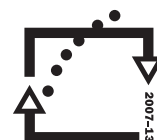




EVROPSKÁ UNIE



MINISTERSTVO ŠKOLSTVÍ,
MLÁDEŽE A TĚLOVÝCHOVY



OP Vzdělávání
pro konkurenceschopnost

INVESTICE DO ROZVOJE VZDĚLÁVÁNÍ

Modularizace a modernizace studijního programu počáteční přípravy učitele fyziky

Studijní modul

Základy moderní fyziky

Tomáš Opatrný, Ivo Vyšín, Lukáš Richterek a Jan Říha



Olomouc 2013

Recenzovali: doc. RNDr. Oldřich Lepil, CSc.
Mgr. Marek Honců, Ph.D.

Odpovědný redaktor: prof. RNDr. Tomáš Opatrný, Dr.

Zpracováno v rámci řešení projektu Evropského sociálního fondu
a Ministerstva školství, mládeže a tělovýchovy České republiky
„Modularizace a modernizace studijního programu počáteční přípravy učitele fyziky“
Registrační číslo: CZ.1.07/2.2.00/18.0018

Tento projekt je spolufinancován Evropským sociálním fondem
a státním rozpočtem České republiky

1. vydání

© Tomáš Opatrný et al., 2012

ISBN 978-80-244-3333-2

Obsah

Úvod	7
1 Langrangeovy a Hamiltonovy rovnice	8
1.1 Shrnutí základních pojmů mechaniky	8
1.1.1 Dynamika částice a řešení pohybových rovnic	9
1.1.2 Energie	12
1.1.3 Konzervativní silové pole	16
1.1.4 Vazby	17
1.2 Hamiltonův princip a Lagrangeovy rovnice	18
1.3 Zákony zachování	23
1.3.1 Zákon zachování hybnosti a momentu hybnosti	24
1.3.2 Integrál energie	24
1.4 Hamiltonovy kanonické rovnice	26
1.5 Poissonova formulace Hamiltonových rovnic	30
1.6 Hamiltonova–Jacobiho rovnice	31
1.6.1 Eikonálová rovnice a analogie s geometrickou optikou	34
1.7 Proměnné akce–úhel a Bohrov model atomu	35
2 Základy kvantové mechaniky	37
2.1 Stručný historický přehled	37
2.1.1 Stará kvantová teorie světla	38
2.1.2 Bohrova teorie atomů	40
2.2 De Broglieho vlny, pojem vlnové funkce	42
2.2.1 De Broglieho vlny	42
2.2.2 Pravděpodobnostní interpretace de Broglieho vln	44
2.2.3 Vlnová funkce a její fyzikální význam	45
2.3 Reprezentace fyzikálních veličin	46
2.3.1 Operátory	46
2.3.2 Operátory základních fyzikálních veličin	51
2.3.3 Komutační vlastnosti operátorů. Relace neurčitosti	52
2.4 Schrödingerova rovnice	54
2.4.1 Formulace Schrödingerovy rovnice	54
2.4.2 Stacionární stavy	55
2.4.3 Zákony zachování v kvantové mechanice	56
2.5 Časová změna fyzikálních veličin	58
2.5.1 Operátor časové změny	58
2.5.2 Ehrenfestovy teoremy	60
2.6 Řešení jednoduchých systémů	61
2.6.1 Jednorozměrná nekonečně hluboká potenciálová jáma	61
2.6.2 Jednorozměrná potenciálová jáma konečné hloubky	62
2.6.3 Potenciálový val, potenciálová bariéra	64
2.6.4 Lineární harmonický oscilátor	68
2.6.5 Trojrozměrný lineární harmonický oscilátor	69

2.7	Pohyb v centrálním poli	71
2.7.1	Orbitální moment hybnosti	71
2.7.2	Schrödingerova rovnice částice v poli centrálních sil	73
2.7.3	Atom vodíku	75
2.8	Spin elektronu	77
2.8.1	Experimentální projevy spinu	77
2.8.2	Spinový formalismus, Pauliho spinové matice	78
3	Základní pojmy statistické fyziky	81
3.1	Makrostav a mikrostav	81
3.2	Liouvilleova věta, Liouvilleova rovnice	83
3.3	Mikrokanonický ensemble	84
3.4	Statistická definice entropie	85
3.5	Kanonický ensemble	86
3.6	Velký kanonický (grandkanonický) ensemble	89
4	Vlastnosti statistické sumy kanonického ensmbu	92
4.1	Statistický integrál	92
4.2	Statistická suma pro systém složený z neinteragujících podsystemů	92
4.3	Vztah mezi statistickou sumou a termodynamickými veličinami	93
4.4	Výpočet statistické sumy a termodynamických veličin v některých jednoduchých případech	94
4.4.1	Kvantová částice v nekonečně hluboké třírozměrné potenciálové jámě o objemu V	94
4.4.2	Klasická částice v objemu V	95
4.5	Gibbsův paradox a statistická suma pro nerozlišitelné částice	96
4.6	Maxwellovo rozdělení rychlostí	97
4.7	Ideální plyn v homogenním gravitačním poli	98
4.8	Harmonický oscilátor	99
4.9	Kvantový rotátor	99
4.10	Dvouatomový plyn	100
4.11	Paramagnetismus	102
4.12	Fluktuace	104
5	Statistická rozdělení, bosony a fermiony	106
5.1	Planckův vyzařovací zákon	106
5.1.1	Hustota módů	106
5.1.2	Planckovo rozdělení	106
5.1.3	Rayleighův-Jeansův zákon a Wienův zákon	107
5.1.4	Wienův posunovací zákon	109
5.1.5	Celková energie záření	109
5.1.6	Stefanův-Boltzmannův zákon	111
5.2	Kvantová statistická rozdělení	111
5.2.1	Nerozlišitelnost částic	111
5.2.2	Matematický popis systémů totožných částic	112
5.3	Vlastnosti ideálního fermionového a bosonového plynu	116
5.3.1	Degenerační faktor	117
5.3.2	Energie a tlak ideálního fermionového a bosonového plynu	118
5.4	Fermionový plyn	120
5.4.1	Tlak elektronů v kovech	120

5.4.2	Velikost bílých trpaslíků	121
5.4.3	Závislost Fermiho energie, vnitřní energie, tepelné kapacity a tlaku ideálního fermionového plynu na teplotě	121
5.5	Boseho-Einsteinova kondenzace	124
5.5.1	Od teorie k experimentu	124
5.5.2	Závislost chemického potenciálu na teplotě	125
5.5.3	Hustota stavů	125
5.5.4	Kritická teplota	126
5.5.5	Kondenzovaná část	127
5.5.6	Tepelná kapacita	128
5.5.7	Profil hustoty	129
5.5.8	Vlastnosti kapalného helia	130
Literatura		134
Rejstřík		136

Úvod

Na druhé straně si však myslím, že mohu klidně prohlásit, že kvantové teorii nerozumí nikdo.

Richard Phillips Feynman (1918–1988)

Zákony termodynamiky lze snadno obdržet z principů statistické mechaniky, neboť jsou jejím neúplným vyjádřením.

Josiah Willard Gibbs (1839–1903)

Proč nám příroda dovoluje uhadnout z vlastností jedné části chování zbytku? Jde o nevědeckou otázku. Nevím jak na ni odpovědět jinak než zcela nevědecky. Myslím, že je to tím, že důležitou vlastností přírody je jednoduchost – a proto je velmi krásná.

Richard Phillips Feynman (1918–1988)

Tento text si klade za cíl ve stručném přehledu shrnout nejdůležitější základní partie kvantové a statistické fyziky. Na rozdíl od standardních součástí základního vysokoškolského kurzu fyziky pro učitelské studium (mechanika, molekulová fyzika, elektřina a magnetismus, optika, atomová fyzika) jde o disciplíny, které mají více teoretický charakter a k jejich zvládnutí je potřeba alespoň do jisté míry si osvojit příslušný matematický aparát a zvyknout si na formalismus, s nímž se při výpočtech pracuje. Jsme však přesvědčeni, že alespoň minimální kvalitativní porozumění řadě moderních technických aplikací je bez zvládnutí těchto disciplin nemožné. Vzhledem k doporučené návaznosti modulů zpracovaných v rámci projektu zde předpokládáme znalost základů mechaniky a fenomenologické termodynamiky včetně významu termodynamických potenciálů.

Ve vymezeném prostoru není možné pokrýt všechna témata vyčerpávajícím způsobem, na řadu z nich se nedostane vůbec. Naštěstí existuje řada kvalitních a dostupných učebnic (např. [5, 8, 15, 40, 42]), proto jsme se při výkladu soustředili na základní pojmy a představy, jež by neměly uniknout pozornosti a jež si zvědavý čtenář může snadno doplnit a rozšířit v příslušných pramenech. Část věnovaná statistické fyzice vychází ze studijního textu [38] aktivně po několik let používaného ve výuce na PřF UP.

Rádi bychom poděkovali oběma recenzentům za cenné připomínky a podněty k vylepšení textu. Text bude volně dostupný v elektronické podobě na stránkách projektu <http://mofy.upol.cz>. Velkou výhodou elektronických materiálů je, že mohou být průběžně doplňovány a vylepšovány. Budeme proto čtenářům vděční za jejich komentáře a upozornění na případné chyby.

Olomouc 15. ledna 2013

Autoři

Kapitola 1

Langrangeovy a Hamiltonovy rovnice

Vstupní bránu pro každého, kdo chce porozumět moderní teoretické fyzice, tvoří teoretická mechanika. V jejím rámci vznikly zejména během 18. a 19. století základní pojmy a metody, jež se v jiném kontextu a odlišných souvislostech využívají i moderních fyzikálních teoriích, včetně kvantové a statistické fyziky, jimž se tento text převážně věnuje.

Již Newtonův současník *Gottfried Wilhelm Leibniz* (1646–1716) přišel s myšlenkou, že k popisu pohybu částice i soustavy částic stačí pracovat s charakteristickými skalárními veličinami typu práce a kinetické energie. Úvahy tohoto druhu dále rozvíjela řada matematiků a fyziků, zejména *Johann Bernoulli*, *Joseph Louis Lagrange*, *Leonhard Euler*, *Jean le Rond d'Alembert*, *Pierre Louis Maupertuis*, *Pierre Simon Laplace*, *Carl Friedrich Gauss* a *William Rowan Hamilton*. Připomeňme, že princip vycházející z podobného základu pro šíření světla odvodil již v roce 1658 *Pierre de Fermat*. V teoretické (nebo též analytické) mechanice principem rozumíme zpravidla skalární rovnici (popř. nerovnost), v níž požadujeme, aby určitá funkce nebo funkcionál nabývaly extrémní (stacionární) hodnoty. Z této podmínky pak lze odvodit pohybové rovnice soustavy nebo podmínky její rovnováhy. Každý princip tak stanoví kritérium, podle něhož můžeme určit, jakým způsobem se realizuje skutečný pohyb soustavy nebo její stav.

Na příkladu Fermatova principu vidíme i jistou teleologickou stránku obecných principů. Světlo se šíří mezi dvěma body tak, aby vzdálenost mezi nimi překonalo v nejmenším možném čase, zdá se tedy, že paprsek se „chová nanejvýš úsporně“; podobných příkladů lze jistě nalézt více (např. stabilní rovnovážnou polohu charakterizuje minimum energie). Podle Leibnitze, Eulera a řady dalších výše zmíněných matematiků se v takovém principu odrážela metafyzická „úspornost“ a „ekonomičnost“ samotného Boha (připomeňme v této souvislosti známý Leibnitzův výrok, že náš svět je ten nejlepší z možných světů). Fermatův princip, stejně jako nejdůležitější z mechanických principů – Hamiltonův princip, jsou příkladem tzv. *integrálních principů*. Při nich zkoumáme hodnoty veličin, funkcí a chování soustavy během určitého konečného časového intervalu. Pokud se zajímáme jen o malé elementy dráhy v jediném libovolně zvoleném okamžiku, pracujeme s *principy diferenciálními* (např. princip virtuální práce nebo d'Alembertův-Lagrangeův princip). V rámci tohoto textu se jimi nebudeme podrobněji zabývat, čtenářům s hlubším zájmem o tuto problematiku můžeme doporučit řadu dostupných učebnic a studijních textů, např. [2–4, 7, 16, 17, 23, 37, 44].

1.1 Shrnutí základních pojmů mechaniky

Nejjednodušším mechanickým objektem je takový objekt, který v matematickém schématu můžeme charakterizovat bodem. Takový objekt nazýváme *částicí* (*hmotným bodem*). Samotný pojem částice je relativní – mnohdy, např. v astronomických úvahách, pokládáme planety za částice. Mohli bychom tedy říci, že za částici budeme považovat takový mechanický objekt, jehož velikost a vnitřní struktura je zanedbatelná při řešení dané fyzikální úlohy. V mechanice pracujeme podle studovaného s různými modely soustav částic – neinteragující částice, soustava částic podrobených vazbám (omezením pohybu), tuhé těleso, kontinuum atd. V kvantové a statistické fyzice pak částicemi nejčastěji rozumíme elementární částice hmoty a z nich složené objekty (protony, neutrony, elektrony, jádra helia atd.) nebo kvanta záření (fotony).

1.1.1 Dynamika částice a řešení pohybových rovnic

Základ dynamiky tvoří tři známé zákony formulované v 17. století Isaacem Newtonem. Tyto zákony, získané zobecněním experimentálních faktů stačí k ucelené logické výstavbě klasické mechaniky a často bývají proto nazývány *základními axiomy mechaniky*. Pro úplné logické vybudování mechaniky bez dalších předpokladů je třeba přidat ještě *axiom o nezávislosti silového působení (princip superpozice)*:

Působí-li na částici současně několik sil, je výsledné zrychlení rovno vektorovému součtu zrychlení, udělovaných částici jednotlivými silami.

Tento axiom (jehož platnost se ovšem zpravidla předpokládá) spolu s prvními třemi Newtonovými zákony tvoří úplnou soustavu *základních axiomů mechaniky*.

Základní problémy, s nimiž se v dynamice setkáme, můžeme v podstatě rozdělit do dvou skupin. První skupinu tvoří úlohy, při nichž máme zadán pohybový zákon pro částici (tj. kinematické pohybové rovnice) a máme určit sílu, která pohyb částice způsobuje. Tento problém se nazývá *první základní úlohou dynamiky*. Jako *druhou základní úlohu dynamiky* označujeme úlohu najít kinematické pohybové rovnice částice, známe-li sílu, která na částici působí.

Studujme nejprve první úlohu dynamiky. Mějme zadán pohyb částice s hmotností m rovnicí

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t).$$

Sílu, která tento pohyb způsobuje, určíme ze 2. Newtonova zákona

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}.$$

Takto jsme ovšem nezjistili nic o podstatě síly, o tom, zda závisí na rychlosti částice, její poloze apod. Pro podrobnější analýzu potřebujeme vědět, jakou polohu \mathbf{r}_0 a rychlost \mathbf{v}_0 má částice v nějakém počátečním okamžiku $t = 0$, tedy musíme znát tzv. počáteční podmínky. Pak můžeme psát

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0) \quad (1.1)$$

a odtud

$$\dot{\mathbf{r}} = \mathbf{v} = \mathbf{v}(t, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0), \quad (1.2)$$

takže konečně

$$\mathbf{F} = m\ddot{\mathbf{r}}(t, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0). \quad (1.3)$$

Z rovnic (1.1), (1.2) a (1.3) nyní můžeme vyloučit konstanty \mathbf{r}_0 a \mathbf{v}_0 , čímž dospějeme k hledané závislosti

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}(t, \mathbf{r}, \mathbf{v}). \quad (1.4)$$

Při řešení první základní úlohy dynamiky se užívá jen derivování a algebraické operace, takže z matematického hlediska není toto řešení nijak obtížné.

Podstatně větší pozornost se věnuje druhé základní úloze dynamiky, tj. určení pohybu, známe-li sílu, která jej vyvolává. Tato úloha spočívá vlastně v řešení diferenciální rovnice druhého řádu

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = \mathbf{F} \quad (1.5)$$

reprezentující tři rovnice pro kartézské složky vektorů

$$m \frac{d^2 x_i}{dt^2} = X_i, \quad i = 1, 2, 3, \quad (1.6)$$

kde X_1, X_2, X_3 jsou složky síly F do souřadnicových os x_1, x_2, x_3 .

Za obecný integrál rovnice (1.5) označujeme funkci \mathbf{r} , která vyhovuje této rovnici a obsahuje dvě vektorové konstanty

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2). \quad (1.7)$$

Zaměníme-li hodnoty konstant, dostaneme vždy nový pohybový zákon, který však bude patřit do téže třídy pohybů. Fyzikální význam této neurčitosti je v tom, že pohyby částice vyvolané toutéž silou se mohou vzájemně lišit v závislosti na počátečních podmínkách, tj. podle počáteční polohy a počáteční rychlosti částice. Pro úplný popis pohybu nějaké konkrétní částice musíme proto kromě pohybové rovnice (1.5) znát ještě její polohu \mathbf{r}_0 a rychlost \mathbf{v}_0 v nějakém počátečním okamžiku t_0 . Dosazením těchto počátečních podmínek do (1.7) obdržíme dvě rovnice

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}(t_0, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2),$$

$$\mathbf{v}_0 = \dot{\mathbf{r}}(t_0, \mathbf{C}_1, \mathbf{C}_2),$$

z nichž můžeme určit

$$\mathbf{C}_1 = \mathbf{C}_1(t_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0),$$

$$\mathbf{C}_2 = \mathbf{C}_2(t_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0)$$

a dosadit do (1.7), čímž dostaneme řešení rovnice (1.5), vyhovující daným počátečním podmínkám – tzv. partikulární integrál

$$\mathbf{r} = \mathbf{r}(t, t_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{v}_0). \quad (1.8)$$

Mnohdy je obtížné najít obecné řešení rovnice (1.5), ale dá se najít závislost typu

$$\boldsymbol{\phi}(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \mathbf{C}_1, \quad (1.9)$$

která již neobsahuje $\ddot{\mathbf{r}}$ a je splněna identicky pro každé \mathbf{r} vyhovující rovnici (1.5). Takovou funkci $\boldsymbol{\phi}$ nazýváme *prvním integrálem* rovnice (1.5). Je-li první integrál pohybové rovnice znám, redukuje se integrace (1.5) na nalezení řešení rovnice 1. řádu typu

$$\dot{\mathbf{r}} = \boldsymbol{\varphi}(t, \mathbf{r}, \mathbf{C}_1)$$

vyplývající z (1.9). Podaří-li se získat dva nezávislé první integrály

$$\boldsymbol{\phi}_1(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \mathbf{C}_1, \quad \boldsymbol{\phi}_2(t, \mathbf{r}, \dot{\mathbf{r}}) = \mathbf{C}_2, \quad (1.10)$$

lze z nich vyloučením $\dot{\mathbf{r}}$ dostat obecné řešení (1.7), případně je můžeme považovat za parametrické vyjádření tohoto řešení, přičemž jako parametr zde vystupuje právě $\dot{\mathbf{r}}$.

Pro jednu částici lze obecné řešení pohybových rovnic najít v celé řadě konkrétních případů, při různých typech působících sil. Za určitých předpokladů lze nalézt řešení i pro pohyb dvou vzájemně na sebe působících částic. Avšak pro systém tří a více částic se již obecné řešení prakticky najít nedá, vyjma některých značně zjednodušených úloh. Většinou je nutné použít některou z přibližných numerických metod. Velkou důležitost mají některé věty obecného charakteru, které platí jak pro jednu částici, tak pro soustavu částic, a které nám v podstatě umožňují určit první integrály pohybových rovnic, tj. vztahy typu (1.10). Takto nalezené první integrály označujeme obvykle za *zákony zachování*.

Zpravidla postupujeme tak, že zavádíme nejprve určité funkce času, souřadnic a rychlostí, jimž přiřazujeme fyzikální obsah. Příkladem takových funkcí jsou hybnost, moment hybnosti, energie. Zavedeme-li tyto funkce do pohybových rovnic, představují pak tyto rovnice vlastně zákony změny těchto funkcí s časem – větu o hybnosti, momentu hybnosti a energii. Zjistíme-li, že za určitých

okolností je některá z těchto funkcí konstantní, tj. že pro ni můžeme napsat rovnici typu (1.10), mluvíme o zákonu zachování této funkce, speciálně o zákonu zachování hybnosti, momentu hybnosti, energie. Podotkněme již nyní, že zavedení těchto funkcí není náhodné, ale souvisí úzce s jistými symetriemi prostoru a času: s homogeností a izotropností prostoru a homogeností času. Zaveďme nyní tyto funkce pro jednu částici.

Hybnost částice \mathbf{p} je definována jako součin hmotnosti a rychlosti částice

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v}. \quad (1.11)$$

Je-li hmotnost částice konstantní, dá se (1.5) psát ve tvaru

$$\frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{F} \quad (1.12)$$

a představuje *zákon změny hybnosti (větu o hybnosti)*.

Jestliže je průmět síly na některou nepohyblivou osu v libovolném okamžiku roven nule, je průmět hybnosti na tuto osu konstantní, tj. platí pro něj zákon zachování. Je-li např. $X_3 = 0$, je $p_3 = \text{konst.}$ Podstatné je, aby byl roven nule průmět síly na nepohyblivou osu. Tuto podmínku je třeba vzít v úvahu, řešíme-li problém např. v polárních souřadnicích, kdy není se orientace os v různých bodech stejná.

Jestliže je nulová výslednice sil působících na částici, platí *zákon zachování hybnosti*

$$\mathbf{p} = \mathbf{p}_0 = \text{konst.},$$

jinými slovy, hybnost je integrálem pohybu.

Moment hybnosti \mathbf{b} (též kinetický moment nebo moment impulsu) je definován vztahem

$$\mathbf{b} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (1.13)$$

Vektorovým násobením (1.12) vektorem \mathbf{r} zleva obdržíme

$$\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}.$$

Pravá strana se nazývá *moment síly* \mathbf{M}

$$\mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}.$$

Levá strana se dá přepsat

$$\mathbf{r} \times \frac{d\mathbf{p}}{dt} = \frac{d}{dt}(\mathbf{r} \times \mathbf{p}) = \frac{d\mathbf{b}}{dt}.$$

Dostáváme tedy zákon změny momentu hybnosti

$$\frac{d\mathbf{b}}{dt} = \mathbf{M}. \quad (1.14)$$

Je-li výsledný moment \mathbf{M} roven nule, platí *zákon zachování momentu hybnosti*

$$\mathbf{b} = \mathbf{b}_0 = \text{konst.}$$

Je-li roven nule průmět momentu síly na některou nepohyblivou osu, zachovává se průmět momentu hybnosti částice na tuto osu. Je-li např. $M_3 = 0$, je $b_3 = \text{konst.}$ K této situaci dochází např. jestliže síla působí stále ve stejném směru. Proložíme-li tímto směrem osu x_3 , je $X_1 = X_2 = 0$, $X_3 \neq 0$, $M_3 = x_1X_2 - x_2X_1 = 0$ a tedy $b_3 = \text{konst.}$

Velmi důležité jsou tzv. *centrální síly*. Centrální síla je taková síla, jejíž vektorová přímka prochází stále týmž bodem zvaným silové centrum. Zvolíme-li tento bod za počátek soustavy souřadnic, platí

$$\mathbf{F} = F\mathbf{r}_0, \quad \mathbf{M} = \mathbf{r} \times \mathbf{F} = 0$$

a tedy

$$\mathbf{b} = m(\mathbf{r} \times \mathbf{v}) = \mathbf{b}_0 = \text{konst.}, \quad (1.15)$$

moment hybnosti částice vzhledem k silovému centru se tedy zachovává. Skalárním násobením (1.15) vektorem \mathbf{r} dostáváme

$$\mathbf{b} \cdot \mathbf{r} = m(\mathbf{r} \times \mathbf{v}) \cdot \mathbf{r} = \mathbf{b}_0 \cdot \mathbf{r} = 0,$$

odkud vyplývá, že trajektorie částice pohybující se v centrálním silovém poli je vždy rovinná. Rovina, v níž leží trajektorie, prochází silovým centrem a je kolmá na konstantní moment hybnosti. Proto při řešení pohybu částice v centrálním silovém poli můžeme úlohu řešit jako rovinnou a vzhledem k symetrii pole obvykle s výhodou používáme polárních souřadnic.

1.1.2 Energie

a) *Kinetická energie*. Je-li $m = \text{konst.}$, pak násobením (1.5) skalárně $d\mathbf{r}$ dostaneme

$$\Delta W = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \mathbf{F} \cdot \dot{\mathbf{r}} dt = m\ddot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}} dt = d\left(\frac{1}{2}m\dot{\mathbf{r}} \cdot \dot{\mathbf{r}}\right) = d\left(\frac{1}{2}mv^2\right) = dT. \quad (1.16)$$

Veličina ΔW na levé straně je elementární práce síly \mathbf{F} na posunutí $d\mathbf{r}$. Na pravé straně je úplný diferenciál *kinetické energie* dT částice. Je tedy

$$T = \frac{1}{2}mv^2. \quad (1.17)$$

Dělením dt dostaneme z (1.16)

$$\frac{\Delta W}{dt} = \dot{T} = \frac{dT}{dt}, \quad (1.18)$$

kde výraz $\Delta W/dt$ představuje *okamžitý výkon síly* \mathbf{F} .

Při konečném přemístění částice po nějaké trajektorii z bodu (1) do bodu (2) dostáváme z (1.16)

$$\int_{(1)}^{(2)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = T_2 - T_1 = \frac{1}{2}mv_2^2 - \frac{1}{2}mv_1^2.$$

Výraz $\Delta W = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$ není obecně úplným diferenciálem, tzn. že práce síly při přemístění částice z jednoho bodu do druhého závisí na trajektorii, po níž se částice pohybuje.

V praxi jsou důležité některé speciální typy sil, pro které ΔW je úplným diferenciálem. Nejdůležitější z nich jsou tzv. *síly potenciálové*. Potom lze psát

$$\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \Delta W \equiv dT.$$

b) *Potenciální energie*. Předpokládejme, že v určité oblasti prostoru je v každém bodě definována síla působící na částici v tomto bodě. Říkáme pak, že v této oblasti je definováno *silové pole*. Jestliže v celém silovém poli je $\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r}$ úplným diferenciálem, mluvíme o *potenciálovém silovém poli*.

Pro potenciálové pole zavádíme místo skalární funkce W funkci U lišící se od W znaménkem – *potenciální energii částice* (energii závisející na poloze částice v potenciálovém poli). Pak platí

$$\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = -dU \quad (1.19)$$

a při konečném přemístění částice

$$\int_{(1)}^{(2)} \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = - \int_{(1)}^{(2)} dU = U_1 - U_2. \quad (1.20)$$

Z (1.19) je vidět, že U je funkcí souřadnic (x_1, x_2, x_3) . Funkci $U(x_1, x_2, x_3)$ najdeme integrováním

$$U(x_1, x_2, x_3) = - \int \mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} + C, \quad (1.21)$$

kde C je konstanta definující tzv. nulovou hladinu potenciální energie. Rozepsáním (1.19) dostaneme

$$\mathbf{F} \cdot d\mathbf{r} = \sum_{i=1}^3 X_i dx_i = - \sum_{i=1}^3 \frac{\partial U}{\partial x_i} dx_i,$$

takže

$$X_i = - \frac{\partial U}{\partial x_i} \quad (1.22)$$

nebo vektorově

$$\mathbf{F} = -\nabla U. \quad (1.23)$$

Rozepsáním rovnic (1.22), derivováním první z nich podle x_1 , druhé podle x_2 a porovnáním smíšených parciálních derivací 2. řádu dostáváme podmínku pro složky síly \mathbf{F} , aby bylo možné zavést potenciální energii

$$\frac{\partial X_2}{\partial x_1} - \frac{\partial X_1}{\partial x_2} = \frac{\partial^2 U}{\partial x_1 x_2} - \frac{\partial^2 U}{\partial x_2 x_1} = 0.$$

Podobným způsobem bychom dostali další dvě rovnice, takže celkem můžeme psát

$$\frac{\partial X_3}{\partial x_2} - \frac{\partial X_2}{\partial x_3} = 0, \quad \frac{\partial X_1}{\partial x_3} - \frac{\partial X_3}{\partial x_1} = 0, \quad \frac{\partial X_2}{\partial x_1} - \frac{\partial X_1}{\partial x_2} = 0.$$

Tyto výrazy představují složky vektoru $\text{rot } \mathbf{F}$. Protože však funkce U nezávisí na čase, je třeba přidat předpoklad nezávislosti na čase i pro sílu \mathbf{F} . Můžeme pak říci, že silové pole je potenciálové, jestliže nezávisí na čase a platí pro ně¹

$$\nabla \times \mathbf{F} = 0. \quad (1.24)$$

c) *Celková mechanická energie.* Kromě sil potenciálových jsou významné tzv. gyroskopické a disipativní síly. *Gyroskopické síly* \mathbf{F}_G jsou síly, které závisí lineárně na rychlosti částice a mají směr kolmý na rychlost částice. Jejich výkon je proto roven nule

$$\frac{\Delta W}{dt} = \mathbf{F}_G \cdot \frac{d\mathbf{r}}{dt} = 0. \quad (1.25)$$

Jak název napovídá, příkladem může být setrvačná odstředivá síla při pohybu po kružnici, konkrétně třeba Lorentzova síla působící na nabitou částici v homogenním magnetickém poli, která zakřivuje trajektorii částice, ale nemění velikost její rychlosti, tedy ani její kinetickou energii. *Disipativní síly* \mathbf{F}_D jsou síly namířené proti směru rychlosti částice vzhledem k prostředí, které ji obklopuje. Disipativní síla se dá zapsat ve tvaru

$$\mathbf{F}_D = -\lambda \mathbf{v},$$

¹Speciálním případem této podmínky pro elektrostatické pole je 3. Maxwellova rovnice $\nabla \times \mathbf{E} = 0$, kde \mathbf{E} je vektor intenzity elektrostatického pole.

kde λ je kladná skalární funkce, která může záviset na poloze a rychlosti částice. Výkon disipativních sil je vždy záporný

$$\frac{\Delta W}{dt} = \mathbf{F}_D \cdot \mathbf{v} = -\lambda v^2 < 0.$$

Konečně se mohou vyskytnout také tzv. *nestacionární potenciálové síly*, tj. takové síly, pro které závisí U nejen na poloze, ale i na čase.² Pro takové síly platí rovnice (1.23) a U se opět určí z (1.21), kde se však provádí integrace při konstantním t . Pro úplný diferenciál v tomto případě platí

$$dU = \sum_{i=1}^3 \frac{\partial U}{\partial x_i} dx_i + \frac{\partial U}{\partial t} dt = d\mathbf{r} \cdot \nabla U + \frac{\partial U}{\partial t} dt$$

a tedy

$$\Delta W = -\nabla U \cdot d\mathbf{r} = -dU + \frac{\partial U}{\partial t} dt. \quad (1.26)$$

Rovnice (1.19) není zřejmě pro nestacionární potenciálové síly splněna.

Předpokládejme nyní, že na částici působí nestacionární potenciálová síla, disipativní síla a gyro-skopická síla, jejichž výslednice

$$\mathbf{F} = -\nabla U + \mathbf{F}_G + \mathbf{F}_D.$$

Vzhledem k (1.25) a (1.26) je výkon síly \mathbf{F}

$$\frac{\Delta W}{dt} = -\frac{dU}{dt} + \frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{F}_D \cdot \mathbf{v}.$$

S přihlédnutím k (1.18) pak platí

$$\frac{d}{dt}(T + U) = \frac{\partial U}{\partial t} + \mathbf{F}_D \cdot \mathbf{v}. \quad (1.27)$$

Výraz typu $T + U = E$ nazýváme *celkovou mechanickou energií částice*. Změna celkové mechanické energie částice je podmíněna závislostí potenciálových sil na čase a existencí disipativních sil. Gyroskopické síly nemají (jak již bylo řečeno) na celkovou mechanickou energii částice vliv.

Nepůsobí-li na částici disipativní síly a jsou-li potenciálové síly stacionární, platí *zákon zachování celkové mechanické energie*. Silovým polím, v nichž platí zákon zachování mechanické energie (tj. stacionárním potenciálovým polím) se říká *pole konservativní* (z lat. conservare = zachovávat). Příkladem mohou být již zmíněná pole gravitační, tíhové a elektrostatické.

Zákony zachování mají velký význam pro řešení celé řady úloh. Dokladem toho jsou např. úlohy o rázech těles. U nepružného rázu využíváme pouze zákon zachování hybnosti, u rázu pružného navíc i zákon zachování energie. Při studiu pohybů těles v poli centrálních sil se opíráme o zákony zachování energie a momentu hybnosti.

Zavedení veličin jako energie, hybnost a moment hybnosti můžeme analogicky rozšířit i na systémy částic, budou pak součtem (u vektorových veličin vektorovým) těchto charakteristik pro jednotlivé částice. Pro celkovou hybnost soustavy tak platí

$$\mathbf{p} = \sum_{\varrho} \mathbf{p}_{\varrho} = \sum_{\varrho} m_{\varrho} \mathbf{v}_{\varrho};$$

podobně pro celkový moment hybnosti

$$\mathbf{b} = \sum_{\varrho} \mathbf{b}_{\varrho} = \sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \times (m_{\varrho} \mathbf{v}_{\varrho}),$$

²Příkladem může být pole časově proměnného náboje, nabíjeného či vybíjeného kondenzátoru apod.

a např. celkovou kinetickou energii

$$T = \sum_{\varrho} T_{\varrho} = \sum_{\varrho} \frac{1}{2} m_{\varrho} v_{\varrho}^2,$$

kde sumace probíhá přes všechny částice systému. Zejména v astrofyzice se při studiu vesmírných systémů skládajících se z obrovského počtu částic (hvězd, galaxií) často využívá tzv. *virialového teoremu*. Odlišuje se od předcházejících vět a zákonů svou *statistickou povahou*, neboť se netýká přímo mechanických veličin, ale jejich časových středních hodnot.

Uvažujme izolovaný systém hmotných bodů, na něž působí pouze vnitřní síly $\mathbf{F}_{\varrho}^{(i)}$ (tj. síly, jimiž působí částice na sebe navzájem v souladu 3. Newtonovým zákonem) a zkoumejme úplnou časovou derivaci výrazu

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{p}_{\varrho} \right) = \sum_{\varrho} \dot{\mathbf{r}}_{\varrho} \cdot \mathbf{p}_{\varrho} + \sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \dot{\mathbf{p}}_{\varrho}. \quad (1.28)$$

První člen na pravé straně (1.28) lze upravit na tvar

$$\sum_{\varrho} \dot{\mathbf{r}}_{\varrho} \cdot \mathbf{p}_{\varrho} = \sum_{\varrho} m_{\varrho} \dot{\mathbf{r}}_{\varrho} \cdot \dot{\mathbf{r}}_{\varrho} = \sum_{\varrho} m_{\varrho} v_{\varrho}^2 = 2T,$$

a odpovídá dvojnásobku celkové kinetické energie systému. Druhý člen je podle definice síly jako časové derivace hybnosti roven $\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{F}_{\varrho}^{(i)}$. Střední časovou hodnotu výrazu na levé straně rovnice (1.28) za časový interval τ získáme standardně integrací

$$\frac{1}{\tau} \int_0^{\tau} \frac{d}{dt} \left(\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{p}_{\varrho} \right) dt = \overline{\frac{d}{dt} \left(\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{p}_{\varrho} \right)} = \overline{2T} + \overline{\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{F}_{\varrho}^{(i)}},$$

kde vodorovnou čarou nad výrazem značíme časovou střední hodnotu. Platí proto

$$\overline{2T} + \overline{\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{F}_{\varrho}^{(i)}} = \frac{1}{\tau} \left[\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{p}_{\varrho} \right]_0^{\tau}. \quad (1.29)$$

Zůstávají-li souřadnice a hybnosti částic konečné, lze dobu τ zvolit dostatečně dlouhou tak, že hodnota výrazu na pravé straně (1.29) bude libovolně malá. Dostáváme tak zmíněný *virialový teorem*

$$\overline{T} = \frac{1}{2} \overline{\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{F}_{\varrho}^{(i)}}. \quad (1.30)$$

*Clausiusovým viriálem*³ soustavy rozumíme střední časovou hodnotu $\overline{\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \mathbf{F}_{\varrho}^{(i)}}$, vztaženou k dostatečně dlouhému časovému intervalu. Podle virialového teoremu (1.30) je střední hodnota kinetické energie soustavy částic v daném časovém intervalu rovna polovině viriálu. Jsou-li vnitřní síly potenciálové, tj. je-li možné zavést potenciální energii $U(\mathbf{r}_{\varrho})$, lze (1.30) zapsat ve tvaru

$$\overline{T} = \frac{1}{2} \overline{\sum_{\varrho} \mathbf{r}_{\varrho} \cdot \nabla U(\mathbf{r}_{\varrho})}.$$

³Virialový teorem pro klasické soustavy částic dokázal Clausius v r. 1870. Význam teoremu podtrhuje skutečnost, že si zachovává svou platnost i v kvantové mechanice.

Jestliže je potenciální energie navíc Eulerovsky homogenní funkcí n -tého řádu,⁴ bude splněna rovnice

$$n\bar{U} = 2\bar{T}. \quad (1.31)$$

Velmi významnou roli hrají ve fyzice tzv. centrální síly, konkrétně gravitační síla a síla coulombovského elektrostatického pole. V obou případech pro potenciální energii U částic v poli těchto sil můžeme psát

$$U \sim \frac{1}{r}.$$

U je tedy Eulerovsky homogenní funkcí řádu -1 (jak lze snadno ověřit) a podle rovnice (1.31) proto platí

$$\bar{T} = -\frac{1}{2}\bar{U}. \quad (1.32)$$

Z rovnice (1.32) přímo vyplývá, že soustava částic, které na sebe působí coulombovskými nebo gravitačními silami, se nemůže nacházet ve stavu statické rovnováhy, tj. ve rovnovážném stavu s kinetickou energií $T = 0$. Tento závěr platí jak pro elektrony v atomech, tak pro atomy ve hvězdách nebo hvězdy v galaxiích. Hmota, která nás obklopuje se proto nutně musí skládat z částic, jež jsou v pohybu, a pouze v relativním smyslu můžeme nějakou její část považovat vůči nám za nepohyblivou.

1.1.3 Konzervativní silové pole

Jak již bylo řečeno, v konzervativním silovém poli platí zákon zachování celkové mechanické energie částice

$$T + U = E.$$

Můžeme proto psát

$$\frac{1}{2}m\dot{x}^2 + U(x) = E$$

nebo

$$\dot{x}^2 = \frac{2}{m} [E - U(x)]. \quad (1.33)$$

Ze známe závislosti potenciální energie na poloze částice $U = U(x)$ lze pomocí rovnice (1.33) určit velikost rychlosti v každém bodě a kvalitativně tak popsat charakter pohybu částice. Znaménko v (1.33) je vždy dáno předcházejícím pohybem částice.

Velikost rychlosti částice musí být reálným číslem. Z této podmínky vyplývá, že pohyb částice bude nutně omezen pouze na oblasti, kde

$$E \geq U(x).$$

Ostatní oblasti jsou z hlediska klasické fyziky zakázané (viz obr. 1.1).⁵

Při pohybu částice v konzervativním silovém poli mohou nastat různé případy, z nichž nejdůležitější z hlediska praktických i teoretických aplikací odpovídá situaci, kdy částice osciluje mezi dvěma *body obratu* $x = a$, $x = b$ a pohyb je *periodický (librační)*. Předpokládejme, že v čase $t = t_0$ se částice

⁴Připomeňme, že když je funkce $f(x_1, x_2, \dots, x_k)$ Eulerovsky homogenní n -tého řádu, platí

$$\begin{aligned} f(sx_1, sx_2, \dots, sx_k) &= s^n f(x_1, x_2, \dots, x_k), \\ \sum_{i=1}^k x_i \frac{\partial f(x_1, x_2, \dots, x_k)}{\partial x_i} &= n f(x_1, x_2, \dots, x_k); \end{aligned}$$

viz např. [41], s. 370.

⁵V kvantové mechanice již tento závěr neplatí. Vlnová funkce popisující pravděpodobnost výskytu částice může být nenulová i v oblastech $E \leq U(x)$ – viz část 2.6.3.

nachází v bodě x_0 , ve kterém platí $E > U(x)$, a její rychlost $\dot{x} > 0$ je orientována v kladném směru osy x . Podle (1.33) potom

$$t = \int_a^b \frac{dx}{\dot{x}} = \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} [E - U(x)]}}. \quad (1.34)$$

Je zřejmé, že x_0 leží mezi dvěma kořeny a, b rovnice $U(x) - E = 0$ (viz obr. 1.1), potom perioda pohybu částice mezi body obratu a, b bude dvojnásobkem času potřebného k pohybu z bodu $x = a$ do bodu $x = b$ neboli

$$\tau = 2 \int_a^b \frac{dx}{\sqrt{\frac{2}{m} [E - U(x)]}}.$$

V samotných bodech obratu je sice rychlost částice nulová, ale zrychlení je nenulové a vrací částici zpět směrem ke druhému bodu obratu. Je zřejmé, že mezi body obratu existuje bod, v němž má funkce $U(x)$ lokální minimum. Minimum potenciální energie v konzervativním silovém poli představuje rovnovážnou polohu, kolem níž může částice konat kmitavý pohyb.

Podotkněme, že úvahy tohoto typu lze využít i v obecnějších případech, při studiu rovinného pohybu v centrálním silovém poli, kde s využitím integrálů pohybu lze zavést tzv. efektivní potenciál a jeho pomocí převést diskusi o charakteru trajektorie z dvourozměrného na jednorozměrný případ (viz např. [7, 44]).

1.1.4 Vazby

Dosud jsme ve svých úvahách mlčky předpokládali, že pohyb částice není v prostoru nijak omezen, že se tedy částice ve svém pohybu může dostat do libovolného místa v prostoru. Stejně tak jsme v případě soustavy částic nekladli požadavky na vzájemné polohy částic soustavy, ani jsme nezaváděli jakákoliv geometrická omezení jejich pohybu. Představíme-li si však např. pohyb matematického kyvadla, je zřejmé, že částice reprezentující kyvadlo se může dostat jen do takových bodů prostoru, pro něž platí

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 - l^2 = 0,$$

kde x_1, x_2, x_3 jsou souřadnice částice v soustavě souřadnic s počátkem v bodě upevnění kyvadla, l je délka závěsu.

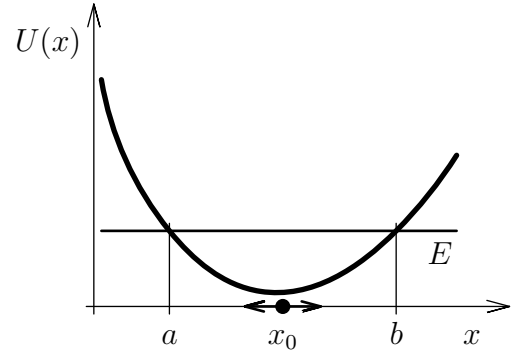
Rovnice tohoto typu, které nějakým způsobem vyjadřují omezení pohybu částice nebo soustav částic, nazýváme *rovnícemi vazby*.

Předpokládejme, že máme soustavu N částic, jejichž polohy budeme určovat polohovými vektory \mathbf{r}_α o složkách $x_{\alpha,1}, x_{\alpha,2}, x_{\alpha,3}$. Rovnice vazby pak obecně budou mít tvar

$$\Phi_\alpha(x_{1,1}, x_{1,2}, x_{1,3}, \dots, x_{N,1}, x_{N,2}, x_{N,3}, \dot{x}_{1,1}, \dot{x}_{1,2}, \dot{x}_{1,3}, \dots, \dot{x}_{N,1}, \dot{x}_{N,2}, \dot{x}_{N,3}, t) = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, s, \quad (1.35a)$$

nebo

$$\Phi_\alpha(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N, \dot{\mathbf{r}}_1, \dots, \dot{\mathbf{r}}_N, t) = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, s. \quad (1.35b)$$



Obr. 1.1: K výkladu pohybu částice v konzervativním poli – nejčastější případ periodického pohybu mezi polohami a a b

Omezení pohybu částic nemusí však vždy být formulováno ve tvaru rovnic. Představíme-li si částici, která se může pohybovat jen uvnitř koule o poloměru l , je zřejmé, že omezení jejího pohybu je nyní možno popsat nerovností

$$x_1^2 + x_2^2 + x_3^2 < l^2.$$

Vazby vyjádřené nerovnostmi zpravidla nazýváme *vazbami jednostrannými (neudržujícími)*, vazby popsané rovnicemi pak nazýváme *vazbami dvoustrannými (udržujícími)*. V dalších úvahách se budeme vesměs zabývat vazbami dvoustrannými, které se dají vyjádřit rovnicemi typu (1.35a) nebo (1.35b).

Pro popis pohybu soustavy N částic v trojrozměrném prostoru potřebujeme obecně $3N$ souřadnic. Pokud však existuje s vazeb, znamená to, že při použití jiných vhodně zvolených parametrů by nám mohlo stačit jen $3N - s$ parametrů, které by jednoznačně určovaly polohu všech částic soustavy. Takové parametry nazýváme *nezávislými zobecněnými souřadnicemi* (též) q_1, q_2, \dots, q_f . Jejich počet $f = 3N - s$ pak představuje *počet stupňů volnosti* soustavy.

1.2 Hamiltonův princip a Lagrangeovy rovnice

Polohu všech částic soustavy určujeme v daném okamžiku zadáním zobecněných souřadnic q_1, q_2, \dots, q_f ; říkáme, že zadání těchto souřadnic nám určuje *konfiguraci* soustavy. Souřadnice q_1, q_2, \dots, q_f můžeme pokládat za souřadnice bodu, tzv. *reprezentujícího bodu v f -rozměrném konfiguračním prostoru*. Každý reprezentující bod tedy reprezentuje určitou konfiguraci soustavy. V průběhu času se stav soustavy mění a reprezentující bod v konfiguračním prostoru opisuje křivku, tzv. *konfigurační trajektorii*. Pohyb soustavy (resp. vývoj soustavy v čase) můžeme tedy studovat jako pohyb reprezentujícího bodu po konfigurační trajektorii; čas t lze přitom pokládat za parametr.

Konfigurační prostor nesplyvá ovšem obecně s trojrozměrným prostorem, v němž se soustava pohybuje a rovněž konfigurační trajektorie není totožná s určitou trajektorií některé částice soustavy: Každý bod konfigurační trajektorie popisuje polohy *všech* částic soustavy.

Představme si nyní, že v určitém okamžiku t_1 je konfigurace soustavy popsána souřadnicemi $q_1^{(1)}, q_2^{(1)}, \dots, q_f^{(1)}$ (zkráceně je budeme značit $q_j^{(1)}$) a v okamžiku t_2 souřadnicemi $q_j^{(2)}$. Těmto konfiguracím necht' odpovídají body $A(q_j^{(1)}, t_1)$ a $B(q_j^{(2)}, t_2)$ v konfiguračním prostoru. Pro jedno-rozměrný konfigurační prostor můžeme rozvinout konfigurační trajektorii v čase, jak je znázorněno na obr. 1.2; analogickou situaci si však můžeme představit i pro konfigurační trajektorii v obecném případě.

Představme si, že na obr. 1.2 odpovídá silná čára konfigurační trajektorii reprezentující skutečný pohyb soustavy v intervalu od t_1 do t_2 . Spolu se skutečným pohybem soustavy však můžeme uvažovat i jiné kinematicky přípustné pohyby, tj. pohyby slučitelné s vazbami, jímž je studovaná soustava podrobena. Při nich by se reprezentující bod pohyboval po jiných konfiguračních trajektoriích, z nichž jedna (rozvinutá opět v čase) je na obr. 1.2 vyznačena slabší čarou.

Protože se jedná o kinematicky přípustné pohyby, můžeme odpovídající zobecněné souřadnice při určitém t dostat vždy změnou $q'_j = q_j + \delta q_j$; výraz δq_j budeme v dalších úvahách nazývat *variací* q_j .

Zavedme *Lagrangeovu funkci* L (*kinetický potenciál, lagranžián*) jako funkci zobecněných souřadnic q_j , zobecněných rychlostí \dot{q}_j a času t vztahem

$$L = T - U = L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f, t) \quad (1.36)$$

nebo zkráceně

$$L = L(q, \dot{q}, t).$$

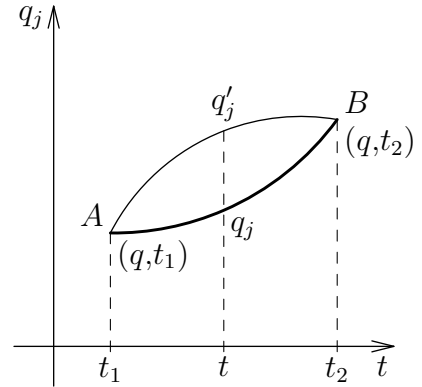
Neznáme-li konfigurační trajektorii, která odpovídá skutečnému pohybu soustavy, můžeme ji ze všech možných kinematicky přípustných trajektorií, které lze proložit body A a B vybrat na základě *Hamiltonova principu*:

Skutečný pohyb konzervativní soustavy v intervalu od t_1 do t_2 je zobrazen takovou konfigurační trajektorií, na které integrál

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L(q_1, q_2, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_f, t) dt \quad (1.37)$$

nabývá extrémní hodnoty. Zde L je výše definovaná Lagrangeova funkce $L = T - U$. Matematicky formulujeme Hamiltonův princip jako tvrzení, že variace integrálu S při pevných hodnotách t_1 a t_2 je rovna nule

$$\delta S = \delta \int_{t_1}^{t_2} L(q, \dot{q}, t) = 0. \quad (1.38)$$



Obr. 1.2: Rozvinutí konfigurační trajektorie v čase

Zmínili jsme se již, že přechod od konfigurační trajektorie, která odpovídá skutečnému pohybu k jiné kinematicky přípustné trajektorii je charakterizován změnou každé souřadnice δq_j , kterou nazýváme *variací* (přesněji *izochronní variací*, neboť se bere při konstantním t). Ujasněme si nyní, co znamená variace geometricky.

Nechť je nějaká souřadnice q_j známou funkcí času $q_j(t)$; její diferenciál dq_j představuje změnu souřadnice v důsledku skutečného pohybu soustavy. Změňme nyní souřadnici q_j tím způsobem, že položíme

$$q'_j = q_j + \alpha \eta_j(t), \quad (1.39)$$

kde α je libovolný parametr, $\eta_j(t)$ diferencovatelná funkce času. Taková změna q_j vznikající v důsledku změny funkce $q_j(t)$ jako celku se nazývá *variací*

$$\delta q_j = q'_j - q_j = \alpha \eta_j(t).$$

Geometrický rozdíl mezi dq_j a δq_j je vidět na obr. 1.3.

Lehce se můžeme přesvědčit, že operace variování a derivování podle času jsou záměnné – např.

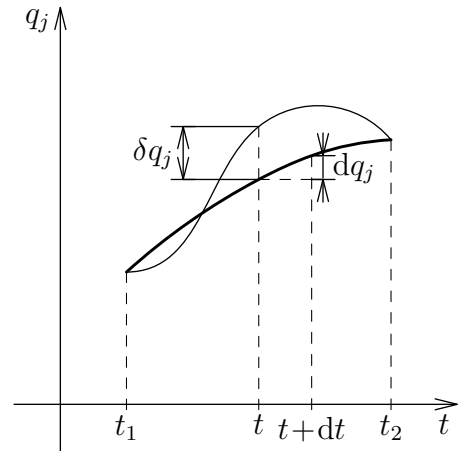
$$\delta \dot{q}_j = \dot{q}'_j - \dot{q}_j = \frac{d}{dt}(\alpha \eta_j) = \frac{d}{dt}(\delta q_j).$$

Dáváme-li parametru α v (1.39) různé hodnoty, dostáváme jednoparametrickou soustavu křivek. Každou z těchto křivek můžeme tedy považovat za funkci času a parametru α , $q_j = q_j(t, \alpha)$. Variace odčítáme vždy jako rozdíl funkčních hodnot nějaké křivky z této soustavy a křivky základní, odpovídající skutečnému pohybu. Předpokládejme, že této základní křivce přísluší hodnota parametru $\alpha = \alpha_0$. Variace se pak dá psát

$$\delta q_j = q_j(t, \alpha) - q_j(t, \alpha_0).$$

Jestliže předpokládáme, že se α málo liší od α_0 , např. $\alpha = \alpha_0 + d\alpha$, můžeme rozvinout $q_j(t, \alpha)$ v Taylorovu řadu a omezit se na první člen řady, takže

$$\delta q_j = \frac{\partial q_j}{\partial \alpha} d\alpha. \quad (1.40)$$



Obr. 1.3: Geometrický rozdíl mezi dq_j a δq_j

Aby studovaná jednoparametrická soustava křivek popisovala jen takové trajektorie, které procházejí body A a B , musíme navíc požadovat, aby

$$\delta q_j|_{t=t_1} = \delta q_j|_{t=t_2} = 0. \quad (1.41)$$

Při volbě soustavy křivek definované rovnicí (1.39) to znamená, že funkce $\eta_j(t)$ musejí být pro $t = t_1$ a $t = t_2$ rovny nule.

Nyní už můžeme přejít k vlastní matematické formulaci problému, tj. k nalezení takové funkce $q(t)$, která dává integrálu S extrémní hodnotu. Vzhledem k tomu, že každá z přípustných křivek odpovídá nějaké hodnotě parametru α , můžeme integrál S pokládat za funkci tohoto parametru. Bez újmy na obecnosti můžeme předpokládat, že extrémní hodnotu dává integrálu S křivka odpovídající parametru $\alpha = 0$. Podmínku extrému S můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \alpha} \right)_{\alpha=0} = 0$$

nebo (vynásobením $d\alpha$)

$$\left(\frac{\partial S}{\partial \alpha} \right)_{\alpha=0} d\alpha = \delta S = 0, \quad (1.42)$$

kde analogicky s (1.40) nazýváme δS variací integrálu S . Vypočítejme nejprve $\partial S / \partial \alpha$

$$\frac{\partial S}{\partial \alpha} = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_i} \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial \dot{q}_i}{\partial \alpha} \right) dt.$$

Rozvedením na dva integrály zjistíme, že druhý integrál se dá vypočítat per partes

$$\int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial q_i}{\partial \alpha} \right) dt = \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} \Big|_{t=t_1}^{t=t_2} - \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^f \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \frac{\partial q_i}{\partial \alpha} dt.$$

Znásobíme-li nyní celou rovnici $d\alpha$ a položíme $\alpha = 0$, a uvážíme-li, že vzhledem k podmínce (1.41) je vyintegrováný člen roven nule, dostáváme

$$\delta S = \int_{t_1}^{t_2} \sum_{i=1}^f \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] \delta q_i dt = 0.$$

Protože jsou souřadnice q_1, \dots, q_f nezávislé, jsou také variace δq_i nezávislé; proto bude tento vztah splněn, jestliže

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) - \frac{\partial L}{\partial q_i} = 0, \quad i = 1, 2, \dots, f. \quad (1.43)$$

Tyto velmi důležité rovnice, jež mají velký význam v řadě praktických aplikací, nazýváme zpravidla *Lagrangeovými rovnicemi druhého druhu*⁶ a představují základní pohybové rovnice soustavy podrobené vazbám zapsané v nezávislých zobecněných souřadnicích. Integrál S tedy nabývá extrémní hodnoty pro takové funkce q_1, q_2, \dots, q_f , které jsou řešením soustavy diferenciálních rovnic (1.43), jež se v matematice zpravidla nazývají *Eulerovy-Lagrangeovy rovnice variačního počtu* (viz např. [11]).

⁶Joseph Louis Lagrange publikoval tyto rovnice v r. 1788 ve svém díle „Mécanique analytique“ (Analytická mechanika).

Volba nezávislých zobecněných souřadnic byla zcela libovolná. Mohli bychom zvolit jinou soustavu nezávislých zobecněných souřadnic a našli bychom rovnice stejného tvaru. Lagrangeovy rovnice druhého druhu mají tedy tu významnou vlastnost, že jsou invariantní při přechodu od jedné soustavy zobecněných souřadnic k soustavě jiné. Vzhledem k tomu, že jde o diferenciální rovnice 2. řádu, při konkrétním řešení musíme vždy doplnit počáteční podmínky $q_i(t_0) = q_{i0}$ a $\dot{q}_i(t_0) = \dot{q}_{i0}$.

V uvedené podobě platí Hamiltonův princip pro nedisipativní systémy, v nichž nedochází k tepelným ztrátám. Lagrangeovy rovnice jsou jen *nutnými* podmínkami extrémnosti (stacionárnosti) integrálu akce, nikoli podmínkami postačujícími. Díky univerzálnosti Lagrangeových rovnic je klíčovou otázkou pro dané odvětví fyziky nalezení správné Lagrangeovy funkce. Zvolíme-li její určitý tvar, můžeme řešit příslušné Lagrangeovy rovnice a tato řešení porovnat s experimentálním průběhem trajektorií. Nesouhlasí-li, je vybraná Lagrangeova funkce špatná. Zpravidla se za L vybírá vhodná skalární funkce (její hodnota nezávisí na volbě souřadnic). Pro jednoduché mechanické problémy známe dvě důležité skalární funkce – kinetickou a potenciální energii, správné pohybové rovnice dostáváme pro jejich kombinaci $L = T - U$.

Lagrangeova funkce přitom není určena jednoznačně. Jestliže totiž vezmeme variaci z úplné derivace nějaké funkce podle času, platí pro ni

$$\delta \int_{t_1}^{t_2} \frac{dF}{dt} dt = \delta [F(t_2) - F(t_1)] = 0,$$

je tedy tato variace rovna nule, neboť jde vlastně o variaci rozdílu konstant – funkčních hodnot ve dvou daných bodech. Proto také, definujeme-li Lagrangeovu funkci na základě Hamiltonova principu, musíme říci, že L je určena až na derivaci nějaké funkce podle času dF/dt . Funkce

$$L' = L + \frac{dF}{dt}$$

totiž splňuje Hamiltonův princip (1.38) stejně jako funkce L , to jest vyplývají z ní naprosto stejné pohybové rovnice.

Pro komplikovanější systémy je rozdělení Lagrangeovy funkce na kinetickou a potenciální energii značně obtížné a navíc někdy zbytečné. Naopak, jak uvidíme dále, na základě různých symetrií systému lze za pomoci Lagrangeovy funkce definovat takové veličiny, jako je energie, hybnost, moment hybnosti systému atd. Vhodnou Lagrangeovu funkci lze nalézt i pro relativistickou mechaniku, pohyby nabitých částic v elektrických a magnetických polích, pro teorii elektromagnetického pole, pro obecnou teorii relativity i pro další fyzikální obory. Vždy z ní potom plynou rovnice popisující daný problém – např. v teorii elektromagnetického pole Maxwellovy rovnice. Ukažme si použití Lagrangeova formalismu na dvou jednoduchých příkladech.

Hmotný bod v potenciálovém poli

Hmotný bod má tři stupně volnosti, za zobecněné souřadnice lze volit např. kartézské souřadnice

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

potenciální energie je obecně funkcí souřadnic $U = U(x, y, z)$. Pro Lagrangeovu funkci potom máme

$$L = T - U = \frac{1}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) - U(x, y, z).$$

Po dosazení do 1.43 získáme pohybové rovnice

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \right) - \frac{\partial L}{\partial x} &= \frac{d}{dt} (m\dot{x}) + \frac{\partial U}{\partial x}; & \iff & m\ddot{x} = \frac{\partial U}{\partial x}; \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \right) - \frac{\partial L}{\partial y} &= \frac{d}{dt} (m\dot{y}) + \frac{\partial U}{\partial y}; & \iff & m\ddot{y} = \frac{\partial U}{\partial y}; \\ \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \right) - \frac{\partial L}{\partial z} &= \frac{d}{dt} (m\dot{z}) + \frac{\partial U}{\partial z}; & \iff & m\ddot{z} = \frac{\partial U}{\partial z}. \end{aligned}$$

Ve vektorovém zápisu tyto rovnice odpovídají Newtonovu zákonu v konzervativním potenciálovém poli $m\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}$, kde $\mathbf{F} = -\nabla U$ (viz vztah (1.23) na s. 13).

Matematické kyvadlo

Matematické kyvadlo s konstantní délkou závěsu l má jeden stupeň volnosti, jako zobecněnou souřadnici můžeme zvolit např. úhel φ . Pro souřadnice x a y pak podle obr. 1.5 platí

$$x = l \cos \varphi, \quad y = l \sin \varphi \quad \dot{x} = -l \sin \varphi \dot{\varphi}, \quad \dot{y} = l \cos \varphi \dot{\varphi}.$$

Zvolíme-li nulovou hladinu potenciální energie v místě závěsu (tj. ve výšce $x = 0$), pak pro lagrangián dostáváme

$$L = T - U = \frac{1}{2} (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) - (-mgx) = \frac{1}{2} l^2 \dot{\varphi}^2 + mgl \cos \varphi.$$

Odpovídající Lagrangeova rovnice pak vede ke známé pohybové rovnici matematického kyvadla

$$ml^2 \ddot{\varphi} + mgl \sin \varphi = 0 \quad \text{neboli} \quad \ddot{\varphi} + \frac{g}{l} \sin \varphi = 0.$$

Obvod LC

Jako poslední uveďme i příklad z jiné oblasti, než je mechanika. Uvažujme jednoduchý obvod skládající se pouze z cívky o indukčnosti L a kondenzátoru o kapacitě C . Za zobecněnou souřadnici zvolíme náboj Q na kondenzátoru, roli zobecněné rychlosti potom hraje proud $I = dQ/dt$. Lagranžián, který vede ke správné pohybové rovnici, má tvar

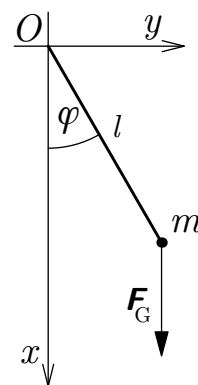
$$\mathcal{L}(Q, \dot{Q}) = \frac{1}{2} L \dot{Q}^2 - \frac{Q^2}{2C}.$$

Vidíme, že energie magnetického pole cívky zde vystupuje na místě pohybové energie a energie nabitého kondenzátoru v roli polohové energie, jak bývá často uváděno při diskusi analogie mezi mechanickými a elektrickými kmity. „Pohybová“ rovnice pro náboj Q pak po dosazení do (1.43) dává

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{Q}} \right) - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial Q} = L \ddot{Q} + \frac{Q}{C} = 0, \quad \text{a po úpravě} \quad \ddot{Q} + \frac{1}{LC} Q = 0,$$

což je rovnice kmitů v obvodu s frekvencí danou Thomsonovým vztahem

$$f = \frac{1}{2\pi} \omega = \frac{1}{2\pi \sqrt{LC}}.$$



Obr. 1.5: Matematické kyvadlo

1.3 Zákony zachování

Jak již bylo řečeno v části 1.1.1, každá veličina, která se v průběhu časového vývoje systému nemění (zachovává) může být velmi důležitá a usnadnit řešení problémů; tyto veličiny v mechanice nazýváme integrály pohybu. Většinou v této souvislosti hovoříme o zákonech zachování: zákon zachování hybnosti, momentu hybnosti, energie; v kvantové teorii zákon zachování elektrického náboje, spinu, isospinu, baryonového čísla, parity atd. V roce 1916 německá matematicka Emma Noetherová formulovala fundamentální souvislost zákonů zachování se symetriemi (označovanou jako *věta Noetherové*):

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

Symetriemi zde rozumíme neměnnost (invariantnost) rovnic popř. charakteristik vůči transformacím souřadnic, jak ilustrují následující příklady:

- Na pracovním stole jsme zkonstruovali nějaký mechanický stroj. Stroj spustíme a budeme sledovat jeho chování. Jestliže stejný experiment provedeme na stejném psacím stole v sousední místnosti, výsledek bude stejný. Provedeme-li ale tentýž experiment na stole v místnosti o patro výše, může dopadnout jinak, protože gravitační pole Země má na tomto stole jinou hodnotu. Tato fyzikální situace je symetrická vzhledem k vodorovnému posunutí, ale není symetrická vzhledem k svislému posunutí.
- Vodičem teče konstantní proud. Kolem vodiče se vytvořilo časově neproměnné (stacionární) magnetické pole. Do tohoto pole vypustíme elektron a budeme sledovat jeho trajektorii. Vypustíme-li elektron o minutu později (počáteční rychlost a poloha elektronu musí být stejná), bude výsledná trajektorie totožná. Zde hovoříme o symetrii vzhledem k časovému posunutí. Kdyby proud nebyl konstantní, tato symetrie bude porušena, magnetické pole v různých časech různé a trajektorie elektronů odlišné.
- Při silné interakci (drží pohromadě atomové jádro) se neutron i proton chovají stejně, při elektromagnetické interakci různě (proton je nabitý). Výměna neutronu za proton nebo protonu za neutron je symetrickou operací při silné interakci, nesymetrickou při elektromagnetické.

Příklady dalších symetrií jsou rotační symetrie, zrcadlová symetrie (záměna levého a pravého); podle principu relativity je výsledek všech experimentů stejný ve všech souřadnicových systémech pohybujících se vůči sobě rovnoměrně přímočaře (Lorentzova symetrie).

Z věty Noetherové můžeme vyplývá souvislost některých základních zákonů zachování se symetriemi prostoru a času, konkrétně s homogeností a izotropností prostoru a s homogeností času. Jestliže nějaká fyzikální soustava A je ovlivňována jinou soustavou B , pak fyzikální chování soustavy A závisí na tom, jak daleko je A od B , což znamená, že mezi všemi možnými souřadnicovými soustavami, v nichž lze popisovat chování soustavy A by bylo možné vždy najít jednu, která by měla vlastnosti privilegované. Pokud je však soustava A umístěna v prostoru jinak prázdném, můžeme předpokládat, že její fyzikální chování nebude záviset na místě, v němž je soustava situována, jinými slovy, prostor sám můžeme pokládat za homogenní. Podobně jestliže by soustava A byla ovlivňována nějakou vnější silou daného směru, záviselo by její chování na orientaci vzhledem k tomuto směru; pokud však v prostoru neexistuje fyzikálně rozlišitelný směr, nezávisí chování soustavy A na její orientaci v prostoru, tj. prostor sám je izotropní. Žádná pozorovaná veličina charakterizující soustavu A tedy nesmí změnit svoji hodnotu při translaci a rotaci souřadnic.

Podobně neexistuje-li privilegovaný časový okamžik, lze očekávat, že fyzikální chování soustavy nemůže být ovlivněno změnou počátku odčítání času („posunutím“ v čase), tj. čas musí být homo-

genní. Jak ukážeme, tyto vlastnosti prostoru a času se významně projevují v známých zákonech zachování.

1.3.1 Zákon zachování hybnosti a momentu hybnosti

Předpokládejme nyní, že L nezávisí explicitně na některých zobecněných souřadnicích, např. na q_α , $\alpha = 1, 2, \dots, l$, takže $\partial L / \partial q_\alpha = 0$, $\alpha = 1, 2, \dots, l$. Takové souřadnice nazýváme *cyklickými souřadnicemi*. Skutečnost, že Lagrangeova funkce nezávisí na souřadnici q_α přitom představuje vyjádření symetrie – při posunutí ve směru této souřadnice se lagranžián nezmění a je proto vzhledem k tomuto prostorovému posunutí invariantní. Může obecně jít jak o posunutí v prostoru, tak otočení, podle toho, zda q_α je souřadnice délková nebo úhlová. Z (1.43) vyplývá

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \right) = 0, \quad \alpha = 1, 2, \dots, l, \quad (1.44)$$

takže

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_\alpha} \equiv p_\alpha = c_\alpha = \text{konst.}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, l. \quad (1.45)$$

Výraz $\partial L / \partial \dot{q}_j$ se obvykle nazývá *zobecněná hybnost* a označuje se p_j . Rovnice (1.45) se tedy dá slovy vyjádřit tak, že zobecněné hybnosti příslušející cyklickým souřadnicím jsou konstantní.

Podotkněme, že označení pochází z analogie: uvážíme-li v kartézských souřadnicích Lagrangeovu funkci volné částice, tj. částice, na niž nepůsobí žádné síly, platí

$$L = T = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2), \quad (1.46)$$

přičemž kartézské souřadnice ztotožňujeme se zobecněnými, $q_1 \equiv x$, $q_2 \equiv y$, $q_3 \equiv z$. Výraz pro L neobsahuje souřadnice x , y , z , takže všechny souřadnice jsou v tomto případě cyklické, a proto

$$\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} = p_x, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} = m\dot{y} = p_y, \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} = m\dot{z} = p_z, \quad (1.47)$$

což skutečně souhlasí s obvykle definovanými složkami hybnosti částice. Obecně to však neplatí – napíšeme-li např. Lagrangeovu funkci pro centrální pohyb v polárních souřadnicích, je zobecněná hybnost příslušející souřadnici φ rovna momentu hybnosti resp. jeho složce a nikoliv hybnosti resp. její složce.

1.3.2 Integrál energie

Předpokládejme, že Lagrangeova funkce L nezávisí explicitně na čase $L \neq L(t)$; opět jde vlastně o symetrii vzhledem k posunutí v čase. Úplná derivace podle času je

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{j=1}^f \left(\frac{\partial L}{\partial q_j} \dot{q}_j + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \ddot{q}_j \right), \quad (1.48)$$

neboť $\partial L / \partial t = 0$. Z (1.43) najdeme

$$\frac{\partial L}{\partial q_j} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) \quad (1.49)$$

a máme

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{j=1}^f \left[\dot{q}_j \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right) + \ddot{q}_j \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \right] = \frac{d}{dt} \left(\sum_{j=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j \right), \quad (1.50)$$

čili

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{j=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L \right) = 0. \quad (1.51)$$

Odtud plyne první integrál Lagrangeových rovnic, tzv. *integrál energie*

$$\sum_{j=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L = E. \quad (1.52)$$

Konstanta má při stacionárních vazbách význam celkové mechanické energie soustavy. Abychom to dokázali, musíme opět použít Eulerovy věty o homogenních funkcích uvedenou v poznámce na s 16.

Protože $U \neq U(\dot{q})$, můžeme psát $\partial L / \partial \dot{q}_j = \partial T / \partial \dot{q}_j$, takže levá strana (1.52) je

$$\sum_{j=1}^f \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L. \quad (1.53)$$

Ukážeme nyní, že při stacionárních vazbách je kinetická energie homogenní funkce druhého stupně v proměnných $\dot{q}_1, \dot{q}_2, \dots, \dot{q}_f$. Jsou-li vazby stacionární, redukuje se vztah mezi kartézskými a zobecněnými souřadnicemi na závislost

$$x_{\varrho,i} = x_{\varrho,i}(q_1, q_2, \dots, q_f), \quad (1.54)$$

takže

$$\dot{x}_{\varrho,i} = \sum_{j=1}^f \frac{\partial x_{\varrho,i}}{\partial q_j} \dot{q}_j \quad (1.55)$$

a pak

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\varrho=1}^N \sum_{i=1}^3 m_{\varrho} \dot{x}_{\varrho,i}^2 = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^f \sum_{k=1}^f a_{jk} \dot{q}_j \dot{q}_k, \quad (1.56)$$

kde

$$a_{jk} = \sum_{\varrho=1}^N \sum_{i=1}^3 \frac{\partial x_{\varrho,i}}{\partial q_j} \frac{\partial x_{\varrho,i}}{\partial q_k} m_{\varrho} \quad (1.57)$$

nezáviselí na zobecněných rychlostech q_j . Z (1.56) je skutečně vidět, že kinetická energie je homogenní funkcí stupně 2 v zobecněných rychlostech, a proto platí

$$\sum_{j=1}^f \frac{\partial T}{\partial \dot{q}_j} \dot{q}_j - L = 2T - (T - U) = T + U = E. \quad (1.58)$$

V případě stacionárních vazeb má konstanta E význam celkové mechanické energie soustavy, ale i bez této podmínky nazýváme funkci definovanou rovnicí (1.52) *zobecněnou energií* i v případech, kdy nelze Lagrangeovu funkci ani energii rozdělit na kinetickou a potenciální část.

Na závěr uveďme příklad, kdy se energie nezachovává. Uvažujme kyvadlo, jehož závěs je *velmi pomalu* namotáván pomocným motorkem v místě úchyty (např. jeřáb se zavěšeným břemenem). Délka závěsu se s časem zkracuje

$$l = l_0 - ct,$$

kde c je rychlost navíjení. Lagrangeova funkce kyvadla má v uvažovaném přiblížení tvar

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

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

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

1.4 Hamiltonovy kanonické rovnice

V předešlé části jsme formulovali Hamiltonův princip, o němž jsme si řekli, že jej lze pokládat za základní princip mechaniky. Pro konkrétní řešení pohybu mechanické soustavy bychom ovšem museli postupovat tak, jak bylo v minulé kapitole naznačeno, tj. odvodit z principu Hamiltonova Lagrangeovy pohybové rovnice a tyto rovnice pak obvyklými metodami řešit. Této metodě řešení mechanických problémů se zpravidla říká metoda Lagrangeova. I když je to v praxi velmi běžná metoda, není jediná; existují také jiné a nejdůležitější z nich, tzv. Hamiltonovu metodu, si nyní popíšeme.

Lagrangeovy rovnice jsou diferenciální rovnice 2. řádu; aby byl pohyb soustavy určen jednoznačně, je třeba zadat počáteční podmínky, tj. počáteční hodnoty všech q_i a \dot{q}_i . V tomto smyslu představují q_i a \dot{q}_i úplnou soustavu $2f$ nezávisle proměnných potřebných k popisu pohybového stavu soustavy. Pohyb soustavy je ale možné popsat také zadáním zobecněných souřadnic q_i a zobecněných hybností $p_i = \partial L / \partial \dot{q}_i$; tyto parametry lze opět pokládat za soustavu $2f$ nezávisle proměnných ve $2f$ -rozměrném prostoru, který nazýváme *prostorem fázovým*. Chceme-li však používat proměnné (q, p, t) místo dosud užívaných (q, \dot{q}, t) , je nutné, abychom místo funkce $L(q, \dot{q}, t)$ zavedli jinou funkci podobných vlastností jako L , která však bude funkcí proměnných (q, p, t) .

Nejvýhodnější způsob přechodu od proměnných (q, \dot{q}, t) k proměnným (q, p, t) spočívá v použití matematické transformace známé jako Legendreova transformace. Ukážeme si tento postup na jednoduchém příkladě.

Uvažme libovolnou funkci dvou proměnných $f(x, y)$; její diferenciál je

$$df = u dx + v dy,$$

kde

$$u = \frac{\partial f}{\partial x}, \quad v = \frac{\partial f}{\partial y}.$$

Přejdeme nyní od nezávisle proměnných x, y k proměnným u, y a tedy od diferenciálů dx, dy k diferenciálům du, dy . Definujme-li funkci

$$g = ux - f, \tag{1.59}$$

bude její diferenciál

$$dg = u dx + x du - df = x du - v dy,$$

kde veličiny x, v jsou nyní funkcemi proměnných u, y a definují se rovnicemi

$$x = \frac{\partial g}{\partial u}, \quad v = -\frac{\partial g}{\partial y}.$$

Přechodu od funkce f proměnných x, y k funkci g proměnných $\partial f / \partial x, y$ uskutečněnému rovnici (1.59) se říká *Legendreova transformace*. Dá se jednoduše rozšířit i na případ funkcí více proměnných. Naše hledaná transformace bude zřejmě stejného typu, protože od funkce L proměnných (q, \dot{q}, t) chceme přejít k funkci proměnných $(q, \partial L / \partial \dot{q}, t)$.

Označíme-li transformovanou funkci H , můžeme ji definovat vztahem

$$H(q, p, t) = \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - L(q, \dot{q}, t), \quad (1.60)$$

kde zkrácené označení $H(q, p, t)$ je opět třeba chápat jako

$$H(q, p, t) = H(q_1, q_2, \dots, q_f, p_1, p_2, \dots, p_f, t).$$

Tuto funkci nazýváme *Hamiltonovou funkcí (hamiltoniánem)*. V části 1.3.2 jsme definovali podobnou funkci, ale jen pro případ $L \neq L(t)$. Tam jsme též viděli, že v případě stacionárních vazeb je H konstantní, rovna celkové mechanické energii soustavy. V tomto případě máme také jednoduchou metodu pro sestavení hamiltoniánu: stačí, jestliže ve výrazu $T + U$ nahradíme zobecněné rychlosti \dot{q} zobecněnými hybnostmi p .

Protože je funkce H definována rovnicí (1.60), je její úplný diferenciál

$$dH = \sum_{i=1}^f \dot{q}_i dp_i + \sum_{i=1}^f p_i d\dot{q}_i - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} d\dot{q}_i - \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial q_i} dq_i - \frac{\partial L}{\partial t} dt. \quad (1.61)$$

Na druhé straně z předpokladu, že $H = H(q, p, t)$ vyplývá pro diferenciál přímo

$$dH = \sum_{i=1}^f \frac{\partial H}{\partial q_i} dq_i + \sum_{i=1}^f \frac{\partial H}{\partial p_i} dp_i + \frac{\partial H}{\partial t} dt. \quad (1.62)$$

Druhý a třetí člen napravo v (1.61) se ruší vzhledem k definici zobecněné hybnosti. Kromě toho můžeme do čtvrtého členu napravo dosadit z Lagrangeových rovnic

$$\frac{\partial L}{\partial q_i} = \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) = \dot{p}_i.$$

Porovnáním koeficientů u dq_i, dp_i a dt v (1.61) a (1.62) dostáváme vztahy

$$\boxed{\dot{q}_i = \frac{\partial H}{\partial p_i}, \quad \dot{p}_i = -\frac{\partial H}{\partial q_i}, \quad \frac{\partial L}{\partial t} = -\frac{\partial H}{\partial t}, \quad i = 1, 2, \dots, f,} \quad (1.63)$$

které se nazývají *Hamiltonovy kanonické rovnice*.

Soustava Hamiltonových kanonických rovnic je ekvivalentní f rovnicím Lagrangeovým. Z matematického hlediska představuje tato soustava převedení f diferenciálních rovnic Lagrangeových, které jsou rovnicemi druhého řádu, na $2f$ diferenciálních rovnic řádu prvního. Význam Hamiltonových rovnic podtrhují následující skutečnosti:

- Pro řešení diferenciálních rovnic prvního řádu je vypracováno velké množství numerických metod a tak Hamiltonovy rovnice bývají většinou pro numerické řešení vhodnější než rovnice Lagrangeovy.
- Za pomoci Hamiltonových rovnic lze snadno zapsat časový vývoj libovolné dynamické proměnné, tj. nejenom zvolených zobecněných souřadnic.

- Hamiltonovy rovnice lze přepsat do velmi jednoduchého tvaru s pomocí tzv. Poissonových závorek (viz s. 30), které z matematického hlediska představují tzv. Lieovu algebru, jejíž vlastnosti jsou určeny nezávisle na objektech, které ji tvoří. Proto je možné tuto strukturu snadno přenést do jiných oblastí fyziky, např. do kvantové mechaniky.

Dodejme, že Hamiltonovy kanonické rovnice můžeme odvodit také z Hamiltonova principu, jestliže variujeme proměnné q_i, p_i jako nezávislé, tj. variujeme křivku, která charakterizuje pohyb soustavy v $2f$ -rozměrném fázovém prostoru. Ukažme použití Hamiltonova formalismu na jednoduchých příkladech.

Volný pád v neodporujícím prostředí

Částice necht' má hmotnost m a pohybuje se po vertikále, q necht' je její vzdálenost od povrchu Země. Pak

$$T = \frac{1}{2}m\dot{q}^2, \quad U = mgq.$$

Protože

$$p = \frac{\partial T}{\partial \dot{q}} = m\dot{q},$$

je $\dot{q} = p/m$ a tedy

$$H = T + U = \frac{p^2}{2m} + mgq.$$

Kanonické rovnice mají tvar

$$\dot{q} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial q} = -mg.$$

První z nich je jen definicí zobecněné hybnosti a nedává tedy nic nového. Druhá rovnice po integraci dává

$$p = -mgt + C_1,$$

kde C_1 je integrační konstanta. Dosazením $p = m\dot{q}$ plyne

$$\dot{q} = -gt + C_2,$$

kde $C_2 = \frac{C_1}{m}$ a integrací

$$q = -\frac{1}{2}gt^2 + C_2t + C_3.$$

Položíme-li počáteční podmínky $q = q_0$, $\dot{q} = v_0$ pro $t = 0$, plyne $C_3 = q_0$, $C_2 = v_0$, takže

$$q = q_0 + v_0t - \frac{1}{2}gt^2,$$

což je známá rovnice pro volný pád v neodporujícím prostředí.

Lineární harmonický oscilátor

Lineární harmonický oscilátor (často zkráceně označovaný zkratkou LHO) patří k nejužitečnějším fyzikálním modelům, v mechanice jej můžeme realizovat např. netlumenými kmity tělesa o hmotnosti m na pružině o tuhosti k . Uvažujeme-li pouze jednorozměrný případ (odtud přívlástek lineární), jde o soustavu s jedním stupněm volnosti, jako zobecněnou souřadnici můžeme volit např. výchylku z rovnovážné polohy x . Jde o konzervativní systém, hamiltonián bude proto roven celkové energii kmitající částice

$$H = T + U = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}kx^2 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}kx^2,$$

kde $p = m\dot{x}$ je hybnost oscilátoru. Obvykle se zavádí úhlová frekvence LHO $\omega_0^2 = k/m$, takže hamiltonián přepíšeme jako

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2.$$

Hamiltonovy rovnice (1.63) pak dávají

$$\dot{x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m}, \quad \dot{p} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega_0^2x = -kx.$$

Ze skutečnosti, že hamiltonián je roven celkové energii LHO

$$H = E = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2x^2,$$

snadno najdeme i rovnici fázové trajektorie

$$1 = \frac{p^2}{2mE} + \frac{x^2}{\frac{2E}{m\omega_0^2}}.$$

Jde zřejmě o rovnici elipsy v dvourozměrném fázovém prostoru o souřadnicích x a p . Není obtížné rozmyslet si tvar fázové trajektorie v případě, že půjde o tlumené kmity.

Pohyb v poli centrální síly

Při obvyklé formulaci problému položíme $q_1 = r$, $q_2 = \varphi$, takže

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) - U(r)$$

a odtud

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

takže

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

Hamiltonova funkce bude

$$H = \frac{1}{2m} \left(p_r^2 + \frac{p_\varphi^2}{r^2} \right) + U(r)$$

a kanonické rovnice dávají soustavu

$$\dot{r} = \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m}, \quad \dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2},$$

$$\dot{p}_r = -\frac{\partial H}{\partial r} = \frac{p_\varphi^2}{mr^3} - \frac{\partial U}{\partial r}, \quad \dot{p}_\varphi = 0.$$

První dvojice rovnic jsou opět definiční rovnice zobecněných hybností, druhé dvě představují pohybové rovnice zapsané v zobecněných hybnostech. Je zřejmé, že při přechodu od proměnných p_r , p_φ zpět k zobecněným rychlostem by tyto rovnice přešly na známé rovnice centrálního pohybu; jejich řešením v proměnných p_r , p_φ se už zabývat nebudeme.

1.5 Poissonova formulace Hamiltonových rovnic

Definujeme *Poissonovy závorky* pro dvě funkce $F(q, p, t)$ a $G(q, p, t)$ jako výraz

$$[F, G] = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial G}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial G}{\partial q_i} \right). \quad (1.64)$$

Z přímého výpočtu bychom lehce dostali

$$[F, G] = -[G, F]$$

a dále

$$[q_j, q_l] = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial q_j}{\partial q_i} \frac{\partial q_l}{\partial p_i} - \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \frac{\partial q_l}{\partial q_i} \right) = \delta_{ji} \cdot 0 - 0 \cdot \delta_{li} = 0, \quad (1.65a)$$

$$[p_j, p_l] = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial p_j}{\partial q_i} \frac{\partial p_l}{\partial p_i} - \frac{\partial p_j}{\partial p_i} \frac{\partial p_l}{\partial q_i} \right) = 0 \cdot \delta_{li} - \delta_{ji} \cdot 0, \quad (1.65b)$$

$$[q_j, p_l] = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial q_j}{\partial q_i} \frac{\partial p_l}{\partial p_i} - \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \frac{\partial p_l}{\partial q_i} \right) = \sum_{i=1}^f \delta_{ji} \delta_{li} - 0 \cdot 0 = \delta_{jl}. \quad (1.65c)$$

Vztahy (1.65) nazýváme *fundamentálními Poissonovými závorkami*.

Další důležité vztahy dostaneme, hledáme-li Poissonovy závorky kanonických proměnných a hamiltoniánu. Platí zřejmě

$$[q_j, H] = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial q_j}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial q_j}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \sum_{i=1}^f \left(\delta_{ji} \frac{\partial H}{\partial p_i} - 0 \cdot \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \frac{\partial H}{\partial p_j} = \dot{q}_j, \quad (1.66a)$$

$$[p_j, H] = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial p_j}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial p_j}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = \sum_{i=1}^f \left(0 \cdot \frac{\partial H}{\partial p_i} - \delta_{ji} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) = -\frac{\partial H}{\partial q_j} = \dot{p}_j, \quad (1.66b)$$

kde jsme využili platnosti Hamiltonových kanonických rovnic. Vztahy (1.66) představují pohybové rovnice zapsané pomocí Poissonových závorek. Analogicky bychom postupovali u dalších dynamických proměnných. V kvantové teorii zůstává tato struktura zachována, jen objekty se kterými pracujeme jsou jiné.

Je-li $F(q, p, t)$ nějaká funkce zobecněných souřadnic a času, platí pro její úplnou derivaci podle času

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial F}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial F}{\partial t}.$$

Dosadíme-li za \dot{q}_i, \dot{p}_i z Hamiltonových kanonických rovnic (1.63), dostáváme

$$\frac{dF}{dt} = \sum_{i=1}^f \left(\frac{\partial F}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial F}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right) + \frac{\partial F}{\partial t},$$

neboli

$$\frac{dF}{dt} = [F, H] + \frac{\partial F}{\partial t}. \quad (1.67)$$

Položíme-li $F = H$, vychází

$$\frac{dH}{dt} = \frac{\partial H}{\partial t},$$

což vede k zákonu zachování energie v případě, že H nezávisí explicitně na čase. Nezávisí-li funkce $F(q, p)$ na čase explicitně, platí

$$\frac{dF}{dt} = [F, H],$$

což ukazuje, že Poissonova závorka může být kritériem toho, zda nějaká funkce je nebo není integrálem pohybu; má-li jím být, musí být rovna nule Poissonova závorka této funkce a funkce Hamiltonovy. Tento výsledek nám umožňuje určit integrály pohybu nezávisle na tom, zda sama H je integrálem pohybu nebo nikoliv.

Poznamenejme ještě, že pro Poissonovy závorky lze dokázat tzv. *Jacobiho identitu*: Jsou-li A, B, C funkce kanonických proměnných, platí

$$[A, [B, C]] + [B, [C, A]] + [C, [A, B]] = 0. \quad (1.68)$$

Důkaz lze provést přímým výpočtem a ponecháváme jej jako úlohu pro samostatnou práci. Položíme-li v této identitě $C = H$ a předpokládáme-li že A a B jsou integrály pohybu, dostáváme

$$[H, [A, B]] = 0, \quad (1.69)$$

takže výraz $[A, B]$ je rovněž integrálem pohybu. Vztahu (1.69) můžeme použít, chceme-li ze známých integrálů pohybu zkonstruovat nové.

1.6 Hamiltonova–Jacobiho rovnice

Hamiltonův princip (1.37) definuje účinek (integrál akce)

$$S = \int_{t_1}^{t_2} L dt$$

s pevnými mezemi. Ponecháme-li horní mez volnou, tj. budeme uvažovat účinek

$$S(q_i, t) = \int_{t_1}^t L dt,$$

získáme funkci zobecněných souřadnic a času konečného stavu. Pro variaci takového funkcionálu pak platí

$$\delta S = \left[\sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i \right]_{t_1}^t + \int_{t_1}^t \sum_{i=1}^f \left[\frac{\partial L}{\partial q_i} - \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \right) \right] \delta q_i dt.$$

Druhý člen díky platnosti Lagrangeových rovnic vymizí a získáme

$$\delta S = \sum_{i=1}^f \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} \delta q_i,$$

neboť $\delta q_i(t_1) = 0$. Odtud plyne vztah

$$p_i = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_i} = \frac{\partial S}{\partial \dot{q}_i} \quad (1.70)$$

a pro úplnou časovou derivaci dále

$$\frac{dS}{dt} = \sum_{i=1}^f \frac{\partial S}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial t} = \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial t}.$$

Zároveň z definice účinku $S(q_i, t)$ platí

$$\frac{dS}{dt} = L.$$

Porovnáním získáme

$$L = \sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i + \frac{\partial S}{\partial t},$$

neboli s využitím (1.60)

$$\sum_{i=1}^f p_i \dot{q}_i - L + \frac{\partial S}{\partial t} = H + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Nahradíme-li v hamiltoniánu zobecněné hybnosti $p_i = \partial S / \partial q_i$, získáme vztah

$$H \left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f}, t \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0. \quad (1.71)$$

Tato rovnice se nazývá Hamiltonova-Jacobiho rovnice, kterou sestavil roku 1842 německý matematik *Carl Gustav Jacob Jacobi*. Je to *parciální* diferenciální rovnice prvního řádu, určující závislost účinku S na q_1, \dots, q_f .

Převedení mechanického problému na řešení parciální diferenciální rovnice místo soustavy obyčejných diferenciálních rovnic má ovšem smysl jen tehdy, dá-li se parciální diferenciální rovnice jednoduše řešit. V případě rovnice (1.71) můžeme poměrně snadno najít řešení, jestliže H nezávisí explicitně na čase a jestliže některé proměnné jsou cyklické. V těchto případech můžeme v rovnici (1.71) provést tzv. separaci proměnných, přičemž ovšem tento termín má poněkud jiný obsah, než jak bývá používán v souvislosti s obyčejnými diferenciálními rovnicemi.

Předpokládejme, že $H \neq H(t)$. Pak se (1.71) redukuje na

$$H \left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f} \right) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Protože za dané podmínky bude hamiltonián roven celkové energii, z Hamilton-Jacobiho rovnice získáme dvě nezávislé rovnice

$$H \left(q_1, \dots, q_f, \frac{\partial S}{\partial q_1}, \dots, \frac{\partial S}{\partial q_f} \right) = E, \quad \frac{\partial S}{\partial t} = -E. \quad (1.72)$$

Akci S můžeme v konzervativním poli rozdělit do dvou částí

$$S(q_i, t) = W(q_i) - Et, \quad (1.73)$$

přičemž část $W(q_i)$ (tzv. *zkrácená akce* nebo *Hamiltonovou charakteristickou funkcí*) nezávisí na čase a část $-Et$ není funkcí souřadnic. Diferencování pak vede ke vztahům

$$dS = dW - E dt - t dE$$

a zároveň z definice S

$$dS = L dt = \sum_{i=0}^f p_i dq_i - E dt.$$

Porovnáním dvou posledních vztahů získáme

$$\begin{aligned} dW &= \sum_{i=0}^f p_i dq_i + t dE, \\ \frac{\partial W_i}{\partial q_i} &= p_i, \quad \frac{\partial W}{\partial E} = t. \end{aligned} \quad (1.74)$$

Pro ilustraci metody separace proměnných uveďme následující příklad.

Pohyb v konzervativním silovém poli

Studujme pohyb s jedním stupněm volnosti, konkrétně částice o hmotnosti m v konzervativním silovém poli $U = U(q)$. Hamiltonián je zřejmě

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(q)$$

a záměnou p za $\partial S/\partial q$ dostáváme Hamiltonovu-Jacobiho rovnici

$$\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial S}{\partial q} \right)^2 + U(q) + \frac{\partial S}{\partial t} = 0.$$

Protože $H \neq H(t)$, můžeme položit

$$S(q, t) = W(q) - Et$$

a pro určení W máme obyčejnou diferenciální rovnici

$$\frac{dW}{dq} = \sqrt{2m [E - U(q)]},$$

odkud

$$W = \int \sqrt{2m [E - U(q)]} dq.$$

Při konkrétním tvaru $U(q)$ můžeme integrovat a pro hlavní Hamiltonovu funkci bychom dostali

$$S = \int \sqrt{2m [E - U(q)]} dq - Et.$$

Aniž bychom však počítali S , můžeme přímo podle (1.74) psát

$$\frac{\partial W}{\partial q} = p, \quad \frac{\partial W}{\partial E} = t,$$

neboli

$$p = \sqrt{2m [E - U(q)]}, \quad t = \sqrt{\frac{m}{2}} \int \frac{dq}{\sqrt{E - U(q)}}.$$

Kdybychom při konkrétním zadání $U(q)$ integrovali poslední rovnici, dostali bychom závislost q na t a počátečních podmínkách, což by bylo řešení. Konkrétně pro lineární harmonický oscilátor popsaný na s. 28 volíme $q = x$, $U = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$, počáteční podmínky nechť jsou $x_0 = x_m$, $\dot{x}_0 = 0$. Postupně získáváme

$$t = \int_{x_0}^x \sqrt{\frac{m}{2}} \int \frac{dx}{\sqrt{E - \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2}} = \left[\frac{1}{\omega_0} \arcsin \left(\sqrt{\frac{m}{2E}} \omega_0 x \right) \right]_{x_0}^x.$$

Z počátečních podmínek vyplývá, že energie LHO, která je integrálem pohybu, má hodnotu

$$E = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_0^2,$$

a proto $\sqrt{m/(2E)} = 1/(\omega_0 x_0)$, což po dosazení do vypočítaného integrálu dává

$$\omega_0 t = \arcsin \left(\frac{x}{x_0} \right) - \arcsin \left(\frac{x_0}{x_0} \right) = \arcsin \left(\frac{x}{x_0} \right) - \arcsin (1) = \arcsin \left(\frac{x}{x_0} \right) + \frac{\pi}{2}.$$

Převedením konstanty na levou stranu a působením funkce \sin na obě strany pak vychází

$$\begin{aligned} x &= x_0 \sin\left(\omega_0 t + \frac{\pi}{2}\right) = x_0 \cos(\omega_0 t); \\ p &= \sqrt{2m(E - U)} = \sqrt{2m\left(\frac{1}{2}m\omega_0^2 x_0^2 - \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2\right)} = \\ &= m\omega_0 x_0 \sqrt{1 - \cos^2(\omega_0 t)} = m\omega_0 x_0 \sin(\omega_0 t), \end{aligned}$$

což je rovnice harmonických kmitů v případě, že pohyb začíná z klidu při maximální výchylce.

1.6.1 Eikonálová rovnice a analogie s geometrickou optikou

Přepíšeme-li rovnici (1.70) v kartézských souřadnicích, obdržíme

$$p_x = \frac{\partial S}{\partial x}, \quad p_y = \frac{\partial S}{\partial y}, \quad p_z = \frac{\partial S}{\partial z}, \quad \text{neboli} \quad \mathbf{p} = \nabla S.$$

Hybnost má tak ve fázovém prostoru směr normály k plochám s $S = \text{konst.}$ V různých časech t se přitom poloha těchto ploch ve fázovém prostoru mění, tak aby byla splněna rovnice (1.73). Pokud v čase $t = 0$ plocha $S = 0$ splývá s plochou $W = 0$, v čase $t = 1$ s plochou $W = E$ atd. Postupně „prochází“ fázovým prostorem podobně jako vlnoplocha optické vlny a hybnost, kolmá na tuto plochu, je pak analogií paprsků kolmých na vlnoplochu.

Tato analogie má hlubší základ. V konzervativním poli lze podle (1.72) a (1.74) v kartézských souřadnicích psát

$$H = \frac{1}{2m} [p_x^2 + p_y^2 + p_z^2] + U = \frac{1}{2m} \left[\left(\frac{\partial W}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial W}{\partial z}\right)^2 \right] + U = E \quad (1.75)$$

neboli

$$(\nabla W)^2 = 2m(E - U).$$

Šíření rovinné světelné vlny popisuje *vlnová rovnice*

$$\Delta A - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 A}{\partial t^2} = 0,$$

kde $c' = c/n$ je rychlost světla v daném prostředí, c rychlost světla ve vakuu a n index lomu, skalární veličina A může představovat např. potenciál elektrického pole. Pro $n = \text{konst.}$ je řešením rovnice rovinná vlna

$$A = A_0 e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)},$$

kde úhlový vlnčet (úhlové vlnové číslo)

$$k = \frac{\omega}{c} = \frac{2\pi f}{c} = \frac{2\pi}{\lambda}.$$

Není-li v prostředí index lomu konstantní, ale bude funkcí souřadnic $n = n(x, y, z)$, řešení vlnové rovnice bude mít tvar

$$A = B(x, y, z) e^{i(kL(x, y, z) - \omega t)},$$

kde B a L jsou funkce souřadnic, B charakterizuje amplitudu vlny a L je tzv. *eikonál*, který určuje optickou délku podél šíření vlny. Pokud $n = \text{konst.}$ a \mathbf{k} má např. směr osy z , potom $L = nz$. Lze ukázat (viz např. [3, 37]), že tato funkce splňuje *eikonálovou rovnici*

$$\left(\frac{\partial L}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial L}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial L}{\partial z}\right)^2 = n^2,$$

popisující šíření světla v geometrické optice, jež je formálně analogická s (1.75).

Pomocí této analogie lze dojít i k Schrödingerově rovnici. Podle de Broglieho hypotézy každé částici s hybností p můžeme přiřadit vlnovou délku $\lambda = h/p$, pro odpovídající úhlový vlnčet platí $k = 2\pi/\lambda = p/\hbar$. Pokud se částice pohybuje ve volném prostoru, odpovídá jí rovinná vlna $u = Ae^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, která splňuje *Helmholtzovu rovnici*

$$\Delta u + k^2 u = 0.$$

Pohybuje-li se částice v konzervativním poli U , potom platí

$$p^2 = 2m(E - U), \quad k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)$$

a po dosazení do Helmholtzovy rovnice dostaneme slavnou stacionární *Schrödingerovu rovnici*

$$\Delta u + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)u = 0,$$

sestavenou Erwinem Schrödingerem v roce 1924 (podrobněji se této problematice budeme věnovat v části 2.4).

1.7 Proměnné akce–úhel a Bohrův model atomu

Zbývá nám ještě zmínit se o metodě řešení Hamiltonovy-Jacobiho rovnice, kterou je výhodné použít zejména u úloh, při nichž jsou souřadnice periodickými funkcemi času. V takovém případě bývá někdy výhodné zavést proměnné

$$\mathcal{J}_i = \oint p_i dq_i = \oint \frac{\partial S}{\partial q_i} dq_i, \quad (1.76)$$

kde integrujeme přes úplnou periodu změny funkce q_i . Výrazy \mathcal{J}_i nazýváme akcemi. Protože při úlohách tohoto typu je hamiltonián konstantní (a roven zachovávací energii), lze použít přímo charakteristické funkce Hamiltonovy W a píšeme

$$\mathcal{J}_i = \oint \frac{\partial S}{\partial q_i} dq_i = \oint \frac{\partial W}{\partial q_i} dq_i,$$

přičemž

$$W = W(q_1, \dots, q_f, \mathcal{J}_1, \dots, \mathcal{J}_f). \quad (1.77)$$

Zobecněné souřadnice příslušející konstantním akcím se nazývají úhlové proměnné φ_i a jsou definovány vztahy

$$\varphi_i = \frac{\partial W}{\partial \mathcal{J}_i}. \quad (1.78)$$

Vzhledem k tomu, že jde o konzervativní systém, budou integrály (1.76) záviset pouze na energii $\mathcal{J}_i = \mathcal{J}_i(E)$ a naopak energii lze zapsat jako funkci akcí $H = E(\dots, \mathcal{J}_i, \dots)$. Z kanonických rovnic pak plyne

$$\dot{\varphi} = \frac{\partial H}{\partial \mathcal{J}_i} = \nu_i, \quad \dot{\mathcal{J}}_i = -\frac{\partial H}{\partial \varphi_i} = 0.$$

Úhlové souřadnice φ jsou cyklické a budou lineárními funkcemi času

$$\varphi_i = \nu_i t + \beta_i, \quad \beta_i = \text{konst.}$$

Vzhledem k tomu, že jde o periodický pohyb, lze poměrně snadno určit fyzikální význam konstant ν_i . Nechť q_j vykoná celý cyklus změny, přičemž ostatní souřadnice se nemění. Změna φ_i při takové změně q_j bude označena $\Delta\varphi_i$ a platí

$$\Delta\varphi_i = \oint d\varphi_i,$$

kde $d\varphi_i$ je nekonečně malá změna φ_i následkem nekonečně malé změny q_j . Platí

$$d\varphi_i = \frac{\partial \varphi_i}{\partial q_j} dq_j,$$

takže s použitím (1.78) vychází

$$\Delta\varphi_i = \oint \frac{\partial \varphi_i}{\partial q_j} dq_j = \oint \frac{\partial^2 W}{\partial q_j \partial \mathcal{J}_i} dq_j = \frac{\partial}{\partial \mathcal{J}_i} \oint \frac{\partial W}{\partial q_j} dq_j = \frac{\partial \mathcal{J}_j}{\partial \mathcal{J}_i} = \delta_{ij}.$$

Při $i = 1$ je tedy změna úhlové proměnné rovna 1, při $i \neq j$ nule. Jestliže je τ_i perioda jednoho cyklu q_i , potom

$$\Delta\varphi_i = 1 = \nu_i \tau_i,$$

odkud

$$\nu_i = \frac{1}{\tau_i},$$

takže ν_i je rovno frekvenci změny q_i .

Zavedení proměnných \mathcal{J}_i mělo i velký historický význam při vzniku kvantové mechaniky, zejména pro Bohruv a Sommerfeldův model atomu. Jeho základem je předpoklad, nazývaný někdy také *kvantovou hypotézou*, že pro stabilní dráhy elektronů v atomu musí integrál

$$\mathcal{J}_i = \oint p dp = nh, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

nabývat pouze určitých diskrétních hodnot odpovídajících násobkům *Planckovy konstanty* $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s. Zdůrazněme, že z pohledu kvantové fyziky jde o kvaziklasické přiblížení, neboť v případě elektronů v atomu nemá smysl hovořit o konkrétní trajektorii, ale pouze o pravděpodobnosti výskytu v okolí atomového jádra.

Aplikujme tyto úvahy na lineární harmonický oscilátor, pro který, jak víme z příkladů na s. 28 a 33, platí

$$\begin{aligned} x &= x \sin(\omega_0 t + \alpha_0), \\ dx &= \omega_0 x \cos(\omega_0 t + \alpha_0) dt = \omega_0 \sqrt{\frac{2E}{m\omega_0^2}} \cos(\omega_0 t + \alpha_0) dt = \sqrt{\frac{2E}{m}} \cos(\omega_0 t + \alpha_0) dt, \\ p &= m\omega_0 x_m \cos(\omega_0 t + \alpha_0) = \sqrt{2mE} \cos(\omega_0 t + \alpha_0), \\ \mathcal{J} &= \oint p dx = 2E \int_0^{1/\omega_0} \cos^2(\omega_0 t + \alpha_0) dt = \frac{2\pi E}{\omega_0}. \end{aligned}$$

Odtud vyjádříme E jako funkci \mathcal{J} ve tvaru

$$E = \frac{\omega_0}{2\pi} \mathcal{J}$$

a pro frekvenci pak vychází

$$\nu = \frac{\partial E}{\partial \mathcal{J}} = \frac{\omega_0}{2\pi}.$$

Kvaziklasický Bohruv předpoklad pak vede ke kvantování energie LHO

$$E_n = \mathcal{J}\nu = nh\nu, \quad n = 1, 2, \dots$$

Energie LHO může nabývat pouze určitých hodnot (násobků $h\nu$) a podle výsledku příkladu na s. 28 jsou ve fázovém prostoru povoleny pouze některé fázové trajektorie (ve tvaru elipsy). Dodejme, že Bohrova teorie sehrála významnou roli v popisu spekter atomů (viz část 2.1.2).

Kapitola 2

Základy kvantové mechaniky

2.1 Stručný historický přehled

Kvantovou mechaniku lze definovat jako vědu o pohybu mikročástic (elementárních částic, atomů, molekul, atomových jader) a o jejich vzájemných interakcích. K jejímu vzniku vedly objevy v oblasti spektroskopie a atomové fyziky, které nebylo možné vysvětlit pomocí představ klasické fyziky.

Koncem 19. století nastalo období vysokého rozvoje klasické mechaniky a teorie elektromagnetického pole. Pomocí klasické mechaniky byly objasněny zákony pohybu nebeských těles, na jejím základě se rozvíjela kinetická teorie plynů. Vlnová teorie světla objasnila interferenční a difrakční jevy a pozdější Maxwellova teorie elektromagnetického pole položila základy jednoty mezi optickými a elektromagnetickými jevy. Jenže později se ukázalo, že aplikace klasické teorie k objasnění jevů a procesů v mikrosvětě vede k nesprávným výsledkům a některé z těchto jevů jsou tímto způsobem vůbec neobjasnitelné. Tak například klasická elektrodynamika dává nesprávné výsledky při popisu spektrální hustoty záření černého tělesa, nedokáže vysvětlit čárové spektrum atomů, nedokáže vysvětlit fotoefekt, Comptonův efekt, tedy jevy, u kterých se uplatňuje korpuskulární podstata světla. Problémy také nastávaly při pokusech o vysvětlení procesů záření atomů při použití Rutherfordova planetárního modelu, protože v souladu s klasickou mechanikou by takové atomy musely být nestabilní.

Krise klasické fyziky tak musela zákonitě vést k revizi klasických představ, které se ukázaly jako nepoužitelné pro popis mikrosystémů a mikroprocesů. Ukázalo se, že mikročástice mají zcela nové vlastnosti – např. vlnové. V souvislosti s touto skutečností vlastně vzniklo zcela nové chápání pojmu mikročástice. Kvantová mechanika stav pohybuující se mikročástice v určitém čase již nepopisuje souřadnicemi a její rychlostí (či impulsem), ale vlnovou funkcí nebo maticí hustoty. Musely být také nově postulovány principy atomismu, na základě kterého jsou elementární částice, ze kterých se skládá látka, charakterizovány nejen diskrétními hodnotami klidové hmotnosti nebo náboje, ale mohou se také nacházet ve stavech, charakterizovaných diskrétními kvantovanými hodnotami energie a jiných fyzikálních veličin.

Dospělo se k závěru, že všechny atomární jevy je možné objasnit pouze na základě nových myšlenek a nové teorie. Touto teorií je právě kvantová mechanik, jejíž vznik se datuje do 20. let minulého století. Její vznik předcházely některé zjednodušené, méně přesné kvantové teorie, jako kvantová teorie světla nebo Bohrova teorie stavby atomů. Zpočátku se dále vyvíjely dvě varianty kvantové teorie – Heisenbergova maticová mechanika a Schrödingerova vlnová mechanika. Jenže ukázalo se, že obě teorie jsou pouze různé formy jedné a téže mechaniky, které stejné úlohy řešily v různých reprezentacích, což můžeme chápat jako použití různých mechanických veličin v roli nezávislých proměnných – argumentů vlnové funkce.

Zpočátku se rozvíjela nerelativistická kvantová mechanika, tedy kvantová mechanika mikročástic, které se pohybují relativně malými rychlostmi ve srovnání s rychlostí světla. Teprve následně (od 30. let minulého století) se rozvíjela relativistická kvantová mechanika pro popis mikročástic, které se pohybují libovolnou rychlostí. Relativistická kvantová mechanika, za jejíž zakladatele jsou považováni Dirac a Fock, pak hraje hlavní roli ve vysvětlení těch atomárních jevů, ve kterých se výrazně projeví relativistické efekty. Avšak nejjemnější detaily takových efektů nebo např. vzá-

jenné transformace elementárních částic je nutné studovat na základě kvantové elektrodynamiky a kvantové teorie pole, které se dále vyvíjely z relativistické kvantové mechaniky od počátku 40. let minulého století.

Cílem následujícího textu je pouze úvod do kvantové teorie. Pozornost bude věnována především nerelativistické kvantové mechanice a pouze základním problémům této teorie. Bude snaha o co nejjednodušší vysvětlení pojmů a řešených problémů. Rovněž použitý matematický aparát bude v maximální míře zjednodušen. Základem matematického aparátu kvantové mechaniky je teorie Hilbertových prostorů. Nedílnou součástí je teorie reprezentací. Pro náš úvodní pohled a popis se pokusíme některé problémy pouze nastínit, předpokládáme, že základní fyzikální principy kvantové mechaniky je možno vysvětlit i tímto zjednodušeným způsobem.

2.1.1 Stará kvantová teorie světla

Základy této teorie byly položeny Maxem Planckem, který se pokusil teoreticky odvodit matematický tvar zákona záření černého tělesa. Spektrální hustota intenzity vyzařování černého tělesa $E(\omega, T)$ o teplotě T již byla známa na základě experimentů, avšak teoreticky se ji nedařilo odvodit. Wien se pokusil vztah pro $E(\omega, T)$ odvodit na základě klasické statistiky. Jeho zákon se ale ukázal jako platný pouze pro ultrafialovou a viditelnou oblast spektra za nízkých teplot. Rayleigh a Jeans se pokusili vztah pro $E(\omega, T)$ odvodit pomocí Maxwellových rovnic a kanonické rozdělovací funkce. Jejich výsledek se ale ukázal jako platný pouze pro dlouhovlnnou oblast spektra.

Správný tvar zákona pro spektrální hustotu intenzity vyzařování odvodil až Max Planck ve tvaru¹

$$E(\omega, T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2c^3 \left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)}, \quad (2.1)$$

kde k je Boltzmannova konstanta ($k = 1,380\,32 \cdot 10^{-23} \text{ J}\cdot\text{K}^{-1}$) a \hbar je Planckova konstanta h dělená hodnotou 2π ; $\hbar = h/(2\pi) = 1,054 \cdot 10^{-34} \text{ J}\cdot\text{s}$.

Planck nejprve odvodil svůj zákon čistě matematicky na základě znalosti předchozích zákonů Wiena a Rayleigha a Jeanse (viz část 5.1.3). Ale později (v roce 1900) jej odvodil také fyzikálně, ale za cenu nových předpokladů, cizích klasické fyzice. Planck předpokládal, že zdroji záření jsou harmonické oscilátory, které se nachází pouze v diskrétních energetických stavech a emitují záření při přechodu ze stavu s vyšší do stavu s nižší energií. Přitom energie oscilátorů v těchto diskrétních stavech je vždy násobkem hodnoty $E = \hbar\omega$, která se nazývá kvantem energie.

Planckova hypotéza byla dále zobecněna Albertem Einsteinem. Ukázalo se, že je možné objasnit celou řadu dosud nevysvětlitelných jevů, pokud budeme toto kvantum považovat za částici (foton) s energií $E = \hbar\omega$. Protože pro vztah mezi hmotností a energií platí Einsteinova rovnice $E = mc^2$, musí být foton charakterizován hmotností $m = \hbar\omega/c^2$. Ovšem potom musí mít foton také impuls o velikosti $p = mc = \hbar\omega/c = \hbar k$, kde k je velikost vlnového vektoru, orientovaného ve směru šíření světla. Je tedy zřejmé, že mezi energií fotonu a velikostí jeho impulsu platí vztah

$$E = cp. \quad (2.2)$$

Vztahy

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (2.3)$$

jsou vlastně matematickým vyjádřením korpuskulárně vlnového dualismu záření.

Ze vztahu pro energii relativistické částice s klidovou hmotností m_0 , tedy ze vztahu $E = c\sqrt{p^2 + m_0^2c^2}$ dále vyplývá, že klidová hmotnost fotonu je nulová.

¹Planckovu zákonu z hlediska statistické fyziky se věnujeme v části 5.1.

Díky uvedeným předpokladům pak mohly být studovány interakce světla (fotonů) s mikročásticemi jako srážky mezi klasickými bodovými částicemi. Použijeme-li vztahy pro zákony zachování energie a impulsu

$$\hbar\omega + E = \hbar\omega' + E', \quad (2.4)$$

$$\hbar\mathbf{k} + \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}' + \mathbf{p}', \quad (2.5)$$

kde E a E' jsou počáteční a konečná energie mikročástice, \mathbf{p} a \mathbf{p}' její počáteční a konečný impuls a konečně $\hbar\mathbf{k}$, $\hbar\mathbf{k}'$ a $\hbar\omega$, $\hbar\omega'$ jsou počáteční a konečné impulsy a energie fotonu, můžeme relativně jednoduše objasnit např. fotoefekt (fotoelektrický jev) nebo Comptonův jev.

V případě fotoefektu je dopadající foton absorbován, platí tedy $\omega' = 0$. Zákon zachování energie má tedy tvar

$$\hbar\omega + E = E'. \quad (2.6)$$

Jestliže χ je hodnota výstupní práce, pak energii elektronu uvnitř kovu můžeme označit jako $-\chi$ a dostaneme známý *Einsteinův vzorec pro fotoefekt*

$$\hbar\omega - \chi = \frac{1}{2}m_0v^2, \quad (2.7)$$

kde $\frac{1}{2}m_0v^2$ je kinetická energie elektronu (omezili jsme se na nerelativistický případ).

Poslední vztah je zajímavý tím, že je možné s jeho pomocí určit experimentálně hodnotu konstanty \hbar . Předpokládejme, že elektron je možné zabrzdit elektromagnetickým polem s potenciálem φ , tedy že platí

$$\frac{m_0v^2}{2} = e\varphi. \quad (2.8)$$

Potom s pomocí vztahu (2.7) dostaneme

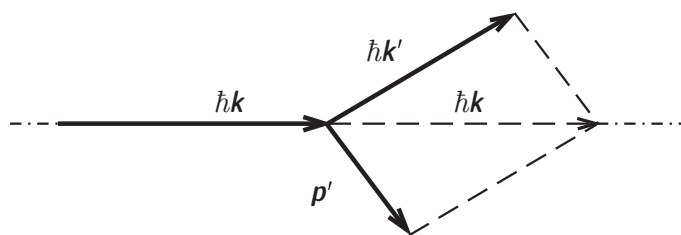
$$\varphi = \frac{\hbar\omega}{e} - \frac{\chi}{e}. \quad (2.9)$$

Z výsledků experimentu jsme schopni získat závislost $\varphi = f(\omega)$ a s pomocí (2.9) určit hodnotu \hbar .

Jak již bylo uvedeno, s pomocí zákonů zachování (2.4) a (2.5) je také možné objasnit *Comptonův efekt*, tedy rozptyl fotonů na elektronech atomu. Zaveďme následující zjednodušení: Zanedbáme energii vazby E_v elektronů v atomu (tedy považujeme je za volné a klidové), což je plně přípustné pro elektrony vnějších slupek atomů, a předpokládejme dopad Röntgenova záření, tedy splnění vztahu $\hbar\omega \gg E_v$. Protože elektrony po interakci s fotony Röntgenova záření dosahují vysokých rychlostí, musíme zákony zachování energie a impulsu (pro případ $\mathbf{p} = 0$) psát v relativistické formě

$$\hbar\omega + m_0c^2 = \hbar\omega' + \frac{m_0c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (2.10)$$

$$\hbar\mathbf{k} = \hbar\mathbf{k}' + \frac{m_0v}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}. \quad (2.11)$$



Obr. 2.1: K řešení Comptonova efektu

Směry šíření dopadajícího a rozptýleného fotonu spolu svírají úhel ϑ – viz. obr. 2.1. Ze zákonů zachování (2.10) a (2.11) s použitím $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = kk' \cos \vartheta$ lze odvodit vztah

$$2\hbar \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = m_0 c^2 \left(\frac{1}{\omega'} - \frac{1}{\omega} \right) \quad (2.12)$$

a protože $\frac{c}{\omega} = \frac{\lambda}{2\pi}$, lze pro změnu vlnové délky $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ v závislosti na úhlu rozptylu ϑ finálně odvodit vztah

$$\Delta\lambda = \frac{4\pi\hbar}{m_0 c} \sin^2 \frac{\vartheta}{2}. \quad (2.13)$$

Je zřejmé, že pokud úhel rozptylu je nulový, pak se vlnová délka rozptýleného světla nemění. Maximální změna vlnové délky rozptýleného světla nastává v případě $\vartheta = \pi$.

2.1.2 Bohrova teorie atomů

Klasická elektrodynamika není schopna vysvětlit čárové spektrum atomů. V roce 1885 Balmer odvodil pouze empirickou formuli popisující vlnové délky spektrálních čar atomu vodíku ve tvaru

$$\frac{1}{\lambda_{mn}} = R_\infty Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right), \quad (2.14)$$

kde m, n jsou libovolná celá čísla, R_∞ je Rydbergova konstanta a Z je pořadové číslo prvku (pro vodík $Z = 1$).

Dalším nedostatkem tehdejších teorií byla skutečnost, že nebyly schopny objasnit stabilitu zářícího atomu. Rutherfordův planetární model nevyhovoval – předpokládal, že zdrojem záření jsou zrychleně pohybuující se elektrony. Přitom jejich energie ale klesá, což znamená, že by nakonec musely spadnout do jádra.

Teprve v roce 1913 Niels Bohr teoreticky zdůvodnil formuli (2.14) a podal vysvětlení stability atomů, ovšem za cenu dalších hypotéz. Základem jeho teorie jsou následující postuláty:

1. Atom existuje dlouhodobě pouze ve stacionárních stavech s danými diskrétními hodnotami energií. V těchto stavech nezáří.
2. Absorpce a emise záření atomem vzniká při jeho přechodu z jednoho stacionárního stavu do druhého. Frekvence emitovaného nebo absorbovaného světla atomem při těchto přechodech je dána vztahem

$$\omega_{mn} = \frac{E_m - E_n}{\hbar}, \quad (2.15)$$

který vlastně můžeme chápat jako vyjádření zákona zachování energie.

Bohr aplikoval tyto postuláty na atom vodíku a vodíku podobné ionty a zavedl tzv. kvantovací podmínku. Pokud vyjdeme z nejjednoduššího předpokladu, že se elektrony v atomu pohybují po kruhových drahách, pak Bohrova kvantovací podmínka říká, že

$$m_0 v r = n\hbar, \quad (2.16)$$

kde $m_0 v r$ je orbitální moment hybnosti elektronu, $n = 1, 2, 3, \dots$

Uveďme pouze pro úplnost, že Bohrova teorie byla dále rozvíjena. Wilson a Sommerfeld nezávisle na sobě zobecnili Bohrovu kvantovací podmínku pro pohyb elektronů po eliptických drahách a pro periodický pohyb v systémech s libovolným počtem stupňů volnosti. Zobecněná kvantovací podmínka se pak uvádí ve tvaru

$$\int p_i dq_i = 2\pi n_i \hbar, \quad (2.17)$$

kde p_i je zobecněný impuls korespondující se zobecněnou souřadnicí q_i , počet hodnot indexu i je roven počtu stupňů volnosti a n_i jsou celá čísla, nazývaná kvantovými čísly. Je zřejmé, že (2.17) přechází na (2.16) v případě rovnoměrného pohybu částice po kružnici.

Bohrův důkaz správnosti formule (2.14) je potom relativně jednoduchý. Celková energie elektronu v poli nepohybujícího se jádra je v atomu vodíku a ve vodíku podobných iontech

$$E = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{m_0 v^2}{2}. \quad (2.18)$$

Z druhého Newtonova zákona vyplývá, že

$$\frac{m_0 v^2}{r} = \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r^2}, \quad (2.19)$$

kde v^2/r je dostředivé zrychlení a $Ze^2/(4\pi\epsilon_0 r^2)$ je coulombovská síla.

Dosadíme-li (2.19) do (2.18), dostaneme pro energii elektronu

$$E = -\frac{Ze^2}{8\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.20)$$

Chybí tedy vypočítat pouze poloměr kruhové dráhy r . Ten lze vypočítat opět ze druhého Newtonova zákona (2.19) a z kvadrátu Bohrovy kvantovací podmínky (2.16) ve tvaru

$$r_n = \frac{4\pi\epsilon_0 n^2 \hbar^2}{m_0 Z e^2}. \quad (2.21)$$

Pokud se omezíme na atom vodíku ($Z = 1$) a na $n = 1$, dostaneme

$$r_1 = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_0 e^2} = a. \quad (2.22)$$

Veličina a je známa jako *atomová délková jednotka* (poloměr první bohrovské orbity v atomu vodíku). Její hodnota je $a = 0,529 \cdot 10^{-10}$ m.

Energii elektronu na n -té orbitě získáme dosazením (2.22) do (2.20)

$$E_n = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} = -\frac{Z^2 m_0 e^4}{8\epsilon_0^2 \hbar^2 n^2} \quad (2.23)$$

a po dosazení do (2.15) dostaneme vztah

$$\omega_{mn} = \frac{m_0 e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^3} Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right); \quad f_{mn} = \frac{c}{\lambda_{mn}} = \frac{\omega_{mn}}{2\pi} = \frac{m_0 e^4}{8\epsilon_0 c \hbar^3} Z^2 \left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right). \quad (2.24)$$

Protože $\omega = 2\pi c/\lambda$, je zřejmé, že vztah (2.24) je totožný s empirickým vzorcem (2.14), kde *Rydbergova konstanta* je dána vztahem

$$R_\infty = \frac{m_0 e^4}{8\epsilon_0 c \hbar^3} = 1,097\,37 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}. \quad (2.25)$$

Z této hodnoty pak snadno určíme ionizační energii atomu vodíku, položíme-li $n = 1$ a $m \rightarrow \infty$, bude $E_\infty = hcR_\infty = 13,6$ eV.

Bohrova teorie sehrála významnou roli v rozvoji kvantové teorie atomů. Plně se potvrdila např. diskretnost energetických stavů. Na druhé straně je však možno nalézt celou řadu nedostatků. Není schopna popsat atom s větším počtem elektronů. Nedokáže vysvětlit série spektrálních čar atomu vodíku. V souladu s dnešními poznatky nesprávně popisuje orbitální magnetické momenty elektronů, což dále souvisí se skutečností, že Bohrova teorie přiřazuje elektronu dráhu, která je podle současné kvantové mechaniky neurčitelná. Bohrova teorie je vlastně poloklasická. Zavádí kvantové představy, ale vztah (2.14) resp. (2.24) odvozuje s využitím klasické mechaniky.

2.2 De Broglieho vlny, pojem vlnové funkce

2.2.1 De Broglieho vlny

V roce 1924 Louis de Broglie vyslovil hypotézu, že korpuskulárně vlnový dualismus se neprojevuje jen u fotonů (elektromagnetického záření), ale že je obecnou vnitřní vlastností mikročástic – elektronů, protonů, atomů, molekul, že je tedy obecnou vlastností hmoty. Proto předpokládal, že každé pohybující se částici (volné částici) je možné přiřadit monochromatickou vlnu

$$\psi = \psi_0 e^{-i(\omega t - \mathbf{k} \cdot \mathbf{r})}, \quad (2.26)$$

přičemž se stále předpokládá platnost vztahů $E = \hbar\omega$ a $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$ pro korpuskulárně vlnový dualismus. Potom ale můžeme (2.26) přepsat do tvaru

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p} \cdot \mathbf{r})}. \quad (2.27)$$

Taková vlna se nazývá *de Broglieho vlnou*. Určeme vlnovou délku de Broglieho vlny

$$\lambda_B = \frac{2\pi}{k} = \frac{2\pi\hbar}{p}. \quad (2.28)$$

Pro částice s nerelativistickou rychlostí – např. pro elektron – vychází λ_B v řádu několika ångströmů.

Zůstává ale problém fyzikální interpretace de Broglieho vln. Fázová rychlost de Broglieho vln je dána obvyklým vztahem $u = \frac{\omega}{k}$. Disperze vln je popsána závislostí fázové rychlosti na vlnové délce v látce. V případě de Broglieho vln dostaneme pro nerelativistickou částici vztah

$$\omega = \frac{E}{\hbar} = \frac{p^2}{2m_0\hbar} = \frac{\hbar k^2}{2m_0} \quad \text{a tedy} \quad \omega \sim k^2. \quad (2.29)$$

Potom ale

$$u = \frac{\hbar k}{2m_0} \quad \text{a odtud} \quad u \sim \frac{1}{\lambda}, \quad (2.30)$$

z čehož vyplývá, že de Broglieho vlny vykazují disperzní vlastnosti i ve vakuu.

Dále je možno dokázat, že fázová rychlost de Broglieho vln není totožná s rychlostí pohybující se částice. Dokažme to na případě rychle se pohybující částice

$$u = \frac{\omega}{k} = \frac{E}{p} = \frac{c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}}{p} > c; \quad (2.31)$$

tedy bylo dokázáno, že fázová rychlost de Broglieho vln je obecně vyšší, než rychlost světla a tedy určitě vyšší, než rychlost v pohybující se částice. Zůstává tedy problém, jak interpretovat de Broglieho vlnu. De Broglieho vlna je rovinná monochromatická vlna s konstantní amplitudou, definovaná v celém prostoru. Pohybující se částice je ale lokalizovaná v určité oblasti prostoru. Byla proto snaha těsněji svázat částici s de Broglieho vlnou. Jednou z možností, jak tuto vazbu zajistit, bylo použití klubka de Broglieho vln s cílem, aby grupová rychlost klubka byla totožná s rychlostí částice.

Uvažujme pro jednoduchost částici, která se pohybuje v kladném směru osy x . V analogii s optikou bude klubko popsáno rovnicí

$$\psi(x, t) = \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} A(k) e^{-i[\omega(k)t - kx]} dk, \quad (2.32)$$

kde $2\Delta k$ je šířka klubka. Funkce $A(k)$ a $\omega(k)$ můžeme rozložit do Taylorovy řady v bodě $k = k_0$

$$\begin{aligned} A(k) &= A(k_0) + \frac{dA(k)}{dk} \Big|_{k=k_0} (k - k_0) + \dots, \\ \omega(k) &= \omega_{k_0} + \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} (k - k_0) + \frac{1}{2!} \frac{d^2\omega}{dk^2} \Big|_{k=k_0} (k - k_0)^2 + \dots, \end{aligned} \quad (2.33)$$

přičemž se omezíme na první člen řady v rozvoji $A(k)$ a na první dva členy řady v rozvoji $\omega(k)$. Potom

$$\psi(x, t) = A(k_0) \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{-i[\omega_0 t + \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} (k - k_0)t - k_0 x - (k - k_0)x]} dk, \quad (2.34)$$

což můžeme upravit na tvar

$$\psi(x, t) = A(k_0) \left\{ \int_{k_0 - \Delta k}^{k_0 + \Delta k} e^{-i[\frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} t - x](k - k_0)} dk \right\} e^{-i(\omega_0 t - k_0 x)}, \quad (2.35)$$

kde výraz ve složené závorce popisuje amplitudu a následný výraz fázi vlnového klubka. Parametry amplitudy klubka je možné vždy nastavit tak, aby šířka hlavního maxima odpovídala rozměrům popisované částice. Dalším rozбором lze dojít k závěru, že šířka hlavního maxima kvadrátu amplitudy A je přibližně

$$\Delta x = \frac{2\pi}{\Delta k}. \quad (2.36)$$

Je zřejmé, že pro fázovou rychlost vlnového klubka platí stejné závěry, jako pro fázovou rychlost jedné de Broglieho vlny – obecně je vyšší než rychlost světla a nemůže být tedy přiřazena rychlosti částice. Grupová rychlost je podle (2.35) popsána vztahem

$$u_g = \frac{d\omega}{dk} \Big|_{k=k_0} = \frac{dE}{dp} \Big|_{p=p_0} \quad (2.37)$$

a pro obecný případ relativistické částice s energií $E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$ dostáváme závěr

$$u_g = \frac{dE}{dp} \Big|_{p=p_0} = \frac{cp_0}{\sqrt{p_0^2 + m_0^2 c^2}} < c. \quad (2.38)$$

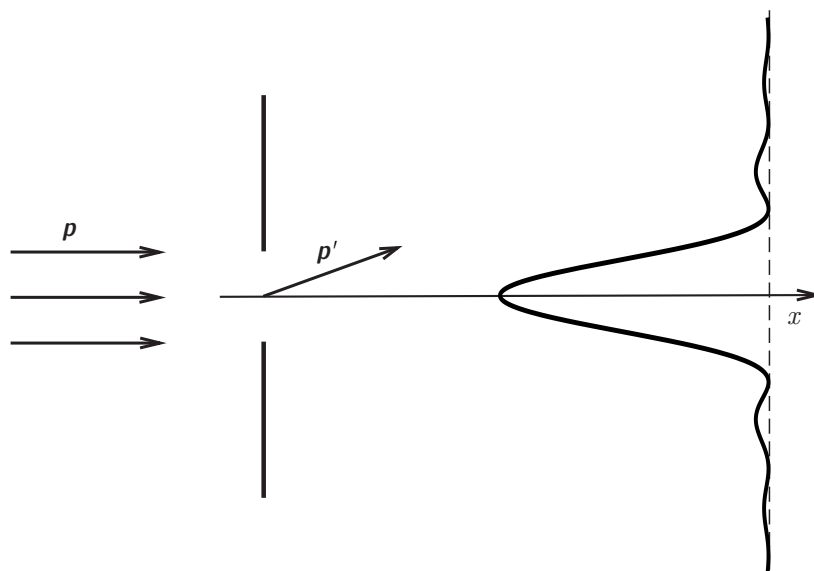
Tedy grupová rychlost je nižší, než rychlost světla, a mohla by tedy být ztotožněna s rychlostí částice. Zdálo by se tedy, že je plně možné ztotožnit klubko de Broglieho vln s pohybující se mikročásticí jak co do rozměru tak i co do rychlosti pohybu. Ukazuje se však, že v uvedeném rozboru byla opomenuta jedna skutečnost. Uvedené závěry platí pouze v takovém časovém intervalu, kdy je možné zanedbat třetí člen v rozvoji $\omega(k)$ oproti druhému členu tohoto rozvoje. Protože se jedná o součást argumentu harmonických funkcí, je zřejmé, že třetí člen rozvoje bude zanedbatelný po takovém časovém intervalu Δt , popsaném podmínkou

$$\Delta t \frac{1}{2} \frac{d^2\omega}{dk^2} \Big|_{k=k_0} (\Delta k)^2 \simeq \pi, \quad (2.39)$$

odkud při použití vztahů (2.36) a (2.29) vyplývá

$$\Delta t \simeq \frac{m_0 (\Delta x)^2}{2\pi\hbar}. \quad (2.40)$$

Pro makroskopickou částicí s hmotností $m_0 = 10^{-3}$ kg a rozměrem $\Delta x = 10^{-3}$ m vychází doba rozplynutí klubka $\Delta t \simeq 10^{24}$ s, což znamená, že vlnové klubko je stabilní. Ovšem pro elektron s $m_0 = 9 \cdot 10^{-31}$ kg při $\Delta x = 10^{-15}$ m dostaneme $\Delta t \simeq 10^{-27}$ s, tzn., že se vlnové klubko rozplyne prakticky okamžitě. Ztotožnit elektron s klubkem de Broglieho vln je tedy nemožné.



Obr. 2.2: K difrakci elektronů na štěrbině

2.2.2 Pravděpodobnostní interpretace de Broglieho vln

Zůstává tedy stále otázka, jak interpretovat de Broglieho vlny a tím dokázat pravdivost jeho hypotézy, že mikročástice mají vlnové vlastnosti. Kdyby např. elektrony měly vlnové vlastnosti, musely by vykazovat difrakční jevy. Uvažujme proto teoreticky difrakci elektronů se stejným impulsem na štěrbině. Tyto elektrony budou před dopadem na štěrbinu popsány stejnými de Broglieho vlnami s frekvencí $\omega = E/\hbar$ a vlnovým vektorem $\mathbf{k} = \mathbf{p}/\hbar$. Pokud se dopadající elektrony šíří ve směru osy x , budou popsány de Broglieho vlnou

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - px)}. \quad (2.41)$$

Předpokládejme přitom, že šířka štěrbiny je srovnatelná s vlnovou délkou λ_B de Broglieho vlny (2.41) a že tato vlnová délka ani absolutní hodnoty jí korespondujících impulsů se při difrakci nemění.

Jev difrakce elektronů na štěrbině se v souladu s Huygensovým-Fresnelovým principem musí projevit vznikem sekundárních de Broglieho vln a jejich následnou interferencí. Na stínítku za štěrbinou pak dostaneme známý difrakční obrazec (obr. 2.2). Předpokládejme, že při dostatečném počtu elektronů bychom takový obrazec (rozložení intenzity) mohli zachytit na fotografické desce, která tak zachytí rozložení míst dopadu elektronů na stínítko.

Každému elektronu, který prošel štěrbinou, můžeme přiřadit de Broglieho vlnu typu

$$\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t) = c(\mathbf{p}') e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{p}' \cdot \mathbf{r})}, \quad (2.42)$$

kde $|\mathbf{p}'| = p$ a $c(\mathbf{p}')$ je amplituda této vlny. Je zřejmé, že $|\psi_{\mathbf{p}'}(\mathbf{r}, t)|^2 = |c(\mathbf{p}')|^2$ popisuje intenzitu těchto de Broglieho vln, která ale bude různá v různých směrech (orientacích impulsů elektronů) a tedy i různých bodech na stínítku. V místech dopadu většího počtu elektronů budou vlny intenzivnější a naopak.

Připomeňme, že vlnové vlastnosti má každý elektron. Stejný difrakční obrazec dostaneme jak v případě, kdy najednou propustíme štěrbinou svazek o velkém počtu elektronů, tak i v případě, že stejný počet elektronů budeme štěrbinou propouštět po jednom.

Na základě uvedené úvahy byla Maxem Bornem v roce 1926 předložena fyzikální interpretace de Broglieho vln, nazývaná statistická nebo pravděpodobnostní. Říká, že intenzita de Broglieho vln v daný čas v libovolném bodě prostoru je úměrná pravděpodobnosti nalezení částice v tomto bodě.

Důležité je, že všechny tyto závěry byly formulovány pouze na základě teoretických úvah. Experimentální důkaz existence de Broglieho vln byl proveden až v roce 1927 Davissonem a Germerem pokusy s difrakcí elektronů na krystalové mříži niklu.

2.2.3 Vlnová funkce a její fyzikální význam

Lze říci, že základem pojmu vlnové funkce je již uvedená Bornova interpretace de Broglieho vln. Maxem Bornem vlastně začíná axiomatická výstavba současné kvantové mechaniky. Aparát kvantové mechaniky je tedy postulovaný a má pravděpodobnostní charakter.

Kvantová teorie nemůže pracovat s pojmem trajektorie. V případě popsání difrakce elektronů nemůžeme říci, jak se ten který elektron bude pohybovat v prostoru za štěrbinou. Stav kvantové částice proto není zadán její polohou a impulsem (vektory v trojrozměrném prostoru), ale komplexní funkcí reálné proměnné – tzv. vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$. De Broglieho vlny byly zavedeny pro volné částice. Bude-li např. částice v elektromagnetickém poli, nebude moci být popsána jednoduchou de Broglieho vlnou. Proto funkci, která popisuje vlnové vlastnosti obecné částice, nazýváme vlnovou funkcí.

Význam vlnové funkce je tedy stejný jako význam de Broglieho vln – kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce $\psi(\mathbf{r}, t)$ udává hustotu pravděpodobnosti $\rho(\mathbf{r}, t)$ výskytu částice v místě, jehož poloha je dána vektorem \mathbf{r}

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 = \psi(\mathbf{r}, t)^* \psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.43)$$

Potom samozřejmě bude platit, že výraz

$$dP = \psi(\mathbf{r}, t)^* \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} \quad (2.44)$$

bude mít význam pravděpodobnosti, že se částice v okamžiku t nachází v objemovém elementu, který je zde označen jako $d^3\mathbf{r}$.

Obdobně výraz

$$P(V) = \int_V |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} \quad (2.45)$$

má význam pravděpodobnosti, že částici v okamžiku t nalezneme v objemu V .

Pokud ale objem V ztotožníme s celým prostorem, pak je pravděpodobnost $P(V)$ rovna jistotě, tedy

$$P = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = 1, \quad (2.46)$$

což znamená, že vlnové funkce musí být kvadraticky integrovatelné.

Jestliže platí, že

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi'(\mathbf{r}, t)|^2 d^3\mathbf{r} = N < \infty, \quad (2.47)$$

pak normovaná vlnová funkce, která má všechny uvedené významy, je rovna

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\sqrt{N}} \psi'(\mathbf{r}, t), \quad (2.48)$$

kde $\frac{1}{\sqrt{N}}$ je normovací konstanta. V praktických výpočtech dostáváme funkce $\psi'(\mathbf{r}, t)$ a musíme je normovat následně.

Někdy se ale můžeme setkat se systémy, jejichž vlnové funkce nejsou kvadraticky integrabilní. Pokud tyto funkce mají fyzikální realitu, pak při jejich normování nevystačíme s běžným matematickým aparátem, ale je nutné použít zobecněné funkce – konkrétně Diracovu δ -funkci.

Uvažujme dále následující situaci. Kolimovaný svazek elektronů dopadá na difrakční mřížku (kryštal), a po odrazu elektrony dopadají na 3 Geiger-Müllerovy čítače, které zachytí všechny částice. Částice, které dopadají na různé detektory, můžeme charakterizovat různými vlnovými funkcemi (kvantovými stavy). Částice, které dopadají na první detektor, popíšeme stavem ψ_1 , částice dopadající na druhý detektor stavem ψ_2 atd. Jenže dopadající částice je charakterizována jedním stavem ψ a zatím nevíme, na který detektor dopadne. Jestliže ψ_1 , ψ_2 , ψ_3 jsou vlnové funkce, popisující možné stavy daného systému, pak musí platit, že

$$\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2 + c_3\psi_3 \quad (2.49)$$

nebo obecně

$$\psi = \sum_{i=1}^{\infty} c_i\psi_i, \quad (2.50)$$

kde bylo zohledněno, že abychom prakticky zachytili všechny částice, museli bychom mít nekonečně mnoho detektorů. Obecně komplexní koeficienty c_i mají význam amplitud pravděpodobnosti.

Pro vlnové funkce (kvantové stavy daného systému) tedy platí princip superpozice.

Z hlediska matematiky to znamená, že vlnové funkce (obecně komplexní) vytváří lineární prostor s nekonečnou dimenzí kvadraticky integrabilních funkcí – tzv. L_2 . Tento prostor je jednou z realizací abstraktního *Hilbertova prostoru*.

Zavedme některé potřebné pojmy. Mějme dvě vlnové funkce $\psi(\mathbf{r}, t)$, $\chi(\mathbf{r}, t)$. Pak skalární součin těchto funkcí v prostoru L_2 je dán vztahem

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t)\chi(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r} = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | \chi(\mathbf{r}, t) \rangle. \quad (2.51)$$

Na pravé straně tohoto výrazu je uvedeno symbolické označení tohoto skalárního součinu s pomocí tzv. Diracovy symboliky.

Norma vlnové funkce (kvadraticky integrabilní) je pak

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t)\psi(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r} = \langle \psi(\mathbf{r}, t) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle = 1. \quad (2.52)$$

Báze Hilbertova prostoru je ortogonální. Jsou-li dvě vlnové funkce $\psi_i(\mathbf{r}, t)$, $\psi_j(\mathbf{r}, t)$ bázovými vektory prostoru L_2 , platí pro jejich skalární součin vztah

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_i^*(\mathbf{r}, t)\psi_j(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r} = \langle \psi_i(\mathbf{r}, t) | \psi_j(\mathbf{r}, t) \rangle = \delta_{ij}, \quad (2.53)$$

kde δ_{ij} je Kroneckerovo δ .

2.3 Reprezentace fyzikálních veličin

2.3.1 Operátory

Stav systému je popsán vlnovou funkcí v prostoru L_2 . Fyzikální veličiny jsou pak popsány operátory, které v tomto prostoru působí. Vlastnosti těchto operátorů jsou opět postulovány. Operátory se

označují stříškou nad symbolem veličiny – např. \hat{T} bude používáno pro označení operátoru kinetické energie.

Uveďme přehled těchto postulátů.

1. postulát: Každé fyzikální veličině je přiřazen lineární hermitovský operátor.

Protože Hilbertův prostor je lineární, musí být lineární i operátory. *Lineární operátory* splňují relace

$$\begin{aligned}\hat{L}[\psi_1(\mathbf{r}, t) + \psi_2(\mathbf{r}, t)] &= \hat{L}\psi_1(\mathbf{r}, t) + \hat{L}\psi_2(\mathbf{r}, t), \\ \hat{L}[c\psi(\mathbf{r}, t)] &= c\hat{L}\psi(\mathbf{r}, t).\end{aligned}\tag{2.54}$$

Uvažujme dále dva operátory \hat{B} a \hat{B}^+ . Jestliže tyto operátory splňují relaci

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{B} \chi d^3\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{B}^+)^* \psi^* \chi d^3\mathbf{r}\tag{2.55}$$

nebo lépe v Diracově symbolice

$$\langle \psi | \hat{B} \chi \rangle = \langle \hat{B}^+ \psi | \chi \rangle,\tag{2.56}$$

kde ψ a χ jsou vlnové funkce, pak říkáme, že operátory \hat{B} a \hat{B}^+ jsou operátory sdružené.

Pokud ale existuje operátor \hat{L} , pro který platí $\hat{L}^+ = \hat{L}$, tedy splňuje relaci

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{L} \chi d^3\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{\infty} \hat{L}^* \psi^* \chi d^3\mathbf{r},\tag{2.57}$$

neboli

$$\langle \psi | \hat{L} \chi \rangle = \langle \hat{L} \psi | \chi \rangle,\tag{2.58}$$

pak o takovém operátoru říkáme, že je *samosdružený* neboli *hermitovský*.

Proč mohou být fyzikálními veličinám přiřazeny pouze hermitovské operátory, zdůvodníme v následujícím postulátu.

2. postulát: V prostoru L_2 působí operátor fyzikální veličiny \hat{F} na funkce ψ tohoto prostoru podle vzoru

$$\hat{F}\psi = f\psi.\tag{2.59}$$

Rovnice (2.59) je operátorová rovnice. Funkce ψ jsou vlastní funkce a čísla f jsou vlastní hodnoty operátoru \hat{F} .

Množiny vlastních funkcí a vlastních hodnot vytvářejí spektra. Tato spektra mohou být diskrétní nebo spojitá (případně smíšená). K rozlišení spekter používáme dolního indexu. Pro diskrétní spektra budou vlastní funkce a vlastní hodnoty označeny indexem, který reprezentuje soubor všech kvantových čísel. Operátorová rovnice tedy bude zapisována ve tvaru

$$\hat{F}\psi_n = f_n\psi_n.\tag{2.60}$$

V případě spojitých spekter mohou být vlastní hodnoty označeny bez indexu a vlastní funkce jsou označeny indexem vlastní hodnoty

$$\hat{F}\psi_f = f\psi_f,\tag{2.61}$$

protože v případě spojitého spektra závisí vlastní funkce na vlastní hodnotě jako na parametru.

Pokud jedné vlastní hodnotě odpovídá jedna vlastní funkce, mluvíme o nedegenerovaných stavech. Pokud jedné vlastní hodnotě odpovídá větší počet vlastních funkcí, mluvíme o degenerovaných stavech. Operátorovou rovnicí v tomto případě zapisujeme ve tvaru

$$\hat{F}\psi_{nk} = f_n\psi_{nk}, \quad (2.62)$$

kde k je index degenerace n -tého kvantového stavu systému. Pokud $1 \leq k \leq s$, říkáme, že n -tý kvantový stav je s -násobně degenerovaný.

Lze jednoduše dokázat, že vlastní funkce lineárního hermitovského operátoru tvoří úplný systém a jsou vzájemně ortogonální. Pokud budou zároveň normované, budou tvořit ortonormovaný systém.

Uvažujme lineární hermitovský operátor \hat{L} , splňující operátorovou rovnici s libovolným spektrem, vlastní funkce tohoto operátoru tvoří uvedený ortonormovaný systém. Zapišeme operátorovou rovnici a rovnici s ní komplexně sdruženou

$$\begin{aligned} \hat{L}\psi &= l\psi, \\ (\hat{L}\psi)^* &= l^*\psi^*. \end{aligned} \quad (2.63)$$

První rovnici vynásobme funkcí ψ^* zleva, druhou rovnici funkcí ψ zprava a obě rovnice integrujme přes celý prostor

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{L}\psi d^3\mathbf{r} &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* l\psi d^3\mathbf{r}, \\ \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{L}\psi)^* \psi d^3\mathbf{r} &= \int_{-\infty}^{\infty} l^* \psi^* \psi d^3\mathbf{r}. \end{aligned} \quad (2.64)$$

Následně obě rovnice odečtěme. Přitom zohledněme, že vlastní hodnoty operátorů jsou čísla a mohou být tedy zapsána před integrál

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{L}\psi d^3\mathbf{r} - \int_{-\infty}^{\infty} (\hat{L}\psi)^* \psi d^3\mathbf{r} = (l - l^*) \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi d^3\mathbf{r}. \quad (2.65)$$

Operátor \hat{L} je hermitovský, tedy levá strana poslední rovnice je rovna nule. Vlastní funkce tohoto operátoru jsou normované, tedy platí, že $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi d^3\mathbf{r} = 1$. Odtud vyplývá, že $l - l^* = 0$ a tedy $l = l^*$. Z toho je zřejmé, že vlastní hodnoty hermitovských operátorů jsou reálná čísla.

Tím je zdůvodněno, proč musí být fyzikální veličině přiřazen hermitovský operátor. Vlastní hodnoty operátoru jsou přímo hodnoty fyzikální veličiny a ty mohou být jediné reálné.

Podívejme se ještě trochu blíže na problém normování vlastních funkcí operátorů se spojitém spektrem. Vlastní funkce těchto operátorů sice stále tvoří ortogonální systém, platí tedy

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^* \psi_{l'} d^3\mathbf{r} = 0, \quad (2.66)$$

ale nejsou kvadraticky integrabilní, protože

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_l|^2 d^3\mathbf{r} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^* \psi_l d^3\mathbf{r} = \infty. \quad (2.67)$$

Takové funkce pak nemohou být normovány na jedničku, ale normují se na zobecněnou Diracovu δ -funkci podle vzoru

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_l^* \psi_{l'} d^3 \mathbf{r} = \delta(l - l'). \quad (2.68)$$

Příkladem takových funkcí jsou vlastní funkce x -ové složky operátoru impulsu, které mají tvar

$$\psi_{p_x} = A e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}, \quad (2.69)$$

kde A je normovací konstanta, jejíž hodnotu máme určit.

Vyjděme z vyjádření Diracovy δ -funkce pomocí Fourierovy transformace

$$\delta(k) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx \quad \Longrightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty} e^{ikx} dx = 2\pi\delta(k). \quad (2.70)$$

Potom platí

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_{p_x} \psi_{p'_x}^* dx = A^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{\frac{i}{\hbar} (p_x - p'_x) x} dx = A^2 2\pi\delta \left[\frac{1}{\hbar} (p_x - p'_x) \right]. \quad (2.71)$$

Použijeme-li další postulované vlastnosti Diracovy δ -funkce

$$\delta(ax) = \frac{1}{|a|} \delta(x), \quad (2.72)$$

kde a je konstanta, pak

$$2\pi\delta \left[\frac{1}{\hbar} (p_x - p'_x) \right] = 2\pi\hbar\delta(p_x - p'_x) \quad (2.73)$$

a tedy $A = 1/\sqrt{2\pi\hbar}$. Normované vlastní funkce x -ové složky operátoru impulsu pak jsou

$$\psi_{p_x} = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} e^{\frac{i}{\hbar} p_x x}. \quad (2.74)$$

3. postulát: Je-li systém v okamžiku měření popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$, pak výsledkem opakovaných měření fyzikální veličiny F je její střední hodnota ve stavu $\psi(\mathbf{r}, t)$, daná vztahem

$$\langle f \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{F} \psi(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r}}{\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t) \psi(\mathbf{r}, t) d^3 \mathbf{r}} = \frac{\langle \psi(\mathbf{r}, t) | \hat{F} | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle}{\langle \psi(\mathbf{r}) | \psi(\mathbf{r}, t) \rangle}. \quad (2.75)$$

Ve vztahu (2.75) je \hat{F} operátor fyzikální veličiny F . V tomto vztahu je dále rozšířeno používání Diracovy symboliky. Samotnými úhlovými závorkami budeme dále označovat střední hodnoty veličin. Střední hodnotu veličiny můžeme zapsat jako střední hodnotu jejího operátoru, tedy $\langle f \rangle = \langle \hat{F} \rangle$.

Samozřejmě pokud pracujeme s normovanými vlnovými funkcemi, pak výrazy ve jmenovatelích ve vzorcí (2.75) jsou rovny jedné. Potom lze psát zkráceně

$$\langle f \rangle = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle. \quad (2.76)$$

Tento postulát může být podložen následující úvahou: Při měření fyzikální veličiny můžeme obdržet jen takové hodnoty, které jsou vlastními hodnotami operátoru fyzikální veličiny. To ovšem znamená, že při měření fyzikální veličiny je systém převeden z původního stavu, popsaného vlnovou funkcí ψ do nějakého stavu ψ'_i , který je vlastní funkcí operátoru měřené fyzikální veličiny. Protože vlastní funkce operátoru fyzikální veličiny tvoří úplný soubor, může být vlnová funkce ψ do nich rozložena – vlastní funkce operátoru fyzikální veličiny jsou v tomto rozvoji násobeny amplitudami pravděpodobnosti

$$\psi = \sum_i c_i \psi'_i = \sum_i \langle \psi'_i | \psi \rangle \psi'_i. \quad (2.77)$$

Kvadráty absolutních hodnot amplitud pravděpodobnosti c_i mají význam pravděpodobnosti toho, že při měření fyzikální veličiny nalezneme hodnotu f_i , příslušející vlastní funkci ψ'_i operátoru měřené veličiny \hat{F} . Tyto pravděpodobnosti tedy jsou

$$P_i = |c_i|^2 = |\langle \psi'_i | \psi \rangle|^2. \quad (2.78)$$

Při opakovaném měření fyzikální veličiny ale může být systém opět s určitou pravděpodobností převeden do jiného stavu ψ'_j , který je také vlastní funkcí operátoru měřené veličiny atd. Je tedy zřejmé, že opakovaným měřením nemůžeme dosáhnout "ostré" hodnoty fyzikální veličiny, ale můžeme definovat pouze střední hodnotu.

Je tedy zřejmé, že proces měření fyzikální veličiny znamená podstatný zásah do kvantového systému. Výjimkou je pouze situace, kdy vlnová funkce splývá s vlastní funkcí operátoru fyzikální veličiny. Pouze v tomto případě má fyzikální veličina F ve stavu ψ ostrou hodnotu.

V souvislosti s kolísáním naměřených hodnot fyzikální veličiny kolem střední hodnoty můžeme zavést další operátory a střední hodnoty jimi popsaných veličin. Můžeme zavést operátor odchylky $\Delta\hat{F}$ naměřené hodnoty od střední hodnoty vztahem

$$\Delta\hat{F} = \hat{F} - \langle f \rangle \quad (2.79)$$

a jako kvadrát tohoto operátoru je definován operátor disperze

$$\hat{D}_F = \left(\hat{F} - \langle f \rangle \right)^2. \quad (2.80)$$

Potom hodnota střední kvantově mechanické disperze je střední hodnota tohoto operátoru

$$\langle D_F \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(\mathbf{r}, t) \left(\hat{F} - \langle f \rangle \right)^2 \psi(\mathbf{r}, t) d^3\mathbf{r} = \langle \psi | \left(\hat{F} - \langle f \rangle \right)^2 | \psi \rangle. \quad (2.81)$$

Úpravou tohoto vztahu můžeme obdržet jiný způsob pro výpočet střední hodnoty disperze. Rozložíme předchozí výraz na dílčí integrály. V Diracově symbolice dostaneme

$$\langle D_F \rangle = \langle \psi | \left(\hat{F} \right)^2 | \psi \rangle - 2\langle f \rangle \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle + \langle f \rangle^2 \langle \psi | \psi \rangle = \langle f^2 \rangle - \langle f \rangle^2, \quad (2.82)$$

tedy $\langle D_F \rangle$ můžeme počítat jako střední hodnotu kvadrátu minus kvadrát střední hodnoty fyzikální veličiny.

2.3.2 Operátory základních fyzikálních veličin

Zpočátku byly operátory základních fyzikálních veličin také postulovány. Bylo postulováno, že každé kartézské souřadnici odpovídá operátor, definovaný jako násobení touto souřadnicí

$$\hat{x} = x, \quad \hat{y} = y, \quad \hat{z} = z. \quad (2.83)$$

Pak lze definovat operátor polohy jako násobení polohovým vektorem

$$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}. \quad (2.84)$$

Operátor impulsu byl definován tak, že jeho vlastní funkce jsou de Broglieho vlny. Uvažujme pro jednoduchost x -ovou složku impulsu. Pak existuje operátorová rovnice

$$\hat{p}_x \psi = p_x \psi, \quad (2.85)$$

kde

$$\psi = \psi_0 e^{-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)}. \quad (2.86)$$

Pak lze jednoduše dojít k závěru, že

$$\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}, \quad (2.87)$$

Analogické výrazy platí pro ostatní složky impulsu

$$\hat{p}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}, \quad \hat{p}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}. \quad (2.88)$$

Operátor impulsu je tedy definován vztahem

$$\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar \nabla, \quad (2.89)$$

kde

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}.$$

Ostatní operátory základních fyzikálních veličin byly odvozeny na základě dvou uvedených operátorů a následujícího předpokladu. Je-li fyzikální veličina v klasické fyzice popsána nějakou funkcí souřadnic a impulsů, pak její operátor získáme tak, že do klasického vztahu dosadíme za souřadnice a impulsy jejich operátory. Potom např. operátor potenciální energie, která je v klasické fyzice popsána funkcí souřadnic, bude přímo roven klasické funkci, protože operátor souřadnice je pouhé násobení souřadnicí

$$\hat{U}(x, y, z) = U(x, y, z). \quad (2.90)$$

Operátor kinetické energie pak bude

$$\hat{T} = \frac{(\hat{p})^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta. \quad (2.91)$$

Pak je ale možné na základě klasické Hamiltonovy funkce pro celkovou energii částice

$$E = \frac{p^2}{2m} + U \quad (2.92)$$

definovat operátor celkové energie jako prostý součet operátorů kinetické a potenciální energie

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \hat{U}(\mathbf{r}). \quad (2.93)$$

Tento operátor nazýváme *Hamiltonův operátor* neboli *hamiltonián* (můžeme jeho zavedení srovnat s definicí hamiltoniánu v klasické mechanice v části 1.4).

Na základě výše uvedené analogie můžeme definovat také operátor momentu hybnosti. Klasický výraz pro moment hybnosti je ²

$$\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}. \quad (2.94)$$

Operátor momentu hybnosti proto bude

$$\hat{\mathbf{L}} = \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla). \quad (2.95)$$

Složky tohoto operátoru tedy jsou

$$\begin{aligned} \hat{L}_x &= -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right), \\ \hat{L}_y &= -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right), \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (2.96)$$

Analogicky operátor čtverce momentu hybnosti rovněž vychází z klasického vztahu. Jestliže $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$, pak

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2. \quad (2.97)$$

Uveďme na závěr několik poznámek:

1. Každé fyzikální veličině klasické mechaniky je přiřazen lineární hermitovský operátor. Existují ale také operátory veličin, které nemají klasické analogy (např. spin).
2. Jak bude dále dokázáno, v kvantové fyzice je možno určit jen celkovou energii částice. Nelze oddělit kinetickou a potenciální energii (operátory \hat{T} a \hat{U} spolu nekomutují).
3. Všechny uvedené operátory platí v tzv. souřadnicové reprezentaci. Tyto operátory působí na vlnovou funkci jako na funkci souřadnic (kartézských, sférických atd.).
4. Operátory byly na tomto místě zavedeny na základě postulátů. Teorie reprezentací umožňuje přímé odvození tvaru operátorů.

2.3.3 Komutační vlastnosti operátorů. Relace neurčitosti

Z tvarů operátorů základních fyzikálních veličin je zřejmé, že při jejich aplikaci na vlnovou funkci obecně záleží na pořadí. Jsou-li \hat{P} , \hat{Q} operátory dvou fyzikálních veličin a $\psi = \psi(x)$ je vlnová funkce, platí obecně relace

$$\hat{P}\hat{Q}\psi \neq \hat{Q}\hat{P}\psi. \quad (2.98)$$

Příkladem mohou být operátory $\hat{x} = x$ a $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$. Platí totiž relace

$$\begin{aligned} \hat{x}\hat{p}_x\psi(x) &= -i\hbar x \frac{\partial\psi(x)}{\partial x}, \\ \hat{p}_x x\psi(x) &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [x\psi(x)] \end{aligned} \quad (2.99)$$

²Označení momentu hybnosti není ve fyzice ustálené. V první kapitole jsme užívali symbol b obvyklý v mechanice, aby nedošlo k záměně s Lagrangeovou funkcí. V této části užíváme označení L používané v řadě učebnic kvantové mechaniky.

a to očividně nejsou stejné výrazy.

Součin operátorů je tedy obecně nekomutativní. Ke studiu komutačních vlastností operátorů se zavádí *komutátor*, daný předpisem

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = \hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P}. \quad (2.100)$$

Operátory \hat{P} , \hat{Q} spolu komutují, pokud komutátor je roven nule, tedy $[\hat{P}, \hat{Q}] = 0$, a nekomutují, je-li $[\hat{P}, \hat{Q}] \neq 0$.

Komutátor je velice důležitý z praktického hlediska. Pomocí komutátorů se studují podmínky současné měřitelnosti různých fyzikálních veličin.

Lze jednoduše dokázat, že operátory \hat{P} a \hat{Q} dvou veličin spolu komutují, pokud mají společné spektrum vlastních funkcí, které označíme např. ψ_P (a naopak – mají-li dva operátory společné spektrum vlastních funkcí, pak spolu komutují). V případě společných vlastních funkcí platí operátorové rovnice

$$\hat{P}\psi_P = p\psi_P, \quad \hat{Q}\psi_P = q\psi_P. \quad (2.101)$$

Aplikujme na první rovnici zleva operátor \hat{Q} a na druhou rovnici zleva operátor \hat{P} . Dostaneme tedy rovnice

$$\hat{Q}\hat{P}\psi_P = p\hat{Q}\psi_P, \quad \hat{P}\hat{Q}\psi_P = q\hat{P}\psi_P. \quad (2.102)$$

Uplatníme-li v pravých stranách rovnic (2.102) rovnice (2.101) a následně odečteme první rovnici od druhé, dojdeme k závěru

$$(\hat{P}\hat{Q} - \hat{Q}\hat{P})\psi_P = (pq - qp)\psi_P \quad (2.103)$$

a protože kulatá závorka na pravé straně je rovna nule, musí být také rovna nule kulatá závorka na levé straně, což je ale komutátor operátorů \hat{P} a \hat{Q} .

Princip současného měření dvou fyzikálních veličin je potom jasný. Jak již bylo uvedeno, při měření fyzikální veličiny P přejde systém z původního stavu, který byl popsán vlnovou funkcí ψ do některého kvantového stavu ψ_P , který je vlastní funkcí operátoru \hat{P} měřené veličiny P . Stejně tak při měření veličiny Q přejde systém do kvantového stavu ψ_Q , který je vlastní funkcí operátoru \hat{Q} . Pokud platí, že $\psi_P \neq \psi_Q$, pak každou veličinu měříme v jiném kvantovém stavu systému. V tomto případě měření jedné veličiny ovlivní systém takovým způsobem, že hodnota druhé veličiny zůstává neurčitou.

Pokud naopak operátory \hat{P} , \hat{Q} dvou veličin spolu komutují a mají tedy společné spektrum vlastních funkcí, pak obě veličiny P a Q měříme ve stejném kvantovém stavu systému a současné měření je tedy možné.

Pokud ale dvě fyzikální veličiny nejsou současně měřitelné, pak míru neurčitosti při současném měření pomáhají určit tzv. relace neurčitosti.

Platí, že jestliže dva hermitovské operátory spolu nekomutují, pak se výsledek jejich komutátoru dá zapsat ve tvaru

$$[\hat{P}, \hat{Q}] = i\hat{R}, \quad (2.104)$$

tedy výsledek komutátoru lze zapsat tak, že je přes imaginární jednotku úměrný nějakému dalšímu operátoru \hat{R} .

Potom je možné dokázat, že pro součin středních hodnot kvantově mechanických disperzí veličin P a Q platí vztah

$$\langle D_P \rangle \langle D_Q \rangle \geq \frac{\langle R \rangle^2}{4}, \quad (2.105)$$

kde $\langle R \rangle$ je střední hodnota veličiny, jíž je přiřazen operátor \hat{R} .

Častěji se ale pracuje s odmocninou předchozího výrazu, tedy vlastně s odchylkami veličin od středních hodnot. Výraz (2.105) se pak převádí na používaný tvar

$$\Delta P \Delta Q \geq \frac{\langle R \rangle}{2}. \quad (2.106)$$

Relace typu (2.105) nebo (2.106) jsou známy jako *Heisenbergovy relace neurčitosti*.

Odvoďme si nejznámější relaci neurčitosti pro souřadnici x a korespondující impuls p_x . Komutátor operátorů počítáme pomocí jeho aplikace na nějakou funkci $\varphi(x)$

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] \varphi(x) = -i\hbar x \frac{\partial \varphi(x)}{\partial x} + i\hbar \frac{\partial}{\partial x} [x\varphi(x)] = i\hbar \varphi(x), \quad (2.107)$$

tedy

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \implies \hat{R} = \hbar. \quad (2.108)$$

Hledaná relace neurčitosti má tedy tvar

$$\langle D_x \rangle \langle D_{p_x} \rangle \geq \frac{\hbar^2}{4} \quad (2.109)$$

nebo v používanějším tvaru

$$\Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}. \quad (2.110)$$

Závěr této relace tedy je, že změříme-li např. přesně polohu mikročástice, pak její hybnost bude mít zcela neurčitou hodnotu.

V důsledku malé hodnoty \hbar se relace neurčitosti uplatňují jen v mikrosvětě. Při přechodu k makroskopickým tělesům se stávají zanedbatelnými.

2.4 Schrödingerova rovnice

2.4.1 Formulace Schrödingerovy rovnice

Schrödingerova rovnice je základní pohybovou rovnicí nerelativistické kvantové mechaniky. Pokud známe stav soustavy v čase t_0 , popsany vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t_0)$, pak Schrödingerova rovnice umožňuje jednoznačný výpočet stavu $\psi(\mathbf{r}, t)$ pro libovolné $t > t_0$. Je zřejmé, že role Schrödingerovy rovnice v kvantové mechanice je analogická roli Newtonových pohybových rovnic v klasické fyzice.

Schrödingerova rovnice je základním zákonem kvantové fyziky. Nelze ji tedy odvodit z klasické fyziky, musela být formulována intuitivně. Může být formulována základě následujících předpokladů:

- Musí pracovat s vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$ – jednoznačným popisem kvantově mechanického systému.
- Jako pohybová rovnice musí obsahovat časovou derivaci.
- Požaduje se, aby splňovala disperzní vztah (2.29) pro de Broglieho vlny.

Pokud vyjdeme z určité podobnosti s homogenní vlnovou rovnicí klasické fyziky a upravíme ji tak, aby splňovala uvedený disperzní vztah pro de Broglieho vlny, pak je možné typově vyjít z rovnice

$$\frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \gamma \Delta \psi(\mathbf{r}, t), \quad (2.111)$$

kde γ je konstanta, jejíž hodnotu je třeba nalézt. Dosadíme-li do této rovnice de Broglieho vlnu (2.26), vyjde nám, že $\gamma = \frac{i\hbar}{2m}$ a tedy

$$\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = i\frac{\hbar}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.112)$$

Potom ovšem stačí rovnici vynásobit $i\hbar$. Dostaneme

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.113)$$

a pokud se na poslední rovnici podíváme blíže, vidíme, že na pravé straně je na vlnovou funkci aplikován operátor kinetické energie \hat{T} (2.91). Poslední závěr byl ale získán pro de Broglieho vlny, které byly přiřazeny volným částicím, tedy částicím, které se nenacházely v žádném potenciálovém poli. V pohybové rovnici pro částici v potenciálovém poli musí být operátor kinetické energie \hat{T} nahrazen operátorem celkové energie, tedy hamiltoniánem \hat{H} (2.93). Potom rovnice (2.113) přechází na finální tvar

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.114)$$

nebo zkráceně

$$i\hbar\frac{\partial\psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{H}\psi(\mathbf{r}, t). \quad (2.115)$$

Protože tato rovnice popisuje časový vývoj kvantově mechanické soustavy, bývá označována jako *časová (nestacionární) Schrödingerova rovnice*.

2.4.2 Stacionární stavy

Ukazuje se, že v celé řadě případů je řešení časové Schrödingerovy rovnice (2.115) velmi složité, často dokonce nemožné. Řešení ale může být výrazně usnadněno, pokud hamiltonián nezávisí na čase. V tomto případě totiž můžeme řešení Schrödingerovy rovnice hledat ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \varphi(\mathbf{r})\chi(t). \quad (2.116)$$

Dosadíme-li toto předpokládané řešení do (2.115) a separujeme časové a prostorové proměnné, dostaneme rovnici

$$i\hbar\frac{1}{\chi(t)} \cdot \frac{d\chi(t)}{dt} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{\varphi(\mathbf{r})}\Delta\varphi(\mathbf{r}) + U(\mathbf{r}), \quad (2.117)$$

a protože na levé a pravé straně této rovnice jsou diferenciální výrazy v různých proměnných, musí být zároveň rovny společné konstantě, kterou označíme E . Odtud pro časovou funkci plyne rovnice

$$i\hbar\frac{d\chi(t)}{dt} = E\chi(t). \quad (2.118)$$

Tato rovnice neobsahuje žádné specifické informace o systému. Může být proto řešena obecně. Řešení má tvar

$$\chi(t) = \chi(0)e^{-\frac{i}{\hbar}Et}. \quad (2.119)$$

Rovnice pro prostorovou složku řešení může být po osamostatnění $\Delta\varphi(\mathbf{r})$ zapsána jako

$$\Delta\varphi(\mathbf{r}) + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(\mathbf{r})] \varphi(\mathbf{r}) = 0. \quad (2.120)$$

Této rovnici se říká *bezčasová* neboli *stacionární Schrödingerova rovnice*.

Vynásobme tuto rovnici výrazem $-\frac{\hbar^2}{2m}$. Pak ji můžeme přepsat do tvaru

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + U(\mathbf{r}) \right] \varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}), \quad (2.121)$$

neboli

$$\hat{H}\varphi(\mathbf{r}) = E\varphi(\mathbf{r}). \quad (2.122)$$

Stacionární (bezčasová) Schrödingerova rovnice je tedy operátorová rovnice pro operátor celkové energie – hamiltonián. Jeho vlastní hodnoty jsou možné energie systému (částice). Separační konstanta E má tedy význam energie systému a rovnice (2.120) nebo (2.122) určuje možné energetické hladiny systému. Protože vlastní funkce lineárního hermitovského operátoru tvoří úplný systém, má uvedená rovnice nekonečně mnoho řešení.

Partikulární řešení časové Schrödingerovy rovnice v případě diskrétního spektra hamiltoniánu je

$$\psi_n(\mathbf{r}, t) = \varphi_n(\mathbf{r})e^{-\frac{i}{\hbar}E_n t} \quad (2.123)$$

a nazýváme je stacionárním řešením Schrödingerovy rovnice. Někdy se ale jako stacionární řešení Schrödingerovy rovnice označují samotné funkce $\varphi(\mathbf{r})$. Toto používané označení vyplývá ze skutečnosti, že střední hodnoty fyzikálních veličin nezávislých na čase jsou ve stavu (2.123) rovněž stacionární (nezávislé na čase). Potom také pravděpodobnost, že při měření fyzikální veličiny F ve stavu (2.123) nalezneme hodnotu f_i příslušející vlastní funkci ψ'_i operátoru této veličiny \hat{F} je rovna

$$P_i(t) = |\langle \psi'_i | \psi_n(\mathbf{r}, t) \rangle|^2 = |\langle \psi'_i | \varphi_n(\mathbf{r}) \rangle|^2 = P_i(0) \quad (2.124)$$

a je tedy také nezávislá na čase.

2.4.3 Zákony zachování v kvantové mechanice

Součástí klasické Maxwellovy teorie elektromagnetického pole je zákon zachování náboje. Diferenciální forma tohoto zákona, nazývaná též *rovnice kontinuity*, je

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_e + \frac{\partial \rho_e}{\partial t} = 0, \quad (2.125)$$

kde ρ_e je objemová hustota elektrického náboje a \mathbf{j}_e je vektor plošné proudové hustoty. Dokážeme, že tento typ zákona má své místo i v kvantové mechanice.

Napišme časovou Schrödingerovu rovnici pro částici v potenciálovém poli

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, t) \quad (2.126)$$

a rovnici k ní komplexně sdruženou

$$-i\hbar \frac{\partial \psi^*(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \psi^*(\mathbf{r}, t) + U(\mathbf{r})\psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (2.127)$$

První rovnici vynásobme zleva komplexně sdruženou vlnovou funkcí $\psi^*(\mathbf{r}, t)$, druhou zleva vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$ a následně je odečtěme

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*), \quad (2.128)$$

kde pro zjednodušení zápisu byly vynechány argumenty vlnových funkcí.

Výraz na levé straně rovnice (2.128) obsahuje hustotu pravděpodobnosti, protože

$$i\hbar \left(\psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = i\hbar \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t}. \quad (2.129)$$

Pravou stranu rovnice (2.128) lze upravit následovně

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (\psi^* \Delta \psi - \psi \Delta \psi^*) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla \cdot (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*). \quad (2.130)$$

Pokud zavedeme vektor hustoty toku pravděpodobnosti $\mathbf{j}(\mathbf{r}, t)$ vztahem

$$\mathbf{j}(\mathbf{r}, t) = \frac{\hbar}{2im} (\psi^* \nabla \psi - \psi \nabla \psi^*), \quad (2.131)$$

pak rovnice (2.128) přechází na tvar

$$\nabla \cdot \mathbf{j}(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \rho(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0, \quad (2.132)$$

což je opravdu tvar rovnice kontinuity. V tomto případě ale má tato rovnice význam zákona zachování pravděpodobnosti.

Z uvedeného vyplývá několik závěrů. Jedním z historických předpokladů správnosti časové Schrödingerovy rovnice byl také požadavek, aby tato rovnice v limitním případě přecházela v některou z významných rovnic klasické fyziky. Ukazuje se, že touto významnou rovnicí je právě rovnice kontinuity.

Kromě toho není žádným překvapením, že rovnice kontinuity má své místo i v kvantové mechanice. I zde musí platit rovnice kontinuity pro zákon zachování náboje. Ovšem protože $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ znamená hustotu pravděpodobnosti výskytu, pak výraz

$$\rho(\mathbf{r}, t) = e|\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (2.133)$$

nazýváme hustotou náboje. Pak můžeme zpětně dovodit, že stejný typ zákona platí jak pro zachování náboje, tak i pro zachování pravděpodobnosti výskytu.

Stejným způsobem lze dokázat, že formu rovnice kontinuity mají i další zákony zachování, jako např. zákon zachování počtu částic a zákon zachování hmotnosti.

Doposud jsme uvažovali jednu částici. Uvažujme nyní existenci systému N částic, které se nachází ve stejném kvantovém stavu ψ . V tomto případě je v principu možné normovat vlnovou funkci na jedničku, ale na počet částic systému, tedy podle vzoru

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d^3 \mathbf{r} = N. \quad (2.134)$$

Pak je ale možné výraz $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ interpretovat jako počet částic, které se nachází v jednotkovém objemu v okolí daného bodu a je tedy zřejmé, že zákon zachování počtu částic má stejnou formu, jako zákon zachování pravděpodobnosti, tedy

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_N(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \rho_N(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0. \quad (2.135)$$

Hustota hmotnosti ρ_m musí být také úměrná pravděpodobnosti výskytu částice, konstantou úměrnosti je hmotnost částice m_0

$$\rho_m(\mathbf{r}, t) = m_0 \rho(\mathbf{r}, t) = m_0 |\psi(\mathbf{r}, t)|^2. \quad (2.136)$$

Jestliže hmotností částice vynásobíme i hustotu toku pravděpodobnosti (2.131), dostaneme hustotu toku hmotnosti $\mathbf{j}_m(\mathbf{r}, t)$. Zákon zachování hmotnosti tedy nabývá očekávané formy

$$\nabla \cdot \mathbf{j}_m(\mathbf{r}, t) + \frac{\partial \rho_m(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = 0. \quad (2.137)$$

2.5 Časová změna fyzikálních veličin

2.5.1 Operátor časové změny

Ve stacionárních stavech systému jsou střední hodnoty fyzikálních veličin nezávislých na čase konstantní. V nestacionárních stavech, které jsou řešením časové Schrödingerovy rovnice, se střední hodnoty fyzikálních veličin v čase mění.

Ovšem také existují veličiny, jejichž hodnoty se v čase nemění navzdory často komplikované časové závislosti vlnové funkce. Příkladem může být energie částice, která tak je, stejně jako v klasické fyzice v případě časově nezávislé Hamiltonovy funkce, integrálem pohybu. Abychom byli schopni určit, kdy je v kvantové fyzice fyzikální veličina integrálem pohybu, musíme obecně řešit problém její časové změny.

Nelze aplikovat časové derivace přímo na veličinu, protože veličiny nemají určitou hodnotu. Řešitelné jsou pouze střední hodnoty. Zkoumejme proto časovou změnu střední hodnoty $\langle f \rangle = \langle \hat{F} \rangle$ nějaké fyzikální veličiny F , popsané vztahem

$$\langle f \rangle = \langle \hat{F} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{F} \psi d^3 \mathbf{r} = \langle \psi | \hat{F} | \psi \rangle, \quad (2.138)$$

kde byly opět pro jednoduchost vynechány argumenty vlnových funkcí.

Pak úplná časová derivace této střední hodnoty bude

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \langle \hat{F} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \hat{F} \psi d^3 \mathbf{r} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} \psi d^3 \mathbf{r} + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{F} \frac{\partial \psi}{\partial t} d^3 \mathbf{r} \\ &= \left\langle \frac{\partial \psi}{\partial t} | \hat{F} | \psi \right\rangle + \langle \psi | \frac{\partial \hat{F}}{\partial t} | \psi \rangle + \langle \psi | \hat{F} | \frac{\partial \psi}{\partial t} \rangle. \end{aligned} \quad (2.139)$$

Z časové Schrödingerovy rovnice (2.115) ale vyplývá, že

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \psi, \quad \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = -\frac{1}{i\hbar} \hat{H}^* \psi^*. \quad (2.140)$$

Po dosazení (2.140) do (2.139) a s využitím hermiticity hamiltoniánu v prvním výrazu na pravé straně, tedy v Diracově symbolice po úpravě

$$-\frac{1}{i\hbar} \langle \hat{H} \psi | \hat{F} | \psi \rangle = -\frac{1}{i\hbar} \langle \psi | \hat{H} \hat{F} | \psi \rangle \quad (2.141)$$

můžeme výsledek zapsat ve tvaru

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{F}\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left[\frac{1}{i\hbar} (\hat{F}\hat{H} - \hat{H}\hat{F}) + \frac{\partial\hat{F}}{\partial t} \right] \psi d^3\mathbf{r} \quad (2.142)$$

nebo v Diracově symbolice

$$\frac{d}{dt}\langle\hat{F}\rangle = \langle\psi|\frac{1}{i\hbar} (\hat{F}\hat{H} - \hat{H}\hat{F}) + \frac{\partial\hat{F}}{\partial t}|\psi\rangle. \quad (2.143)$$

Výraz v kulaté závorce v předchozích dvou vztazích je komutátor operátorů \hat{F} a \hat{H} . Výraz v hranaté závorce ve vztahu (2.142) (a stejný výraz ve (2.143)) pak musí mít význam operátoru časové změny – kvantově mechanické derivace operátoru

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}] + \frac{\partial\hat{F}}{\partial t} \quad (2.144)$$

a je zřejmé, že pro jeho střední hodnotu platí vztah

$$\left\langle \frac{d\hat{F}}{dt} \right\rangle = \frac{d}{dt}\langle\hat{F}\rangle. \quad (2.145)$$

Výraz $\frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}]$ se v analogii s klasickou mechanikou nazývá *kvantové Poissonovy závorky* (srovnejte s jejich zavedením v klasické mechanice v části 1.5).

Pokud je kvantová veličina integrálem pohybu (a platí tedy pro ni zákon zachování v čase), pak musí platit

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = 0. \quad (2.146)$$

Zároveň pokud operátor \hat{F} fyzikální veličiny F nezávisí na čase, platí pro jeho časovou změnu vztah

$$\frac{d\hat{F}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{F}, \hat{H}]. \quad (2.147)$$

Vidíme, že v tomto případě je daná veličina F integrálem pohybu, pokud její operátor \hat{F} komutuje s hamiltoniánem

$$[\hat{F}, \hat{H}] = 0. \quad (2.148)$$

Jako příklad můžeme uvést výpočet operátoru časové změny souřadnice volné částice, která se pohybuje ve směru souřadné osy x . Zde platí, že $\hat{x} = x$ a $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2}$. Komutátor opět počítáme pomocí jeho aplikace na nějakou funkci

$$[\hat{x}, \hat{H}] \varphi(x) = \left[x, -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{\partial^2}{\partial x^2} \right] \varphi(x) = \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{\partial\varphi(x)}{\partial x}; \quad (2.149)$$

odtud

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \neq 0. \quad (2.150)$$

Podle očekávání tedy není souřadnice volné částice integrálem pohybu. Kdybychom stejný postup zopakovali pro časovou derivaci x -ové složky operátoru impulsu $\hat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$, došli bychom k závěru

$$[\hat{p}_x, \hat{H}] = 0, \quad (2.151)$$

protože opravdu impuls volné částice integrálem pohybu je a platí pro něj zákon zachování v čase.

Operátor časové změny má některé další vlastnosti. Vztah (2.145) je možné zobecnit i pro vyšší derivace, jak je možno dokázat opakovaným použitím vztahů (2.144) a (2.145). Tak např. pro druhou derivaci střední hodnoty fyzikální veličiny platí

$$\frac{d^2}{dt^2}\langle\hat{F}\rangle = \left\langle\frac{d^2\hat{F}}{dt^2}\right\rangle, \quad (2.152)$$

kde druhou derivaci operátoru $\frac{d^2\hat{F}}{dt^2}$ získáme opětovným použitím vztahu (2.144) na první derivaci $\frac{d\hat{F}}{dt}$.

Pro časovou derivaci součinu operátorů platí obvyklý vztah diferenciálního počtu

$$\frac{d}{dt}(\hat{F}\hat{G}) = \frac{d\hat{F}}{dt}\hat{G} + \hat{F}\frac{d\hat{G}}{dt}. \quad (2.153)$$

2.5.2 Ehrenfestovy teorémy

Je známo, že v klasické fyzice je možné získat nové fyzikální veličiny pomocí první a druhé časové derivace veličiny základní. Pokud bude např. základní veličinou souřadnice x , je možné tímto způsobem získat jako nové veličiny rychlost $\frac{dx}{dt}$ a zrychlení $\frac{d^2x}{dt^2}$. V kvantové mechanice jsou fyzikální veličiny reprezentovány operátory. Vzniká otázka, jaké operátory odpovídají těmto novým veličinám – časovým derivacím operátorů.

Ukažme řešení tohoto problému na příkladě souřadnice x a x -ové složky impulsu. Operátory těchto veličin jsou nezávislé na čase, proto pro jejich časové derivace platí vztahy

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{x}, \hat{H}], \quad (2.154)$$

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{p}_x, \hat{H}], \quad (2.155)$$

kde $\hat{x} = x$, $\hat{p}_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$ a $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x, y, z)$.

Pro komutátory lze získat výsledky

$$[\hat{x}, \hat{H}] = \frac{\hbar^2}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial x}, \quad [\hat{p}_x, \hat{H}] = -i\hbar \frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x}. \quad (2.156)$$

Dosadíme-li (2.156) do (2.154) a (2.155) a víme, že $-\frac{\partial U(x, y, z)}{\partial x}$ má význam x -ové složky působící síly F_x , můžeme pro časové derivace operátorů psát

$$\frac{d\hat{x}}{dt} = -\frac{i\hbar}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial x} = \frac{\hat{p}_x}{m} \quad (2.157)$$

a

$$\frac{d\hat{p}_x}{dt} = -\frac{\partial U}{\partial x} = \hat{F}_x. \quad (2.158)$$

Pak ale můžeme přejít ke středním hodnotám veličin, popsanych předchozími operátorovými výrazy. Dostaneme výsledky

$$\frac{d}{dt}\langle x \rangle = \frac{\langle p_x \rangle}{m} \quad (2.159)$$

a

$$\frac{d}{dt}\langle p_x \rangle = \langle F_x \rangle. \quad (2.160)$$

Je tedy zřejmé, že vztahy mezi rychlostí a impulsem a druhý zákon Newtonův klasické mechaniky jsou v kvantové mechanice splněny pouze z hlediska středních hodnot fyzikálních veličin.

Vztahy (2.159) a (2.160) se nazývají *Ehrenfestovy teoremy*.

2.6 Řešení jednoduchých systémů

Budeme se zabývat řešením stacionární Schrödingerovy rovnice. Vycházíme ze skutečnosti, že ve všech možných stavech fyzikální soustavy hraje významnou roli stavový operátor energie. Budeme řešit jednoduché jednočásticové systémy, které jsou buď modely reálných praktických úloh (potenciálové jámy, bariéry, valy) nebo jsou samy o sobě velmi důležité (lineární harmonický oscilátor, atom vodíku). Jedná se o ilustrativní formulaci úloh s náznakem jejich řešení.

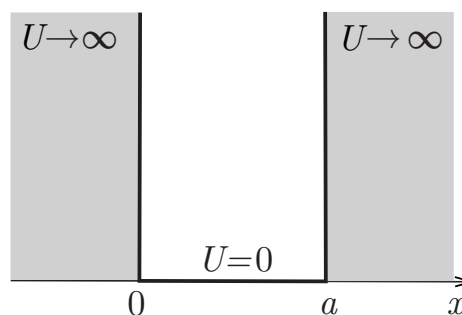
2.6.1 Jednorozměrná nekonečně hluboká potenciálová jáma

Jedná se o řešení modelového případu částice v potenciálovém poli, jako je např. elektron ve vzorku kovu nebo valenční elektron v atomu. Přitom nekonečně hlubokou jámu chápeme jako přiblížení pro energie stacionárních stavů částice, nacházejících se blízko dna potenciálové jámy.

Jak se dále ukáže, i řešení stacionární Schrödingerovy rovnice je velmi složité pro obecné potenciálové průběhy. Proto řešíme modelové průběhy, kde se reálný průběh potenciální energie nahrazuje průběhem pravoúhlým.

Předpokládejme, že máme potenciálovou jámu nekonečné hloubky o šířce a orientované ve směru osy x (obr. 2.3). Jednorozměrná stacionární Schrödingerova rovnice je

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U)\varphi(x) = 0. \quad (2.161)$$



Obr. 2.3: Jednorozměrná, nekonečně hluboká potenciálová jáma

Nás ale zajímají pouze hodnoty souřadnice x v intervalu $x \in \langle 0, a \rangle$, protože částice z nekonečně hluboké jámy nemůže uniknout. Proto podle obr. 2.3 $U = 0$ a řešíme tedy rovnici

$$\frac{d^2\varphi(x)}{dx^2} + k^2\varphi(x) = 0, \quad \text{kde } k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E. \quad (2.162)$$

Protože, jak bylo uvedeno, částice nemůže z jámy uniknout, řešíme rovnici (2.162) za okrajových podmínek

$$\varphi(0) = 0, \quad \varphi(a) = 0. \quad (2.163)$$

Řešení rovnice (2.162) hledáme ve formě superpozice harmonických funkcí, tedy ve tvaru

$$\varphi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx), \quad (2.164)$$

kde ale z první okrajové podmínky vyplývá, že $B = 0$. Podobně druhá okrajová podmínka vede k závěru

$$\varphi(a) = A \sin(ka) = 0 \quad \implies \quad ka = n\pi; \quad n = 1, 2, 3 \dots \quad (2.165)$$

Dosadíme-li do posledního výrazu za k z (2.162), získáme vztah pro hodnoty energie částice

$$\frac{2mE}{\hbar^2} a^2 = n^2 \pi^2 \quad \Rightarrow \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2ma^2}. \quad (2.166)$$

Vidíme, že spektrum energií je diskrétní a s rostoucím n se zřehňuje. Energie základního stavu je nenulová. Korespondující vlnové funkce s využitím $k = \pi n/a$ (2.165) jsou

$$\varphi_n(x) = A \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right), \quad (2.167)$$

kde hodnotu konstanty A určíme z normovací podmínky

$$A^2 \int_0^a \sin^2\left(\frac{\pi n}{a} x\right) dx = 1, \quad (2.168)$$

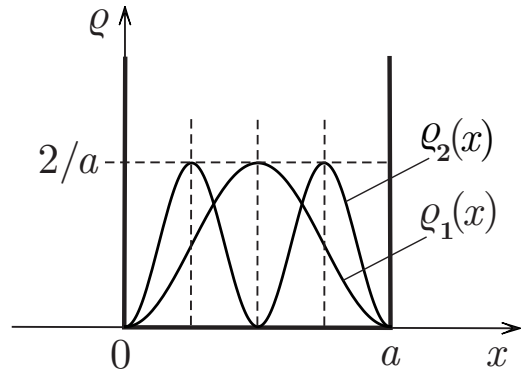
která dává výsledek $A = \sqrt{\frac{2}{a}}$. Normované vlnové funkce tedy mají tvar

$$\varphi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{\pi n}{a} x\right). \quad (2.169)$$

Je tedy zřejmé, že spektrum hamiltoniánu je diskrétní a nedegenerované. Dále můžeme studovat hustotu pravděpodobnosti výskytu částice s určitou energií v určitém místě potenciálové jámy, tedy výrazy

$$\rho_n(x) = |\varphi_n(x)|^2 = \frac{2}{a} \sin^2\left(\frac{\pi n}{a} x\right). \quad (2.170)$$

Výsledky pro první dva kvantové stavy částice v jámě jsou znázorněny na obr. 2.4. Je-li částice v jámě ve stavu s nejnižší energií, pak ji s největší pravděpodobností nalezneme uprostřed jámy. Částici s energií E_2 nalezneme nejčastěji v místech se souřadnicí $x = \frac{a}{4}$ a $x = \frac{3}{4}a$ atd. Vidíme, že i z tohoto pohledu se kvantová částice chová naprosto odlišně, než částice klasická. Korespondenci s klasickou částicí můžeme nalézt pro stavy s vysokou energií, tedy pro $n \gg 1$. V tomto případě je možno považovat hustotu pravděpodobnosti výskytu částice prakticky za konstantní v celé šířce potenciálové jámy.



Obr. 2.4: Hustota pravděpodobnosti výskytu částice v jámě

2.6.2 Jednorozměrná potenciálová jáma konečné hloubky

Uvažujme symetrickou potenciálovou jámu konečné hloubky. Tato úloha má ve srovnání s úlohou předchozí přece jen blíže k realitě, oblast aplikace řešení je samozřejmě stejná. Obecný potenciálový průběh reálné jámy je ale z důvodu možnosti řešení Schrödingerovy rovnice opět nahrazen průběhem pravoúhlým. Situace je znázorněna na obr. 2.5.

Předpokládejme tedy průběh potenciální energie

$$\begin{aligned} U &= 0 \quad \text{pro } x \in \langle 0, a \rangle, \\ U &= U_0 \quad \text{pro } x \in (-\infty, 0) \text{ a } (a, \infty). \end{aligned} \quad (2.171)$$

Pro pravoúhlý průběh potenciální energie můžeme řešení rozdělit do tří oblastí – oblasti vlevo od jámy, oblasti jámy a oblasti vpravo od jámy, přičemž na rozhraní oblastí se předpokládá spojitost vlnových funkcí a jejich prvních derivací.

Schrödingerovy rovnice v těchto oblastech jsou

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\varphi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_3(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\varphi_3(x) &= 0. \end{aligned} \quad (2.172)$$

Zavedeme-li kladné konstanty k a k' vztahy

$$k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(U_0 - E) \quad \text{a} \quad k'^2 = \frac{2m}{\hbar^2}E, \quad (2.173)$$

můžeme rovnice (2.172) přepsat jako

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} - k^2\varphi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + k'^2\varphi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_3(x)}{dx^2} - k^2\varphi_3(x) &= 0 \end{aligned} \quad (2.174)$$

a jejich řešení jsou

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1e^{kx} + B_1e^{-kx}, \\ \varphi_2(x) &= A_2e^{ik'x} + B_2e^{-ik'x}, \\ \varphi_3(x) &= A_3e^{kx} + B_3e^{-kx}. \end{aligned} \quad (2.175)$$

Vlnové funkce musí být kvadraticky integrabilní. Této podmínce nevyhovuje člen s konstantou B_1 ve vlnové funkci $\varphi_1(x)$ a člen s konstantou A_3 ve vlnové funkci $\varphi_3(x)$. Tyto členy tedy nemohou být součástí řešení. Řešení (2.175) s touto úpravou dosadíme do podmínek spojitosti vlnových funkcí a jejich prvních derivací na rozhraní oblastí, tedy do podmínek

$$\varphi_1(0) = \varphi_2(0), \quad \varphi_2(a) = \varphi_3(a), \quad (2.176)$$

$$\frac{d\varphi_1(x)}{dx}\Big|_{x=0} = \frac{d\varphi_2(x)}{dx}\Big|_{x=0}, \quad \frac{d\varphi_2(x)}{dx}\Big|_{x=a} = \frac{d\varphi_3(x)}{dx}\Big|_{x=a}. \quad (2.177)$$

Dostaneme soustavu lineárních homogenních rovnic pro výpočet koeficientů A_1 , A_2 , B_2 a B_3 a je známo, že tato soustava má nenulové řešení pouze v případě, že je nulový determinant z koeficientů, tedy v tomto případě

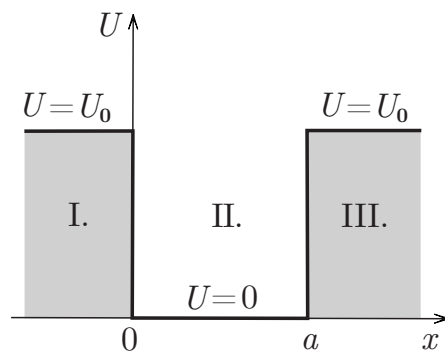
$$\begin{vmatrix} 1 & -1 & -1 & 0 \\ k & -ik' & ik' & 0 \\ 0 & e^{ik'a} & e^{-ik'a} & -e^{-ka} \\ 0 & ik'e^{ik'a} & -ik'e^{-ik'a} & ke^{-ka} \end{vmatrix} = 0. \quad (2.178)$$

Vypočtený výraz je možné upravit na rovnici

$$\operatorname{tg}(k'a) = -\frac{2kk'}{k^2 - k'^2}, \quad (2.179)$$

který je možné po zavedení nové proměnné x a konstanty C vztahy

$$x = \frac{E}{U_0} \quad \text{a} \quad C = \frac{a}{\hbar} \sqrt{2mU_0} \quad (2.180)$$



Obr. 2.5: Jednorozměrná potenciálová jáma konečné hloubky

převést na rovnici

$$\operatorname{tg}(C\sqrt{x}) = -2\frac{\sqrt{x(1-x)}}{1-2x}. \quad (2.181)$$

Je zřejmé, že řešením této transcendentní rovnice budou diskrétní hodnoty proměnné x , tedy i v potenciální jámě konečné hloubky je spektrum energií diskrétní.

Podrobnějším rozbohem lze dokázat, že vždy existuje alespoň jedno řešení, tedy alespoň jedna energetická hladina. Konstantu C lze chápat jako parametr jámy, který určuje, kolik diskrétních energetických hladin v jámě existuje. Uveďme příklady:

$C = 1$	1 hladina energie
$C = 1,5$	1 hladina energie
$C = 2$	2 hladiny
$C = 3$	2 hladiny
$C = 4$	3 hladiny
$C = 15$	9 hladin

Podívejme se ještě na limitní případy řešení. Předpokládejme, že energie částice je značně menší než hloubka jámy, tedy $E \ll U_0$. Pak ale platí $k \gg k'$ a z rovnice (2.179) dostaneme závěr

$$\operatorname{tg}(k'a) = \operatorname{tg}\left(\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a\right) = 0, \quad (2.182)$$

což bude splněno, pokud

$$\frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}a = n\pi; \quad n = 1, 2, 3, \dots \text{ a tedy } E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2 n^2}{2ma^2}. \quad (2.183)$$

Částice se tedy chová stejně jako v potenciálové jámě nekonečné hloubky.

Jestliže je naopak energie částice značně větší, než hloubka jámy ($E \gg U_0$), jedná se o volnou částici. Pak pro všechny oblasti platí Schrödingerova rovnice

$$\frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + k'^2\varphi_2(x) = 0, \quad (2.184)$$

která bude splněna pro libovolné k' . Protože $k' = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$, bude rovnice (2.184) splněna pro libovolnou hodnotu energie částice. Můžeme tedy tento závěr chápat jako jeden z důkazů, že volná částice má spojité spektrum energií.

2.6.3 Potenciálový val, potenciálová bariéra

Uvažujme situaci, kdy někde v prostoru existuje oblast s vyšší potenciální energií. Pro jednoduchost budeme opět řešit jednorozměrný případ a omezíme se na pravoúhlý průběh potenciálu.

Symetrický jednorozměrný potenciálový val je znázorněn na obr. 2.6. Šířka valu je a , závislost potenciální energie na souřadnici x je

$$\begin{aligned} U &= U_0 \quad \text{pro } x \in \langle 0, a \rangle, \\ U &= 0 \quad \text{pro } x \in (-\infty, 0) \text{ a } (a, \infty). \end{aligned} \quad (2.185)$$

Uvedený pravoúhlý průběh potenciální energie můžeme opět rozdělit do tří oblastí – oblasti vlevo od valu, oblasti valu a oblasti vpravo od valu, pro všechny oblasti definovat stacionární Schrödingerovy

rovnice a řešit je s využitím podmínek spojitosti vlnových funkcí a jejich prvních derivací na rozhraní oblastí. Schrödingerovy rovnice v jednotlivých oblastech jsou

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}(E - U_0)\varphi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_3(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2}E\varphi_3(x) &= 0. \end{aligned} \quad (2.186)$$

a příslušné podmínky spojitosti vlnových funkcí jsou opět popsány vztahy (2.176) a (2.177).

Předpokládejme, že částice se pohybuje směrem k oblasti valu zleva doprava. Uvažujme nejprve případ, kdy energie částice je vyšší, než potenciálový val, tedy případ $E > U_0$. Klasická částice by přeletěla nad valem. Ukážeme, že v případě kvantové částice existuje i v tomto případě možnost jejího odrazu.

V uvedeném případě nám stačí uvažovat chování částice na rozhraní první a druhé oblasti zleva. Řešíme tedy vlastně problém potenciálové bariéry o výšce U_0 . Zavedme opět kladné konstanty k a k' vztahy

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(E - U_0)}}{\hbar}. \quad (2.187)$$

První a druhou Schrödingerovu rovnici ve (2.187) přepíšeme do tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + k^2\varphi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} + k'^2\varphi_2(x) &= 0 \end{aligned} \quad (2.188)$$

a jejich řešení jsou

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \\ \varphi_2(x) &= A_2 e^{ik'x} + B_2 e^{-ik'x}. \end{aligned} \quad (2.189)$$

Vidíme, že jednotlivé členy v řešení (2.189) jsou vlastně prostorové složky de Broglieho vln. Členy s kladnou exponentou pak popisují částici, která se v dané oblasti šíří zleva doprava, členy se zápornou exponentou popisují částice, které se šíří zprava doleva. Protože ve druhé oblasti nyní neuvažujeme žádné další potenciálové rozhraní, pak se částice, která projde rozhraním první a druhé oblasti, už nemá kde odrazit a vrátit se zpět. Proto můžeme položit $B_2 = 0$. Hodnotu jedné ze zbývajících konstant můžeme v rámci řešení volit – položíme např. $A_1 = 1$. Pak odraznost rozhraní první a druhé oblasti bude

$$R = \left| \frac{B_1}{A_1} \right|^2 = |B_1|^2. \quad (2.190)$$

Hodnotu amplitudy B_1 určíme z okrajových podmínek (2.176) a (2.177) pro první rozhraní. Po dosazení řešení (2.189) do těchto podmínek dostaneme pro zbývajících amplitudy B_1 , A_2 rovnice

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2, \\ ik - ikB_1 &= ik'A_2 \end{aligned} \quad (2.191)$$

a odtud

$$B_1 = \frac{k - k'}{k + k'}. \quad (2.192)$$

Odraznost rozhraní pak pomocí vztahů (2.187) a (2.190) vychází ve tvaru

$$R = \left(\frac{1 - \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}}{1 + \sqrt{1 - \frac{U_0}{E}}} \right)^2. \quad (2.193)$$

Vidíme, že i pro $E > U_0$ dostáváme pro odraznost R nenulové hodnoty. Např. pro poměr $\frac{E}{U_0} = 2$ vychází $R = 0,03$, tedy 3 částice ze sta se vrací do první oblasti.

Za druhé uvažujme případ, kdy zleva na potenciálový val dopadá částice s energií $E < U_0$. Klasická částice se v tomto případě od valu odrazí a vrací se zpět do první oblasti. Je ale známo, že kvantová částice valem může projít a že tedy existuje nenulová pravděpodobnost výskytu částice ve třetí oblasti. Tento jev můžeme popsat propustností potenciálového valu. Zavedeme-li kladné konstanty k, k' vztahy

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad k' = \frac{\sqrt{2m(U_0 - E)}}{\hbar}, \quad (2.194)$$

můžeme Schrödingerovy rovnice (2.186) zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d^2\varphi_1(x)}{dx^2} + k^2\varphi_1(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_2(x)}{dx^2} - k'^2\varphi_2(x) &= 0, \\ \frac{d^2\varphi_3(x)}{dx^2} + k^2\varphi_3(x) &= 0, \end{aligned} \quad (2.195)$$

jejichž řešení jsou

$$\begin{aligned} \varphi_1(x) &= A_1 e^{ikx} + B_1 e^{-ikx}, \\ \varphi_2(x) &= A_2 e^{-k'x} + B_2 e^{k'x}, \\ \varphi_3(x) &= A_3 e^{ikx} + B_3 e^{-ikx}. \end{aligned} \quad (2.196)$$

Ve třetí oblasti není žádné další potenciálové rozhraní, proto se částice, která se dostane do tohoto prostředí, může šířit jen zleva doprava. Proto můžeme položit $B_3 = 0$. Ostatní koeficienty vypočítáme dosazením řešení (2.196) do okrajových podmínek (2.176) a (2.177), přičemž jeden z koeficientů volíme. Položme opět $A_1 = 1$. Pro ostatní koeficienty pak dostaneme soustavu lineárních homogenních rovnic

$$\begin{aligned} 1 + B_1 &= A_2 + B_2, \\ ik(1 - B_1) &= -k'(A_2 - B_2), \\ A_2 e^{-k'a} + B_2 e^{k'a} &= A_3 e^{ika}, \\ -k'A_2 e^{-k'a} + k'B_2 e^{k'a} &= ikA_3 e^{ika}. \end{aligned} \quad (2.197)$$

Propustnost potenciálového valu T pak definujeme výrazem

$$T = \left| \frac{A_3}{A_1} \right|^2 = |A_3|^2 \quad (2.198)$$

a A_3 vypočítáme řešením soustavy (2.197). Soustavu lze relativně jednoduše vyřešit za předpokladu, že exponenta $k'a$ nabývá relativně velkých hodnot. Za tohoto předpokladu lze totiž položit $B_2 = 0$. Potom lze A_3 vypočítat ve tvaru

$$A_3 = \frac{4kk'}{(k + ik')(k' - ik)} e^{-ika} e^{-k'a} \quad (2.199)$$

a tedy

$$T = |A_3|^2 = A_3^* A_3 = \frac{16k^2 k'^2}{(k^2 + k'^2)^2} e^{-2k'a} = 16 \frac{E(U_0 - E)}{U_0^2} e^{-2k'a}. \quad (2.200)$$

Pokud zavedeme označení $16 \frac{E(U_0 - E)}{U_0^2} = T_0$ a dosadíme za k' z (2.194), můžeme propustnost pravoúhlého valu zapsat ve finálním tvaru

$$T = T_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_0 - E)}a}. \quad (2.201)$$

Je zřejmé, že $T > 0$, tedy že opravdu existuje nenulová pravděpodobnost průchodu částice potenciálovým valem.

Řešený pravoúhlý val je ovšem velmi hrubé přiblížení reálných potenciálových valů. V případě reálných valů ale můžeme postupovat tak, že val rozložíme na soustavu N pravoúhlých valů na úrovni energie částice E (obr. 2.7) a propustnosti těchto dílčích valů vynásobíme.

Je-li propustnost dílčího j -tého valu

$$T_j = T_{0j} e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m(U_{0j} - E)}a_j}, \quad (2.202)$$

pak propustnost celého valu obecného tvaru bude

$$T = T_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \sum_{j=1}^N \sqrt{(U_{0j} - E)} \cdot a_j}, \quad (2.203)$$

případně při stejné šířce dílčích valů $a_j = \frac{a}{N}$, kde a je šířka obecného valu na úrovni energie dopadající částice

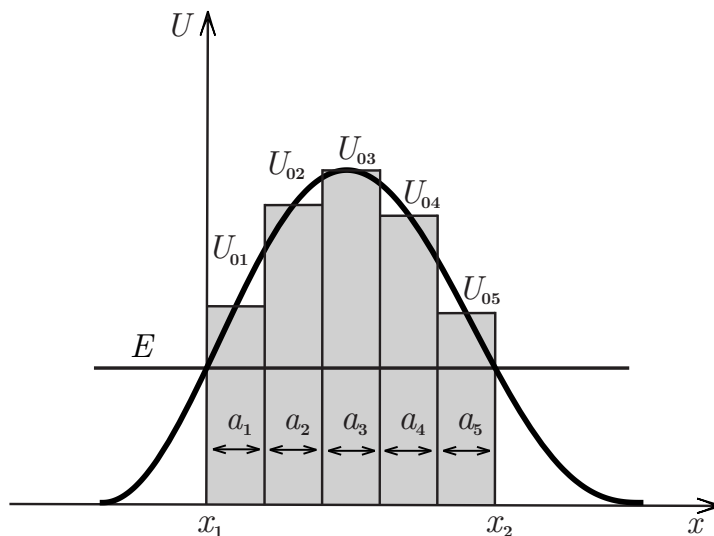
$$T = T_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \sum_{j=1}^N \sqrt{(U_{0j} - E)} \cdot \frac{a}{N}}, \quad (2.204)$$

kde $T_0 = T_{01} T_{02} \dots T_{0N}$.

Sumace v exponentě předchozího výrazu ale není nic jiného, než numerická integrace obdélníkovou metodou. Proto můžeme výsledky (2.203) a (2.204) zapsat ve tvaru

$$T = T_0 e^{-\frac{2}{\hbar} \sqrt{2m} \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{[U(x) - E]} dx}, \quad (2.205)$$

což je běžně používaný vzorec pro řešení tunelových jevů.



Obr. 2.7: Potenciálový val obecného tvaru

2.6.4 Lineární harmonický oscilátor

Lineární harmonický oscilátor (často označovaný zkratkou LHO) lze v jednorozměrném případě chápat jako částici, která vykonává kmity podél např. osy x pod vlivem působící síly F . Velikost výchylky z rovnovážné polohy je přímo úměrná působící síle, platí, že $F = -kx$.

Harmonický oscilátor se využívá v řešení celé řady problémů. Typickou ukázkou je řešení kmitů atomů v molekulách a krystalech. Kromě toho již bylo uvedeno, že také energii elektromagnetického pole ve vakuu lze vyjádřit jako energii nekonečně mnoha nezávislých harmonických oscilátorů.

Obecně můžeme potenciální energii v okolí jejího minima vyjádřit ve formě Taylorova rozvoje

$$U(x) = U_0 + \left. \frac{\partial U}{\partial x} \right|_{x=0} x + \left. \frac{\partial^2 U}{\partial x^2} \right|_{x=0} x^2 + \left. \frac{\partial^3 U}{\partial x^3} \right|_{x=0} x^3 + \dots, \quad (2.206)$$

kde předpokládáme, že minimum potenciální energie leží v bodě $x = 0$. Hodnotu potenciální energie U_0 v minimu volíme – položíme $U_0 = 0$. První derivace U v bodě $x = 0$ je přímo podmínkou minima, musí být nulová. Třetí a následné vyšší derivace U jsou anharmonické členy. Pokud nás tedy zajímají pouze harmonické kmity oscilátoru, můžeme potenciální energii vyjádřit ve tvaru

$$U(x) = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2, \quad (2.207)$$

kde m je hmotnost oscilátoru a ω_0 se nazývá charakteristická nebo také vlastní frekvence oscilátoru.

Hamiltonián jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru má tedy tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \quad (2.208)$$

a řešíme tak stacionární Schrödingerovu rovnici

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \cdot \frac{d^2 \varphi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 \varphi(x) = E \varphi(x). \quad (2.209)$$

Protože minimum potenciální energie je $U_0 = 0$, bude mít rovnice (2.209) řešení pouze pro $E > 0$.

Ve vlastním řešení rovnice (2.209) (které zde nebudeme podrobně rozebírat) je užitečné zavést nové proměnné vztahy

$$\xi = \frac{x}{b}, \quad \text{kde } b = \sqrt{\frac{\hbar}{m\omega_0}}, \quad \text{a } \lambda = \frac{2E}{\hbar\omega_0}. \quad (2.210)$$

V těchto proměnných řešíme rovnici

$$\frac{d^2 \varphi(\xi)}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2) \varphi(\xi) = 0. \quad (2.211)$$

Řešení této rovnice hledáme ve tvaru

$$\varphi(\xi) = g(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}} \quad (2.212)$$

a při splnění požadavku kvadratické integrability vlnových funkcí, který se týká výběru funkce $g(\xi)$, dojdeme dalším řešením k následujícím závěrům: Energie oscilátoru jsou diskrétní a jsou dány vztahem

$$E_n = \hbar\omega_0 \left(n + \frac{1}{2} \right); \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.213)$$

Korespondující normované vlnové funkce jsou

$$\varphi_n(\xi) = \frac{1}{\sqrt{b\sqrt{\pi}}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} \cdot e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi); \quad \xi = \frac{x}{b}. \quad (2.214)$$

$H_n(\xi)$ jsou Hermitovy polynomy, vyjádřené rekurentním vzorcem

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n e^{-\xi^2}}{d\xi^n}. \quad (2.215)$$

Pro několik prvních n jsou tyto polynomy popsány výrazy

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi \end{aligned} \quad (2.216)$$

atd.

Kvantový lineární harmonický oscilátor má tedy následující vlastnosti:

- Existuje pouze ve stavech s diskrétními hodnotami energií – spektrum oscilátoru je diskrétní.
- Energetické spektrum je ekvidistantní, energie dvou sousedních kvantových stavů se liší o hodnotu $\hbar\omega_0$.
- Energie základního stavu (pro $n = 0$) je nenulová a má hodnotu $E_0 = \frac{1}{2}\hbar\omega_0$.
- Každé hodnotě energie E_n odpovídá jedna vlastní funkce hamiltoniánu $\varphi_n\left(\frac{x}{b}\right)$. Spektrum jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru je nedegenerované.

Vidíme, že jsou zde zásadní odlišnosti od klasického oscilátoru. Zatímco klasický oscilátor mění svoji energii spojitě podle funkce

$$E_{kl} = \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2, \quad (2.217)$$

energie kvantového oscilátoru je nespojitá. Nejnižší hodnota energie klasického oscilátoru je nulová, kvantový oscilátor má v základním stavu nenulovou energii.

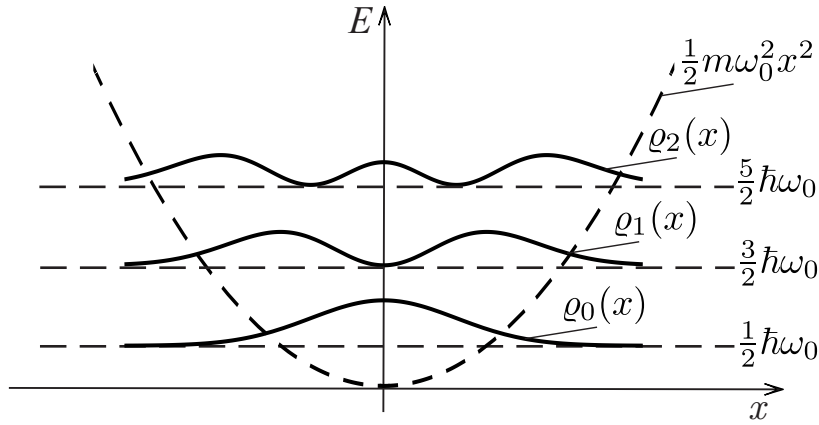
Další odlišnosti je možno nalézt při studiu hustoty pravděpodobnosti výskytu $\rho_n(x)$. Klasický oscilátor má nejvyšší pravděpodobnost výskytu v bodech obratu, naopak nejvyšší pravděpodobnost jeho nalezení je v rovnovážné poloze. Hustota pravděpodobnosti výskytu kvantového oscilátoru je různá v různých kvantových stavech. Na obr. 2.8 jsou znázorněny hustoty pravděpodobnosti výskytu oscilátoru pro 3 nejvyšší kvantové stavy.

Vidíme, že nejvyšší pravděpodobnost nalezení kvantového oscilátoru v základním energetickém stavu je v jeho rovnovážné poloze, tedy v $x = 0$. Pro první excitovaný stav pak existují dvě místa, symetricky rozmístěná vzhledem k rovnovážné poloze atd. Korespondence s klasickým oscilátorem pak nastává pro vysoce excitované stavy (stavy s velkým n), kde střední hodnoty hustoty pravděpodobnosti prakticky korespondují s průběhem funkce (2.217).

Z obr. 2.8 je dále zřejmé, že kvantový oscilátor má na rozdíl od klasického oscilátoru nenulovou hustotu pravděpodobnosti výskytu i za body obratu klasického oscilátoru.

2.6.5 Trojrozměrný lineární harmonický oscilátor

Teorie jednorozměrného oscilátoru omezuje oblast praktického využití výsledků. V praxi se nejčastěji setkáváme s trojrozměrnými oscilátory. Ukazuje se ale, že v nejdůležitějších úlohách je často



Obr. 2.8: K hustotě pravděpodobnosti výskytu kvantového oscilátoru

možné převést řešení trojrozměrné úlohy na řešení tří úloh jednorozměrných. Trojrozměrný lineární harmonický oscilátor pak slouží jako ilustrativní příklad.

Pouhým zobecněním dojdeme k závěru, že potenciální energie oscilátoru v trojrozměrném případě bude

$$U(x, y, z) = \frac{m}{2} (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2). \quad (2.218)$$

Hamiltonián trojrozměrného oscilátoru pak je

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + \frac{m}{2} (\omega_1^2 x^2 + \omega_2^2 y^2 + \omega_3^2 z^2) \quad (2.219)$$

a vidíme, že jej můžeme zapsat ve formě součtu tří nezávislých hamiltoniánů, z nichž každý působí na jinou souřadnici

$$\hat{H} = \hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z, \quad (2.220)$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{H}_x &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{m}{2} \omega_1^2 x^2, \\ \hat{H}_y &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{m}{2} \omega_2^2 y^2, \\ \hat{H}_z &= -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial z^2} + \frac{m}{2} \omega_3^2 z^2. \end{aligned} \quad (2.221)$$

Lze jednoduše dokázat, že řešení stacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\varphi(x, y, z) = E\varphi(x, y, z) \quad (2.222)$$

s hamiltoniánem (2.219) lze hledat metodou separace proměnných. Vlnovou funkci $\varphi(x, y, z)$ (vlastní funkci hamiltoniánu \hat{H}) hledáme ve formě součinu vlastních funkcí $\varphi_{n_1}(x)$, $\varphi_{n_2}(y)$, $\varphi_{n_3}(z)$ dílčích hamiltoniánů \hat{H}_x , \hat{H}_y , \hat{H}_z a energii trojrozměrného oscilátoru E hledáme ve formě prostého součtu vlastních hodnot E_{n_1} , E_{n_2} , E_{n_3} dílčích hamiltoniánů \hat{H}_x , \hat{H}_y , \hat{H}_z . Platí totiž, že

$$\begin{aligned} \hat{H}\varphi(x, y, z) &= (\hat{H}_x + \hat{H}_y + \hat{H}_z) \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}(y) \varphi_{n_3}(z) \\ &= \varphi_{n_2}(y) \varphi_{n_3}(z) \hat{H}_x \varphi_{n_1}(x) + \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_3}(z) \hat{H}_y \varphi_{n_2}(y) \\ &\quad + \varphi_{n_1}(x) \varphi_{n_2}(y) \hat{H}_z \varphi_{n_3}(z). \end{aligned} \quad (2.223)$$

Každý dílčí hamiltonián ale splňuje svoji stacionární Schrödingerovu rovnici typu (2.209). Proto dále

$$\begin{aligned}\hat{H}\varphi(x, y, z) &= \varphi_{n_2}(y)\varphi_{n_3}(z)E_{n_1}\varphi_{n_1}(x) + \varphi_{n_1}(x)\varphi_{n_3}(z)E_{n_2}\varphi_{n_2}(y) \\ &\quad + \varphi_{n_1}(x)\varphi_{n_2}(y)E_{n_3}\varphi_{n_3}(z) \\ &= (E_{n_1} + E_{n_2} + E_{n_3})\varphi_{n_1}(x)\varphi_{n_2}(y)\varphi_{n_3}(z).\end{aligned}\quad (2.224)$$

Řešení stacionárních Schrödingerových rovnic pro jednorozměrné lineární harmonické oscilátory, kmitající ve směrech souřadných os x , y , z , známe. Můžeme proto psát rovnou řešení Schrödingerovy rovnice s hamiltoniánem (2.219). Energie trojrozměrného oscilátoru jsou

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 \left(n_2 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_3 \left(n_3 + \frac{1}{2} \right) \quad (2.225)$$

a korespondující vlnové funkce mají tvar

$$\begin{aligned}\varphi_{n_1, n_2, n_3}(\xi_1, \xi_2, \xi_3) &= \sqrt[4]{\frac{m^3\omega_1\omega_2\omega_3}{\pi^3\hbar^3}} \sqrt{\frac{1}{2^{n_1+n_2+n_3} n_1!n_2!n_3!}} \\ &\quad \times e^{-\frac{\xi_1^2+\xi_2^2+\xi_3^2}{2}} H_{n_1}(\xi_1)H_{n_2}(\xi_2)H_{n_3}(\xi_3);\end{aligned}\quad (2.226)$$

$$\xi_1 = \sqrt{\frac{m\omega_1}{\hbar}}x, \quad \xi_2 = \sqrt{\frac{m\omega_2}{\hbar}}y, \quad \xi_3 = \sqrt{\frac{m\omega_3}{\hbar}}z.$$

Spektrum tohoto trojrozměrného anizotropního lineárního harmonického oscilátoru je obecně degenerované. Uvažujme ale trojrozměrný izotropní oscilátor. Pak

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_0. \quad (2.227)$$

Potom energie izotropního oscilátoru jsou

$$E_{n_1, n_2, n_3} = \hbar\omega_0 \left(n_1 + n_2 + n_3 + \frac{3}{2} \right), \quad (2.228)$$

což znamená, že nějakou hodnotu energie E_{n_1, n_2, n_3} můžeme dostat kombinacemi několika různých hodnot n_1 , n_2 , n_3 , kterým ale odpovídají různé vlnové funkce (2.226) při podmínce (2.227). Spektrum izotropního oscilátoru je tedy degenerované s výjimkou základního stavu $n_1 = n_2 = n_3 = 0$. Např. hodnotu energie pro $n_1 + n_2 + n_3 = 6$ dává 28 různých kombinací čísel n_1 , n_2 , n_3 , tedy tento stav je 28 násobně degenerovaný.

2.7 Pohyb v centrálním poli

2.7.1 Orbitální moment hybnosti

Operátory momentu hybnosti a kvadrátu momentu hybnosti byly definovány vztahy (2.95), (2.96) a (2.97). Výpočtem lze dokázat, že složky operátoru momentu hybnosti splňují cyklické komutační relace

$$\begin{aligned}\left[\hat{L}_x, \hat{L}_y \right] &= i\hbar\hat{L}_z, \\ \left[\hat{L}_y, \hat{L}_z \right] &= i\hbar\hat{L}_x, \\ \left[\hat{L}_z, \hat{L}_x \right] &= i\hbar\hat{L}_y.\end{aligned}\quad (2.229)$$

Důsledkem těchto relací musí být, že složky momentu hybnosti nejsou současně měřitelné. Na druhé straně se ale dá dokázat, že každá ze složek operátoru momentu hybnosti komutuje s operátorem kvadrátu momentu hybnosti, tedy že platí relace

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_x] = [\hat{L}^2, \hat{L}_y] = [\hat{L}^2, \hat{L}_z] = 0. \quad (2.230)$$

Je tedy zřejmé, že je možné nalézt společné vlastní vektory operátoru \hat{L}^2 a jedné z jeho složek a že veličiny reprezentované těmito operátory jsou současně měřitelné. I když je možné vybrat libovolnou složku momentu hybnosti, je tradicí vybrat složku \hat{L}_z . Existují tedy operátorové rovnice

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 \varphi &= L^2 \varphi, \\ \hat{L}_z \varphi &= L_z \varphi. \end{aligned} \quad (2.231)$$

V centrálním poli je vhodné řešit rovnice (2.231) ve sférických souřadnicích. Sférické souřadnice, označené r , ϑ a θ zavedeme obvyklými vztahy $x = r \sin \vartheta \cos \theta$, $y = r \sin \vartheta \sin \theta$ a $z = r \cos \vartheta$. Operátory v rovnicích (2.231) lze ve sférických souřadnicích zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 &= -\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin \vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \cdot \frac{\partial^2}{\partial \theta^2} \right] = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \theta}, \\ \hat{L}_z &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \theta}, \end{aligned} \quad (2.232)$$

kde symbolem $\Delta_{\vartheta, \theta}$ je označena úhlová část Laplaceova operátoru Δ .

Poněkud komplikovanějším řešením rovnic (2.231) ze nalézt výrazy pro L^2 a L_z ve tvaru

$$\begin{aligned} L_z &= m\hbar, \quad \text{kde } m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \\ L^2 &= \hbar^2 l(l+1), \quad \text{kde } l = 0, 1, 2, \dots, \end{aligned} \quad (2.233)$$

přičemž konstanty m a l jsou vázány podmínkou

$$l - |m| \geq 0. \quad (2.234)$$

Znamená to, že $|m| \leq l$ nebo $-l \leq m \leq l$, tedy při fixním l existuje $2l + 1$ hodnot m .

Z těchto výsledků je zřejmé, že vlastní hodnoty operátoru kvadrátu momentu hybnosti a operátoru projekce momentu hybnosti do osy z jsou diskrétní.

S orbitálním momentem hybnosti souvisí také orbitální magnetický moment. Operátor této veličiny je (stejně jako v klasické fyzice veličina sama) úměrný orbitálnímu momentu hybnosti přes konstantu $e/(2m)$, nazývanou *gyromagnetický poměr*. Operátor orbitálního magnetického momentu je v souladu s (2.95) definován vztahem

$$\hat{\mathbf{M}} = \frac{e}{2m} \hat{\mathbf{L}} = -\frac{ie\hbar}{2m} (\mathbf{r} \times \nabla). \quad (2.235)$$

Samozřejmě i ostatní související operátory, týkající se orbitálního magnetického momentu (operátory jeho složek, operátor kvadrátu orbitálního magnetického momentu) a vlastní hodnoty těchto operátorů jsou úměrné korespondujícím operátorům orbitálního momentu hybnosti a jejich vlastním hodnotám přes uvedený gyromagnetický poměr.

2.7.2 Schrödingerova rovnice částice v poli centrálních sil

Částice v poli centrálních sil má tři stupně volnosti. Pro určení jejího stavu je tedy nutné znát vlastní hodnoty tří vzájemně komutujících a zároveň nezávislých operátorů – integrálů pohybu částice. Těmito operátory mohou být operátor celkové energie – hamiltonián \hat{H} , operátor kvadrátu orbitálního momentu hybnosti \hat{L}^2 a operátor jedné z projekcí orbitálního momentu hybnosti – jak již bylo uvedeno, v souladu s tradicí se používá složka \hat{L}_z . Lze jednoduše dokázat, že Hamiltonián \hat{H} opravdu také komutuje s operátory \hat{L}^2 a \hat{L}_z .

Abychom našli společné vlastní funkce těchto operátorů, budeme řešit stacionární Schrödingerovu rovnici pro částici v poli centrálních sil

$$\Delta\varphi + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]\varphi = 0. \quad (2.236)$$

Pro částici v poli centrálních sil bude opět výhodné řešit rovnici (2.236) ve sférických souřadnicích r, ϑ, θ . Schrödingerova rovnice v těchto souřadnicích má tvar

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2\varphi}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial\varphi}{\partial r} + \frac{1}{r^2 \sin\vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial\varphi}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2\vartheta} \cdot \frac{\partial^2\varphi}{\partial\theta^2} + \\ + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]\varphi = 0; \quad \varphi = \varphi(r, \vartheta, \theta). \end{aligned} \quad (2.237)$$

Mají-li být vlnové funkce také vlastními funkcemi operátorů \hat{L}^2 a \hat{L}_z , které jsou ale funkcí jen úhlových souřadnic ϑ a θ , musí být možné vyjádřit vlnové funkce ve formě součinu radiální a úhlové části, tedy ve tvaru

$$\varphi(r, \vartheta, \theta) = R(r)Y(\vartheta, \theta). \quad (2.238)$$

Po dosazení (2.238) do (2.237) a po následné separaci proměnných dostaneme rovnici

$$\frac{r^2}{R} \left\{ \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]R \right\} = -\frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial Y}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2} \right], \quad (2.239)$$

kde pro zjednodušení zápisu byly vynechány argumenty funkcí R a Y .

Z matematiky je známo, že rovnice (2.239) bude splněna v celém oboru proměnných pouze tehdy, budou-li se výrazy na levé a pravé straně, obsahující derivace podle různých proměnných, rovnat společně konstantě, kterou označíme např. C . Obdržíme tedy k řešení dvě rovnice

$$\frac{r^2}{R} \left\{ \frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} [E - U(r)]R \right\} = C, \quad (2.240)$$

$$-\frac{1}{Y} \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \cdot \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial Y}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \cdot \frac{\partial^2 Y}{\partial\theta^2} \right] = C. \quad (2.241)$$

Porovnáme-li rovnici (2.241) s výrazem pro operátor kvadrátu momentu hybnosti \hat{L}^2 (2.232), dojdeme k závěru, že funkce $Y(\vartheta, \theta)$ jsou vlastními funkcemi tohoto operátoru. Z definice jeho vlastních hodnot (2.233) pak vyplývá, že rovnice (2.241) má řešení pouze pro hodnoty konstanty

$$C = l(l+1); \quad l = 0, 1, 2, \dots \quad (2.242)$$

Řešení takto definované rovnice je v matematice známé. Každému l odpovídá $2l+1$ nezávislých řešení, tzv. sférických funkcí. Tato nezávislá řešení jsou (opět v souladu s vlastními hodnotami

operátorů \hat{L}^2 a \hat{L}_z) definována pro $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$. Sférické funkce pro kladné hodnoty m je možno nalézt ve tvaru

$$Y_l^m(\vartheta, \theta) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \cdot P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\theta}, \quad (2.243)$$

kde $P_l^m(\cos \vartheta)$ je *přidružený Legendreův polynom*. Ten je v našem případě argumentu $\cos \vartheta$ definován vztahem

$$P_l^m(\cos \vartheta) = (1 - \cos^2 \vartheta)^{\frac{m}{2}} \cdot \frac{d^m}{d \cos^m \vartheta} P_l(\cos \vartheta) \quad (2.244)$$

a

$$P_l(\cos \vartheta) = \frac{1}{2^l l!} \cdot \frac{d^l}{d \cos^l \vartheta} (\cos^2 \vartheta - 1)^l \quad (2.245)$$

je *Legendreův polynom*.

Sférické funkce pro záporné hodnoty m lze vypočítat z funkcí (2.243) pomocí vztahu

$$Y_l^{-m} = (-1)^m (Y_l^m)^* \quad (2.246)$$

Uveďme ještě dvě poznámky. Sférické funkce jsou v souladu s definicí objemového elementu dV se sférických souřadnicích normovány podle vztahu

$$\int_{\vartheta=0}^{\pi} \int_{\theta=0}^{2\pi} (Y_l^m)^* Y_l^m \sin \vartheta d\vartheta d\theta = 1, \quad (2.247)$$

i když symbolický zápis této podmínky se uvádí ve tvaru $\langle lm|lm \rangle = 1$.

Ze vztahu (2.243) je dále zřejmé, že sférické funkce je možné zapisovat ve formě součinu

$$Y_l^m(\vartheta, \theta) = \Theta(\vartheta)\Phi(\theta). \quad (2.248)$$

Porovnáním se vztahem (2.243) vidíme, že funkce $\Phi(\theta)$ je úměrná funkci $e^{im\theta}$, která je očividně vlastní funkcí operátoru \hat{L}_z – splňuje jeho operátorovou rovnici (2.231) pro \hat{L}_z definovaný ve (2.232) a vlastní hodnoty ve (2.233). Funkce $\Theta(\vartheta)$ vystupuje v operátorové rovnici pro \hat{L}_z pouze v roli konstanty, proto sférické funkce (2.243) a (2.246) jsou také opravdu vlastními funkcemi operátoru \hat{L}_z .

Uveďme na závěr tvar několika sférických funkcí Y_l^m pro hodnoty $l = 0, 1, 2$ a kladné hodnoty m :

$$\begin{aligned} l = 0 : \quad Y_0^0 &= \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \\ l = 1 : \quad Y_1^0 &= \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \vartheta \\ &Y_1^1 = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sin \vartheta \cdot e^{i\theta} \\ l = 2 : \quad Y_2^0 &= \sqrt{\frac{5}{4\pi}} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \vartheta - \frac{1}{2} \right) \\ &Y_2^1 = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} \sin \vartheta \cos \vartheta \cdot e^{i\theta} \\ &Y_2^2 = \sqrt{\frac{15}{32\pi}} \sin^2 \vartheta \cdot e^{2i\theta} \end{aligned} \quad (2.249)$$

Poznamenejme, že buď přímo tyto funkce, nebo jejich lineární kombinace, se pak běžně využívají v kvantové chemii ke znázornění atomových orbitalů jako reálných funkcí v trojrozměrném prostoru.

2.7.3 Atom vodíku

Řešení problému energetických stavů atomu vodíku je jednou z nejdůležitějších úloh v kvantové mechanice. Tato úloha patří k nevelkému počtu úloh, které jsou exaktně řešitelné. Potom můžeme přesné teoretické závěry srovnávat s experimentem, který právě v případě atomu vodíku potvrzuje správnost kvantových zákonů. Výsledky řešení atomu vodíku pak umožnily řešení dalších, složitějších atomů a v další návaznosti i energetických stavů molekul.

Protože hmotnost jádra je značně větší, než hmotnost elektronu, můžeme problém atomu vodíku řešit jako problém elektronu v centrálním poli nepohybujícího se jádra. Ve skutečnosti se jedná o studium jednoho ze dvou nezávislých systémů, kdy druhým systémem je pohyb těžiště atomu.

Úhlová část vlnové funkce částice v poli centrálních sil byla vyřešena v předchozí kapitole. Zbývá tedy definovat a vyřešit rovnici (2.240) pro radiální část. Potenciální energie coulombovské interakce mezi elektronem a jádrem je popsána vztahem

$$U(r) = -\frac{Ze'^2}{r}, \quad \text{kde bylo označeno} \quad e'^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}; \quad (2.250)$$

e je náboj elektronu a Z je pořadové číslo prvku, které je samozřejmě v případě atomu vodíku rovno jedné. Ovšem stejným způsobem, pouze s jiným pořadovým číslem Z , bychom řešili i problém ionizovaných atomů He^+ , Be^{++} , Li^{+++} atd. Po dosazení (2.250) do (2.240) lze pro hodnotu konstanty $C = l(l+1)$ tuto rovnici převést na tvar

$$\frac{d^2R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + \frac{Ze'^2}{r} \right] R - \frac{l(l+1)}{r^2} R = 0. \quad (2.251)$$

Protože potenciální energie coulombovské interakce je záporná, zajímají nás pouze záporné hodnoty energie E . Samotné řešení rovnice (2.251) je poněkud zdlouhavé. Uveďme pouze, že obvykle bývá zavedena nová bezrozměrná proměnná ρ vztahem

$$\rho = 2\frac{r}{r_0}, \quad \text{kde} \quad r_0 = \left(-\frac{2m}{\hbar^2} E \right)^{-\frac{1}{2}}. \quad (2.252)$$

Při řešení (2.251) je stejně jako v případě lineárního harmonického oscilátoru požadováno splnění požadavku kvadratické integrability vlnových funkcí. Splnění tohoto požadavku vede na rovnici

$$n - \frac{mZe'^2}{\hbar^2} r_0 = 0; \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (2.253)$$

a odtud je potom možné po dosazení za r_0 vypočítat energie E

$$E_n = -\frac{me'^4 Z^2}{2\hbar^2 n^2}, \quad (2.254)$$

případně s využitím Bohrova poloměru (2.22) můžeme energie zapsat ve tvaru

$$E_n = -\frac{1}{2} \frac{e'^2 Z^2}{an^2}. \quad (2.255)$$

Je zřejmé, že vlastní hodnoty hamiltoniánu závisí jen na čísle n , energetické spektrum je tedy diskrétní. V rámci odvození vztahu (2.253) jsou dále omezeny hodnoty čísla l . Ukazuje se, že pro hodnoty l musí být splněna podmínka $l < n$, tedy konstanta l může nabývat jen hodnot

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (2.256)$$

Radiální část vlnové funkce je finálně vyjádřena v následujícím tvaru

$$R_n^l = - \left\{ \frac{(n-l-1)!}{[(n+l)!]^3 2n} \right\}^{\frac{1}{2}} \left(\frac{2Z}{na} \right)^{\frac{3}{2}} \cdot e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^l L_{n+l}^{2l+1}(\rho), \quad (2.257)$$

kde výraz $L_{n+l}^{2l+1}(\rho)$ je možné vyjádřit pomocí derivací *Laguerrových polynomů* $L_{n+l}(\rho)$. Ty jsou dány vztahy

$$L_{n+l}(\rho) = e^{\rho} \frac{d^{n+l}}{d\rho^{n+l}} (e^{-\rho} \rho^{n+l}) \quad (2.258)$$

a platí tedy, že

$$L_{n+l}^{2l+1}(\rho) = \frac{d^{2l+1}}{d\rho^{2l+1}} L_{n+l}(\rho). \quad (2.259)$$

Zavedenou bezrozměrnou proměnnou ρ můžeme s využitím (2.255) dále psát ve tvaru

$$\rho = \frac{2Zr}{na}. \quad (2.260)$$

Radiální složky vlnových funkcí (2.257) jsou opět v souladu s definicí objemového elementu dV ve sférických souřadnicích normovány podle vztahu

$$\int_0^{\infty} [R_n^l(r)]^2 r^2 dr = 1. \quad (2.261)$$

Vidíme, že radiální části vlnových funkcí závisí na dvojici čísel n a l s hodnotami, které jsou dány vztahy (2.253) a (2.256). Uveďme několik prvních funkcí R_n^l pro $n = 1, 2, 3$:

$$\begin{aligned} n = 1 : \quad R_1^0 &= 2 \left(\frac{Z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \\ n = 2 : \quad R_2^0 &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (2 - \rho) \\ &R_2^1 = \frac{1}{2\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho \\ n = 3 : \quad R_3^0 &= \frac{1}{9\sqrt{3}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} (6 - 6\rho + \rho^2) \end{aligned} \quad (2.262)$$

$$\begin{aligned} &R_3^1 = \frac{1}{9\sqrt{6}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho (4 - \rho) \\ &R_3^2 = \frac{1}{9\sqrt{30}} \left(\frac{Z}{a} \right)^{\frac{3}{2}} e^{-\frac{\rho}{2}} \rho^2. \end{aligned} \quad (2.263)$$

Vlnové funkce atomu vodíku pak získáme prostým vynásobením úhlové a radiální části podle (2.238).

Proveďme shrnutí výsledků. Energie atomu vodíku jsou diskrétní a závislé pouze na jednom kvantovém čísle n , které nabývá hodnot $n = 1, 2, 3, \dots$. Toto kvantové číslo se nazývá *hlavní kvantové číslo*.

Naopak vlnové funkce jsou popsány trojicí kvantových čísel – hlavním kvantovým číslem n , číslem l , nabývajícím hodnot $l = 0, 1, 2, \dots, n-1$ a číslem m s hodnotami $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$, což je

také možno zapsat jako $m = -l, -l+1, -l+2, \dots, l-2, l-1, l$. Číslo l se nazývá *vedlejší (orbitální) kvantové číslo* a číslo m je *magnetické kvantové číslo*. Vlnové funkce pro jednu hodnotu hlavního kvantového čísla n popisují stavy s odlišnou velikostí orbitálního momentu hybnosti L a odlišným průmětem momentu hybnosti L_z do osy z . Počet vlnových funkcí pro jednu hodnotu n je dán vztahem

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = n^2, \quad (2.264)$$

protože pro jedno n existuje $n-1$ hodnot l a pro každé l je $2l+1$ hodnot m . Spektrum atomu vodíku (a vodíku podobným iontům) je tedy degenerované s výjimkou základního stavu $n=1$.

Ve spektroskopii se místo hodnot vedlejšího kvantového čísla používají písmena s, p, d, f, \dots . Potom např. stav, označený jako $4f$ znamená stav s $n=4$ a $l=3$.

Získané výsledky a závěry můžeme porovnat se závěry Bohrova modelu atomu vodíku. Bohrovův model předpokládal pohyb elektronu po kruhové dráze. Z pohledu kvantové mechaniky je toto nesprávné, nejsou respektovány relace neurčitosti. Elektronu na jejich základě nelze stanovit přesnou polohu a impuls. V kvantové mechanice je elektron popsán vlnovou funkcí – mluvíme o stavu elektronu.

Výrazy $[R_n^l(r)] r^2$ mají význam hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu v určité vzdálenosti od jádra. Potom můžeme alespoň z hlediska maxima této hustoty porovnat závěry kvantové mechaniky s poloměry Bohrových orbit. Ukazuje se, že i z tohoto pohledu je shoda pouze částečná. Maximum hustoty pravděpodobnosti koresponduje s poloměrem Bohrových orbit pouze pro některé stavy – konkrétně pro stavy $1s$ (poloměr Bohrovy orbity a), $2p$ (poloměr $4a$), $3d$ (poloměr $9a$) atd.

Magnetické kvantové číslo m je charakteristikou toho, že elektron při svém pohybu vytváří magnetický moment. Základní kvantový stav elektronu je ale popsán čísly $n=1, l=0, m=0$, což znamená, že elektron v základním stavu orbitální magnetický moment nevytváří. To opět nekoresponduje s Bohrovou teorií – elektron, který se pohybuje po kruhové dráze magnetický moment vytváří.

Elektron je ale charakterizován ještě jednou relativistickou vlastností – spinem, který chápeme jako jeho vlastní (vnitřní) moment hybnosti a s ním související magnetický moment. Tato vlastnost nemůže být postížena Schrödingerovou rovnicí, která je nerelativistická. Takže správně je každý stav elektronu popsán čtyřmi kvantovými čísly, je nutno doplnit číslo spinové l_s . V této souvislosti můžeme připomenout existenci Pauliho principu – 2 elektrony se nemohou současně vyskytovat ve stavu, který je popsán stejnou čtveřicí kvantových čísel.

Uvedený model atomu vodíku předpokládal nepohybující se jádro. Ukazuje se ale, že pro hmotná jádra opravdu pohyb jádra nehraje podstatnou roli. Významnější roli hraje pole jádra. Pokud pole jádra není čistě coulombovské, energie elektronu by závisela na dalších kvantových číslech – snímala by se degenerace. Za tímto účelem stačí např. vložit atom do vnějšího magnetického pole.

2.8 Spin elektronu

2.8.1 Experimentální projevy spinu

Spin chápeme jako vlastní (vnitřní) moment hybnosti elektronu (a s ním související magnetický moment), na rozdíl od jeho orbitálního momentu hybnosti. Dnes víme, že právě v důsledku existence spinu řada experimentů v polovině dvacátých let minulého století vykazovala odchylky od teoretických předpovědí, zpracovaných na tehdejší úrovni kvantové teorie, vycházející z principu korespondence hamiltoniánu s klasickou Hamiltonovou funkcí. Lze říci, že základním důkazem

vlastního magnetického momentu elektronu jsou výsledky *experimentů Sterna a Gerlacha*, uskutečněné již v roce 1921.

Stern a Gerlach nechali procházet svazek atomů s jediným valenčním elektronem (v jejich pokusech atomů stříbra) nehomogenním magnetickým polem. Atomy s jedním valenčním elektronem mají vykompenzované magnetické momenty všech elektronů vnitřních slupek, takže vnější magnetické pole interaguje jen s magnetickým momentem jediného valenčního elektronu. Podle teorie orbitálního momentu hybnosti může průmět momentu hybnosti do zvoleného směru (konvenčně osy z) nabývat $2l + 1$ hodnot. Svazek atomů tak může být magnetickým polem rozštěpen na lichý počet podsvazků. Avšak Stern a Gerlach na stínítku zaznamenali jen dvě stopy, tedy svazek atomů byl rozštěpen jen na dva podsvazky. Stern a Gerlach dokonce byli schopni vypočítat velikost průmětu magnetického momentu do zvoleného směru, který opět označíme jako směr osy z . Došli k závěru, že

$$M_z = \pm \frac{e\hbar}{2m}. \quad (2.265)$$

Poměrem průmětu magnetického momentu a momentu hybnosti je definován gyromagnetický poměr (2.235). V případě orbitálního momentu hybnosti pro něj platí vztah

$$\frac{M_z}{L_z} = \frac{e}{2m}. \quad (2.266)$$

Změřit tento gyromagnetický poměr pro elektron se pokusili v roce 1915 Einstein a de Haas, ale interpretace jejich výsledků byla složitá a zatížena chybami experimentu. Přesná hodnota byla získána o několik let později v pracích Becka, Avidssona a Stewarta. Ti popsali tento poměr hodnotou

$$\frac{M_{s_z}}{L_{s_z}} = \frac{e}{m}, \quad (2.267)$$

tedy hodnotou dvojnásobnou oproti hodnotě související s orbitálním momentem hybnosti.

Výsledky uvedených experimentů interpretovali v roce 1925 Uhlenbeck a Goudsmit právě zavedením *spinu* elektronu. Spin je nová dynamická proměnná, která nemá obdobu v klasické fyzice. Proto je jeho popis v rámci kvantové teorie opět postulovaný.

2.8.2 Spinový formalismus, Pauliho spinové matice

Operátor spinu byl tedy čistě formálně postulován, a to v analogii s orbitálním momentem hybnosti. Spinu je přiřazen vektorový operátor $\hat{\mathbf{S}}$ se složkami \hat{S}_x , \hat{S}_y , \hat{S}_z a tyto operátory splňují stejné komutační relace, jako operátor orbitálního momentu hybnosti: Složky operátoru spinu spolu nekomutují a tvoří cyklický systém

$$\begin{aligned} [\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar\hat{S}_z, \\ [\hat{S}_y, \hat{S}_z] &= i\hbar\hat{S}_x, \\ [\hat{S}_z, \hat{S}_x] &= i\hbar\hat{S}_y, \end{aligned} \quad (2.268)$$

tedy jednotlivé složky spinu nejsou současně měřitelné. Na druhé straně každá složka operátoru spinu komutuje s operátorem kvadrátu spinu

$$[\hat{S}^2, \hat{S}_x] = [\hat{S}^2, \hat{S}_y] = [\hat{S}^2, \hat{S}_z] = 0. \quad (2.269)$$

Znamená to, že lze současně měřit kvadrát velikosti spinu (vlastní hodnoty operátoru \hat{S}^2) a jeho průmět do zvoleného směru. Opět se konvenčně jako tento směr volí směr souřadné osy z , tedy

měříme vlastní hodnoty operátoru \hat{S}_z . Oba uvedené operátory pak musí mít společné spektrum vlastních funkcí (spinových funkcí), splňují tedy operátorové rovnice

$$\begin{aligned}\hat{S}^2\chi &= S^2\chi, \\ \hat{S}_z\chi &= S_z\chi,\end{aligned}\tag{2.270}$$

kde vlastní hodnoty těchto operátorů hledáme ve tvaru, který je analogií vlastních hodnot operátoru orbitálního momentu hybnosti, tedy ve tvaru

$$\begin{aligned}S^2 &= \hbar^2 l_s(l_s + 1), \\ S_z &= \hbar m_s.\end{aligned}\tag{2.271}$$

Potom l_s je spinové číslo a m_s je magnetické spinové číslo, charakterizující průmět spinu do zvoleného směru. Tato čísla musí opět obecně splňovat relaci

$$m_s = -l_s, -l_s + 1, \dots, l_s - 1, l_s.\tag{2.272}$$

Ze vztahů (2.265) a (2.267) ale vyplývá, že

$$S_z = \pm \frac{\hbar}{2} \quad \text{a tedy} \quad m_s = \pm \frac{1}{2}.\tag{2.273}$$

V souladu s (2.272) pak musí platit, že spinové číslo elektronu je

$$l_s = \frac{1}{2}.\tag{2.274}$$

Protože průmět spinu elektronu do zvoleného směru dosahuje pouze dvou hodnot, je výhodné operátory spinu vyjádřit pomocí dvouřádkových matic. Jsou-li tyto matice diagonalizovány, mají jen dva diagonální prvky a tím i dvě vlastní hodnoty. Uvažujme vektorový maticový operátor $\hat{\sigma}$, pomocí kterého vyjádříme operátor spinu ve tvaru

$$\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}\tag{2.275}$$

nebo lépe ve složkách

$$\hat{S}_x = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_x, \quad \hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_y, \quad \hat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z.\tag{2.276}$$

Ze znalosti průmětu spinu do zvoleného směru pak vyplývá, že vlastní hodnoty maticových operátorů $\hat{\sigma}_x$, $\hat{\sigma}_y$, $\hat{\sigma}_z$ musí být ± 1 a kvadráty těchto operátorů jsou jednotkové matice

$$\hat{\sigma}_x^2 = \hat{\sigma}_y^2 = \hat{\sigma}_z^2 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.\tag{2.277}$$

Z komutačních relací (2.268) pro složky operátoru spinu je možné jednoduše vypočítat komutační relace pro maticové operátory. Ty opět samozřejmě tvoří cyklický systém

$$\begin{aligned}[\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y] &= 2i\hat{\sigma}_z, \\ [\hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z] &= 2i\hat{\sigma}_x, \\ [\hat{\sigma}_z, \hat{\sigma}_x] &= 2i\hat{\sigma}_y.\end{aligned}\tag{2.278}$$

Pracujeme-li se spinem konvenčně v reprezentaci jeho z složky, jak již bylo uvedeno, můžeme přímo definovat tvar maticového operátoru $\hat{\sigma}_z$ tak, že v jeho diagonále budou přímo jeho vlastní hodnoty

$$\hat{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.279)$$

Z uvedených vlastností maticových operátorů je potom možné nalézt ostatní složky operátoru $\hat{\sigma}$ ve tvaru

$$\hat{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}. \quad (2.280)$$

Těmto maticím se říká Pauliho spinové matice.

Je možné snadno dokázat, že společné vlastní funkce operátorů \hat{S}^2 a \hat{S}_z v uvedené maticové formě operátorů jsou

$$\begin{aligned} \chi_{\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} && \text{pro } m_s = \frac{1}{2}, \\ \chi_{-\frac{1}{2}} &= \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} && \text{pro } m_s = -\frac{1}{2}. \end{aligned} \quad (2.281)$$

Je samozřejmě známo, že spin není vlastností jen elektronů. Spin je vlastností všech mikročástic, přičemž spinové číslo nabývá hodnot $l_s = 0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots$. Zkušenost ukazuje, že z hlediska vlastností existují dva druhy mikročástic. Částice s polovinovým spinem ($l_s = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \dots$), mezi které patří kromě elektronu také proton a neutron, ale také např. μ^- mezon, Ω^- hyperon aj., se nazývají fermiony. Částice s celočíselným spinem $l_s = 0, 1, 2, \dots$ se nazývají bosony a mezi ně patří např. foton, π^- mezon, alfa částice atd. Podrobněji se k této klasifikaci mikročástic vrátíme v následujících kapitolách.

Kapitola 3

Základní pojmy statistické fyziky

Cílem statistické fyziky je vysvětlit makroskopické vlastnosti látky na základě mikroskopických vlastností jejích elementů (např. stavebních částic) s pomocí matematického aparátu teorie pravděpodobnosti a statistiky. Chceme-li popisovat chování velkého souboru mnoha stejných systémů (klasickým příkladem je plyn složený z mnoha stejných molekul), můžeme v podstatě použít několik přístupů.

- na základě výsledků jednoduchých experimentů se snažíme nalézt zákony, kterými se soubor řídí. Například zjistíme, že v uzavřené nádobě roste tlak s rostoucí teplotou či rostoucím počtem částic a naopak tlak plynu klesá, budeme-li zvětšovat rozměry nádoby. Kombinací těchto vztahů můžeme nalézt stavovou rovnici. Vždy však musíme mít na mysli, že jde o odvození na základě experimentů, bez zkoumání podstaty jevů samotných a ne vždy budeme zcela rozumět, kdy odvozené zákony přesně platí. Tímto přístupem se zabývá termodynamika a nazývá se popisný, odvozený ze zkušenosti, neboli *fenomenologický*.
- Pokusíme se vypočítat trajektorii každé částičky tvořící soubor ze základních zákonů. Tento postup nutně musí selhat u souborů mnoha částic, kde je takový popis nad naše možnosti. Můžeme ale použít různé numerické metody, nepopisovat všechny systémy ze souboru apod.
- Zákony popisující chování souboru jako celku se pokoušíme odvodit teoreticky ze znalosti chování jednotlivých členů systému statistickými metodami. Získané výsledky mají pravděpodobnostní charakter, ale u souborů mnoha částic to není na závadu

Posledním přístupem se zabývá statistická fyzika, které se budeme věnovat v následujících kapitolách. V tomto smyslu statistická fyzika poskytuje zdůvodnění principů fenomenologické termodynamiky. Soubor systémů popisovaný metodami statistické fyziky přitom může být velmi rozmanitý, např. jednoduchý jednoatomový plyn, neutronová hvězda složená z neutronů, feromagnetikum složené z mnoha elementárních magnetků (spinů) atd. Systémy popisovaného souboru mohou být jak klasické tak kvantové.

Snad se nám alespoň trochu podaří přesvědčit čtenáře, že jde o mimořádně krásnou a elegantní partii fyziky, s jejímiž počátky jsou spjata jména takových velikánů, jako byli třeba *Ludwig Boltzmann*, *Josiah Gibbs*, *Enrico Fermi*, *Paul Dirac*, *Satyendra Bose* a *Albert Einstein*.

3.1 Makrostav a mikrostav

Důležitými pojmy jsou ve výše zmíněné souvislosti mikrostav a makrostav. Uvažujme systém složený z N částic. Stav tohoto systému může být zadán různými způsoby.

- Klasicky, tj. zadáním $3N$ zobecněných souřadnic q_i a $3N$ zobecněných hybností p_i . Stavů pak odpovídá bod v $6N$ -rozměrném fázovém prostoru.
- Kvantově: pomocí vlnové funkce $3N$ proměnných $\psi(q_1, q_2, \dots, q_N)$. Stavů odpovídá vektor v Hilbertově (obecně nekonečněrozměrném, komplexním) prostoru.

Takto zadaný stav systému se nazývá *mikrostav*. Obecnější je popis pravděpodobnostní:

- v klasické fyzice zadáním hustoty pravděpodobnosti $\rho(q_1, \dots, q_N, p_1, \dots, p_N)$ na $6N$ -rozměrném fázovém prostoru;
- v kvantové fyzice zadáním operátoru hustoty (též matice hustoty) $\hat{\rho}$ v Hilbertově prostoru

$$\hat{\rho} = \sum_k |\psi_k\rangle p_k \langle\psi_k|. \quad (3.1)$$

Plný popis stavu systému s např. $N = 10^{23}$ částic je však prakticky nemožný, tím méně modelování jeho časového vývoje. Informace obsažená v popisu mikrostavu je pro řadu aplikací též nadbytečně velká, stačilo by znát menší množství relevantních parametrů. Rozdělme obrovské množství možných mikrostavů na menší množství podskupin, jejichž mikrostavy mají určitou společnou vlastnost. Každá tato množina mikrostavů se pak nazývá *makrostav*. Příkladem makrostavů jsou:

- Všechny mikrostavy, jejichž celková energie je E_0 ;
- Pokud se uvažovaný systém se skládá z dvojité nádoby obsahující N částic, makrostav definujeme jako množinu mikrostavů, ve kterých je N_1 částic v levé nádobě a $N_2 = N - N_1$ částic je v pravé nádobě.

Měřené makroskopické veličiny (např. tlak p , objem V , vodivost, magnetizace) veličiny jsou funkcemi mikrostavu systému. Makrostav je vhodné definovat jako množinu všech mikrostavů, pro které dané veličiny nabývají konkrétních hodnot. Mikrostav systému se obecně mění s časem a s ním i měřené hodnoty makroskopických veličin.

Definice: rovnováha systému

Systém je v rovnováze, jestliže makroskopické veličiny zůstávají v čase konstantní (až na malé fluktuační kolemy svých středních hodnot).

Úkolem statistické fyziky je vysvětlit (či předpovědět) hodnoty měřených makroskopických veličin. Hodnoty a údaje měřené přístroji odpovídají časové střední hodnotě fluktuující veličiny

$$\langle L \rangle_t = \frac{1}{2\tau} \int_{-\tau}^{\tau} L(t) dt. \quad (3.2)$$

Teoretický výpočet časové střední hodnoty makroskopické veličiny je v normálních případech technicky neproveditelný. Pro řešení statistických úloh se zavádí pojem ensemble (poprvé ho zavedl J. W. Gibbs) a střední hodnoty se namísto přes časový interval počítají přes ensembley.

Definice: ensemble

Ensemble je myšlená množina systémů se stejnými vnějšími parametry (např. objem nádoby, gravitační pole atd.), ale s různými mikrostavy. Množina probíhá systémy ve všech mikrostavech, splňujících určité kritérium. Volba tohoto kritéria pak určuje, o jaký ensemble se jedná (mikrokanonický, kanonický či makrokanonický).

Statistická fyzika pak dokáže v řadě případů spočítat střední hodnoty přes ensemble $\langle L \rangle_{\text{ens}}$. Vztah mezi $\langle L \rangle_t$ a $\langle L \rangle_{\text{ens}}$ postuluje *ergodická hypotéza*:

Střední hodnota fyzikálních veličin systému v rovnovážném stavu počítaná přes ensemble se rovná časové střední hodnotě.

Podle typu interakce systému s okolím rozeznáváme tři základní typy statistických ensembleů:

1. *Mikrokanonický ensemble*: popisuje izolovaný systém s danou hodnotou energie. Experimentálně je takovýto systém prakticky nerealizovatelný, pro teoretické úvahy a výpočty je však velmi užitečný.

2. *Kanonický ensemble*: popisuje systém, který si vyměňuje energii s okolím, se kterým je přítom v rovnováze (energie může proudit tam i zpět, v dlouhodobém průměru je však bilance energetické výměny nulová). Systém má přítom pevně daný, neměnný počet částic. Okolí, se kterým si systém vyměňuje energii, se nazývá *termostat*, případně *rezervoár*. Příkladem je rtuť v teploměru.
3. *Velký kanonický (grandkanonický) ensemble*: popisuje systém, který si s okolím (rezervoárem) vyměňuje jak energii, tak i částice. Systém je přítom s rezervoárem opět v rovnováze. Příkladem je sytá pára; rezervoárem je v takovém případě kapalina pod ní.

3.2 Liouvilleova věta, Liouvilleova rovnice

Uvažujeme klasický konzervativní systém. V dalších úvahách vyjdeme z rovnice kontinuity (zákona zachování) a z Hamiltonových pohybových rovnic. Vývoj stavu systému lze popsat jako „průtok fázové kapaliny“. Pro jednoduchost označme všechny souřadnice fázového prostoru stejným symbolem x ; $\varrho(q_i, p_i)$ $\varrho(x_i)$. Určeme, jak se mění s časem pravděpodobnost, že systém se nachází v elementu fázového prostoru vymezeném souřadnicemi x_i a $x_i + dx_i$.

Pravděpodobnost, že za časový element dt „vteče“ systém „zleva“ do elementu je $\varrho(x, t) \dot{x}_i S$, kde S je plocha stěny objemového elementu fázového prostoru. Pravděpodobnost, že systém „unikne“ z elementu „pravou“ stěnou je v prvním přiblížení $\left[\varrho \dot{x}_i + \frac{\partial(\varrho \dot{x}_i)}{\partial x_i} dx_i \right] S$. Celková změna pravděpodobnosti přítomnosti systému v daném objemovém elementu je pak rozdílem těchto dvou hodnot, s tím, že se sečtou příspěvky od všech souřadnic x_i . Z toho plyne

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = - \sum_i \frac{\partial(\varrho \dot{x}_i)}{\partial x_i}. \quad (3.3)$$

Rozepsáním derivace součinu s tím, že se vrátíme k původnímu označení fázových proměnných q_i, p_i , dostaneme

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = - \sum_i \left(\frac{\partial \varrho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \varrho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) - \varrho \sum_i \left(\frac{\partial \dot{q}_i}{\partial q_i} + \frac{\partial \dot{p}_i}{\partial p_i} \right). \quad (3.4)$$

Nyní lze využít Hamiltonových rovnic (1.63); z nich plyne, že druhý člen na pravé straně rovnice 3.4 je nulový. Zbývající členy rovnice mají za důsledek, že

$$\frac{d\varrho}{dt} = \sum_i \left(\frac{\partial \varrho}{\partial q_i} \dot{q}_i + \frac{\partial \varrho}{\partial p_i} \dot{p}_i \right) + \frac{\partial \varrho}{\partial t} = 0. \quad (3.5)$$

Tato rovnice říká, že v konzervativních systémech je fázová tekutina nestlačitelná. Tomuto tvrzení se říká *Liouvilleova věta*. Vyplývá z ní též, že při evoluci konzervativního systému se zachovává objem fázové kapaliny (ač se může měnit jeho tvar). Změnu hustoty pravděpodobnosti daného stavu (tj. v daném bodě fázového prostoru) pak popisuje rovnice

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = - \sum_i \left(\frac{\partial \varrho}{\partial q_i} \frac{\partial H}{\partial p_i} - \frac{\partial \varrho}{\partial p_i} \frac{\partial H}{\partial q_i} \right),$$

což se symbolicky vyjadřuje pomocí Poissonových závorek (viz s. 30) jako

$$\frac{\partial \varrho}{\partial t} = [H, \varrho]. \quad (3.6)$$

Této rovnici se říká *Liouvilleova rovnice*.

V konzervativních systémech pak pro stacionární stavy $\partial \varrho / \partial t = 0$ platí, že

$$\varrho(q_i, p_i) = \varrho(H(q_i, p_i)).$$

3.3 Mikrokanonický ensemble

Jde o soubor identických izolovaných systémů, každý s pevně danou stejnou hodnotou energie E . Vývoj ve fázovém prostoru je omezen na nadplochu s konstantní energií, $H(q_i, p_i) = E$. Podle kvaziergodické hypotézy se k libovolnému bodu této nadplochy dostane systém libovolně blízko. Systém tak za dostatečně dlouhou dobu projde postupně celým objemem této nadplochy. Pro systém v rovnováze jsou všechny body této nadplochy stejně pravděpodobné, tedy

$$\varrho(q_i, p_i) = \begin{cases} A & \text{pro } E < H(p_i, q_i) < E + dE; \\ 0 & \text{ve všech ostatních případech.} \end{cases} \quad (3.7)$$

Zde A je konstanta, která má význam pro normování,

$$\int \varrho(q_i, p_i) dp_i dq_i = A \int dp_i dq_i = 1.$$

Veličina $1/A$ odpovídá objemu nadplochy fázového prostoru, která je systému přístupná.

Objem \mathcal{V} nadplochy fázového prostoru $H(q_i, p_i) = E$ závisí na energii systému E . Pro obecný systém s interagujícími částicemi je výpočet velmi obtížný; uvažujme pro jednoduchost ideální plyn N neinteragujících částic se stejnou hmotností, zaujímající objem V . Energie této soustavy je pak rovna součtu kinetických energií všech částic

$$E_{\text{tot}} = \frac{1}{2m} (p_{x1}^2 + p_{y1}^2 + p_{z1}^2 + p_{x2}^2 + \dots + p_{xN}^2 + p_{yN}^2 + p_{zN}^2).$$

Objem hybnostního prostoru odpovídajícímu energiím *menším než* E je objem $3N$ -rozměrné koule s poloměrem $p_0 = \sqrt{2mE}$. Pro objem n -rozměrné koule s poloměrem r platí

$$V_n(n) = \frac{\pi^{n/2}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} r^n.$$

Objem hybnostního prostoru stavů s energií E je roven povrchu této koule. Ten lze získat ze vztahu $dV_n(r) = S_n(r)dr$, čili

$$S_n(n) = \frac{n\pi^{n/2}}{\Gamma\left(\frac{n}{2} + 1\right)} r^{n-1}.$$

Integrál přes souřadnice pak dává

$$\int dx_1 dy_1 dz_1 dx_2 \dots dx_N dy_N dz_N = V^N,$$

příslušný objem fázového prostoru je tedy

$$\mathcal{V} = \frac{1}{A} = \frac{3N\pi^{\frac{3N}{2}}}{\Gamma\left(\frac{3N}{2} + 1\right)} V^N (2mE)^{\frac{3N-1}{2}}.$$

Je vidět, že při větším počtu částic roste objem odpovídající nadplochy velice prudce s energií a s objemem systému.

V řadě případů se systém skládá z *nerozlišitelných* částic; stav systému se pak nezmění, jestliže zaměníme souřadnice a hybnosti dvou či více částic. Některé části fázového prostoru pak jsou navzájem ekvivalentní a má smysl brát v úvahu pouze jednu z nich; odečtením nadbytečných permutací se tak efektivní objem fázového prostoru sníží na hodnotu $1/N!$ původní velikosti.

Často bývá výhodnější místo s objemem fázového prostoru pracovat s bezrozměrnými veličinami. Pokud by jeden mikrostav zaujímal fázový objem \mathcal{V}_0 , bude mít číslo $\Omega \equiv V/\mathcal{V}_0$ význam počtu mikrostavů odpovídajících danému makrostavu. Volba konkrétní hodnoty elementárního objemu \mathcal{V}_0 může být často libovolná, protože nás většinou zajímají jen relativní počty stavů, Ω_1/Ω_2 . V klasické fyzice může být tento elementární objem libovolně malý – specifikace stavu ve velmi malém fázovém objemu by znamenala, že určíme velice přesně polohy a hybnosti jednotlivých částic. Kvantová mechanika však libovolně přesnou specifikaci poloh a hybností neumožňuje, je zde omezení vyplývající z relací neurčitosti. Element fázového prostoru pro systém z N částic pak má objem h^{3N} , kde $h = 2\pi\hbar = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J·s je Planckova konstanta.

3.4 Statistická definice entropie

Uvažujme uzavřený systém, skládající se ze dvou podsystémů s parametry E_i, V_i, N_i , kde $i = 1, 2$ tak, že

$$E = E_1 + E_2 = \text{konst.} \quad dE_1 = -dE_2, \quad (3.8a)$$

$$V = V_1 + V_2 = \text{konst.} \quad dV_1 = -dV_2, \quad (3.8b)$$

$$N = N_1 + N_2 = \text{konst.} \quad dN_1 = -dN_2, \quad (3.8c)$$

tedy podsystémy si mohou vyměňovat energii i částice, případně mohou měnit objem, ale celková energie, objem i počet částic zůstávají konstantní. V rovnovážném stavu budou energie, objem a počet částic v podsystémech fluktuovat kolem svých středních hodnot; tento rovnovážný stav odpovídá situaci s největším počtem mikrostavů.

Pro systém složený ze dvou podsystémů je počet mikrostavů roven součinu počtu mikrostavů jeho podsystémů

$$\Omega(E, V, N) = \Omega_1(E_1, V_1, N_1) \Omega_2(E_2, V_2, N_2). \quad (3.9)$$

Pro makrostav s největším počtem mikrostavů platí $\Omega = \Omega_{\max}$ a $d\Omega = 0$. Diferencováním rovnice (3.9) dostáváme

$$d\Omega = \Omega_2 d\Omega_1 + \Omega_1 d\Omega_2,$$

což lze přepsat jako

$$d(\ln \Omega) = d(\ln \Omega_1) + d(\ln \Omega_2). \quad (3.10)$$

Podmínka rovnováhy pak má tvar

$$d(\ln \Omega) = 0, \quad \ln \Omega = \ln \Omega_{\max}. \quad (3.11)$$

Tyto vztahy lze srovnat s termodynamickými vztahy pro systém v rovnováze, který se skládá ze dvou podsystémů. Celková entropie tohoto systému je dána součtem entropií podsystémů

$$S(E, V, N) = S_1(E_1, V_1, N_1) + S_2(E_2, V_2, N_2)$$



Obr. 3.1: Rovnice (3.12) z roku 1877 je vytesána i na Boltzmannově náhrobku na vídeňském hřbitově (zdroj: Wikipedie)

(srovnejte s rovnicí (3.9)). Celková entropie systému se nemění a nabývá své maximální hodnoty

$$dS = dS_1 + dS_2, \quad dS = 0, \quad S = S_{\max}$$

(srovnejte s rovnicemi (3.10) a (3.11)). Je vidět, že existuje kompletní analogie mezi entropií a logaritmem počtu mikrostavů. Boltzmann navrhl, že termodynamická entropie a tento logaritmus počtu mikrostavů si jsou (až na konstantu úměrnosti) rovny¹

$$S = k \ln \Omega. \quad (3.12)$$

Konstanta úměrnosti se dnes nazývá *Boltzmannova konstanta*, v soustavě SI má hodnotu (viz také s. 38) $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J} \cdot \text{K}^{-1}$. Pokud dokážeme spočítat počet mikrostavů při daných hodnotách E , V , N , můžeme tak spočítat entropii a z ní hodnoty různých termodynamických veličin

$$\frac{1}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial E} \right)_{V,N}, \quad (3.13a)$$

$$\frac{p}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial V} \right)_{E,N}, \quad (3.13b)$$

$$-\frac{\mu}{T} = \left(\frac{\partial S}{\partial N} \right)_{E,V}. \quad (3.13c)$$

Bohužel, přesný výpočet $\Omega(E, V, N)$ je obvykle velice obtížný a dá se provést jen pro některé jednoduché systémy.

3.5 Kanonický ensemble

Jde o soubor identických systémů, které si vyměňují energii s rezervoárem, ale celkový počet částic zůstává konstantní. Uvažujme následující model: soustava se skládá z L stejných systémů, které si mohou spolu vyměňovat energii; celá soustava je přitom izolovaná (je tedy prvkem mikrokanonického ensemble). Energie této celé soustavy je E . Jaká je pravděpodobnost, že daný, náhodně zvolený systém z této soustavy je v mikrostavu l s energií E_l ?

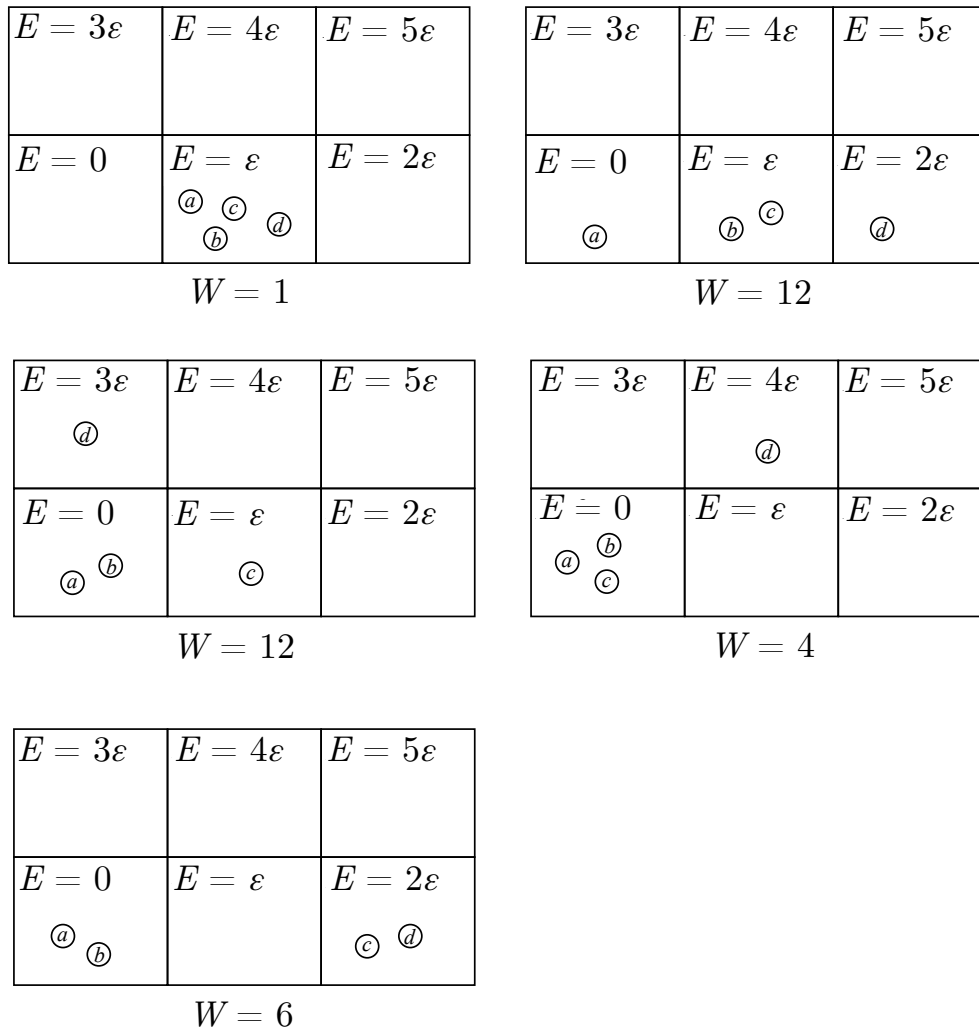
Uvažujme nejprve pro jednoduchost 4 stejné (rozlišitelné) systémy, z nichž každý může nabývat hodnot energie $0, \varepsilon, 2\varepsilon, 3\varepsilon, \dots$, přičemž celková energie všech systémů dohromady je 4ε . Na obr. 3.2 jsou znázorněné možné konfigurace, které této podmínce vyhovují. Každá příhrádka tu odpovídá jednomu fyzikálnímu stavu, každá kulička odpovídá fyzikálnímu systému. Konkrétně si tu můžeme představit, že systémy jsou kvantové harmonické oscilátory. Na obrázku jsou též uvedeny počty mikrostavů W , které vzniknou záměnou jednotlivých systémů. Je vidět, že více mikrostavů náleží případům, kdy jsou systémy co nejdříve „rozprostřeny“ po stavovém prostoru, kdežto méně mikrostavů odpovídá případu, kdy se mnoho systémů shromáždí ve stejném stavu.

Podobná situace je zachycena i na obr. 3.3, kde uvažujeme 8 systémů sdílejících celkovou energii 8ε (tedy stejně jako v předchozím případě průměrná energie jednoho systému je ε).

Jaký je celkový počet realizací v obecném případě? Je-li n_1 systémů ve stavu 1, n_2 systémů ve stavu 2 atd., pak počet realizací W tohoto rozdělení je

$$W = \frac{L!}{n_1! n_2! n_3! \dots n_l! \dots}, \quad (3.14)$$

¹Tento vztah se často zapisuje ve tvaru $S = k \ln W$, kde W pochází z němčiny, Wahrscheinlichkeit = pravděpodobnost.



Obr. 3.2: Možné realizace soustavy složené ze čtyř systémů s celkovou energií 4ε s uvedením počtu mikrostavů (převzato z [38])

kde $L = \sum_l n_l$ je celkový počet všech systémů. Čítec zlomku udává počet permutací (pořadí) L systémů, jmenovatel zlomku říká, že mezi těmito permutacemi k novému mikrostavu nepovedou záměny systémů ve stejném stavu.

Jak bude vypadat rozložení systémů mezi jednotlivé stavy, které bude mít nejvíce realizací? Je zřejmé, že počet realizací W bude největší tehdy, když čísla n_l ve jmenovateli budou co nejmenší, ideálně pokud by se v každém stavu nacházel nanejvýš jeden ze systémů. To však obecně nebude možné splnit, pokud trváme na zachování energie v celé soustavě, tedy na tom, že musí být splněna podmínka $\sum_l n_l E_l = E$, kde E je konstanta.

Nalezneme nyní rozdělení

$$n_1, n_2, n_3, \dots, n_l, \dots,$$

kteří bude mít pro $L \rightarrow \infty$ největší počet realizací při požadovaném splnění podmínek

$$\sum_l n_l = L, \quad \sum_l n_l E_l = E. \tag{3.15}$$

Hledáme tedy lokální maximum funkce W . Při malé změně rozdělení n_l o δn_l tedy musí platit

$$\delta W = 0, \tag{3.16}$$

$E = 6\varepsilon$	$E = 7\varepsilon$	$E = 8\varepsilon$	$E = 6\varepsilon$	$E = 7\varepsilon$	$E = 8\varepsilon$	$E = 6\varepsilon$	$E = 7\varepsilon$	$E = 8\varepsilon$
$E = 3\varepsilon$	$E = 4\varepsilon$	$E = 5\varepsilon$	$E = 3\varepsilon$	$E = 4\varepsilon$	$E = 5\varepsilon$	$E = 3\varepsilon$	$E = 4\varepsilon$	$E = 5\varepsilon$
$E = 0$	$E = \varepsilon$	$E = 2\varepsilon$	$E = 0$	$E = \varepsilon$	$E = 2\varepsilon$	$E = 0$	$E = \varepsilon$	$E = 2\varepsilon$
$\circ \circ \circ \circ$	\circ		$\circ \circ$	$\circ \circ \circ$	\circ	$\circ \circ \circ \circ$	$\circ \circ \circ \circ$	
$W = 8$			$W = 420$			$W = 1$		
$E = 6\varepsilon$	$E = 7\varepsilon$	$E = 8\varepsilon$	$E = 6\varepsilon$	$E = 7\varepsilon$	$E = 8\varepsilon$	$E = 6\varepsilon$	$E = 7\varepsilon$	$E = 8\varepsilon$
$E = 3\varepsilon$	$E = 4\varepsilon$	$E = 5\varepsilon$	$E = 3\varepsilon$	$E = 4\varepsilon$	$E = 5\varepsilon$	$E = 3\varepsilon$	$E = 4\varepsilon$	$E = 5\varepsilon$
$E = 0$	$E = \varepsilon$	$E = 2\varepsilon$	$E = 0$	$E = \varepsilon$	$E = 2\varepsilon$	$E = 0$	$E = \varepsilon$	$E = 2\varepsilon$
$\circ \circ$	\circ		\circ	$\circ \circ$	\circ	\circ	\circ	
$W = 420$			$W = 1120$			$W = 336$		

Obr. 3.3: Několik možných realizací soustavy složené z osmi systémů s celkovou energií 8ε s uvedením počtu mikrostavů. Dokázali byste najít další? Je případ s největším možným počtem konfigurací na tomto obrázku, nebo vypadá jinak? (Převzato z [38])

spolu s podmínkami

$$\sum_l \delta n_l = 0, \quad \sum_l E_l \delta n_l = 0. \quad (3.17)$$

Požadavek (3.16) lze přeformulovat na požadavek maxima logaritmu W , tedy

$$\delta \ln W = 0, \quad \delta \left[\ln \left(\frac{L!}{n_1! n_2! n_3! \dots n_l! \dots} \right) \right] = - \sum_l \delta [\ln (n_l!)] = 0.$$

S využitím *Stirlingova vztahu* platného pro velká čísla $n \gg 1$

$$\ln n! \approx n \ln n - n \quad (3.18)$$

dostáváme

$$\ln n_l \delta n_l = 0.$$

Sečteme-li tuto rovnici s rovnicemi (3.17), vynásobenými Lagrangeovými multiplikátory α a β , získáme

$$\sum_l (\ln n_l + \alpha + \beta E_l) \delta n_l = 0. \quad (3.19)$$

Hlavní myšlenka metody Lagrangeových multiplikátorů spočívá v tom, že ač tato rovnice platí pro libovolné koeficienty α a β při takových variacích $\delta n_1, \delta n_2, \dots, \delta n_l, \dots$, které vyhoví vazebným podmínkám, lze najít konkrétní hodnoty α a β , při nichž (3.19) platí pro jakékoli variace $\delta n_1, \delta n_2, \dots, \delta n_l, \dots$. To však může nastat pouze tehdy, když výraz v závorce v rovnici (3.19) je identicky roven nule, z čehož plyne pro rozdělení s největším počtem realizací

$$n_l = e^{-\alpha} e^{-\beta E_l}.$$

Hodnoty konstant α a β pak vyplývají z podmínek pro počet systémů v soustavě a pro celkovou energii soustavy, tedy

$$e^{-\alpha} \sum_l e^{-\beta E_l} = L, \quad e^{-\alpha} \sum_l E_l e^{-\beta E_l} = E.$$

Relativní počet systémů ve stavu l je pak pravděpodobností nalezení některého systému v tomto stavu

$$P_l = \frac{n_l}{L} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_l}, \quad (3.20)$$

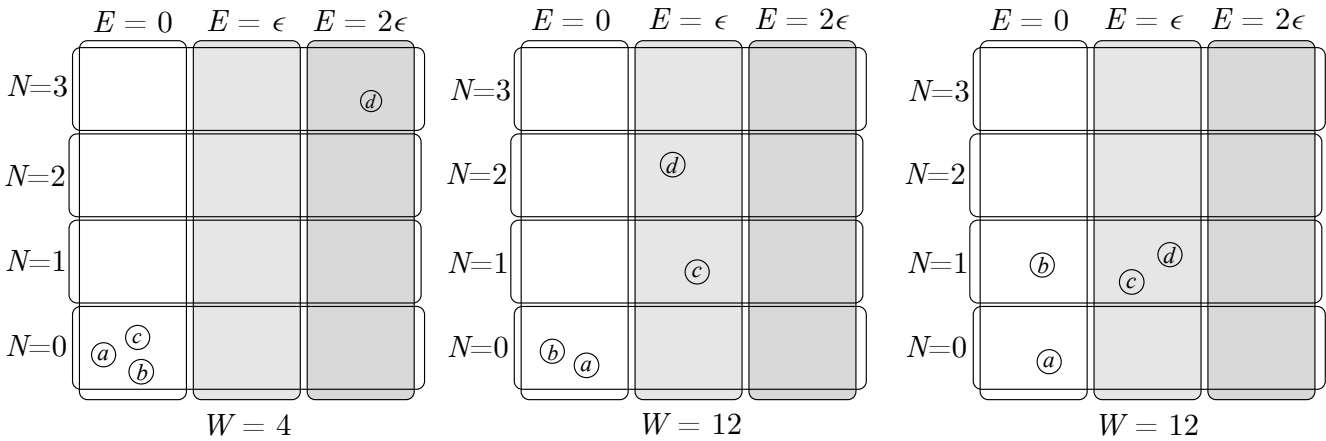
kde veličina

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l} \quad (3.21)$$

se nazývá *statistická suma*, nebo též *partiční funkce* kanonického ensemble. Její znalost jako funkce parametru β a dalších parametrů systému (jako např. V) nám umožňuje vypočítat řadu důležitých vlastností daného systému. V kapitole 4 si ukážeme, jak v některých jednoduchých případech partiční funkci vypočítat a jak z ní získat informaci o termodynamických veličinách systému.

3.6 Velký kanonický (grandkanonický) ensemble

Jde o soubor systémů, které si vyměňují s rezervoárem energii i nerozlišitelné částice. Ensemble popíšeme pravděpodobností $P_{l,N}$ toho, že je daný systém ve stavu l s energií E_l a nachází se v něm N částic. Pro získání intuitivní představy, jak se tato pravděpodobnost získá, se můžeme podívat na obr. 3.4. Ten představuje čtyři systémy, které si mohou vyměňovat tři částice a jejich celková energie je 2ϵ .



Obr. 3.4: Několik možných realizací soustavy složené ze čtyř systémů s celkovou energií 2ϵ a s celkovým počtem $\mathcal{N} = 3$ částic (převzato z [38])

Při odvozování budeme postupovat stejně jako v případě kanonického ensemble s tím, že celkový počet realizací s $n_{l,N}$ systémy ve stavu l a N částicemi je

$$W = \frac{L!}{\prod_{l,N} n_{l,N}!} \quad (3.22)$$

Opět předpokládáme, že celkový počet systémů je obrovský ($L \rightarrow \infty$), a hledáme lokální maximum $\ln W$, přičemž musejí být splněny podmínky konstantního počtu systémů L , konstantní celkové

energie E a konstantního celkového počtu částic \mathcal{N} , tedy

$$\sum_{l,N} n_{l,N} = L, \quad \sum_{l,N} n_{l,N} E_l = E, \quad \sum_{l,N} n_{l,N} N = \mathcal{N}. \quad (3.23)$$

Podmínka lokálního maxima $\ln W$ při splnění podmínek (3.23) vede k rovnicím

$$\sum_{l,N} \ln n_{l,N} \delta n_{l,N} = 0, \quad \sum_{l,N} \delta n_{l,N} = 0, \quad \sum_{l,N} E_l \delta n_{l,N} = 0, \quad \sum_{l,N} N \delta n_{l,N} = 0. \quad (3.24)$$

Vázaný extrém funkce $\ln W$ tak můžeme získat, pokud druhou, třetí a čtvrtou rovnici vynásobíme Lagrangeovými multiplikátory α , β a γ a všechny čtyři rovnice sečteme. Dostaneme tím vztah

$$\sum_{l,N} (\ln n_{l,N} + \alpha + \beta E_l + \gamma N) \delta n_{l,N} = 0. \quad (3.25)$$

Opět využijeme základní myšlenku Lagrangeových multiplikátorů, podle které musí existovat taková volba koeficientů α , β a γ tak, že rovnice (3.25) platí bez ohledu na volbu variací $\delta n_{l,N}$. Tím pádem musí být výraz v závorce roven nule a dostáváme

$$\begin{aligned} \ln n_{l,N} &= -\alpha - \beta E_l - \gamma N, \\ n_{l,N} &= \exp(-\alpha - \beta E_l - \gamma N). \end{aligned}$$

Konkrétní hodnoty koeficientů α , β a γ získáme z vazebních podmínek. Podobně jako u kanonického ensmbly souvisí koeficient α s celkovým počtem systémů

$$L = \sum_{l,N} n_{l,N} = \exp(-\alpha) \sum_{l,N} \exp(-\beta E_l - \gamma N),$$

takže

$$\exp(-\alpha) = \frac{\mathcal{N}}{\sum_{l,N} \exp(-\beta E_l - \gamma N)}.$$

Namísto koeficientu γ se většinou pracuje se symbolem $\mu = -\gamma/\beta$, takže počet systémů $n_{l,N}$ ve stavu l a s N částicemi bude

$$n_{l,N} = \frac{L}{Z} e^{-\beta(E_l - \mu N)}, \quad (3.26)$$

kde

$$Z(\beta, \mu) = \sum_{l,N} e^{-\beta(E_l - \mu N)} \quad (3.27)$$

je takzvaná *grandkanonická statistická suma*, nebo též *grandkanonická partiční funkce*. Veličina μ má rozměr energie a nazývá se *chemický potenciál*.

Zásadní význam má pro nás pravděpodobnost toho, že libovolně vybraný systém z grandkanonického ensmbly najdeme ve stavu l a s N částicemi, kterou získáme jako relativní četnost těchto systémů, tedy $P_{l,N} = n_{l,N}/L$. Dostáváme tak

$$P_{l,N} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_l - \mu N)}, \quad (3.28)$$

což je *grandkanonické rozdělení*. Z jeho znalosti pro konkrétní fyzikální systémy bychom byli schopni vypočítat střední hodnoty relevantních fyzikálních veličin. Často nám však pro takovýto výpočet bude stačit znalost grandkanonické partiční funkce jako funkce β , μ a externích parametrů, popisujících fyzikální systém (např. objem V , intenzita vnějšího elektrického pole).

Zcela analogicky můžeme postupovat, pokud si systémy vyměňují částice několika druhů. V tom případě získáme pravděpodobnost toho, že soustava se bude nacházet ve stavu l s N_1 částicemi prvního druhu, N_2 částicemi druhého druhu atd., jako

$$P_{l,N_1,N_2,\dots} = \frac{1}{Z} e^{-\beta(E_l - \mu_1 N_1 - \mu_2 N_2 - \dots)}, \quad (3.29)$$

kde odpovídající grandkanonická partiční funkce

$$Z(\beta, \mu_1, \mu_2, \dots) = \sum_{l, N_1, N_2, \dots} e^{-\beta(E_l - \mu_1 N_1 - \mu_2 N_2 - \dots)} \quad (3.30)$$

je funkcí β a několika různých chemických potenciálů μ_1, μ_2, \dots . Grandkanonické rozdělení a partiční funkce jsou zvláště užitečné pro stanovení vlastností fermionového či bosonového kondenzátu – tedy např. pro popis elektronového plynu ve vodiči nebo pro popis Boseho-Einsteinova kondenzátu atomárního plynu.

Kapitola 4

Vlastnosti statistické sumy kanonického ensmbu

4.1 Statistický integrál

V předchozí kapitole jsme odvodili (viz rovnice (3.20) a (3.21)) vztah pro pravděpodobnost, že se systém popsaný kanonickým rozdělením nachází ve stavu s energií E_n je

$$P_l = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_l},$$

kde veličina

$$Z = \sum_l e^{-\beta E_l}$$

je statistická suma daného systému (někdy též nazývaná „partiční funkce“). Suma Z je funkcí vnějších parametrů daného systému (např. V) a parametru β , který při odvozování rovnice (3.20) měl význam Lagrangeova multiplikátoru s rozměrem reciproké energie. Dosti často dochází k tomu, že u daného systému má větší množství stavů stejnou hodnotu energie, tj. že tato energetická hladina je *degenerovaná*. Pak bývá možné uvažovat pravděpodobnost toho, že systém má určitou hodnotu energie a počítat přes energetické hladiny. Jestliže E_k je energie k -té hladiny, která je stejná pro g_k ortogonálních stavů, pak pravděpodobnost toho, že systém má takovou hodnotu energie je

$$P_k = \frac{1}{Z} g_k e^{-\beta E_k}, \quad (4.1)$$

kde statistická suma je

$$Z = \sum_l g_l e^{-\beta E_l}. \quad (4.2)$$

Číslo g_k se nazývá degenerační faktor.

Zatím jsme uvažovali kvantový systém s diskrétními energetickými hladinami, analogicky však můžeme získat i pravděpodobnosti mikrostavů klasického systému; pravděpodobnost, že systém s f stupni volnosti má dynamické parametry v rozmezí $(x_1, x_2, \dots, x_f, p_1, p_2, \dots, p_f)$ až $(x_1 + dx_1, x_2 + dx_2, \dots, x_f + dx_f, p_1 + dp_1, p_2 + dp_2, \dots, p_f + dp_f)$ je

$$P(x_1, \dots, x_f, p_1, \dots, p_f) dx_1 \dots dx_f dp_1 \dots dp_f = \frac{1}{Z} e^{-\beta H(x_1, \dots, x_f, p_1, \dots, p_f)} dx_1 \dots dx_f dp_1 \dots dp_f, \quad (4.3)$$

kde obdobou statistické sumy je *statistický integrál*

$$Z = \int_{x_1} \dots \int_{x_f} \int_{p_1} \dots \int_{p_f} e^{-\beta H(x_1, \dots, x_f, p_1, \dots, p_f)} dx_1 \dots dx_f dp_1 \dots dp_f. \quad (4.4)$$

4.2 Statistická suma pro systém složený z neinteragujících podsystemů

Pokud můžeme zanedbat energii interakce, celková energie takového systému je součtem energií podsystemů

$$E_{n_1, n_2} = E_{n_1} + E_{n_2}$$

a tedy

$$Z = \sum_{n_1, n_2} e^{-\beta(E_{n_1} + E_{n_2})} = \sum_{n_1, n_2} e^{-\beta E_{n_1}} e^{-\beta E_{n_2}} = Z_1 Z_2, \quad (4.5)$$

kde Z_1 a Z_2 jsou statistické sumy jednotlivých systémů. Pro N stejných *rozlišitelných* neinteragujících systémů (např. N molekul ideálního plynu) platí, že celková statistická suma Z_N je

$$Z_N = Z_1^N, \quad (4.6)$$

tj. N -tou mocninou statistické sumy jednoho systému.

4.3 Vztah mezi statistickou sumou a termodynamickými veličinami

U systému v tepelné rovnováze s okolím fluktuuje jeho celková energie (vnitřní energie) kolem své střední hodnoty, kterou můžeme vypočítat ze znalosti pravděpodobnostního rozdělení

$$\bar{E} = \sum_n P_n E_n = \frac{1}{Z} \sum_n E_n e^{-\beta E_n} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} (e^{-\beta E_n}) = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta} (\ln Z). \quad (4.7)$$

To znamená, že ze znalosti statistické sumy jako funkce parametru β můžeme poměrně snadno vypočítat střední hodnotu energie tohoto systému aniž bychom museli provádět další sumaci.

Podrobme nyní zkoumaný systém změně: pozměňme mírně pravděpodobnosti P_n i hodnoty externích parametrů (pro konkrétnost objem V) a zjistíme, jak se změní střední hodnota energie

$$d\bar{E} = \sum_n E_n dP_n + \sum_n P_n dE_n. \quad (4.8)$$

Změna hodnot energií jednotlivých stavů závisí na změně vnějších parametrů jako

$$dE_n = \frac{\partial E_n}{\partial V} dV.$$

Pro úpravu prvního členu na pravé straně rovnice (4.8) začněme s vyjádřením diferenciálu výrazu $\sum_n P_n \ln P_n$

$$d \left(\sum_n P_n \ln P_n \right) = \sum_n \ln P_n dP_n + \sum_n dP_n.$$

Protože celkový součet pravděpodobností je konstantní, musí být suma jejich změn rovna nule, $\sum_n dP_n = 0$; pro logaritmus pravděpodobnosti pak platí $\ln P_n = -\ln Z - \beta E_n$, takže

$$d \left(\sum_n P_n \ln P_n \right) = -Z \sum_n dP_n - \beta \sum_n E_n dP_n = -\beta \sum_n E_n dP_n.$$

Poslední vztah lze uplatnit v rovnici (4.8); je ještě vhodné výraz rozšířit konstantou k . Vychází

$$d\bar{E} = -\frac{1}{\beta} d \left(k \sum_n P_n \ln P_n \right) + \sum_n P_n \frac{\partial E_n}{\partial V} dV.$$

Tento vztah lze porovnat s kombinovaným zákonem termodynamiky

$$dE = T dS - p dV. \quad (4.9)$$

Toto srovnání napovídá, že β je nepřímo úměrné teplotě, $\sum_n P_n \ln P_n$ je úměrné entropii a $\sum_n P_n \partial E_n / \partial V$ odpovídá záporně vzatému tlaku (tedy tendenci reagovat na zmenšení objemu zvětšením energie). Podle volby konstanty k tak dostáváme

$$T = \frac{1}{k\beta}, \quad (4.10a)$$

$$S = -k \sum_n P_n \ln P_n, \quad (4.10b)$$

$$p = - \sum_n P_n \frac{\partial E_n}{\partial V}. \quad (4.10c)$$

Ve vztahu pro entropii můžeme vyjádřit příslušné pravděpodobnosti a najít odpovídající sumy, takže entropie souvisí jednoduše se statistickou sumou

$$S = k (\ln Z + \beta \bar{E}). \quad (4.11)$$

Podobně jako střední hodnotu energie můžeme najít i její derivaci podle teploty, tedy tepelnou kapacitu C_V

$$C_V = \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V = \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} \frac{d\beta}{dT} = - \frac{1}{kT^2} \frac{\partial \bar{E}}{\partial \beta} = k\beta^2 \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}. \quad (4.12)$$

Zvláště jednoduchý vztah lze nalézt pro *volnou energii* $F = E - TS$. Z rovnic (4.7), (4.10a) a (4.10b) vyplývá, že

$$F = - \frac{1}{\beta} \ln Z. \quad (4.13)$$

Protože ze znalosti volné energie jako funkce teploty a objemu lze vypočítat tlak pomocí vztahu

$$p = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_T, \quad (4.14)$$

odkud můžeme získat stavovou rovnici pro tlak ze statistické sumy jako

$$p = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V} \right)_\beta. \quad (4.15)$$

4.4 Výpočet statistické sumy a termodynamických veličin v některých jednoduchých případech

4.4.1 Kvantová částice v nekonečně hluboké třírozměrné potenciálové jámě o objemu V

V podstatě se jedná o model ideálního plynu. Pro energii takovéto částice platí podle zobecnění jednorozměrného případu z části 2.6.1

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right),$$

kde a , b a c jsou rozměry potenciálové jámy, její objem $V = abc$. Statistická suma je pak

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{n_x=1}^{\infty} \sum_{n_y=1}^{\infty} \sum_{n_z=1}^{\infty} \exp \left[-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} + \frac{n_z^2}{c^2} \right) \right] = \\ &= \left[\sum_{n_x=1}^{\infty} \exp \left(-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{n_x^2}{a^2} \right) \right] \cdot \left[\sum_{n_y=1}^{\infty} \exp \left(-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{n_y^2}{b^2} \right) \right] \cdot \left[\sum_{n_z=1}^{\infty} \exp \left(-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \frac{n_z^2}{c^2} \right) \right]. \end{aligned}$$

Pro dostatečně vysoké teploty $kT \gg \pi^2 \hbar^2 / (2mV^{2/3})$ – což např. pro vodík v objemu 1 mm^3 znamená $T \gg 1 \text{ pK}$, tedy pro jakékoliv realistické teploty – lze s dostatečnou přesností nahradit sumaci integrálem

$$\sum_{n_x=1}^{\infty} \exp\left(-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2 n_x^2}{2m a^2}\right) \approx \int_0^{\infty} \exp\left(-\beta \frac{\pi^2 \hbar^2 n_x^2}{2m a^2}\right) dn_x = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \frac{a}{\pi \hbar}.$$

Podobným způsobem lze vyjádřit i statistické sumy přes zbývající prostorové proměnné, celková třírozměrná statistická suma pro jednu částici pak vychází

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} V = \frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} V. \quad (4.16)$$

Z tohoto výrazu pak získáme statistickou sumu pro N neinteragujících částic (ideální plyn) umocněním na N . Střední hodnotu energie tohoto plynu pak vyjádříme pomocí rovnice (4.7). Protože $\ln Z = -\frac{3}{2}N \ln \beta + \ln \text{konst.}$, dostáváme

$$\bar{E} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = \frac{3}{2}N \frac{1}{\beta} = \frac{3}{2}NkT, \quad (4.17)$$

což je známý výsledek kinetické teorie plynů. Vzhledem k objemu se logaritmus statistické sumy chová jako $\ln Z = N \ln V + \text{konst.}$, takže po dosazení do (4.15) získáme stavovou rovnici

$$p = \frac{1}{\beta} \left(\frac{\partial \ln Z}{\partial V}\right)_{\beta} = \frac{1}{\beta} \frac{N}{V} = \frac{NkT}{V}, \quad (4.18)$$

což také odpovídá dobře známému výsledku kinetické teorie.

4.4.2 Klasická částice v objemu V

Zkoumejme nyní stejný systém z pohledu klasické fyziky, kdy statistickou sumu budeme počítat integrací přes fázový prostor. Hamiltonián jedné částice lze zapsat ve tvaru

$$H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}.$$

Označíme-li symbolicky $d^3\mathbf{r} = dx dy dz$ a $d^3\mathbf{p} = dp_x dp_y dp_z$, statistický integrál spočítáme jako

$$\begin{aligned} Z &= \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^a \int_0^b \int_0^c \exp[-\beta H(x, y, z, p_x, p_y, p_z)] d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \int_0^a \int_0^b \int_0^c \exp\left(-\beta \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m}\right) d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{r} = \\ &= \frac{1}{h^3} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_x^2}{2m}} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_y^2}{2m}} dp_y \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\beta \frac{p_z^2}{2m}} dp_z \int_0^a dx \int_0^b dy \int_0^c dz = \\ &= \frac{1}{h^3} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} \sqrt{\frac{2\pi m}{\beta}} abc = \frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} V, \end{aligned} \quad (4.19)$$

což je stejný výsledek, jako kvantově-mechanický vztah (4.16) v limitě vysokých teplot. Poznamenejme, že Planckova konstanta má v klasickém výrazu význam jednotky fázového objemu. V principu hraje roli faktor, který zajišťuje, že statistická suma bude bezrozměrné číslo a v klasické fyzice by tento faktor mohl být jakýkoliv s rozměrem délka krát hybnost. Volba jeho číselné hodnoty by měla za následek pouze volbu nulové hladiny pro počítání entropie a některých termodynamických potenciálů. Při položení tohoto faktoru rovným Planckově konstantě dostaneme korespondenci s odpovídajícími veličinami počítanými na základě kvantové fyziky.

4.5 Gibbsův paradox a statistická suma pro nerozlišitelné částice

Vypočtíme statistickou sumu a z ní pak entropii pro ideální plyn složený z N rozlišitelných částic. Vyjdeme ze vztahu (4.6) pro N -částicovou statistickou sumu, ze vztahu (4.11) pro výpočet entropie ze statistické sumy a ze vztahu (4.16) pro částici v objemu V . Dostaneme tak

$$S = k \left[\ln \left(\frac{1}{h^{3N}} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3N/2} V^N \right) + \beta \frac{3N}{2\beta} \right] = Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} V \right) + \frac{3}{2} \right],$$

kde druhý člen v závorce odpovídá vnitřní energii podle vztahu (4.17).

Předpokládejme nyní, že máme dvě nádoby, každou o objemu V a v každé je stejný počet N takovýchto částic. Systém složený z těchto dvou podsystémů by měl mít entropii danou jako součet dílčích entropií (entropie je extenzivní veličina). Dostaneme tak pro tento složený systém

$$S_2 = 2Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} V \right) + \frac{3}{2} \right].$$

Na tento složený systém se ale můžeme dívat také tak, že se jedná o $2N$ částic v objemu $2V$ a jeho entropie by tedy měla být

$$\begin{aligned} S'_2 &= 2Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} 2V \right) + \frac{3}{2} \right] = \\ &= 2Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} V \right) + \ln 2 + \frac{3}{2} \right] = S_2 + 2Nk \ln 2. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Oba výrazy se od sebe liší o člen $2Nk \ln 2 = 2nR \ln 2$, kde $R = kN_A$ je univerzální plynová konstanta, N_A je Avogadrova konstanta a n je počet molů. Fyzikálně by to mohlo znamenat to, že pokud bychom měli nádobu s přepážkou, která od sebe odděluje dvě stejně velká množství plynu ve stejně velkých objemech, prosté odstranění přepážky (které nic nezmění na fyzikálních vlastnostech plynu) by vedlo ke zvýšení entropie o uvedenou hodnotu. Tomuto podivnému výsledku se říká *Gibbsův paradox*.

Řešení Gibbsova paradoxu je založeno na počítání statistické sumy pro nerozlišitelné částice. Při sčítání přes všechny stavy mohlo nastat, že např. částice 1 byla ve stavu a , částice 2 ve stavu b , ale také mohlo nastat, že částice 1 byla ve stavu b a částice 2 ve stavu a . Tyto dva případy byly započítány jako dva různé stavy složeného systému. Pokud jsou ale částice navzájem nerozlišitelné, obě uvedené situace odpovídají jedinému stavu, který je třeba započítat do statistické sumy pouze jedinkrát. Za předpokladu, že je jen velmi malá pravděpodobnost toho, že by se dvě částice nacházely ve stejném stavu, lze statistickou sumu pro systém složený ze dvou nerozlišitelných neinteragujících částic počítat jako

$$Z_2 = \frac{1}{2} Z_1^2$$

na rozdíl od vztahu (4.6), kde výměna dvou částic vede k novému mikrostavu složeného systému. Pro N částic je třeba kompenzovat všech $N!$ permutací, které lze provést mezi částicemi, aniž by se systém dostal do jiného mikrostavu. Statistická suma pak má tvar

$$Z_N = \frac{1}{N!} Z_1^N. \quad (4.21)$$

Je třeba zde zdůraznit, že tento vztah je správný pouze v případě, že můžeme zanedbat situace, kdy se několik částic nachází v témže stavu – tedy pro dostatečně řídké systémy při dostatečně vysoké teplotě. Pokud tato podmínka není splněna, je nutno se s nerozlišitelností částic vypořádat zcela jiným způsobem a velkou roli hraje kvantová podstata částic: jinak se chovají bosony (částice s celočíselným spinem) a jinak fermiony (s poločíselným spinem), pro které platí Pauliho vylučovací princip. Statistiku těchto částic budeme studovat později.

Dosadíme-li výraz (4.21) do vztahu pro entropii ideálního plynu, dostaneme

$$S = k \left[\ln \left(\frac{1}{N! h^{3N}} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3N/2} V^N \right) + \frac{3}{2} N \right].$$

Pro velké hodnoty N lze pro logaritmus $N!$ použít *Stirlingův vztah*

$$\ln N! \approx N \ln N - N,$$

takže můžeme psát

$$S = k \left[\ln \left(\frac{1}{N h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} V \right) + \frac{3}{2} N + N \right] = Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} \frac{V}{N} \right) + \frac{5}{2} \right].$$

Pro dva stejné systémy, každý s N částicemi v objemu V pak dostaneme celkovou entropii

$$S_2 = 2Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} \frac{V}{N} \right) + \frac{5}{2} \right].$$

Pokud bychom nyní uvažovali spojený systém s $2N$ částicemi v objemu $2V$, dostali bychom jeho entropii ve tvaru

$$S'_2 = 2Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} \frac{2V}{2N} \right) + \frac{5}{2} \right] = 2Nk \left[\ln \left(\frac{1}{h^3} \left(\frac{2\pi m}{\beta} \right)^{3/2} \frac{V}{N} \right) + \frac{5}{2} \right] = S_2.$$

V tomto případě tedy dospějeme ke stejnému výsledku pro oba pohledy na kombinovaný systém.

4.6 Maxwellovo rozdělení rychlostí

Pomocí statistického integrálu (4.19) lze vyjádřit pravděpodobnost, že se částice o hmotnosti m , na kterou nepůsobí kromě stěn nádoby jiné síly, bude nacházet v okolí určitého bodu fázového objemu. V klasickém případě nezapočítáváme „kvantování“ fázového prostoru (vynecháme součinitel $1/h^3$). Můžeme psát

$$\begin{aligned} P(x, y, z, p_x, p_y, p_z) d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p} &= \frac{\exp[-\beta H(x, y, z, p_x, p_y, p_z)]}{Z} d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p} = \\ &= \frac{1}{V} \left(\frac{1}{2\pi m k T} \right)^{3/2} \exp \left[-\frac{(p_x^2 + p_y^2 + p_z^2)}{2m k T} \right] d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{p}. \end{aligned}$$

Přejdeme-li od hybností k rychlostem podle vztahů $p_x = m v_x$ atd., získáváme *Maxwellovo rozdělení rychlostí* (někdy také *Maxwellův zákon rozdělení rychlostí* nebo zkráceně *Maxwellovo rozdělení*)

$$P(x, y, z, v_x, v_y, v_z) d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v} = \frac{1}{V} \left(\frac{m}{2\pi k T} \right)^{3/2} \exp \left[-m \frac{(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2k T} \right] d^3 \mathbf{r} d^3 \mathbf{v}; \quad (4.22)$$

každá složka rychlosti má tedy gaussovské rozdělení s pološířkou $\sigma_v = \sqrt{kT/m}$. Často se uvádí hustota pravděpodobnosti rozdělení *velikosti* rychlostí. Po integraci přes uvažovaný objem ($\int \int \int d^3\mathbf{r} = V$) a zavedením velikosti rychlosti v ve zřejmé analogii ke sférickým souřadnicím dospějeme ke známému vyjádření

$$P(v) dv = 4\pi \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} v^2 \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] dv \quad (4.23)$$

uváděnému v řadě učebních textů pro základní vysokoškolský kurz (např. [19, 21, 22]).

4.7 Ideální plyn v homogenním gravitačním poli

Uvažujme nyní podobnou situaci, avšak součástí hamiltoniánu bude i potenciální energie; pohyb částice bude omezen na nekonečně vysoký válec s podstavou A a tedy

$$H(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + mgz.$$

Pro statistickou sumu pak platí

$$Z = \int \cdots \int \exp[-\beta H(x, y, z, p_x, p_y, p_z)] d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p}.$$

Protože $\int \int dx dy = A$ a integrál přes složky hybnosti je stejný jako při odvození (4.19), vychází

$$Z = \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} A \int_0^\infty \exp[-\beta mgz] dz = \left(\frac{2\pi m}{\beta}\right)^{3/2} \frac{A}{\beta mg}, \quad (4.24)$$

z níž lze spočítat závislost energie na teplotě, najít stavovou rovnici atd. (přičemž vnějšími parametry jsou nyní A a g). Hustota pravděpodobnosti nalezení částice s dynamickými proměnnými v okolí fázového bodu (x, y, z, p_x, p_y, p_z) je

$$P(x, y, z, p_x, p_y, p_z) = \frac{1}{(2\pi mkT)^{3/2}} \frac{mg}{AkT} \exp\left(-\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mkT} - \frac{mgz}{kT}\right).$$

Po integraci přes hybnosti získáme hustotu pravděpodobnosti nalezení částice v určitém místě o souřadnici z

$$P(z) = \frac{mg}{AkT} e^{-\beta mgz};$$

pro hustotu částic pak $\varrho(x) = NP(z)$, ke N je celkový počet částic ve válci. S pomocí stavové rovnice pro ideální plyn (4.18) získáme závislost tlaku na výšce z

$$p(z) = NP(z)kT = \frac{Nmg}{A} e^{-\beta mgz} = p(0)e^{-\beta mgz}$$

označovanou někdy jako *barometrická rovnice* nebo *barometrická formule*. Tlak $p(0)$ je dán celkovou tíhou částic ve válci a plochou jeho podstavy. Získaná závislost neuvažuje pokles teploty s nadmořskou výškou, který lze v mírném zeměpisném pásu v troposféře považovat za konstantní asi do 11 km nad hladinou moře a odpovídá změně $-6,5 \text{ mK}\cdot\text{m}^{-1}$, barometrický vzorec je proto použitelným přiblížením do nadmořské výšky asi 5 000 m (viz např. [9, 36]).

4.8 Harmonický oscilátor

Pro energii n -tého stavu harmonického oscilátoru s frekvencí ω podle (2.213) platí¹

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right) \quad (4.25)$$

a pro statistickou sumu pak

$$Z = \sum_0^{\infty} e^{-\beta\hbar\omega(n+\frac{1}{2})} = e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}} \sum_0^{\infty} (e^{-\beta\hbar\omega})^n = \frac{e^{-\frac{\beta\hbar\omega}{2}}}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} = \frac{1}{2 \sinh\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right)}. \quad (4.26)$$

Tento vztah využijeme k výpočtu tepelné kapacity harmonického oscilátoru; z rovnic (4.7) a (4.12) dostaneme

$$\bar{E} = \frac{\hbar\omega}{2} \coth\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right), \quad (4.27a)$$

$$C_\omega = k \frac{\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)^2}{\sinh^2\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)}. \quad (4.27b)$$

Při diskusi chování při různých teplotách se někdy zavádí tzv. *vibrační teplota* $T_{\text{vib}} = \hbar\omega/k$. Výraz pro C_ω je zajímavý ve dvou limitních případech: pro vysoké teploty $T \gg T_{\text{vib}}$ dostaneme $C_\omega \rightarrow k$, což je i hodnota, kterou bychom získali pro klasický harmonický oscilátor. Pro nízké teploty $T \ll T_{\text{vib}}$ tepelná kapacita klesá exponenciálně k nule, $C_\omega \rightarrow 0$. Einstein tímto způsobem vysvětloval pokles tepelné kapacity krystalů s klesající teplotou: krystal z N atomů si lze představit jako soustavu $3N$ harmonických oscilátorů. Při dostatečně vysokých teplotách mají krystaly tepelnou kapacitu nezávislou na teplotě $3Nk$, což je tzv. *Dulongův-Petitův zákon*. Při klesajících teplotách začne klesat i tepelná kapacita krystalů; ve skutečnosti však ne tak prudce, jak by vyplývalo z Einsteinova modelu, pro nízké teploty platí $C_{V,\text{krystal}} \propto T^3$. Tato nepřesnost souvisí s tím, že Einsteinův model uvažuje frekvence všech oscilátorů, stejně to však neodpovídá skutečnosti. Dodejme, že typická vibrační teplota např. u plynů má hodnoty řádově v tisících kelvinů (viz také část 4.10).

4.9 Kvantový rotátor

Prozkoumejme nyní vlastnosti rotující částice s nenulovým momentem hybnosti L a nenulovým momentem setrvačnosti J . Může jít například o rotující dvouatomovou molekulu nebo podobný systém. Nejprve odvodíme statistickou sumu pro systém tvořený jedinou molekulou. Pro hamiltonián rotačního pohybu můžeme psát

$$H_{\text{rot}} = \frac{L^2}{2J} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2J},$$

kde kvantové číslo $L = 0, 1, 2, \dots$ odpovídá kvantování momentu hybnosti. Každý takový energetický stav je degenerován, vyskytuje se $2l + 1$ krát, jednotlivé stavy se stejnou energií se liší magnetickým kvantovým číslem $m = -l, -l + 1, \dots, -1, 0, 1, \dots, l - 1, l$, takže jednočásticová rotační statistická suma vychází

$$Z_{1\text{rot}} = \sum_{l=0}^{\infty} (2l + 1) \exp\left[-\frac{\beta l(l+1)\hbar^2}{2J}\right].$$

¹Místo tohoto vztahu pro energii oscilátoru se často pracuje se vztahem bez energie základního stavu, $E_n = n\hbar\omega$. Střední hodnota energie je pak o $\hbar\omega/2$ nižší než (4.27a). Na vztahu pro tepelnou kapacitu to ovšem nic nemění.

Setkáváme s řadou, která není analyticky řešitelná, můžeme ji sečíst jen numericky nebo v limitě nízkých či vysokých teplot. Oblast nízkých a vysokých teplot je dána argumentem exponenciální funkce. Je-li argument roven jedné, dostáváme charakteristickou teplotu, při níž je tepelná energie rovna rotační energii $\hbar^2/(2J) \approx kT$. Můžeme tak zavést tzv. *rotační teplotu* vztah

$$T_{\text{rot}} = \frac{\hbar^2}{2kT}.$$

Typické hodnoty T_{rot} jsou nízké – např. pro N_2 (dusík) 3 K, pro H_2 (vodík) 85 K. Nyní se pokusíme sečíst řadu pro partiční sumu alespoň v limitě nízkých a vysokých teplot.

Pro $T \ll T_{\text{rot}}$ členy řady s rostoucím l prudce klesají, stačí vzít v úvahu pouze první dva členy, proto

$$Z_{1\text{rot}} \approx 1 + 3 \exp\left(-\frac{\beta\hbar^2}{2J}\right) = 1 + 3 \exp\left(-\frac{2T_{\text{rot}}}{T}\right).$$

Podle vztahů (4.7), (4.13), (4.11) a (4.12) pak můžeme dopočítat termodynamické veličiny systému N rotátorů, např.

$$\begin{aligned} F_{\text{rot}} &= -\frac{1}{\beta} \ln(Z_{1\text{rot}}^N) = -NkT \ln\left[1 + 3 \exp\left(-\frac{2T_{\text{rot}}}{T}\right)\right], \\ \overline{E}_{\text{rot}} &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(Z_{1\text{rot}}^N) = -\frac{\partial}{\partial T} \ln(Z_{1\text{rot}}^N) \frac{dT}{d\beta} = NkT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left\{ \ln\left[1 + 3 \exp\left(-\frac{2T_{\text{rot}}}{T}\right)\right] \right\} = \\ &= 6NkT_{\text{rot}} \frac{\exp\left(-\frac{2T_{\text{rot}}}{T}\right)}{1 + 3 \exp\left(-\frac{2T_{\text{rot}}}{T}\right)} \approx 6NkT_{\text{rot}} \exp\left(-\frac{2T_{\text{rot}}}{T}\right). \end{aligned}$$

Pro vysoké teploty $T \gg T_{\text{rot}}$, což u plynů odpovídá běžným pokojovým teplotám, je obsazeno mnoho stavů s velkým l a sumu nahradíme integrací

$$Z_{1\text{rot}} \approx \int_0^{\infty} 2l \exp\left[-\frac{\beta l(l+1)\hbar^2}{2J}\right] dl = \frac{2J^2}{\beta\hbar^2} = \frac{2J^2kT}{\hbar^2} = \frac{T}{T_{\text{rot}}}$$

a dopočítáme termodynamické veličiny

$$\begin{aligned} F_{\text{rot}} &= -\frac{1}{\beta} \ln(Z_{1\text{rot}}^N) = -NkT \ln\left(\frac{T}{T_{\text{rot}}}\right), \\ \overline{E}_{\text{rot}} &= -\frac{\partial}{\partial\beta} \ln(Z_{1\text{rot}}^N) = -\frac{\partial}{\partial T} \ln(Z_{1\text{rot}}^N) \frac{dT}{d\beta} = NkT^2 \frac{\partial}{\partial T} \left[\ln\left(\frac{T}{T_{\text{rot}}}\right) \right] = NkT, \\ S_{\text{rot}} &= \frac{\overline{E}_{\text{rot}} - F_{\text{rot}}}{T} = Nk \left[1 + \ln\left(\frac{T}{T_{\text{rot}}}\right) \right]. \end{aligned}$$

Situace je obdobná jako u oscilátoru. Do rotační teploty není systém schopen absorbovat teplo, jeho stupně volnosti jsou „zamrzlé“. Nad rotační teplotou přispívá k tepelné kapacitě každý rotátor hodnotou Boltzmannovy konstanty. U dvouatomárních molekul jsou rotační teploty podstatně nižší než vibrační. Při postupném zahřívání plynu se nejprve uvolní rotační stupně volnosti a teprve později vibrační stupně volnosti.

4.10 Dvouatomový plyn

Uvažujme nyní systém složený z N dvouatomových molekul s rozlišitelnými atomy (jinak bychom museli vzít v úvahu symetrií vlnových funkcí); toto přiblížení je vyhovující pro (polo)klasický popis

chování a vlastností plynů. Energie (resp. hamiltonián) jedné molekuly bude složena z translační energie, vibrační energie, rotační energie a energie dalších (například jaderných) stupňů volnosti. Statistická suma pro jednu molekulu bude součinem statistických sum jednotlivých stupňů volnosti a termodynamické veličiny budou součtem odpovídajících členů, lze proto psát

$$H = H_{\text{tr}} + H_{\text{rot}} + H_{\text{vib}} + H_{\text{jad}} + \dots ,$$

$$Z_1 = \sum \exp [-\beta (H_{\text{tr}} + H_{\text{rot}} + H_{\text{vib}} + H_{\text{jad}} + \dots)] = Z_{1\text{tr}} Z_{1\text{rot}} Z_{1\text{vib}} \dots$$

Celková statistická suma pro N částic potom bude

$$Z = Z_{1\text{tr}}^N Z_{1\text{rot}}^N Z_{1\text{vib}}^N \dots$$

Základní termodynamické veličiny jsou podle své definice aditivní a bude pro ně platit

$$F = -kT \ln Z = F_{\text{tr}} + F_{\text{rot}} + F_{\text{vib}} + F_{\text{jad}} + \dots ,$$

$$\overline{E} = -kT^2 \frac{\partial \ln Z}{\partial T} = \overline{E}_{\text{tr}} + \overline{E}_{\text{rot}} + \overline{E}_{\text{vib}} + \overline{E}_{\text{jad}} + \dots ,$$

$$S = \frac{\overline{E} - F}{T} = S_{\text{tr}} + S_{\text{rot}} + S_{\text{vib}} + S_{\text{jad}} + \dots ,$$

$$C_V = \frac{\partial \overline{E}}{\partial T} = C_{\text{tr}} + C_{\text{rot}} + C_{\text{vib}} + C_{\text{jad}} + \dots$$

Zkoumejme nyní příspěvek jednotlivých stupňů volnosti k tepelné kapacitě. Translační stupně volnosti přispívají k vnitřní energii a tepelné kapacitě podle vztahu (4.17), což dává

$$\overline{E}_{\text{tr}} = \frac{3}{2} NkT, \quad C_V = \frac{\partial \overline{E}}{\partial T} = \frac{3}{2} Nk.$$

Vidíme, že translační stupně volnosti přispívají k měrné tepelné kapacitě plynu tak, že tepelná kapacita vztažená na počet částic je konstantní a rovna $3k/2$.

Příspěvek vibračních stupňů volnosti je popsán rovnicí (4.27) Při nízkých teplotách je vnitřní energie dána nulovými kmity $\overline{E}_{\text{vib}} \approx N\hbar\omega/2$, při vysokých teplotách je lineární funkcí teploty. K přechodu mezi oběma průběhy dochází v okolí vibrační teploty T_{vib} . Při nízkých teplotách vibrační stupně volnosti nepřispívají k měrnému teplu, při vysokých teplotách přispívají vibrační stupně volnosti k měrnému teplu konstantní hodnotou. Provedeme-li limity malých a velkých teplot, dostaneme:

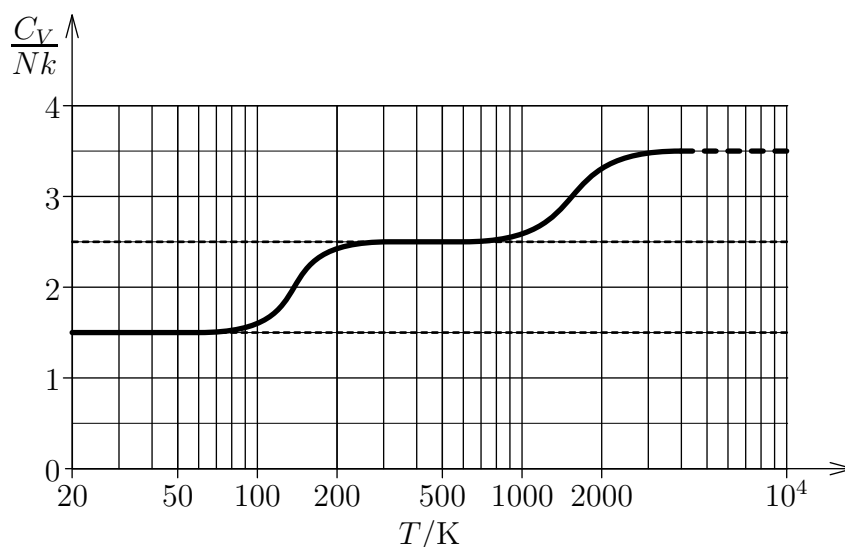
$$\overline{E}_{\text{vib}} \approx \begin{cases} N\hbar\omega/2 & \text{pro } T \ll T_{\text{vib}} \\ NkT & \text{pro } T \gg T_{\text{vib}} \end{cases} \quad C_{\text{vib}} \approx \begin{cases} 0 & \text{pro } T \ll T_{\text{vib}} \\ Nk & \text{pro } T \gg T_{\text{vib}} \end{cases}$$

Každý vibrační stupeň volnosti přidává při vysokých teplotách k tepelné kapacitě plynu hodnotu k , Boltzmannovu konstantu tak můžeme interpretovat jako tepelnou kapacitu jedné vibrující molekuly.

Pro rotační stupně volnosti neznáme analytický průběh vnitřní energie a tepelné kapacity při konstantním objemu. Umíme ale odhadnout jejich hodnoty v limitě nízkých a vysokých teplot vzhledem k rotační teplotě T_{rot} (viz část 4.9):

$$\overline{E}_{\text{rot}} \approx \begin{cases} 6NkT_{\text{rot}} \exp\left(-\frac{2T_{\text{rot}}}{T}\right) & \text{pro } T \ll T_{\text{rot}} \\ NkT & \text{pro } T \gg T_{\text{rot}} \end{cases} \quad C_{\text{rot}} \approx \begin{cases} 0 & \text{pro } T \ll T_{\text{rot}} \\ Nk & \text{pro } T \gg T_{\text{rot}} \end{cases}$$

Vidíme, že rotační stavy přispívají k měrnému teplu stejným způsobem jako vibrační stavy, příspěvek se projeví při teplotách vyšších než je rotační teplota T_{rot} . Na obr. 4.1 vidíme závislost C_V

Obr. 4.1: Závislost $C_V/(Nk)$

na teplotě pro dvouatomový vodíkový plyn. Protože rotační a vibrační pohyb vyžadují určitou minimální energii, uplatňuje se při nízkých teplotách pouze posuvný pohyb. S rostoucí teplotou začínají molekuly nejprve rotovat a při dostatečných teplotách také kmitat (překresleno podle [19]). Teplotní škála je logaritmická, aby bylo možné pokrýt větší rozsah teplot

na teplotě pro dvouatomový vodíkový plyn H_2 . Při nízkých teplotách pod 80 K se uplatňuje pouze translační pohyb molekul a proto $C_V/(Nk) = 3/2$. U rotací a vibrací se uplatňují kvantové efekty a energie odpovídající těmto stupňům volnosti nemůže být libovolně malá, proto při nízkých teplotách nemají molekuly dostatek energie k tomu, aby mohly rotovat nebo kmitat od sebe a k sobě okolo určité rovnovážné polohy. S rostoucí teplotou začíná nejprve několik, později stále více a více molekul rotovat, až nakonec rotují prakticky všechny a $C_V/(Nk) = 5/2$. Při teplotách nad 1 000 K přibývá kmitajících molekul, až nakonec kmitají téměř všechny a $C_V/(Nk) \rightarrow 7/2$. Graf končí okolo teploty 3 200 K, při níž atomy kmitají natolik, že se od sebe otrhnou – dojde k disociaci molekul H_2 na jednotlivé atomy H.

4.11 Paramagnetismus

Zajímavou aplikací kanonického rozdělení je popis paramagnetického chování látek. Atomy řady látek mají vlastní magnetický moment $\boldsymbol{\mu}$. Umístíme-li takovou látku do vnějšího magnetického pole \boldsymbol{H} , snaží se dipóly orientovat ve směru tohoto pole, aby energie dipólu $-\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{H}$ byla minimální. Na druhou stranu tepelný pohyb atomů toto uspořádání narušuje, takže pro vysoké teploty je orientace dipólů nahodilá a výsledný magnetický moment je nulový. Při konečné teplotě bude výsledný magnetický moment někde mezi nulovou a maximální hodnotou, která odpovídá orientaci všech dipólových momentů v jednom směru.

Jako model pro popis tohoto jevu uvažujme systém N magnetických dipólů jejichž posuvný pohyb a vzájemnou interakci můžeme zanedbat (to platí poměrně dobře pro pevné látky, u kapalin a plynů však můžeme magnetické vlastnosti považovat nezávislé na translačním pohybu). Celková energie systému v magnetickém poli o intenzitě \boldsymbol{H} bude

$$E = - \sum_{i=1}^N \boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{H}.$$

Bude-li mít vektor \mathbf{H} směr osy z , potom při použití obvyklých úhlových souřadnic lze psát $\boldsymbol{\mu}_i \cdot \mathbf{H} = \mu_{zi} H_z = \mu H \cos \vartheta_i$. Statistický integrál pro jeden dipólový moment bude

$$Z_1 = \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \exp[\beta \mu H \cos \vartheta] \sin \vartheta d\vartheta d\varphi = 2\pi \int_0^{\pi} \exp[\beta \mu H \cos \vartheta] \sin \vartheta d\vartheta = \frac{4\pi}{\beta \mu H} \sinh(\beta \mu H).$$

Pro celý systém N částic pak bude výsledný statistický integrál

$$Z = Z_1^N = \left[\frac{4\pi}{\beta \mu H} \sinh(\beta \mu H) \right]^N. \quad (4.28)$$

Pomocí vztahu pro střední energii systému (4.7) vypočteme

$$\begin{aligned} \bar{E} &= -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -N \frac{\partial}{\partial \beta} \ln \left[\frac{4\pi}{\beta \mu H} \sinh(\beta \mu H) \right] = \\ &= -N \frac{4\pi}{\frac{4\pi}{\beta \mu H} \sinh(\beta \mu H)} \left[\frac{1}{\beta} \cosh(\beta \mu H) - \frac{1}{\beta^2 \mu H} \sinh(\beta \mu H) \right] = -N \mu H \left[\coth(\beta \mu H) - \frac{1}{\beta \mu H} \right]. \end{aligned} \quad (4.29)$$

Protože $\bar{E} = -N \bar{\mu}_z H$, pro střední hodnotu dipólového momentu a pro složku celkového dipólového momentu ve směru vnějšího pole platí

$$\bar{\mu}_z = \mu \left[\coth(\beta \mu H) - \frac{1}{\beta \mu H} \right], \quad (4.30)$$

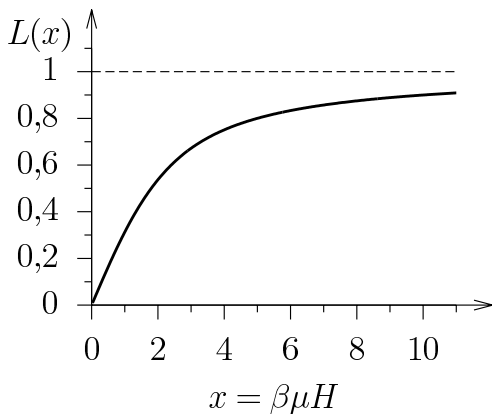
$$\bar{M}_z = N \bar{\mu}_z = N \mu \left[\coth(\beta \mu H) - \frac{1}{\beta \mu H} \right] = N \mu L(\beta \mu H), \quad (4.31)$$

kde funkce

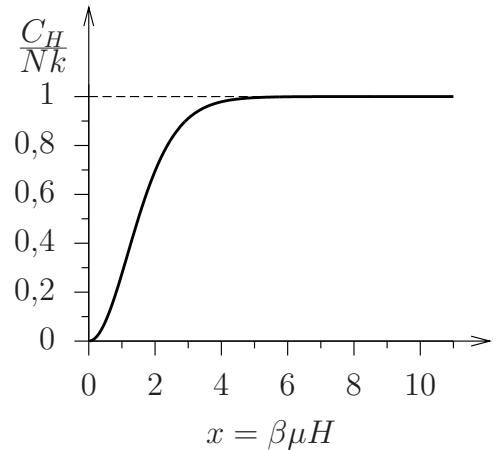
$$L(x) = \left[\coth(x) - \frac{1}{x} \right] \quad (4.32)$$

se nazývá *Langevinovou funkcí* a proměnná $x = \beta \mu H = \frac{\mu H}{kT}$. Závislost $L(x)$ je vykreslena na obr. 4.2 a pro její MacLaurinův rozvoj v okolí 0 platí (ověření přenecháváme čtenáři)

$$L(x) \approx \frac{x}{3} - \frac{x^5}{45} + \dots$$



Obr. 4.2: Grafické znázornění Langevinovy funkce $L(x)$ definované rovnicí (4.32)



Obr. 4.3: Grafické znázornění závislosti $C_H(x)$ definované rovnicí (4.34)

Z grafu i MacLaurinova rozvoje vidíme, že pro běžné teploty roste celkový dipólový moment \overline{M}_z s teplotou lineárně. Vzhledem k tomu, že atomové dipólové momenty mají řádově velikost Bohrova magnetonu $\mu_B = 9,27 \cdot 10^{-24} \text{ J} \cdot \text{T}^{-1}$, bude při pokojové teplotě $x \ll 1$ i pro silná vnější magnetická pole. Naopak pro nízké teploty $T \rightarrow 0 \text{ K}$, kdy $x \gg 1$, dochází ke stavu nasycení, při kterém $L(x) \approx 1$ a všechny atomové dipólové momenty jsou orientovány ve směru \mathbf{H} . Pro běžné teploty přibližně platí lineární závislost

$$\overline{M}_z \approx \frac{N\mu^2}{3kT}H - \dots,$$

kde konstanta úměrnosti odpovídá (*magnetické*) *susceptibilitě*

$$\chi_m = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{\partial \overline{M}_z}{\partial H} = \frac{N\mu^2}{3kT} = \frac{C}{T}; \quad (4.33)$$

tuto závislost susceptibility na teplotě nazýváme *Curieův zákon*.

Ze vztahu pro celkovou energii (4.29) můžeme odvodit tepelnou kapacitu systému v konstantním magnetickém poli

$$\begin{aligned} C_H &= \left(\frac{\partial \overline{E}}{\partial T} \right)_H = -N\mu H \frac{dL(x)}{dx} \frac{\partial x}{\partial T} = \\ &= Nk \left(1 - \frac{x^2}{\sinh^2 x} \right). \end{aligned} \quad (4.34)$$

Funkční závislost je znázorněna na obr. 4.3. Pro vysoké teploty $x \rightarrow 0$ je tedy nejenom $\overline{E} \approx 0$, ale také C_H se blíží k nule, což je typické pro systémy, jejichž energie je shora ohraničená a nemůže být libovolně velká. Pro $T \rightarrow \infty$ (tj. $x \rightarrow 0$) energie nikdy nemůže přesáhnout nulovou hodnotu a systém proto nemůže přijmout další energii, musí proto $\lim_{T \rightarrow \infty} C_H = 0$. Proto při běžných teplotách magnetické dipóly nijak významně nepřispívají k tepelné kapacitě paramagnetických látek.

4.12 Fluktuace

Fluktuacemi obecně rozumíme odchylky hodnot fyzikálních veličin od jejich rovnovážných středních hodnot. Existence fluktuací termodynamických makroskopických veličin vyplývá z jejich statistické povahy, u systémů složených z mnoha částic jsou pozorované fluktuace obvykle velmi malé. Fluktuacemi je také podmíněna řada jevů – např. fluktuace elektrického proudu jsou příčinou prakticky neodstranitelných šumů v radiotechnických zařízeních, fluktuace omezují citlivost měřicích přístrojů apod.

Kvantitativně popisujeme fluktuace nejčastěji tzv. *kvadratickou fluktuací* uvažované fyzikální veličiny L

$$\overline{(\Delta L)^2} = \overline{(L - \overline{L})^2} = \overline{L^2} - (\overline{L})^2, \quad (4.35)$$

kteřá je vždy nezáporná. Nulové hodnoty dosahuje pouze tehdy, pokud po celou dobu měření $L = \overline{L}$, naopak každá odchylka od střední hodnoty přispívá k hodnotě kvadratické fluktuace.

K posouzení relativní chyby zavádíme *relativní fluktuaci* uvažované fyzikální veličiny L

$$\delta_L = \frac{\sqrt{\overline{(\Delta L)^2}}}{\overline{L}}.$$

Je-li $\delta_L \ll 1$, nabývá fyzikální veličina hodnot natolik blízkých k \overline{L} , že se záměnou těchto hodnot za střední hodnotu prakticky nedopouštíme žádné chyby.

Jako příklad studujme fluktuace vnitřní energie systému popsaném kanonickým rozdělením. Již jsme odvodili vztah pro střední hodnotu energie (4.7). Podobně dostaneme

$$\overline{E^2} = \sum_n P_n E_n^2 = \frac{1}{Z} \sum_n E_n^2 e^{-\beta E_n} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \left(\sum_n e^{-\beta E_n} \right) = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2}.$$

Dosazením do (4.35) vychází

$$\overline{(\Delta E)^2} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} = -\frac{\partial \overline{E}}{\partial \beta}.$$

Protože

$$C_V = \left(\frac{\partial \overline{E}}{\partial T} \right)_V = \frac{\partial \overline{E}}{\partial \beta} \cdot \frac{\partial \beta}{\partial T} = -\frac{1}{kT^2} \cdot \frac{\partial \overline{E}}{\partial \beta},$$

lze také psát $\overline{(\Delta E)^2} = kT^2 C_V$. Pro relativní fluktuaci energie kanonického ensmbly pak platí

$$\delta_E = \sqrt{\frac{kT^2 C_V}{\overline{E}}}.$$

Např. pro jednoatomový ideální plyn máme $\overline{E} = 3NkT/2$, $C_V = 3Nk/2$, takže

$$\begin{aligned} \overline{(\Delta E)^2} &= \frac{3}{2} Nk^2 T^2, \\ \delta_E &= \sqrt{\frac{2}{3N}}. \end{aligned}$$

Pro jeden mol částic, tj. pro $N \approx 10^{23}$ vychází $\delta_E \approx 10^{-12}$, takže fluktuace energie jsou prakticky neměřitelné. Tento závěr je speciálním případem obecného pravidla, že relativní fluktuace aditivní fyzikální veličiny systému skládajícího se z N nezávislých částic je *nepřím*o úměrná \sqrt{N} .

Ze vztahu (4.1) pro pravděpodobnost toho, že systém popsaný kanonickým rozdělením nalezneme ve stavu s energií E lze odvodit ještě jeden důležitý závěr (podrobněji viz např. [18]) týkající se nejpravděpodobnější hodnoty energie. Protože degenerace stavů (nebo hustota stavů u spojitého intervalu energií) roste s E a Boltzmannův součinitel $e^{-\beta E}$ naopak s rostoucí energií klesá, musí mít pravděpodobnost nalezení kanonického systému ve stavu s energií E pro určitou hodnotu maximum, které pro velké množství částic N odpovídá střední energii \overline{E} . Tomu pak odpovídá i malá relativní fluktuace energie okolo této hodnoty.

Kapitola 5

Statistická rozdělení, bosony a fermiony

V této kapitole prostudujeme některé základní vlastnosti ideálních systémů totožných částic, složených z fermionů a bosonů, které se někdy označují jako *ideální fermionový* nebo *bosonový plyn*. Jak lze předpokládat, vlastnosti obou plynů závisejí výrazně na teplotě, zaměříme se na jejich chování při nízkých i relativně vysokých teplotách.

5.1 Planckův vyzařovací zákon

Příkladem bosonů jsou i fotony, modelem „fotonového plynu“, jak uvidíme, lze popsat zákony záření černého tělesa. Hledejme množství energie $E(\omega)d\omega$ elektromagnetického záření v dutině o objemu V , které za tepelné rovnováhy při teplotě T připadá na interval frekvencí $(\omega, \omega + d\omega)$. Záření v dutině můžeme považovat za superpozici stojatých vln. Každá takováto vlna se chová jako (kvantový) harmonický oscilátor. Pokud nebudeme uvažovat energii základního stavu (energii vakua, kterou fyzikálně nedetekujeme), připadá na každý takovýto oscilátor střední energie

$$\mathcal{E}(\omega, T) = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}. \quad (5.1)$$

Připomeňme, že pro energii jednoho fotonu (kvanta záření) platí $\varepsilon = \hbar\omega = pc$, kde p je hybnost fotonu a c rychlost světla ve vakuu.

5.1.1 Hustota módů

Fotony jsou částice elektromagnetické interakce šířící se rychlostí světla. Jejich základní charakteristiky jsou spin $s = 1$, chemický potenciál klidová hmotnosti i elektrický náboj jsou rovny nule. Na fotony uzavřené v objemu V budeme v tomto prvním přiblížení nahlížet jako na systém se spojitými hladinami energie a určíme, kolik z nich má hybnost v intervalu $(p, p + dp)$, tento počet označíme $g(p)dp$. Degenerační faktor volíme 2, neboť pro příčné elektromagnetické záření existují dva nezávislé příčné módy (polarizace) záření. Pokud převedeme hybnostní část fázového prostoru do sférických souřadnic, pro počet fotonů s hybností menší nebo rovnou p lze psát

$$\mathcal{N}(p) = \int g(p)dp = 2 \cdot \frac{1}{h^3} \int \dots \int d^3\mathbf{r} d^3\mathbf{p} = \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} \int 4\pi p^2 dp.$$

S využitím vztahů pro energii a úhlovou frekvenci fotonu $p = \varepsilon/c = \hbar\omega/c$ můžeme výsledek přepsat pomocí energie, resp. úhlové frekvence

$$g(\varepsilon)d\varepsilon = \frac{V\varepsilon^2}{\pi^2\hbar^3c^3}d\varepsilon, \quad \text{resp.} \quad g(\omega)d\omega = \frac{V\omega^2}{\pi^2c^3}d\omega. \quad (5.2)$$

5.1.2 Planckovo rozdělení

Energie záření s frekvencí v intervalu $(\omega, \omega + d\omega)$ pak po spojení výsledků (5.1) a (5.2) vychází

$$E(\omega)d\omega = \frac{\hbar\omega}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} g(\omega)d\omega = \frac{V\hbar}{\pi^2c^3} \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega. \quad (5.3)$$

Množství energie lze vyjádřit též pomocí vlnové délky záření λ s využitím vztahu $\omega = 2\pi c/\lambda$, jehož diferencováním dostaneme

$$d\omega = -\frac{2\pi c}{\lambda^2}d\lambda.$$

Dosazením vztahu pro ω a $d\omega$ do rovnice (5.3), při vypuštění záporného znaménka (jehož význam je v tom, že pokud zvyšujeme frekvenci, vlnová délka se zkracuje a naopak) dostaneme

$$E(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi V hc}{\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)} d\lambda. \quad (5.4)$$

Vztahům (5.3) a (5.4) se říká *Planckův vyzařovací zákon* – určují, jak je energie záření rozprostřena ve spektru. Tvar funkcí $E(\omega)$ a $E(\lambda)$ pro několik různých teplot je zakreslen na obrázcích 5.1. Z nich je zřejmé, že

- funkce nabývají nulových hodnot pro argument roven nule i jdoucí k nekonečnu, mezi nimi je jedno maximum;
- s rostoucí teplotou roste funkční hodnota pro kteroukoliv hodnotu argumentu;
- s rostoucí teplotou se poloha maxima posouvá k vyšším frekvenčním hodnotám a k nižším hodnotám vlnové délky.

Max Karl Ernst Ludwig Planck byl především za objev těchto zákonů a průkopnické zavedení kvant záření – fotonů v roce 1918 odměněn Nobelovou cenou. Prozkoumejme nyní limitní chování těchto funkcí pro nízké frekvence (tj. dlouhé vlnové délky) a poté pro vysoké frekvence (tj. krátké vlnové délky).

5.1.3 Rayleighův-Jeansův zákon a Wienův zákon

Při frekvencích velmi nízkých ve srovnání s kT/\hbar je $\hbar\omega/(kT) \ll 1$ a exponenciálu lze nahradit prvními dvěma členy Maclaurinova rozvoje, tj. lineární funkcí

$$\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) \approx 1 + \frac{\hbar\omega}{kT}, \quad \text{popř.} \quad \exp\left(\frac{\hbar c}{\lambda kT}\right) \approx 1 + \frac{\hbar c}{\lambda kT}.$$

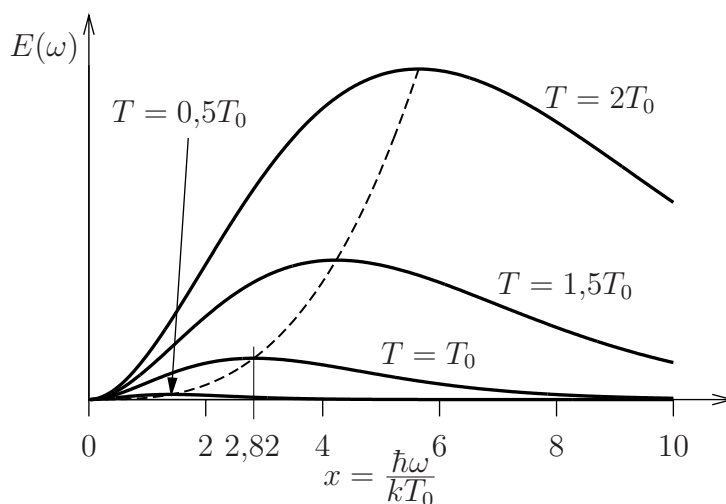
Dosazením do vztahu (5.3) dostaneme

$$E(\omega) d\omega \approx \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \frac{\omega^3}{1 + \frac{\hbar\omega}{kT} - 1} d\omega = \frac{VkT\omega^2}{\pi^2 c^3} d\omega. \quad (5.5)$$

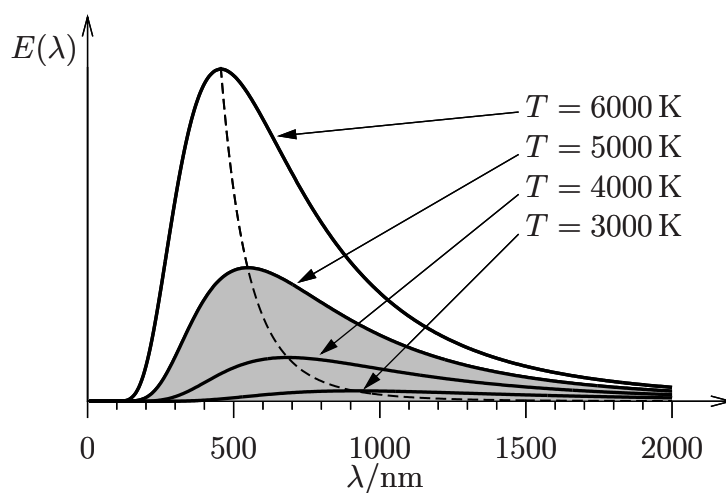
a podobně po dosazení do (5.4) získáme

$$E(\lambda) d\lambda \approx \frac{8\pi V hc}{\lambda^5 \left(1 + \frac{\hbar c}{\lambda kT} - 1 \right)} d\lambda = \frac{8\pi V kT}{\lambda^4} d\lambda. \quad (5.6)$$

Tyto rovnice říkají, že hustota energie roste s frekvencí kvadraticky, případně s klesající vlnovou délkou roste s převrácenou čtvrtou mocninou vlnové délky. Všimněme si, že v těchto rovnicích vůbec nevystupuje Planckova konstanta, rovnice tohoto typu byly odvozeny pro vyzařování černého tělesa ještě před objevem kvantové fyziky. Podle svých původců se jim říká *Rayleighův-Jeansův vyzařovací zákon* (nejméně bychom se k nim dostali, pokud bychom za střední hodnotu energie jednoho módu elektromagnetického pole dosadili kT a vynásobili frekvenční hustotou módů z rovnice (5.2)). Problém nastane, pokud Rayleighův-Jeansův zákon použijeme pro příliš vysoké frekvence (čili krátké vlnové délky) – hustota energie pak roste nade všechny meze. Tomuto paradoxu se říká *ultrafialová katastrofa* – jakékoliv zahřáté těleso by veškerou svou energii v nekonečně krátkém čase vyzařilo na nekonečně vysokých frekvencích; zmíněné označení pochází až z roku 1911 od Paula



(a)



(b)

Obr. 5.1: Rozložení energie tepelného záření ve frekvenčním spektru a ve spektru vlnových délek.

Čárkovaná spojnice maxim odpovídá Wienovu posunovacímu zákonu. Vyplněná plocha pod křivkou odpovídá celkové energii fotonového plynu, kterou získáme integrací přes všechny vlnové délky

Ehrenfesta. Tento paradox našel své rozřešení právě v kvantování energie elektromagnetického pole, jež vedlo v roce 1900 k Planckovu vyzařovacímu zákonu a základům kvantové fyziky.

Při vysokých frekvencích ve srovnání s kT/\hbar je $\hbar\omega/(kT) \gg 1$ a jedničku ve jmenovateli Planckova rozdělení (5.3) a (5.4) lze oproti exponenciální funkci zanedbat. Dojdeme tak k *Wienovu vyzařovacímu zákonu*

$$E(\omega) d\omega = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \omega^3 e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}} d\omega \quad \text{nebo} \quad E(\lambda) d\lambda = \frac{8\pi V}{\lambda^5} \frac{hc}{\lambda kT} e^{-\frac{hc}{\lambda kT}} d\lambda. \quad (5.7)$$

Historicky byl Wienův zákon odvozen v roce 1896, tj. o čtyři roky dříve než Rayleighův, jehož teoretické zdůvodnění podal Jeans až roku 1905. Každý ze zákonů vyhovoval pouze v určité části elektromagnetického spektra a experimenty brzy potvrdily, že nejlépe vyhovuje statistické rozdělení odhadnuté Planckem.

5.1.4 Wienův posunovací zákon

Všimněme si ještě, jak se mění poloha maxima funkce $E(\omega)$. Derivací podle ω dostaneme

$$\frac{d}{d\omega} E(\omega) = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \omega^2 \frac{3 \left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right) - \frac{\hbar\omega}{kT} e^{\frac{\hbar\omega}{kT}}}{\left(e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1 \right)^2},$$

kde pravá strana nabývá nulové hodnoty pro $\omega = 0$, nebo pro $\omega \rightarrow \infty$ a nebo pro nulovou hodnotu čitatele. V čitateli vystupuje frekvence vždy jako součást výrazu $\xi = \frac{\hbar\omega}{kT}$, takže hodnota čitatele bude nulová, pokud bude ξ nabývat určité konkrétní hodnoty, která je řešením rovnice

$$3(e^\xi - 1) - \xi e^\xi = 0.$$

Tuto rovnici lze řešit numericky, přičemž dostaneme $\xi^* \approx 2,821$, pro frekvenci ω^* odpovídající maximum rozdělení hustoty energie splňuje podmínku

$$\frac{\hbar\omega^*}{kT} \approx 2,821, \quad \text{neboli} \quad \omega^* \approx 2,821 \frac{kT}{\hbar} \approx 3,69 \cdot 10^{11} T. \quad (5.8)$$

Poloha maxima ve frekvenčním spektru se tedy lineárně posouvá s teplotou – tomuto pravidlu se říká *Wienův posunovací zákon*.

Podobným způsobem můžeme najít i polohu maxima pro funkci $E(\lambda)$, v tomto případě dostaneme pro vlnovou délku λ^* , na níž je maximum energie, vztah

$$\frac{hc}{kT\lambda^*} = \zeta,$$

kde ζ je řešením rovnice

$$5(e^\zeta - 1) - \zeta e^\zeta = 0.$$

Její numerické řešení dává $\zeta^* \approx 4,965$ a tedy

$$\frac{hc}{kT\lambda^*} \approx 4,965, \quad \text{neboli} \quad \lambda^* \approx \frac{hc}{4,965 kT} \approx \frac{2,9 \cdot 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{K}}{T}; \quad (5.9)$$

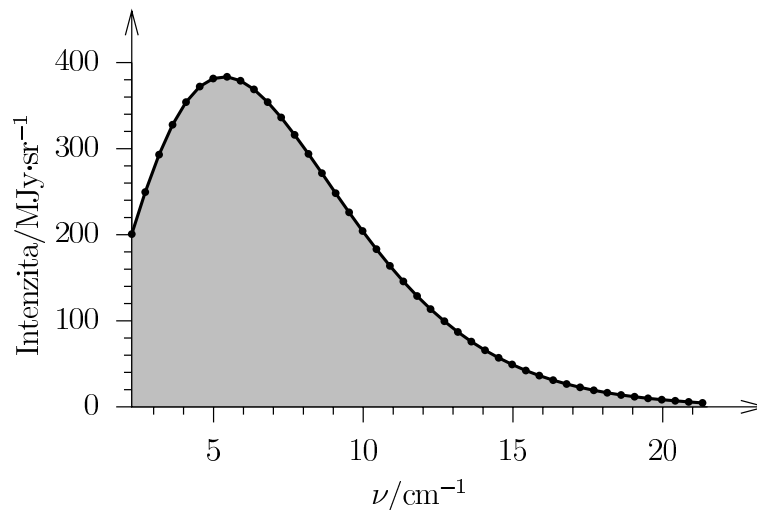
v této podobě bývá Wienův posunovací zákon nejčastěji uváděn. Vlnová délka, na které má záření maximální energii, se tedy posouvá nepřímo úměrně teplotě. Zákon formuloval v roce 1893 Wilhelm Wien pouze na základě empirických zkušeností a v roce 1911 za tento a související objevy získal Nobelovu cenu za fyziku. Závislost ω^* resp. λ^* na teplotě je znázorněna na obrázku 5.1.

Pomocí Wienova zákona můžeme také naopak určit teplotu zářících těles např. v astrofyzice. I z obrázku 5.1b přímo vidíme, že připadá-li ve slunečním spektru maximum energie na záření o vlnové délce okolo 500 nm, musí mít jeho povrch teplotu mezi 5 000 K a 6 000 K, z Wienova zákona vychází hodnota 5 800 K uváděná v literatuře a v tabulkách (viz např. [35]). Reliktní záření o teplotě $T \approx 3$ K má maximum pro vlnové délky přibližně 1 mm, člověk o teplotě $T \approx 300$ K pro vlnové délky asi 10 μm , chladné hvězdy s $T \approx 3 000$ K vyzařují hlavně v IR oboru na délce asi 1 000 nm a velmi horké hvězdy s povrchovou teplotou $T \approx 30 000$ K vyzařují nejvíce v UV oblasti na vlnové délce 100 nm.

5.1.5 Celková energie záření

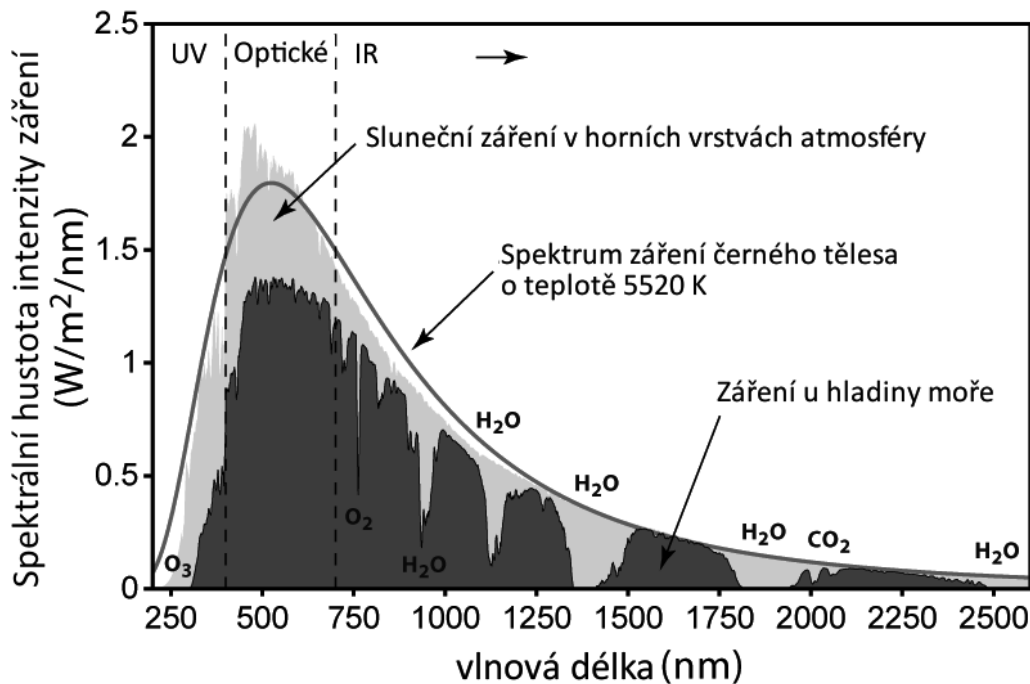
Pomocí Planckova zákona můžeme odpovědět na otázku, jaká je celková energie elektromagnetického záření v dutině o objemu V při teplotě T . Výraz (5.3) integrujeme přes všechny frekvence (hodnota integrálu je určena plochou pod grafem Planckova rozdělení, jak je vyznačeno na obr. 5.1)

$$E(V, T) = \int_0^\infty E(\omega) d\omega = \frac{V\hbar}{\pi^2 c^3} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1} d\omega = \frac{V k^4 T^4}{\pi^2 c^3 \hbar^3} \int_0^\infty \frac{x^3}{e^x - 1} dx.$$



Obr. 5.2: Spektrum reliktního mikrovlnného záření naměřené družicí COBE patří k nejdokonalším planckovským spektrům v přírodě, na obrázku jsou naměřená data srovnána s modelem záření černého tělesa o teplotě 2,725 K. Jde o záření vyplňující celý vesmír pocházející z doby asi 380 000 let po velkém třesku, které v sobě nese stopy tepelné rovnováhy mezi hmotou a zářením v raném vesmíru; teplota reliktního záření určuje průměrnou teplotu našeho vesmíru.

Zvolená stupnice frekvence cm^{-1} udává, kolik vlnových délek se vejde do 1 cm, tzn. $1 \text{ cm}^{-1} \approx 3 \cdot 10^{10} \text{ Hz}$; jednotky na svislé ose odpovídají 10^6 jansky na steradián, přičemž 1 jansky je definován jako $10^{-26} \text{ W na m}^2 \text{ na Hz}$ (zdroj dat: NASA, Fixsen et al. (1996), *Astrophys. J.* **473**, 576, [astro-ph/9605054])



Obr. 5.3: Spektrum slunečního záření dopadajícího na zemi ve srovnání s přesným planckovským rozdělením pro teplotu 5 520 K. Zřetelné jsou absorpční čáry a oblasti odpovídající prvkům a sloučeninám v zemské atmosféře (upraveno podle Wikipedie)

Poslední integrál po provedené substituci $x = \hbar\omega / (kT)$ již neobsahuje žádné fyzikální parametry, jde jednoduše o číselnou konstantu, jejíž hodnotu lze nalézt v tabulkách

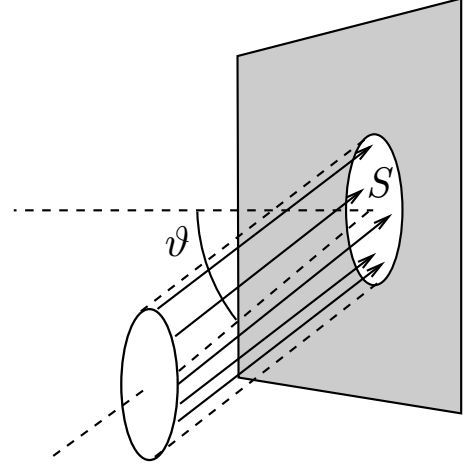
$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx = \frac{\pi^4}{15},$$

takže

$$E(T, V) = aVT^4, \quad \text{kde} \quad a = \frac{\pi^2 k^4}{15c^3 \hbar^3} \doteq 7,56 \cdot 10^{-16} \text{ J} \cdot \text{m}^{-3} \cdot \text{K}^{-4}. \quad (5.10)$$

5.1.6 Stefanův-Boltzmannův zákon

Bude-li v dutině malý otvor o ploše S , bude zajímavou charakteristikou také intenzita unikajícího záření. Uvažujme množství energie, které za jednotku času unikne otvorem dutiny. Záření v dutině je izotropní, takže množství energie šířící se uvnitř dutiny do prostorového úhlu $d\Omega$ je tomuto úhlu úměrné, tj. lze psát $E(V, \Omega) d\Omega$. Z dutiny unikne energie záření, které se šíří ve směru otvoru a za danou časovou jednotku se k otvoru stihne dostat. Záření šířící se pod úhlem ϑ k normále otvoru se k otvoru dostane z objemu o velikosti $Sct \cos \vartheta$ (viz obr. 5.4); elementární prostorový úhel odpovídající směru ϑ, φ je $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$, takže celková uniklá energie za čas t bude



Obr. 5.4: Záření z dutiny, které unikne otvorem o ploše S (upraveno podle [38])

$$E(t) = \frac{aSctT^4}{4\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \sin \vartheta \cos \vartheta d\vartheta = \frac{1}{4} aSctT^4.$$

Intenzitu záření definujeme jako množství vyzářené energie vyzářené na povrchu zdroje za jednotku času jednotkou plochy, tedy

$$I = \frac{E}{tS} = \frac{ac}{4} T^4 = \sigma T^4, \quad (5.11)$$

kde

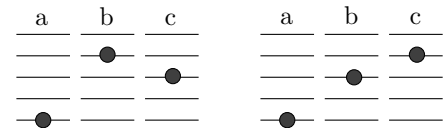
$$\sigma = \frac{ac}{4} = \frac{\pi^2 k^4}{60c^3 \hbar^3} \doteq 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4} \quad (5.12)$$

je *Stefanova-Boltzmannova konstanta* a vztah (5.11) je *Stefanův-Boltzmannův zákon*.

5.2 Kvantová statistická rozdělení

5.2.1 Nerozlišitelnost částic

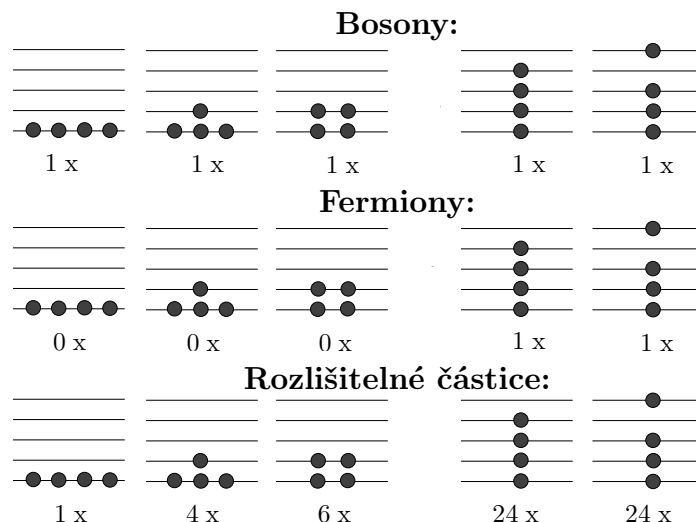
Postulát kvantové mechaniky říká, že totožné částice jsou principiálně nerozlišitelné. Znamená to mimo jiné, že stavy znázorněné na obr. 5.5 jsou dva různé stavy, pokud jsou částice a, b, c rozlišitelné, ale jedná se o jeden a tentýž stav, pokud a, b, c jsou tři totožné částice. Přesněji vyjádřeno, vlnové funkce soustavy totožných částic musejí splňovat určité požadavky symetrie.



Obr. 5.5: Dva stavy s třemi částicemi a, b, c (převzato z [38])

Vlnové funkce částic s celočíselným spinem (*bosonů*) jsou symetrické vzhledem k záměně dvou částic, tedy $\psi(r_1, r_2, r_3, \dots) = \psi(r_1, r_2, r_3, \dots)$ atd. Vlnové funkce částic s poločíselným spinem (*fermionů*) jsou naproti tomu antisymetrické, tedy při záměně dvou částic mění znaménko na opačné, tj. $\psi(r_1, r_2, r_3, \dots) = -\psi(r_1, r_2, r_3, \dots)$ atd.

Jak se tato vlastnost projeví na fyzikálních vlastnostech? Uvažujme pro jednoduchost čtyři totožné bosony, čtyři totožné fermiony a čtyři rozlišitelné částice a zkoumejme možná obsazení jejich kvantových stavů:



Lze očekávat, že bosony budou mít tendenci sdružovat se na nejnižších energetických hladinách. Abychom se o tom přesvědčili, musíme najít odpověď na otázku – jaká bude střední hodnota $\overline{n_k}$ počtu částic v k -tém stavu.

5.2.2 Matematický popis systémů totožných částic

Pro rozlišitelné částice platí $Z_N = Z_1^N$. Jako první odhad statistické sumy pro nerozlišitelné částice lze použít vztah korigující permutace mezi částicemi (4.6)

$$Z_N = \frac{1}{N!} Z_1^N.$$

Tento vztah je ale použitelný pouze tehdy, je-li velice malá pravděpodobnost toho, že dvě částice (nebo více částic) budou ve stejném stavu – tedy při velkých teplotách a nízkých hustotách částic. Výborně tak vyhovuje pro popis molekulových plynů za normálních teplot. Při vysokých hustotách (např. pro elektronový plyn v kovech) nebo nízkých teplotách (např. supratekuté helium při teplotách okolo 3 K nebo opticky chlazené atomární plyny s teplotami řádově 100 nK) je však nepoužitelný. Musíme zvolit jiný přístup.

Reprezentace kvantového stavu pomocí obsazovacích čísel

Místo symetrizované (tedy bosonové) vlnové funkce ve tvaru

$$\Psi(x_1, x_2, x_3) = A [\psi_1(x_1) \psi_1(x_2) \psi_2(x_3) + \psi_1(x_1) \psi_1(x_3) \psi_2(x_2) + \psi_1(x_2) \psi_1(x_3) \psi_2(x_1)]$$

lze jednodušeji psát

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} 2 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \end{pmatrix},$$

což znamená, že dvě částice se nacházejí ve stavu ψ_1 , jedna částice je ve stavu ψ_2 a další stavy jsou neobsazené. Celková energie stavu

$$|\Psi\rangle = \begin{pmatrix} n_1 \\ n_2 \\ n_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

pak je

$$E = n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots = \sum_k n_k E_k,$$

kde $n_1 + n_2 + \dots = N$ je počet všech částic. Statistická suma takového systému pak má tvar

$$Z_N = \sum_{n_1+n_2+\dots=N} e^{-\beta(n_1 E_1+n_2 E_2+\dots)} = \sum_{\sum_k n_k=N} \prod_{k=0}^{\infty} e^{-\beta n_k E_k}. \quad (5.13)$$

Výpočet konkrétní hodnoty tohoto výrazu je však obvykle prakticky nemožný. Pokud by se mohlo počítat přes všechny hodnoty n_k bez podmínky $\sum_k n_k = N$, bylo by možno zaměnit pořadí sumace a násobení. V takovém případě by se statistická suma vypočítala poměrně jednoduše, podmínka $\sum_k n_k = N$ by však nemohla být zachována.

Statistická suma

Pro praktické výpočty se používá kompromis – uvažuje se systém s proměnným počtem částic (tedy patřící do grandkanonického ensamble), pro který však budeme požadovat kromě zadané teploty také *daný střední počet částic* N . Uvažujeme tedy situaci, kdy počet částic není zadán, ale může fluktuovat kolem své střední hodnoty. Relativní fluktuace však klesají jako $1/\sqrt{N}$ a jsou tedy v případě makroskopických systémů zanedbatelné.

Systém částic je v rovnováze s rezervoárem částic, částice mohou přecházet oběma směry. Rovnováhy bude dosaženo, pokud chemický potenciál μ částic v systému je roven chemickému potenciálu částic v rezervoáru. Hodnota μ se získá jako Lagrangeův multiplikátor při maximalizaci počtu realizací stavů v množině identických systémů za podmínky fixované celkové energie a fixovaného celkového počtu částic. Pro systém, který si může s rezervoárem vyměňovat jeden druh částic, je pravděpodobnost realizace kvantového stavu k s energií E_k v systému s N částicemi je podle (3.28)

$$P_k(N) = \frac{1}{Z(\beta, \mu)} e^{-\beta(E_k - \mu N)},$$

kde

$$Z(\beta, \mu) = \sum_{k,N} e^{-\beta(E_k - \mu N)}$$

je *grandkanonická statistická suma*.

Fyzikální význam *chemického potenciálu* μ lze interpretovat tak, že jde o energii, kterou je potřeba ze systému odebrat, aby při přidání jedné částice zůstala entropie konstantní. Pokud si soustava vyměňuje s rezervoárem více druhů částic, je grandkanonická statistická suma

$$Z(\beta, \mu_1, \mu_2, \dots) = \sum_{k, N_1, N_2, \dots} e^{-\beta(E_k - \mu_1 N_1 - \mu_2 N_2 - \dots - \mu_k N_k - \dots)}, \quad (5.14)$$

kde N_k je počet částic k -tého druhu.

Použijme nyní formalismus grandkanonického ensamble pro kvantové systémy totožných neinteragujících částic, které mohou být v kvantových stavech $1, 2, \dots, k, \dots$ s energiemi $E_1, E_2, \dots, E_k, \dots$

Pokud je n_1 částic v prvním kvantovém stavu, n_2 ve druhém stavu atd., bude celková energie systému $n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots + n_k E_k + \dots$. Grandkanonická suma této soustavy pak vychází

$$Z = \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_k} \dots e^{-\beta[(n_1 E_1 + n_2 E_2 + \dots) - \mu(n_1 + n_2 + \dots)]},$$

což lze přepsat ve tvaru

$$Z = \sum_{n_1} e^{-\beta(E_1 - \mu)n_1} \sum_{n_2} e^{-\beta(E_2 - \mu)n_2} \dots \sum_{n_k} e^{-\beta(E_k - \mu)n_k} \dots$$

Pro střední počet částic v k -tém stavu pak dostáváme

$$\begin{aligned} \bar{n}_k &= \frac{1}{Z} \sum_{n_1} \sum_{n_2} \dots \sum_{n_k} \dots n_k e^{-\beta[n_1(E_1 - \mu) + n_2(E_2 - \mu) + \dots + n_k(E_k - \mu) \dots]} = \\ &= \frac{\sum_{n_1} e^{-\beta(E_1 - \mu)n_1} \sum_{n_2} e^{-\beta(E_2 - \mu)n_2} \dots \sum_{n_k} n_k e^{-\beta(E_k - \mu)n_k} \dots}{\sum_{n_1} e^{-\beta(E_1 - \mu)n_1} \sum_{n_2} e^{-\beta(E_2 - \mu)n_2} \dots \sum_{n_k} e^{-\beta(E_k - \mu)n_k} \dots} = \\ &= \frac{\sum_{n_k} n_k e^{-\beta(E_k - \mu)n_k}}{\sum_{n_k} e^{-\beta(E_k - \mu)n_k}}. \end{aligned}$$

Podobně jako v případě kanonického ensamble, pro získání této střední hodnoty není nutno provádět dvojí sumaci. Pokud vypočteme

$$Z_k = \sum_{n_k} e^{-\beta(E_k - \mu)n_k}, \quad (5.15)$$

dostáváme

$$\bar{n}_k = -\frac{1}{Z_k (E_k - \mu)} \frac{\partial Z_k}{\partial \beta}. \quad (5.16)$$

Parametr μ pak získáme z požadavku, že celkový střední počet všech částic $\bar{N} = \sum_k \bar{n}_k$ má být roven počtu částic v systému. Pro dva druhy kvantových částic – bosony a fermiony – vypadá součet odlišně.

U *bosonů* může být v k -tém stavu libovolně mnoho částic, tedy $n_k = 0, 1, 2, \dots, \infty$. Sumací v rovnici (5.15) dostáváme

$$Z_k^{\text{BE}} = \sum_{n_k=0}^{\infty} e^{-\beta(E_k - \mu)n_k} = \frac{1}{1 - e^{-\beta(E_k - \mu)}}.$$

Aby tento zlomek byl konečný pro všechny hodnoty energií, je třeba aby $\mu \leq 0$. Derivací jako v rovnici (5.16) pak získáme

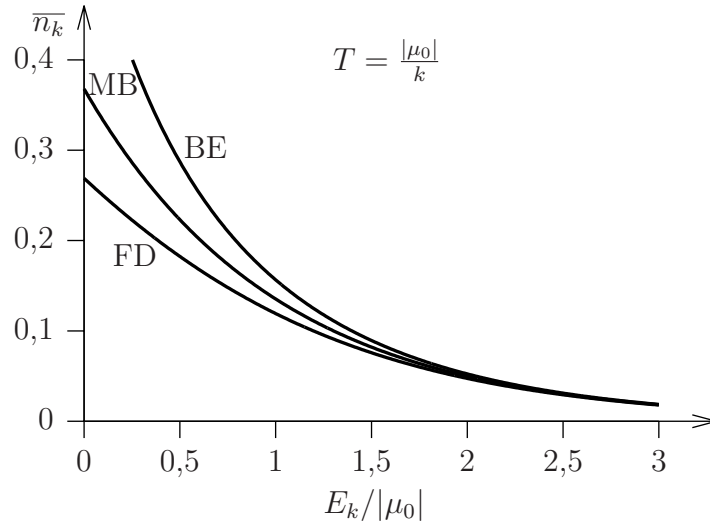
$$\bar{n}_k^{\text{BE}} = \frac{1}{e^{\beta(E_k - \mu)} - 1}, \quad (5.17)$$

což je *Boseho-Einsteinovo rozdělení*.¹ Udává střední počet bosonů připadajících na jeden kvantový stav s energií E_k při teplotě $T = 1/(k\beta)$, přičemž hodnotu μ lze určit ze znalosti celkového počtu částic v systému.

Pro *fermiony* platí, že v každém kvantovém stavu může být pouze 0 nebo 1 částice, sumace v rovnici (5.15) má tedy pouze dva členy

$$Z_k^{\text{FD}} = \sum_{n_k=0}^1 e^{-\beta(E_k - \mu)n_k} = 1 + e^{-\beta(E_k - \mu)}.$$

¹V české literatuře se někdy také užívá Boseovo-Einsteinovo resp. Fermiovo-Diracovo rozdělení (viz např. [22, 35]).



Obr. 5.6: Srovnání Bose-Einsteinova (BE), Fermi-Diracova (FD) a Maxwellova-Boltzmannova (MB) rozdělení při vyšších teplotách

Derivací pak získáme

$$\bar{n}_k^{\text{FD}} = \frac{1}{e^{\beta(E_k - \mu)} + 1}, \quad (5.18)$$

což je *Fermiho-Diracovo rozdělení*. U tohoto rozdělení může být parametr μ jak kladný tak i záporný, tomuto parametru se říká *Fermiho energie* μ_F . V úvahách bývá často užitečné zavést tzv. *Fermiho teplotu* T_F vztahem $T_F = \mu_F/k$.

Pro srovnání připomeňme, že u systému rozlišitelných částic platí

$$\bar{n}_k = N p_k = \frac{N}{Z_1} e^{-\beta E_k}$$

a když formálně položíme $\mu \equiv \frac{1}{\beta} \ln \left(\frac{N}{Z_1} \right)$ dostáváme *Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení*

$$\bar{n}_k^{\text{MB}} = \frac{1}{e^{\beta(E_k - \mu)}}. \quad (5.19)$$

Vlastnosti jednotlivých rozdělení

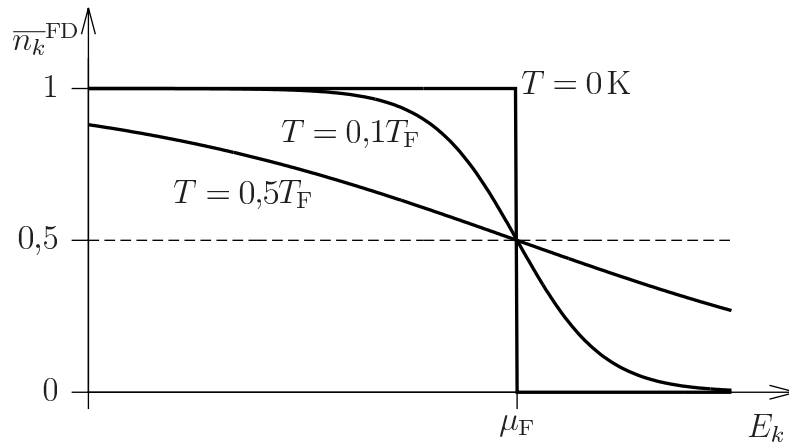
Vidíme, že z formálního hlediska jsou výrazy pro odvozená rozdělení velmi podobné, srovnajme proto jejich vlastnosti. Pokud je splněna podmínka $e^{\beta(E_k - \mu)} \gg 1$, lze zanedbat jedničku ve jmenovateli oproti exponenciále; všechna tři rozdělení pak dávají přibližně stejné výsledky

$$\bar{n}_k^{\text{BE}} \approx \bar{n}_k^{\text{FD}} \approx \bar{n}_k^{\text{MB}}.$$

Dochází k tomu, má-li studovaný systém vysoký počet kvantových stavů, malý počet částic (např. řídký plyn) nebo při vysokých teplotách, kdy jsou částice excitovány do vysokých energetických stavů. Hodnota chemického potenciálu μ přitom sama závisí na teplotě, v obrázku 5.6 proto vystupuje parametr $\mu_0 \equiv \mu(T = 0)$.

U Fermiho-Diracova rozdělení platí, že $e^{\beta(E_k - \mu)} \geq 0$ a tím pádem

$$\bar{n}_k^{\text{FD}} \leq 1,$$



Obr. 5.7: Fermiho-Diracovo rozdělení při různých teplotách

což je v souladu s Pauliho vylučovacím principem, podle kterého nemůže být jeden kvantový stav obsazen více než jedním fermionem (viz obr. 5.7).

Při teplotě 0 K bude $\beta \rightarrow \infty$ a

$$e^{\beta(E_k - \mu)} \rightarrow \begin{cases} \infty & \text{pro } E_k > \mu \\ 0 & \text{pro } E_k < \mu \end{cases},$$

z čehož plyne, že při $T \rightarrow 0$

$$\overline{n}_k^{\text{FD}} \rightarrow \begin{cases} 0 & \text{pro } E_k > \mu \\ 1 & \text{pro } E_k < \mu \end{cases};$$

při nulové teplotě má tedy $\mu = \mu_F$ význam poslední obsazené energetické hladiny. Při nenulových teplotách $T > T_0$ platí pro stav s energií $E_k = \mu_F$

$$\overline{n}_k^{\text{FD}} = \frac{1}{e^{\beta \cdot 0} + 1} = \frac{1}{2};$$

to odpovídá i případům znázorněným na obr. 5.7.

5.3 Vlastnosti ideálního fermionového a bosonového plynu

Zanedbáváme-li interakci mezi částicemi (jako u ideálního plynu v klasické termodynamice), označujeme systém fermionů nebo bosonů jako ideální fermionový nebo bosonový plyn. Přitom je však třeba uvažovat spin částic a jejich nerozlišitelnost. Částice s celočíselným spinem se řídí Boseho-Einsteinovým rozdělením, zatímco částice s poločíslným spinem se řídí Fermiho-Diracovým rozdělením. Většinu nejdůležitějších vztahů pro oba typy částic lze získat ze vztahu

$$n(E)dE = g(E)f(E)dE,$$

kde $n(E)dE$ je počet částic s energiemi v intervalu $(E, E + dE)$; $f(E)$ nyní označuje příslušnou *rozdělovací funkci*, tj.

$$f(E) = \frac{1}{e^{\beta(E-\mu)} \pm 1} \quad (5.20)$$

a $g(E)dE$ je *degenerační faktor*, tedy počet stavů s energiemi v intervalu $(E, E + dE)$. Funkce $g(E)$ závisí na konkrétním typu vnějšího potenciálového pole, zatímco $f(E)$ je stejná pro všechny částice daného typu. Při tomto popisu vycházíme ze skutečnosti, že vzdálenosti mezi energetickými hladinami jsou malé ve srovnání s typickou energií kT , takže energetické spektrum systémů můžeme

považovat za *kvazispojité*. Pak ztrácí smysl hovořit o středním počtu částic na jednotlivých diskrétních hladinách, ale pracujeme s výše uvedeným počtem částic s energiemi v dostatečně malém intervalu. Někdy bývá tento model označován jako *kvaziklasické přiblížení*.

5.3.1 Degenerační faktor

Určeme degenerační faktor $g(E)dE$ pro ideální nerelativistický plyn uzavřený v krychli o hraně délky L . Nejprve určíme počet stavů s energií menší než E , označme ho $N(E)$. Pro energii jako funkci kvantových čísel n_x, n_y, n_z platí

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

Všechny kvantové stavy (s výjimkou spinu) lze tedy znázornit pomocí bodů třírozměrného prostoru se souřadnicemi (n_x, n_y, n_z) . Počet stavů s energií menší než E pak odpovídá objemu osminy koule s poloměrem n_{\max} vynásobenému spinovou multiplicitou g každého stavu. Máme proto

$$E = \frac{p^2}{2m} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n_{\max}^2$$

a odtud

$$n_{\max} = \frac{L}{\pi \hbar} \sqrt{2mE}.$$

Pro počet stavů s energií menší než E tak vychází

$$\mathcal{N} = g \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n_{\max}^3 = \frac{g}{6} \pi (2m)^{3/2} \frac{V}{\pi^3 \hbar^3} E^{3/2}.$$

Derivací tohoto výrazu pak dostaneme příslušný degenerační faktor

$$d\mathcal{N}(E) = g(E) dE = \frac{g}{4} (2m)^{3/2} \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} E^{1/2} dE \quad (5.21)$$

Faktor g říká, kolik spinových stavů přísluší stavu popsanému kvantovými čísly (n_x, n_y, n_z) , např. pro elektrony se spinem $1/2$ klademe $g = 2$.

Fermiho energie a střední energie při nulové teplotě

Určeme hodnotu Fermiho energie μ_F pro elektrony v kovu (tedy nerelativistické částice) při teplotě $T = 0$ K, je-li dán počet elektronů v objemové jednotce n_0 . Vyjdeme z podmínky pro celkový počet částic v jednotkovém objemu

$$n_0 = \frac{N}{V} = \frac{1}{V} \int_0^\infty g(E) f(E) dE = \frac{g}{4} \frac{(2m)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\mu_F} E^{1/2} dE = \frac{g}{4} \frac{(2m)^{3/2}}{\pi^2 \hbar^3} \frac{1}{3} \mu_F^{3/2}, \quad (5.22)$$

odkud plyne

$$\mu_F = \left(\frac{6n_0 \pi^2}{g} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m}. \quad (5.23)$$

Typické hodnoty Fermiho energie pro kovy se pohybují v jednotkách nebo desítkách eV (pro sodík $\mu_F = 3,24$ eV, odpovídající Fermiho teplota $T_F = \mu_F/k = 3,77 \cdot 10^4$ K; další hodnoty lze nalézt např. na <http://hyperphysics.phy-astr.gsu.edu/hbase/tables/fermi.html>). Při běžných pokojových teplotách je tak splněna podmínka $T \ll T_F$ a z obr. 5.7 je zřejmé, že průběh rozdělovací funkce \bar{n}_k^{FD} jen málo liší od průběhu při 0 K; u stavů nad μ_F střední počet částic s rostoucí energií

hladiny rychle klesá k nule, což prakticky znamená, že obsazeny jsou jen stavy těsně nad touto úrovní.

Jednoduchým výpočtem nyní můžeme určit střední energii fermionu při teplotě $T = 0$ K, je-li dána Fermiho energie μ_F . Jelikož jejich celkový počet je dán součinem $Vn_0 \int g(E)f(E)dE$ postupně získáme

$$\bar{\varepsilon} = \frac{1}{Vn_0} \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE = \frac{\int_0^{\mu_F} E^{3/2} dE}{\int_0^{\mu_F} E^{1/2} dE} = \frac{3}{5} \mu_F. \quad (5.24)$$

Degenerační faktor pro ultrarelativistický plyn

Jako ultrarelativistické částice označuje takové, jejichž kinetická energie (a tím i jejich celková energie ε) je mnohem větší než jejich klidová energie $m_0 c^2$. Podle relativistického vztahu mezi energií a hybností

$$\varepsilon = \sqrt{p^2 c^2 + m_0^2 c^4} \quad (5.25)$$

pak zřejmě bude

$$\varepsilon \approx pc = c \frac{\pi \hbar}{L} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2}.$$

Podobně jako v předchozím případě vychází počet stavů s energií menší než E roven

$$\mathcal{N} = g \cdot \frac{1}{8} \cdot \frac{4}{3} \pi n_{\max}^3, \quad \text{kde ovšem nyní} \quad n_{\max} = \frac{LE}{\pi \hbar c}.$$

Kombinací obou vztahů získáme

$$\mathcal{N} = \frac{g V E^3}{6 \pi^3 \hbar^3}.$$

Derivací podle E pak získáme

$$g(E) = \frac{d\mathcal{N}}{dE} = \frac{g V E^2}{2 \pi^2 \hbar^3 c^3} \quad (5.26)$$

v souladu s degeneračním faktorem odvozeným pro fotony (5.2). Přiblížení ultrarelativistických částic platí pro částice s nulovou klidovou hmotností $m_0 \approx 0$, resp. pro částice, jejichž relativistická hmotnost ε/c^2 je mnohem větší než klidová hmotnost m_0 .

5.3.2 Energie a tlak ideálního fermionového a bosonového plynu

Vypočteme nyní střední energii a tlak ideálního bosonového a fermionového plynu. Pro nerelativistický plyn integrací přes energetické stavy s využitím (5.21) dostáváme

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE = \frac{g}{4} (2m)^{3/2} \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} \int_0^{\infty} E^{3/2} f(E) dE, \quad (5.27)$$

pro relativistický pak s využitím (5.26)

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE = \frac{g V}{2 \pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^{\infty} E^3 f(E) dE. \quad (5.28)$$

K odvození tlaku využijeme obvyklou představu nádoby tvaru kvádru se stěnami o ploše S kolmo na osu x ve vzdálenosti l od sebe. Při nárazu na stěny nádoby se x -ová složka hybnosti částice

změní o $2p_x$ a narazí opakovaně na jednu stěnu vždy po čase $2l/v_x$. Tlak vyvolaný na stěnu touto částicí pak bude

$$P_1 = \frac{\Delta p_x}{\Delta t S} = \frac{2p_x}{S} \cdot \frac{v_x}{2l} = \frac{p_x v_x}{V} = \frac{p_x^2}{mV}.$$

Celkový tlak P získáme integrací přes fázový prostor. Obecně platí, že pro střední počet částic v elementu fázového prostoru $d\Phi = d^3\mathbf{r}d^3\mathbf{p}$ lze psát

$$n(\Phi) = \frac{g}{h^3} f(E(\Phi)) d\Phi,$$

kde g je opět spinová multiplicita stavů. Pomocí tohoto vztahu lze také získat výše odvozené vztahy pro energii ideálního fermionového nebo bosonového plynu (postupem podobným jako při odvození (5.2)). Zde analogicky získáme celkový tlak P takového systému

$$\begin{aligned} P &= \int \frac{p_x^2}{mV} n(\Phi) d\Phi = \frac{g}{mh^3} \int p_x^2 f\left(\frac{p^2}{2m}\right) d^3\mathbf{p} d^3\mathbf{r} = \\ &= \frac{g}{mVh^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\vartheta \int_0^\infty p^2 \cos^2 \vartheta f\left(\frac{p^2}{2m}\right) p^2 \sin \vartheta dp d\vartheta d\varphi = \\ &= \frac{2\pi g}{mh^3} \int_0^\vartheta \cos^2 \vartheta \sin \vartheta d\vartheta \int_0^\infty p^4 f\left(\frac{p^2}{2m}\right) dp = \\ &= \frac{2\pi g}{mh^3} \cdot \frac{2}{3} \cdot (2m)^{5/2} \cdot \frac{1}{2} \int_0^\infty E^{3/2} f(E) dE = \\ &= \frac{2g(2m)^{3/2}}{3^4 \pi^2 h^3} \int_0^\infty E^{3/2} f(E) dE, \end{aligned}$$

kde jsme využili substituce $p = \sqrt{2mE}$, $dp = \frac{\sqrt{2m}}{2\sqrt{E}} dE$. Srovnáním s (5.27) pak odvodíme vztah

$$P = \frac{2\bar{E}}{3V}. \quad (5.29)$$

Analogicky postupujeme v ultrarelativistickém případě, kdy platí vztah mezi energií a hybností ve tvaru $E = pc$, $dE = cdp$ a příspěvek ke tlaku od jedné částice má tvar

$$P_1 = \frac{\Delta p_x}{\Delta t S} = \frac{2p \cos \vartheta}{\frac{2l}{c \cos \vartheta} S} = \frac{pc \cos^2 \vartheta}{V}.$$

Tlak ode všech částic pak vychází

$$\begin{aligned} P &= \int \frac{p_x c \cos^2 \vartheta}{V} n(\Phi) d\Phi = \\ &= \frac{gc}{h^3} \int_0^{2\pi} \int_0^\vartheta \int_0^\infty p \cos^2 \vartheta f\left(\frac{p^2}{2m}\right) p^2 \sin \vartheta dp d\vartheta d\varphi = \\ &= \frac{gc}{8\pi^3 h^3} 2\pi \frac{2}{3} \int_0^\infty p^3 f(pc) dp = \frac{gc}{6\pi^2 h^3 c^4} \int_0^\infty E^3 f(E) dE. \end{aligned}$$

Srovnáním s (5.28) zjistíme, že

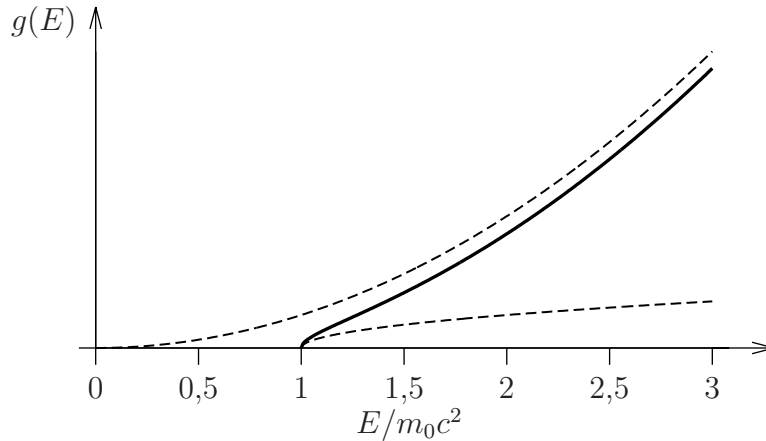
$$P = \frac{1}{3} \bar{E}. \quad (5.30)$$

Vztah (5.30) platí i pro fotony a vyjadřuje tak důležitou souvislost mezi tlakem záření a hustotou energie.

Při určování počtu stavů připadajících na interval energií $(E, E + dE)$, tedy $g(E)dE$ jsme uvažovali zvláště nerelativistický případ (5.21), kdy je kinetická energie úměrná p^2 a zvláště ultrarelativistický případ (5.26), kdy je energie úměrná p . V nerelativistickém přiblížení je $g(E) \propto E^{1/2}$, pro částice s rychlostí světla je zase $g(E) \propto E^2$. V obecném případě má funkční závislost $g(E)$ tvar jako na obr. 5.8, jež odpovídá vyjádření

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2 \hbar^3 c^3} (E - m_0 c^2)^{1/2} (E + m_0 c^2)^{1/2} E.$$

Lze ukázat, že pro $E_{\text{kin}} \ll m_0 c^2$, resp. pro $E \gg m_0 c^2$ přechází k uvedeným přibližným tvarům. Inflexní bod získáme z podmínky $g''(E) = 0$ pro $E^i = \sqrt{3/2} m_0 c^2 \approx 1,22 m_0 c^2$.



Obr. 5.8: Obecná závislost degeneračního faktoru na celkové energii částice

5.4 Fermionový plyn

U této části ukážeme některé aplikace modelu ideálního fermionového plynu, jež mají praktické důsledky a mohou být konfrontovány s experimentem.

5.4.1 Tlak elektronů v kovech

Odhadněme tlak elektronů v kovech při $T = 0$ K. Z klidové hmotnosti elektronu $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31}$ kg vyplývá i jejich klidová energie $m_e c^2 \approx 0,51$ MeV. Protože Fermiho energie μ_F pro kovy dosahuje hodnot v jednotkách a desítkách elektronvoltů, lze elektrony v tomto případě považovat za nerelativistické částice, pro něž podle (5.24) a (5.29) platí

$$P = \frac{2}{3} \bar{E} = \frac{2}{3} n_0 \frac{3}{5} \mu_F = \frac{2}{5} n_0 \mu_F. \quad (5.31)$$

Pro přibližné hodnoty $n_0 \approx 10^{30} \text{ m}^{-3}$, $\mu_F \approx 10^{-19} \text{ J}$ vychází odhad tlaku $P \approx 10^{11} \text{ Pa}$, což je poměrně vysoká hodnota. K výraznému stlačení kovů bychom proto museli vyvinout obrovský tlak.

5.4.2 Velikost bílých trpaslíků

Bílý trpaslík je hvězda, která spotřebovala své jaderné palivo a tlak záření a atomového plynu nedokázal zabránit gravitačnímu hroucení. Dalšímu hroucení nyní brání tlak degenerovaného elektronového plynu. Čistě na základě vztahů (5.23) a (5.31) i odhadu gravitačního tlaku můžeme najít souvislost mezi hmotností a velikostí bílého trpaslíka a také řádově odhadnout velikost takového objektu, pokud by měl hmotnost Slunce (právě naše Slunce by se v daleké budoucnosti mělo bílým trpaslíkem stát). Pro tlak elektronového plynu tedy máme

$$P = \frac{2}{5}n_0\mu_F = \frac{2}{5}n_0 \left(\frac{6n_0\pi^2}{g} \right)^{2/3} \frac{\hbar^2}{2m_e} \approx \frac{\hbar^2}{m_e} n_0^{5/3}.$$

Protože nám jde pouze o řádový odhad, neuvažujeme číselné faktory, jejichž výsledná hodnota je řádu 1. Tlak, který vyvolává gravitace hvězdy lze řádově odhadnout z velikosti gravitační síly $\approx \varkappa M^2/R^2$, kde \varkappa je gravitační konstanta, M hmotnost hvězdy a R její poloměr. Síla působí na plochu $\approx R^2$, takže vyvolává tlak

$$P \approx \frac{\varkappa M^2}{R^4}.$$

Počet elektronů na jednotku objemu dostaneme z úvahy, že elektronů je ve hvězdě zhruba stejně jako protonů a neutronů, které tvoří hlavní část hmotnosti tělesa, tedy počet elektronů je zhruba $\approx M/m_p$, kde m_p je hmotnost protonu; hustotu elektronů pak odhadneme na $n_0 \approx M/(m_p R^3)$. Porovnáním vztahů pro tlak dostaneme

$$\frac{\varkappa M^2}{R^4} \approx \frac{\hbar^2}{m_e} n_0^{5/3} \approx \frac{\hbar^2 M^{5/3}}{m_e m_p^{5/3} R^5},$$

odkud získáme odhad pro poloměr bílého trpaslíka

$$R \approx \frac{\hbar^2}{\varkappa m_e m_p^{5/3} M^{1/3}}.$$

Přesnější výpočet by byl pochopitelně komplikovanější, ale i z této jednoduché úvahy plyne tvar závislosti $R \propto 1/M^{1/3}$, tedy s rostoucí hmotností se velikost bílého trpaslíka zmenšuje. Pro sluneční hmotnost $M_\odot = 2 \cdot 10^{30}$ kg vychází číselná hodnota $R \approx 10^7$ m, tedy 10 000 km, což je řádově velikost Země. To je vcelku slušný odhad: např. bílý trpaslík Sirius B, který má zhruba stejnou hmotnost jako Slunce, má poloměr zhruba 5 900 km. Poznamenejme ještě, že uvedený vztah nemůže platit pro libovolné hmotnosti; nad tzv. Chandrasekharovou mezí (zhruba $1,4M_\odot$) již ani tlak elektronového plynu nedokáže zabránit hroucení hvězdy, elektrony s protony splynou v neutrony a vznikne ještě kompaktnější objekt – neutronová hvězda (případně černá díra).

5.4.3 Závislost Fermiho energie, vnitřní energie, tepelné kapacity a tlaku ideálního fermionového plynu na teplotě

Budeme uvažovat teploty dostatečně nízké, tj. $T \ll T_F$, což pro elektrony v kovech znamená teploty nižší než řádově desetitisíce kelvinů. Při nenulových teplotách již nebude integrace tak snadná, jako při odvození vztahu (5.23). Fermiho energii však opět dostaneme z požadavku na počet fermionů

$$N = \int_0^\infty g(E)f(E)dE = C \int_0^\infty \frac{E^{1/2}}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} dE, \quad (5.32)$$

kde podle (5.21)

$$C = \frac{(2m)^{2/3} V}{2\pi^2 \hbar^3}.$$

Podobně můžeme získat vztah pro celkovou energii elektronového plynu

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E g(E) f(E) dE = C \int_0^{\infty} \frac{E^{3/2}}{e^{\frac{E-\mu}{kT}} + 1} dE. \quad (5.33)$$

Pokud se nám podaří vypočítat integrál (5.32), získáme vztah pro $\mu(n_0, T)$, tedy závislost chemického potenciálu na hustotě počtu částic a na teplotě. S využitím této závislosti a výpočtem integrálu (5.33) získáme závislost celkové energie fermionového plynu na teplotě a derivací podle teploty tepelnou kapacitu. To nám umožní např. zjistit, jak přispívá elektronový plyn k tepelné kapacitě kovů. Víme také, že u ideálních plynů spolu jednoduše souvisí energie a tlak, takže budeme moci získat stavovou rovnici pro takovýto plyn.

Oba zmiňované integrály jsou příliš komplikované na exaktní výpočet, proto využijeme přibližný postup, který dobře vyhovuje pro $\mu \gg kT$ Upravme nejprve obecný integrál ve tvaru

$$\int_0^{\infty} \frac{h(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE. \quad (5.34)$$

Pokusíme se jej vyjádřit jako snadný integrál platný pro nulovou teplotu, tedy

$$\int_0^{\mu} h(E) dE$$

plus nějaká malá korekce. Toho dosáhneme zápisem

$$\begin{aligned} \frac{h(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE &= h(E) + \frac{h(E) - h(E) [e^{\beta(E-\mu)} + 1]}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} = h(E) - \frac{h(E)e^{\beta(E-\mu)}}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} = \\ &= h(E) - \frac{h(E)}{e^{-\beta(E-\mu)} + 1}. \end{aligned}$$

Hledaný integrál (5.34) tedy můžeme psát ve tvaru

$$\int_0^{\infty} \frac{h(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE = \int_0^{\mu} \left[h(E) - \frac{h(E)}{e^{-\beta(E-\mu)} + 1} \right] dE + \int_{\mu}^{\infty} \frac{h(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE.$$

Zavedme ve druhém integrálu na pravé straně substituci $x = -\beta(E - \mu) = \beta(\mu - E)$ a ve třetím integrálu substituci $x = \beta(E - \mu)$, čímž dostaneme

$$\int_0^{\infty} \frac{h(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE = \int_0^{\mu} h(E) dE - \frac{1}{\beta} \int_0^{\beta\mu} \frac{h(\mu - \frac{x}{\beta})}{e^x + 1} dx + \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} \frac{h(\mu + \frac{x}{\beta})}{e^x + 1} dx.$$

Dva poslední integrály mají různou horní mez, nicméně příspěvek integrandu bude nezanedbatelný jen pro velmi malé hodnoty x , tím pádem lze v obou případech integrovat ve stejných mezích, aniž by se příliš ovlivnil výsledek. Můžeme tedy psát

$$\int_0^{\infty} \frac{h(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE \approx \int_0^{\mu} h(E) dE - \frac{1}{\beta} \int_0^{\infty} \frac{h(\mu + \frac{x}{\beta}) - h(\mu - \frac{x}{\beta})}{e^x + 1} dx.$$

Protože nezanedbatelný příspěvek k integrálu pochází pouze od malých hodnot x , pro něž $x/\beta \ll \mu$, můžeme funkci $h(\mu \pm x/\beta)$ rozvinout do Taylorova rozvoje a omezit se na několik málo prvních členů

$$h\left(\mu \pm \frac{x}{\beta}\right) = h(\mu) \pm h'(\mu)\frac{x}{\beta} + \frac{h''(\mu)}{2}\left(\frac{x}{\beta}\right)^2 \pm \frac{h'''(\mu)}{6}\left(\frac{x}{\beta}\right)^3 + \dots$$

a výsledný integrál je

$$\int_0^{\infty} \frac{h(E)}{e^{\beta(E-\mu)} + 1} dE \approx \int_0^{\mu} h(E) dE + \frac{2h'(\mu)}{\beta^2} \int_0^{\infty} \frac{x}{e^x + 1} dx + \frac{h'''(\mu)}{3\beta^4} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x + 1} dx + \dots$$

Poslední dva integrály mohou být nalezeny v tabulkách integrálů, případně vyčísleny numericky s výsledkem

$$\int_0^{\infty} \frac{x}{e^x + 1} dx = \frac{\pi^2}{12}, \quad \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x + 1} dx = \frac{7\pi^4}{120}.$$

Nyní již máme všechny výsledky potřebné pro získání teplotní závislosti parametrů μ , \bar{E} a tepelné kapacity C_V . Pro získání Fermiho energie z integrálu (5.32) za $h(E)$ dosadíme $h(E) = E^{1/2}$, tedy $h'(\mu) = E^{-1/2}/2$ a $h'''(\mu) = 3E^{-5/2}/8$. Budeme-li uvažovat nejvýše kvadratické členy v T , získáme

$$N \approx C \left(\frac{2}{3}\mu^{3/2} + \frac{\pi^2}{12} \frac{(kT)^2}{\mu^{1/2}} \right) = \frac{2}{3} C \mu^{3/2} \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right].$$

Srovnáním s (5.22) odkud plyne

$$\mu_F \approx \mu \left[1 + \frac{\pi^2}{8} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]^{2/3} \approx \mu \left[1 + \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right]$$

a

$$\mu \approx \mu_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{kT}{\mu} \right)^2 \right] = \mu_F \left[1 - \frac{\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right],$$

kde μ_F je Fermiho energie při nulové teplotě daná vztahem (5.23) a $T_F = \mu_F/k$ Fermiho teplota.

Podobným způsobem můžeme získat další veličiny, např.

$$\begin{aligned} \bar{E} &\approx \frac{3}{5} N \mu_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right], \\ C_V &= \left(\frac{\partial \bar{E}}{\partial T} \right)_V \approx \frac{\pi^2}{2} N k \frac{T}{T_F}, \\ P &= \frac{2}{3} \frac{\bar{E}}{V} \approx \frac{2}{5} \frac{N}{V} \mu_F \left[1 + \frac{5\pi^2}{12} \left(\frac{T}{T_F} \right)^2 \right]. \end{aligned}$$

Z těchto výsledků je především zajímavý vztah pro tepelnou kapacitu, který je pro nízké teploty (což se týká i pokojové teploty, která je typicky mnohem nižší než Fermiho teplota) přímo úměrný teplotě. Je-li např. $T_F = 3 \cdot 10^4$ K, pak za pokojové teploty tepelná kapacita elektronů je zhruba $0,01(\pi^2/2)Nk$, zatímco tepelná kapacita krystalové mřížky (při platnosti Dulongova-Petitova zákona) je $3Nk$, takže volné elektrony přispívají jen zhruba jedním procentem k celkové tepelné kapacitě kovu. Pokud by se elektronový plyn choval stejně jako klasický ideální plyn, přispíval by řádově stejnou hodnotou jako mřížka. Důležitý je též průběh tepelné kapacity při nízkých teplotách, kdy

tepelná kapacita mřížky klesá k nule jako T^3 , tedy mnohem rychleji než lineárně, bude za velmi nízkých teplot příspěvek elektronového plynu k tepelné kapacitě kovu dominantní.

Tlak fermionů je nenulový i při nulové teplotě, toho jsme využili také při odhadu velikosti bílého trpaslíka. Lze tomu intuitivně rozumět na základě Pauliho principu a relace neurčitosti – fermiony musí obsazovat různé kvantové stavy. Můžeme si představit fázový prostor rozdělený na buňky o rozměrech Δx a Δp_x na každý stupeň volnosti, přičemž v každé buňce sedí jedna částice. Pokud bychom chtěli u takového systému zmenšit objem, musíme snížit Δx , což při zachování relací neurčitosti vede ke zvýšení Δp_x a tedy i ke zvýšení kinetické energie. Aby částice v systému zvýšily kinetickou energii, musíme konat práci, tedy při zmenšování objemu působit proti vzdorující síle. Zde je tedy původ tlaku fermionového plynu. Naproti tomu bosony mohou při nulové teplotě všechny „sedět“ ve stejném základním jednočásticovém stavu. Jsou-li drženy v nádobě běžné velikosti, je jejich tlak plynoucí z relací neurčitosti zcela zanedbatelný.

5.5 Boseho-Einsteinova kondenzace

5.5.1 Od teorie k experimentu

Ačkoliv teoretické základy Boseho-Einsteinovy kondenzace byly položeny před více než 80 lety, experimentální realizace tohoto pozoruhodného kvantového jevu je teprve nedávná a celá oblast bosonové kondenzace řídkých plynů nyní prochází velice bouřlivým vývojem.

Teoretické počátky stojí v práci indického fyzika S. Boseho, který roku 1924 přišel s nápadem, jak odvodit Planckův vyzařovací zákon zcela jiným způsobem, než jak to udělal ve svém původním příspěvku Planck. Namísto představy, že záření je soubor harmonických oscilátorů v tepelné rovnováze, uvažoval záření jako plyn nerozlišitelných nehmotných částic. Bose své odvození poslal Einsteinovi s prosbou o komentář. Tomu se jeho přístup velmi líbil, Boseho text přeložil z angličtiny do tehdejšího jazyka vědy němčiny a nechal publikovat v *Zeitschrift der Physik*. Poté Einstein myšlenku rozpracoval a rozšířil na systémy hmotných nerozlišitelných částic, jejichž počet se zachovává (v následujícím formalismu to odpovídá zobecnění systému z případu s nulovým chemickým potenciálem na nenulový). Na rozdíl od systémů rozlišitelných částic vykazuje systém bosonů za nízkých teplot zvláštní vlastnosti — částice mají tendenci se v mnohem větší míře shlukovat (kondenzovat) v nejnižším energetickém stavu. To se projeví u některých termodynamických veličin (např. v závislosti tepelné kapacity na teplotě) i v chování, kdy makroskopický systém vykazuje vlastnosti odpovídající normálně jednočásticové vlnové funkci.

Některé bosonové systémy vykazují vlastnosti, jež lze chápat jako podobné Boseho-Einsteinově kondenzaci. Příkladem je přechod kapalného helia do supratekutého stavu kdy vymizí veškerá viskozita a tepelná kapacita projde takzvaným lambda bodem. Jiným příkladem může být systém Cooperových párů (párů elektronů s opačně orientovaným spinem interagujících prostřednictvím mřížkových vibrací) v supravodiči. Nicméně tyto systémy lze popsat jako bosonové kondenzáty jen kvalitativně a velmi přibližně. Na rozdíl od původního Einsteinova modelu ideálního plynu je totiž v těchto systémech naprosto podstatná vzájemná interakce částic. Jakým způsobem však co nejlépe realizovat ideální bosonový kondenzát?

Problém je v tom, že pokud chceme, aby částice interagovaly jen minimálně, musejí být v dostatečné vzdálenosti od sebe, čili musíme pracovat se zředěnými plyny. To však přináší další problém – kritická teplota kondenzace klesá s klesající hustotou částic. Čím řidší plyn máme, na tím nižší teplotu musíme systém chladit. Právě technologie chlazení atomů nakonec přinesly rozhodující průlom v této oblasti. Pro získávání zvláště nízkých teplot je zapotřebí působit na atomy vhodnou kombinací optických a magnetických polí. Za hlavní příspěvky v této oblasti byla udělena Nobelova cena za fyziku v roce 1997 (Steven Chu, Claude Cohen-Tannoudji a William D. Phillips). Samotná

Boseho-Einsteinova kondenzace atomárního plynu byla poprvé uskutečněna v roce 1995 a odměna v podobě Nobelovy ceny za ni přišla roku 2001 (Eric A. Cornell, Wolfgang Ketterle a Carl E. Wieman). Dnešní experimenty testují nejrůznější možnosti manipulací s těmito kondenzáty: koherentní skládání kondenzovaných atomů do molekul a rozebírání zpět, vytváření vírů, interference několika kondenzátů podobně jako interference optických polí a mnoho dalších. Některé vlastnosti kondenzátů jsou analogické koherentnímu laserovému světlu. V době, kdy byl sestaven první laser, neměli lidé tušení, kde všude najde praktické uplatnění. Jaké aplikace nakonec nalezne Boseho-Einsteinova kondenzace se dnes také můžeme jen dohadovat.

5.5.2 Závislost chemického potenciálu na teplotě

Střední počet bosonů nacházejících se v n -tém stavu závisí na energii tohoto stavu E_n a je dán rozdělovací funkcí

$$f(E_n) = \frac{1}{e^{\frac{E_n - \mu}{kT}} - 1}.$$

V tomto vztahu je μ chemický potenciál, jenž obecně závisí na teplotě a na počtu částic v daném prostoru. Než se pokusíme určit konkrétní průběh této závislosti, najdeme jeho některé důležité obecné vlastnosti.

Položme pro jednoduchost hodnotu energie základního stavu rovnu nule. V tom případě μ nemůže nabývat kladných hodnot. Pokud by μ bylo kladné, nabývala by funkce $f(E_n = 0)$ pro počet částic v základním stavu zápornou hodnotu, což je počet částic v základním nepřipustné. Při vysokých teplotách lze očekávat, že Boseho-Einsteinovo rozdělení bude přecházet v Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení (5.19)

$$f(E_n) \approx e^{-\frac{E_n - \mu}{kT}} = e^{\frac{\mu}{kT}} e^{-\frac{E_n}{kT}}$$

To nastane tehdy, když $e^{\frac{E_n - \mu}{kT}} \gg 1$ a jedničku ve jmenovateli lze zanedbat. Taková situace se nastane, pokud bude mít μ výrazně zápornou hodnotu. Pokud teploty snižujeme, bude chemický potenciál μ růst, což vede ke zvyšování středního počtu částic v nejnižších stavech. Růst chemického potenciálu však není neomezený — nemůže překročit nulovou hodnotu. Obvykle dochází k tomu, že při jisté kritické teplotě T_c chemický potenciál dosáhne nulové hodnoty a na té zůstává při všech teplotách nižších než $T < T_c$. V takové situaci je populace excitovaných stavů limitována hodnotou $1/(e^{E_n/(kT)} - 1)$, kdežto počet částic v základním stavu může být neomezený. Hromadění velkého množství částic v základním stavu nazýváme *Boseho-Einsteinovou kondenzací*. Jak k ní dochází a jaké jsou nejdůležitější vlastnosti Boseho-Einsteinova kondenzátu můžeme určit na základě znalosti dvou faktorů: rozdělovací funkce $f(E_n)$ a hustoty stavů.

5.5.3 Hustota stavů

Modelový případ klasické částice s hmotností m pohybující se volně v objemu V (čili částice v potenciálové jámě) jsme již popisovali v části 5.3.1. Celkový počet stavů takové částice s energiemi v intervalu mezi E a $E + dE$ pak udává degenerační faktor podle (5.21)

$$g(E) = \frac{g}{4} (2m)^{3/2} \frac{V}{\pi^2 \hbar^3} E^{1/2};$$

kde faktor g představuje spinovou polarizaci částice související s možnými orientacemi jejího spinu (a vlastně degeneraci jednotlivých energetických hladin).

Pokud je částice držena v pasti s harmonickým průběhem potenciálu, má hustota stavů jiný průběh. Uvažujme anizotropní potenciál s frekvencemi podél hlavních os ω_x , ω_y a ω_z , tedy

$$U(r) = \frac{1}{2} m (\omega_x^2 x^2 + \omega_y^2 y^2 + \omega_z^2 z^2).$$

Energie takovéto částice závisí na třech kvantových číslech,

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \hbar(\omega_x n_x + \omega_y n_y + \omega_z n_z),$$

kde $n_{x,y,z} = 0, 1, 2, \dots$ a energii měříme od hladiny základního stavu (viz poznámka na s. 99). Počet stavů s energií menší než E můžeme odhadnout v limitě $E \gg \hbar\omega_{x,y,z}$ pomocí objemu jehlanu v prostoru souřadnic n_x , n_y a n_z . Tento jehlan má vrchol v počátku a jeho hrany ležící v osách n_x , n_y a n_z jsou ohraničeny hodnotami $E/(\hbar\omega_x)$, $E/(\hbar\omega_y)$ a $E/(\hbar\omega_z)$. Objem takového jehlanu je

$$\mathcal{N}(E) = \frac{E^3}{6\hbar^3\omega_x\omega_y\omega_z},$$

což nám opět umožňuje určit počet stavů $g(E)dE$ v intervalu $(E, E + dE)$

$$d\mathcal{N} = g(E)dE = \frac{1}{2\hbar^3\omega_x\omega_y\omega_z} E^2. \quad (5.35)$$

Podobně jako v případě částice v potenciálové jámě jde o mocninnou závislost. Některé další vztahy lze odvodit podobným způsobem pro model částice v potenciálové jámě i pro model oscilátoru, proto bude vhodné zavést obecný vztah

$$g(E) = C_\alpha E^{\alpha-1}, \quad (5.36)$$

kde $\alpha = 3/2$ pro částici v pravoúhlé potenciálové jámě a $\alpha = 3$ pro třírozměrný oscilátor. Příslušné konstanty pak v tomto označení jsou (pro $g = 1$)

$$C_{3/2} = \frac{Vm^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2\hbar^3}}, \quad C_3 = \frac{1}{2\hbar^3\omega_x\omega_y\omega_z}. \quad (5.37)$$

5.5.4 Kritická teplota

Kritická teplota T_c je nejvyšší teplota, do které je ještě základní stav obsazen makroskopickým množstvím částic. Můžeme ji určit z rovnosti, ve které pokládáme $\mu = 0$, a počet částic v excitovaných stavech je roven celkovému počtu částic, tedy

$$N = \int_0^\infty \frac{1}{e^{\frac{E}{kT_c}} - 1} g(E) dE.$$

Dosadíme-li sem za $g(E)$ ze vztahu (5.36), obdržíme

$$N = C_\alpha \int_0^\infty \frac{E^{\alpha-1}}{e^{\frac{E}{kT_c}} - 1} dE.$$

Poslední integrál lze upravit substitucí $u = E/(kT_c)$ na tvar

$$N = C_\alpha (kT_c)^\alpha \int_0^\infty \frac{u^{\alpha-1}}{e^u - 1} du, \quad (5.38)$$

což umožňuje dostat veličinu T_c mimo integrál a vyjádřit tak N jako výraz úměrný T_c^α . Konstanta úměrnosti pak závisí na konkrétní hodnotě integrálu; tu můžeme získat buď numericky nebo v analytickém tvaru jako

$$\int_0^\infty \frac{u^{\alpha-1}}{e^u - 1} du = \Gamma(\alpha)\zeta(\alpha),$$

kde $\Gamma(\alpha)$ je gama funkce a $\zeta(\alpha)$ je Riemannova zeta funkce. Zde se spokojíme s tabulkovými numerickými hodnotami pro uvažované hodnoty α ; pro $\alpha = 3/2$ je $\Gamma(3/2) = \sqrt{\pi}/2$ a $\zeta(3/2) \approx 2,6122$, pro $\alpha = 3$ je $\Gamma(3) = 2$ a $\zeta(3) \approx 1,202$. Z rovnice (5.38) tak dostáváme vyjádření pro kritickou teplotu

$$kT_c = \left(\frac{N}{C_\alpha \Gamma(\alpha) \zeta(\alpha)} \right)^{1/\alpha}, \quad (5.39)$$

což pro částici v pravoúhlé jámě dává

$$kT_c \approx 3,31 \frac{\hbar^2}{m} \left(\frac{N}{V} \right)^{2/3}, \quad (5.40)$$

a pro třírozměrný harmonický oscilátor pak

$$kT_c \approx 0,94 \hbar (\omega_x \omega_y \omega_z N)^{1/3}. \quad (5.41)$$

Jak je vidět, v obou případech závisí kritická teplota jednak na charakteristických vlastnostech systému (frekvence oscilátoru, rozměr jámy) a také na počtu částic – s rostoucím množstvím částic roste i kritická teplota.

5.5.5 Kondenzovaná část

Předpokládejme nyní nižší než kritickou teplotu, $T < T_c$. Integrujeme-li střední počet částic ve stavu s energií E hustotou stavů, vyjde integrál menší než je celkový počet částic v systému

$$\int_0^\infty \frac{1}{e^{E/kT_c} - 1} g(E) dE < N.$$

Kam se poděly zbývající částice? Nemohou se nacházet jinde, než v základním stavu systému. Připomeňme, že určování počtu částic pomocí integrálu přes hustotu stavů má smysl jen v limitě stavů s vyššími energiemi. Pro nejnižší energie a zvláště pro základní stav musíme mít v patrnosti, že kvantové stavy mají diskrétní povahu. Integrál tak má význam *počtu částic nacházejících se v excitovaných stavech*

$$N_{\text{ex}} = C_\alpha \int_0^\infty \frac{E^{\alpha-1}}{e^{E/kT_c} - 1} dE = C_\alpha \Gamma(\alpha) \zeta(\alpha) (kT_c)^\alpha.$$

S využitím vztahu (5.39) pro kritickou teplotu pak dostáváme

$$N_{\text{ex}} = N \left(\frac{T}{T_c} \right)^\alpha.$$

Ostatní částice v základním stavu pak tvoří *kondenzovanou část*, jejich počet musí být

$$N_0(T) = N - N_{\text{ex}} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^\alpha \right].$$

Pro částice v pravoúhlé potenciálové jámě tak máme

$$N_0(T) = N - N_{\text{ex}} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^{3/2} \right].$$

kdežto pro částice v harmonické pasti dostáváme

$$N_0(T) = N - N_{\text{ex}} = N \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^3 \right].$$

5.5.6 Tepelná kapacita

Tepelná kapacita bosonového systému má odlišný průběh nad a pod kritickou teplotou. Uvažujme nejprve teploty nižší než T_c . Chemický potenciál μ je v tom případě nulový a pro celkovou energii systému platí

$$\bar{E} = \int_0^{\infty} E f(E) g(E) dE = C_\alpha \int_0^{\infty} E \frac{E^{\alpha-1}}{e^{\frac{E}{kT_c}} - 1} dE = C_\alpha \Gamma(\alpha + 1) \zeta(\alpha + 1) (kT)^{\alpha+1}.$$

Namísto konstanty C_α můžeme pracovat s výrazem obsahujícím celkový počet částic N ; získáváme

$$\bar{E} = \frac{N}{\Gamma(\alpha) \zeta(\alpha) (kT_c)^{\alpha+1}} \Gamma(\alpha + 1) \zeta(\alpha + 1) (kT)^{\alpha+1} = N k \alpha \frac{\zeta(\alpha + 1)}{\zeta(\alpha)} \frac{T^{\alpha+1}}{T_c},$$

neboť $\Gamma(\alpha + 1) = \alpha \Gamma(\alpha)$. Derivací podle teploty pak dostáváme tepelnou kapacitu

$$C_V = N k \alpha (\alpha + 1) \frac{\zeta(\alpha + 1)}{\zeta(\alpha)} \left(\frac{T}{T_c} \right)^\alpha.$$

S klesající teplotou se tedy tepelná kapacita přibližuje k nule (jak očekáváme v souladu s třetím termodynamickým zákonem).

Pro teploty nad T_c již chemický potenciál není nulový a integrace přes energie vede ke komplikovanějším výrazům. Pro celkový počet částic platí

$$N = C_\alpha \int_0^{\infty} \frac{E^{\alpha-1}}{e^{\frac{E-\mu}{kT_c}} - 1} dE$$

a celková energie je

$$\bar{E} = C_\alpha \int_0^{\infty} \frac{E^\alpha}{e^{\frac{E-\mu}{kT_c}} - 1} dE.$$

Protože při vyšších teplotách je chemický potenciál záporný a výraz v exponentu nabývá vyšších hodnot, lze zlomek s exponenciálou nahradit přibližným výrazem podle vztahu

$$\frac{1}{e^x - 1} = e^{-x} \frac{1}{1 - e^{-x}} \approx e^{-x} + e^{-2x},$$

takže pro počet částic a energii dostáváme přibližně

$$N \approx C_\alpha \int_0^{\infty} E^{\alpha-1} \left(e^{\frac{\mu-E}{kT}} + e^{2\frac{\mu-E}{kT}} \right) dE = C_\alpha \Gamma(\alpha) (kT)^\alpha \left(e^{\frac{\mu}{kT}} + \frac{1}{2^\alpha} e^{2\frac{\mu}{kT}} \right), \quad (5.42)$$

$$\bar{E} \approx C_\alpha \int_0^{\infty} E^\alpha \left(e^{\frac{\mu-E}{kT}} + e^{2\frac{\mu-E}{kT}} \right) dE = C_\alpha \Gamma(\alpha + 1) (kT)^{\alpha+1} \left(e^{\frac{\mu}{kT}} + \frac{1}{2^{\alpha+1}} e^{2\frac{\mu}{kT}} \right). \quad (5.43)$$

Když oba výrazy podělíme a uvážíme, že $e^{\frac{\mu}{kT}} \ll 1$, postupně odvodíme

$$\frac{\bar{E}}{N} = \alpha k T \frac{e^{\frac{\mu}{kT}} + \frac{1}{2^{\alpha+1}} e^{2\frac{\mu}{kT}}}{e^{\frac{\mu}{kT}} + \frac{1}{2^\alpha} e^{2\frac{\mu}{kT}}} = \alpha k T \frac{1 + \frac{1}{2^{\alpha+1}} e^{\frac{\mu}{kT}}}{1 + \frac{1}{2^\alpha} e^{\frac{\mu}{kT}}} \approx \alpha k T \left(1 - \frac{1}{2^{\alpha+1}} e^{\frac{\mu}{kT}} \right).$$

Výraz $e^{\mu/(kT)}$ můžeme přibližně vyjádřit z rovnice (5.42) jako

$$e^{\frac{\mu}{kT}} \approx \frac{N}{C_\alpha \Gamma(\alpha) (kT)^\alpha}$$

a pokud nahradíme N výrazem s kritickou teplotou z (5.39), můžeme psát

$$e^{\frac{\mu}{kT}} \approx \zeta(\alpha) \left(\frac{T_c}{T} \right)^\alpha.$$

Tím pádem pro střední hodnotu energie platí

$$\bar{E} \approx \alpha N k T \left[1 - \frac{\zeta(\alpha)}{2^{\alpha+1}} \left(\frac{T_c}{T} \right)^\alpha \right]$$

a pokud tento výraz derivujeme podle teploty, obdržíme vztah pro tepelnou kapacitu

$$C_V \approx \alpha N k \left[1 + (\alpha - 1) \frac{\zeta(\alpha)}{2^{\alpha+1}} \left(\frac{T_c}{T} \right)^\alpha \right].$$

Konkrétně pro bosonový plyn v pravouhlé jámě ($\alpha = 3/2$) dostáváme

$$C_V \approx \frac{3}{2} N k \left[1 + 0,231 \left(\frac{T_c}{T} \right)^{3/2} \right]$$

a pro bosony v poli harmonického potenciálu

$$C_V \approx 3 N k \left[1 + 0,150 \left(\frac{T_c}{T} \right)^3 \right].$$

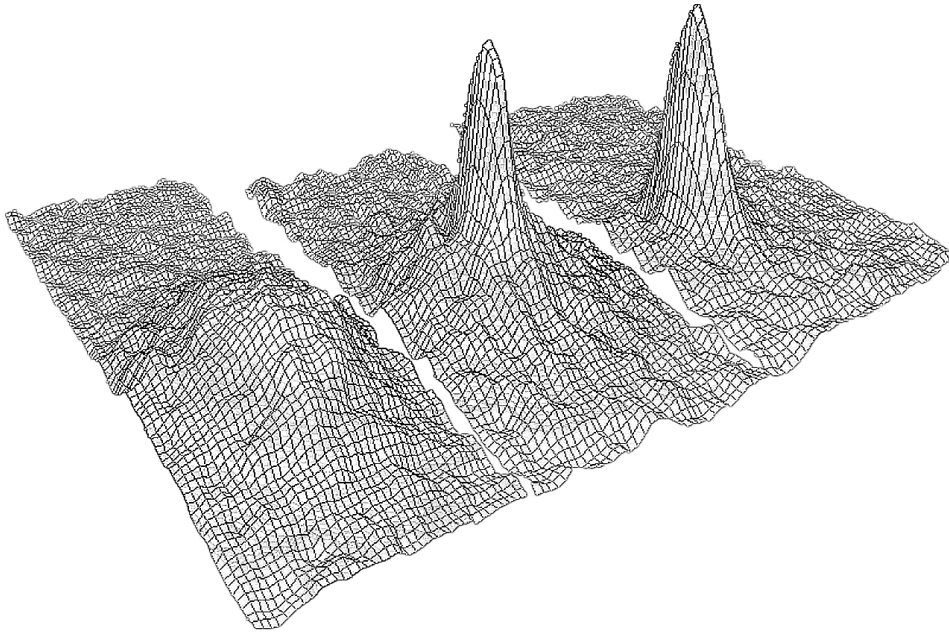
Jak je vidět, v obou případech dostáváme v limitě vysokých teplot výraz odpovídající Dulongovu-Petitovu zákonu. Poblíž kritické teploty je však průběh tepelné kapacity dosti neobvyklý; až do T_c tepelná kapacita s teplotou roste, pak se však její průběh lomí a tepelná kapacita klesá ke své asymptotické hodnotě. Podobný zlom v průběhu tepelné kapacity je charakteristický i pro jiné bosonové systémy — objevuje se například v kapalném heliu v bodu přechodu z normální do supratekuté fáze (takzvaný *lambda bod*).

5.5.7 Profil hustoty

O tom, že se skutečně podařilo dosáhnout Boseho Einsteinovy kondenzace, svědčí například průběh hustoty částic v závislosti na poloze. Pokud atomový oblak ozáříme laserovým svazkem, jehož frekvence je v rezonanci s některým atomovým přechodem, bude světlo v atomech absorbováno. Absorpce bude záviset na poloze – kde bude hustota atomů větší, bude se více světla pohlcovat. Podobným způsobem můžeme proměřit i průběh hustoty rychlostí. Pokud vypneme všechna pole, která vytvářejí past a drží atomy lokalizované, bude se atomový oblak volně rozpínat a padat volným pádem. Předpokládáme-li pro jednoduchost klasický popis pohybu částic, bude mít po určité době t daný atom polohu $\mathbf{r}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{v}_0 t + \frac{1}{2} \mathbf{g} t^2$, kde \mathbf{g} je vektor gravitačního zrychlení a \mathbf{r}_0 a \mathbf{v}_0 byla poloha a rychlost atomu v okamžik vypnutí pole. Po dostatečně dlouhé době již bude vliv počáteční podmínky polohy r_0 zanedbatelný vůči vlivu počáteční hodnoty rychlosti v_0 a rozložení částic pak odpovídá počátečnímu rozložení rychlostí. Konkrétně atomová past v původním experimentu z roku 1995, za který byla udělena Nobelova cena [Anderson et al. (1995), *Science* **269**, 198] omezovala atomy rubidia do oblasti několika mikrometrů. Při dosažené teplotě řádově 100 nK je termální rychlost atomů přibližně $3 \text{ mm} \cdot \text{s}^{-1}$. Poloha atomů byla sledována cca

60 ms po vypnutí pasti, což znamená, že díky původní rychlosti se oblak atomů rozepne do velikosti zhruba 200 μm . To znamená, že původní rozdělení polohy se zcela ztrácí v rozdělení odpovídajícím rozdělení rychlosti.

U rozdělení rychlosti (nebo hybnosti) částice v harmonické pasti je důležité, že v termálním stavu při vyšších teplotách jeho pološířka nezávisí na frekvenci oscilátoru a pro hybnost je rovna $\Delta p = \sqrt{mkT}$. Naproti tomu pološířka rozdělení hybnosti v základním stavu oscilátoru je na frekvenci závislá a rovna $\Delta p = \sqrt{m\hbar\omega/2}$. Pokud bychom tedy měli částice v anizotropní harmonické pasti, můžeme snadno poznat, zda se nacházejí v termálním stavu nebo v základním stavu oscilátoru: proměříme-li její rozdělení vektoru hybnosti, dostaneme pro termální stav symetrické rozdělení — pološířka bude ve všech směrech stejná. Pokud se však částice nacházejí v základním stavu, nebude rozdělení symetrické – ve směrech s vyšší frekvencí bude širší oproti směrům s nižší frekvencí. Právě tato vlastnost pomohla dosvědčit, že se konečně podařilo získat Boseho Einsteinův kondenzát (viz obr. 5.9).



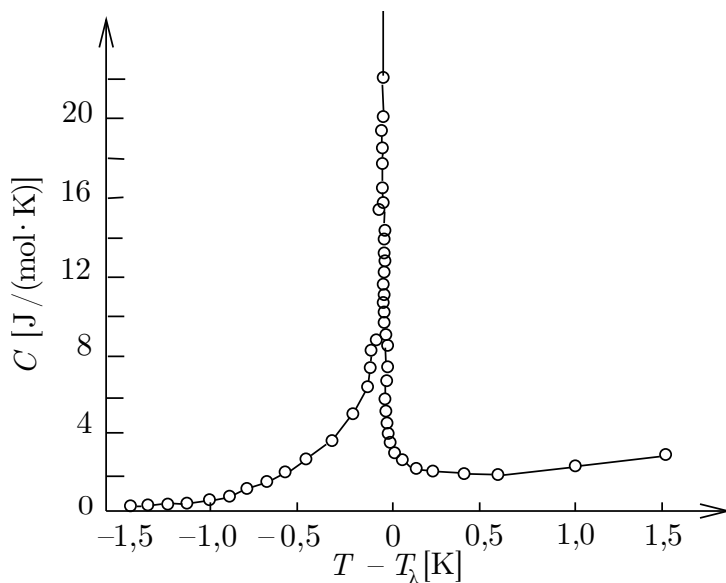
Obr. 5.9: Experimentálně změřený dvourozměrný profil rychlostí částic při Boseho Einsteinově kondenzaci, data jsou z NIST v Boulderu v americkém státě Colorado. Odpovídající teploty při měření byly v pořadí zleva 400 nK, 200 nK a 50 nK (zdroj: Wikipedie, upraveno)

5.5.8 Vlastnosti kapalného helia

Atomy helia ${}^4\text{He}$ mají nulový spin a jsou to tedy bosony. Za nízkých teplot by se tedy měl projevit jejich kvantový charakter na termodynamických vlastnostech helia. Ovšem pokud s heliem pracujeme za běžných tlaků, stanou se interakce mezi sousedními atomy velmi významné pro jejich dynamiku za mnohem vyšších teplot, než je kritická teplota pro Boseho-Einsteinovu kondenzaci. Helium zkondenzuje do běžné kapalně fáze dříve, než může zkondenzovat do nejnižšího kvantového stavu. Přesto se však u něj pozorují vlastnosti analogické bosonovému kondenzátu – supratekutost a průchod tepelné kapacity lambda bodem (viz obr. 5.10) k nim patří. Zmiňme se zde stručně o nejzajímavějších vlastnostech této podivuhodné látky.

O zkapalnění helia usiloval řadu let nizozemský fyzik Heike Kamerlingh Onnes. Nakonec se mu to podařilo v roce 1908, kdy po zkapalnění vzduchu zkapalnil vodík a použil jej ke chlazení zkapalňovacího přístroje s heliem. Zjistil při tom, že bod varu helia odpovídá teplotě 4,2 K. Za své úspěchy byl odměněn Nobelovou cenou v roce 1913.

Helium ${}^4\text{He}$ má na rozdíl od běžných kapalin dva trojné body (viz obr. 5.11) a za nízkých teplot se může nacházet ve čtyřech fázích. Ke zkapalnění plynného helia dojde za běžných tlaků při teplotě kolem 5,2 K. Pevná fáze se vyskytuje pouze při tlaku nad $2,5 \cdot 10^6$ Pa, při nižších tlacích dojde k fázovému přechodu prvního druhu a helium zkapalní. Ovšem kapalně fáze jsou celkem dvě; při ochlazování z kapalně fáze He I, odpovídající běžným kapalinám, projde helium při teplotách kolem 2 K tzv. λ -bodem a dostane se do kapalně fáze He II. V této fázi ztrácí viskozitu a protéká například tak úzkými trhlinami, jakými žádná běžná kapalina neproteče (o rozměrech 10 nm), takovému heliu říkáme supratekuté. Poprvé si této vlastnosti všiml ve 30. letech ruský fyzik Pjotr L. Kapica, který pak za svůj objev získal Nobelovu cenu roku 1978. Supratekuté helium vzlíná po povrchu jakéhokoliv materiálu v asi 30 nm tenkém tzv. *Rollinově filmu* (obr. 5.12). Pokud by bylo drženo v otevřené nádobě, vyteče z ní po jejím povrchu; je proto velmi obtížné supratekuté helium držet, stěny nádob musejí být dokonale těsné a po celém povrchu musí být dostatečně chladné. Jinak by se helium z teplejšího místa odpařovalo a na jeho místo by po povrchu neustále proudilo další supratekuté helium.



Obr. 5.10: Průběh tepelné kapacity v lambda přechodu u kapalně helia (převzato z [38], originální zdroj: Buckingham, M.J., Fairbank, W.M., „The Nature of the Lambda Transition“, in *Progress in Low Temperature Physics III*. North Holland Publishing: 1961)

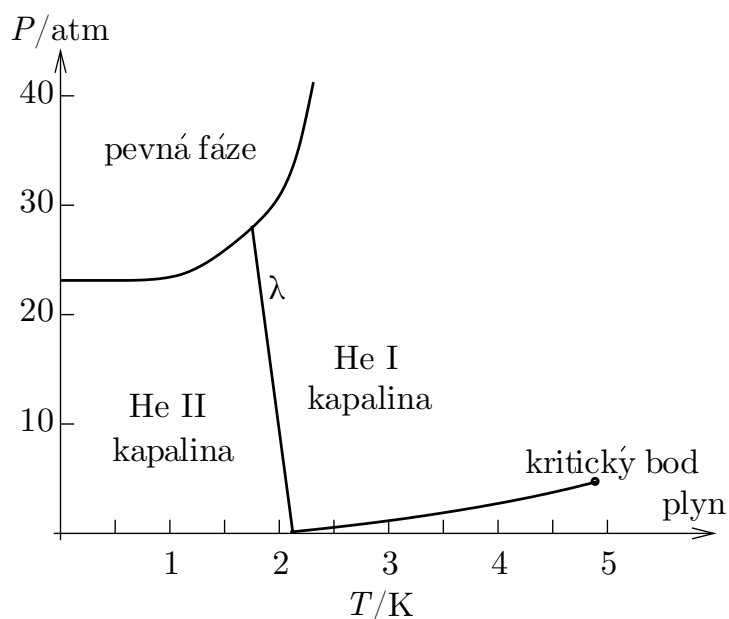
normální a naopak.

Tímto tzv. dvoukapalinovým modelem lze vysvětlit několik zajímavých efektů. Jedním z nich je hodnota viskozity závislá na způsobu měření. Při průchodu tenkou kapilárou vykazuje helium II nulovou viskozitu, zatímco pokud provádíme měření pomocí souosých disků, z nichž jeden rotuje, druhý je v klidu a mezi nimi je helium, naměříme nenulovou viskozitu. Proudění kapilárou se zúčastní totiž pouze supratekutá složka, zatímco rotující disky s sebou strhávají i normální složku.

Termomechanický efekt nastává tehdy, pokud pórovitá přepážka rozděluje dvě části nádoby se supratekutým heliem a v jedné části nádoby zvýšíme teplotu. Dojde tím ke vzrůstu tlaku v ohřívané části nádoby, neboť přepážkou může proudit pouze supratekutá složka. V teplejším prostoru se bude část supratekuté složky přeměňovat na normální, ta však již nemůže pronikat přepážkou zpět. Snížení koncentrace supratekuté složky však povede k jejímu přílivu z chladnější části. Funguje to i opačně: pokud v jedné části nádoby zvýšíme tlak, dojde tu i ke zvýšení teploty. Na stejném

Díky vysoké tepelné vodivosti (několiksetkrát vyšší než u mědi) nelze He II přivést k varu; při ohřívání se bude tato látka vždy vypařovat povrchově. Při fázovém přechodu druhého druhu u helia dochází k nespojitosti v průběhu derivace tepelné kapacity, v průběhu koeficientu teplotní roztažnosti a také elektrické permitivity v závislosti na teplotě.

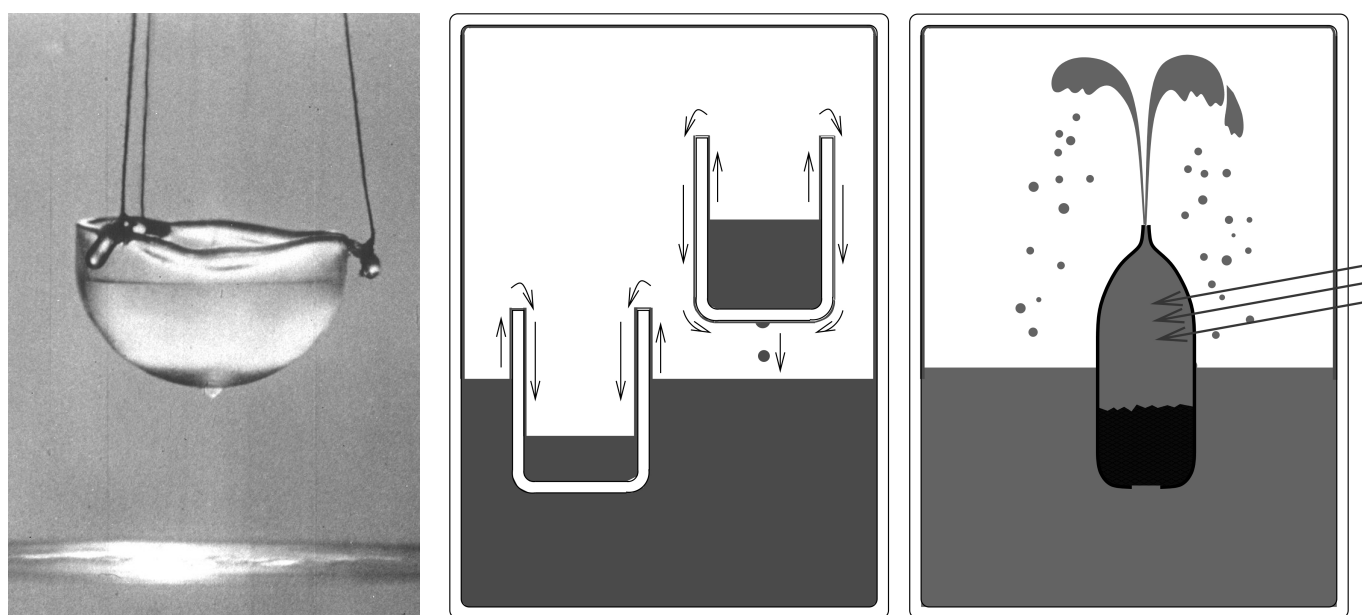
Supratekutost však má poněkud komplikovanější charakter. Je tu jistá analogie s Boseho-Einsteinovou kondenzací, kdy se značné (makroskopické) množství částic nachází ve stejném, základním kvantovém stavu, ale při nenulové teplotě bude vždy jistá část ve vyšších kvantových stavech. Helium II se v řadě případů chová jako směs dvou kapalin, z nichž jedna je supratekutá a druhá normální, při poklesu teploty roste podíl supratekuté složky na úkor



Obr. 5.11: Graf koexistence fází pro helium ^4He ; hraniční křivka oddělující fáze I a II (λ -hranice) končí ve dvou trojných bodech (převzato z [38])

principu pracuje tzv. fontánový jev (obr. 5.12). Nádobku na obou koncích otevřenou napěchujeme u dna práškem a částečně ponoříme do kapalného helia II. Práškovou vrstvou může proudit pouze supratekutá složka. Pokud nádobku nad vrstvou prášku zahříváme (např. světelným svazkem), povede přeměna supratekuté složky v normální k přetlaku a tím k nepřetržitému tryskání kapalného helia z horního otvoru baňky.

V supratekutém heliu se může šířit několik druhů zvuku. Tzv. první zvuk je obdobou běžného zvuku, tedy tlakových vln doprovázených oscilací hustoty látky. Druhý zvuk je tvořen teplotní vlnou, při které osciluje poměr mezi supratekutou a normální složkou helia. Tento typ vlnění je hlavní příčinou mimořádně vysoké tepelné vodivosti helia II.



Obr. 5.12: Vztlínání supratekutého helia po stěnách nádob v Rollinově filmu a fontánový jev (převzato z Wikipedie (fotografie) a z [38] (kresba))

Kromě izotopu ${}^4\text{He}$ se helium vyskytuje ještě jako izotop ${}^3\text{He}$, v přírodě velmi vzácný s relativním zastoupením asi 10^{-6} . Má jaderný spin $1/2$ a se dvěma elektrony je tedy fermionem. Vytvořit supratekutou fázi helia ${}^3\text{He}$ se podařilo v roce 1971 při teplotě 2,7 mK a tlaku 34 atm (David M. Lee, Douglas D. Osheroff a Robert C. Richardson, Nobelova cena r. 1996). Protože se jedná o fermiony, nelze v případě supratekutosti mluvit o bosonové kondenzaci heliových atomů. Dvojice atomů však mohou vytvářet slabě vázané páry obdobné Cooperovým párům v supravodičích, které mají celočíselný spin a jsou tedy bosony. Protože vazba tvořící Cooperovy páry heliových atomů je velmi slabá, je třeba pracovat s mimořádně nízkými teplotami. Na rozdíl od elektronových Cooperových párů, které mají celkový spin 0 se spiny ${}^3\text{He}$ skládají na 1. To vede k dalším zajímavým efektům plynoucím z různých přípustných orientací celkového spinu každého páru a tím k celkové anizotropii. Jako důsledek pak existuje několik typů kondenzátů helia ${}^3\text{He}$.

Pro ochlazování na zvláště nízké teploty má velký význam směs obou izotopů. Ta může přejít do supratekuté fáze, přičemž poloha λ -bodu závisí na koncentraci ${}^3\text{He}$. Pokud ochlazujeme směs při dané koncentraci pod určitou teplotu, oddělí se od sebe dvě kapalně fáze, z nichž jedna bude mít vyšší koncentraci ${}^3\text{He}$ než druhá. Teplota, při které takové oddělení nastane, závisí na původní koncentraci ${}^3\text{He}$, obsah obou izotopů v obou oddělených fázích závisí na teplotě: ve fázi bohaté na ${}^3\text{He}$ bude i určité procento ${}^4\text{He}$, bude však klesat s teplotou a podobné to bude pro zastoupení ${}^3\text{He}$ ve fázi bohaté na ${}^4\text{He}$. Důležité však je, že ve fázi bohaté na ${}^4\text{He}$ koncentrace izotopu ${}^3\text{He}$ nikdy neklesne pod 6 %, a to ani při nulové teplotě. Pokud má atom helia ${}^3\text{He}$ projít rozhraním oddělujícím obě fáze, musí při tom získat nebo odevzdat určitou energii (podobně jako molekula vody musí získat energii aby se mohla dostat z kapalně fáze do plynné). Konkrétně pro přechod z fáze bohaté na ${}^3\text{He}$ do fáze bohaté na ${}^4\text{He}$ musí atom ${}^3\text{He}$ získat energii z okolního prostředí. Když budeme mít v nádobě ze dvou stran otevřené dvě takovéto fáze helia a ze strany s fází bohaté na ${}^4\text{He}$ budeme odčerpávat páry helia ${}^3\text{He}$, budou z fáze bohaté na ${}^3\text{He}$ proudit atomy ${}^3\text{He}$ tak, aby jejich koncentrace byla alespoň 6 %. Při tom však budou neustále odebírat energii okolí a tak ho ochlazovat. Tímto způsobem lze dosáhnout nízkých teplot až 20 mK.

Použité prameny a literatura k dalšímu studiu

- [1] Čulík, F.; Noga, M.: *Úvod do statistické fyziky a termodynamiky*. Bratislava: Alfa, 1982.
- [2] Bajer, J.: *Mechanika 1*. PřF UP Olomouc, 2004, ISBN 80-244-0819-8.
- [3] Bajer, J.: *Mechanika 2*. PřF UP Olomouc, 2004, ISBN 80-244-0884-8.
- [4] Bajer, J.: *Mechanika 3*. PřF UP Olomouc, 2006, ISBN 80-244-1293-4.
- [5] Beiser, A.: *Úvod do moderní fyziky*. Praha: Academia, 1978.
- [6] Борисоглебский, Л. А. *Квантовая механика*. Минск: БГУ, 1981.
- [7] Brdička, M.; Hladík, A.: *Teoretická mechanika*. Praha: Academia, 1987.
- [8] Davydov, A. S.: *Kvantová mechanika*. Praha: SPN, 1978.
- [9] Douglas, J.F.; Gasiorek, J.M.; Swaffield, J.A.: *Fluid mechanics*. Longman Scientific & Technical, 1985. ISBN 0-582-98861-6.
- [10] Dušek, M.: *Koncepční otázky kvantové teorie*. Olomouc: UP, 2002. ISBN 80-244-0449-4.
- [11] Elsgolc, L. E.: *Variační počet*. Praha: SNTL, 1965.
- [12] Feynman, R. P.; Leighton, R. B.; Sands, M.: *Feynmanovy přednášky z fyziky 1 – 3*. Havlíčkův Brod: Fragment, 2005.
- [13] Goldstein, H.: *Classical Mechanics*. Addison-Wesley Publishing Company, Inc., 1980.
- [14] Gregory, R. D.: *Classical mechanics*. Cambridge University Press, 2006.
- [15] Greiner, W.: *Quantum Mechanics. An Introduction*. Berlin: Springer, 1994, ISBN 3-540-67458-6.
- [16] Greiner, W.: *Classical mechanics. System of particles and Hamiltonian mechanics*. New York: Springer-Verlag, 2003, ISBN 0-387-95128-8.
- [17] Greiner, W.: *Classical mechanics. Point particles and relativity*. New York: Springer-Verlag, 2004, ISBN 0-387-95586-0.
- [18] Greiner, W.; Neise, L.; Stöcker, H.: *Thermodynamics and Statistical Mechanics*. Berlin: Springer, 1995, ISBN 0-387-94299-8.
- [19] Halliday, D.; Resnick, R.; Walker, J.: *Fyzika. Vysokoškolská učebnice obecné fyziky. Část 2: Mechanika – Termodynamika*. Brno a Praha: VUTIUM a Prometheus, 2000, ISBN 80-214-1868-0.
- [20] Halliday, D.; Resnick, R.; Walker, J.: *Fyzika. Vysokoškolská učebnice obecné fyziky. Část 5: Moderní fyzika*. Brno a Praha: VUTIUM a Prometheus, 2000, ISBN 80-214-1868-0.
- [21] Hlavička, A. et al.: *Fyzika pro pedagogické fakulty*. Praha: SPN, 1971.
- [22] Horák, Z.; Krupka, F.: *Fyzika. Příručka pro vysoké školy technického směru*. Praha: SNTL, 1981.
- [23] Horský, J.; Novotný, J.; Štefaník, M.: *Mechanika ve fyzice*. Praha: Academia, 2001, ISBN 80-200-0208-1.
- [24] Janků, V.: *Základy statistické fyziky*. Olomouc: UP, 1984.
- [25] Klíma, J.; Velický, B.: *Kvantová mechanika I*. Praha: MFF UK, 1992.
- [26] Klvaňa, F.; Lacina, A.; Novotný, J.: *Sbírka příkladů ze statistické fyziky*. Brno: UJEP, 1975.
- [27] Kulhánek, P.: *Teoretická mechanika*. 2001. Dostupné z <http://www.aldebaran.cz/studium/mechanika.pdf>.
- [28] Kulhánek, P.: *Statistická fyzika*. 2002. Dostupné z <http://www.aldebaran.cz/studium/statistika.pdf>.

- [29] Kvasnica, J.: *Statistická fyzika*. Praha: Academia, 1983 a 1998.
- [30] Kvasnica, J.: *Matematický aparát fyziky*. Praha: Academia, 1989, ISBN 80-200-0088-7.
- [31] Kvasnica, J.: *Termodynamika*. Praha: SNTL, 1989.
- [32] Lacina, A.: *Základy termodynamiky a statistické fyziky*. Praha: SPN, 1990.
- [33] Ландау, Л. Д.; Лифшиц, Е. М.: *Механика*. Москва: Наука, 1988.
- [34] McMahon, D.: *Quantum Mechanics Demystified*. New York: McGraw-Hill, 2005, ISBN 0071486704.
- [35] Mechlová, E.; Košťál, K.; et al.: *Výkladový slovník fyziky pro základní vysokoškolský kurz*. Praha: Prometheus, 1999.
- [36] Mikulčák, J.; et al.: *Matematické, fyzikální a chemická tabulky a vzorce pro střední školy*. Praha: Prometheus, 2009, ISBN 978-80-7196-264-9.
- [37] Obetková, V.; et al.: *Teoretická mechanika*. Bratislava: Alfa, 1990.
- [38] Opatrný, T.: *Kapitoly z termodynamiky a statistické fyziky*. Olomouc: 2009. Dostupné z <http://www.ktf.upol.cz/tom/bookex1.pdf>.
- [39] Peleg, Y.; et al.: *Schaum's Outline of Quantum Mechanics*. New York: McGraw-Hill, 2010, ISBN 0071623582.
- [40] Pišút, J.; et al.: *Úvod do kvantovej mechaniky*. Bratislava/Praha: Alfa/SNTL, 1983. Dostupné z <http://www.ddp.fmph.uniba.sk/~pisut/qm/qm.htm>.
- [41] Rektorys, K.; et al.: *Přehled užití matematiky I, II*. Praha: SNTL, 1988.
- [42] Skála, L.: *Úvod do kvantové mechaniky*. Praha: Academia, 2005, ISBN 80-200-1316-4.
- [43] Štoll, I.: *Dějiny fyziky*. Praha: Prometheus, 2009, ISBN 978-80-7196-375-2.
- [44] Tillich, J.; Richterek, L.: *Teoretická mechanika*. PřF UP Olomouc, 2007. Dostupné z <http://muj.optol.cz/~richterek/data/media/mechanika/>.

Rejstřík

- A**
akce zkrácená 32
axiom nezávislosti silového působení 9
axiomy mechaniky (základní) 9
- B**
bod
– hmotný *viz* částice
– lambda 129
– obratu 16
boson 111
- Č**
částice 8
číslo kvantové
– hlavní 76
– orbitální *viz* číslo kvantové vedlejší
– vedlejší 77
- E**
efekt Comptonův *viz* jev Comptonův
eikonál 34
energie
– kinetická 12
– mechanická celková 13, 14
– potenciální 12
– volná 94
– zobecněná *viz* integrál energie
ensemble 82
– grandkanonický 83, 89
– kanonický 83, 86
– mikrokanonický 82, 84
– velký kanonický *viz* ensemble grandkanonický
experiment Sternův a Gerlachův 78
- F**
faktor degenerační 92, 116
fermion 111
film Rollinův 131
fluktuace 104
– kvadratická 104
– relativní 104
funkce
– Eulerovsky homogenní 16
– grandkanonická partiční *viz* suma statistická grandkanonická
– Hamiltonova 27
– charakteristická Hamiltonova 32
– Lagrangeova 18
– Langevinova 103
– partiční *viz* suma statistická
– rozdělovací 116
fyzika statistická 81
- H**
hamiltonián *viz* funkce Hamiltonova, 52
hodnota střední
– časová 82
hybnost
– částice 11
– zobecněná 24
hypotéza
– ergodická 82
– kvantová 36
- I**
identita Jacobiho 31
integrál
– energie 25
– pohybu první 10
– statistický 92
- J**
jednotka atomová délková 41
jev Comptonův 39
- K**
katastrofa ultrafialová 107
komutátor 53
kondenzace Boseho-Einsteinova 124, 125
konfigurace soustavy 18
konfigurační prostor 18
konstanta
– Boltzmannova 38, 86
– Planckova 36
– Rydbergova 41
– Stefanova-Boltzmannova 111

kvantové číslo
– magnetické 77

L

Lagrangeovými souřadnicemi 18
lagranžián *viz* funkce Lagrangeova

M

makrostav 82
mikrostav 81
moment
– hybnosti 11
– impulsu *viz* moment hybnosti
– kinetický *viz* moment hybnosti
– síly 11

N

nerozlišitelnost částic 85

O

operátor 46
– Hamiltonův 52
– hermitovský 47
– lineární 47
– samosdružený *viz* operátor hermitovský
oscilátor lineární harmonický 68

P

paradox Gibbsův 96
plyn ideální
– bosonový 106
– fermionový 106
pohyb
– librační 16
– periodický 16
pole
– konzervativní 14
– silové 12
– – potenciálové 12

polynom

– Laguerrovův 76
– Legendreův 74
– – přidružený 74

poměr gyromagnetický 72

potenciál

– chemický 90, 113
– kinetický *viz* funkce Lagrangeova

práce síly 12

princip

– diferenciální 8
– Hamiltonův 19
– integrální 8

– superpozice 9

prostor

– fázový 26
– Hilbertův 46
– konfigurační *viz* konfigurační prostor
přiblížení kvaziklasické 117

R

relace neurčitosti 54

rezervoár 83

rovnice

– barometrická 98
– Eulerovy-Lagrangeovy 20
– Hamilton-Jacobiho 32
– Hamiltonovy kanonické 27
– Helmholtzova 35
– kontinuity 56
– Lagrangeovy 2. druhu 20
– Liouvilleova 83
– Schrödingerova
– – bezčasová *viz* rovnice Schrödingerova
stacionární
– – časová *viz* rovnice Schrödingerova
nestacionární
– – nestacionární 55
– – stacionární 56
– Schrödingerova stacionární 35
– vazby 17
– vlnová 34

rovnováha systému 82

rozdělení

– Boseho-Einsteinovo 114
– Fermiho-Diracovo 115
– grandkanonické 90
– Maxwelllovo-Boltzmannovo 115
– rychlostí Maxwelllovo 97

S

síla

– centrální 12
– disipativní 13
– gyroskopická 13
– potenciálová 12
– – nestacionární 14

souřadnice

– cyklická 24
– Lagrangeovy *viz* souřadnice zobecněné
– zobecněné 18

spin 78

stupeň volnosti 18

suma statistická 89, 92

– grandkanonická 90, 113
 susceptibilita 104
 symetrie 23

T

teorém viriálový *viz* věta viriálová
 teorémy Ehrenfestovy 61
 teplota
 – Fermiho 115
 – kritická 126
 – rotační 100
 – vibrační 99
 termostat 83
 trajektorie konfigurační 18
 transformace Legendrova 27
 trpaslík bílý 121

U

úloha dynamiky základní
 – druhá 9
 – první 9

V

variace 18
 vazby
 – jednostranné 18
 – neudržující *viz* vazby jednostranné
 – udržující 18, *viz* vazby dvoustranné
 věta
 – Liouvilleova 83

– Noetherová 23
 – o hybnosti 11
 – viriálová 15
 viriál Clausiusův 15
 vlna de Broglieho 42
 výkon okamžitý 12
 vzorec pro fotoefekt Einsteinův 39
 vztah Stirlingův 88, 97

Z

zákon

– Curieův 104
 – Dulongův-Petitův 99
 – Maxwellův
 – – rozdělení rychlostí *viz* rozdělení rychlostí
 Maxwelllovo
 – Planckův vyzařovací 107
 – Rayleighův-Jeansův vyzařovací 107
 – Stefanův-Boltzmannův 111
 – Wienův posunovací 109
 – Wienův vyzařovací 108
 – zachování 10
 – – hybnosti 11
 – – mechanické energie 14
 – – momentu hybnosti 11
 – změny
 – – hybnosti 11
 závorky Poissonovy 30
 – kvantové 59

Tomáš Opatrný, Ivo Vyšín, Lukáš Richterek a Jan Říha

Základy moderní fyziky

Výkonný redaktor: prof. RNDr. Tomáš Opatrný, Dr.

Odpovědná redaktorka: Mgr. Lucie Loutocká

Technické zpracování systémem \LaTeX : Mgr. Lukáš Richterek, Ph.D., RNDr. Ivo Vyšín, CSc.

Návrh obálky: Jiří Jurečka

Publikace neprošla ve vydavatelství redakční ani jazykovou úpravou.

Vydala a vytiskla Univerzita Palackého v Olomouci

Křížkovského 8, 771 47 Olomouc

www.upol.cz/vup

e-mail: vup@upol.cz

Olomouc 2012

1. vydání

Neprodejné

ISBN 978-80-244-3333-2