

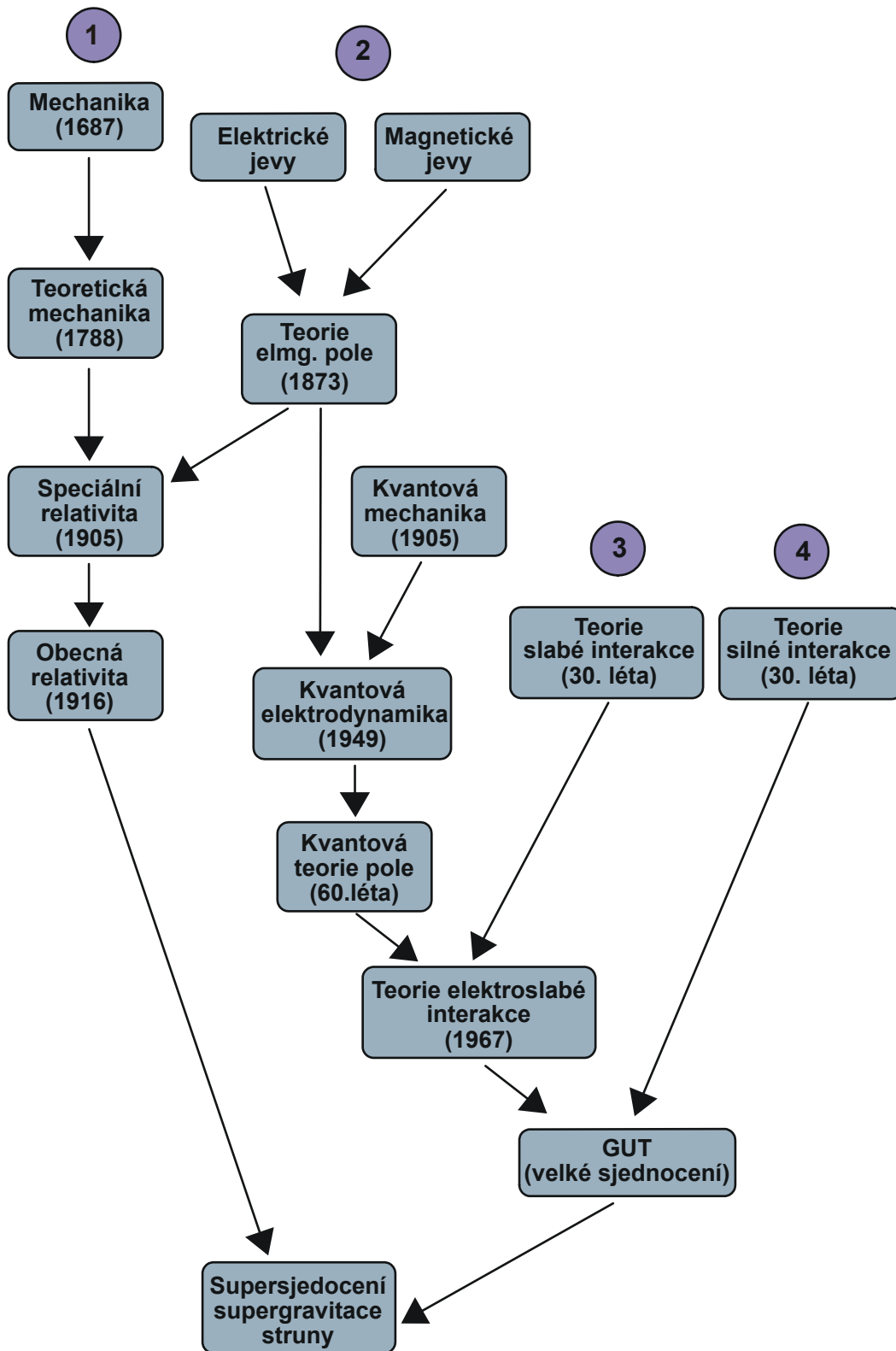
# TEORETICKÁ FYZIKA TF1-3



STUDIJNÍ TEXT PRO DOKTORSKÉ STUDIUM

PETR KULHÁNEK

# INTEGRAČNÍ TENDENCE VE FYZICE



# OBSAH

<b>1. TEORETICKÁ MECHANIKA</b>	<b>3</b>
<b>1. 1. ZÁKLADNÍ POJMY</b>	<b>3</b>
1. 1. 1. ZÁKLADNÍ POJMY Z MECHANIKY	3
1. 1. 2. (M) EINSTEINOVA SUMAČNÍ KONVENCE	4
1. 1. 3. (M) DÉLKOVÝ ELEMENT	6
<b>1. 2. INTEGRÁLNÍ PRINCIPY MECHANIKY</b>	<b>8</b>
1. 2. 1. HAMILTONŮV PRINCIP NEJMENŠÍ AKCE	8
1. 2. 2. LAGRANGEOVY ROVNICE	9
1. 2. 3. JEDNODUCHÉ PŘÍKLADY	11
1. 2. 4. DALŠÍ PŘÍKLADY	12
<b>1. 3. ZÁKONY ZACHOVÁNÍ V PŘÍRODĚ</b>	<b>14</b>
1. 3. 1. TEORÉM NOETHEROVÉ	14
1. 3. 2. ZÁKON ZACHOVÁNÍ HYBNOSTI	14
1. 3. 3. ZÁKON ZACHOVÁNÍ ENERGIE	16
<b>1. 4. HAMILTONOVY KANONICKÉ ROVNICE</b>	<b>18</b>
1. 4. 1. (M) LIEOVA ALGEBRA	18
1. 4. 2. HAMILTONOVY ROVNICE	21
1. 4. 3. HARMONICKÝ OSCILÁTOR	23
1. 4. 4. POISSONOVA FORMULACE HAMILTONOVÝCH ROVNIC	25
1. 4. 5. NUMERICKÉ ŘEŠENÍ HAMILTONOVÝCH ROVNIC	27
<b>1. 5. VLASTNOSTI DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC</b>	<b>28</b>
1. 5. 1. MATICE STABILITY A FÁZOVÝ PORTRÉT SYSTÉMU	29
1. 5. 2. METODA POTENCIÁLU	33
1. 5. 3. BIFURKACE	35
1. 5. 4. LJAPUNOVSKÁ STABILITA, LIMITNÍ CYKLUS, ATRAKTOR	37
1. 5. 5. EVOLUČNÍ ROVNICE	44
<b>1. 6. POHYBY NABITÝCH ČÁSTIC V ELEKTROMAGNETICKÝCH POLÍCH</b>	<b>47</b>
1. 6. 1. KONSTANTNÍ HOMOGENNÍ ELEKTRICKÉ POLE (RELATIVISTICKY)	48
1. 6. 2. KONSTANTNÍ HOMOGENNÍ MAGNETICKÉ POLE (NERELATIVISTICKY)	49
1. 6. 3. ZKŘÍŽENÁ POLE (NERELATIVISTICKY)	51
1. 6. 4. DRIFTY	53
1. 6. 5. NĚKTERÉ SPECIÁLNÍ KONFIGURACE POLÍ	55

<b>2. KVANTOVÁ TEORIE</b>	<b>61</b>
<b>2.1. VZNIK A VÝVOJ KVANTOVÉ TEORIE</b>	<b>61</b>
<b>2.2. (M) OPERÁTORY V KVANTOVÉ TEORII</b>	<b>65</b>
2.2.1. UNITÁRNÍ PROSTORY (PROSTORY SE SKALÁRNÍM SOUČINEM)	65
2.2.2. OPERÁTORY	68
2.2.3. PROJEKČNÍ OPERÁTORY	73
2.2.4. ROZVOJ PRVKU DO BÁZE	75
2.2.5. SPEKTRÁLNÍ TEORIE	77
<b>2.3. ZÁKLADNÍ PRINCIPY KVANTOVÉ TEORIE</b>	<b>82</b>
2.3.1. ZÁKLADNÍ AXIOMY A DEFINICE	82
2.3.2. KOMPATIBILITA MĚŘENÍ A HEISENBERGOVY RELACE	86
2.3.3. VLASTNÍ STAVY ENERGIE, SCHRÖDINGEROVA ROVNICE	89
<b>2.4. HARMONICKÝ OSCILÁTOR</b>	<b>92</b>
2.4.1. ŘEŠENÍ POMOCÍ VLNOVÉ MECHANIKY (SCHRÖDINGER)	92
2.4.2. ŘEŠENÍ BEZ VOLBY REPREZENTACE (DIRAC)	96
2.4.3. ŘEŠENÍ POMOCÍ MATICOVÉ MECHANIKY (HEISENBERG)	99
<b>2.5. SFÉRICKY SYMETRICKÝ POTENCIÁL</b>	<b>101</b>
2.5.1. MOMENT HYBNOSTI	102
2.5.2. ŘEŠENÍ V X REPREZENTACI, KULOVÉ FUNKCE	106
2.5.3. JEDNODUCHÉ SYSTÉMY: OSCILÁTOR, VODÍK, JÁMA	108
<b>2.6. ČASOVÝ VÝVOJ</b>	<b>110</b>
2.6.1. EVOLUČNÍ OPERÁTOR	110
2.6.2. ČASOVÁ SCHRÖDINGEROVA ROVNICE	112
2.6.3. DVOUŠTĚRBINOVÝ EXPERIMENT	113
2.6.4. EHRENFESTOVY TEORÉMY, VIRIÁLOVÝ TEORÉM	114
<b>2.7. RELATIVISTICKÁ KVANTOVÁ TEORIE, SPIN</b>	<b>116</b>
2.7.1. PROSTOROVÁ ROTACE A LORENTZOVA TRANSFORMACE	116
2.7.2. SPIN	117
2.7.3. KLEIN-GORDONOVA A DIRACOVA ROVNICE	119
<b>2.8. SOUSTAVA STEJNÝCH ČÁSTIC</b>	<b>122</b>
2.8.1. OPERÁTOR VÝMĚNY DVOU ČÁSTIC	122
2.8.2. BOSONY A FERMIONY, PAULIHO PRINCIP	123
2.8.3. DRUHÉ KVANTOVÁNÍ	124
<b>PŘÍLOHA – ZOBECNĚNÉ FUNKCE</b>	<b>127</b>
P1. DIRACOVA DISTRIBUCE	127
P2. KONVOLUCE	129
P3. GREENŮV OPERÁTOR A GREENOVA FUNKCE	130

<b>3. STATISTICKÁ FYZIKA</b>	<b>133</b>
<b>3.1. (M) NĚCO Z MATEMATIKY</b>	<b>133</b>
3.1.1. UŽITEČNÉ VZTAHY	133
3.1.2. PFAFFOVY DIFERENCIÁLNÍ FORMY	133
<b>3.2. VYBRANÉ PARTIE Z TERMODYNAMIKY</b>	<b>137</b>
3.2.1. PRVNÍ A DRUHÁ VĚTA TERMODYNAMICKÁ	137
3.2.2. TERMODYNAMICKÉ POTENCIÁLY	138
<b>3.3. ZÁKLADNÍ POJMY STATISTICKÉ FYZIKY</b>	<b>141</b>
3.3.1. SLOVNÍČEK POJMŮ	141
3.3.2. LIOUVILLŮV TEORÉM	144
3.3.3. ERGODICKÝ PROBLÉM	146
<b>3.4. GIBBSOVO KANONICKÉ ROZDĚLENÍ</b>	<b>147</b>
3.4.1. ODVOZENÍ ROZDĚLENÍ	147
3.4.2. KONSTANTY ROZDĚLENÍ	148
3.4.3. PARTIČNÍ SUMA	150
<b>3.5. JEDNODUCHÉ PŘÍKLADY</b>	<b>152</b>
3.5.1. ROZDĚLOVACÍ FUNKCE ČÁSTICE VE VNĚJŠÍM POLI	152
3.5.2. IDEÁLNÍ PLYN	155
3.5.3. KLASICKÝ OSCILÁTOR	157
<b>3.6. DALŠÍ PŘÍKLADY</b>	<b>158</b>
3.6.1. KVANTOVÝ OSCILÁTOR (VIBRÁTOR)	158
3.6.2. KVANTOVÝ ROTÁTOR	161
3.6.3. DVOUATOMOVÝ PLYN	163
<b>3.7. GRANDKANONICKÉ ROZDĚLENÍ</b>	<b>166</b>
3.7.1. ODVOZENÍ ROZDĚLENÍ	166
3.7.2. KONSTANTY ROZDĚLENÍ	166
3.7.3. PARTIČNÍ SUMA	168
<b>3.8. FERMIONY A BOSONY</b>	<b>170</b>
3.8.1. FERMI-DIRACOVO A BOSE-EINSTEINOVO ROZDĚLENÍ	171
3.8.2. SOUBOR FOTONŮ (PLANCKŮV VYZAŘOVACÍ ZÁKON)	173
3.8.3. SOUBOR FERMIONŮ (BÍLÝ TRPASLÍK, NEUTRONOVÁ HVĚZDA)	177
<b>3.9. FLUKTUACE A ENTROPIE</b>	<b>179</b>
3.9.1. FLUKTUACE	179
3.9.2. ENTROPIE	182
<b>3.10. ELEKTRICKY A MAGNETICKY AKTIVNÍ SYSTÉMY</b>	<b>183</b>
3.10.1. ZÁKLADNÍ POJMY	183
3.10.2. MAGNETICKY AKTIVNÍ MATERIÁLY	185
3.10.3. MŘÍŽOVÉ MODELY	189
<b>3.11. MONTE CARLO METODY</b>	<b>192</b>
3.11.1. REALIZACE ROZDĚLENÍ	192
3.11.2. MC METODY PRO MŘÍŽOVÉ MODELY	197
3.11.3. OPTIMALIZACE A ŘÍZENÉ OCHLAZOVÁNÍ	199
<b>3.12. NEROVNOVÁŽNÁ STATISTIKA</b>	<b>201</b>
3.12.1. BOLTZMANNOVA ROVNICE	201
3.12.2. BOLTZMANNŮV SRÁŽKOVÝ ČLEN	203
3.12.3. ROVNICE PŘENOSU (MOMENTOVÁ ROVNICE)	205
3.12.4. PRVNÍ TŘI MOMENTY	207

## INTEGRAČNÍ TENDENCE VE FYZICE – MÍSTO PŘEDMLUVY

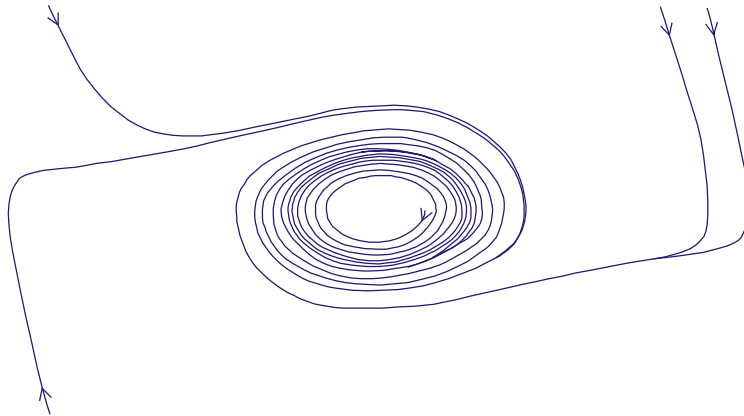
Isaak Newton	(1643-1727)	základní zákony optiky a mechaniky (1676)
Joseph Louis Lagrange	(1736-1813)	analytická mechanika (1788)
Hans Christian Öersted	(1777-1851)	elektrický proud má magnetické účinky (1820)
Michael Faraday	(1791-1867)	jev elektromagnetické indukce (1831)
James Clerk Maxwell	(1831-1879)	teorie elektromagnetického pole (1873)
Max Planck	(1858-1947)	záření absolutně černého tělesa (1901)
Albert Einstein	(1879-1955)	fotoelektrický jev (1905) speciální teorie relativity (1905) obecná teorie relativity (1916)
Niels Bohr	(1885-1962)	planetární model atomu (1913)
Louis de Broglie	(1892-1987)	dualismus vln a částic
Erwin Schrödinger	(1887-1961)	vlnová kvantová mechanika (1926)
Wolfgang Pauli	(1900-1958)	teorie spinu - Pauliho rovnice 1. teorie slabé interakce (30. léta)
Paul Adrien M. Dirac	(1900-1984)	Diracova rovnice, předpověď pozitronu (1928) kvantová elektrodynamika (1949) spoluautor kvantové teorie pole
Werner Heisenberg	(1901-1976)	maticová kvantová mechanika (1925) relace neurčitosti
Hideki Yukawa	(1907-1981)	1. teorie silné interakce (30. léta)
Richard Philips Feynman	(1918-1988)	spoluautor kvantové teorie pole Feynmanovy diagramy dráhový integrál v kvantové mechanice
Steven Weinberg	(1933)	teorie elektroslabé interakce (1967)
Abdul Salam	(1926)	teorie elektroslabé interakce
Rubbia, Wheeler, Hawking, Thorne, Misner, ...		

Sylabus, který se právě chystáte číst je třetím vydáním a současně prvním spojením všech tří napsaných částí. Text doznal minimálních změn. Budu vděčný za všechny připomínky a objevené chyby a nedostatky. Objevíte-li cokoli, co Vám vhání adrenalin do žil, napište mi na adresu: [kulhanek@fel.cvut.cz](mailto:kulhanek@fel.cvut.cz). Na tuto adresu směřujte i Vaše dotazy a ostatní připomínky. Některé zajímavé informace naleznete na adrese <http://www.aldebaran.cz>. Zde je také možné stáhnout poslední aktuální verzi tohoto sylabu.

Přeji hodně radosti z objevených zákonitostí přírody, pocitu moci, pochopíte-li hloubku úvah Vašich předchůdců a pocitu bezmoci, který Vás bude pohánět kupředu v okamžicích váhání. Těm studentům a pedagogům, kteří zjistí, že na této škole nemají co dělat, blahopřeji k bystrému úsudku a přejí důstojný odchod.

Petr Kulháněk, v Praze 1.1.2002

# *TF1: TEORETICKÁ MECHANIKA*



**STUDIJNÍ TEXT PRO DOKTORSKÉ STUDIUM**

**PETR KULHÁNEK**

## PŘEDMLUVA

Tento text je učebním textem pro přednášku „Teoretická fyzika 1“. Důraz je kladen zejména na pochopení fyzikálních zákonitostí a jejich matematického popisu. Potřebná matematika je probírána v samostatných kapitolách označovaných písmenem (M). Tyto kapitoly je třeba chápat jen jako nutný přehled, který si neklade nároky na matematickou přesnost ani úplnost.

Fyzika 20. století je poznamenána vznikem dvou oddělených fyzikálních směrů - *obecné teorie relativity* a *kvantové teorie*. Každý z těchto směrů popisuje svým způsobem pojem síly ve fyzice. V současné době známe čtyři silové interakce - gravitační, elektromagnetickou, silnou a slabou.

**Obecná teorie relativity** (geometrická teorie gravitace) popisuje gravitační interakci za pomoci zakřivené geometrie prostoru a času:

- *každé těleso svou přítomností zakřivuje prostoročas kolem sebe;*
- *každé těleso se v tomto zakřiveném prostoročase pohybuje po nejrovnějších možných drahách - tzv. geodetikách (reprezentují skutečné trajektorie gravitačně ovládaných těles).*

**Kvantová teorie pole** s úspěchem popisuje interakci elektromagnetickou, silnou a slabou za pomoci intermediálních (výměnných) částic:

- *Každá částice kolem sebe vysílá oblak intermediálních částic, které si může vyměňovat s ostatními částicemi a tím mezi nimi dochází k vzájemnému silovému působení.*

Tato výměna nesplňuje Heisenbergovy relace neurčitosti, proto je nepozorovatelná a příslušné výměnné částice nazýváme při procesu interakce virtuální. Intermediální částice jsou :

elektromagnetická interakce	foton
silná interakce	gluony (8 druhů)
slabá interakce	$W^+$ , $W^-$ , $Z^0$ .

Pro gravitační interakci předpokládá kvantová teorie existenci zatím hypotetických intermediálních částic : gravitonů.

Elektromagnetická interakce působí jen na částice s elektrickým nábojem, silná interakce působí na hadrony (*hadros* = silný) - hadrony dělíme na mezony složené z kvarku a antikvarku a baryony složené ze tří kvarků. Slabá interakce působí na leptony a hadrony. Gravitační interakce působí na všechny částice bez výjimky.

V průběhu let dochází ve fyzice ke vzniku mnoha nových odvětví, fyzika se diferencuje. Současně však probíhá integrační proces - snaha o jednotný popis fyzikálních jevů. Tak byla v minulém století pochopena společná podstata jevů elektrických a magnetických (Øersted, Faraday, Maxwell) a vnikla teorie elektromagnetického pole. Po vzniku kvantové teorie se objevila příslušná kvantová analogie - kvantová elektrodynamika a kvantová teorie elektromagnetického pole. V době relativně nedávné se podařilo „spojit“ elektromagnetickou a slabou interakci v teorii elektroslabé interakce (Weinberg, Salam). Nyní probíhají intenzivní pokusy připojit k teorii elektroslabé interakce ještě interakci silnou (tzv. velké sjednocení) a gravitační (supersjednocení, supergravitace). Následuje přehled významných objevů a událostí ve fyzice, které přispěly k tomuto integračnímu procesu.



# 1. TEORETICKÁ MECHANIKA

## 1. 1. ZÁKLADNÍ POJMY

### 1. 1. 1. Základní pojmy z mechaniky

**Mechanický systém:** jakákoli soustava částic nebo těles, které se rozhodneme popisovat (elektron, atom, Zeměkoule, planetární systém, ...).

**Kartézské souřadnice:** pro souřadnice a síly používáme označení:

$$\mathbf{x} \equiv \mathbf{r} \equiv (x_1, x_2, x_3) \equiv (x, y, z), \text{ resp. } \mathbf{F} \equiv (F_1, F_2, F_3) \equiv (F_x, F_y, F_z).$$

Pohybová rovnice hmotného bodu má tvar  $m d^2\mathbf{x}/dt^2 = \mathbf{F}$ .

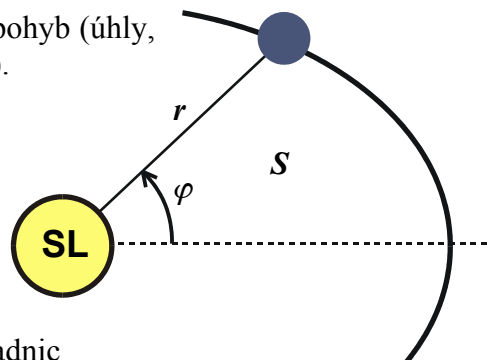
**Zobecněné souřadnice:** jakékoli parametry popisující pohyb (úhly, vzdálenosti, plochy). Označujeme je  $\mathbf{q} = (q_1, q_2, \dots)$ .

**Příklad: Pohyb planety kolem Slunce**

$q_1 = r(t)$  - vzdálenost od Slunce;

$q_2 = \varphi(t)$  - úhel průvodiče a zadané polopřímky;

$q_3 = S(t)$  - plocha opaná průvodičem.



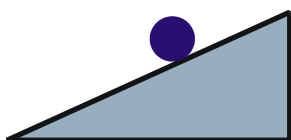
**Zobecněné rychlosti:** časové změny zobecněných souřadnic

**Příklad:**

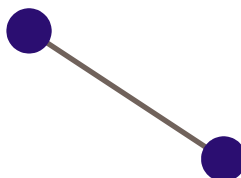
$v_r = dr/dt$	radiální rychlost,
$v_\varphi = d\varphi/dt$	úhlová rychlost,
$v_S = dS/dt$	plošná rychlost,
$v_x = dx/dt$	$x$ -ová složka rychlosti.

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

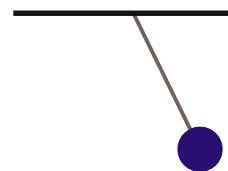
Těleso na nakloněné rovině



Dvě tělesa spojená tyčí



Kyvadlo



**Stupeň volnosti:** počet nezávislých údajů (parametrů), kterými lze zcela popsat pohyb systému (značíme  $f$ ).

**Příklad:**

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

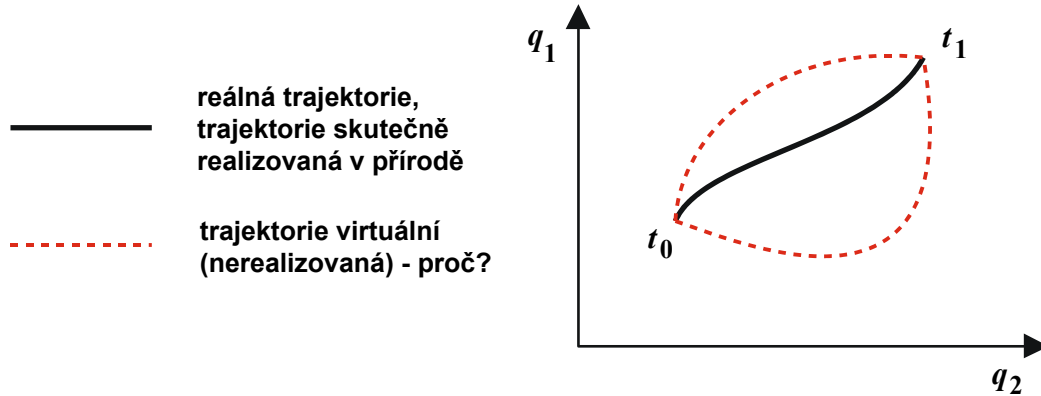
Pro systém  $N$  hmotných bodů s  $R$  vazbami platí  $f = 3N - R$ . Zobecněné souřadnice volíme vždy jako množinu nezávislých parametrů, které zcela popisují systém, tj. je jich právě  $f$ :

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

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

**Stav systému:** v klasické mechanice je v daném čase  $t_0$  stav systému zcela určen konfigurací  $\mathbf{q} \equiv (q_1, q_2, \dots, q_f)$  a tendencí (zobec. rychlostmi)  $\mathbf{v} \equiv (v_1, v_2, \dots, v_f)$ .

**Reálná a virtuální trajektorie:**



### 1. 1. 2. (M) Einsteinova sumační konvence

Vyskytnou-li se ve výrazu dva stejné indexy, potom přes ně automaticky sčítáme. Sčítací indexy budeme označovat malými písmeny abecedy ( $i, j, k \dots$ ):

$$a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_N b_N = \sum_{j=1}^N a_j b_j = a_j b_j \quad (1.1)$$

**Poznámka:** Na označení sčítacího indexu nezáleží:  $a_i b_i = a_j b_j = a_k b_k = a_1 b_1 + \dots + a_N b_N$ .

**Příklady:**

*Skalární součin dvou vektorů:*

$$\mathbf{a} \equiv (a_1, a_2, \dots, a_N) \quad ; \quad \mathbf{b} \equiv (b_1, b_2, \dots, b_N) \quad ;$$

$$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \dots + a_N b_N = a_j b_j \quad .$$

*Divergence:*

$$\mathbf{T} \equiv (T_1, T_2, T_3) \quad ;$$

$$\text{div } T = \frac{\partial T_1}{\partial x_1} + \frac{\partial T_2}{\partial x_2} + \frac{\partial T_3}{\partial x_3} = \frac{\partial T_i}{\partial x_i}$$

*Maticové násobení:*

$$\mathbf{A} = \{a_{ij}\}; \quad \mathbf{B} = \{b_{ij}\};$$

$$\{\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}\}_{ij} = \sum_{k=1}^N a_{ik} b_{kj} = a_{ik} b_{kj}.$$

Volné indexy jsou na obou stranách rovnosti (zde  $i, j$ ). Přes volný index se nesčítá. Němý (vázaný, sčítací) index je dvojice stejných indexů v jednom matematickém členu, přes který se sčítá (zde  $k$ ).

*Malý přírůstek funkce jedné proměnné:*

Mějme funkci jedné reálné proměnné  $f(q)$ , která hodnotě  $q$  přiřadí hodnotu  $f$ :

$$f(q): q \rightarrow f; \quad \text{potom} \quad \Delta f \cong \frac{df}{dq} \Delta q .$$

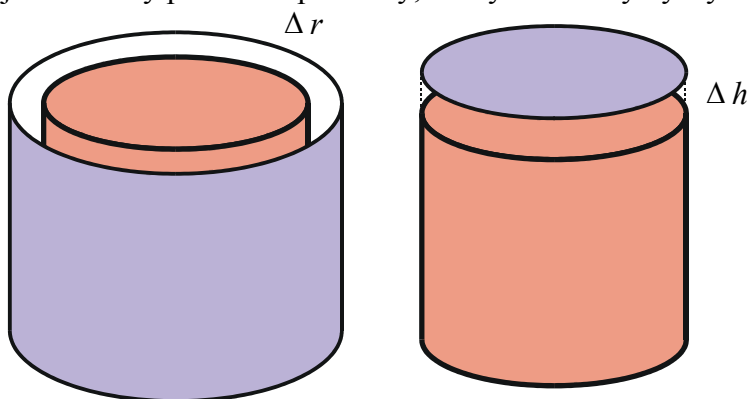
**Příklad:** Představme si kouli o poloměru  $r$ , jejíž objem je  $V(r) = 4/3 \pi r^3$ . Poloměr koule změněme o  $\Delta r$ . Její objem se pro malá  $\Delta r$  přibližně změní o  $\Delta V \cong dV/dr \cdot \Delta r = 4\pi r^2 \cdot \Delta r$ . Interpretace je zřejmá:  $4\pi r^2$  je plocha koule o poloměru  $r$  a  $\Delta r$  je tloušťka této plochy. Součin představuje změnu objemu koule.

*Malý přírůstek funkce více proměnných:*

Mějme funkci více reálných proměnných  $f(q_1, q_2, \dots, q_N)$ , která hodnotám  $\mathbf{q}$  přiřadí hodnotu  $f$ :

$$f(q): (q_1, \dots, q_N) \rightarrow f, \quad \text{potom} \quad \Delta f \cong \frac{\partial f}{\partial q_1} \cdot \Delta q_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial q_N} \cdot \Delta q_N = \frac{\partial f}{\partial q_j} \cdot \Delta q_j .$$

**Příklad:** Určeme přírůstek objemu válce, zvětšíme-li poloměr podstavy o  $\Delta r$  a výšku o  $\Delta h$ . Protože  $V(r, h) = \pi r^2 h$ , dostaneme  $\Delta V \cong \partial V/\partial r \cdot \Delta r + \partial V/\partial h \cdot \Delta h = 2\pi r h \Delta r + \pi r^2 \Delta h$ . První příspěvek je od změny poloměru podstavy, druhý od změny výšky válce:



*Infinitesimální (nekonečně malý) přírůstek funkce více proměnných:*

Zavedeme-li infinitesimální změny namísto malých přírůstků dostaneme vztah

$$df = \frac{\partial f}{\partial q_1} \cdot dq_1 + \dots + \frac{\partial f}{\partial q_N} \cdot dq_N = \frac{\partial f}{\partial q_j} \cdot dq_j .$$

**Poznámka:** Předchozí vztahy lze precizněji formulovat pomocí Lagrangeovy věty o přírůstku a věty o prvním diferenciálu. Pro naše účely však postačí jednoduché vztahy uvedené výše.

*Derivace složené funkce:*

Jestliže vnitřní proměnné  $q_i$  závisí na čase, potom má úplná časová derivace tvar:

$$f = f(q_1, q_2, \dots, q_N) ;$$

$$\frac{df}{dt} = \frac{\partial f}{\partial q_1} \cdot \frac{dq_1}{dt} + \dots + \frac{\partial f}{\partial q_N} \cdot \frac{dq_N}{dt} = \frac{\partial f}{\partial q_j} \cdot \frac{dq_j}{dt} = \frac{\partial f}{\partial q_j} \cdot \dot{q}_j .$$

**Příklad:** Určete první diferenciál a první časovou derivaci v polárních souřadnicích:

$$x(t) = r(t) \cos \varphi(t) ,$$

$$y(t) = r(t) \sin \varphi(t) ;$$

$$dx = \frac{\partial x}{\partial r} dr + \frac{\partial x}{\partial \varphi} d\varphi = \cos \varphi dr - r \sin \varphi d\varphi ,$$

$$dy = \frac{\partial y}{\partial r} dr + \frac{\partial y}{\partial \varphi} d\varphi = \sin \varphi dr + r \cos \varphi d\varphi ;$$

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \dot{r} \cos \varphi - r \dot{\varphi} \sin \varphi, \\ \dot{y} &= \dot{r} \sin \varphi + r \dot{\varphi} \cos \varphi.\end{aligned}$$

*K symbolice v kartézských souřadnicích:*

$$\mathbf{x} \equiv \vec{x} \quad \mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \equiv \vec{a} \cdot \vec{b}$$

Pro  $f=f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$  zapisujeme gradienty takto:

$$\vec{\nabla} f \equiv \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \equiv \left( \frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z} \right); \quad \vec{\nabla}_{\mathbf{v}} f \equiv \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \equiv \left( \frac{\partial f}{\partial v_x}, \frac{\partial f}{\partial v_y}, \frac{\partial f}{\partial v_z} \right),$$

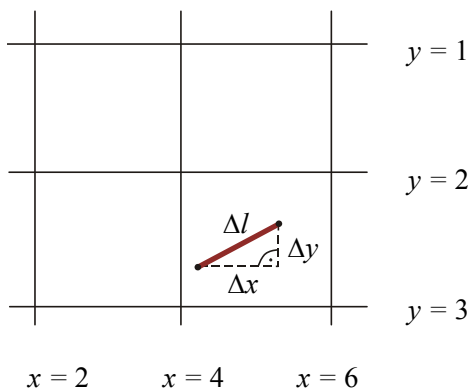
nebo v komponentách: 
$$\frac{\partial f}{\partial x_i} \equiv \partial_i f \equiv f_{,i}.$$

**Příklad:**

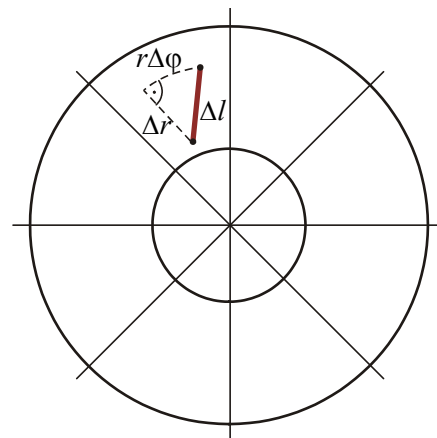
$$f(\mathbf{v}) = v^2 = \mathbf{v}^2 = \mathbf{v} \cdot \mathbf{v} = v_j v_j = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 = v^2 ;$$

$$\frac{\partial f}{\partial v_i} = \frac{\partial}{\partial v_i} v_j v_j = \delta_{ji} v_j + v_j \delta_{ji} = v_i + v_i = 2v_i, \quad \text{nebo} \quad \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial v^2}{\partial \mathbf{v}} = 2\mathbf{v}.$$

### 1. 1. 3. (M) Délkový element



$$\Delta l^2 = \Delta x^2 + \Delta y^2$$



$$\Delta l^2 \cong \Delta r^2 + r^2 \Delta \varphi^2$$

Pro infinitezimálně malé vzdálenosti přejdou přibližné rovnosti v přesné rovnosti. V ortogonálních systémech (souřadnicové sítě jsou vzájemně kolmé) lze délkový element vyjádřit vztahem

$$dl^2 = g_{11} dq_1^2 + g_{22} dq_2^2 + g_{33} dq_3^2, \quad ,$$

v neortogonálních obecně platí, že délkový element je kvadratickou funkcí přírůstků:

$$dl^2 = g_{ij} dq_i dq_j .$$

Poznamenejme, že platí sumační konvence. Koefficienty  $g_{ij}$  se nazývají *metrika* nebo *metrický tenzor*. Při jejich určování lze postupovat buď geometricky (viz horní obrázek) nebo z diferenciálů transformačních vztahů pro souřadnice (viz příklad pro polární souřadnice

z minulé kapitoly, kde byly vypočteny diferenciály  $dx$ ,  $dy$  pro tyto souřadnice). Analogicky postupujeme i pro další souřadnicové systémy:

*Polární souřadnice:*

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi \\ y &= r \sin \varphi \end{aligned} ; \quad dl^2 = dr^2 + r^2 d\varphi^2 \quad . \quad (1.2)$$

*Sférické souřadnice:*

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi \sin \theta \\ y &= r \sin \varphi \sin \theta \\ z &= r \cos \theta \end{aligned} ; \quad dl^2 = dr^2 + r^2 d\theta^2 + r^2 \sin^2 \theta d\varphi^2 \quad . \quad (1.3)$$

*Válcové souřadnice:*

$$\begin{aligned} x &= r \cos \varphi \\ y &= r \sin \varphi \\ z &= z \end{aligned} ; \quad dl^2 = dr^2 + r^2 d\varphi^2 + dz^2 \quad . \quad (1.4)$$

Kinetickou energii systému pak můžeme snadno v zobecněných souřadnicích určit za pomoci délkového elementu ze vztahu:

$$T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2} m \frac{dl^2}{dt^2} = \frac{1}{2} m g_{ij} \frac{dq_i dq_j}{dt^2} = \frac{1}{2} m g_{ij} \dot{q}_i \dot{q}_j \quad . \quad (1.5)$$

Speciálně pro předchozí souřadnice tedy platí:

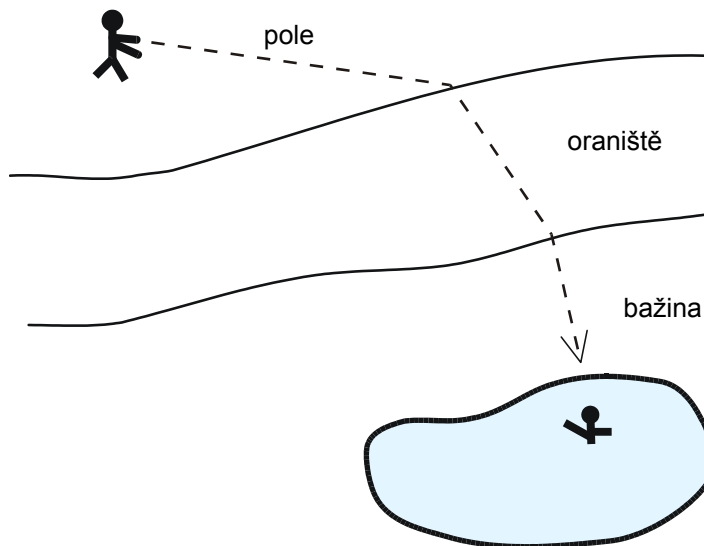
$$\begin{aligned} \text{Kartézské} \quad T(\dot{x}, \dot{y}, \dot{z}) &= \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) \\ \text{Polární} \quad T(r, \dot{r}, \dot{\varphi}) &= \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2) \\ \text{Sférické} \quad T(r, \theta, \dot{r}, \dot{\varphi}, \dot{\theta}) &= \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\theta}^2 + r^2 \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2) \\ \text{Válcové} \quad T(r, \dot{r}, \dot{\varphi}, \dot{z}) &= \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \dot{\varphi}^2 + \dot{z}^2) \end{aligned} \quad (1.6)$$

V jednotlivých souřadnicích se kinetická energie rozpadá na součet členů odpovídajících jednotlivým stupňům volnosti. Například v polárních souřadnicích se kinetická energie skládá z radiální části  $T_r$  a rotační části  $T_\varphi$ .

**Poznámka:** velikost kinetické energie nemůže záviset na volbě souřadnicového systému, kinetická energie je skalární funkcí zobecněných souřadnic. Další skalární funkcí je například potenciální energie.

## 1. 2. INTEGRÁLNÍ PRINCIPY MECHANIKY

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



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

$$v = \frac{dl}{dt} \quad \Rightarrow \quad dt = \frac{dl}{v} \quad \Rightarrow$$

$$t = \int_{t_0}^{t_1} \frac{dl}{v} = \int_{t_0}^{t_1} \frac{\sqrt{dx^2 + dy^2}}{v(x, y)} = \int_{x_0}^{x_1} \frac{\sqrt{1 + y'^2}}{v(x, y)} dx .$$

Předpokládáme, že známe prostorovou závislost rychlosti  $v(x, y)$ . Ta je dána typem terénu (pole, oraniště, bažina). Nyní hledáme takovou křivku  $y(x)$ , aby předchozí integrál měl minimální hodnotu. Řešením úloh tohoto typu se zabývá variační počet. Variačně lze zformulovat i základní zákony mechaniky, teorie elektromagnetického pole i dalších fyzikálních disciplín. V této kapitole se budeme zabývat jedním z integrálních principů mechaniky - tzv. Hamiltonovým principem.

### 1. 2. 1. Hamiltonův princip nejmenší akce

V úvodním příkladu zachránce volil trajektorii tak, aby celkový čas byl nejkratší. Všechny ostatní trajektorie (tzv. virtuální - nerealizované) jsou sice v principu možné, ale zachránce se po nich bude pohybovat delší dobu.

Základní myšlenka integrálních principů mechaniky je velmi podobná. Ze všech možných trajektorií systému se realizovala jen ta, která je nějakým způsobem výhodnější než ostatní. Hledisko výhodnosti se uvažuje obdobně úvodnímu příkladu:

*Hamiltonův princip:*

existuje funkce zobecněných souřadnic a rychlostí (tj. stavu) a případně času

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

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

$$S(t_0, t_1) \equiv \int_{t_0}^{t_1} L(t, q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f) dt \quad (1.7)$$

extrém (minimum).

Funkci  $L(t, \mathbf{q}, d\mathbf{q}/dt)$  nazýváme *Lagrangeova funkce (lagranžian)* a integrál  $S(t_0, t_1)$  *integrál akce*.

## 1. 2. 2. Lagrangeovy rovnice

Zavedme *virtuální posunutí*

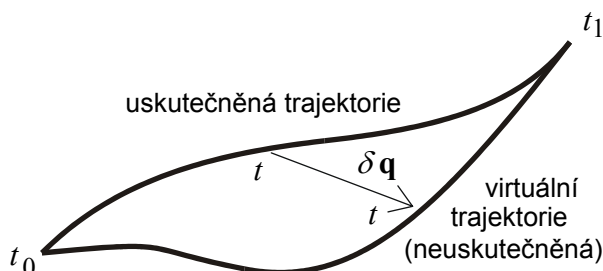
$$\begin{aligned} \delta q_k &= q_{k \text{ virt}}(t) - q_{k \text{ real}}(t) \quad , \text{ resp} \\ \delta \mathbf{q} &= \mathbf{q}_{\text{virt}}(t) - \mathbf{q}_{\text{real}}(t) \end{aligned} \quad (1.8)$$

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

$$1) \quad \delta \mathbf{q}(t_0) = \delta \mathbf{q}(t_1) = 0 \quad ; \quad (1.9)$$

$$2) \quad \delta \dot{\mathbf{q}} = \frac{d}{dt} \delta \mathbf{q} \quad . \quad (1.10)$$

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



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

Odvoďme nyní nutné podmínky extrémnosti integrálu akce:

$$\begin{aligned} \delta \int_{t_0}^{t_1} L(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt &= 0 \quad \Rightarrow \\ \int_{t_0}^{t_1} \delta L(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) dt &= 0 \quad \Rightarrow \\ \int_{t_0}^{t_1} \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta \dot{q}_k \right) dt &= 0 \quad , \end{aligned}$$

kde jsme z důvodu isochronnosti vynechali diferenciaci podle času. Druhý člen nyní za pomoci (1.10) integrujeme per partes:

$$\int_{t_0}^{t_1} \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} \delta q_k - \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k \right) dt + \left[ \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \delta q_k \right]_{t_0}^{t_1} = 0 \quad .$$

Poslední člen je vzhledem k (1.9) nulový a proto

$$\int_{t_0}^{t_1} \left( \frac{\partial L}{\partial q_k} - \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \delta q_k dt = 0 \quad .$$

Tato rovnost musí platit pro každé dva časy  $t_0, t_1$  a pro každé virtuální posunutí  $\delta q_k$ . Vzhledem k tomu, že  $\delta q_k$  jsou nezávislá (počet zobecněných souřadnic je roven počtu stupňů volnosti systému) musí být závorka v předchozím vztahu pro každé  $k$  nutně nulová, tj.:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad ; \quad k = 1, \dots, f \quad . \quad (1.11)$$

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

### Poznámky:

- 1) Lagrangeovy rovnice jsou pohybovými rovnicemi našeho systému v zobecněných souřadnicích. Jejich tvar nezávisí na volbě souřadnicové soustavy. Newtonovy rovnice musí být speciálním případem v kartézském souřadnicovém systému.
- 2) Rovnice je třeba doplnit o počáteční podmínky

$$\begin{aligned} q_k(t_0) &= q_{k0} \\ \dot{q}_k(t_0) &= \dot{q}_{k0} \end{aligned} \quad , \quad (1.12)$$

tj. zadat stav v nějakém počátečním čase  $t_0$ .

- 3) Lagrangeova funkce není jednoznačně určitelná, liší-li se například dvě Lagrangeovy funkce o konstantu (obecně i o některé funkce zobecněných souřadnic a rychlostí), potom pro obě Lagrangeovy funkce vyjdou stejné rovnice a tedy i stejné fyzikální řešení.
- 4) Hamiltonův princip v uvedené podobě platí jen pro nedisipativní systémy, tj. systémy ve kterých nedochází k tepelným ztrátám.
- 5) Lagrangeovy rovnice jsou jen nutnými podmínkami extrémálnosti integrálu akce, nikoli postačujícími.

Nejdůležitější úlohou daného vědního oboru je volba správné Lagrangeovy funkce. Zvolíme-li určitý tvar Lagrangeovy funkce, můžeme řešit příslušné Lagrangeovy rovnice a tato řešení porovnat s experimentálním průběhem trajektorií. Nesouhlasí-li, je vybraná Lagrangeova funkce špatná. Volba Lagrangeovy funkce patří mezi základní *axiomy* budované teorie. Zpravidla se za  $L$  vybírá vhodná skalární funkce (její hodnota nezávisí na volbě souřadnic). Pro jednoduché mechanické problémy známe dvě důležité skalární funkce: kinetickou a potenciální energii. V nejjednodušším případě by Lagrangeova funkce mohla být jejich lineární kombinací  $L = \alpha T + \beta V$ . Skutečně lze ukázat, že pro volbu  $\alpha = 1, \beta = -1$  dostáváme správné pohybové rovnice, v kartézském souřadnicovém systému rovnice Newtonovy - viz příklad 1. v následující kapitole. Proto

$$L(t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) = T(\mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}}) - V(t, \mathbf{q}) \quad . \quad (1.13)$$

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



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

### 1. 2. 3. Jednoduché příklady

#### Příklad 1: Hmotný bod v potenciálním poli $V(x, y, z)$

Hmotný bod má tři stupně volnosti, za zobecněné souřadnice zvolíme

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

potom

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

$$V(x, y, z) \dots \text{ daná funkce} \quad ;$$

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

Příslušné Lagrangeovy rovnice mají tvar

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} (m\dot{x}) + \frac{\partial V}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad m\ddot{x} = -\frac{\partial V}{\partial x} \quad ;$$

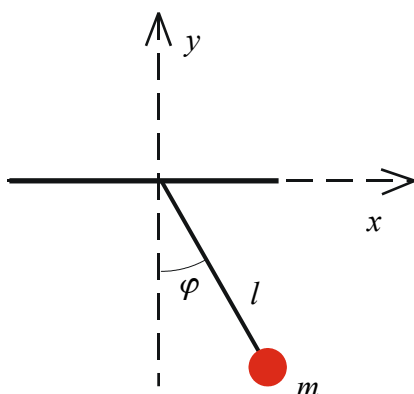
$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial L}{\partial y} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} (m\dot{y}) + \frac{\partial V}{\partial y} = 0 \quad \Rightarrow \quad m\ddot{y} = -\frac{\partial V}{\partial y} \quad ;$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} - \frac{\partial L}{\partial z} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} (m\dot{z}) + \frac{\partial V}{\partial z} = 0 \quad \Rightarrow \quad m\ddot{z} = -\frac{\partial V}{\partial z} \quad .$$

Všechny tři pohybové rovnice můžeme přepsat do běžného tvaru

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

#### Příklad 2: Rovinné kyvadlo



Rovinné kyvadlo má jediný stupeň volnosti. Za zobecněnou souřadnici zvolíme úhel  $\varphi$ . Potom

$$x(t) = l \cdot \sin \varphi(t) \quad ; \quad y(t) = -l \cdot \cos \varphi(t) \quad ,$$

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

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2) = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\varphi}^2 \quad ,$$

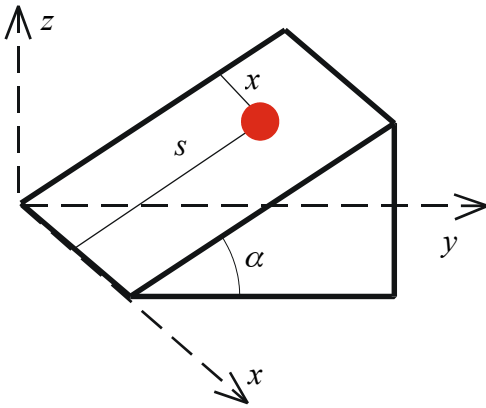
$$V = mgy = -mgl \cos \varphi \quad ,$$

$$L = T - V = \frac{1}{2} ml^2 \dot{\varphi}^2 + mgl \cos \varphi \quad .$$

Odpovídající Lagrangeova rovnice je

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{\varphi} + \frac{g}{l} \sin \varphi = 0 \quad .$$

Pro malé úhly je  $\sin \varphi \sim \varphi$  a rovnice přechází v běžnou rovnici pro matematické kyvadlo.

**Příklad 3: Pohyb po nakloněné rovině**

Pohyb po nakloněné rovině má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice budeme volit vzdálenosti od hran nakloněné roviny  $x(t)$  a  $s(t)$ . Standardním postupem máme:

$$x(t) = x(t) \quad ;$$

$$y(t) = s(t) \cos \alpha \quad ;$$

$$z(t) = s(t) \sin \alpha \quad ;$$

$$T = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{s}^2) \quad ;$$

$$V = mgz = mgs \cdot \sin \alpha \quad ,$$

$$L(s, \dot{x}, \dot{s}) = T - V = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{s}^2) - mgs \cdot \sin \alpha \quad ,$$

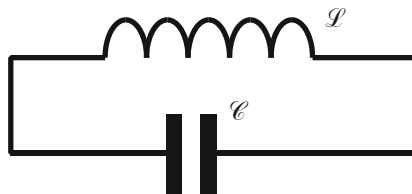
a pohybové rovnice jsou

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} = 0 \quad ,$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{s}} - \frac{\partial L}{\partial s} = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{s} = -g \sin \alpha \quad .$$

**1. 2. 4. Další příklady****Příklad 4: LC obvod**

Za zobecněnou souřadnici budeme volit náboj  $Q(t)$  odtoklý z kondenzátorové baterie. Příslušnou zobecněnou rychlostí je elektrický proud  $I = dQ/dt$ .



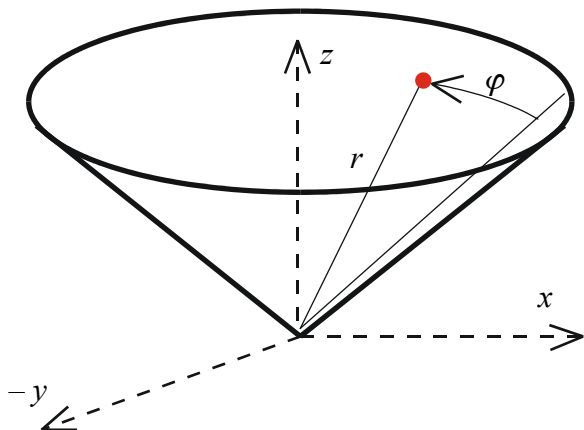
Označíme-li indukčnost  $\mathcal{L}$  a kapacitu  $\mathcal{C}$ , potom Lagrangeova funkce

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

poskytne správnou rovnici  $\mathcal{L}\mathcal{C}$  obvodu:

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} - \frac{\partial L}{\partial Q} = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{Q} + \frac{1}{\mathcal{L}\mathcal{C}} Q = 0 \quad .$$

Povšimněte si, že první člen v Lagrangeově funkci je energie vázaná v magnetickém poli cívky a druhý člen energie kondenzátorové baterie.

**Příklad 5:** Pohyb hmotného bodu po kuželové ploše v gravitačním poli

Pohyb má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice budeme volit vzdálenost částice od vrcholu kužele  $r$  a polární úhel  $\varphi$ . Využijeme tedy dvě ze sférických souřadnic, třetí - odklon  $\theta_0$  od osy  $z$  je na kuželové ploše konstantní. Za použití (1.3) příp. (1.6) snadno odvodíme

$$\begin{aligned}x(t) &= r(t) \cos \varphi(t) \sin \theta_0 \\y(t) &= r(t) \sin \varphi(t) \sin \theta_0 \\z(t) &= r(t) \cos \theta_0 ;\end{aligned}$$

$$T(r, \dot{r}, \dot{\varphi}) = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \sin^2 \theta_0 \dot{\varphi}^2) ;$$

$$V(r) = mgz = mgr \cos \theta_0 ;$$

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

a proto

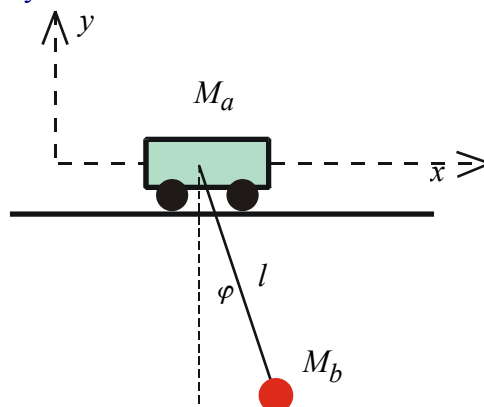
$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} - \frac{\partial L}{\partial r} = 0 \quad \Rightarrow \quad m\ddot{r} = mr \sin^2 \theta_0 \dot{\varphi}^2 - mg \cos \theta_0 ,$$

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} (mr^2 \dot{\varphi} \sin^2 \theta_0) = 0 .$$

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

**Příklad 6:** Rovinné kyvadlo s vodorovně pohyblivým závěsem

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



$$x_a(t) = x(t) \quad ; \quad x_b(t) = x(t) + l \sin \varphi(t) ,$$

$$y_a(t) = 0 \quad ; \quad y_b(t) = -l \cos \varphi(t) ;$$

$$\begin{aligned}L(x, \varphi, \dot{x}, \dot{\varphi}) &= \frac{1}{2} M_a (\dot{x}_a^2 + \dot{y}_a^2) + \frac{1}{2} M_b (\dot{x}_b^2 + \dot{y}_b^2) - M_a g y_a - M_b g y_b = \\ &= \frac{1}{2} M_a \dot{x}^2 + \frac{1}{2} M_b (\dot{x}^2 + l^2 \dot{\varphi}^2 + 2l\dot{x}\dot{\varphi} \cos \varphi) + M_b g l \cos \varphi .\end{aligned}$$

Dále bychom mohli nalézt Lagrangeovy rovnice a numericky je řešit.

## 1. 3. ZÁKONY ZACHOVÁNÍ V PŘÍRODĚ

### 1. 3. 1. Teorém Noetherové

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

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

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

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

- 1) Na pracovním stole jsme zkonstruovali nějaký mechanický stroj. Stroj spustíme a budeme sledovat jeho chování. Jestliže stejný experiment provedeme na stejném psacím stole v sousední místnosti, výsledek bude stejný. Provedeme-li ale tentýž experiment na stole v místnosti o patro výše, může dopadnout jinak, protože gravitační pole Země má na tomto stole jinou hodnotu. Tato fyzikální situace je *symetrická vzhledem k vodorovnému posunutí*, ale není symetrická vzhledem k svislému posunutí.
- 2) Vodičem teče konstantní proud. Kolem vodiče se vytvořilo časově neproměnné (stacionární) magnetické pole. Do tohoto pole vypustíme elektron a budeme sledovat jeho trajektorii. Vypustíme-li elektron o minutu později (počáteční rychlost a poloha elektronu musí být stejná), bude výsledná trajektorie totožná. Zde hovoříme o *symetrii vzhledem k časovému posunutí*. Kdyby proud nebyl konstantní, tato symetrie bude porušena, magnetické pole v různých časech různé a trajektorie elektronů odlišné.
- 3) 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.*
- 4) *Příklady dalších symetrií:* rotační symetrie; zrcadlová symetrie (záměna levého a pravého); výsledek experimentů je stejný ve všech souřadnicových systémech pohybujících se vůči sobě rovnoměrně přímočaře (Lorentzova symetrie).

V teoretické mechanice se seznámíme se zákonem zachování hybnosti, momentu hybnosti a energie a se symetriemi, které těmto zákonům zachování odpovídají. V kvantové teorii se seznámíme s celou řadou dalších důležitých symetrií, které vedou k zachování elektrického náboje, spinu, isospinu, parity, barvy a vůně kvarků a dalších kvantových čísel.

### 1. 3. 2. Zákon zachování hybnosti

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

$$L = L(t, q_1, \dots, q_{k-1}, q_{k+1}, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad . \quad (1.14)$$

Zobecněnou souřadnici, která se nevyskytuje v Lagrangeově funkci nazýváme *cyklickou*. Na  $q_k$  potom nezávisí ani pohybové rovnice a tím ani výsledek experimentu. *Situace je*

symetrická vůči prostorovému posunutí v zobecněné souřadnici  $q_k$  (viz první příklad symetrií).

Z pohybové rovnice pro tuto souřadnici  $q_k$  máme

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} = \text{const} .$$

Nalezli jsme tedy příslušnou zachovávající se veličinu.

**Definice:** Zobecněnou hybností odpovídající zobecněné souřadnici  $q_k$  nazveme

$$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \quad , \quad k = 1, \dots, f. \quad (1.15)$$

Tato veličina se zachovává, je-li zobecněná souřadnice  $q_k$  cyklická (nevyskytuje se v  $L$ ), tj. fyzikální situace je symetrická vzhledem k prostorovému posunutí v zobecněné souřadnici  $q_k$ .

Určeme nyní zobecněné hybnosti k příkladům 1 - 6 z kapitol 1.2.3 a 1.2.4.

**Příklad 1:**

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

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

**Příklad 2:**

$$p_\varphi \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = ml^2 \dot{\varphi} .$$

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

Zobecněná hybnost k úhlové proměnné se někdy nazývá **moment hybnosti**.

**Příklad 3:**

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

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

**Příklad 4\*:**

$$p_Q \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} = \mathcal{I} \dot{Q} .$$

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

**Příklad 5\*:**

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

Radiální hybnost  $p_r$  se nezachovává (při posunutí v  $r$  se mění gravitační pole), moment hybnosti  $p_\varphi$  se zachovává - situace je symetrická vzhledem k pootočení v úhlu  $\varphi$ ,  $\varphi$  je cyklická souřadnice.

**Příklad 6\*:**

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

Zachovává se hybnost soustavy  $p_x$ , nezachovává se moment hybnosti  $p_\varphi$ . Proč?

**1. 3. 3. Zákon zachování energie**

Nechť Lagrangeova funkce nezávisí explicitně na čase, tj.

$$L = L(q_1, \dots, q_f, \dot{q}_1, \dots, \dot{q}_f) \quad \Leftrightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial t} = 0 \quad . \quad (1.16)$$

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

$$\frac{dL}{dt} = \frac{\partial L}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial q_k} \cdot \dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \cdot \frac{d}{dt}(\dot{q}_k) \quad .$$

Vzhledem k předpokladu je první člen na pravé straně nulový,  $\partial L / \partial q_k$  vyjádříme z Lagrangeovy rovnice (1.11) a máme

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \right) \cdot \dot{q}_k + \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \cdot \frac{d}{dt}(\dot{q}_k) \quad .$$

Členy napravo upravíme za pomoci vztahu pro derivaci součinu dvou funkcí

$$\frac{dL}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k \right)$$

a po převedení na jednu stranu rovnosti zjistíme, že

$$\frac{d}{dt} \left( \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L = \text{const} \quad .$$

Opět jsme tedy našli zachovávanou veličinu.

**Definice:** *Zobecněnou energii* nazveme

$$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \dot{q}_k - L \quad . \quad (1.17)$$

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

V příkladech 1 - 6 se energie zachovává, Lagrangeovy funkce nezávisí explicitně na čase, všechny situace jsou symetrické vůči časovému posunutí. Postupně máme:

$$E_1 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}} \dot{y} + \frac{\partial L}{\partial \dot{z}} \dot{z} - L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + V(x, y, z),$$

$$E_2 = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \dot{\varphi} - L = \frac{1}{2} m l^2 \dot{\varphi}^2 - mgl \cos \varphi,$$

$$E_3 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{s}} \dot{s} - L = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{s}^2) + mgs \sin \alpha,$$

$$E_4 = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} \dot{Q} - L = \frac{1}{2} \mathcal{L} \dot{Q}^2 + \frac{Q^2}{2\mathcal{E}},$$

$$E_5 = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}} \dot{r} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \dot{\varphi} - L = \frac{1}{2} m (\dot{r}^2 + r^2 \sin^2 \theta_0 \dot{\varphi}^2) + mgr \cos \theta_0,$$

$$E_6 = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} \dot{\varphi} - L = \frac{1}{2} M_a \dot{x}^2 + \frac{1}{2} M_b (\dot{x}^2 + l^2 \dot{\varphi}^2 + 2l\dot{x}\dot{\varphi} \cos \varphi) - M_b gl \cos \varphi.$$

Povšimněte si, že ve všech těchto jednoduchých příkladech je

$$E = T + V \quad . \quad (1.18)$$

Tato relace ale platí jen pro speciální tvary Lagrangeovy funkce. V obecném případě nelze Lagrangeovu funkci ani energii rozdělit na kinetickou a potenciální část. Energie je však i nadále vždy definována vztahem (1.17).

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

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

$c$  je rychlost navíjení. Lagrangeova funkce kyvadla

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

nyní explicitně závisí na čase a energie se nezachovává. Rozhoupejme kyvadlo a sledujme jeho kmity. Udělejme totéž o minutu později. Experiment dopadne jinak, protože 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 isotropní (stejný ve všech směrech), zachovává se moment hybnosti; je-li prostor neměnný v čase, zachovává se energie.

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

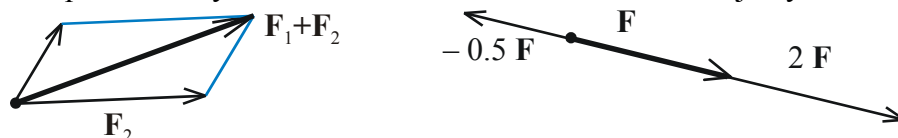
## 1. 4. HAMILTONOVY KANONICKÉ ROVNICE

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

- 1) Pro řešení diferenciálních rovnic prvního řádu je vypracováno velké množství numerických metod a tak Hamiltonovy rovnice bývají většinou pro numerické řešení vhodnější než rovnice Lagrangeovy.
- 2) Za pomoci Hamiltonových rovnic lze snadno zapsat časový vývoj libovolné dynamické proměnné, tj. nejenom zvolených zobecněných souřadnic.
- 3) Hamiltonovy rovnice lze přepsat do velmi jednoduchého tvaru s pomocí tzv. Poissonových závorek, které z matematického hlediska představují Lieovu algebru. Vlastnosti Lieovy algebry jsou určeny nezávisle na objektech, které ji tvoří. Proto bude možné tuto strukturu snadno přenést do kvantové mechaniky.

### 1. 4. 1. (M) Lieova algebra

S pojmem vektoru jste se pravděpodobně setkali poprvé ve fyzice (například rychlost, síla). Zde jste vystačili s představou úseček opatřených na jednom konci šipkou, se kterými lze provádět dvě operace: skládání vektorů (*sčítání*) a natahování vektorů (*násobení skalárem*). Tato představa byla v matematice zobecněna i na další objekty.



Stačí pro ně definovat sčítání a násobení skalárem tak, aby tyto operace zachovávaly základní vlastnosti skládání a natahování vektorů. Množina takových objektů se nazývá *lineární vektorový prostor*. Připomeňme si nyní jeho definici ze základního kursu matematiky:

Označme  $A$  lineární vektorový prostor, necht'  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in A$ ;  $R(C)$  množinu reálných (komplexních) čísel, necht'  $\alpha, \beta, \gamma \in R(C)$ .

**Definice:** řekneme, že  $A$  je lineární vektorový prostor nad množinou reálných (komplexních) čísel, jsou-li pro prvky tohoto prostoru definovány operace

$$\begin{array}{llll} + & : & A \times A \rightarrow A & \text{sčítání vektorů} & \mathbf{z} = \mathbf{x} + \mathbf{y} \\ \cdot & : & A \times R(C) \rightarrow A & \text{násobení vektoru skalárem} & \mathbf{z} = \alpha \cdot \mathbf{x}, \end{array}$$

které mají následující vlastnosti:

$$\begin{array}{ll} 1) & \mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{x}, & \mathbf{x} + (\mathbf{y} + \mathbf{z}) = (\mathbf{x} + \mathbf{y}) + \mathbf{z}, \\ 2) & \alpha \cdot (\mathbf{x} + \mathbf{y}) = \alpha \cdot \mathbf{x} + \alpha \cdot \mathbf{y}, & (\alpha + \beta) \cdot \mathbf{x} = \alpha \cdot \mathbf{x} + \beta \cdot \mathbf{x}, \\ 3) & \alpha \cdot (\beta \cdot \mathbf{x}) = (\alpha\beta) \cdot \mathbf{x}, & 1 \cdot \mathbf{x} = \mathbf{x}, \\ 4) & \mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{x} + \mathbf{z} \Rightarrow & \mathbf{y} = \mathbf{z}. \end{array}$$

#### Poznámky:

- 1) Operace "+" přiřazuje dvěma prvkům prostoru  $A$  opět prvek prostoru  $A$ . Pro  $n$ -tici čísel může být operace "+" definována takto:  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$ ,  $\mathbf{y} = (y_1, \dots, y_N)$ ;  $\mathbf{x} + \mathbf{y} \equiv (x_1 + y_1, \dots, x_N + y_N)$ .
- 2) Operace " $\cdot$ " přiřazuje prvku prostoru  $A$  a reálnému (komplexnímu) číslu opět prvek prostoru  $A$ . Pro  $n$ -tici čísel může být operace " $\cdot$ " definována takto:  $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_N)$ ;  $\alpha \cdot \mathbf{x} \equiv (\alpha x_1, \dots, \alpha x_N)$ .
- 3) V lineárním vektorovém prostoru lze zvolit skupinu lineárně nezávislých vektorů (bazi) tak, že každý prvek prostoru lze napsat jako lineární kombinaci prvků baze:

$$\mathbf{x} = \sum_{l=1}^N x_l \mathbf{e}_l \quad ; \quad \{\mathbf{e}_l\}_{l=1}^N \quad \dots \quad \text{prvky baze} \quad . \quad (1.19)$$



Veličiny  $x_l$  jsou koeficienty lineární kombinace, nazýváme je *souřadnice prvku  $\mathbf{x}$*  v bazi  $\{\mathbf{e}_l\}$ . Počet prvků baze nazýváme *dimenze prostoru*. Baze musí být úplná, tj. žádný její prvek nesmí chybět, jde o maximální množinu lineárně nezávislých vektorů.

**Definice:** Lineární vektorový prostor s operacemi "+" a "." nazveme Lieovou algebrou, je-li v něm navíc definována operace

$$[\cdot, \cdot] : A \times A \rightarrow A \quad \text{Lieova operace} \quad \mathbf{z} = [\mathbf{x}, \mathbf{y}]$$

s vlastnostmi:

$$1) \quad [\mathbf{x}, \mathbf{y}] = -[\mathbf{y}, \mathbf{x}] \quad \text{antisymetrie} \quad (1.20)$$

$$2) \quad [\mathbf{x} + \mathbf{y}, \mathbf{z}] = [\mathbf{x}, \mathbf{z}] + [\mathbf{y}, \mathbf{z}] \quad \text{linearita} \quad (1.21)$$

$$3) \quad [\alpha \cdot \mathbf{x}, \mathbf{y}] = \alpha \cdot [\mathbf{x}, \mathbf{y}] \quad \text{linearita} \quad (1.22)$$

$$4) \quad [\mathbf{x}, [\mathbf{y}, \mathbf{z}]] + [\mathbf{y}, [\mathbf{z}, \mathbf{x}]] + [\mathbf{z}, [\mathbf{x}, \mathbf{y}]] = 0 \quad (1.23)$$

#### Poznámky:

1) Jde o další zobrazení, při kterém dvojici vektorů přiřadíme vektor.

2) Z linearity v prvním argumentu a antisymetrie plyne linearita ve druhém argumentu.

#### Příklad 1: $A$ ... množina uspořádaných trojic

$$\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \quad , \quad \mathbf{y} = (y_1, y_2, y_3) \quad ; \quad x_i, y_i \in C(R)$$

$$+ : \quad \mathbf{x} + \mathbf{y} \equiv (x_1 + y_1, x_2 + y_2, x_3 + y_3) ,$$

$$\cdot : \quad \alpha \cdot \mathbf{x} \equiv (\alpha x_1, \alpha x_2, \alpha x_3) ,$$

$$[\cdot, \cdot] : \quad [\cdot, \cdot] \equiv \mathbf{x} \times \mathbf{y} \quad .$$

Lieova algebra je definována jako vektorový součin. Ověřte, že vektorový součin splňuje všechny vlastnosti Lieovy algebry (1.20) až (1.23).

#### Příklad 2: $A$ - množina čtvercových matic $n \times n$ . Pro konkrétnost budeme uvažovat matice $2 \times 2$

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad ; \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{pmatrix} ,$$

$$+ : \quad \mathbf{A} + \mathbf{B} \equiv \begin{pmatrix} a_{11} + b_{11} & a_{12} + b_{12} \\ a_{21} + b_{21} & a_{22} + b_{22} \end{pmatrix} ,$$

$$\cdot : \quad \alpha \cdot \mathbf{A} \equiv \begin{pmatrix} \alpha a_{11} & \alpha a_{12} \\ \alpha a_{21} & \alpha a_{22} \end{pmatrix} ,$$

$$[\cdot, \cdot] : \quad [\mathbf{A}, \mathbf{B}] \equiv \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \quad .$$

Lieova algebra je definována za pomoci maticového násobení jako tzv. komutátor. Je-li  $\mathbf{AB} = \mathbf{BA}$ , matice komutují a komutátor je roven nule. Ověřte, že komutátor splňuje všechny vlastnosti Lieovy algebry (1.20) až (1.23).

#### Strukturní koeficienty Lieovy algebry

Rozvineme-li prvky prostoru do příslušné baze, můžeme psát:

$$[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = [x_k \mathbf{e}_k, y_l \mathbf{e}_l] = x_k y_l [\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l] \quad . \quad (1.24)$$

K určení Lieovy operace postačí znát výsledek operace jen pro prvky baze. Je zřejmé, že výsledek operace  $[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l]$  je prvek prostoru a můžeme ho proto opět rozvinout do baze  $\{\mathbf{e}_m\}$ . Koeficienty rozvoje (souřadnice)  $c^m$  budou ale záviset na tom, pro které dva prvky baze Lieovu operaci provádíme:

$$[\mathbf{e}_k, \mathbf{e}_l] = c_{kl}^m \mathbf{e}_m \quad . \quad (1.25)$$

Veličiny  $c_{kl}^m$  se nazývají strukturní koeficienty Lieovy algebry. Výsledek Lieovy operace lze nyní zapsat ve tvaru

$$[\mathbf{x}, \mathbf{y}] = c_{kl}^m x_k y_l \mathbf{e}_m \quad . \quad (1.25)$$

Zadáním strukturních koeficientů je určena celá Lieova algebra. Z antisymetrie Lieovy operace (1.20) plyne antisymetrie strukturních koeficientů

$$c_{kl}^m = -c_{lk}^m \quad . \quad (1.26)$$

### Příklad 1: - pokračování

Na trojicích lze zvolit bazi

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1 &= (1, 0, 0) & ; & & \mathbf{e}_2 &= (0, 1, 0) & ; & & \mathbf{e}_3 &= (0, 0, 1) & ; \\ [\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2] &= \mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_3 & , & & & & & & & & \\ [\mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3] &= \mathbf{e}_2 \times \mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1 & , & & & & & & & & \\ [\mathbf{e}_3, \mathbf{e}_1] &= \mathbf{e}_3 \times \mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2 & . & & & & & & & & \end{aligned}$$

Nenulové strukturní koeficienty tedy jsou

$$c_{12}^3 = c_{23}^1 = c_{31}^2 = 1 \quad ; \quad c_{21}^3 = c_{32}^1 = c_{13}^2 = -1 \quad .$$

### Příklad 2: - pokračování

Na komplexních maticích  $2 \times 2$  lze zvolit bazi

$$\sigma_0 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_1 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_2 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad \sigma_3 = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad .$$

$\sigma_0$  je jednotková matice (až na normovací konstantu  $1/2$ );  $\sigma_k$   $k = 1, 2, 3$  jsou tzv. Pauliho matice, v kvantové teorii uvidíme, že mají význam operátoru spinu. Snadno vypočteme (ověřte!)

$$\begin{aligned} [\sigma_1, \sigma_2] &= \sigma_1 \sigma_2 - \sigma_2 \sigma_1 = i \sigma_3 \quad , \\ [\sigma_2, \sigma_3] &= \sigma_2 \sigma_3 - \sigma_3 \sigma_2 = i \sigma_1 \quad , \\ [\sigma_3, \sigma_1] &= \sigma_3 \sigma_1 - \sigma_1 \sigma_3 = i \sigma_2 \quad , \\ [\sigma_0, \sigma_1] &= [\sigma_0, \sigma_2] = [\sigma_0, \sigma_3] = 0 \quad . \end{aligned}$$

Jednotková matice komutuje s každou maticí. Nenulové strukturní koeficienty jsou

$$c_{12}^3 = c_{23}^1 = c_{31}^2 = i \quad ; \quad c_{21}^3 = c_{32}^1 = c_{13}^2 = -i \quad .$$

Pro matice (i jiné objekty, u kterých je definováno násobení mezi objekty) platí ještě další důležité relace:

$$[\mathbf{AB}, \mathbf{C}] = \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B} \quad , \quad (1.28)$$

$$[\mathbf{A}, \mathbf{BC}] = \mathbf{B}[\mathbf{A}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{C} \quad . \quad (1.29)$$

### Důkaz:

$$\begin{aligned} \mathbf{A}[\mathbf{B}, \mathbf{C}] + [\mathbf{A}, \mathbf{C}]\mathbf{B} &= \mathbf{A}(\mathbf{BC} - \mathbf{CB}) + (\mathbf{AC} - \mathbf{CA})\mathbf{B} = \\ &= \mathbf{ABC} - \mathbf{ACB} + \mathbf{ACB} - \mathbf{CAB} = \mathbf{ABC} - \mathbf{CAB} = [\mathbf{AB}, \mathbf{C}] \quad . \end{aligned}$$

Analogicky dokážeme i druhou relaci. Pomocí těchto vztahů můžeme určit Lieovu operaci i pro mocniny matic, například:

$$[\mathbf{A}^2, \mathbf{B}] = [\mathbf{A}\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}[\mathbf{A}, \mathbf{B}] + [\mathbf{A}, \mathbf{B}]\mathbf{A} .$$

Podobně lze ze znalosti základní operace  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$  a vztahů (1.28), (1.29) určit postupně výsledek operace  $[\mathbf{A}^k, \mathbf{B}^l]$ .

## 1. 4. 2. Hamiltonovy rovnice

S pomocí definice zobecněné hybnosti (1.15) můžeme Lagrangeovy rovnice (1.11) přepsat do tvaru

$$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} \quad ; \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \dot{p}_k \equiv \frac{\partial L}{\partial q_k} , \quad (1.30)$$

který silně připomíná Newtonovy rovnice v kartézských souřadnicích. Najdeme nyní diferenciál energie za pomoci jejího definičního vztahu (1.17)

$$E = p_k \dot{q}_k - L(t, q, \dot{q}) \quad \Rightarrow \\ dE = \dot{q}_k dp_k + p_k d\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \frac{\partial L}{\partial q_k} dq_k - \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} d\dot{q}_k .$$

V předposledním členu vyjádříme  $\partial L / \partial q_k$  z pohybové rovnice (1.30), v posledním členu využijeme definici zobecněné hybnosti:

$$dE = \dot{q}_k dp_k + p_k d\dot{q}_k - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \dot{p}_k dq_k - p_k d\dot{q}_k .$$

Členy s diferenciály zobecněných rychlostí se odečtou a zbývá

$$dE = - \frac{\partial L}{\partial t} dt - \dot{p}_k dq_k + \dot{q}_k dp_k . \quad (1.31)$$

Funkci, jejíž diferenciál jsme právě našli označíme

$$E = H(t, \mathbf{q}, \mathbf{p}) . \quad (1.32)$$

Koeficienty v diferenciálu (1.31) musí být příslušné parciální derivace funkce  $H$ :

$$- \frac{\partial L}{\partial t} = \frac{\partial H}{\partial t} \quad ; \quad - \dot{p}_k = \frac{\partial H}{\partial q_k} \quad ; \quad \dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} . \quad (1.33)$$

Funkce  $H$  se nazývá *Hamiltonova funkce*. Hamiltonova funkce je energie přepsaná do proměnných  $t, q_k, p_k$ . V (1.31) se odečetly diferenciály rychlostí, proto lze vždy nalézt takovou transformaci

$$t, \mathbf{q}, \dot{\mathbf{q}} \quad \rightarrow \quad t, \mathbf{q}, \mathbf{p} , \quad (1.34)$$

aby energie byla funkcí zobecněných souřadnic a zobecněných hybností. Tato transformace se nazývá *Legendreova duální transformace*. Poslední dvě rovnice z relace (1.33) jsou *Hamiltonovy kanonické rovnice* (kanos - zákon, souhrn pravidel):

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k} \quad ; \quad \dot{p}_k = - \frac{\partial H}{\partial q_k} . \quad (1.35)$$

Při řešení problému Hamiltonovými rovnicemi

- určíme z Lagrangeovy funkce zobecněné hybnosti a zobecněnou energii,
- ze zobecněné energie vyloučíme zobecněné rychlosti - vyjádříme je za pomoci zobecněných hybností, tj. provedeme Legendreovu duální transformaci,
- napišeme Hamiltonovy rovnice,
- řešíme je.

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

$$q_k(t_0) = q_{k0} \quad ; \quad p_k(t_0) = p_{k0} \quad . \quad (1.36)$$

**Příklad:** Rovinný pohyb planety (hmotnost  $m$ ) kolem Slunce (hmotnost  $M$ ).

Předpokládáme  $M \gg m$  ; tj. Slunce se nepohybuje. Pohyb má dva stupně volnosti, za zobecněné souřadnice zvolíme polární souřadnice  $q_1 = r(t)$  ;  $q_2 = \varphi(t)$  - vzdálenost planety od Slunce a úhel spojnice planeta - Slunce od zvolené polopřímky.

Z (1.6) a z gravitačního zákona víme, že

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

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

Kdybychom řešili úlohu z Lagrangeových rovnic, měli bychom

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

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial \varphi} = 0 \quad \Rightarrow \quad r^2 \ddot{\varphi} + 2r \dot{r} \dot{\varphi} = 0 \quad .$$

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

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

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

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

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

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

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

Hamiltonovy kanonické rovnice jsou

$$\begin{aligned} \dot{r} &= \frac{\partial H}{\partial p_r} = \frac{p_r}{m} \quad , & \dot{p}_r &= -\frac{\partial H}{\partial r} = +\frac{p_\varphi^2}{mr^3} - G\frac{mM}{r^2} \quad , \\ \dot{\varphi} &= \frac{\partial H}{\partial p_\varphi} = \frac{p_\varphi}{mr^2} \quad , & \dot{p}_\varphi &= -\frac{\partial H}{\partial \varphi} = 0 \quad . \end{aligned}$$

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

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

### 1. 4. 3. Harmonický oscilátor

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

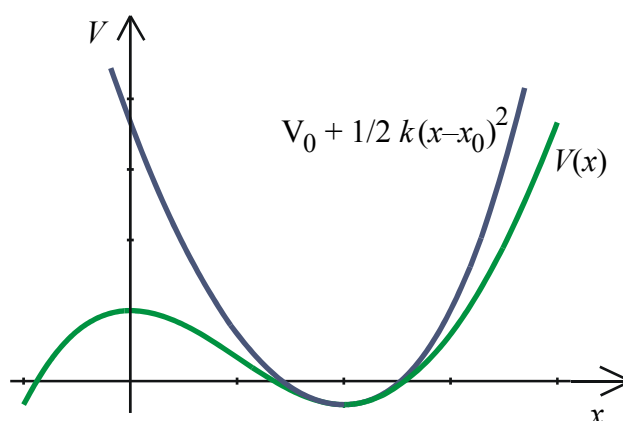
Představme si částici v poli potenciální energie s minimem v bodě  $x_0$  a hodnotou minima  $V_0 = V(x_0)$ . Provedme Taylorův rozvoj funkce  $V(x)$  v okolí minima do druhého řádu:

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

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

$$V(x) = V(x_0) + \frac{1}{2} V''(x_0) \cdot (x - x_0)^2 = V_0 + \frac{1}{2} k (x - x_0)^2 \quad , \quad \text{kde } k \equiv V''(x_0) \quad . \quad (1.37)$$

Potenciální energii jsme tedy nahradili parabolickou závislostí - viz obrázek.



*Harmonickým oscilátorem* nazýváme systém s parabolickou závislostí potenciální energie (1.37). Dostí přesně tuto závislost splňuje například těleso zavěšené na pružině v gravitačním poli. Veličina  $k \equiv V''(x_0)$  se nazývá *tuhost oscilátoru*.

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

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}kx^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \quad \Rightarrow \quad \ddot{x} + \frac{k}{m}x = 0 \quad . \quad (1.38)$$

Obecné řešení této rovnice je

$$x(t) = c_1 \cos \omega t + c_2 \sin \omega t, \quad \text{kde } \omega \equiv \sqrt{\frac{k}{m}} \quad (1.39-40)$$

Pro následující počáteční podmínky plyne řešení:

$$x(0) = A \quad ; \quad \dot{x}(0) = 0 \quad \Rightarrow \quad x(t) = A \cos \omega t \quad . \quad (1.41-42)$$

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

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 - \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad . \quad (1.43)$$

Řešme nyní úlohu za pomoci Hamiltonových rovnic:

$$p = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} = m\dot{x} \quad \Rightarrow \quad \dot{x} = \frac{p}{m} \quad ,$$

$$E = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} \dot{x} - L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad .$$

Po vyloučení rychlosti z  $E$  dostáváme Hamiltonovu funkci

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \quad (1.44)$$

a Hamiltonovy rovnice

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

Řešení této soustavy se stejnými počátečními podmínkami vede k

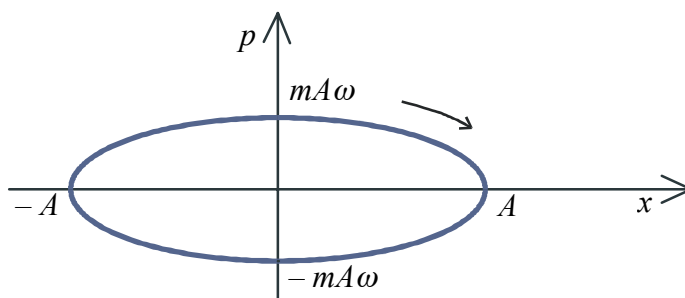
$$x(t) = A \cos \omega t \quad ,$$

$$p(t) = -mA\omega \sin \omega t = m\dot{x} \quad . \quad (1.45)$$

Vyloučíme-li z (1.45) čas (na pravých stranách ponecháme jen trigonometrické funkce, rovnice umocníme na druhou a sečteme), získáme rovnici trajektorie ve fázových proměnných  $x, p$ :

$$\left(\frac{x}{A}\right)^2 + \left(\frac{p}{mA\omega}\right)^2 = 1 \quad . \quad (1.46)$$

Fázovou trajektorii harmonického oscilátoru je elipsa.



Na závěr určíme klasickou hustotu pravděpodobnosti  $w(x)$  výskytu částice mezi krajními

polohami  $-A$ ,  $A$ . Pro pravděpodobnost, že se částice nachází v okolí  $\Delta x$  bodu  $x$  platí:



$$\Delta P \cong \frac{2\Delta t}{T} = \frac{2\Delta x/v(x)}{2\pi/\omega} = \frac{\omega}{\pi v(x)} \Delta x, \quad (1.46)$$

kde  $T$  je perioda pohybu a  $2\Delta t$  je doba, po kterou částice pobývá v okolí bodu  $x$ . Okolím prolétá za periodu  $T$  částice dvakrát (tam a zpět), proto je v čitateli  $2\Delta t$ .

Hustota pravděpodobnosti je

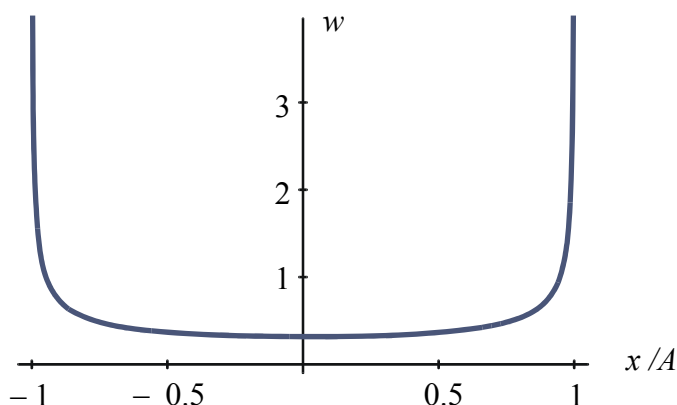
$$w(x) = \frac{dP}{dx} = \frac{\omega}{\pi v(x)}. \quad (1.47)$$

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

$$\frac{1}{2}mv^2 + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 = \frac{1}{2}m\omega^2 A^2 \quad \Rightarrow \quad v(x) = \omega\sqrt{A^2 - x^2}. \quad (1.48)$$

Konečný vztah má tvar

$$w(x) = \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}}. \quad (1.49)$$



Hustota pravděpodobnosti výskytu částice je nejvyšší v bodech obratu  $-A$ ,  $A$  a nejnižší v místě minima potenciální energie. V kvantové teorii poznáme modifikaci tohoto průběhu pro částice mikrosvěta. Poznamenejme ještě, že

Celková pravděpodobnost výskytu částice v oblasti  $(-A, A)$  je rovna jedné.

$$\int_{-A}^{+A} w(x) dx = \int_{-A}^{+A} \frac{1}{\pi\sqrt{A^2 - x^2}} dx = \frac{1}{\pi} \left[ \arcsin\left(\frac{x}{A}\right) \right]_{-A}^{+A} = 1. \quad (1.50)$$

#### 1. 4. 4. Poissonova formulace Hamiltonových rovnic

Uvažujme obecnou dynamickou proměnnou  $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$ , která je funkcí zobecněných souřadnic a zobecněných hybností (souřadnice, hybnost, potenciální energie, součin potenciální a kinetické energie ...). Její časový vývoj je dán vztahem

$$\dot{A} = \frac{dA}{dt} = \frac{\partial A}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial A}{\partial p_k} \dot{p}_k = \frac{\partial A}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial H}{\partial p_k} - \frac{\partial A}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial H}{\partial q_k}, \quad (1.51)$$

kde jsme časové derivace fázových proměnných  $\mathbf{q}$ ,  $\mathbf{p}$  vyjádřili z Hamiltonových rovnic.

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

$$\{f, g\} \equiv \frac{\partial f}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial g}{\partial p_k} - \frac{\partial f}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial g}{\partial q_k} \quad (1.52)$$

nazýváme Poissonovou závorkou funkcí  $f, g$ .

Časový vývoj (1.51) obecné dynamické proměnné je vzhledem k definici (1.52) dán jako Poissonova závorka příslušné dynamické proměnné a Hamiltonovy funkce:

$$\dot{A} = \{A, H\} \quad (1.53)$$

**Poznámka:** Pro  $A = A(t, \mathbf{q}, \mathbf{p})$  bude  $dA/dt = \partial A/\partial t + \{A, H\}$ , tento případ je však vzácný.

*Vlastnosti Poissonových závorek:*

$$\begin{aligned} 1) \quad & \{f, g\} = -\{g, f\} \\ 2) \quad & \{f + g, h\} = \{f, h\} + \{g, h\}; \quad \{\alpha f, h\} = \alpha \{f, h\} \\ 3) \quad & \{f, \{g, h\}\} + \{g, \{h, f\}\} + \{h, \{f, g\}\} = 0 \\ 4) \quad & \{f g, h\} = f \{g, h\} + \{f, h\} g \\ 5) \quad & \{f, g h\} = g \{f, h\} + \{f, g\} h. \end{aligned} \quad (1.54)$$

Důkaz všech těchto vztahů je triviální a plyne přímo z definice Poissonovy závorky (1.52). Poissonovy závorky tvoří Lieovu algebru na prostoru funkcí. Velmi důležité je znát Poissonovy závorky mezi zobecněnými souřadnicemi a hybnostmi

$$\begin{aligned} \{q_i, q_j\} &= \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial q_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial q_j}{\partial q_k} = \delta_{ik} \cdot 0 - 0 \cdot \delta_{jk} \quad , \\ \{p_i, p_j\} &= \frac{\partial p_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial p_i}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial q_k} = 0 \cdot \delta_{jk} - \delta_{ik} \cdot 0 \quad , \\ \{q_i, p_j\} &= \frac{\partial q_i}{\partial q_k} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial p_k} - \frac{\partial q_i}{\partial p_k} \cdot \frac{\partial p_j}{\partial q_k} = \delta_{ik} \cdot \delta_{jk} = \delta_{ij} \quad . \end{aligned}$$

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

$$\{q_i, q_j\} = \{p_i, p_j\} = 0 \quad ; \quad \{q_i, p_j\} = \delta_{ij} \quad (1.55)$$

Těmito relacemi je určena celá Lieova algebra Poissonových závorek. Známe-li jejich vlastnosti (1.54) a relace (1.55), můžeme řešit problémy mechaniky aniž bychom potřebovali definici (1.52).

**Příklad:** Harmonický oscilátor

$$\begin{aligned} T &= \frac{p^2}{2m} \quad , \quad V = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad ; \quad H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \quad ; \\ \dot{x} = \{x, H\} &= \frac{\partial x}{\partial x} \cdot \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p} \cdot \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad , \\ \dot{p} = \{p, H\} &= \frac{\partial p}{\partial x} \cdot \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial p}{\partial p} \cdot \frac{\partial H}{\partial x} = -\frac{\partial H}{\partial x} = -m\omega^2 x \quad . \end{aligned}$$

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

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



Časový vývoj můžeme ale určit i z vlastností Lieovy algebry Poissonových závorek (1.54) a (1.55) bez znalosti jejich definice. Ukažme to na příkladu zobecněné hybnosti:

$$\begin{aligned}\dot{x} = \{x, H\} &= \frac{\partial x}{\partial x} \cdot \frac{\partial H}{\partial p} - \frac{\partial x}{\partial p} \cdot \frac{\partial H}{\partial x} = \frac{\partial H}{\partial p} = \frac{p}{m} \quad , \\ \dot{p} = \{p, H\} &= \left\{ p, \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 \right\} \stackrel{(2)}{=} \frac{1}{2m} \{p, p^2\} + \frac{1}{2} m \omega^2 \{p, x^2\} = \\ &\stackrel{(4)}{=} \frac{1}{2m} (p \{p, p\} + \{p, p\} p) + \frac{1}{2} m \omega^2 (x \{p, x\} + \{p, x\} x) = \\ &= \frac{p}{m} \{p, p\} + m \omega^2 x \{p, x\} \stackrel{(1)}{=} \frac{p}{m} \{p, p\} - m \omega^2 x \{x, p\} \stackrel{(1.55)}{=} -m \omega^2 x \quad .\end{aligned}$$

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

### 1. 4. 5. Numerické řešení Hamiltonových rovnic

Jen ve výjimečných případech lze nalézt explicitní řešení. Zpravidla jsme odkázáni na numerické řešení problému. V dosavadním textu jsme se naučili problém zformulovat za pomoci soustavy diferenciálních rovnic doplněných vhodnými počátečními podmínkami. Většina matematických programů (např. “Mathematica”, “Reduce”, “Maple”, ...) dokáže takto zformulovanou úlohu numericky a někdy i analyticky vyřešit. Uvedme zde přesto alespoň jednu numerickou metodu (Runge-Kutta 4. řádu) vhodnou pro numerické vyhledání řešení.

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

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

Časovou osu rozdělíme na dílky s intervalem  $\Delta t$ . Předpokládejme, že známe řešení v nějakém čase  $t$  (např v  $t_0$  - počáteční podmínka). Potom určíme

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

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

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

Tím známe řešení v čase  $t + \Delta t$  a postup můžeme opakovat. Otázky přesnosti výpočtu, konvergence a případně další metody lze nalézt v literatuře.

## 1. 5. VLASTNOSTI DIFERENCIÁLNÍCH ROVNIC

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

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_1 &= f_1(t, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \\ \dot{\xi}_2 &= f_2(t, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \\ &\vdots \\ \dot{\xi}_N &= f_N(t, \xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N) \quad ,\end{aligned}\tag{1.56}$$

neboli

$$\dot{\xi}_k = f_k(t, \xi) \quad , \quad k=1, \dots, N \quad .\tag{1.57}$$

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

$$\dot{\xi}_k = f_k(\xi) \quad , \quad k=1, \dots, N \quad .\tag{1.58}$$

Nejjednodušší je případ lineárních rovnic tvaru

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_1 &= a_{11}\xi_1 + \dots + a_{1N}\xi_N \\ &\vdots \\ \dot{\xi}_N &= a_{N1}\xi_1 + \dots + a_{NN}\xi_N \quad .\end{aligned}\tag{1.59}$$

neboli

$$\dot{\xi} = \mathbf{A}\xi \quad .\tag{1.60}$$

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

$$\mathbf{A}\eta^{(l)} = \lambda_l \eta^{(l)} \quad .\tag{1.61}$$

Úpravou rovnice (1.61) dostaneme  $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1})\eta = 0$ . Tato rovnice bude mít netriviální řešení jen, je-li

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1}) = 0 \quad ,\tag{1.62}$$

což je rovnice pro vlastní čísla  $\lambda$ . Z tvaru (1.61) potom dopočteme vlastní vektory. Řešením soustavy lineárních diferenciálních rovnic je každý výraz

$$\xi = \eta \exp(\lambda t) \quad ,$$

protože

$$\frac{d\xi}{dt} = \lambda \eta \exp(\lambda t) = \mathbf{A}\eta \exp(\lambda t) = \mathbf{A}\xi \quad .$$

Obecné řešení je lineární kombinací řešení pro jednotlivá vlastní čísla:

$$\xi(t) = c_1 \eta^{(1)} e^{\lambda_1 t} + c_2 \eta^{(2)} e^{\lambda_2 t} + \dots \quad .\tag{1.63}$$

Jde-li o problém kmitů,  $\lambda$  jsou komplexní ( $\lambda_k = \delta + i\omega_k$ ). Jednotlivé členy v součtu (1.63) jsou tzv. vlastní mody kmitů. Počet vlastních frekvencí je menší nebo roven řádu matice  $\mathbf{A}$ .

**Poznámka:** Výsledek (1.63) platí jen, jsou-li vlastní čísla matice  $\mathbf{A}$ , určená z rovnice (1.62), navzájem různá. Je-li některé vlastní číslo  $k$ -násobným kořenem rovnice (1.62), potom odpovídající koeficient lineární kombinace (1.63) bude polynom stupně  $k - 1$ .

### Příklad 1: Harmonický oscilátor

Hamiltonovy rovnice pro harmonický oscilátor mají tvar

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

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

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= \xi_2 \\ \dot{\xi}_2 &= -\xi_1 \end{aligned} \quad \Rightarrow \quad \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \xi_1 \\ \xi_2 \end{pmatrix} \quad ,$$

ve které  $\xi_1 = x$ ,  $\xi_2 = p$ . Z rovnice pro vlastní čísla (1.62) snadno určíme vlastní čísla  $\lambda_{1,2} = \pm i$  a z rovnice pro vlastní vektory (1.61) odpovídající vlastní vektory

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

Obecné řešení soustavy tedy je

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

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

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

## 1. 5. 1. Matice stability a fázový portrét systému

Je-li soustava diferenciálních rovnic nelineární, může být řešení mnohem komplikovanější než výsledek (1.63).

**Stacionární body řešení:** Jde o takové body fázového prostoru, ze kterých se systém samovolně nevyvíjí. Jsou definovány vztahem  $d\xi_k/dt = 0$ . Nalezneme je tak, že pravé strany soustavy diferenciálních rovnic (1.56) položíme rovny nule:

$$f_k(\boldsymbol{\xi}) = 0 \quad \text{rovnice pro stacionární body.} \quad (1.64)$$

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

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

Hledejme tedy řešení rovnice (1.56) ve tvaru

$$\xi_k = \xi_k^{(S)} + \delta \xi_k \quad , \quad k=1, \dots, N \quad ,$$

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

$$\frac{d}{dt} (\xi_k^{(S)} + \delta \xi_k) = f_k(\xi^{(S)} + \delta \xi)$$

a provedeme Taylorův rozvoj pravé strany do prvního řádu

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

Vzhledem k stacionaritě  $\xi^{(S)}$  je první člen na pravé straně nulový a můžeme psát

$$\frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \delta \xi_1 \\ \vdots \\ \delta \xi_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & \cdots & a_{1N} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{N1} & \cdots & a_{NN} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \delta \xi_1 \\ \vdots \\ \delta \xi_N \end{pmatrix}, \quad (1.65)$$

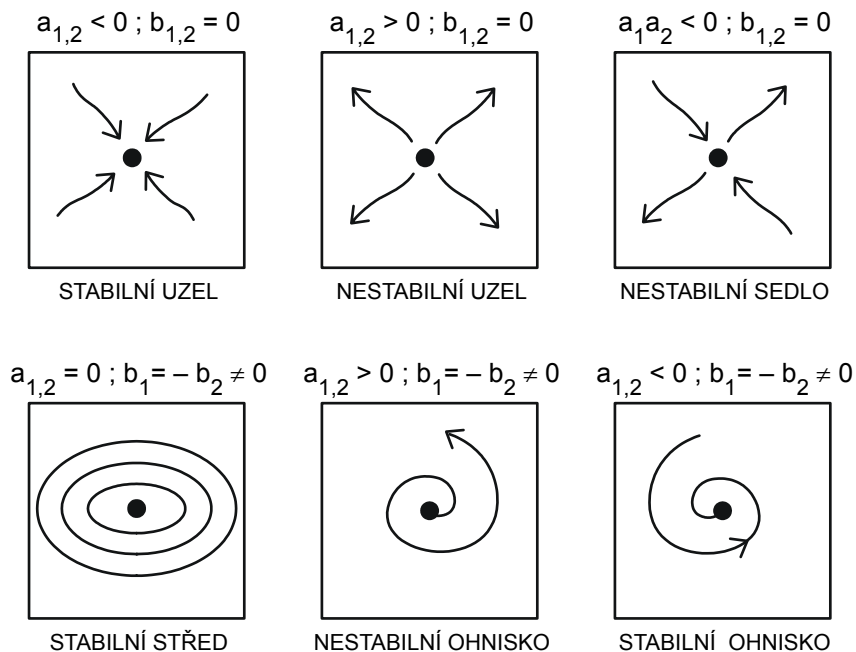
kde

$$a_{kl} \equiv \left. \frac{\partial f_k}{\partial \xi_l} \right|_{\xi^{(S)}} \quad (1.66)$$

je tzv. *matice stability*. Jde o parciální derivace pravých stran rovnic (1.56) podle jednotlivých proměnných ve zkoumaném stacionárním bodě. Soustava rovnic (1.65) pro malé poruchy  $\delta \xi$  je linearizovaná a její řešení umíme najít pomocí vlastních čísel a vlastních směrů matice **A**. Je-li  $\text{Re}(\lambda) < 0$ , bude daný mod utlumen ( $\exp(\lambda t)$ ) a řešení je stabilní v příslušném vlastním směru. Je-li  $\text{Re}(\lambda) > 0$ , je mod v daném směru nestabilní. Je-li  $\lambda = \pm i b$ , malá porucha systém v okolí stacionárního bodu rozkmitá .

#### Poznámky:

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



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

**Příklad 2: Nelineární oscilátor**

Uvažujme soustavu rovnic

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_1 &= \xi_2 \\ \dot{\xi}_2 &= -\xi_1 + \varepsilon \xi_1^2.\end{aligned}$$

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

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

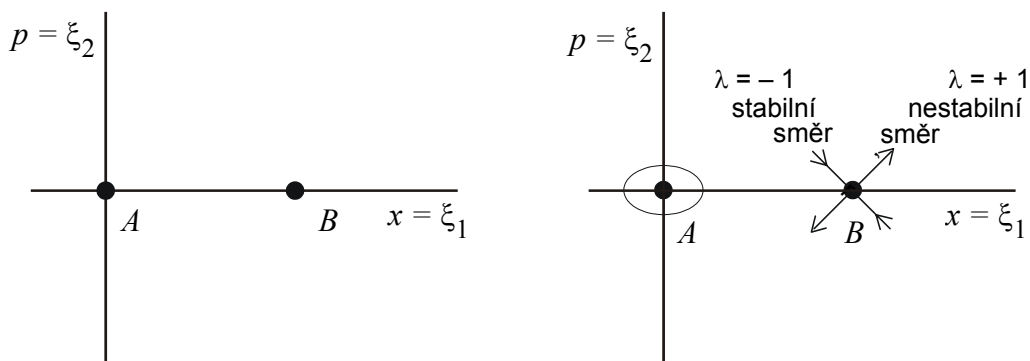
a zakreslíme je do fázového prostoru. Potom nalezneme matici stability (1.66) v obecném tvaru:

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

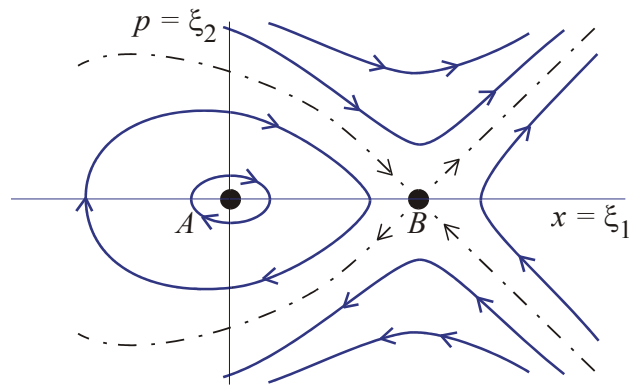
Tuto matici určíme v stacionárních bodech  $A$  a  $B$ . Vypočteme vlastní čísla a vlastní vektory z rovnic (1.61) a (1.62):

$$\begin{aligned}A: \quad \mathbf{A} &= \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \lambda_{1,2} = \pm i \Rightarrow \text{porucha } e^{\pm i t} \\ B: \quad \mathbf{A} &= \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \Rightarrow \begin{cases} \lambda_1 = +1 & , & \boldsymbol{\eta}_1 = c \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \end{pmatrix} & , & \text{porucha } e^{+t} \\ \lambda_2 = -1 & , & \boldsymbol{\eta}_2 = c \begin{pmatrix} +1 \\ -1 \end{pmatrix} & , & \text{porucha } e^{-t} \end{cases} \end{aligned}$$

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



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



### Příklad 3: Částice v periodickém potenciálu (například nabitá částice v krystalové mříži)

Předpokládejme, že se částice pohybuje v poli potenciální energie dané vztahem

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

Perioda potenciálu je  $a$  a výška  $V_0$ . Je zřejmé, že částice s celkovou energií  $E < V_0$  může být zachycena v minimech potenciální energie (oscilovat) a částice s energií  $E > V_0$  se může volně pohybovat. Příslušné Hamiltonovy rovnice budou:

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

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

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= \xi_2 \\ \dot{\xi}_2 &= -\sin \xi_1 . \end{aligned}$$

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

stacionární body:  $\xi_2 = 0$   
 $\sin \xi_1 = 0 \quad \Rightarrow \quad A_k = [k\pi, 0] \quad ; \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$

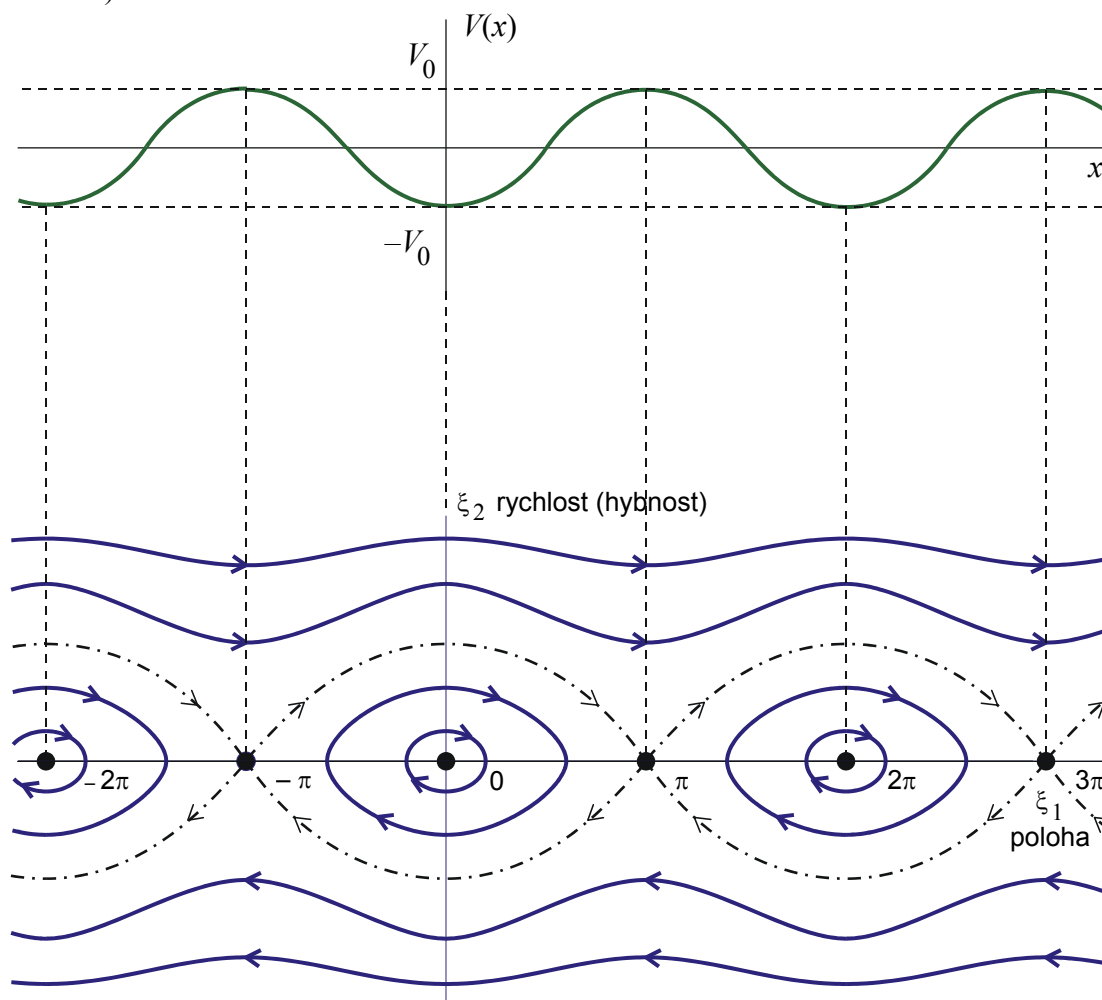
matice stability:  $\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \frac{\partial f_1}{\partial \xi_2} \\ \frac{\partial f_2}{\partial \xi_1} & \frac{\partial f_2}{\partial \xi_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos \xi_1 & 0 \end{pmatrix}$

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

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

Částice s malou energií oscilují v minimech potenciální energie (jsou zachyceny). Částice s vyššími energiemi se pohybují buď v kladném směru osy  $x$  (horní dvě trajektorie) nebo v záporném směru osy  $x$  (dolní dvě trajektorie). Čím vyšší je rychlost částice, tím méně je její pohyb ovlivněn periodickým potenciálem.

*Separatrix*: odděluje trajektorie různého typu (v předchozích příkladech je značena čerchovaně).



### 1. 5. 2. Metoda potenciálu

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

V jednodimenzionálním případě máme jedinou diferenciální rovnici

$$\dot{\xi} = f(\xi) \quad . \quad (1.67)$$

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

**Definice:**

$$\phi(\xi) \equiv - \int f(\xi) d\xi \quad (1.68)$$

nazýváme potenciál rovnice (1.67). Přímou z definice snadno ukážeme, že platí

$$\begin{aligned} \phi \text{ má extrém} &\Rightarrow d\phi/d\xi = 0 &\Rightarrow f(\xi) = 0 &\Rightarrow \text{stac. bod} \\ \phi \text{ má maximum} &\Rightarrow d^2\phi/d\xi^2 < 0 &\Rightarrow a = df/d\xi > 0 &\Rightarrow \text{nestabilita} \\ \phi \text{ má minimum} &\Rightarrow d^2\phi/d\xi^2 > 0 &\Rightarrow a = df/d\xi < 0 &\Rightarrow \text{stabilita.} \end{aligned}$$

Ve vícedimenzionálním případě se pro soustavu (1.56) postupuje obdobně. Definujeme diferenciální formu

$$d\phi \equiv -f_1(\xi)d\xi_1 - f_2(\xi)d\xi_2 - \dots - f_N(\xi)d\xi_N \quad (1.69)$$

a hledáme potenciál  $\phi$  tak, aby  $f_k = -\partial\phi/\partial\xi_k$ . Výraz (1.69) je potom úplným diferenciálem funkce  $\phi$ . Není-li diferenciální forma (1.69) integrabilní, lze hledat integrační faktor  $\mu(\xi)$  tak, aby byla integrabilní forma

$$d\phi \equiv -f_1 \mu d\xi_1 - f_2 \mu d\xi_2 - \dots - f_N \mu d\xi_N .$$

Pro  $N \leq 3$  existuje integrační faktor vždy.

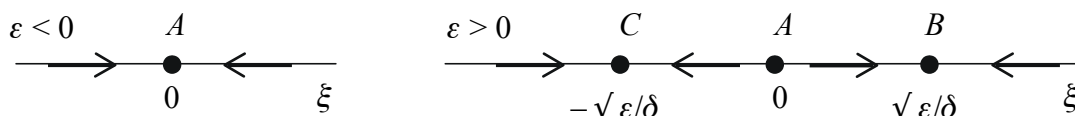
Z tvaru nalezené funkce  $\phi$  již snadno rozhodneme o stabilitě systému. Následující příklad je pro srovnání vyřešen pomocí matice stability i metodou potenciálu.

**Příklad 4:** Potenciál „koňakové lahve“

$$\frac{d\xi}{dt} = \varepsilon\xi - \delta\xi^3 \quad ; \quad \delta > 0 \quad ; \quad \xi \in \mathbb{R} \quad (1.70)$$

$$\begin{array}{lll} \varepsilon < 0: & \text{stac. bod } A: & \xi_s = 0 \\ & \text{matice stability} & a = \varepsilon - 3\delta\xi_s^2 = \varepsilon < 0 \quad \Rightarrow \quad \text{bod } A \text{ stabilní} \end{array}$$

$$\begin{array}{lll} \varepsilon > 0: & \text{stac. body } A, B, C: & \xi_s = 0 \quad ; \quad \xi_s = \pm \sqrt{\frac{\varepsilon}{\delta}} \\ & \text{matice stability} & a = \varepsilon - 3\delta\xi_s^2 = \begin{cases} \varepsilon & \text{pro bod } A & \text{nestabilní} \\ -2\varepsilon & \text{pro body } B, C & \text{stabilní} \end{cases} \end{array}$$

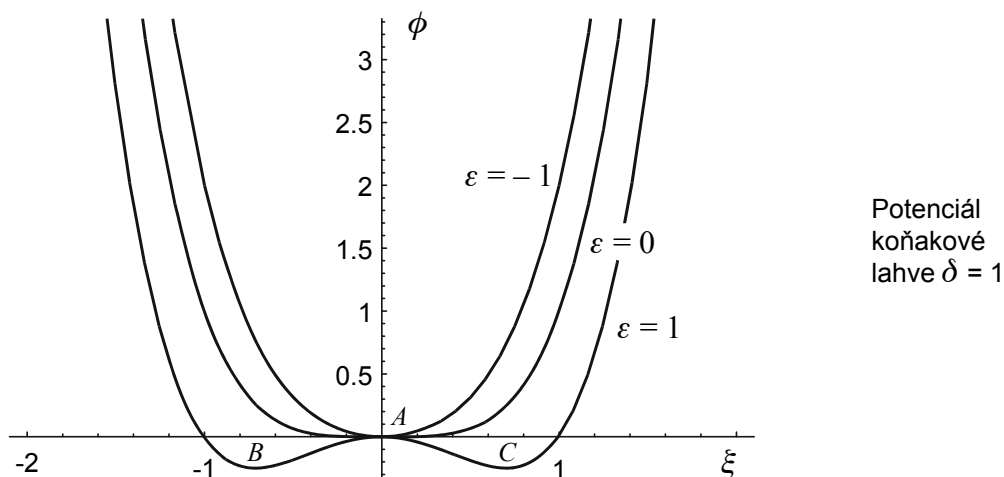


Řešení metodou potenciálu:



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

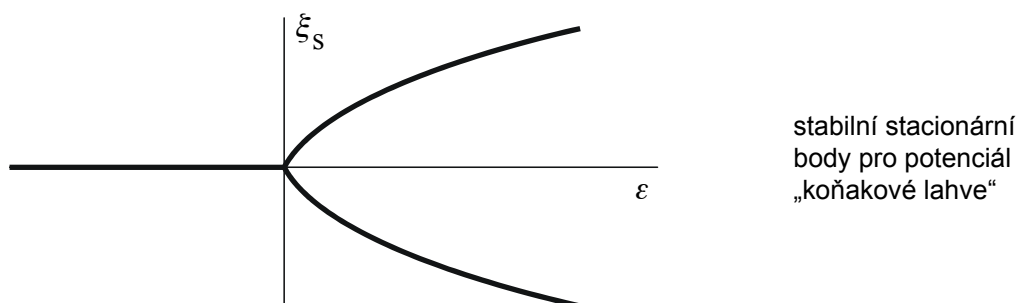
Na obrázku je znázorněn průběh potenciálu pro  $\delta = 1$  a různé hodnoty parametru  $\varepsilon$ . Vidíme, že pro  $\varepsilon < 0$  má  $\phi$  jediné minimum v počátku, ve kterém je stabilní bod  $A$ . Pro  $\varepsilon > 0$  se tento bod stává maximem a je nestabilní. Objevují se však dvě minima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



### 1. 5. 3. Bifurkace

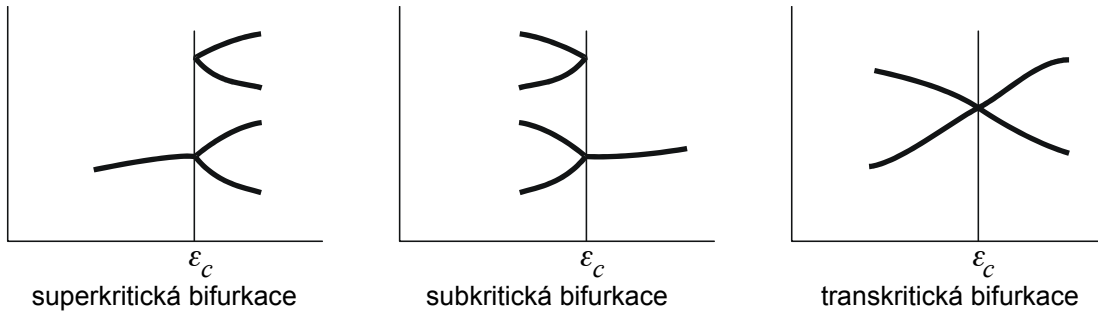
*Bifurkací* nazýváme náhlou změnu fázového portréту soustavy při spojitě změně některého řídicího parametru výchozích rovnic.

V příkladu 4 z minulé kapitoly vypadá fázový portrét jinak pro  $\varepsilon < 0$  a jinak pro  $\varepsilon > 0$ . Při pomalé změně  $\varepsilon$  se pomalu mění fázový portrét soustavy. Výjimkou je bod  $\varepsilon = 0$ . Fázové portréty pro  $\varepsilon < 0$  a  $\varepsilon > 0$  nejsou topologicky ekvivalentní (nelze je na sebe převést spojitým zobrazením).



Typickým jevem při bifurkaci je větvení řešení. V příkladu 4 je pro  $\varepsilon < 0$  jediný stabilní bod  $\xi_s = 0$ , pro  $\varepsilon > 0$  existují dva stabilní body  $\xi_s = \pm \sqrt{\varepsilon/\delta}$ , bod  $\xi_s = 0$  se stává nestabilní.

Podle typu větvení řešení můžeme bifurkace dělit na superkritické, subkritické a transkritické:



### Fázové přechody druhého druhu - typická bifurkace

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

Typickým fázovým přechodem 2. druhu je změna chování feromagnetika při Curieově teplotě  $T_c$ . Uvažujme pro názornost jen jednu nekonečnou řadu spinů  $\sigma_1, \sigma_2, \dots$ , které mohou být orientovány jen nahoru nebo dolů (tomu budou odpovídat hodnoty  $\sigma_a = \pm 1$ ) s jednoduchou interakční energií danou vztahem

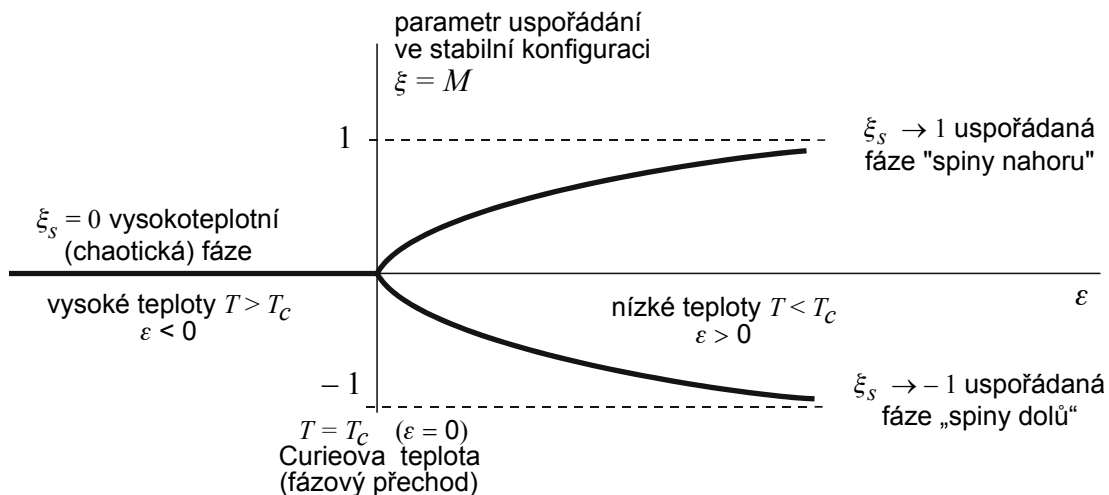
$$H = -J \sum_{\langle \sigma_a \sigma_b \rangle} \delta_{\sigma_a \sigma_b} .$$

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

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

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

potom v nízkoteplotní fázi s klesající teplotou  $M \rightarrow \pm 1$  a ve vysokoteplotní fázi s rostoucí teplotou  $M \rightarrow 0$ . Potenciál „koňakové lahve“ a s ním souvisící rovnice (1.70) velmi dobře popisuje právě takový fázový přechod. Veličina  $\xi$  odpovídá parametru uspořádání tj.  $\xi = M$  a řídicímu parametru odpovídá veličina  $\varepsilon = T_c - T$ :



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

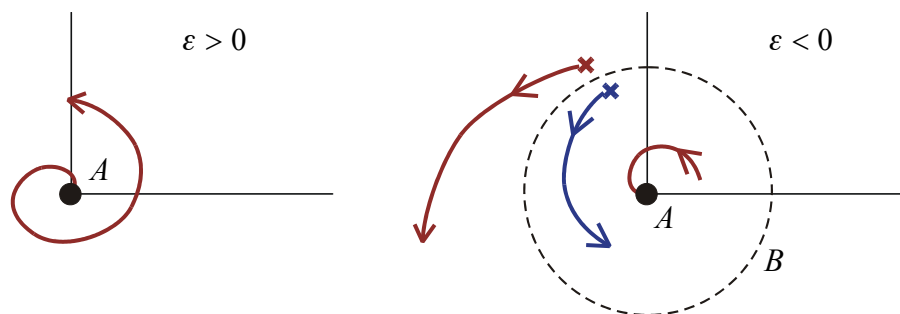
### Příklad 5: Hopfova bifurkace

$$\begin{aligned} \dot{r} &= r(\varepsilon + \delta r^2) \quad , \\ \dot{\varphi} &= \omega \quad ; \quad \delta > 0, \quad r \geq 0, \quad \varphi \in \mathbb{R} \quad . \end{aligned} \quad (1.71)$$

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

$$\begin{aligned} \varepsilon < 0: \quad \text{stac. body } A, B: \quad r_s &= 0; \quad r_s = \sqrt{\frac{|\varepsilon|}{\delta}} \\ \text{matice stability} \quad a &= \varepsilon + 3\delta r_s^2 = \begin{cases} \varepsilon & \text{pro bod } A \text{ stabilní} \\ -2\varepsilon & \text{pro bod } B \text{ nestabilní} \end{cases} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \varepsilon > 0: \quad \text{stac. bod } A: \quad r_s &= 0 \\ \text{matice stability} \quad a &= \varepsilon + 3\delta r_s^2 = \varepsilon > 0 \quad \Rightarrow \quad \text{bod } A \text{ nestabilní.} \end{aligned}$$



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

#### 1. 5. 4. Ljapunovská stabilita, limitní cyklus, atraktor

Zkoumejme, jak se budou vyvíjet dvě trajektorie s blízkými počátečními podmínkami  $\xi_0$  a  $\xi_0 + \varepsilon$  v čase:



Řekneme, že trajektorie je *ljapunovsky nestabilní*, jestliže existuje trajektorie s blízkou počáteční podmínkou, která se od zkoumané trajektorie bude s časem exponenciálně

vzdalovat. Řekneme, že trajektorie je *Ljapunovsky stabilní*, jestliže se všechny trajektorie k ní v čase  $t_0$  blízké budou exponenciálně přibližovat.

Mění-li se v čase vzdálenost obou trajektorií exponenciálně, platí

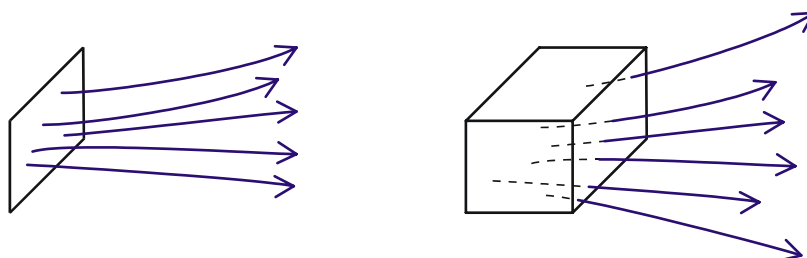
$$\|\xi(t, \xi_0 + \varepsilon) - \xi(t, \xi_0)\| \sim e^{\lambda t}$$

a snadno určíme

$$\lambda = \lim_{\substack{t \rightarrow \infty \\ \varepsilon \rightarrow 0}} \frac{1}{t} \ln \|\xi_\varepsilon - \xi\| .$$

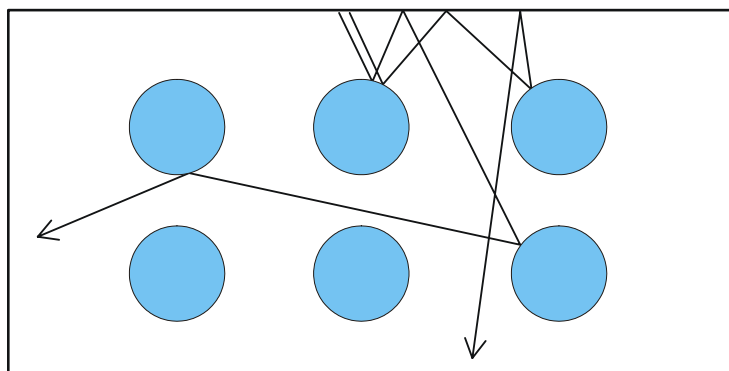
Koeficient  $\lambda$  se nazývá Ljapunovův exponent. Je-li  $\lambda > 0$  hovoříme o Ljapunovsky nestabilní trajektorii. Je-li  $\lambda < 0$ , o Ljapunovsky stabilní trajektorii. Je-li  $\lambda = 0$  je závislost jiná než exponenciální, například mocninná, a nelze hovořit o Ljapunovské stabilitě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

Ve vícedimenzionálních úlohách s  $\xi = (\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_N)$  Ljapunovův exponent závisí na způsobu provedení limity  $\varepsilon \rightarrow 0$ . Získáme tak  $N$  Ljapunovských koeficientů 1. řádu (ve směru souřadnicových os). Můžeme ale sledovat i celý svazek blízkých trajektorií z dvou nebo třídimenzionální oblasti:



Potom hovoříme o vícerozměrných Ljapunovských exponentech (2. řádu, 3. řádu, ...). Trajektorie je Ljapunovsky stabilní, jsou-li všechny Ljapunovské koeficienty  $\lambda \leq 0$ .

Příkladem Ljapunovsky nestabilní trajektorie je množina  $r_s = \sqrt{|\varepsilon|/\delta}$  pro  $\varepsilon < 0$  v posledním příkladu na Hopfovou bifurkaci. Trajektorie s  $r \geq r_s$  jsou Ljapunovsky nestabilní. Trajektorie s  $r < r_s$  jsou Ljapunovsky stabilní. Jiný příklad Ljapunovské nestability je kulečnick s překážkami podle následujícího obrázku:

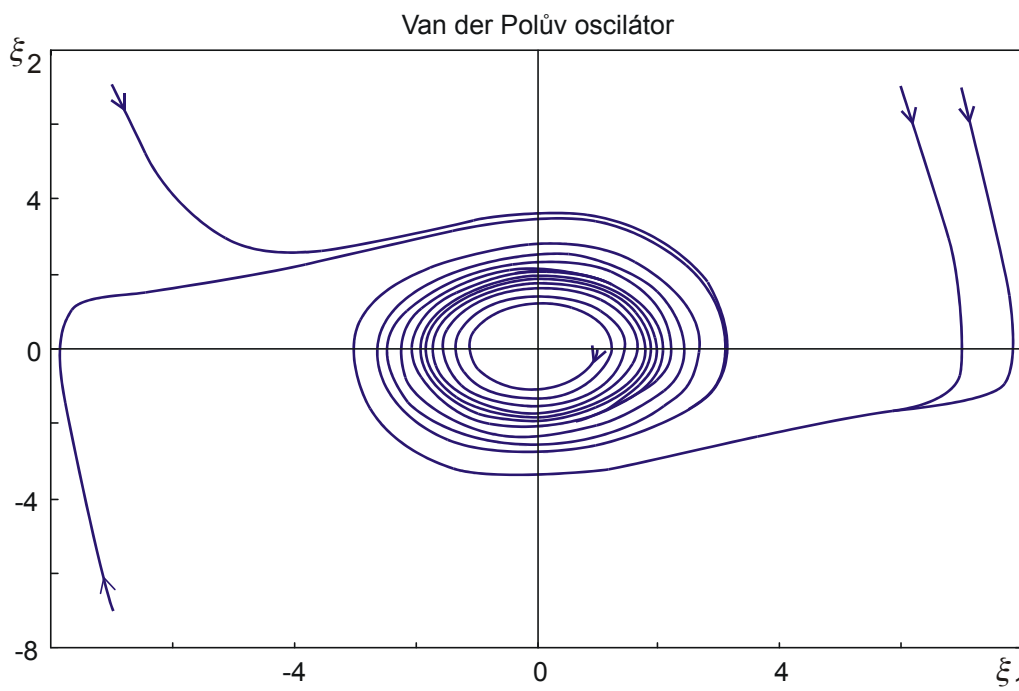


Dvě blízké trajektorie spolu v pozdějších časech přestávají souviset.

**Příklad 6:** Van der Polův oscilátor

$$\begin{aligned}\dot{\xi}_1 &= \xi_2 \\ \dot{\xi}_2 &= -\xi_1 + \varepsilon(1 - \delta \xi_1^2)\xi_2 \quad ; \quad \delta > 0 \quad .\end{aligned}\tag{1.72}$$

V tomto systému se trajektorie s libovolnou počáteční podmínkou blíží k jediné periodické trajektorii, kterou nazýváme *limitní cyklus*. Za dosti dlouhou dobu se každá trajektorie přiblíží libovolně blízko k trajektorii limitního cyklu. Všechny trajektorie z blízkého okolí limitního cyklu jsou Ljapunovsky stabilní. V následujícím obrázku jsou fázové trajektorie pro různé počáteční podmínky pro van der Polův oscilátor s  $\delta = 1$  a  $\varepsilon = 0.1$ .

**Některé základní pojmy z teorie množin***Vzdálenost dvou bodů  $\rho(\mathbf{A}, \mathbf{B})$ :*

V tomto učebním textu budeme vzdálenost dvou bodů definovat jako

- $$\rho(\mathbf{A}, \mathbf{B}) \equiv \sqrt{\sum_{k=1}^N (A_k - B_k)^2} \quad .$$

Tj. vzdálenost je určována z Pythagorovy věty. Pro definici vzdálenosti lze použít i jiný předpis splňující základní požadavky na pojem vzdálenosti. Vzdálenost dvou bodů často píšeme také ve tvaru  $\|\mathbf{A} - \mathbf{B}\|$ , kde

- $$\|\mathbf{X}\| \equiv \sqrt{\sum_{k=1}^N X_k^2} \quad .$$

Jde o normu (velikost) rozdílového vektoru  $\mathbf{A} - \mathbf{B}$ .

*Vzdálenost bodu a množiny  $\rho(\mathbf{A}, \mathcal{M})$ :*

- minimum vzdáleností od všech bodů množiny, včetně její hranice ( $\overline{\mathcal{M}}$ );

- $\rho(\mathbf{A}, \mathcal{M}) \equiv \min_{\mathbf{X} \in \overline{\mathcal{M}}} \rho(\mathbf{A}, \mathbf{X})$  .

 **$\varepsilon$ -okolí bodu  $U_\varepsilon(\mathbf{A})$** 

- kruh bez hranice se středem v  $\mathbf{A}$  a poloměrem  $\varepsilon$  ;
- $U_\varepsilon(\mathbf{A}) \equiv \{\mathbf{X}; \rho(\mathbf{A}, \mathbf{X}) < \varepsilon\}$  .

**Otevřená množina  $\mathcal{M}_o$** 

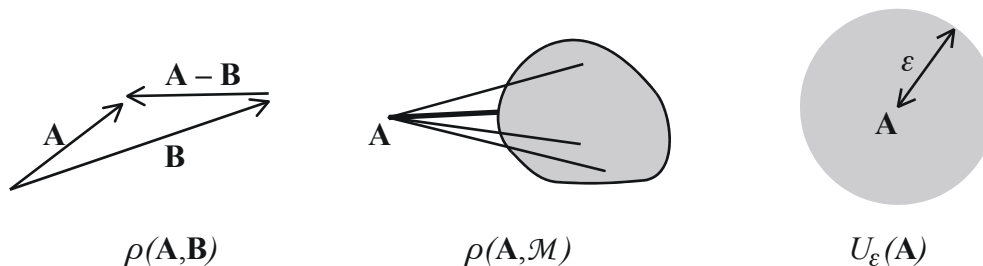
- kolem každého bodu množiny lze zkonstruovat okolí, které je celé v množině  $\mathcal{M}_o$ ;
- ke  $\forall \mathbf{X} \in \mathcal{M}_o \exists U_\varepsilon(\mathbf{X}) \subset \mathcal{M}_o$  ;
- zjednodušeně lze říci, že otevřené množiny neobsahují svou hranici.

**Uzavřená množina  $\mathcal{M}_u$** 

- nalezneme-li posloupnost bodů z  $\mathcal{M}_u$ , která v nějakém smyslu konverguje, potom bude limita z této posloupnosti vždy součástí množiny  $\mathcal{M}_u$  ;
- $\mathbf{X}^{(k)} \in \mathcal{M}_u$  ;  $\mathbf{X}^{(k)} \rightarrow \mathbf{X} \Rightarrow \mathbf{X} \in \mathcal{M}_u$  ;
- zjednodušeně lze říci, že uzavřené množiny obsahují svou hranici.

**Poznámky:**

- 1) V našem případě fázového prostoru jsou body  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ ,  $\mathbf{X}$  vždy nějaké  $N$ -tice  $(\xi_1, \dots, \xi_N)$ .
- 2) Uzavřený interval a kruh s hranicí jsou uzavřené množiny; otevřený interval a kruh bez hranice jsou otevřené množiny; polouzavřený interval není ani otevřená ani uzavřená množina; prázdná množina a celý prostor  $R^2$  jsou ve smyslu předchozích definic otevřené i uzavřené množiny.

**Definice z teorie množin vztahující se k řešení soustavy diferenciálních rovnic****Invariantní množina  $\mathcal{J}$** 

- Interpretujeme-li libovolný bod množiny  $\mathcal{J}$  jako počáteční podmínku soustavy diferenciálních rovnic (1.56), potom celá následující trajektorie bude ležet v množině  $\mathcal{J}$ . Jakmile se tedy systém dostane do množiny  $\mathcal{J}$ , potom v ní bude setrávat i ve všech pozdějších časech.
- $\mathcal{J} = \{\mathbf{X}; \mathbf{X}_0 = \xi(t_0) \in \mathcal{J} \Rightarrow \mathbf{X} = \xi(t) \in \mathcal{J} \text{ pro } \forall t > t_0\}$  .

**Hustě pokrytá množina  $\mathcal{D}$** 

- V libovolně malém okolí každého bodu množiny  $\mathcal{D}$  prochází nějaká fázová trajektorie.

**Chaotická množina  $\mathcal{X}$** 

- 1) každá trajektorie v  $\mathcal{X}$  je l'japunovsky nestabilní,

- 2) existuje trajektorie, která  $X$  hustě pokryje,
- 3)  $X$  je invariantní množina.

#### Atraktor $\mathcal{A}$

- 1) trajektorie z okolí  $\mathcal{A}$  jsou k  $\mathcal{A}$  „přitahovány“, tj. s rostoucím časem se k  $\mathcal{A}$  blíží:

$$\exists U_{\mathcal{A}} \supset \mathcal{A}, \text{ že pro } \forall \xi(t_0) \in U_{\mathcal{A}} \text{ platí } \lim_{t \rightarrow \infty} \rho(\xi(t), \mathcal{A}) = 0,$$

- 2) existuje trajektorie, která  $\mathcal{A}$  hustě pokryje,
- 3)  $\mathcal{A}$  je invariantní množina,
- 4)  $\mathcal{A}$  je uzavřená množina.

#### Podivný atraktor $S$

Podivný atraktor je chaotický atraktor, tj. všechny trajektorie podivného atraktoru jsou Lyapunovsky nestabilní.

#### Limitní cyklus $C$

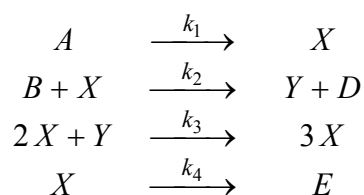
Uzavřená fázová trajektorie, která je atraktor.

#### Poznámky :

- 1) Každý stacionární bod je invariantní množinou. Také každá uzavřená trajektorie, například harmonického oscilátoru, je invariantní množinou.
- 2) Každá uzavřená trajektorie tvoří automaticky invariantní uzavřenou hustě pokrytou množinu. Limitní cyklus navíc „přitahuje“ trajektorie z okolí, tj. má první vlastnost atraktoru.
- 3) Příkladem chaotické množiny je plocha kulečnicku na straně 39.
- 4) Podivný atraktor může vzniknout jen v problému s dimenzí  $N \geq 3$ .
- 5) Pro dvě rovnice platí *Benoixonovo kritérium*:  $\partial f_1 / \partial x_1 + \partial f_2 / \partial x_2$  nemění v jednoduše souvislé oblasti znaménko  $\Rightarrow$  v této oblasti neexistuje uzavřená trajektorie.

#### Příklad 7: 2D bruselátor

Budeme zkoumat chemickou reakci typu



Rychlosti jednotlivých reakcí jsou označeny  $k_1, \dots, k_4$ . Koncentrace výchozích látek a produktů označíme  $c_A, c_B, c_D, c_E$ . Proměnnými budou koncentrace látek  $X$  a  $Y$ :  $\xi_1 = c_X$ ,  $\xi_2 = c_Y$ . Z tvaru reakcí sestavíme výchozí soustavu diferenciálních rovnic

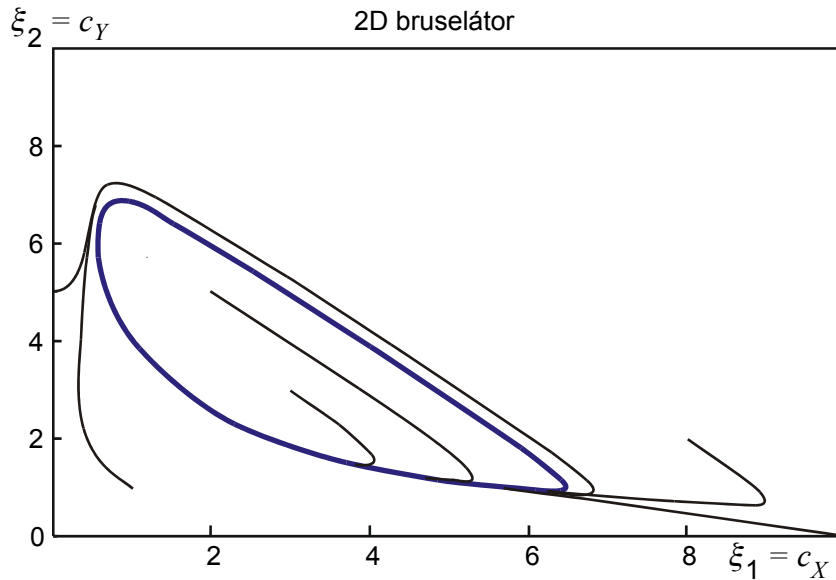
$$\frac{d\xi_1}{dt} = k_1 c_A - k_2 c_B \xi_1 + k_3 \xi_1^2 \xi_2 - k_4 \xi_1,$$

$$\frac{d\xi_2}{dt} = k_2 c_B \xi_1 - k_3 \xi_1^2 \xi_2.$$

Na pravých stranách jsou jen zapsány způsoby vzniku a zániku látek  $X$  a  $Y$ . Opustíme-li nepodstatné konstanty, jde o rovnice typu

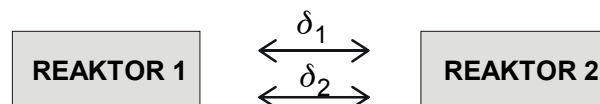
$$\begin{aligned}\frac{d\xi_1}{dt} &= \alpha - (\beta+1)\xi_1 + \xi_1^2 \xi_2 \quad , \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= \beta \xi_1 - \xi_1^2 \xi_2 \quad .\end{aligned}\tag{1.73}$$

Tyto rovnice poskytují řešení ve tvaru limitního cyklu. Pro hodnoty  $\alpha = 2$  a  $\beta = 5.9$  a různé počáteční podmínky jsou fázové trajektorie na následujícím obrázku. Po dosti dlouhém čase se koncentrace  $\xi_1$  a  $\xi_2$  periodicky se mění (oscilují) kolem jistých středních hodnot.



#### Příklad 8: 4D bruselátor

Budeme předpokládat, že předchozí reakce probíhá současně ve dvou reaktorech s možností výměny látky  $X$  rychlostí  $\delta_1$  a látky  $Y$  rychlostí  $\delta_2$ . Koncentrace látek  $X$  a  $Y$  v reaktorech 1 a 2 označíme takto:  $\xi_1 = c_{X1}$ ,  $\xi_2 = c_{Y1}$ ,  $\xi_3 = c_{X2}$ ,  $\xi_4 = c_{Y2}$ .



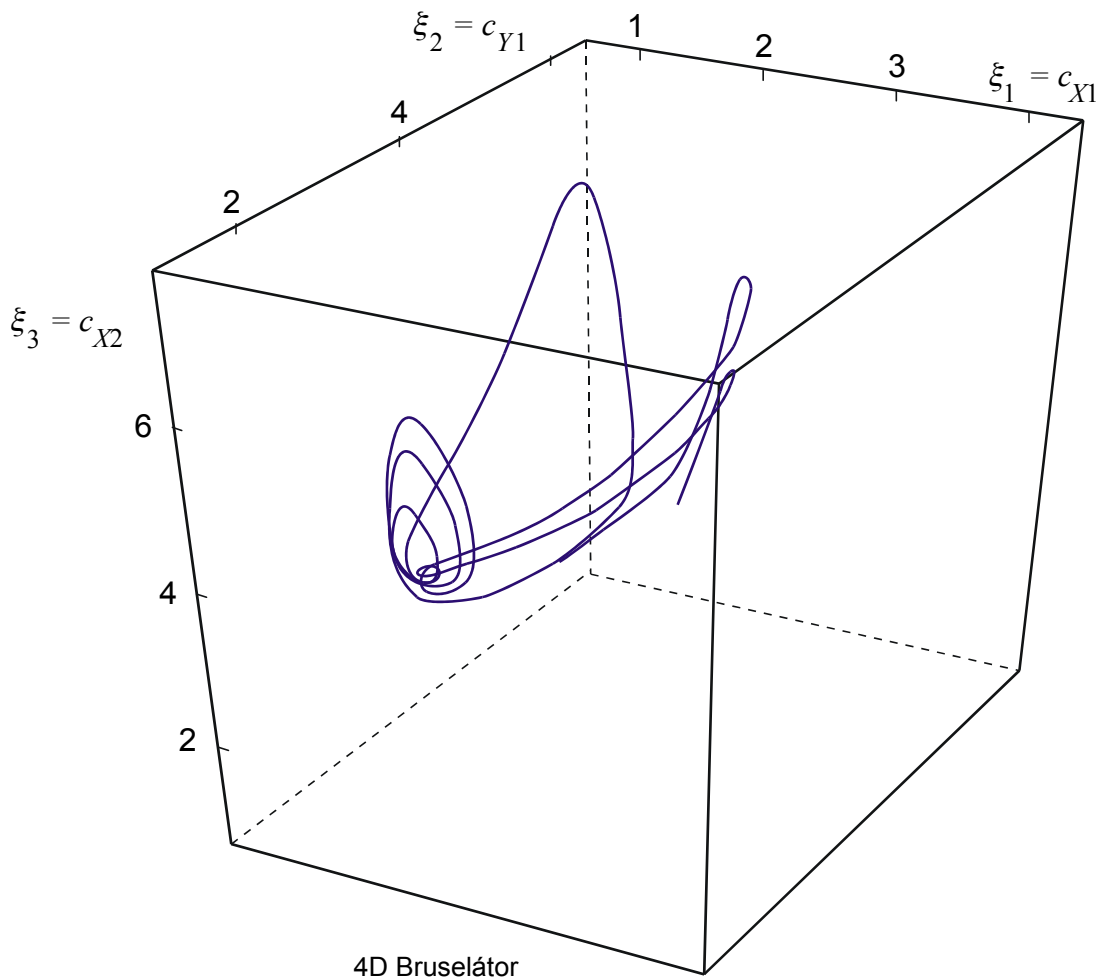
Výchozí rovnice budou

$$\begin{aligned}\frac{d\xi_1}{dt} &= \alpha - (\beta+1)\xi_1 + \xi_1^2 \xi_2 + \delta_1(\xi_3 - \xi_1), \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= \beta \xi_1 - \xi_1^2 \xi_2 + \delta_2(\xi_4 - \xi_2), \\ \frac{d\xi_3}{dt} &= \alpha - (\beta+1)\xi_3 + \xi_3^2 \xi_4 + \delta_1(\xi_1 - \xi_3), \\ \frac{d\xi_4}{dt} &= \beta \xi_3 - \xi_3^2 \xi_4 + \delta_2(\xi_2 - \xi_4).\end{aligned}\tag{1.74}$$

Jde o soustavu čtyř nelineárních diferenciálních rovnic, jejichž řešení pro některé parametry je podivný atraktor (dimenze systému je větší než 3). Na následujícím obrázku je část fázové



trajektorie, která by hustě pokryla oblast podivného atraktoru pro  $\alpha = 2$ ,  $\beta = 5.9$ ,  $\delta_1 = 1.21$  a  $\delta_2 = 12.1$ .

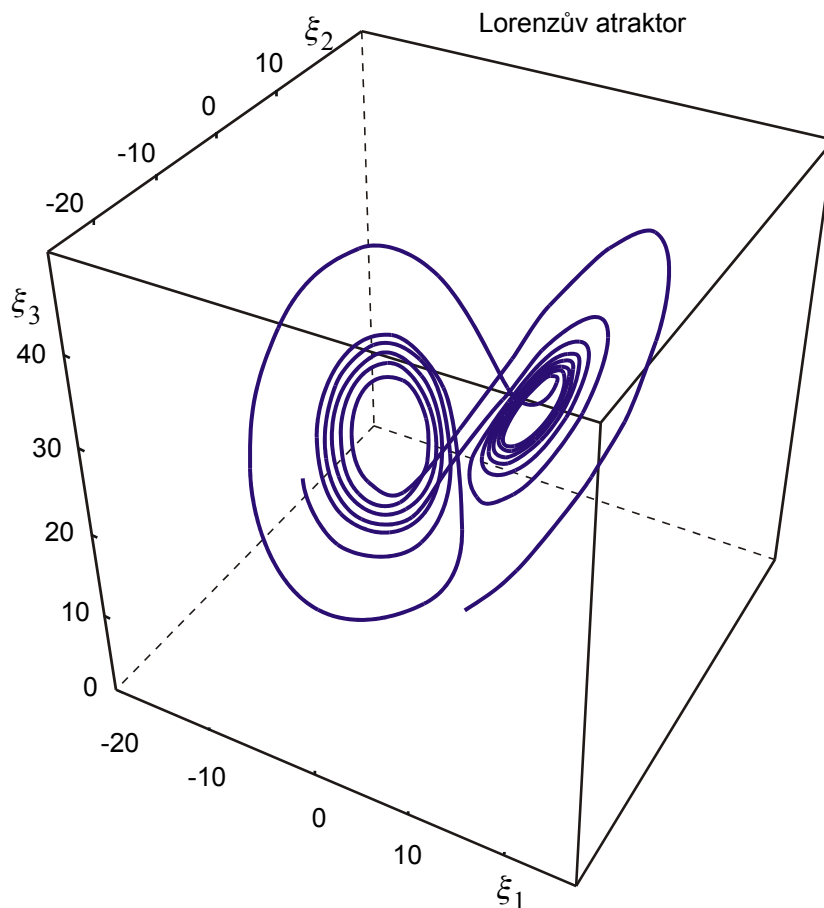


### Příklad 9: Lorenzův atraktor

Jde o neznámější příklad podivného atraktoru. Výchozí sada rovnic

$$\begin{aligned} \frac{d\xi_1}{dt} &= \alpha(\xi_2 - \xi_1) \quad , \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= -\xi_1 \xi_2 + \beta \xi_1 - \xi_2 \quad , \\ \frac{d\xi_3}{dt} &= \xi_1 \xi_2 - \gamma \xi_3 \end{aligned} \quad (1.75)$$

popisuje proudění kapaliny mezi dvěma planparalelními deskami s různými teplotami. Veličiny  $\xi_1$ ,  $\xi_2$ ,  $\xi_3$  mají postupně význam: 1. Fourierova komponenta rychlosti, 1. a 2. Fourierova komponenta teploty. Na následujícím obrázku je opět zakreslena část fázové trajektorie, která by hustě pokryla oblast atraktoru. Rovnice byly řešeny pro hodnoty  $\alpha = 3$ ,  $\beta = 26.5$ ,  $\gamma = 1$ .



### 1. 5. 5. Evoluční rovnice

#### Příklad 10: Elektron děrové plazma v silném elektrickém poli

V silném elektrickém poli způsobují urychlené elektrony a díry ionizaci nárazem. Při setkání elektronu s dírou dojde k rekombinaci, tj. zániku nosičů. Označíme-li  $\xi_1 = n_e$  koncentraci elektronů a  $\xi_2 = n_d$  koncentraci děr, budou mít základní rovnice pro časový vývoj počtu nosičů tvar:

$$\begin{aligned} \frac{d\xi_1}{dt} &= \alpha_1 \xi_1 - \beta \xi_1 \xi_2 \quad , \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= \alpha_2 \xi_2 - \beta \xi_1 \xi_2 \quad . \end{aligned} \quad (1.76)$$

První členy na pravé straně popisují ionizační procesy (přírůstek nosičů), druhé členy rekombinační procesy (úbytek nosičů).

#### Příklad 11: Systém dravec ↔ kořist

Předpokládáme, že dravec se živí kořistí (například vlk a zajíci), kořist má potravy dostatek (jí například trávu). Označíme-li  $\xi_1 = n_d$  počet dravců v určité oblasti a  $\xi_2 = n_k$  množství potenciální kořisti, budou mít základní rovnice pro časový vývoj počtu zvířat tvar:

$$\begin{aligned}\frac{d\xi_1}{dt} &= -\alpha_1 \xi_1 + \beta_1 \xi_1 \xi_2 \quad , \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= +\alpha_2 \xi_2 - \beta_2 \xi_1 \xi_2 \quad .\end{aligned}\tag{1.77}$$

První člen v první rovnici popisuje úhyn dravců v nepřítomnosti kořisti ( $\xi_2 = 0$ ). První člen v druhé rovnici popisuje množení se kořisti v nepřítomnosti dravců ( $\xi_1 = 0$ ). Druhé členy představují požíráání kořisti dravci, tzv. „párovou interakci“, díky které počet dravců roste a množství kořisti se snižuje.

### Příklad 12: Dvě sociální skupiny

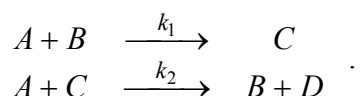
Popišme nyní dvě skupiny lidí s odlišným názorem na určitý problém (přívrženci dvou různých postupů, teorií, názorů, politických stran). Označíme-li  $\xi_1 = n_A$  počet přívrženců názoru  $A$  a  $\xi_2 = n_B$  počet přívrženců názoru  $B$ , budou mít základní rovnice pro časový vývoj počtu přívrženců tvar:

$$\begin{aligned}\frac{d\xi_1}{dt} &= \alpha_1 \xi_1 + \beta_1 \xi_1 \xi_2 \quad , \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= \alpha_2 \xi_2 - \beta_2 \xi_1 \xi_2 \quad .\end{aligned}\tag{1.78}$$

Koeficienty  $\beta$  mohou být kladné i záporné, párovou interakci zde tvoří setkání příslušníků různých skupin, diskuze atd.

### Příklad 13: Chemické reakce

Uvažme chemickou reakci typu



Rovnice pro časový vývoj jednotlivých koncentrací mají tvar:

$$\begin{aligned}\frac{dn_A}{dt} &= -k_1 n_A n_B - k_2 n_A n_C \quad , \\ \frac{dn_B}{dt} &= -k_1 n_A n_B + k_2 n_A n_C \quad , \\ \frac{dn_C}{dt} &= +k_1 n_A n_B - k_2 n_A n_C \quad , \\ \frac{dn_D}{dt} &= +k_2 n_A n_C \quad .\end{aligned}\tag{1.79}$$

Látka  $B$  je katalyzátorem reakce. Je-li  $A$  zastoupena v dostatečném množství jako surovina, lze brát  $n_A = \text{const.}$  a řešit jen tři rovnice.

Všechny rovnice z předchozích příkladů mají společný tvar

$$\frac{d\xi_k}{dt} = \alpha_{kj} \xi_j + \beta_k^{jl} \xi_j \xi_l\tag{1.80}$$

a nazývají se *evoluční rovnice*. Poznamenejme, že přes dvojnité indexy se sčítá. Charakteristická je lineární kombinace různých párových interakcí. Typickými řešeními jsou oscilace, limitní cykly, ve více jak třech dimenzích vznikají chaotické množiny a podivné atraktory.

Rozeberme nyní řešení soustavy dvou rovnic tvaru

$$\begin{aligned}\frac{d\xi_1}{dt} &= \alpha_1 \xi_1 + \beta_1 \xi_1 \xi_2 \quad , \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= \alpha_2 \xi_2 + \beta_2 \xi_1 \xi_2 \quad .\end{aligned}\tag{1.81}$$

Standardním postupem zjistíme stacionární body:

$$\xi^{(1)} = (0, 0) \quad ; \quad \xi^{(2)} = (-\alpha_2/\beta_2, -\alpha_1/\beta_1) \quad .$$

Nezapomínejme na význam proměnných  $\xi$ . Vesměs jde o počty jedinců nějakého typu. Smysl tedy mají jen nezáporné hodnoty. Z matice stability určíme, že první stacionární bod

$$\begin{aligned}\xi^{(1)} = (0, 0) \text{ je pro } \alpha_1, \alpha_2 > 0 & \quad \text{nestabilní} \\ \alpha_1, \alpha_2 < 0 & \quad \text{stabilní} \\ \alpha_1 \cdot \alpha_2 < 0 & \quad \text{sedlový bod.}\end{aligned}$$

V druhém stacionárním bodě

$\xi^{(2)} = (-\alpha_2/\beta_2, -\alpha_1/\beta_1)$  je řešení pro

$$\begin{aligned}\alpha_1, \alpha_2 > 0 & \quad \text{nestabilní v jednom směru.} \\ \alpha_1, \alpha_2 < 0 & \quad \text{nestabilní v jednom směru.} \\ \alpha_1 \cdot \alpha_2 < 0 & \quad (\text{různá znaménka } \alpha_1, \alpha_2), \text{ jde o oscilace kolem} \\ & \quad \text{stacionárního bodu.}\end{aligned}$$

Frekvence oscilací jsou

$$\omega = \sqrt{\alpha_1 \cdot \alpha_2} \quad .\tag{1.82}$$

Tyto oscilace znamenají *oscilující rovnováhu* mezi jedinci obou typů, jejich počet je udržován v mezích daných oscilacemi. Právě takový systém je systém dravec a kořist (příklad 11). V systému elektronů a děr v silném elektrickém poli (příklad 10) není možné dosáhnou oscilující rovnováhy. Počty jedinců dvou sociálních skupin (příklad 12) mohou a nemusí oscilovat, stejně tak jako koncentrace látek v chemických reakcích (příklad 13).

Doplníme-li na pravých stranách evolučních rovnic regulační členy  $f_k$  dostaneme tzv. *Volterr-Lotkovovy rovnice*:

$$\frac{d\xi_k}{dt} = \alpha_{kj} \xi_j + \beta_k^{jl} \xi_j \xi_l + f_k \quad .\tag{1.83}$$

Regulační členy mohou popisovat v systému dravec  $\leftrightarrow$  kořist například dodávání potravy zvnějšíku nebo vnější regulaci počtu zvířat. Hodnoty  $f_k$  mohou být konstantní i různé funkce času (periodický lov). Škála typů řešení Volterr-Lotkovových systémů je velmi bohatá již i pro dvoudimenzionální případ. V různých oblastech fázového prostoru nacházíme různé typy řešení - oscilace, stabilní a nestabilní ohniska, stabilní oblasti, nestabilní oblasti, sedla. Při periodických regulačních členech pozorujeme rezonance, buzení systému. Například rovnice typu dravec  $\leftrightarrow$  kořist s regulačním členem

$$\begin{aligned}\frac{d\xi_1}{dt} &= -\xi_1 + \xi_1 \xi_2 + 1/4 \quad , \\ \frac{d\xi_2}{dt} &= +\xi_2 - \xi_1 \xi_2\end{aligned}\tag{1.84}$$

má v bodě  $\xi^{(S)} = (1, 3/4)$  řešení ve tvaru stabilního ohniska.

## 1. 6. POHYBY NABITÝCH ČÁSTIC V ELEKTROMAGNETICKÝCH POLÍCH

**Předpoklady:** 1) částice vzájemně neinteragují  
2) vlastní pole částic je zanedbatelné.

Elektrická a magnetická pole můžeme popsat buď elektrickou intenzitou  $\mathbf{E}$  a magnetickou indukcí  $\mathbf{B}$  nebo za pomoci čtyřpotenciálu  $(\phi, \mathbf{A})$ . Převodní vztahy jsou

$$\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \text{grad} \phi, \quad (1.85)$$

$$\mathbf{B} = \text{rot} \mathbf{A}. \quad (1.86)$$

Zde předpokládáme, že  $\phi(t, \mathbf{x})$  a  $\mathbf{A}(t, \mathbf{x})$  jsou předem dané funkce. Problém pohybu nabitých částic můžeme potom zapsat v Lagrangeově formulaci takto:

**Nerelativisticky**

**Relativisticky**

$$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 - Q\phi + Q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}$$

$$L = -mc^2 \sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2} - Q\phi + Q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v} \quad (1.87)$$

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

$$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = \frac{m\mathbf{v}}{\sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2}} + Q\mathbf{A} \quad (1.88)$$

$$W = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{v} - L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + Q\phi$$

$$W = \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} \cdot \mathbf{v} - L = \frac{mc^2}{\sqrt{1 - \mathbf{v}^2/c^2}} + Q\phi \quad (1.89)$$

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

$$H = c\sqrt{m^2c^2 + (\mathbf{p} - Q\mathbf{A})^2} + Q\phi. \quad (1.90)$$

**Pozn. 1:** Energii budeme v této kapitole značit  $W$ , abychom ji odlišili od intenzity elektrického pole  $\mathbf{E}$ .

**Pozn. 2:** Povšiměte si, že  $W \neq T + V$ , energie totiž nezávisí na  $\mathbf{A}$ , magnetické pole nemění energii, ale pouze směr rychlosti.

Ukažme (pro jednoduchost v nerelativistickém případě), že příslušné Lagrangeovy rovnice jsou totožné s Lorentzovou rovnicí pro pohyb nabitě částice. Ve složkách máme

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} m v_j v_j - Q\phi(t, \mathbf{x}) + QA_j(t, \mathbf{x}) v_j; \\ \frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial v_i} - \frac{\partial L}{\partial x_i} &= 0, \\ \frac{d}{dt} (m v_i + QA_i) + Q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - Q \frac{\partial A_j}{\partial x_i} v_j &= 0, \\ \frac{d}{dt} (m v_i) + Q \frac{\partial A_i}{\partial t} + Q \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \frac{dx_j}{dt} + Q \frac{\partial \phi}{\partial x_i} - Q \frac{\partial A_j}{\partial x_i} v_j &= 0, \\ \frac{d}{dt} (m v_i) &= Q \left[ -\frac{\partial A_i}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial x_i} + v_j \left( \frac{\partial A_j}{\partial x_i} - \frac{\partial A_i}{\partial x_j} \right) \right], \end{aligned}$$

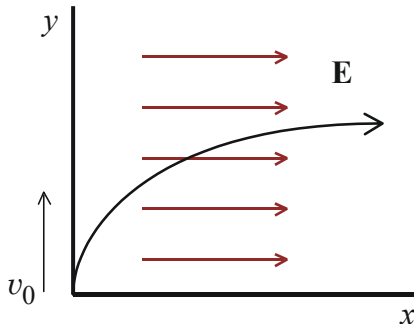
vektorově

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = Q \left[ -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial \phi}{\partial \mathbf{x}} + \mathbf{v} \times \text{rot } \mathbf{A} \right] , \quad (1.91)$$

$$\frac{d}{dt}(m\mathbf{v}) = Q [\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}] ,$$

což je známá Lorentzova rovnice.

### 1. 6. 1. Konstantní homogenní elektrické pole (relativisticky)



$$\mathbf{E} = (E, 0, 0) \Rightarrow \phi = -Ex ,$$

$$\mathbf{B} = (0, 0, 0) \Rightarrow \mathbf{A} = 0 ;$$

počáteční podmínky:

$$\mathbf{x}(0) = (0, 0, 0),$$

$$\mathbf{p}(0) = (0, \gamma_0 m v_0, 0), \text{ kde } \gamma_0 \equiv 1/\sqrt{1 - v_0^2/c^2} .$$

Hodnota potenciálu  $\phi$  plyne ze vztahu (1.85) pro  $\mathbf{A} = 0$ . Hamiltonova funkce problému je

$$H = c \sqrt{m^2 c^2 + (\mathbf{p} - Q\mathbf{A})^2} + Q\phi = c \sqrt{m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2} - QEx ,$$

a příslušné Hamiltonovy rovnice mají tvar

$$\dot{x} = \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{c p_x}{\sqrt{m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2}} ,$$

$$\dot{y} = \{y, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{c p_y}{\sqrt{m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2}} , \quad (1.92-95)$$

$$\dot{p}_x = \{p_x, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x} = QE ,$$

$$\dot{p}_y = \{p_y, H\} = -\frac{\partial H}{\partial y} = 0 .$$

Integrací rovnic (1.94), (1.95) dostaneme

$$p_x(t) = QEt ,$$

$$p_y(t) = p_y(0) = \text{const} = \gamma m v_0 .$$

Toto řešení dosadíme do rovnic (1.92), (1.93) a integrujeme:

$$x(t) = \int_0^t \frac{c p_x}{\sqrt{m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2}} dt = c \int_0^t \frac{QEt}{\sqrt{\varepsilon_0^2 + (QEt)^2}} dt = \frac{c}{QE} \left( \sqrt{\varepsilon_0^2 + (QEt)^2} - \varepsilon_0 \right) ,$$

$$y(t) = \int_0^t \frac{c p_y}{\sqrt{m^2 c^2 + p_x^2 + p_y^2}} dt = c \int_0^t \frac{\gamma_0 m v_0}{\sqrt{\varepsilon_0^2 + (QEt)^2}} dt = \frac{c \gamma_0 m v_0}{QE} \text{arcsch} \left( \frac{QEt}{\varepsilon_0} \right) .$$

Výsledné řešení je tedy dáno vztahy

$$x(t) = \frac{c\varepsilon_0}{QE} \left( \sqrt{1 + \left( \frac{QEt}{\varepsilon_0} \right)^2} - \varepsilon_0 \right) ; \quad y(t) = \frac{c\gamma_0 m v_0}{QE} \operatorname{arcsch} \left( \frac{QEt}{\varepsilon_0} \right), \quad (1.96)$$

$$\gamma_0 \equiv 1/\sqrt{1 - v_0^2/c^2} ; \quad \varepsilon_0 \equiv \sqrt{m^2 c^2 + (\gamma_0 m v_0)^2} .$$

Proveďme nyní nerelativistickou limitu

$$v \ll c \text{ (tj. } c \rightarrow \infty) \Rightarrow \gamma_0 \rightarrow 1; \quad \varepsilon_0 \approx mc, \quad \text{tj.}$$

$$x(t) = \frac{mc^2}{QE} \left( \sqrt{1 + \left( \frac{QEt}{mc} \right)^2} - 1 \right) \approx \frac{mc^2}{QE} \left( 1 + \frac{1}{2} \left( \frac{QEt}{mc} \right)^2 - 1 \right) = \frac{QE}{2m} t^2 ,$$

$$y(t) = \frac{cmv_0}{QE} \operatorname{arcsch} \left( \frac{QEt}{mc} \right) \approx \frac{cmv_0}{QE} \cdot \frac{QEt}{mc} = v_0 t .$$

Vidíme, že výrazy přecházejí ve známé klasické vztahy - pohyb rovnoměrně zrychlený ve směru pole a pohyb rovnoměrný napříč pole. Současně rychlost ve směru pole  $v_x$  neroste nade všechny meze, tak jako v klasickém případě:

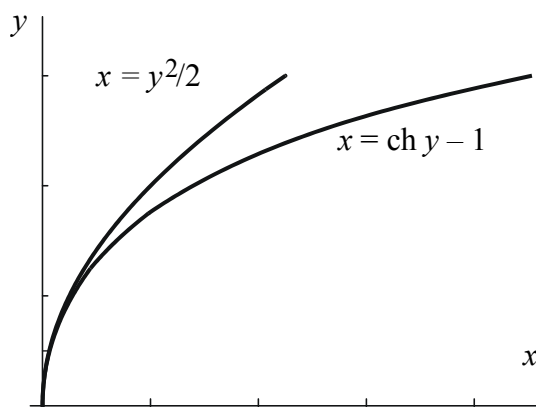
$$\lim_{t \rightarrow \infty} v_x(t) = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{dx}{dt} = \lim_{t \rightarrow \infty} \frac{c}{QE} \cdot (QE)^2 \cdot \frac{t}{\sqrt{\varepsilon_0^2 + (QEt)^2}} = c .$$

V libovolném konečném čase  $t$  je vždy  $v_x < c$ .

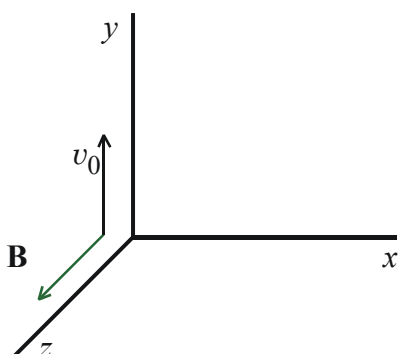
Vyloučíme-li z (1.96) čas dostaneme trajektorii částice

$$x = \frac{\varepsilon_0 c}{QE} \left[ \operatorname{ch} \left( \frac{QE}{c\gamma m v_0} y \right) - 1 \right] . \quad (1.97)$$

Rozdíl mezi funkcemi  $x = y^2/2$  (klasická trajektorie) a  $x = \operatorname{ch}(y) - 1$  je na obrázku:



### 1. 6. 2. Konstantní homogenní magnetické pole (nerelativisticky)



$$\mathbf{E} = (0, 0, 0) \Rightarrow \phi = 0 ,$$

$$\mathbf{A} = (-B y, 0, 0) \text{ nebo}$$

$$\mathbf{B} = (0, 0, B) \Rightarrow \mathbf{A} = (0, B x, 0) \text{ nebo}$$

$$\mathbf{A} = 1/2 (-B y, B x, 0)$$

počáteční podmínky:

$$\mathbf{x}(0) = (0, 0, 0) ,$$

$$\mathbf{p}(0) = (0, m v_0, 0) .$$

Hodnota vektorového potenciálu  $\mathbf{A}$  plyne ze vztahu (1.86). Pro vektorový potenciál  $\mathbf{A}$  budeme používat druhé z uvedených možných vyjádření. Zobecněná hybnost je v našem případě dána vztahem  $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + Q\mathbf{A}$ . Pro Hamiltonovu funkci platí

$$H = \frac{(\mathbf{p} - Q\mathbf{A})^2}{2m} + Q\phi = \frac{p_x^2 + (p_y - QBx)^2 + p_z^2}{2m}$$

a Hamiltonovy rovnice jsou

$$\begin{aligned}\dot{x} &= \{x, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m} \quad , \\ \dot{y} &= \{y, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{p_y - QBx}{m} \quad , \\ \dot{z} &= \{z, H\} = \frac{\partial H}{\partial p_z} = \frac{p_z}{m} \quad , \\ \dot{p}_x &= \{p_x, H\} = -\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{QB(p_y - QBx)}{m} \quad , \\ \dot{p}_y &= \{p_y, H\} = -\frac{\partial H}{\partial y} = 0 \quad , \\ \dot{p}_z &= \{p_z, H\} = -\frac{\partial H}{\partial z} = 0 \quad .\end{aligned}\tag{1.98-103}$$

Z rovnic (1.102), (1.103) máme ihned

$$\begin{aligned}p_y(t) &= p_y(0) = mv_0 \quad , \\ p_z(t) &= p_z(0) = 0 \quad .\end{aligned}$$

Tyto výrazy spolu s  $p_x$  vyjádřeným z (1.98) dosadíme do (1.101) a získáme tak rovnici

$$\ddot{x} + \left(\frac{QB}{m}\right)^2 x = \frac{QBv_0}{m}$$

pro proměnnou  $x$ . Po jejím vyřešení známe závislost  $x(t)$  a můžeme již přímo integrovat rovnice (1.99), (1.100). Výsledné řešení má tvar

$$\begin{aligned}x(t) &= R_L - R_L \cos \omega_c t \quad , \\ y(t) &= R_L \sin \omega_c t \quad , \\ z(t) &= 0 \quad ,\end{aligned}\tag{1.104}$$

kde jsme označili

$$R_L \equiv \frac{mv_0}{QB} \quad ; \quad \omega_c \equiv \frac{QB}{m}\tag{1.105}$$

tzv. Larmorův poloměr  $R_L$  a cyklotronní frekvenci  $\omega_c$ . Rovnici trajektorie získáme vyloučením času z (1.104):

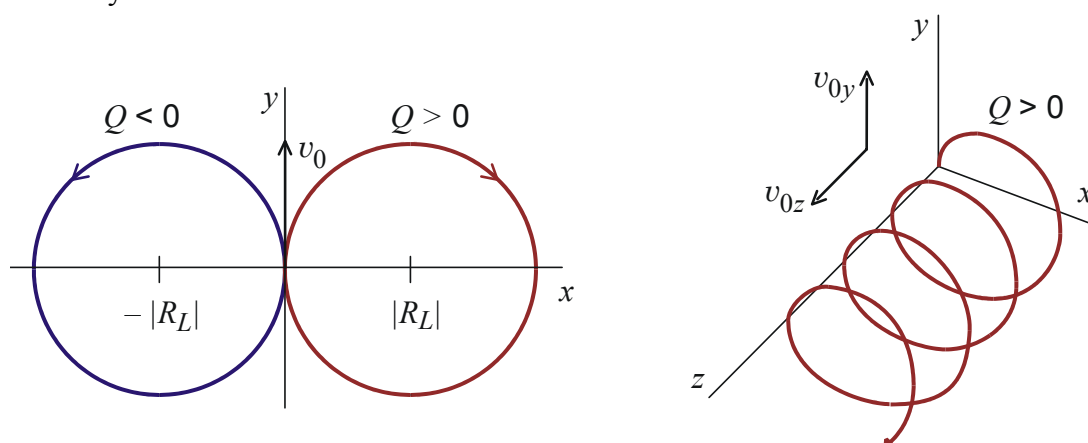
$$(x - R_L)^2 + y^2 = R_L^2 \quad .\tag{1.106}$$

Vidíme, že pohyb se děje po kružnici s poloměrem  $R_L$  a se středem  $S = [R_L, 0]$ .

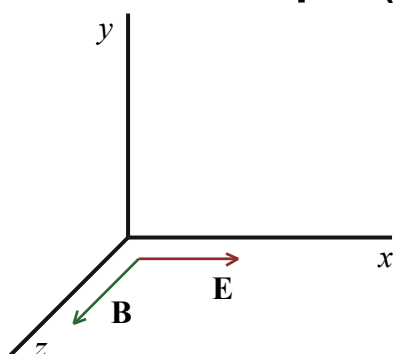
Magnetické pole nepůsobí na pohyb částice ve směru podél pole. Kolmo na směr pole působí Lorentzova síla, která zakřivuje trajektorii částice na kružnici. Při nenulové počáteční rychlosti  $v_z(0)$  je pohyb částice složen z rovnoměrného přímočarého pohybu podél pole a Larmorovy rotace (gyrace), tím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



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



### 1. 6. 3. Zkřížená pole (nerelativisticky)



$$\begin{aligned} \mathbf{E} = (E, 0, 0) &\Rightarrow \phi = -Ex, \\ &\mathbf{A} = (-By, 0, 0) \text{ nebo} \\ \mathbf{B} = (0, 0, B) &\Rightarrow \mathbf{A} = (0, Bx, 0) \text{ nebo} \\ &\mathbf{A} = 1/2 (-By, Bx, 0) \end{aligned}$$

počáteční podmínky:

$$\begin{aligned} \mathbf{x}(0) &= (0, 0, 0), \\ \mathbf{p}(0) &= (0, 0, 0). \end{aligned}$$

Pro vektorový potenciál  $\mathbf{A}$  budeme používat druhé z uvedených možných vyjádření. Zobecněná hybnost je opět  $\mathbf{p} = m\mathbf{v} + Q\mathbf{A}$ . Pro Hamiltonovu funkci platí

$$H = \frac{(\mathbf{p} - Q\mathbf{A})^2}{2m} + Q\phi = \frac{p_x^2 + (p_y - QBx)^2 + p_z^2}{2m} - QEx$$

a Hamiltonovy rovnice jsou

$$\begin{aligned} \dot{x} = \{x, H\} &= \frac{\partial H}{\partial p_x} = \frac{p_x}{m}, \\ \dot{y} = \{y, H\} &= \frac{\partial H}{\partial p_y} = \frac{p_y - QBx}{m}, \\ \dot{z} = \{z, H\} &= \frac{\partial H}{\partial p_z} = \frac{p_z}{m}, \\ \dot{p}_x = \{p_x, H\} &= -\frac{\partial H}{\partial x} = \frac{QB(p_y - QBx)}{m} + QE, \\ \dot{p}_y = \{p_y, H\} &= -\frac{\partial H}{\partial y} = 0, \\ \dot{p}_z = \{p_z, H\} &= -\frac{\partial H}{\partial z} = 0. \end{aligned} \tag{1.107-113}$$

Postupem zcela analogickým předešlému příkladu získáme řešení

$$\begin{aligned}x(t) &= R_d - R_d \cos \omega_c t \quad , \\y(t) &= R_d \sin \omega_c t - v_d t \quad , \\z(t) &= 0 \quad ,\end{aligned}\tag{1.114}$$

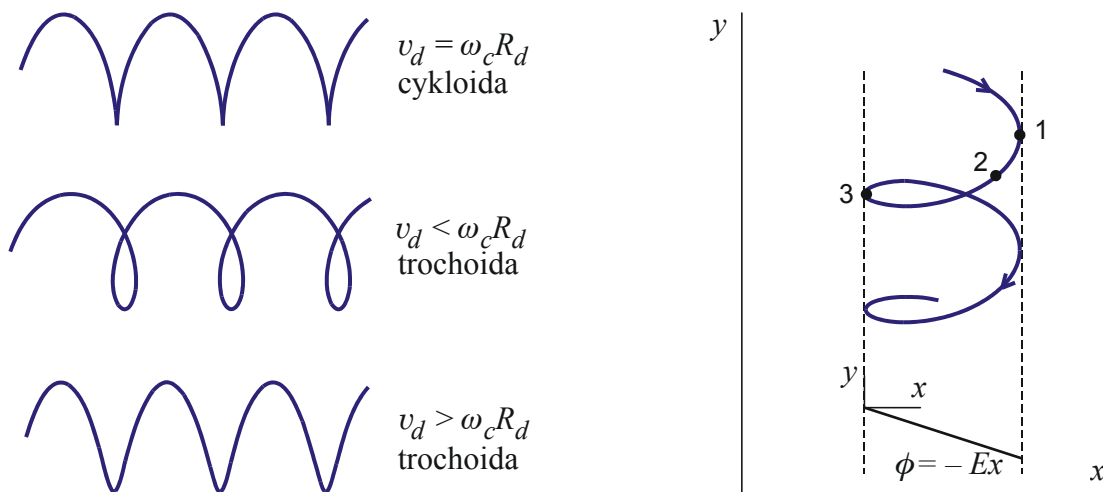
kde jsme označili

$$\omega_c \equiv \frac{QB}{m} \quad ; \quad v_d \equiv \frac{E}{B} \quad ; \quad R_d \equiv \frac{mv_d}{QB}\tag{1.115}$$

tzv. cyklotronní frekvenci  $\omega_c$ , driftovou rychlost  $v_d$  a driftový poloměr  $R_d$ . Rovnice trajektorie má po částečném vyloučení času z rovnic (1.114) tvar

$$(x - R_d)^2 + (y + v_d t)^2 = R_d^2 \quad .\tag{1.116}$$

Jde tedy o pohyb po kružnici s poloměrem  $R_d$ , jejíž střed  $S = [R_d, -v_d t]$  se pohybuje konstantní driftovou rychlostí  $v_d$  kolmo na elektrické i magnetické pole. Výsledná křivka (1.116) se nazývá cykloida.



V bodech trajektorie 1, 2, 3 má částice různou potenciální energii

$$\phi = -Ex \quad \Rightarrow \quad \phi_1 < \phi_2 < \phi_3 \quad .$$

a vzhledem k zákonu zachování energie i různou rychlost

$$\frac{1}{2}mv^2 + Q\phi = \text{const} \quad \Rightarrow \quad v_1 > v_2 > v_3 \quad .$$

a tím i různý Larmorův poloměr:

$$R_L = \frac{mv}{QB} \quad \Rightarrow \quad R_{L_1} > R_{L_2} > R_{L_3} \quad .$$

Cykloidální trajektorii částice lze tedy interpretovat jako pohyb po kružnici s proměnným poloměrem. Poznamenejme, že pro cykloidu platí přesně

$$v_d = \omega_c R_d \quad .\tag{1.117}$$

Neplatí-li tato relace, jde o obecnější křivku, která se nazývá trochoida. Pro nenulovou počáteční rychlost pohyb probíhá právě po trochoidě:

$$\begin{aligned}x(t) &= R_d - R_d \cos \omega_c t \quad , \\y(t) &= R_d \sin \omega_c t - v_d t \quad , \\z(t) &= v_{0z} t \quad ,\end{aligned}\tag{1.118}$$

kde se driftový poloměr změnil na

$$R_d = \frac{m \sqrt{v_{0x}^2 + (v_{0y} + v_d)^2}}{QB} \quad .\tag{1.119}$$

Pohyb se opět děje po kružnici s pohybuujícím se středem

$$S = \left[ \frac{m(v_{0y} + v_d)}{QB}, -v_d t \right] \quad .$$

### 1. 6. 4. Drifty

Výše uvedený výpočet je speciálním případem tzv. driftových pohybů. V případě, že na částici působí kromě magnetického pole ještě další silové pole, které se mění v průběhu jedné gyrační periody jen velmi málo (v čase i v prostoru), posouvá se gyrační střed driftovou rychlostí

$$\mathbf{v}_d = \frac{\mathbf{F} \times \mathbf{B}}{QB^2} \quad .\tag{1.120}$$

Tento výraz je ve skutečnosti přesný jen pro konstantní homogenní pole  $\mathbf{F}$ . V případě pomalu se měnících slabě nehomogenních polí jde o první přiblížení po vystředování výchozích rovnic přes gyrační pohyb.

- **$\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  drift.**  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  drift je drift elektricky nabitě částice v elektrickém a magnetickém poli. Z (1.120) plyne pro  $\mathbf{F} = Q\mathbf{E}$

$$\mathbf{v}_E = \frac{\mathbf{E} \times \mathbf{B}}{B^2} \quad .\tag{1.121}$$

Drifová rychlost je kolmá k oběma polím a její velikost je

$$v_E = \frac{E}{B} \sin \alpha \quad ,\tag{1.122}$$

kde  $\alpha$  je úhel mezi oběma poli. Dříve odvozený vztah (1.115) pro driftovou rychlost je speciálním případem vztahu (1.122). Driftová rychlost nezávisí na hmotnosti a náboji částice, elektrony i ionty v elektrickém poli driftují stejným směrem. Tento drift nebude původcem elektrického proudu, ale je jednou z mála cest, kterou získávají ionty vyšší energii než elektrony.

- **Gravitační drift.** V gravitačním silovém poli  $\mathbf{F} = m \mathbf{g}$  a magnetickém poli dochází k driftu s rychlostí

$$\mathbf{v}_g = \frac{m \mathbf{g} \times \mathbf{B}}{QB^2} \quad ,\tag{1.123}$$

která je kolmá ke gravitačnímu i magnetickému poli. Její směr závisí na náboji částice a pro elektrony a ionty je opačný. Velikost síly závisí na hmotnosti částic. Tento drift může být zdrojem elektrických proudů.

- **Grad  $|\mathbf{B}|$  drift.** V slabě nehomogenním magnetickém poli působí na gyrační střed částice fiktivní síla (fiktivní proto, že jde o sílu působící na gyrační střed - přes gyraci byly rovnice vystředovány)

$$\mathbf{F} = -\mu \vec{\nabla} |\mathbf{B}| \quad ; \quad \mu = \frac{mv_{\perp}^2}{2B} \quad . \quad (1.124)$$

$\mu$  je magnetický moment proudové smyčky vytvořené Larmorovou rotací částice. Lze ukázat, že tato veličina se zachovává v případě pomalých změn polí v porovnání s gyrací (je tzv. adiabatickým invariantem). Rychlost jsme rozložili na složku kolmou a rovnoběžnou s magnetickým polem:

$$\mathbf{v} = \mathbf{v}_{\parallel} + \mathbf{v}_{\perp} \quad . \quad (1.125)$$

$\nabla |\mathbf{B}|$  drift je způsoben změnou velikosti magnetického pole. Příslušná driftová rychlost má velikost

$$\mathbf{v}_{\nabla B} = \frac{mv_{\perp}^2}{2Q} \frac{\mathbf{B} \times \vec{\nabla} B}{B^3} \quad . \quad (1.126)$$

Tento drift závisí na hmotnosti a náboji částic, povede k různému driftování elektronů a iontů a ke vzniku elektrického proudu v plazmatu.

- **Drift zakřivení.** Při pohybu kolem zakřivené silokřivky magnetického pole bude na částici působit odstředivá síla

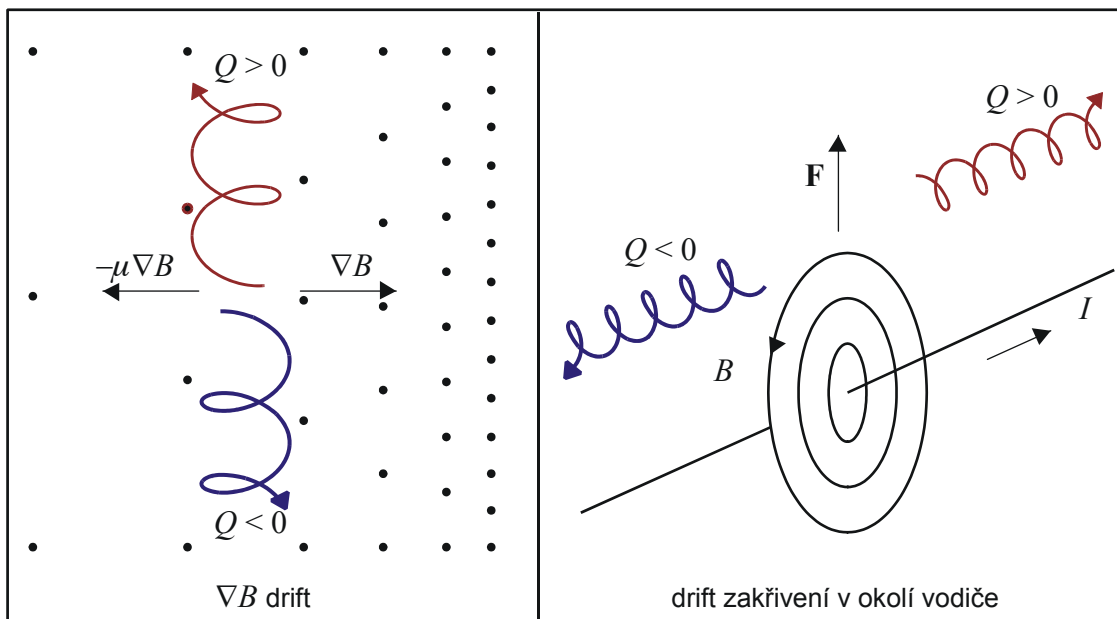
$$\mathbf{F} = \frac{mv_{\parallel}^2}{R_k} \frac{\mathbf{R}_k}{R_k} \quad , \quad (1.127)$$

kde  $\mathbf{R}_k$  je poloměr křivosti silokřivky. Rychlost driftu zakřivení je

$$\mathbf{v}_R = \frac{mv_{\parallel}^2}{QB^2} \frac{\mathbf{R}_k \times \mathbf{B}}{R_k^2} \quad . \quad (1.128)$$

Drift zakřivení opět povede ke vzniku proudu v plazmatu. Poloměr křivosti parametricky zadané křivky (parametr  $t$ ) můžeme určit ze vztahu:

$$\frac{1}{R} = \|\mathbf{d}^2\mathbf{r}/\mathbf{d}s^2\|; \quad ds = \sqrt{dx^2 + dy^2 + dz^2} = \sqrt{\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2} dt \quad . \quad (1.129)$$



- **Polarizační drift.** Bude-li se velikost elektrického pole pomalu měnit v čase, bude se také měnit driftová rychlost  $v_E$ . To odpovídá působení setrvačné síly

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}_E}{dt} = m \frac{d\mathbf{E}}{dt} \times \mathbf{B} \frac{1}{B^2}$$

a polarizačnímu driftu

$$\mathbf{v}_P = \frac{m}{Q} \frac{\mathbf{B} \times \left( \frac{d\mathbf{E}}{dt} \times \mathbf{B} \right)}{B^4}, \quad (1.130)$$

který je opět původcem proudu v plazmatu.

## 1. 6. 5. Některé speciální konfigurace polí

### Magnetická zrcadla

V magnetických zrcadlech je možné po určitou dobu udržet nabitě částice. Magnetická zrcadla využívají síly (1.124), která může obrátit směr pohybu částice. Označme úhel mezi rychlostí částice a magnetickými silokřivkami  $\theta$ . Potom je

$$v_{\perp} = v \sin \theta \quad ; \quad v_{\parallel} = v \cos \theta \quad . \quad (1.131)$$

Ze zákona zachování energie  $W$  a adiabatického invariantu  $\mu$

$$W = \frac{1}{2} m v^2 + Q\phi = \frac{1}{2} m v_{\perp}^2 + \frac{1}{2} m v_{\parallel}^2 = \text{const} \quad ; \quad (1.132)$$

$$\mu = \frac{m v_{\perp}^2}{2B}$$

plyne základní rovnice pro zrcadla

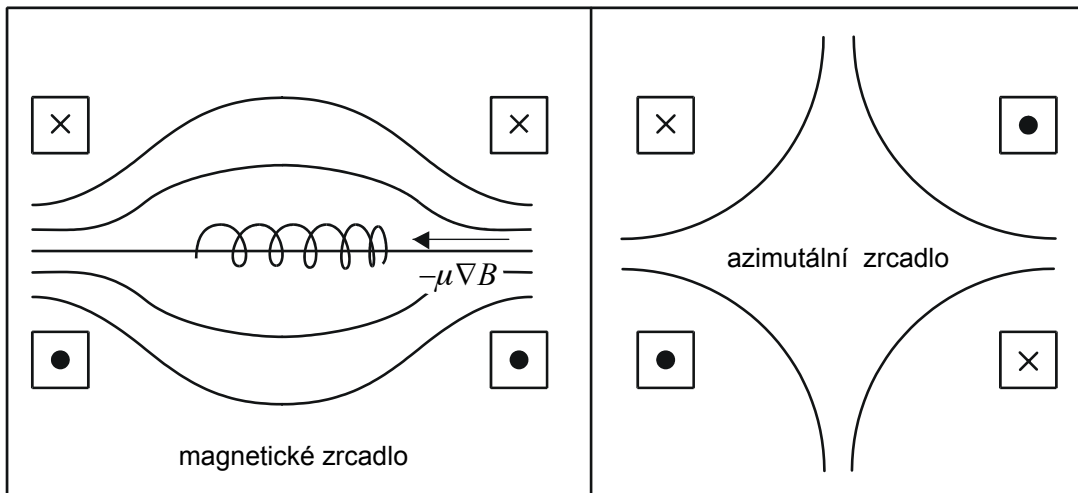
$$\frac{\sin^2 \theta}{B} = \text{const} \quad ; \quad \text{tj.} \quad \frac{\sin^2 \theta}{B} = \frac{\sin^2 \theta_0}{B_0} \quad . \quad (1.133)$$

Index 0 označuje hodnoty pole a úhlu v místě nástřelu částice. Z (1.133) plyne, že částice nastřelená pod úhlem  $\theta_0$  v místě s polem  $B_0$  bude obrácena zpět, vzroste-li velikost pole na kritickou hodnotu

$$B_c = \frac{B_0}{\sin^2 \theta_0} \quad . \quad (1.134)$$

Nedosáhne-li magnetické pole této hodnoty, částice ze zrcadla uniká. Máme-li naopak zadáno maximální pole  $B_c$ , potom ze systému uniknou všechny částice s  $\theta < \theta_0$  v místě s polem  $B_0$  podle (1.134) (tzv. únikový kužel).

Záměnou směru proudu v cívkách magnetického zrcadla vznikne tzv. azimutální zrcadlo. V azimutálním zrcadle je v centru  $|\mathbf{B}| = 0$ , Larmorův poloměr je nekonečný, cyklotronní frekvence nulová a změny polí nejsou malé ve srovnání s Larmorovou rotací. Adiabatický invariant  $\mu$  se nezachovává a částice, které prošly centrální oblastí se snadno dostanou do únikového kužele.

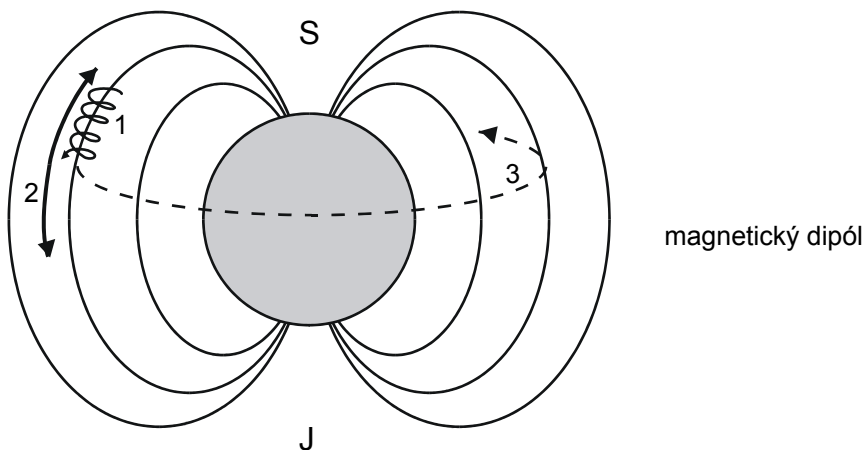


### Magnetický dipól

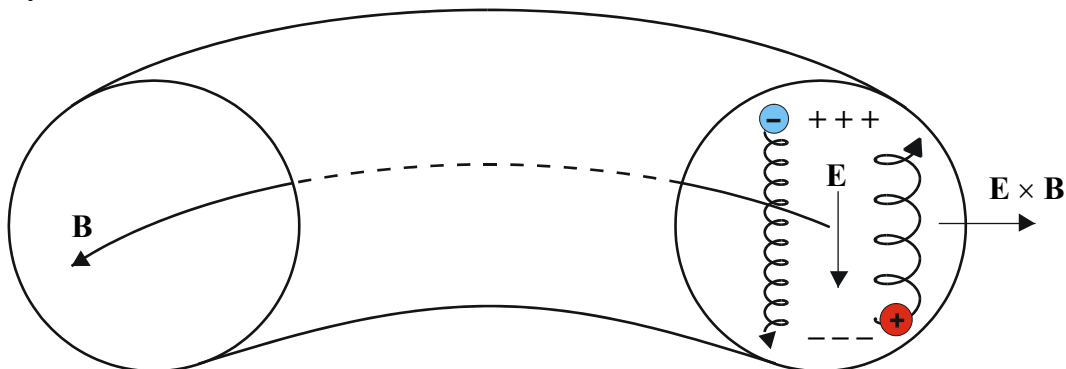
Pohyb nabitě částice v magnetickém dipólu se skládá ze tří periodických pohybů:

- 1) Larmorova rotace (gyrace)
- 2) longitudální pohyb mezi jednotlivými odrazy v polárních oblastech (zrcadla)
- 3) transverzální driftový pohyb (drift zakřivení)

Příkladem magnetického dipólu může být magnetické pole Země.

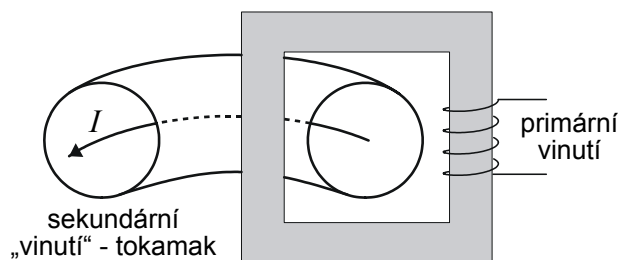


### Toroidy



V toroidální geometrii dochází k driftu zakřivení, který způsobuje separaci náboje, tím vzniká elektrické pole a  $\mathbf{E} \times \mathbf{B}$  drift, kterým částice unikají z prostoru toroidu. Tomu lze částečně čelit zkroucením silokřivek pole (dodatečným poloidálním polem). Základní toroidální pole vzniká za pomoci cívky navinuté na plášť torusu. Dodatečné poloidální pole můžeme získat různými způsoby. Jmenujme alespoň:

- 1) *stellarátor* - vinutí je šikmé.
- 2) *tokamak* - torus je sekundárem transformátoru. Tím v prostoru tokamaku vzniká elektrický proud, který generuje poloidální pole.



- 3) *multipóly* - v pracovním prostoru jsou vodiče, které generují poloidální pole.

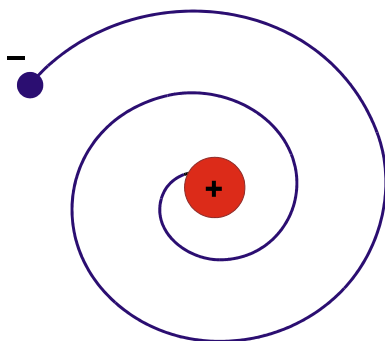
Poznamenejme na závěr, že ve skutečných zařízeních se jednotlivé částice vzájemně ovlivňují a to buď lokálními srážkami nebo prostřednictvím vzniku kolektivních polí celého systému částic - plazmatu.

Veškeré úvahy zde uvedené platí tedy jen za předpokladů uvedených na počátku této kapitoly (řídce horké plazma).





# *TF2: KVANTOVÁ TEORIE*



**STUDIJNÍ TEXT PRO DOKTORSKÉ STUDIUM**

**PETR KULHÁNEK**

## PŘEDMLUVA

Teoretická mechanika vychází ze zobecněných zkušeností člověka, z toho, jak vnímáme svět kolem sebe v našich měřítkách - v tzv. *makrosvětě*. Snažíme-li se zákony teoretické mechaniky aplikovat na tělesa malých rozměrů (atomy, částice) - tzv. *mikrosvět*, nebudou již předpovědi ve shodě s experimentem. V mikrosvětě platí jiné zákony. Například samotný akt měření může ovlivnit objekty mikrosvěta. Chceme-li určit polohu fotbalového míče, zachytíme okem fotony odražené od míče a informaci zpracujeme. Chceme-li určit polohu elektronu, odražený foton, z kterého na polohu usuzujeme, udělí elektronu nezanedbatelný impuls a změní jeho stav. Asi největší rozdíl mezi jevy v makrosvětě a mikrosvětě souvisí s komutativností. V makrosvětě jsme si zvykli na to, že jevy, které pozorujeme jsou komutativní – nezáleží na pořadí. Je jedno, zda nejprve provedeme měření *A* a poté měření *B* nebo naopak. Zkrátka  $AB = BA$ . V mikrosvětě tomu tak ale není. Akt měření ovlivňuje stav objektů a záleží na tom, které měření provedeme jako první. To je také hlavním důvodem selhání teoretické mechaniky při popisu mikrosvěta. Teoretická mechanika je založena na komutujících matematických objektech. Jedinou nekomutující strukturou jsou Poissonovy závorky, a to navíc ještě pomocnou.

První jevy v mikrosvětě, které byly v příkrém rozporu s teoretickou mechanikou, byly objeveny na počátku 20. století. Jejich analýza vedla ke zrodu kvantové teorie - jedné ze dvou nejúspěšnějších teorií v dějinách lidstva (kvantová teorie, obecná teorie relativity). Základní rovnice a vztahy zůstávají shodné s teoretickou mechanikou, platí však pro zcela jiné objekty. Například Lieova algebra Poissonových závorek je aplikována na jisté operátory představující dynamické proměnné. Předpovědi dnešní kvantové teorie se shodují s experimentem na mnoho platných cifer.

Uvedme nyní základní rozdíly světa malých rozměrů - *mikrosvěta* - oproti situacím, na které jsme zvyklí z našeho okolí - *makrosvěta*:

- 1) ***diskrétní hladiny některých dynamických proměnných*** (například energie, moment hybnosti ...) - v dané situaci můžeme naměřit jen určité hodnoty u sledované veličiny a žádné jiné. V makrosvětě jsou měřené hodnoty spojité.
- 2) ***dualismus vln a částic*** - objekty mikrosvěta se mohou chovat jako vlny i jako částice.
- 3) ***nekomutativnost aktu měření*** - při měření hodnot dvou dynamických proměnných (například polohy a rychlosti) může výsledek záležet na pořadí provedení měření. Akt měření totiž ovlivňuje stav systému, po měření se systém obecně nachází v jiném stavu než před měřením.
- 4) ***relace neurčitosti*** - zvýšení přesnosti měření jedné dynamické proměnné v některých případech sníží přesnost měření jiné dynamické proměnné. Tato měření se navzájem ovlivňují a jsou nekomutativní.
- 5) ***nedeterminismus kvantové teorie*** - dva experimenty připravené za stejných podmínek mohou dopadnout různě. Při provedení mnoha pokusů zjistíme, že výsledky mají pravděpodobnostní charakter. Jsme tedy schopni předpovědět jen s jakou pravděpodobností naměříme ten či onen možný jev, nikoli který jev konkrétně nastane.

Fyzika se tak dostala před úlohu vytvořit takovou teorii, která by souhlasila s experimenty v mikrosvětě a v makrosvětě přecházela v klasickou teoretickou mechaniku. Konstrukci kvantové teorie se budeme zabývat v této části skript. Aktuální verzi skript naleznete na serveru [www.aldebaran.cz](http://www.aldebaran.cz) v sekci Studium.

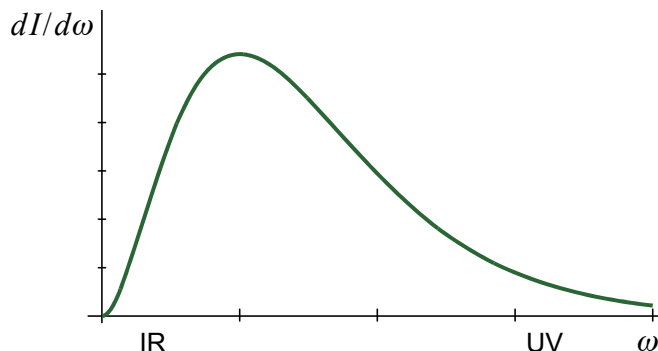
## 2. KVANTOVÁ TEORIE

### 2.1. VZNIK A VÝVOJ KVANTOVÉ TEORIE

Shrňme nyní základní experimentální fakta, která vedla ke zrodu kvantové teorie:

#### Záření absolutně černého tělesa:

V absolutně černém tělese (lze za ně považovat například každou hvězdu) je v rovnováze látka a záření při nějaké konkrétní teplotě  $T$ . Sledujeme-li vyzařování absolutně černého tělesa, zjistíme, že na různých frekvencích vyzařuje s různou intenzitou. Experimentálně pozorovaný průběh energie

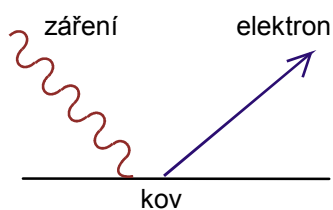


vyzařené na jednotkovou frekvenci je na obrázku. Teoretické výpočty křivky záření absolutně černého tělesa, které prováděli Rayleigh, Jeans a Wien, vedly k odlišným závislostem. Buď divergovaly v infračervené (IR) nebo v ultrafialové (UV) oblasti spektra. Správnou formuli uhodl až Max Planck v srpnu 1900 tím, že zkoušel porovnávat různé funkce s naměřenými údaji. Jeho výsledek zněl:  $dI/d\omega \sim \omega^3 \exp[-\text{const } \omega / T]$ . Za další dva měsíce odvodil Planck tuto závislost i teoreticky za předpokladu, že energie světla o určité frekvenci  $\omega$  se nemění spojitě, ale je celistvým násobkem základního energetického kvanta

$$E = \hbar \omega; \quad \hbar = 1.05 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (2.1)$$

Veličina  $\hbar$  se nazývá redukovaná Planckova konstanta. Planck původně použil předpoklad o kvantování energie pro zjednodušení matematických výpočtů. Později se ukázalo, že energie elektromagnetického záření určité frekvence je skutečně kvantována, tj. její pozorované hodnoty nejsou spojitě, ale mění se skokem o základní energetické kvantum  $\hbar \omega$ .

#### Fotoelektrický jev (fotoefekt):



Při dopadu světla (elektromagnetického záření) na povrch kovu může být z kovu vytržen elektron, který opustí povrch kovu. K uvolňování elektronů z kovu dochází při frekvencích světla vyšších než prahová frekvence  $\omega_0$ , která je pro daný kov charakteristická. Máme-li k dispozici světlo s frekvencí nižší než prahovou, emise elektronů nenastane, byť bychom použili světlo se sebevětší intenzitou. Tento experiment je v rozporu s představou o světle jako elektromagnetickém vlnění. K fotoefektu by mělo docházet při každé frekvenci a dostatečnou energii k emisi by mělo jít získat zvýšením intenzity dopadajícího světla.

Řešení podal A. Einstein v roce 1905. Elektromagnetické vlnění se chová při fotoefektu jako částice. Tyto částice nazval *fotony*. Energie jednoho fotonu záření o frekvenci  $\omega$  je právě energie jednoho energetického kvanta (2.1). Vysvětlení fotoelektrického jevu je nyní velice jednoduché. Na povrchu kovu dochází ke srážce fotonu s elektronem. Aby foton vyrazil elektron, musí mít vyšší energii než je vazbová energie elektronu v kovu:  $\hbar \omega \geq E_i$ . Prahová frekvence zřejmě je  $\omega_0 = E_i / \hbar$ . Celková energetická bilance

$$\hbar \omega = E_i + \frac{1}{2} m_e v^2$$

se nazývá Einsteinova rovnice pro fotoefekt. Energie dopadlého fotonu se spotřebuje na vytržení elektronu z kovu a na kinetickou energii vylétávajícího elektronu.

Elektromagnetické vlnění tedy můžeme považovat za soubor fotonů. Proto i při záření absolutně černého tělesa se mění energie záření o dané frekvenci skokem - tento skok představuje přírůstek nebo úbytek jednoho fotonu.

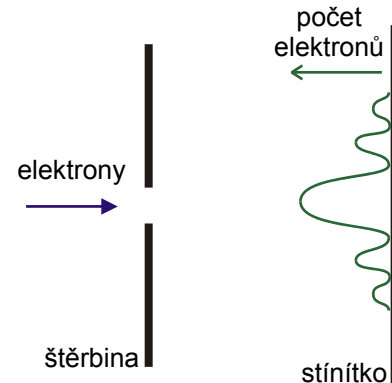
### Comptonův jev

A. H. Compton v roce 1923 zjistil, že rentgenové paprsky odražené od povrchu grafitu mění svoji vlnovou délku. Podle klasických představ by vlny měly rozkmitat povrchové elektrony a ty generovat vlnu se stejnou frekvencí. Vysvětlení: Fotony se opět chovají jako částice, srážejí se s elektrony a při srážce ztrácí část energie  $e$  proto mění svou vlnovou délku.

### Ohyb elektronů:

Fotoelektrický jev ukázal, že vlnění se může chovat v určitých situacích jako částice. Naopak, někdy se částice chovají jako vlny. Například svazek elektronů procházející štěrbinou nebo dvoušěrbinou po dopadu na stínítko vytvoří typický ohybový obrazec. Nemůžeme předem říci, kam který elektron dopadne, ale při velkém množství elektronů můžeme určit pravděpodobnosti dopadu do konkrétního místa na stínítku. Vzniklý ohybový obrazec je tedy typickým statistickým jevem.

Dnes jsou vlnové vlastnosti elektronů využívány například v elektronových mikroskopech. Elektrony mají výrazně kratší vlnovou délku než viditelné světlo a proto je rozlišovací schopnost elektronového mikroskopu podstatně vyšší než optického. Poprvé byly vlnové vlastnosti elektronu pozorovány C. J. Davissonem a L. H. Germerem v roce 1927. Zkoumali odraz elektronů od povrchu niklu. Po vyžhání niklu došlo k rekrystalizaci a odražené elektrony začaly vykazovat na přesných velkých krystalech ohybový obrazec.



**Poznámka:** Částice popisujeme čtveřicí veličin ( $E$ ,  $\mathbf{p}$ ). Definice energie  $E$  a hybnosti  $\mathbf{p}$  souvisí se symetriemi při posunutí v čase a v prostoru (teorém Noetherové). Vlnění popisujeme čtveřicí veličin ( $\omega$ ,  $\mathbf{k}$ ). Úhlová frekvence  $\omega$  je definována jako změna fáze vlnění s časem  $\omega = \partial\varphi/\partial t$  a vlnový vektor  $\mathbf{k}$  je změna fáze vlnění s prostorovými souřadnicemi  $\mathbf{k} = \partial\varphi/\partial\mathbf{x}$ . Při periodickém ději s konstantní periodou  $T$  v čase a  $\lambda$  v prostoru (vlnová délka) lze psát  $\omega = 2\pi/T$ ,  $k = 2\pi/\lambda$ . Louis de Broglie vyslovil hypotézu, že objekty mikrosvěta se chovají jako vlny i jako částice (dualismus vln a částic).

Převodní vztah má tvar:

$$E = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} . \quad (2.2)$$

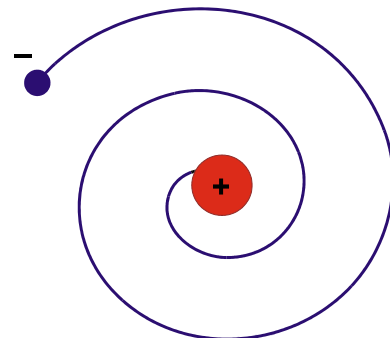
Často nás zajímá vlnová délka vlnění odpovídající konkrétní částici, například elektronu v elektronovém mikroskopu. Ze vztahu (2.2) máme  $mv = 2\pi\hbar/\lambda$  a tedy

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} . \quad (2.3)$$

### Existence atomu:

Podle klasického planetárního modelu atomu obíhají záporně nabitě elektrony kolem kladně nabitého jádra tak, jako ve Sluneční soustavě obíhají planety kolem Slunce. Odstředivá síla je vyrovnána přitažlivou Coulombovou silou.

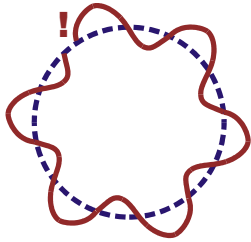
Mezi gravitačními a elektromagnetickými jevy je ale podstatný rozdíl. Z Maxwellovy teorie elektromagnetického pole plyne, že každá nabitá částice, která se pohybuje se zrychlením, vyzařuje elektromagnetické vlnění a ztrácí tak



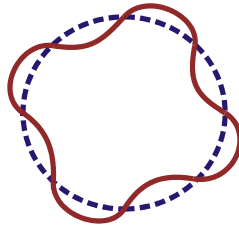
energii. Při kruhovém pohybu elektronu kolem jádra se mění směr rychlosti, zrychlení  $d\mathbf{v}/dt$  je nenulové (míří do centra atomu, jde o dostředivé zrychlení) a elektron ztrácí energii zářením. Pohybuje se po spirále až dopadne na jádro atomu. Tento proces trvá například pro vodík  $10^{-11}$  s. Podle klasické teorie by tedy za velice krátkou dobu neměly žádné atomy existovat!! Na tento paradox upozornil poprvé dánský fyzik Niels Bohr.

Niels Bohr vytvořil tzv. *Bohrův model atomu* na základě tří umělých postulátů, které přidal ke klasické teorii:

- 1) elektrony se pohybují jen po tzv. *stacionárních drahách* - tj. po takových drahách, ve kterých je odpovídající de Broglieho vlnová délka ze vztahu (2.3) "namotána" na oběžnou dráhu tj. obvod dráhy je  $n$ -násobkem vlnové délky.



Tato dráha není možná



Tato dráha je možná

$$2\pi r_n = n\lambda \quad ; \quad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv_n} .$$

Index  $n$  čísluje možné stavy elektronu v atomu ( $r_n$  možný poloměr dráhy,  $v_n$  rychlost na  $n$ -té dráze,  $E_n$  odpovídající energie) podle počtu vlnových délek elektronu na jeho oběžné dráze.

- 2) na stacionární dráze elektron nezáří.
- 3) při přeskoky elektronu mezi dvěma stacionárními hladinami dojde k vyzáření fotonu o energii odpovídající rozdílu energií těchto hladin.

Tento jednoduchý Bohrův model atomu není řešením výše uvedeného paradoxu, jde spíše o postulování nebo konstatování experimentálně známých skutečností. Navíc je tento model aplikovatelný jen na nejjednodušší atomy s jediným elektronem v obalu (H, He<sup>+</sup>). Tento model ale poprvé správně určil hladiny energie elektronu v atomu vodíku a vysvětlil spektrum atomu vodíku.

### Heisenbergovy relace neurčitosti:

Při měření polohy a hybnosti objektu mikrosvěta budou nepřesnosti měření  $\Delta x$ ,  $\Delta p$  splňovat relaci (přes  $k$  se nesčítá)

$$\Delta x_k \Delta p_k \geq \frac{\hbar}{2} \quad ; \quad k = 1, 2, 3 \quad . \quad (2.4)$$

Čím přesněji určíme polohu objektu, tím méně přesně určíme jeho hybnost a naopak. Samotný akt měření ovlivňuje náš objekt, ale relace (2.4) je splněna i tehdy, neprovedeme-li měření vůbec. Jde o principiální hranici danou přírodou, za kterou nelze nahlédnout.

Například obyčejný ohyb světla na štěrbině lze chápat jako důsledek relací neurčitosti pro fotony. Průchod fotonů štěrbinou není nic jiného než pokus o určení jejich polohy  $y$  s přesností  $\Delta y$  (velikost štěrbinu). Fotony, které prošly štěrbinou určitě měly v okamžiku průchodu souřadnici  $y$  rovnou souřadnici  $y$  štěrbinu. Zmenšíme-li šířku štěrbinu  $\Delta y$ , zvýšíme přesnost měření  $y$ ; podle relací (2.4) se ale zvýší nepřesnost  $\Delta p_y$  určení odpovídající komponenty hybnosti. Výsledkem je známý ohybový jev - fotony za štěrbinou vyletují s danou pravděpodobností do různých směrů se střední kvadratickou fluktuací hybnosti  $\Delta p_y$  danou Heisenbergovými relacemi neurčitosti.



Výčet experimentálních faktů, které jsme uvedli výše není zdaleka úplný. Všechny ale přispěly ke zrodu kvantové teorie, popisující pro nás nezvyklý svět atomů a elementárních částic. Podejme nyní stručný přehled jejího vývoje. V roce 1925 formuloval Werner Heisenberg ve svých 25 letech *maticovou mechaniku* - každé dynamické proměnné přiřadil čtvercovou matici (zpravidla nekonečnou), jejíž vlastní čísla byly měřitelné hodnoty příslušné veličiny. Šlo o teorii pramenící z vynikající intuice, na základě které bylo možné určit například energetická spektra různých atomů (nejen vodíku).

V roce 1926 Erwin Schrödinger formuloval *vlnovou kvantovou mechaniku*. Řešením rovnice

$$\left[ \frac{-\hbar^2}{2m} \Delta + V \right] \psi = E \psi \quad (2.5)$$

pro vlnovou funkci  $\psi$  bylo opět možné určit hodnoty energie  $E$  pro objekt v potenciálním poli  $V(x, y, z)$ . Obě konstrukce - Heisenbergova i Schrödingerova - poskytovaly shodné výsledky. Spíše než o ucelenou teorii šlo v té době o návod, jak určit energetické spektrum.

*Obecnou konstrukci* kvantové teorie na Hilbertových prostorech provedl P. A. M. Dirac. Ukázalo se, že Heisenbergova a Schrödingerova mechanika se liší jen jinou volbou příslušného Hilbertova prostoru.

Až doposud byla budována nerelativistická kvantová teorie. Zobecnění na relativistický případ provedli Klein a Gordon pro spin částice  $s = 0$  a Dirac pro spin částice  $s = 1/2$  (Klein-Gordonova rovnice, Diracova rovnice). S *relativistickou kvantovou teorií* byla objasněna podstata spinu, Dirac předpověděl existenci pozitronu, ale především byl postaven základ pro vybudování *kvantové elektrodynamiky* (Dirac - 1949). Odsud byl již jen krůček ke vzniku *kvantové teorie elektromagnetického pole* (Dirac, Feynman), ve které dochází i ke kvantování samotného elektromagnetického pole (tzv. druhé kvantování). Výsledky kvantové teorie pole lze přehledně zapisovat pomocí tzv. Feynmanových diagramů.

Na základě různých symetrií v přírodě se od 60. let bouřlivě vyvíjí *kalibrační teorie*, například *Weinberg-Salamova teorie elektroslabé interakce*, která sjednocuje teoretický pohled na interakci elektromagnetickou a slabou, rozvíjí se *kvantová chromodynamika* - teorie silné interakce, teorie *GUT* sjednocující elektroslabou a silnou interakci a probíhají intenzivní pokusy o formulaci Einstein-Diracových rovnic supersymetrických teorií *SUSY* pokoušejících se o jednotný popis všech čtyř interakcí. Lidstvo stále více poznává svět elementárních částic a jeho zákonitosti.

Následující kapitulu budeme věnovat matematice, kterou je třeba znát pro pochopení kvantové teorie. Vlastní stavbou kvantové teorie se budeme zabývat až v kapitole 2.3 a následujících.

## 2.2. (M) OPERÁTORY V KVANTOVÉ TEORII

V této kapitole se budeme zabývat nejdůležitější matematikou potřebnou v kvantové teorii. Veškeré úvahy jsou z důvodu jednoduchosti provedeny pro případ, kdy vlastní čísla operátorů jsou navzájem různá a tvoří spočetnou množinu. Obecnější případy vícenásobných vlastních čísel a spojitého spektra jsou krátce diskutovány v závěru kapitoly.

### 2.2.1. Unitární prostory (prostory se skalárním součinem)

V kapitole 1.4.1. jsme rozšířili pojem vektoru na obecnější objekty než jsou uspořádané trojice a zavedli lineární vektorový prostor. Pozorně si znovu tuto pasáž přečtěte! Nyní analogicky rozšíříme pojem skalárního součinu pro různé lineární vektorové prostory. Budeme důsledně používat Diracovu symboliku, ve které jsou prvky lineárních vektorových prostorů značeny symboly  $|\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{x}\rangle, |\mathbf{a}\rangle$  a skalární součiny  $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle, \langle \mathbf{x} | \mathbf{y} \rangle, \langle \mathbf{a} | \mathbf{b} \rangle$ , atd.

#### $\mathcal{R}^3$ prostor reálných trojic

$$|\mathbf{f}\rangle = (f_1, f_2, f_3) \quad , \quad |\mathbf{g}\rangle = (g_1, g_2, g_3) \quad , \\ \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 = f_k g_k \quad \text{skalární součin} \quad .$$

Norma vektoru (velikost) se definuje vztahem

$$\|\mathbf{f}\| \equiv \sqrt{\langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle} \quad \stackrel{\text{pro } \mathcal{R}^3}{=} \quad \sqrt{f_1^2 + f_2^2 + f_3^2} \quad . \quad (2.6)$$

Pro reálné trojice znázorněné jako úsečky opatřené šipkami je norma vektoru rovna délce úsečky a platí  $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| \cdot \cos \alpha$ , kde  $\alpha$  je úhel sevřený oběma vektory. Z tohoto vztahu plyne okamžitě *Schwartzovo lemma*:

$$|\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle| \leq \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| \quad . \quad (2.7)$$

Výsledkem operace skalárního součinu je číslo, v případě lineárního vektorového prostoru  $\mathcal{R}^3$  reálné číslo, v obecném případě bude výhodné uvažovat i o čísle komplexním. Norma vektoru (velikost) musí ale vždy být nezáporné reálné číslo.

#### $\mathcal{R}^N$ prostor reálných $N$ -tic

$$|\mathbf{f}\rangle = (f_1, \dots, f_N) \quad , \quad |\mathbf{g}\rangle = (g_1, \dots, g_N) \quad ; \quad f_l, g_l \in \mathcal{R}, \\ \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1 g_1 + \dots + f_N g_N = \sum_{k=1}^N f_k g_k = f_k g_k \quad .$$

V platnosti zůstávají definice normy i Schwartzovo lemma.

#### $\mathcal{C}^N$ prostor komplexních $N$ -tic

$$|\mathbf{f}\rangle = (f_1, \dots, f_N) \quad , \quad |\mathbf{g}\rangle = (g_1, \dots, g_N) \quad ; \quad f_l, g_l \in \mathcal{C}, \\ \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1^* g_1 + \dots + f_N^* g_N = \sum_{k=1}^N f_k^* g_k = f_k^* g_k \quad .$$

Skalární součin definujeme v jednom z argumentů komplexně sdružený (dohodou v levém). Pro komplexní číslo  $z = a + i b$  je velikost (norma) čísla dána vztahem

$$\|z\| = \sqrt{z^* z}$$



Právě proto, aby pro komplexní čísla zůstalo v platnosti, že norma vektoru je odmocnina skalárního součinu vektoru se sebou samým, je v definici skalárního součinu komplexní sdružení v jednom z argumentů. Při výše uvedené definici skalárního součinu bude výsledkem sice komplexní číslo, ale norma vektoru zůstane reálná nezáporná:

$$\|f\| = \sqrt{\langle f|f \rangle} = \sqrt{f_1^* f_1 + \dots + f_N^* f_N} = \sqrt{|f_1|^2 + \dots + |f_N|^2} \geq 0$$

Opět platí Schwartzovo lemma.

## $l^2$ prostor komplexních posloupností ( $N$ -tice s $N \rightarrow \infty$ )

$$|\mathbf{f}\rangle = \{f_1, \dots, f_n, \dots\} = \{f_l\}_{l=1}^{\infty}, |\mathbf{g}\rangle = \{g_l\}_{l=1}^{\infty}; f_l, g_l \in \mathbb{C},$$

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv f_1^* g_1 + \dots + f_n^* g_n + \dots = \sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k = f_k^* g_k.$$

Takto definovaný skalární součin má smysl jen pro konvergentní posloupnosti. Do prostoru  $l^2$  můžeme zahrnout jen takové prvky  $|\mathbf{f}\rangle$ , pro které je  $\|\mathbf{f}\| < \infty$ , tj. požadujeme

$$\sum_{k=1}^{\infty} f_k^* f_k < \infty \quad \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle \in l^2.$$

Potom je

$$|\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle| = \left| \sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k \right| \leq \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| < \infty \quad \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{g}\rangle \in l^2,$$

neboť Schwartzovo lemma platí i v případě nekonečných posloupností.

## $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$ prostor komplexních funkcí reálné proměnné

Při dalším zobecnění prostoru  $l^2$  si můžeme index  $k$  představit spojitý. Místo  $k$  budeme psát  $x : f_x$ . Výraz  $f_x$  není ale nic jiného než komplexní funkce reálné proměnné (spojitého indexu), kterou je zvykem zapisovat ve tvaru  $f(x)$ , tj.

$$|\mathbf{f}\rangle \equiv f_x \equiv f(x), \quad |\mathbf{g}\rangle \equiv g_x \equiv g(x), \quad ; \quad x \in \mathcal{R}, \quad f, g \in \mathbb{C},$$

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) dx.$$

Analogicky jako v  $l^2$  je třeba do prostoru  $\mathcal{L}^2$  zahrnout jen prvky s  $\|\mathbf{f}\| < \infty$ , tj.

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) f(x) dx < \infty \quad \text{pro } \forall f(x) \in \mathcal{L}^2.$$

Potom je

$$|\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle| = \left| \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) g(x) dx \right| \leq \|\mathbf{f}\| \cdot \|\mathbf{g}\| < \infty \quad \text{pro } \forall |\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{g}\rangle \in \mathcal{L}^2$$

a skalární součin má smysl. Schwartzovo lemma platí i pro integrály.  $\mathcal{L}^2$  se někdy nazývá *prostor funkcí integrovatelných s kvadrátem*. Lze ho definovat i pro jiný definiční obor než  $(-\infty, \infty)$ , potom píšeme  $\mathcal{L}^2(\mathcal{M})$ , kde  $\mathcal{M}$  je definiční obor funkcí  $f(x) \in \mathcal{L}^2(\mathcal{M})$ .

Nyní můžeme přistoupit k obecné definici prostorů se skalárním součinem.



**UNITÁRNÍ PROSTOR** (prostor se skalárním součinem) - unitárním prostorem nazveme lineární vektorový prostor  $\mathcal{V}$  (s operací  $+$ :  $\mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$  a operací  $\cdot$ :  $\mathbb{C} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}$ ), na kterém je definována další operace

$$\langle | \rangle : \mathcal{V} \times \mathcal{V} \rightarrow \mathbb{C}$$

(tzv. skalární součin) s vlastnostmi

- 1)  $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} + \mathbf{h} \rangle = \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle + \langle \mathbf{f} | \mathbf{h} \rangle$ ,
- 2)  $\langle \mathbf{f} | \alpha \mathbf{g} \rangle = \alpha \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle$ ,
- 3)  $\langle \mathbf{g} | \mathbf{f} \rangle = \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle^*$  ( $\Rightarrow \langle \alpha \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \alpha^* \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle$ ),
- 4)  $\langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle \geq 0$  ;  $\langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle = 0 \Leftrightarrow | \mathbf{f} \rangle = 0$

#### Poznámky:

- 1) Přidáním operace  $[, ]$  z lineárního vektorového prostoru získáme Lieovu algebru, přidáním operace  $\langle | \rangle$  získáme unitární prostor.
- 2) První dvě operace v definici znamenají linearitu v pravém argumentu. Z třetí operace plyne antilinearita v levém argumentu (aditivnost + vytknutí komplexně sdružené konstanty).
- 3) Symbolika zápisu pochází od P. A. M. Diraca. Nazývá se také braketová symbolika nebo brakety (z anglického bracket = závorka).  
 $\langle | \rangle$  „bracket“  
 $\langle |$  „bra“ (lze matematicky definovat, duál, naznačená operace skalárního součinu)  
 $| \rangle$  „ket“ (vektor z  $\mathcal{V}$ )
- 4) Pro komplexní  $N$ -tice lze interpretovat  $| \mathbf{f} \rangle$  jako sloupcovou matici,  $\langle \mathbf{f} |$  jako transponovanou komplexně sdruženou matici:

$$| \mathbf{f} \rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix} ; \quad \langle \mathbf{f} | = (f_1^* \quad \dots \quad f_N^*) .$$

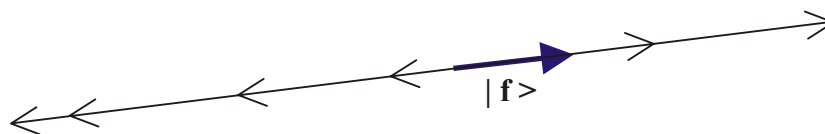
Potom je skalární součin

$$\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = (f_1^* \quad \dots \quad f_N^*) \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} = f_k^* g_k$$

definován za pomoci maticového násobení. Pro jiné prostory než  $n$ -tice není pro naše účely třeba jednotlivé části skalárního součinu  $\langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle$  nějak interpretovat.

- 5) Pro  $\mathcal{L}^2$  lze chápat  $\langle \mathbf{f} | = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x) \dots dx$  jako naznačenou operaci skalárního součinu. Je jen třeba doplnit patřičnou funkci, na kterou operace působí. Podobná situace je u derivování, napíšeme-li jen  $d/dx$ .

**Paprsek** - necht'  $\mathcal{V}$  je unitární prostor,  $| \mathbf{f} \rangle$  jeho nenulový prvek. Paprskem nataženým na  $| \mathbf{f} \rangle$  nazveme množinu prvků  $\{ | \mathbf{g} \rangle ; | \mathbf{g} \rangle = \alpha | \mathbf{f} \rangle ; \alpha \in \mathbb{C} \setminus \{0\}, | \mathbf{f} \rangle, | \mathbf{g} \rangle \in \mathcal{V} \}$ .



**Hilbertův prostor** - úplný unitární prostor (hranice prostoru je jeho součástí).

**Separabilní Hilbertův prostor** - Hilbertův prostor se spočetnou bází.

## 2.2.2. Operátory

Operátorem rozumíme zobrazení

$$\hat{\mathbf{A}}: \mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V} ,$$

které prvku  $|\mathbf{f}\rangle$  prostoru  $\mathcal{V}$  přiřazuje prvek  $|\mathbf{g}\rangle$  tohoto prostoru:

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{g}\rangle .$$

V platnosti zůstává běžné názvosloví používané pro zobrazení (*vzor, obraz, definiční obor, obor hodnot, ...*).

**Příklad 1:**  $\mathcal{R}^3$  Operátorem na  $\mathcal{R}^3$  může být libovolná matice  $3 \times 3$ , například

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} ; \quad |\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 3 \end{pmatrix} = |\mathbf{g}\rangle , \quad \text{obecně}$$

$$\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ f_3 \\ f_2 + f_3 \end{pmatrix} .$$

**Příklad 2:**  $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$

$$\hat{\mathbf{D}} \equiv \frac{d}{dx} ; \quad |\mathbf{f}\rangle = x e^{-x} \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{D}}|\mathbf{f}\rangle = \frac{d}{dx}(x e^{-x}) = (1-x)e^{-x} = |\mathbf{g}\rangle .$$

**Jednotkový operátor:**  $\hat{\mathbf{1}}|\mathbf{f}\rangle \equiv |\mathbf{f}\rangle$ . Pro  $n$ -tice je jednotkovým operátorem diagonální matice s jednotkami na diagonále (jednotková matice) - ověřte!

**Kvadrát operátoru:** Druhou mocninu operátoru můžeme definovat, je-li obor funkčních hodnot operátoru podmnožinou jeho definičního oboru, potom

$$\hat{\mathbf{A}}^2|\mathbf{f}\rangle \equiv \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle) .$$

**Příklad 3:** Operátor derivace

$$\hat{\mathbf{D}} \equiv \frac{d}{dx} ; \quad |\mathbf{f}\rangle = e^{-x^2} \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{D}}^2|\mathbf{f}\rangle \equiv \frac{d}{dx}\left(\frac{d}{dx}e^{-x^2}\right) = \frac{d}{dx}(-2xe^{-x^2}) = (-2 + 4x^2)e^{-x^2} .$$

**Mocnina operátoru:** Analogicky definujeme indukci obecnou mocninu operátoru

$$\hat{\mathbf{A}}^n|\mathbf{f}\rangle \equiv \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{A}}^{n-1}|\mathbf{f}\rangle) .$$

**Funkce operátoru:** Necht'  $f(x)$  je analytická funkce s Taylorovým rozvojem

$$f(x) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k .$$

Potom můžeme definovat funkci operátoru

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{\mathbf{A}}^k . \quad (2.8)$$

Připomeňme si zde rozvoje některých důležitých funkcí:

$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + x^4 + x^5 + \dots ,$$

$$e^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \dots ,$$

$$\sin x = x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} + \dots ,$$

$$\cos x = 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} - \dots ,$$

$$\operatorname{sh} x = x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} + \dots ,$$

$$\operatorname{ch} x = 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} + \dots .$$

**Příklad 4:** Na prostoru  $C^2$  je zadán maticový operátor  $\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ . Určete  $\exp(\hat{\mathbf{A}})$ .

$$\hat{\mathbf{A}}^2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^3 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{1}} = \hat{\mathbf{A}} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^4 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^3 = \hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{1}} ,$$

$$\vdots$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{2n-1} = \hat{\mathbf{A}} , \quad \hat{\mathbf{A}}^{2n} = \hat{\mathbf{1}} , \quad n = 1, 2, \dots$$

Nyní již snadno nalezneme hledanou funkci matice:

$$\begin{aligned} \exp(\hat{\mathbf{A}}) &= 1 + \hat{\mathbf{A}} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^2}{2!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^3}{3!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^4}{4!} + \dots = \\ &= \left(1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{6!} + \dots\right) \hat{\mathbf{1}} + \left(1 + \frac{1}{3!} + \frac{1}{5!} + \frac{1}{7!} + \dots\right) \hat{\mathbf{A}} = \\ &= \operatorname{ch}(1) \hat{\mathbf{1}} + \operatorname{sh}(1) \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} 1 & -i \operatorname{sh} 1 \\ i \operatorname{sh} 1 & \operatorname{ch} 1 \end{pmatrix} . \end{aligned}$$

Takto získají smysl například i výrazy typu  $\sin(d/dx)$  a podobně. Později se naučíme funkci operátoru nalézt pomocí spektrálního rozvoje operátoru. Jde o efektivnější způsob než je Taylorův rozvoj.

**Inverzní operátor:** Inverzním operátorem k  $\hat{\mathbf{A}}$  nazveme takový operátor  $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$ , že

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \hat{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{1}} .$$

K danému operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$  může být nalezení inverzního operátoru značně obtížné, někdy inverzní operátor neexistuje vůbec.

**Sdružený operátor:** Sdruženým operátorem k  $\hat{\mathbf{A}}$  nazveme takový operátor  $\hat{\mathbf{A}}^+$ , že

$$\langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle .$$

Působení operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$  v pravé straně skalárního součinu dopadne stejně jako působení k němu sdruženého operátoru v levé části skalárního součinu. Sdružený operátor k  $\hat{\mathbf{A}}$  nemusí vždy existovat.

**Příklad 5:**

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} ; \quad \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -i \end{pmatrix} ; \quad \hat{\mathbf{A}}^+ = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2i & -i \end{pmatrix} .$$

Skutečně

$$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 1 & -2 \\ 0 & -i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \hat{\mathbf{1}} ;$$

$$\hat{\mathbf{A}} | \mathbf{g} \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 2i \\ 0 & i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 + 2i g_2 \\ i g_2 \end{pmatrix} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^+ | \mathbf{f} \rangle = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ -2i & -i \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} f_1 \\ -2i f_1 - i f_2 \end{pmatrix} \Rightarrow$$

$$\langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{g} \rangle = \begin{pmatrix} f_1^* & f_2^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 + 2i g_2 \\ i g_2 \end{pmatrix} = f_1^* g_1 + 2i f_1^* g_2 + i f_2^* g_2 ,$$

$$\langle \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \begin{pmatrix} f_1^* & 2i f_1^* + i f_2^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ g_2 \end{pmatrix} = f_1^* g_1 + 2i f_1^* g_2 + i f_2^* g_2 .$$

**Poznámka:** Nalézt sdružený operátor pro matice je velmi snadné, původní matici stačí komplexně sdružit a transponovat (překlopit kolem diagonály), tj.  $\hat{\mathbf{A}}^+ = (\hat{\mathbf{A}}^*)^T$ .

Uveďme nyní velmi užitečné vztahy pro výpočet inverzního a sdruženého operátoru pro součin dvou operátorů:

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1} = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \hat{\mathbf{A}}^{-1} , \quad (2.9)$$

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^+ = \hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{A}}^+ . \quad (2.10)$$

Jejich důkaz je triviální přímo z definice inverzního a sdruženého operátoru:

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{1}} \quad / \quad \hat{\mathbf{B}}^{-1} \text{ zprava} ,$$

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \quad / \quad \hat{\mathbf{A}}^{-1} \text{ zprava} ,$$

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1} = \hat{\mathbf{B}}^{-1} \hat{\mathbf{A}}^{-1} .$$

Analogicky postupujeme pro sdružený operátor:

$$\langle (\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \langle \mathbf{f} | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \hat{\mathbf{B}} \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{A}}^+ \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle .$$

**Komutativita operátorů:** Pro operátory je obecně  $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} \neq \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}$ . Říkáme, že operátory nekomutují. Míru nekomutativnosti můžeme posoudit za pomoci tzv. komutátoru

$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \equiv \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} . \quad (2.11)$$

Je-li komutátor operátorů  $\hat{\mathbf{A}}$ ,  $\hat{\mathbf{B}}$  nulový, operátory komutují, je-li různý od nuly nekomutují. Výsledkem komutátoru je opět operátor. Uveďme nejdůležitější vlastnosti komutátorů (dokažte!)

- 1)  $[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = -[\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{A}}]$  ,
- 2)  $[\hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}] = [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{C}}] + [\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}]$  ,
- 3)  $[\alpha \cdot \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = \alpha \cdot [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}]$  ,
- 4)  $[\hat{\mathbf{A}}, [\hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{C}}]] + [\hat{\mathbf{B}}, [\hat{\mathbf{C}}, \hat{\mathbf{A}}]] + [\hat{\mathbf{C}}, [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}]] = 0$  .

To jsou ale právě definiční vlastnosti Lieovy algebry (1.20) až (1.23). Komutátory tvoří Lieovu algebru na prostoru operátorů.

**Příklad 6:** Mějme na  $\mathcal{L}^2$  dva operátory:  $\hat{\mathbf{D}} = d/dx$  a  $\hat{\mathbf{X}} = x$ , například na prvek  $|x^5\rangle$  působí takto

$$\hat{\mathbf{D}}|x^5\rangle = \frac{d}{dx}x^5 = 5x^4 \quad , \quad \hat{\mathbf{X}}|x^5\rangle = x \cdot x^5 = x^6 .$$

Určeme jejich komutátor

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] | \mathbf{f} \rangle &= (\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{X}} - \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{D}}) | \mathbf{f} \rangle = \left( \frac{d}{dx}x - x \frac{d}{dx} \right) f(x) = \frac{d}{dx}(x f(x)) - x \frac{d}{dx}f(x) = \\ &= f(x) + x f'(x) - x f'(x) = f(x) = | \mathbf{f} \rangle \Rightarrow \\ [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] | \mathbf{f} \rangle &= | \mathbf{f} \rangle = \text{pro } \forall | \mathbf{f} \rangle \in \mathcal{L}^2 \Rightarrow \\ [\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] &= \hat{\mathbf{1}} . \end{aligned}$$

Podobně můžeme určovat i další komutační relace.

V celém tomto textu se budeme zabývat **lineárními operátory**, tj. operátory s lineární odezvou:  $\hat{\mathbf{A}}(\alpha | \mathbf{f} \rangle + \beta | \mathbf{g} \rangle) = \alpha \hat{\mathbf{A}} | \mathbf{f} \rangle + \beta \hat{\mathbf{A}} | \mathbf{g} \rangle$ . Všechny dosud uvedené operátory byly lineární.

V kvantové teorii se setkáme především se dvěma druhy lineárních operátorů - operátory **unitárními** a operátory **Hermitovými**. Uveďme nyní definice těchto operátorů.

## UNITÁRNÍ OPERÁTORY

**Definice:** unitární operátor zachovává skalární součin, tj.

$$| \mathbf{f} \rangle \rightarrow \hat{\mathbf{U}} | \mathbf{f} \rangle , \quad | \mathbf{g} \rangle \rightarrow \hat{\mathbf{U}} | \mathbf{g} \rangle \quad \Rightarrow \quad \langle \mathbf{f} | \mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{U}} \mathbf{f} | \hat{\mathbf{U}} \mathbf{g} \rangle . \quad (2.12)$$

Skalární součin se před a po působení unitárního operátoru nezmění.

**Věta:** Pro unitární operátory je sdružený a inverzní operátor totožný, tj.

$$\hat{\mathbf{U}}^+ = \hat{\mathbf{U}}^{-1} . \quad (2.12')$$

**Důkaz:** Z definice sdruženého operátoru víme, že

$$\langle \hat{U}f | \hat{U}g \rangle = \langle \hat{U}^+ \hat{U}f | g \rangle .$$

Pro zachování skalárního součinu (definice unitárního operátoru) je nutné, aby

$$\hat{U}^+ \hat{U} = \hat{1} ,$$

to ale podle definice inverzního operátoru právě znamená, že  $\hat{U}^+ = \hat{U}^{-1}$ .

**Příklad 7:** operátor  $\hat{U} \equiv e^{ix}$  na prostoru  $\mathcal{L}^2$  je unitární

$$|f\rangle = f(x) , \quad \hat{U}|f\rangle = e^{ix} f(x) ,$$

$$|g\rangle = g(x) , \quad \hat{U}|g\rangle = e^{ix} g(x) ,$$

$$\begin{aligned} \langle \hat{U}f | \hat{U}g \rangle &= \int (e^{ix} f(x))^* e^{ix} g(x) dx = \int e^{-ix} f^*(x) e^{ix} g(x) dx = \\ &= \int f^*(x) g(x) dx = \langle f | g \rangle . \end{aligned}$$

## HERMITOVY OPERÁTORY

**Definice:** Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, tj.

$$\langle \hat{A}f | g \rangle = \langle f | \hat{A}g \rangle . \quad (2.13)$$

**Věta:** Pro Hermitův operátor je sdružený operátor shodný s operátorem původním, je samosdružený:

$$\hat{A}^+ = \hat{A} . \quad (2.13')$$

**Důkaz:** Plyne okamžitě z definice sdruženého operátoru.

**Poznámka:** V přesné matematice se definice samosdruženého a Hermitova operátoru nepatrně liší požadavky na definiční obor, pro naše účely nebudeme samosdružené a Hermitovy operátory rozlišovat. Vzhledem k tomu, že Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, často se píše

$$\langle \hat{A}f | g \rangle = \langle f | \hat{A}g \rangle = \langle f | \hat{A}|g \rangle .$$

Centrální pozice  $\hat{A}$  naznačuje, že podle vlastního uvážení můžeme operátorem zapůsobit vlevo či vpravo. Tato struktura se někdy nazývá sendvič.

**Příklad 8:** operátor  $\hat{B} = i \frac{d}{dx}$  na prostoru  $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$  je hermitovský

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}f | g \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \left( i \frac{d}{dx} f(x) \right)^* g(x) dx = -i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d f^*(x)}{dx} g(x) dx \stackrel{p. \text{ partes}}{=} \\ &= -i \left[ f^*(x) g(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + i \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{d g(x)}{dx} dx = \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \left( i \frac{d g(x)}{dx} \right) dx = \langle f | \hat{B}g \rangle . \end{aligned}$$

Výraz v hranaté závorce je nulový, neboť funkce z  $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$  jsou integrovatelné s kvadrátem na  $(-\infty, \infty)$  a proto musí být

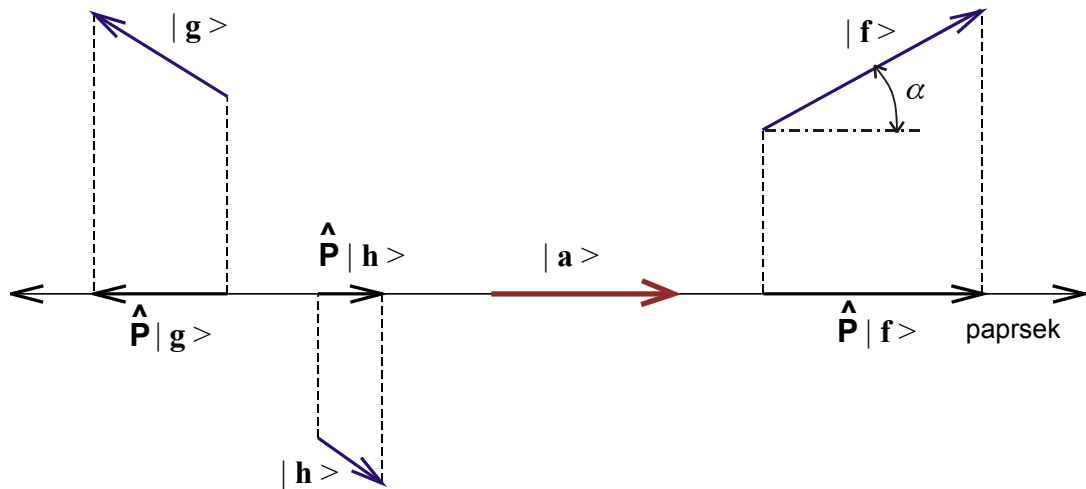
$$\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = \lim_{x \rightarrow \pm\infty} g(x) = 0 \quad \text{pro } \forall f, g \in \mathcal{L}^2 .$$

Samotný operátor derivace  $\hat{D} = d/dx$  hermitovský není, při provedení integrace per partes by se zaměnilo znaménko a  $\langle \hat{D}f | g \rangle = - \langle f | \hat{D}g \rangle$ .

### 2.2.3. Projekční operátory

Cílem této kapitoly bude naučit se nacházet projekce vektorů do předem zadaného paprsku. Jde o úlohu, která má prvořadý význam nejen pro kvantovou teorii. Rozvoje do různých typů řad (například Fourierova řada) nejsou nic jiného než hledání projekcí zadané funkce do vektorů nějaké báze, které reprezentují paprsek v prostoru.

Z celého paprsku stačí vzít jediný vektor, který paprsek zcela popíše. Vybereme tento „reprezentativní“ vektor jednotkový, tj. tak, aby  $\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle = 1$ , tj.  $\|\mathbf{a}\| = 1$ . Snadno představitelná je situace v  $\mathcal{R}^2$ . Na obrázku vidíme jednotkový vektor  $|\mathbf{a}\rangle$ , který reprezentuje paprsek a vektory  $|\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{g}\rangle, |\mathbf{h}\rangle$ , které do tohoto paprsku budeme promítat.



Projekce libovolného vektoru  $|\mathbf{f}\rangle$  má velikost  $\|\mathbf{f}\| \cdot \cos\alpha$  a směr  $|\mathbf{a}\rangle / \|\mathbf{a}\|$ . Znaménko funkce  $\cos$  ve velikosti projekce určuje, zda promítaný vektor míří ve směru  $|\mathbf{a}\rangle$  nebo ve směru opačném. Projekci lze napsat jako součin její velikosti a směru:

$$\hat{P}|\mathbf{f}\rangle = \|\mathbf{f}\| \cdot \cos\alpha \frac{|\mathbf{a}\rangle}{\|\mathbf{a}\|} = \|\mathbf{f}\| \cdot \frac{\langle \mathbf{a} | \mathbf{f} \rangle}{\|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{f}\|} \cdot \frac{|\mathbf{a}\rangle}{\|\mathbf{a}\|} = \frac{\langle \mathbf{a} | \mathbf{f} \rangle}{\|\mathbf{a}\| \cdot \|\mathbf{a}\|} |\mathbf{a}\rangle = \frac{\langle \mathbf{a} | \mathbf{f} \rangle}{\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle} |\mathbf{a}\rangle .$$

Povšimněte si, že při úpravách výrazů v Diracově symbolice můžeme libovolně stěhovat čísla (normy vektorů a skalární součiny). Výraz pro projekci se skládá z koeficientu, který určuje velikost projekce a vektoru  $|\mathbf{a}\rangle$ . Zapišeme-li formálně koeficient až za vektor, získáme operátorový tvar:

$$\hat{P}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{a}\rangle \frac{\langle \mathbf{a} | \mathbf{f} \rangle}{\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a} | \mathbf{f} \rangle}{\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle} .$$

Označme

$$\hat{P} \equiv \frac{|\mathbf{a}\rangle \langle \mathbf{a} |}{\langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle} . \quad (2.14)$$

Tento výraz se nazývá projekčním operátorem. Sám o sobě význam nemá, jde o naznačenou operaci skalárního součinu, která musí být vykonána. Teprve zapůsobením  $\hat{P}$  na nějaký vektor  $|\mathbf{f}\rangle$  dostaneme smysluplný výraz – projekci vektoru danou koeficientem  $\langle \mathbf{a} | \mathbf{f} \rangle / \langle \mathbf{a} | \mathbf{a} \rangle$  a směrem vektoru  $|\mathbf{a}\rangle$ . Situace je podobná operátoru  $d/dx$ , také jde jen o naznačenou derivaci, která musí být vykonána na konkrétní funkci. Bude-li vektor  $|\mathbf{a}\rangle$ , do kterého promítáme jednotkový, výrazy se ještě zjednoduší:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}} &\equiv |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|, \\ \hat{\mathbf{P}}|\mathbf{f}\rangle &\equiv |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle.\end{aligned}\quad (2.15)$$

Koeficient projekce je  $\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle$  a směr je  $|\mathbf{a}\rangle$ .

### Příklad 9:

Nalezněte projekci vektoru  $|\mathbf{f}\rangle$  do vektorů  $|\mathbf{a}\rangle$  a  $|\mathbf{b}\rangle$ . Vektory jsou dány takto:

$$|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix}; \quad |\mathbf{a}\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}; \quad |\mathbf{b}\rangle = \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix}.$$

Nejprve nalezneme projekční operátory:

$$\hat{\mathbf{P}}_a \equiv \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{\begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix} \cdot (1 \ 1)}{(1 \ 1) \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 1 \end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix},$$

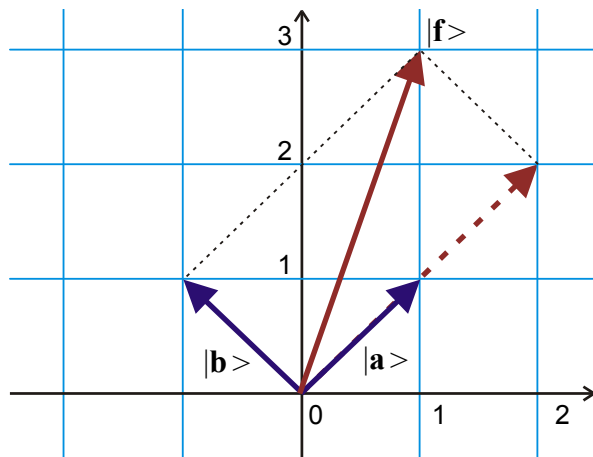
$$\hat{\mathbf{P}}_b \equiv \frac{|\mathbf{b}\rangle\langle\mathbf{b}|}{\langle\mathbf{b}|\mathbf{b}\rangle} = \frac{\begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix} \cdot (-1 \ +1)}{(-1 \ +1) \cdot \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix} +1 & -1 \\ -1 & +1 \end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix}.$$

Nyní snadno nalezneme hledané projekce:

$$\hat{\mathbf{P}}_a|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 & 1/2 \\ 1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2 \\ 2 \end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{P}}_b|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix} 1/2 & -1/2 \\ -1/2 & 1/2 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 \\ 3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 \\ +1 \end{pmatrix}.$$

Využijme nyní tohoto příkladu a vyzkoušejte si, že platí jednoduché a užitečné relace. Výpočty jsou natolik snadné, že zde uvedu jen výsledky:



1.  $\hat{\mathbf{P}}_a^+ = \hat{\mathbf{P}}_a$  ;  $\hat{\mathbf{P}}_b^+ = \hat{\mathbf{P}}_b$  .
2.  $\hat{\mathbf{P}}_a^2 = \hat{\mathbf{P}}_a$  ;  $\hat{\mathbf{P}}_b^2 = \hat{\mathbf{P}}_b$  .
3.  $\hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}}$  .

První relace znamená, že projekční operátory jsou hermitovské. Pro matice je význam jednoduchý: Matice se po překlapaní kolem hlavní diagonály a následném komplexním sdružení nezmění. Druhá relace má také velmi jednoduchý význam: Projekce dvakrát provedená po sobě (kvadrát operátoru) je shodná s projekcí provedenou jednou. Obě vlastnosti jsou pro projekční operátory charakteristické a většinou se považují za definici projekčního operátoru:

**Definice:** Projekčním operátorem nazveme takový lineární operátor, který je hermitovský a platí  $\hat{\mathbf{P}}^2 = \hat{\mathbf{P}}$ .

**Poznámka:** Snadno lze ukázat, že obě vlastnosti jsou splněny pro definici 2.14, například pro druhou vlastnost:



$$\hat{\mathbf{P}}^2 = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}| \cdot |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle \cdot \langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \hat{\mathbf{P}} .$$

V prostředním výrazu jsme zkrátily skalární součin v čitateli (uprostřed) s jedním ze skalárních součinů ve jmenovateli. Jde o prostá komplexní čísla, která lze vytknout před výrazy a krátit.

Význam třetí relace je také snadno pochopitelný: Vektory  $|\mathbf{a}\rangle$  a  $|\mathbf{b}\rangle$  jsou navzájem kolmé a v rovině tvoří ortonormální bázi (bázi složenou z kolmých a jednotkových vektorů). Projekce do těchto vektorů nejsou ničím jiným než rozkladem původního vektoru do této báze. Zkuste si obě projekce sečíst. Dostanete původní vektor. Právě matematickým vyjádřením faktu, že součet všech projekcí dá původní vektor je třetí relace:

$$\hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{P}}_a |\mathbf{f}\rangle + \hat{\mathbf{P}}_b |\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{f}\rangle .$$

Někdy se této relaci říká relace úplnosti. Pokud je daná báze úplná (nechybí v ní žádný vektor), potom je součet všech projekčních operátorů roven jednotkovému operátoru. To znamená, že součet všech projekcí libovolného vektoru dá původní vektor.

### 2.2.4. Rozvoj prvku do báze

Mějme v unitárním prostoru spočetnou bázi (maximální množinu lineárně nezávislých vektorů)  $\{|\mathbf{e}_k\rangle\}$ . Vhodnou lineární kombinací jednotlivých prvků můžeme vždy zajistit, aby prvky báze byly navzájem kolmé a měli jednotkovou velikost. Takové prvky budeme označovat jen pořadovým číslem:  $|k\rangle$ . Báze složená z vektorů  $|k\rangle$  má dvě základní vlastnosti:

$$\langle k|l\rangle = \delta_{kl} , \quad (2.16)$$

$$\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{\mathbf{1}} . \quad (2.17)$$

Vlastnost (2.16) je vyjádřením ortonormality. Skalární součin dvou různých vektorů je nulový (jsou navzájem kolmé) a dvou stejných je roven jedné (vektory báze mají jednotkovou velikost). Vlastnost (2.17) je relací úplnosti báze. Součet všech projekčních operátorů dá jednotkový operátor, tj. součet všech projekcí libovolného vektoru dá původní vektor. V relaci úplnosti je možné vynechat sumaci a využít Einsteinovu sumační konvenci. V případě neseperabilních prostorů s nespočetnou bází mají obě relace tvar:

$$\langle x|y\rangle = \delta(x-y) , \quad (2.16')$$

$$\int |x\rangle\langle x| dx = \hat{\mathbf{1}} . \quad (2.17')$$

Na pravé straně relace ortonormality je místo Kroneckerova symbolu Diracova  $\delta$  distribuce a v relaci úplnosti je místo sumace projekčních operátorů integrace.

Rozvoj prvku do báze je v Diracově symbolice mimořádně jednoduchý. Stačí před prvek vsunout relaci úplnosti v podobě jednotkového operátoru:

$$|\mathbf{f}\rangle = \hat{\mathbf{1}} |\mathbf{f}\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k| |\mathbf{f}\rangle = \sum_k c_k |k\rangle , \quad c_k \equiv \langle k|\mathbf{f}\rangle . \quad (2.18)$$

Koeficienty rozvoje jsou dány skalárním součinem rozvíjeného vektoru s prvkem báze.

#### Příklad 10: Fourierova řada

Uvažujme prostor  $\mathcal{L}^2(0, 2\pi)$  periodických funkcí integrovatelných s kvadrátem. Díky požadavku  $f(0) = f(2\pi)$  tvoří v tomto prostoru úplnou bázi soustava funkcí (viz elementární učebnice z matematiky nebo látka z prvních semestrů):

$$|f_k\rangle = e^{ikx}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

Tyto funkce jsou sice navzájem kolmé, ale nejsou jednotkové:

$$\langle f_k | f_l \rangle = \int_0^{2\pi} e^{-ikx} e^{ilx} dx = \int_0^{2\pi} e^{i(l-k)x} dx = \begin{cases} 0 & \text{pro } l \neq k \\ 2\pi & \text{pro } l = k \end{cases} = 2\pi \delta_{kl}.$$

Nulovost skalárního součinu pro  $l \neq k$  plyne z periodičnosti trigonometrických funkcí na intervalu  $\langle 0, 2\pi \rangle$ . Vydělíme-li prvky báze jejich velikostí, získáme ortonormální bázi

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx}, \quad k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots,$$

pro kterou platí relace ortonormality (2.16) a relace úplnosti (2.17). Rozvoj libovolné funkce z našeho prostoru je potom

$$|\mathbf{f}\rangle = \sum_k c_k |k\rangle, \quad c_k \equiv \langle k | \mathbf{f} \rangle,$$

neboli

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k c_k e^{ikx}, \quad c_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} e^{-ikx} f(x) dx,$$

což jsou známé vztahy pro Fourierovu řadu. Nezapomeňte, že skalární součin je v levém argumentu komplexně sdružený, proto je v koeficientu  $c_k$  minus.

### Reprezentace

V dané bázi můžeme snadno přepsat operátorovou rovnici  $\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{g}\rangle$ . Vložíme před vektor jednotkový operátor.

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}\rangle &= |\mathbf{g}\rangle \quad \Rightarrow \\ \sum_l \hat{\mathbf{A}}|l\rangle \langle l|\mathbf{f}\rangle &= |\mathbf{g}\rangle \quad / \langle k| \text{ zleva} \Rightarrow \\ \sum_l \langle k|\hat{\mathbf{A}}|l\rangle \langle l|\mathbf{f}\rangle &= \langle k|\mathbf{g}\rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Získaný výraz není ale nic jiného než maticové násobení

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \\ A_{n1} & & A_{nn} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \quad \begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} &\rightarrow A_{kl} \equiv \langle k|\hat{\mathbf{A}}|l\rangle, \\ |\mathbf{f}\rangle &\rightarrow f_l \equiv \langle l|\mathbf{f}\rangle, \\ |\mathbf{g}\rangle &\rightarrow g_l \equiv \langle l|\mathbf{g}\rangle, \end{aligned}$$

neboli

$$\sum_l A_{kl} f_l = g_k. \quad (2.20)$$

Jestliže operátoru přiřadíme čtvercovou matici  $\hat{\mathbf{A}} \rightarrow A_{kl} \equiv \langle k|\hat{\mathbf{A}}|l\rangle$  a vektoru sloupcovou matici  $|\mathbf{f}\rangle \rightarrow f_l \equiv \langle l|\mathbf{f}\rangle$ , můžeme s operátorovými výrazy zacházet jako s obyčejným násobením matic. Hovoříme o tom, že jsme zvolili reprezentaci daného prostoru. Ve skutečnosti nejde o nic jiného než o volbu konkrétní báze. Má-li báze nekonečný spočetný počet členů, budou vektorům odpovídat posloupnosti a operátorům nekonečné matice. Vidíme, že v libovolném separabilním Hilbertově prostoru existuje jednoznačné zobrazení

prvků na prostor posloupností  $l^2$  (isomorfismus). V případě neseparabilních prostorů s nespočetnou bází získáme obdobnou relaci:

$$\int \langle x | \hat{\mathbf{A}} | y \rangle \langle y | \mathbf{f} \rangle dy = \langle x | \mathbf{g} \rangle, \quad (2.19')$$

což není nic jiného než integrální transformace.

$$\int A(x, y) f(y) dy = g(x); \quad (2.20')$$

$$A(x, y) \equiv \langle x | \hat{\mathbf{A}} | y \rangle, \quad f(y) \equiv \langle y | \mathbf{f} \rangle, \quad g(x) \equiv \langle x | \mathbf{g} \rangle$$

s jádrem  $A(x, y)$ . Veličiny  $x, y$  hrají úlohu spojitého indexu.

### Přechod mezi bázemi

Máme-li k dispozici dvě sady bázových vektorů  $\{|k\rangle\}$  a  $\{|k'\rangle\}$ , bude mezi koeficienty rozvoju platit jednoduchý vztah, který opět odvodíme jen vložením relace úplnosti:

$$f'_k \equiv \langle k' | \mathbf{f} \rangle = \sum_k \langle k' | k \rangle \langle k | \mathbf{f} \rangle = \sum_k S_{k'k} f_k, \quad S_{k'k} \equiv \langle k' | k \rangle.$$

Matice  $\mathbf{S}$  se nazývá matice přechodu.

## 2.2.5. Spektrální teorie

V teorii operátorů patří k základním úlohám nalézt směry, ve kterých se působení daného operátoru projevuje jako komplexní natahování:

$$\hat{\mathbf{A}} | \mathbf{f} \rangle = \lambda | \mathbf{f} \rangle; \quad \lambda \in \mathbb{C}. \quad (2.21)$$

Vektor  $| \mathbf{f} \rangle$  se nazývá *vlastním vektorem* (charakteristickým vektorem) operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$  a koeficient natahování  $\lambda$  *vlastním číslem* (charakteristickým číslem). Například u tenzoru setrvačnosti leží vlastní vektory ve směru os, ve kterých těleso při rotaci nehází. U lineárních operátorů je i každý násobek vlastního vektoru vlastním vektorem se stejným vlastním číslem. Jde tedy o celý paprsek v Hilbertově prostoru, neboli *vlastní směr*. Takových vlastních směrů a čísel může existovat u lineárních operátorů celá řada, jejich maximální počet je roven *dimenzi prostoru* (počtu prvků báze). U separabilních prostorů můžeme tedy úlohu nalezení vlastních čísel a vektorů formulovat rovnicemi:

$$\hat{\mathbf{A}} | \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k | \mathbf{f}_k \rangle; \quad k = 1, 2, \dots; \quad \lambda_k \in \mathbb{C}. \quad (2.21')$$

Množina všech vlastních čísel  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_n, \dots\}$  se nazývá *spektrum operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$* .

Nalezneme-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme relativně snadno řešit rovnice obsahující tento operátor. Pomocí vlastních čísel a vektorů lze například řešit soustavy obyčejných lineárních diferenciálních rovnic (viz kapitola 1.5 první části skriptu).

**Věta:** Hermitovský operátor má reálná vlastní čísla a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

**Důkaz:** Při výpočtu skalárního součinu využijeme hermitovosti operátoru a ponecháme operátor jednou působit v pravé části skalárního součinu a podruhé v levé části. Výsledek musí být stejný:

$$\langle \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_k \rangle = \begin{cases} \langle \mathbf{f}_k | \lambda_k \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k^* \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle \end{cases} \Rightarrow \lambda_k = \lambda_k^* \Rightarrow \lambda_k \in \mathbb{R}.$$

Vlastní čísla jsou tedy reálná. V druhé části budeme postupovat obdobně. Pro vlastní číslo z levé části skalárního součinu využijeme první části důkazu:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_l \rangle &= \begin{cases} \langle \mathbf{f}_k | \lambda_l \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{A}} \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k^* \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \end{cases} \\
&\Downarrow \\
\lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\
&\Downarrow \\
(\lambda_l - \lambda_k) \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \\
&\Downarrow \\
\langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \text{ pro } k \neq l \quad .
\end{aligned}$$

**Věta:** Vlastní čísla unitárního operátoru leží na komplexní jednotkové kružnici a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

**Důkaz:** Při důkazu vyjdeme s definice unitárního operátoru:

$$\langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle = \langle \hat{\mathbf{U}} \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{U}} \mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k^* \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_k \rangle \quad .$$

Porovnáním prvního a posledního výrazu je zřejmé, že

$$\lambda_k \lambda_k^* = 1 \quad \Rightarrow \quad |\lambda_k| = 1.$$

Zbývá dokázat kolmost vektorů. Budeme postupovat analogicky jako v případě hermitovského operátoru. V levé části skalárního součinu využijeme opět první části důkazu:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{f}_k | \hat{\mathbf{U}} \mathbf{f}_l \rangle &= \begin{cases} \langle \mathbf{f}_k | \lambda_l \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{U}}^{-1} \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \frac{1}{\lambda_k^*} \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \end{cases} \\
&\Downarrow \\
\lambda_l \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= \lambda_k \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle \\
&\Downarrow \\
(\lambda_l - \lambda_k) \langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \\
&\Downarrow \\
\langle \mathbf{f}_k | \mathbf{f}_l \rangle &= 0 \text{ pro } k \neq l \quad .
\end{aligned}$$

### Poznámky:

1. Reálné vlastní hodnoty hermitovských operátorů budou v kvantové teorii využity jako možné výsledky měření dynamické proměnné, které odpovídá operátor  $\hat{\mathbf{A}}$ . Ani kolmost vlastních vektorů není bez užitku. Vhodný hermitovský operátor nám může v podobě svých vlastních vektorů „porodit“ výhodnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru.
2. Unitární operátory se v kvantové teorii využívají k popisu časového vývoje stavu objektu.

**Příklad 11:** Určeme vlastní čísla a vektory matice  $\hat{\mathbf{A}}$  z příkladu 4:

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} ,$$

$$\hat{\mathbf{A}} | \mathbf{f} \rangle = \lambda | \mathbf{f} \rangle \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{pmatrix} -\lambda & -i \\ i & -\lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} .$$

Rovnice má netriviální řešení jen pokud je determinant roven nule. Z této podmínky plynou dvě možné hodnoty vlastního čísla  $\lambda$ . Pro každou z nich potom již snadno učíme příslušný vlastní vektor. Pozor! Podmínka pro determinant činí rovnice pro složky vlastního vektoru závislé. To je ale v pořádku, řešení rovnic musí mít jeden volný parametr, tak aby představovalo celý paprsek v prostoru. K vlastním vektorům můžeme najít normované vlastní vektory a příslušné projekční operátory. Výsledek je:

$$\lambda_1 = -1, \quad |\mathbf{f}_1\rangle = c \begin{pmatrix} +i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad |1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} +i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{P}}_1 = |1\rangle\langle 1| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & +i \\ -i & 1 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = +1, \quad |\mathbf{f}_2\rangle = c \begin{pmatrix} -i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad |2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -i \\ +1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{P}}_2 = |2\rangle\langle 2| = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ +i & 1 \end{pmatrix}.$$

Povšimněte si, že matice  $\mathbf{A}$  byla hermitovská (matice překlopená kolem diagonály a komplexně sdružená je shodná s původní maticí). Proto má reálná vlastní čísla a vlastní vektory tvoří ortonormální soustavu:

$$\langle 1|1\rangle = \langle 2|2\rangle = 1, \quad \langle 1|2\rangle = \langle 2|1\rangle = 0.$$

Tato soustava vektorů je úplná, tvoří bázi v prostoru komplexních dvojic:

$$|1\rangle\langle 1| + |2\rangle\langle 2| = \hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{P}}_2 = \hat{\mathbf{1}}.$$

**Věta o spektrálním rozvoji:** Necht'  $\hat{\mathbf{A}}$  je lineární operátor s množinou vlastních vektorů, která tvoří úplnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru. Potom můžeme pro analytickou funkci operátoru definovanou Taylorovým rozvojem (2.8) psát

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_k f(\lambda_k) |k\rangle\langle k| = \sum_k f(\lambda_k) \hat{\mathbf{P}}_k. \quad (2.22)$$

**Důkaz:** Nejprve si povšimněme působení mocnin operátoru na vlastní vektory:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}_k\rangle &= \lambda_k |\mathbf{f}_k\rangle, \\ \hat{\mathbf{A}}^2|\mathbf{f}_k\rangle &= \lambda_k \hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}_k\rangle = \lambda_k^2 |\mathbf{f}_k\rangle, \\ &\vdots \\ \hat{\mathbf{A}}^n|\mathbf{f}_k\rangle &= \lambda_k^n |\mathbf{f}_k\rangle, \\ &\Downarrow \\ f(\hat{\mathbf{A}})|\mathbf{f}_k\rangle &= \sum_n c_n \hat{\mathbf{A}}^n |\mathbf{f}_k\rangle = \sum_n c_n \lambda_k^n |\mathbf{f}_k\rangle = f(\lambda_k) |\mathbf{f}_k\rangle. \end{aligned}$$

V další fázi důkazu budeme funkcí operátoru působit již na obecný vektor. Provedeme ale jeho rozklad do báze složené z vlastních vektorů, kde působení známe z poslední rovnosti:

$$f(\hat{\mathbf{A}})|\mathbf{f}\rangle = \sum_k f(\hat{\mathbf{A}})|k\rangle\langle k|\mathbf{f}\rangle = \sum_k f(\lambda_k)|k\rangle\langle k|\mathbf{f}\rangle.$$

To je ale přesně rovnost, kterou jsme chtěli dokázat. Vynecháme-li ve výrazech libovolný vektor  $|\mathbf{f}\rangle$ , na který operátory působí, dostáváme větu o spektrálním rozvoji.

#### Poznámky:

- 1) Má-li operátor vícenásobné vlastní číslo stupně  $N$ , není to na závadu. Vlastní vektory k vícenásobnému vlastnímu číslu tvoří celý podprostor  $\mathcal{P}$  dimenze  $N$  a lze zvolit  $N$  nezávislých kolmých vlastních vektorů odpovídajících tomuto vícenásobnému číslu.
- 2) Je-li prostor neseperabilní, bude za některých dalších předpokladů možné větu o spektrálním rozvoji modifikovat do tvaru:

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \int f(\lambda_x) |x\rangle\langle x| dx \quad .$$

- 3) Pro vyjádření funkce operátoru je často mnohem jednodušší použít místo Taylorova rozvoje větu o spektrálním rozvoji. Příslušná řada probíhá jen přes vlastní čísla operátoru.
- 4) Známe-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme snadno napsat jeho libovolnou funkci a řešit tak rovnice, ve kterých se tato funkce operátoru vyskytuje. Speciálně inverzní operátor je dán formulí

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} |k\rangle\langle k| = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} \hat{\mathbf{P}}_k \quad .$$

Vidíme, že pro jeho existenci je kromě předpokladů věty nutná nenulovost všech vlastních čísel.

**Příklad 12:** Na prostoru  $C^2$  je zadán maticový operátor  $\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ . Určete  $\exp(\hat{\mathbf{A}})$ .

Tento příklad jsme již řešili pomocí Taylorova rozvoje jako příklad 4. Z příkladu 11 známe vlastní čísla, vektory i projekční operátory tohoto maticového operátoru. Z věty o spektrálním rozvoji můžeme proto napsat:

$$e^{\hat{\mathbf{A}}} = e^{\lambda_1} \hat{\mathbf{P}}_1 + e^{\lambda_2} \hat{\mathbf{P}}_2 = e^{-1} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & +i \\ -i & 1 \end{pmatrix} + e^{+1} \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & -i \\ +i & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \text{ch}1 & -i \text{sh}1 \\ i \text{sh}1 & \text{ch}1 \end{pmatrix} \quad .$$

Na rozdíl od Taylorova rozvoje má řada nyní jen dva členy.

**Příklad 13:** Nalezněte časový vývoj průběhu teploty tyče délky  $L$ , jejíž oba konce jsou udržovány na nulové teplotě. Počáteční teplota tyče je dána funkcí  $T_0(x)$ .

Úkolem je najít řešení rovnice teplotní difúze

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad , \quad T = T(t, x)$$

s počátečními a okrajovými podmínkami

$$T(t_0, x) = T_0(x) \quad , \quad T(t, 0) = T(t, L) = 0 \quad .$$

Přeformulujme nyní úlohu do Diracovy symboliky. Zaveďme nejprve Hilbertův prostor

$$\mathcal{H} = \left\{ f(x) : f \in L^2(0, L) \wedge f(0) = f(L) = 0 \right\}.$$

Jde o prostor funkcí definovaných na intervalu  $\langle 0, L \rangle$ , periodických a integrovatelných s kvadrátem. Okrajová podmínka původní rovnice je přesunuta do definice prostoru. Kdyby byly okrajové hodnoty na obou stranách různé, mohli bychom teplotní funkci zrcadlově rozšířit (tím bychom získali stejnou hodnotu teploty na obou koncích tyče). Jestliže by hodnota teploty tyče na obou koncích byla nenulová, můžeme posunout počátek teplotní stupnice. Vzhledem k derivacím v rovnici teplotní difúze to na tvar rovnice nemá vliv. Požadavek nulové teploty na obou koncích tyče tedy není na újmu obecnosti řešení. Úloha má nyní tvar:

$$\frac{d|T\rangle}{dt} = -\kappa \hat{\mathbf{A}} |T\rangle \quad , \quad |T\rangle \in \mathcal{H} \quad , \quad \hat{\mathbf{A}} \equiv -\frac{d^2}{dx^2} \quad . \quad (2.23)$$

Z příkladu 8 víme, že operátor  $\hat{\mathbf{B}} = i \frac{d}{dx}$  je hermitovský (má reálná vlastní čísla a kolmou

soustavu vlastních vektorů). Proto i kvadrát tohoto operátoru  $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{B}}^2$  je hermitovský.

Znaménko minus zde není podstatné, jen zajistí nezáporná vlastní čísla operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$ . Řešení úlohy můžeme formálně napsat okamžitě (!!):

$$|T(t)\rangle = e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle . \quad (2.24)$$

Skutečně: dosadíme-li počáteční čas, dá řešení počáteční podmínku. Derivujeme-li řešení podle času, zjistíme, že řešení (2.24) splňuje výchozí rovnici (2.23):

$$\frac{d}{dt} |T(t)\rangle = \frac{d}{dt} e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle = -\kappa \hat{\mathbf{A}} e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle = -\kappa \hat{\mathbf{A}} |T(t)\rangle .$$

Jediný problém je, že v nalezeném řešení (2.24) vystupuje funkce operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$ . Abychom ji mohli určit, musíme znát spektrum a vlastní vektory operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$  na prostoru  $\mathcal{H}$ . Řešme tedy nejprve úlohu

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} |f\rangle &= \lambda |f\rangle , & |f\rangle &\in \mathcal{H} \quad \Rightarrow \\ f'' + \lambda f &= 0 , & f(0) &= f(L) = 0 . \end{aligned}$$

Řešení této obyčejné lineární diferenciální rovnice s okrajovými podmínkami je:

$$\lambda_k = \frac{\pi^2 k^2}{L^2} , \quad |f_k\rangle = c \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) , \quad |k\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) , \quad k = 1, 2, \dots .$$

Vlastní čísla jsou reálná ( $\hat{\mathbf{A}}$  je hermitovský operátor), vlastní vektory jsou navzájem kolmé a tvoří přirozenou bázi v  $\mathcal{H}$ . Napsat řešení (2.24) je nyní již jen jednoduchou aplikací věty o spektrálním rozvoji:

$$\begin{aligned} |T(t)\rangle &= e^{-\kappa \hat{\mathbf{A}}(t-t_0)} |T(t_0)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} e^{-\lambda_k \kappa (t-t_0)} |k\rangle \langle k | T(t_0)\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-\frac{\pi^2 k^2 \kappa}{L^2} (t-t_0)} |k\rangle ; \\ |k\rangle &\equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) , \quad c_k \equiv \langle k | T(t_0)\rangle . \end{aligned}$$

Řešení můžeme samozřejmě zapsat i standardně, bez použití Diracovy symboliky:

$$T(t, x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{k=1}^{\infty} c_k e^{-\frac{\pi^2 k^2 \kappa}{L^2} (t-t_0)} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) ; \quad c_k \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) T_0(x) dx .$$

Pro  $t = t_0$  máme Fourierovu řadu pro počáteční podmínku. Pro  $t \neq t_0$  nejde o nic jiného než o rozvoj do jednotlivých Fourierových modů. Každá Fourierova komponenta ubývá exponenciálně s časem.

Vidíme, že věta o spektrálním rozvoji nám může být užitečná i při řešení parciálních diferenciálních rovnic.

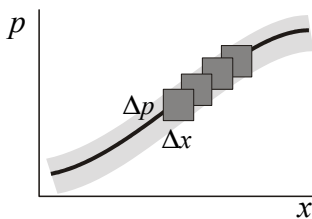


## 2.3. ZÁKLADNÍ PRINCIPY KVANTOVÉ TEORIE

Jak už víme, klasická mechanika selhala při popisu dějů mikrosvětla zejména proto, že je postavena na komutujících objektech. V mikrosvětě děje ale nekomutují. Základním cílem bude tedy místo dynamických proměnných používat nekomutující objekty (operátory) a nalézt vztah mezi operátory a reálnými měřitelnými veličinami.

### 2.3.1. Základní axiomy a definice

#### I. Redefinice stavu



V klasické mechanice je stav částice určen polohou a hybností. Vzhledem k tomu, že v mikrosvětě nelze současně tyto veličiny měřit a měření jedné ovlivní měření druhé, je nutné pojem stavu definovat novým způsobem. Fázové trajektorie již nelze v mikrosvětě popsat křivkami. Vnímáme je s přesností danou relacemi neurčitosti  $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$ . Můžeme si představit, že fázovou trajektorii vidíme jako rozmazanou čáru s rozlišením daným čtverečkem o ploše  $\hbar/2$  (sledujeme-li jednu souřadnici a jí odpovídající zobecněnou hybnost).

**Kompatibilita:** Řekneme, že dvě dynamické proměnné jsou kompatibilní, jestliže měření jedné veličiny neovlivní měření veličiny druhé. Příkladem kompatibilních proměnných jsou  $(x, y)$ , příkladem nekompatibilních proměnných jsou  $(x, p_x)$ . Kompatibilita je symetrická vlastnost, ale není transitivní.

$$(A \text{ komp } B) \Rightarrow (B \text{ komp } A) ,$$

$$(A \text{ komp } B) \wedge (B \text{ komp } C) \not\Rightarrow (A \text{ komp } C) .$$

**Příklad 14:**  $(x \text{ komp } y) \wedge (y \text{ komp } p_x) \not\Rightarrow (x \text{ komp } p_x)$ .

**Úplná množina pozorovatelných (ÚMP):** Maximální nezávislá množina vzájemně kompatibilních dynamických proměnných. Jakákoli další dynamická proměnná už s nimi není kompatibilní. Například v nerelativistické teorii jsou nejznámější ÚMP  $(x, y, z)$ ,  $(p_x, p_y, p_z)$  a pro centrální pole ještě energie, kvadrát momentu hybnosti a jeho jedna komponenta  $(E, L^2, L_3)$ . Současně lze tedy změřit všechny tři souřadnice nebo všechny tři složky hybnosti. Nelze již ale současně změřit všechny tři složky momentu hybnosti.

**Stav systému:** Řekneme, že známe stav systému, známe-li výsledek měření některé ÚMP. Stavem tedy nazveme jen to, co lze ve skutečnosti současně změřit.

Základním rysem nové teorie musí být nekomutující objekty – operátory. Místo dynamických proměnných z klasické mechaniky (souřadnice, hybnost, energie, moment hybnosti, ...) budeme používat operátory (operátor souřadnice, hybnosti, ...). Nekomutativnost těchto operátorů bude vyjadřovat nekomutativnost aktu měření dynamických proměnných v mikrosvětě. Veličiny naměřené přístrojem v mikrosvětě jsou reálná čísla, někdy spojitá (poloha částice), někdy diskrétní (například jednotlivé hladiny energie elektronu vázaného v atomu). Jak získat z operátoru dynamické proměnné sadu reálných čísel spojitého nebo diskrétního charakteru? Takovou sadou je právě spektrum hermitovských operátorů. *Dynamickým proměnným budeme tedy přiřazovat hermitovské operátory.*

Každý operátor působí na prvky nějakého Hilbertova prostoru  $\mathcal{H}$ . Musíme se tedy ptát, jaký význam bude v naší teorii mít sám Hilbertův prostor a také prvky, na které operátory působí. Později uvidíme, že příliš nezáleží na volbě Hilbertova prostoru. Podstatné jsou spíše vztahy mezi dynamickými proměnnými, nyní operátory. Kvantová mechanika založená na prostoru  $\mathcal{L}^2$  funkcí integrovatelných s kvadrátem je známá Schrödingerova vlnová mechanika



vedoucí na Schrödingerovu rovnici a vlnové funkce. Kvantová teorie založená na prostoru  $l^2$  posloupností sčítatelných s kvadrátem je Heisenbergova maticová mechanika. Obě teorie se na první pohled zdají naprosto odlišné. Přesto vlastní čísla operátorů v obou teoriích jsou stejná a obě teorie tak dávají stejné předpovědi. Hilbertův prostor se všemi svými prvky a s operátory, které na prvky působí koresponduje s vlastnostmi celého systému z klasické mechaniky. *Místo systému budeme proto v kvantové teorii hovořit o Hilbertově prostoru daného systému* (například Hilbertův prostor elektronu).

Zbývá rozluštit poslední hádanku – k čemu jsou prvky Hilbertova prostoru? Již v úvodu jsme si řekli, že v mikrosvětě sám akt měření ovlivní stav systému. Před měřením je systém v jiném stavu než po měření. Akt měření dynamické proměnné zastupuje v kvantové teorii hermitovský operátor této proměnné. Působením tohoto operátoru na prvek prostoru dostáváme jiný prvek tohoto prostoru. A to je přesně to, co hledáme. *Prvky (vektory) prostoru tedy představují stav systému.* Akt měření je působení příslušného operátoru na stav (prvek prostoru) a nový stav je prvek, který vznikl působením operátoru.

Vlastní číslo operátoru prezentuje naměřenou hodnotu a vypovídá tak o stavu systému. Víme už, že násobky každého vlastního vektoru jsou opět vlastním vektorem. V  $\mathcal{H}$  tedy existuje k danému vlastnímu číslu celý vlastní směr (paprsek). Stav systému proto musí odpovídat celý paprsek v  $\mathcal{H}$ , nikoli jen jeden jediný vektor. Přicházíme tak ke třem základním axiomům kvantové teorie:

- |   |                        |
|---|------------------------|
| ■ <b>systému přiřadíme Hilbertův prostor <math>\mathcal{H}</math></b>                                 | systém → $\mathcal{H}$ |
| ■ <b>stavu systému přiřadíme paprsek <math> \psi\rangle \in \mathcal{H}</math></b>                    | stav → $ \psi\rangle$  |
| ■ <b>dynamické proměnné přiřadíme hermitovský operátor <math>A</math> na <math>\mathcal{H}</math></b> | $A$ → $\hat{A}$        |

S linearitou budované teorie se pojí velmi důležitý princip:

- **Princip superpozice:** Necht'  $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$  a  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$  reprezentují dva různé stavy systému. Potom je každý vektor  $a_1|\varphi\rangle + a_2|\psi\rangle$  je také fyzikálně realizovatelný stav.

Bez tohoto požadavku by nebylo možné vybudovat lineární teorii.

## II. Měření v kvantové teorii

Akt měření dynamické proměnné  $A$  v nějakém stavu znamená aplikaci operátoru  $\hat{A}$  této dynamické proměnné na daný stav  $|\psi\rangle$ . Operátorem  $\hat{A}$  a stavem  $|\psi\rangle$  musí tedy být zcela jednoznačně dáno, co je a co není možné na systému naměřit. Odpověď na tuto otázku poskytují tzv. *interpretační postuláty*:

- **Postulát A.** Měříme-li dynamickou proměnnou  $A$ , mohu na systému naměřit jen některou z vlastních hodnot  $\{a_j\}$  operátoru  $\hat{A}$  této dynamické proměnné:  $\hat{A}|j\rangle = a_j|j\rangle$ .
- **Postulát B.** Pozorování dynamické proměnné  $A$  na systému, který byl připraven ve vlastním stavu  $|j\rangle$  operátoru  $\hat{A}$ , vede zcela jistě k naměření vlastní hodnoty  $a_j$ .
- **Postulát C.** Je-li systém připraven v obecném stavu  $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ , vede opakované měření veličiny  $A$  k různým výsledkům  $a_j$ . Střední hodnota těchto opakovaných měření bude rovna  $\langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle$ .

**Poznámky:**

- 1) Opakovaná měření si nemusíme představovat tak, že bychom na stejném systému opakovali neustále tutáž měření. V praxi by to nebylo proveditelné. Těžko můžeme na jednom jediném elektronu zopakovat nějaké měření. Musíme mít připraveno velké množství systémů ve stejném stavu (například svazek elektronů) a opakovat měření na různých elektronech (systémech).
- 2) Výraz pro střední hodnotu je nejjednodušším možným výrazem složeným z operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$  a stavu  $|\psi\rangle$ , který dá jako výsledek reálné číslo. Střední hodnotu bývá zvykem označovat  $\langle A \rangle$  nebo  $\overline{A}$ .
- 3) Automaticky předpokládáme, že stavové vektory jsou normovány k jedné. Nemí-li stavový vektor normován, musíme výraz pro střední hodnotu vydělit ještě kvadrátem normy stavového vektoru:

$$\langle A \rangle = \frac{\langle \psi | \hat{\mathbf{A}} | \psi \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} .$$

- 4) Výraz pro střední hodnotu rozepsaný v prostoru  $L^2(\mathbb{R}^3)$  dá:

$$\langle A \rangle = \frac{\int \psi^*(\mathbf{x}) \hat{\mathbf{A}} \psi(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}}{\int \psi^*(\mathbf{x}) \psi(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}} .$$

- 5) Jsou-li všechny systémy připraveny ve vlastním stavu  $|j\rangle$  operátoru  $\hat{\mathbf{A}}$ , dá střední hodnota daná postulátem C samozřejmě příslušnou vlastní hodnotu podle postulátu B a všechna měření dají v tomto výjimečném případě stejný výsledek (přes  $j$  se nesčítá):

$$\langle A \rangle = \frac{\langle j | \hat{\mathbf{A}} | j \rangle}{\langle j | j \rangle} = \frac{a_j \langle j | j \rangle}{\langle j | j \rangle} = a_j .$$

### III. Statistická interpretace stavového vektoru

Rozvineme-li stavový vektor do ortonormální spočetné báze  $|n\rangle$  nebo nespočetné báze  $|x\rangle$

$$|\psi\rangle = \sum |n\rangle \langle n | \psi \rangle = \sum \psi_n |n\rangle, \quad \text{resp.} \quad |\psi\rangle = \int |x\rangle \langle x | \psi \rangle dx = \int \psi(x) |x\rangle dx,$$

nazýváme koeficienty rozvoje  $\psi_n$ , respektive  $\psi(x)$ , amplitudou pravděpodobnosti, že systém nalezneme ve stavu  $|n\rangle$ , respektive  $|x\rangle$ . K tomu nás opravňuje fakt, že jde o projekce stavového vektoru do patřičného prvku báze. Z ortonormality báze a normovanosti stavu k jedné okamžitě plyne

$$\sum \psi_n^* \psi_n = 1, \quad \text{resp.} \quad \int \psi^*(x) \psi(x) dx = 1$$

a výrazy

$$w_n = \psi_n^* \psi_n, \quad \text{resp.} \quad w(x) = \psi^*(x) \psi(x)$$

proto chápeme jako pravděpodobnost realizace stavu  $|n\rangle$  resp. hustotu pravděpodobnosti nalezení systému ve stavu  $|x\rangle$ . Pravděpodobnosti jsou automaticky normalizovány k jedné.

### IV. Princip korespondence

Posledním ze základních principů kvantové teorie je princip korespondence. Vymezuje, které části z teoretické mechaniky je možné převzít v kvantové teorii.

- **Princip korespondence pro základní relace.** Základní relace mezi dynamickými proměnnými v teoretické mechanice a příslušnými operátory v kvantové mechanice se mohou lišit jen pořadím operátorů.
- **Princip korespondence pro algebru Poissonových závorek.** Struktura Poissonových závorek v teoretické mechanice je identická se strukturou komutátorů v kvantové teorii:

$$\begin{aligned} A &\rightarrow \hat{\mathbf{A}} \\ B &\rightarrow \hat{\mathbf{B}} \quad \Rightarrow \quad \{A, B\} = C \rightarrow [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = k \hat{\mathbf{C}} \\ C &\rightarrow \hat{\mathbf{C}} \end{aligned}$$

První část principu korespondence platí pro jednoduché relace mezi dynamickými proměnnými, které neobsahují derivace. Například definice Hamiltonovy funkce v potenciálním poli  $V$

$$H \equiv \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z)$$

přejde v definici Hamiltonova operátoru

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Z}}) \quad (2.25)$$

Výraz pro potenciální energii je typickou funkcí operátoru, kterou jsme probírali v kapitole o operátorech. Pro výrazy typu  $A = xp$  nelze kvantový analog jednoznačně určit. Může jím být buď  $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}$  nebo  $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{X}}$ . Operátory nekomutují a proto záleží na jejich pořadí. Správná varianta z obou možných musí být vybrána na základě experimentu. Stejně tak můžeme z různých Lagrangeových funkcí téhož systému obdržet různé kvantové teorie a správnou variantu je třeba opět vybrat na základě experimentu.

Druhá část principu korespondence se týká Poissonových závorek – výrazů, které v klasické mechanice obsahují derivace dynamických proměnných. Poissonovým závorkám v kvantové teorii odpovídají komutátory dynamických proměnných. Nelze však položit rovnost mezi komutační relací a Poissonovou závorkou. Důvody jsou hned dva:

- 1) *rozměrový*: Poissonova závorka obsahuje derivace, které do výrazů vnášejí fyzikální rozměr, komutátory nikoli  $\Rightarrow$  je třeba použít rozměrový převodní koeficient  $k$ .
- 2) *principiální*: Dynamickým proměnným v kvantové teorii můžeme přiřazovat jen hermitovské operátory (mají reálná vlastní čísla, která interpretujeme jako naměřitelné hodnoty). Jsou-li operátory odpovídající  $A$  a  $B$  hermitovské, musí být operátor odpovídající  $C$  také hermitovský. To lze opět zajistit pomocí konstanty  $k$ .

Určeme nyní podmínku na konstantu  $k$ , která plyne z požadavku hermitovosti operátorů:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] &= k \hat{\mathbf{C}} \\ \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} &= k \hat{\mathbf{C}} \quad /+ \\ \hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{A}}^+ - \hat{\mathbf{A}}^+ \hat{\mathbf{B}}^+ &= k^* \hat{\mathbf{C}}^+ \quad / \hat{\mathbf{O}}^+ = \hat{\mathbf{O}} \\ \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} &= k^* \hat{\mathbf{C}} \\ -[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] &= k^* \hat{\mathbf{C}} \end{aligned}$$

Porovnáme-li počátečný a koncový výraz, musí platit  $k^* = -k$ . To ale splňují jen ryze imaginární čísla. Převodní konstanta tedy musí mít tvar:

$$k = i\hbar \quad (2.26)$$

Konstanta  $\hbar$  je nějaké reálné číslo a je jedinou fundamentální konstantou kvantové teorie. Tato konstanta se bude vyskytovat ve všech předpovědích kvantové teorie (například v energetickém spektru elektronu vázaného v atomech, ve vztazích pro záření absolutně černého tělesa, v Heisenbergových relacích neurčitosti, atd. ...). Její hodnotu je možné změřit experimentálně na základě těchto předpovědí a je rovna:

$$\hbar = 1.0545887 \times 10^{-34} \text{ Js} \quad (2.27)$$

Princip korespondence pro Poissonovy závorky můžeme stručně zapsat jako

$$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \quad (2.28)$$

Tím jsme zakončili přehled základních principů kvantové teorie. Jelikož jde o základní neodvoditelné principy, na kterých teorii stavíme, bylo by možné jen stroze vypsát axiomy, postuláty a principy označené v této kapitole čtverečkem. Doplnující texty se snaží jen poukázat na to, že právě tato volba základních axiomů je přirozená a povede k cíli. O správnosti základních principů však mohou rozhodnout jedině experimenty ověřující výpovědi z těchto principů plynoucí.

### 2.3.2. Kompatibilita měření a Heisenbergovy relace

Rozhodnout o tom, zda se měření dvou dynamických proměnných ovlivňují či nikoli, je jednoduché. Stačí znát komutátor operátorů těchto proměnných. Je-li tento komutátor nulový, je  $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}$  a měření se neovlivňují. Základní komutátory pro souřadnice a hybnosti můžeme odvodit z principu korespondence, ostatní už pak z vlastností komutátorů. Pro Poissonovy závorky mezi souřadnicemi a hybnostmi platí (1.55):

$$\{x_k, x_l\} = \{p_k, p_l\} = 0 \quad , \quad \{x_k, p_l\} = \delta_{kl} \quad .$$

Tomu odpovídají podle principu korespondence komutační relace:

$$[\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{X}}_l] = [\hat{\mathbf{P}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l] = 0 \quad , \quad [\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l] = i\hbar \hat{\mathbf{1}} \delta_{kl} \quad . \quad (2.29)$$

Z nich je zřejmé, že současně lze u objektu změřit všechny tři souřadnice nebo hybnosti. Také se vzájemně neovlivní měření například souřadnice  $x$  a hybnosti  $p_y$ . *Jediná měření, která se vzájemně ovlivňují a u kterých záleží na pořadí měření (nenulový komutátor) je měření zobecněné souřadnice a jí příslušné zobecněné hybnosti.*

Rovnice (2.29) jsou základními komutačními relacemi v kvantové teorii. Bylo by samozřejmě možné hledat ostatní složitější komutační relace také z Poissonových závorek. Výhodnější je odvozovat je ze základních relací (2.29) a vlastností Lieovy algebry komutátorů. Tím se oprostíme od klasické mechaniky a nemusíme se k ní při každé komutační relaci vracet. Kvantová mechanika začíná „žít vlastním životem“. To, co přebrala z klasické mechaniky prostřednictvím principu korespondence jsou jen relace (2.29).

Odvodme nyní komutační relaci mezi první a druhou komponentou momentu hybnosti:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] &= [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_2 + \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] + [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2 = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1] + \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3] - \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_3 - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1] - \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_2 - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1\hat{\mathbf{P}}_2 + \\ &+ \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{P}}_3] + \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 + \hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2 + [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3\hat{\mathbf{P}}_2 = \\ &= 0 - \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1 + 0 + 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 - 0 + 0 + 0 + \hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2 + 0 = \\ &= -i\hbar \hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{P}}_1 + i\hbar \hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{P}}_2 = i\hbar (\hat{\mathbf{X}}_1 \hat{\mathbf{P}}_2 - \hat{\mathbf{X}}_2 \hat{\mathbf{P}}_1) = i\hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \quad . \end{aligned}$$

Je jasné, že postup je velmi zdouhavý, ale přímočarý. Hledanou komutační relaci postupně „rozměňujeme“ podle pravidel Lieovy algebry až na elementární relace mezi souřadnicemi a hybnostmi. Prakticky všechny symbolicky orientované programy či programovací jazyky bez problémů tuto úlohu řeší za nás a obsahují balíky pro výpočet komutačních relací.

Analogickým postupem můžeme nalézt komutační relace pro ostatní komponenty momentu hybnosti. Není to ale nutné, stačí je získat cyklickou záměnou souřadnicových os. Kompletní komutační relace pro moment hybnosti potom jsou:

$$\begin{aligned} [\hat{L}_1, \hat{L}_2] &= i\hbar \hat{L}_3, \\ [\hat{L}_2, \hat{L}_3] &= i\hbar \hat{L}_1, \\ [\hat{L}_3, \hat{L}_1] &= i\hbar \hat{L}_2. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Výsledkem je, že současně není možné změřit žádné dvě komponenty momentu hybnosti. Měření každé komponenty ovlivní měření kterékoli jiné komponenty. Zavedme operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti

$$\hat{L}^2 \equiv \hat{L}_1^2 + \hat{L}_2^2 + \hat{L}_3^2. \quad (2.31)$$

Stejným postupem jako dříve dopočteme komutační relace kvadrátu momentu s jednotlivými komponentami. Tentokrát při „rozměňování“ komutační relace postačí dostat se jen k relacím (2.30) pro moment hybnosti. Jejich výsledek už známe. Po výpočtu dostaneme:

$$[\hat{L}^2, \hat{L}_k] = 0, \quad k = 1, 2, 3. \quad (2.32)$$

Není tedy možné současně změřit dvě různé komponenty momentu hybnosti. Vždy je ale možné změřit kvadrát velikosti momentu hybnosti a jednu z jeho libovolných komponent, zpravidla se používá třetí komponenta. Ze zatím provedených úvah je zřejmé, že současně můžeme měřit dynamické proměnné  $\{x, y, z\}$  nebo  $\{p_x, p_y, p_z\}$  nebo  $\{L^2, L_3\}$ . V kapitole 2.5 uvidíme, že v případě sféricky symetrického potenciálu je s poslední množinou kompatibilní ještě energie. Jde o základní tři úplné množiny pozorovatelných (ÚMP) pro nerelativistickou částici.

Nalezli jsme tedy jednoduchý postup, pomocí kterého zjistíme, které veličiny lze současně měřit a které ne. Postačí nalézt komutátor odpovídajících operátorů. Tento postup nám ale umožní odpověď typu ano/ne. V případě, že dynamické proměnné spolu současně měřit nelze, se musíme ptát, jak moc naruší akt měření jedné proměnné akt měření proměnné druhé. Na tuto otázku odpovídají Heisenbergovy relace neurčitosti, které si nyní odvodíme.

Předtím si uveďme přehled základních statistických pojmů a jejich operátorových analogií v kvantové teorii:

statistika		kvantová teorie	
$\bar{a}$	střední hodnota	$\bar{a} \equiv \langle \psi   \hat{\mathbf{A}}   \psi \rangle$	střední hodnota
$\Delta a \equiv a - \bar{a}$	střední odchylka	$\Delta \hat{\mathbf{A}} \equiv \hat{\mathbf{A}} - \bar{a} \hat{\mathbf{1}}$	operátor odchylky
$\overline{\Delta a} = 0$	vztah pro $\overline{\Delta a}$	$\langle \psi   \Delta \hat{\mathbf{A}}   \psi \rangle = 0$	vztah pro $\overline{\Delta a}$

$\overline{(\Delta a)^2} = \overline{a^2} - \bar{a}^2$	vztah pro $\overline{(\Delta a)^2}$ (variance)	$\langle \psi   \Delta \hat{\mathbf{A}}^2   \psi \rangle =$ $= \langle \psi   \hat{\mathbf{A}}^2   \psi \rangle -$ $- \langle \psi   \hat{\mathbf{A}}   \psi \rangle^2$	vztah pro $\overline{(\Delta a)^2}$ (variance)
$\Delta a_{kv} = \sqrt{\overline{(\Delta a)^2}} = \sqrt{\overline{a^2} - \bar{a}^2}$	střední kvadr. odchylka	$\Delta a_{kv} = \sqrt{\langle \psi   \Delta \hat{\mathbf{A}}^2   \psi \rangle}$	střední kvadr. odchylka

Zkuste si dokázat oba dva statistické vztahy v klasické statistice i v kvantové teorii. V obou případech stačí jen dosadit z příslušných definic.

Nyní již můžeme přistoupit k odvození relací neurčitosti. Předpokládejme, že máme dvě nekompatibilní proměnné:

$$A, B \rightarrow \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}} ; \quad [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = \hat{\mathbf{C}} .$$

Nalezněme střední kvadratické chyby měření:

$$\begin{aligned} (\Delta a_{kv})^2 (\Delta b_{kv})^2 &= \langle \psi | (\Delta \hat{\mathbf{A}})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{\mathbf{B}})^2 | \psi \rangle \stackrel{(*1)}{=} \langle \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi | \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \rangle \langle \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi | \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \rangle = \\ &= \|\Delta \hat{\mathbf{A}} \psi\|^2 \cdot \|\Delta \hat{\mathbf{B}} \psi\|^2 \stackrel{(*2)}{\geq} |\langle \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi | \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \rangle|^2 = |\langle \psi | \Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} | \psi \rangle|^2 \stackrel{(*3)}{=} \\ &= |\langle \psi | \frac{1}{2} (\Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} + \Delta \hat{\mathbf{B}} \Delta \hat{\mathbf{A}}) + \frac{1}{2} (\Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} - \Delta \hat{\mathbf{B}} \Delta \hat{\mathbf{A}}) | \psi \rangle|^2 \stackrel{(*4)}{=} \\ &= |\frac{1}{2} \langle \psi | [\Delta \hat{\mathbf{A}}, \Delta \hat{\mathbf{B}}]_+ | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | [\Delta \hat{\mathbf{A}}, \Delta \hat{\mathbf{B}}]_- | \psi \rangle|^2 \stackrel{(*5)}{\geq} \\ &\geq |\frac{1}{2} \langle \psi | [\Delta \hat{\mathbf{A}}, \Delta \hat{\mathbf{B}}]_- | \psi \rangle|^2 \stackrel{(*6)}{=} |\frac{1}{2} \langle \psi | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] | \psi \rangle|^2 = |\frac{1}{2} \langle \psi | \hat{\mathbf{C}} | \psi \rangle|^2 . \end{aligned}$$

Po odmocnění dostáváme konečný tvar Heisenbergových relací:

$$\Delta a_{kv} \Delta b_{kv} \geq \frac{1}{2} |\langle \psi | \hat{\mathbf{C}} | \psi \rangle| . \quad (2.33)$$

#### \* Poznámky k odvození:

- (1) využití hermitovosti operátorů;
- (2) Schwartzovo lemma (2.7);
- (3) rozdělení na symetrickou a antisymetrickou část;
- (4) označení symetrické části jako antikomutátor a antisymetrické jako komutátor;
- (5) symetrická část je pozitivně definitní operátor (nezáporné střední hodnoty);
- (6) jednotkový operátor v definici  $\Delta \hat{\mathbf{A}}$  komutuje s čímkoli.

Známe-li výsledek komutační relace operátorů příslušících dvěma dynamickým proměnným, můžeme z Heisenbergových relací určit míru ovlivnění jednoho měření druhým. Toto vzájemné ovlivnění výsledků měření závisí na stavu, ve kterém je systém připraven. Jen jsou-li obě dynamické proměnné ve vztahu *zobecněná souřadnice – zobecněná hybnost*, nezávisí vzájemné ovlivnění na stavu systému:

$$[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = i\hbar \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle| = \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \psi \rangle| = \frac{\hbar}{2} .$$

To je nejznámější tvar relací neurčitosti

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} . \quad (2.34)$$

Jde o první konkrétní měřitelný výsledek z námi budované teorie, který obsahuje jedinou konstantu teorie – Planckovu konstantu.

**Poznámka:** Operátory kinetické a potenciální energie zpravidla vzájemně nekomutují. To má za následek, že není současně přesně zjištělná kinetická i potenciální energie a částice se může (na rozdíl od klasické fyziky) „přehoupnout“ přes potenciálovou bariéru (tzv. tunelový jev).

### 2.3.3. Vlastní stavy energie, Schrödingerova rovnice

V minulé kapitole jsme se naučili rozhodnout, které dynamické proměnné lze společně měřit a které ne. Pomocí Heisenbergových relací neurčitosti jsme schopni i kvalitativně postihnout míru narušení jednoho měření měřením druhým. Nyní se budeme věnovat druhé základní úloze kvantové mechaniky: Nalézt spektrum operátoru energie – hodnoty energie, které je možné na systému naměřit. Úlohu můžeme zformulovat například takto:

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle, \quad (2.35)$$

$$\hat{H} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) = \frac{\hat{P}_x^2 + \hat{P}_y^2 + \hat{P}_z^2}{2m} + V(\hat{X}, \hat{Y}, \hat{Z}), \quad (2.36)$$

$$\{\hat{X}_k, \hat{X}_l\} = \{\hat{P}_k, \hat{P}_l\} = 0, \quad \{\hat{X}_k, \hat{P}_l\} = i\hbar \mathbf{1} \delta_{kl}. \quad (2.37)$$

Budeme hledat vlastní hodnoty operátoru energie (Hamiltonova operátoru) ze vztahu (2.35). Tato rovnice pro vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru se nazývá *Schrödingerova rovnice*. Operátor energie (Hamiltonův operátor) je dán vztahem (2.36). Základní operátory, ze kterých je složen Hamiltonův operátor, podléhají komutačním relacím (2.29), resp. (2.37). Nezáleží příliš na tom, jaký Hilbertův prostor zvolíme. V příští kapitole uvidíme řešení harmonického oscilátoru v různých prostorech  $\mathcal{H}$ , vždy dostaneme stejné spektrum Hamiltonova operátoru. Na daném prostoru je nejpodstatnější zvolit Hermitovy operátory zobecněných souřadnic a hybností tak, aby splňovaly komutační relace (2.37).

Ukažme si nyní přepis Schrödingerovy rovnice v prostoru  $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$  funkcí integrovatelných s kvadrátem na celém prostoru  $\mathcal{R}^3$ . Nejjednodušším operátorem na tomto prostoru je operátor násobení souřadnicí. Tento operátor ztotožníme s operátorem souřadnice:

$$\hat{X} = x; \quad \hat{Y} = y; \quad \hat{Z} = z. \quad (2.38)$$

Nyní zbývá nalézt hermitovské operátory pro hybnost tak, aby splňovaly komutační relace (2.37). V příkladu 6 jsme si ukázali, že operátor derivace a operátor násobení souřadnicí splňují v jedné dimenzi komutační relaci  $[\hat{D}, \hat{X}] = \mathbf{1}$ , neboli  $[\hat{X}, \hat{D}] = -\mathbf{1}$ . Je zřejmé, že operátor  $\hat{P} \equiv -i\hbar d/dx$  splňuje relaci  $[\hat{X}, \hat{P}] = i\hbar \mathbf{1}$  a v jedné dimenzi plní úlohu operátoru hybnosti. Sám operátor derivace není hermitovský, ale operátor derivace vynásobený ryze imaginární konstantou již hermitovský je (viz příklad 8). Aby ve třech dimenzích operátor hybnosti splňoval komutační relace (2.37) a platila volba (2.38) pro operátor souřadnice, musí operátor hybnosti mít tvar

$$\hat{P}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}; \quad \hat{P}_y = -i\hbar \frac{\partial}{\partial y}; \quad \hat{P}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial z}, \quad \text{neboli} \quad (2.39)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar \vec{\nabla}. \quad (2.39')$$

Schrödingerova rovnice (2.35) s operátorem energie (2.36), volbou prostoru  $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$  a operátory (2.38) a (2.39) vede potom na slavnou Schrödingerovu rovnici v  $x$  reprezentaci:

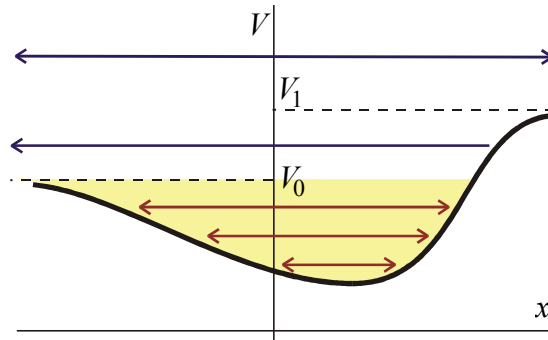


$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(\mathbf{x}) \right] \psi_n(\mathbf{x}) = E_n \psi_n(\mathbf{x}) \quad (2.40)$$

Řešení této rovnice pro konkrétní potenciál  $V$  poskytne spektrum operátoru energie  $\{E_n\}$  jakožto množinu možných měřitelných hodnot energie.

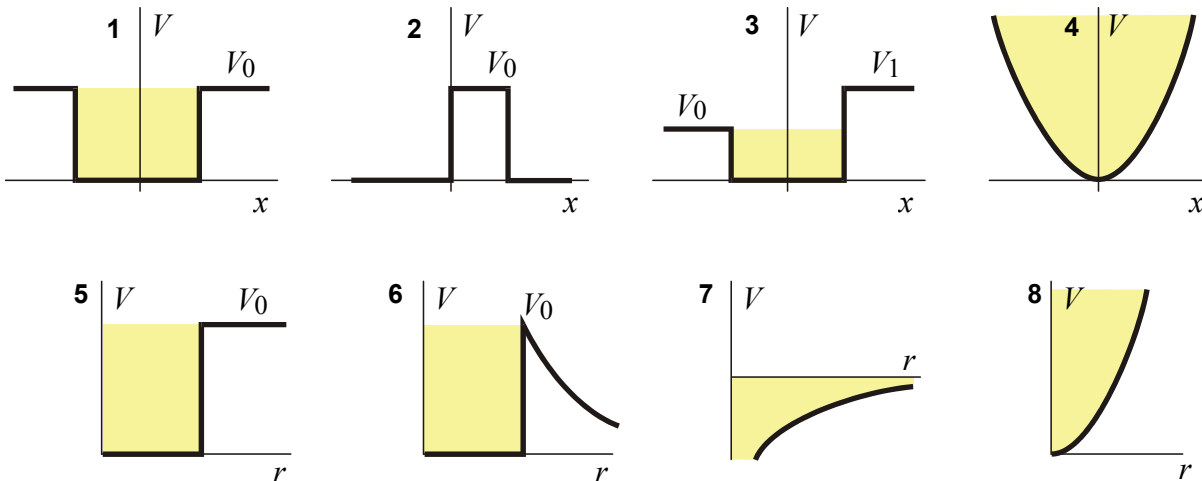
**Poznámka 1:** Řešení rovnice (2.40) lze nalézt pro každou hodnotu energie. Ne vždy je však toto řešení z prostoru  $L^2(\mathcal{R}^3)$ . Je proto vždy třeba vybrat z možných řešení jen ta, která jsou integrovatelná s kvadrátem, tj. donekonečna ubývají dostatečně rychle, aby zajistila integrovatelnost.

**Poznámka 2:** Existuje jednoduchý způsob, jak odhadnout typ spektra pro daný potenciál. Může-li se v klasické mechanice částice vzdálit do nekonečna, je spektrum operátoru energie spojitě. Nemůže-li se ani v jednom směru vzdálit do nekonečna je spektrum operátoru energie diskrétní.



Připomeňme, že v klasické mechanice se částice může pohybovat tam, kde je její celková energie větší než potenciální. To plyne ze vztahu  $E = mv^2/2 + V(x)$ . Jde vlastně o podmínku nezápornosti kinetické energie. V nakreslené situaci je pro  $E < V_0$  spektrum energie diskrétní, pro  $E > V_0$  spojitě.

**Příklad:**



**1D potenciály;**  $x \in (-\infty, +\infty)$

1. *Symetrická pravoúhlná jáma*. Diskrétní spektrum pro  $E < V_0$ , spojitě pro  $E > V_0$ . Pro nekonečnou jámu ( $V_0 \rightarrow \infty$ ) je spektrum jen diskrétní.
2. *Bariéra*. Spojité spektrum.
3. *Nesyetrická pravoúhlná jáma*. Diskrétní spektrum pro  $E < V_0$ , spojitě pro  $E > V_0$ .
4. *Harmonický oscilátor*. Diskrétní spektrum.

**3D potenciály;**  $r > 0$

5. *Sférická jáma*. Diskrétní spektrum pro  $E < V_0$ , spojitě pro  $E > V_0$ . V podobném potenciálu se pohybuje například neutron v atomovém jádře.



6. *Coulombova bariéra (sférická jáma kombinovaná s Coulombovým odpuzováním)*. Diskrétní spektrum pro  $E < V_0$ , spojité pro  $E > V_0$ . Nenulová pravděpodobnost průniku bariérou, tunelový jev (operátor kinetické a potenciální energie nekomutuje). V podobném potenciálu se pohybuje proton nebo  $\alpha$  částice v atomovém jádře.
7. *Coulombův přitažlivý potenciál*. Diskrétní spektrum pro  $E < 0$ , spojité pro  $E > 0$ . V podobném potenciálu se pohybuje elektron v atomárním obalu. Stavů se zápornou energií jsou vázané stavy, stavy s kladnou energií jsou volné (elektron není vázán k atomovému jádru).
8. *Sférický harmonický oscilátor*. Diskrétní stavy energie. Systém je při vychýlení do kteréhokoli směru vrácen do počátku podle předpisu  $V(r) = 1/2 kr^2$ .

Celá kapitola 2.4 bude věnována řešení Schrödingerovy rovnice pro vlastní hodnoty operátoru energie na příkladu harmonického oscilátoru. Harmonický oscilátor je velice důležitým systémem. Jedná se o parabolické přiblížení k jakékoli potenciální energii s minimem a mnoho systémů lze považovat za harmonický oscilátor alespoň v prvním přiblížení. Nakonec i samo elektromagnetické pole je soustavou fotonů – elementárních harmonických oscilátorů. Mohli jsme jistě zvolit příklad jednodušší - pravoúhlou jámu či bariéru. V těchto příkladech je potenciální energie po částech konstantní a řešení Schrödingerovy rovnice je víceméně triviální. Jen je třeba jednotlivé části řešení v místech změny předpisu potenciální energie správně navázat. Tyto elementární úlohy jsou řešeny v každé úvodní učebnici základního kursu fyziky a zvědavý čtenář si je tam jistě najde.

## 2.4. HARMONICKÝ OSCILÁTOR

Na příkladu harmonického oscilátoru si ukážeme typické řešení úlohy pro vlastní hodnoty operátoru energie. Naše úloha je

$$\begin{aligned}\hat{H}|n\rangle &= E_n|n\rangle, \\ \hat{H} &\equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{X}}^2, \\ [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] &= i\hbar\hat{\mathbf{1}}.\end{aligned}\quad (2.41)$$

Jde o problém vlastních hodnot Hamiltonova operátoru s konkrétním průběhem potenciální energie a zadanými základními komutačními relacemi mezi operátorem polohy a hybnosti.

V kapitole 2.4.1 úlohu vyřešíme v rámci klasické Schrödingerovy vlnové mechaniky. Za Hilbertův prostor zvolíme prostor  $\mathcal{L}^2(\mathcal{R})$ , volba operátorů (2.38) a (2.39) povede na diferenciální rovnici (2.40) v jedné dimenzi. Řešení této rovnice se provádí rozvojem do nekonečných řad, které je třeba „oříznout“ tak, aby řešení bylo z prostoru  $\mathcal{L}^2(\mathcal{R})$ , tj. integrovatelné s kvadrátem. Odsud získáme spektrum operátoru energie.

V kapitole 2.4.2 si ukážeme řešení úlohy (2.41) bez volby reprezentace. Nebudeme vůbec volit konkrétní podobu Hilbertova prostoru. Řešení nalezneme jen z formulace úlohy (2.41). Uvidíme tak, že konkrétní volba Hilbertova prostoru není podstatná. Při tomto přístupu si zavedeme kreační a anihilační operátory, které svým působením posouvají energetické hladiny o jednu výše či níže. Tyto operátory jsou v kvantové teorii velmi užitečné a proto se s nimi seznámíme již nyní u jednoduchého příkladu harmonických oscilací.

V kapitole 2.4.3 si ukážeme řešení úlohy (2.41) na prostoru  $l^2$  nekonečných posloupností sčitatelných s kvadrátem (tzv. Heisenbergova maticová mechanika). Operátory zde budou nekonečné matice. Možná se vám zdá obtížná úloha najít vlastní čísla nekonečných matic. Problém ale není tak složitý. Jestliže za vektory báze zvolíme vlastní vektory příslušného operátoru, bude matice odpovídající tomuto operátoru diagonální. Vlastní čísla diagonálních matic se hledají snadno ... Jsou to právě prvky na diagonále.

Třemi různými způsoby tak uvidíte řešení jednoho a téhož problému. V kvantové teorii jde totiž o vnitřní strukturu teorie, nikoli o konkrétní reprezentaci, ve které výpočet provádíme.

### 2.4.1. Řešení pomocí vlnové mechaniky (Schrödinger)

Hamiltonova funkce jednodimenzionálního harmonického oscilátoru je dána součtem kinetické a potenciální energie (1.44)

$$H(x, p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (2.42)$$

Hamiltonův operátor je v prostoru  $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$  potom dán jednoduchou relací

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2. \quad (2.43)$$

Odpovídající Schrödingerova rovnice pro vlastní funkci  $\psi(x)$  z prostoru  $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$  má tvar

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) = E \psi(x) \quad (2.44a)$$

Jde o obyčejnou lineární diferenciální rovnici druhého řádu s nelineárním koeficientem u nulté derivace. Standardní tvar této rovnice (s jednotkovým koeficientem u nejvyšší derivace) je:

$$\frac{d^2\psi}{dx^2} + \left( \frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2} x^2 \right) \psi = 0 . \quad (2.44b)$$

Rovnici budeme řešit ve čtyřech krocích:

### 1. substituce v nezávislé proměnné

V nezávislé proměnné budeme volit takovou substituci, která „zbezrozměrní“ rovnici. Přesuňme koeficienty tak, aby byly symetrické u proměnné  $x$

$$\frac{d^2\psi}{\frac{m\omega}{\hbar} dx^2} - \frac{m\omega}{\hbar} x^2 \psi + \frac{2E}{\hbar\omega} \psi = 0 \quad (2.44c)$$

a provedme substituci

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x , \quad (2.45)$$

po které Schrödingerova rovnice získá bezrozměrný tvar

$$\frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2 \psi + \lambda \psi = 0 , \quad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} . \quad (2.46)$$

### 2. substituce v závislé proměnné

V závislé proměnné budeme volit takovou substituci, které zohlední chování vlnové funkce pro  $\xi \rightarrow \pm\infty$ . Pro velká  $\xi$  můžeme zanedbat poslední člen v rovnici (2.46) a přibližně platí

$$\xi \rightarrow \pm\infty \quad \Rightarrow \quad \frac{d^2\psi}{d\xi^2} - \xi^2 \psi \approx 0 \quad \Rightarrow \quad \psi \approx e^{\pm\xi^2/2} .$$

(řešení stačí dosadit do původní rovnice a zanedbat členy s nižšími mocninami  $\xi$ ). Kladné z nalezených řešení evidentně není z prostoru  $L^2$ , integrál z kvadrátu přes celý prostor by byl nekonečný. Vlnová funkce se tedy pro velká  $\xi$  musí chovat jako  $\exp[-\xi^2/2]$ . To nás přivádí k substituci pro závislou proměnnou

$$\psi(\xi) = e^{-\xi^2/2} u(\xi) , \quad (2.47)$$

po jejímž provedení dostaneme rovnici

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)u = 0 . \quad (2.48)$$

Derivace se automaticky rozumí podle nové proměnné  $\xi$ . V principu by z matematického hlediska bylo v pořádku říci „v rovnici (2.44) provedeme substituce (2.45) a (2.47), výsledná rovnice je (2.48)“. V bodech 1 a 2 jsme si jen ukázali, jaké pohyby nás k těmto substitucím vedou, protože postup je obdobný i u jiných průběhů potenciálu.

### 3. rozvoj řešení do mocninné řady

Řešení rovnice (2.48) budeme hledat ve tvaru mocninné řady

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k .$$

Snadno nalezneme první a druhou derivaci

$$u'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k c_k \xi^{k-1} \quad ; \quad u''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) c_k \xi^{k-2} \quad .$$

Výrazy pro  $u$  a její derivace dosadíme do rovnice (2.48):

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1) c_k \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2k c_k \xi^k + (\lambda-1) \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k = 0 \quad .$$

Jednotlivé členy přeindexujeme tak, aby mocniny  $\xi$  byly stejné:

$$\sum_{l=-2}^{\infty} (l+1)(l+2) c_{l+2} \xi^l - \sum_{l=0}^{\infty} 2l c_l \xi^l + (\lambda-1) \sum_{l=0}^{\infty} c_l \xi^l = 0 \quad .$$

První dva členy v prvním výrazu jsou nulové a proto můžeme spodní hranici posunout na  $l=0$ :

$$\sum_{l=0}^{\infty} [(l+1)(l+2) c_{l+2} - (2l+1-\lambda) c_l] \xi^l = 0 \quad .$$

Má-li být polynomiální výraz identicky nulový pro každou hodnotu  $\xi$ , musí být nulové všechny koeficienty, tj. výrazy v hranaté závorce. Získáváme tak rekurentní relaci pro koeficienty  $c_l$  naší řady:

$$c_{l+2} = \frac{(2l+1-\lambda)}{(l+1)(l+2)} c_l \quad . \quad (2.49)$$

Budeme-li znát koeficienty  $c_0$  a  $c_1$ , budeme znát celé řešení, protože z rekurentní relace můžeme spočítat

$$\begin{aligned} c_0 &\Rightarrow c_2, c_4, c_6, \dots \\ c_1 &\Rightarrow c_3, c_5, c_7, \dots \end{aligned}$$

Koeficienty  $c_0$  a  $c_1$  tak hrají roli dvou integračních konstant řešení diferenciální rovnice (2.48) druhého řádu. Sudá část řady se počítá z  $c_0$  a lichá z  $c_1$ .

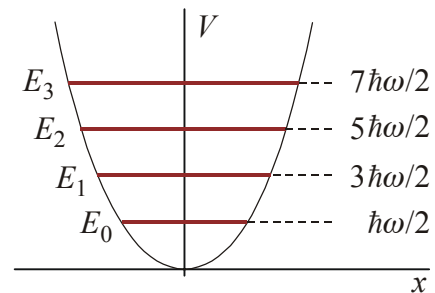
#### 4. oříznutí řady

Nalezené řešení je ve tvaru nekonečné mocninné řady. Řeší sice původní rovnici, ale není z prostoru  $\mathcal{L}^2$ . Aby bylo řešení z  $\mathcal{L}^2$  (integrovatelné s kvadrátem), musí být řada konečná, tedy polynomiální. Prakticky to znamená, že koeficienty řady musí být od určitého  $l=n$  nulové. V rekurentní relaci (2.49) bude čitatel pro toto  $l=n$  nulový a veškeré odvozené koeficienty  $c_l$  s  $l \geq n$  nulové. Vidíme, že nebude možné takto „oříznout“ současně sudé i liché členy řady. Proto jsou možná jen sudá řešení ( $c_0 \neq 0, c_1 = 0$ ) nebo jen lichá řešení ( $c_0 = 0, c_1 \neq 0$ ) představující sudý nebo lichý polynom stupně  $n$ . Podmínka oříznutí (nulovost čitatele) v (2.49) je  $2n+1-\lambda=0$  a plyne z ní po vyjádření  $\lambda$  spektrum energie harmonického oscilátoru:

$$E_n = (n + 1/2) \hbar \omega \quad . \quad (2.50)$$

#### Poznámky:

- 1) Nezapomínejte, že energie  $E$  (vlastní hodnota operátoru  $\hat{H}$ ) je po celou dobu výpočtu schována v bezrozměrné konstantě (vlastním čísle)  $\lambda$ .
- 2) Sama Schrödingerova rovnice má řešení pro každou hodnotu energie. Tato řešení ale nejsou integrovatelná s kvadrátem, až výběr integrovatelných funkcí (oříznutí řady) vede k diskrétnímu spektru operátoru energie (jen pro některé vybrané hodnoty energie ubývá řešení v  $\pm\infty$  dostatečně rychle, aby bylo integrovatelné s kvadrátem). Tato situace je typická pro spojitě průběhy potenciální energie s minimem.



- 3) Základní hladina energie  $E_0 = \hbar\omega/2$  je nenulová!! I při nulové absolutní teplotě není harmonický oscilátor v klidu a vykonává tzv. nulové kmity (například oscilace krystalové mříže). Při absolutní nule se hmota nachází ve stavu s nejnižší možnou energií, nikoli však v klidu.
- 4) Spektrum operátoru energie je ekvidistantní, rozdíl dvou libovolných sousedních energetických hladin je  $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$ : To je právě známý Planckův vztah z počátku století. Energie jakýchkoli kmitů se nemůže měnit spojitě, ale po skocích (energetických kvantech)

$$\Delta E = \hbar\omega \quad (2.51)$$

- 5) Zde se také nachází jedna z prvních možností experimentálního určení Planckovy konstanty měřením energetických kvant (například při fotoelektrickém jevu: vyřazení elektronů z povrchu kovu kvanty energie elektromagnetického záření – fotony). Zatím byla Planckova konstanta jediným neurčeným parametrem základních postulátů kvantové teorie.
- 6) Polynomiální řešení pro funkci  $u$  se nazývají Hermitovy polynomy a označujeme je  $H_n(\xi)$ . Pro dané  $n$  nejprve určíme bezrozměrné vlastní číslo  $\lambda_n$

$$\lambda_n \equiv \frac{2E_n}{\hbar\omega} = \frac{2(n+1/2)\hbar\omega}{\hbar\omega} = 2n+1$$

a z rekurentní formule (2.49) určíme pomocí  $c_0$  nebo  $c_1$  (podle toho zda jde o sudý či lichý polynom) ostatní koeficienty rozvoje. Pro  $c_0 = c_1 = 1$  se nalezené polynomy nazývají Hermitovy. Prvních několik Hermitových polynomů vychází:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= c_0, & H_3(\xi) &= c_1(\xi - 2/3\xi^3), \\ H_1(\xi) &= c_1\xi, & H_4(\xi) &= c_0(1 - 4\xi^2 + 4/3\xi^4), \\ H_2(\xi) &= c_0(1 - 2\xi^2), & H_5(\xi) &= c_1(\xi - 4/3\xi^3 + 4/15\xi^5) \dots \end{aligned}$$

Koeficienty  $c_0$  a  $c_1$  se volí rovny jedné. Stupeň polynomu  $n$  udává současně počet nulových bodů polynomu (počet průsečíků s osou  $\xi$ ).

- 7) Hermitovy polynomy se prakticky snadno počítají nenormované z rekurentní formule

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi H_n(\xi) - 2n H_{n-1}(\xi).$$

Pro první polynomy vychází:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, & H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, & H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, & H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \dots \end{aligned}$$

Normovací koeficienty (i s exponenciální vahou  $\exp[-\xi^2]$ ) jsou dány vztahem

$$\alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} n! 2^n}}.$$

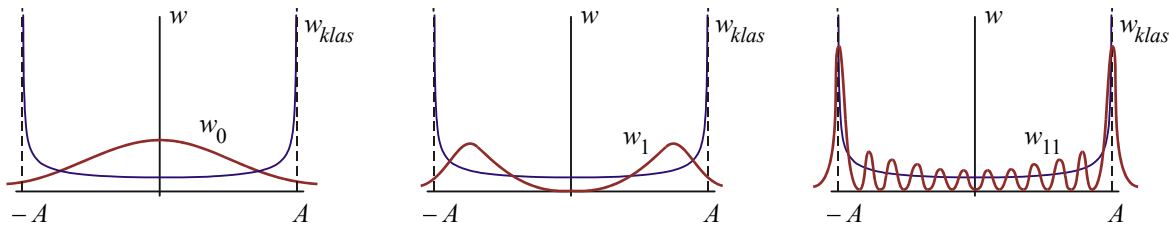
- 8) Celkové řešení spektrálního problému je

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad |n\rangle = \psi_n(\xi) = \alpha_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (2.52)$$

Vlastní funkce  $\psi_n(\xi)$  tvoří přirozený úplný ortonormální systém na prostoru  $L^2(-\infty, +\infty)$ , který pro  $\xi \rightarrow \pm\infty$  „dostí rychle“ ubývá k nule.

- 9) Hustota pravděpodobnosti, že částice kmitající s energií  $E_n$  (oscilátor ve stavu  $|n\rangle$ ) se nachází v poloze  $x$  (resp. bezrozměrné poloze  $\xi$ ), je dána výrazem  $w_n = \psi_n^* \psi_n$ . Pro několik prvních stavů je vykreslena na obrázku. Pravděpodobnost má oscilující charakter a existuje malá nenulová pravděpodobnost výskytu oscilátoru i za klasickými body obratu. Tento obraz nastává pro systémy s nízkou teplotou a je zcela odlišný od klasického řešení. Pro velké energie (vysoká  $n$ ) by se měla křivka blížit klasické pravděpodobnosti výskytu oscilátoru (1.49). Vidíme však, že oscilace jsou sice velmi husté, ale existuje značné množství bodů, ve kterých je kvantová pravděpodobnost nulová. Nic takového však u makroskopických systémů neměříme. Proč? Je to dáno rozlišovací schopností makroskopických přístrojů. Žádný přístroj nebude měřit polohu

s takovou přesností, aby registroval jednotlivá minima pravděpodobnosti u vysokých energetických stavů. Přístroj ve skutečnosti určuje polohu s konečnou přesností, do které se vejde řada minim a registruje jen střední hodnotu hustoty pravděpodobnosti. A tou je právě klasická křivka.



### 2.4.2. Řešení bez volby reprezentace (Dirac)

Úlohu (2.41) budeme nyní řešit obecně. Hamiltonův operátor nejprve přepíšeme do bezrozměrného tvaru:

$$\hat{H}(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}) \equiv \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \frac{\hat{H}}{\hbar \omega} \equiv \frac{m \omega}{2\hbar} \hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{1}{2m\hbar \omega} \hat{\mathbf{P}}^2 \quad (2.53)$$

Převedení do bezrozměrného tvaru naprosto není nutné, veškeré další úvahy by bylo možné provádět i s rozměrovým hamiltoniánem a všechny následující vztahy by se lišily o konstantu  $\hbar \omega$ , kterou jsme hamiltonián vydělili. Důvodem je to, že vztahy získané z bezrozměrného hamiltoniánu jsou poněkud názornější. Pro komutující čísla je možné součet kvadrátů „odmocnit“ pomocí vztahu  $a^2 + b^2 = (a+ib) \cdot (a-ib)$ . U nekomutujících objektů není situace tak jednoduchá. Zaveďme operátory:

$$\hat{\mathbf{a}} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{\mathbf{X}} + i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{\mathbf{P}} \quad ; \quad \hat{\mathbf{a}}^+ \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \hat{\mathbf{X}} - i \sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}} \hat{\mathbf{P}} \quad (2.54)$$

Oba tyto operátory jsou pro kvantovou teorii velmi důležité. Nazývají se anihilační a kreační operátory (smysl tohoto názvu uvidíme za chvíli). Kreační a anihilační operátory, jako jedny z mála v kvantové teorii, nejsou hermitovské a nepůsobí tedy v obou částech skalárního součinu stejně. Platí pro ně některé důležité relace, například:

$$\begin{aligned} (1) \quad & \frac{\hat{H}}{\hbar \omega} = \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \quad , \\ (2) \quad & \frac{\hat{H}}{\hbar \omega} = \hat{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{a}}^+ - \frac{1}{2} \quad , \\ (3) \quad & \hat{\mathbf{X}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\hat{\mathbf{a}}^+ + \hat{\mathbf{a}}) \quad , \\ (4) \quad & \hat{\mathbf{P}} = i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\hat{\mathbf{a}}^+ - \hat{\mathbf{a}}) \quad , \\ (5) \quad & [\hat{H}, \hat{\mathbf{a}}] = -\hbar \omega \hat{\mathbf{a}} \quad , \\ (6) \quad & [\hat{H}, \hat{\mathbf{a}}^+] = +\hbar \omega \hat{\mathbf{a}}^+ \quad , \\ (7) \quad & [\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^+] = \hat{\mathbf{1}} \quad . \end{aligned} \quad (2.55)$$

Důkaz všech relací je triviální. Stačí jen dosadit z definice kreačních a anihilačních operátorů  $\hat{\mathbf{a}}^+$ ,  $\hat{\mathbf{a}}$  (2.54) a využít základní komutační relace  $[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = i\hbar \hat{\mathbf{1}}$ . Relace (1) a (2) jsou zobecněním relace  $a^2 + b^2 = (a+ib) \cdot (a-ib)$  pro nekomutující objekty a představují formální odmocnění hamiltoniánu. Kreační a anihilační operátory jsou lineární kombinací operátoru souřadnice a operátoru hybnosti. Proto je možné naopak operátor souřadnice a hybnosti vyjádřit jako lineární kombinaci kreačních a anihilačních operátorů - viz relace (3) a (4). Známe-li kreační a anihilační operátor, můžeme z relací (1) až (4) zpětně zrekonstruovat hamiltonián, operátor souřadnice a operátor hybnosti. Komutační relace (5) až (7) vyjadřují základní vlastnosti kreačních a anihilačních operátorů: Uvidíme, že relace (5) znamená, že anihilační operátor posouvá stavy systému o energetickou hladinu  $\hbar\omega$  dolů a relace (6) znamená, že kreační operátor posouvá stav o energetickou hladinu  $\hbar\omega$  vzhůru. Relace (7) je potom vzájemnou relací mezi anihilačním a kreačním operátorem.

V následující větě dokážeme, že operátor  $\hat{\mathbf{a}}^+$  je kreačním operátorem, tj. posouvá energetické stavy o jednotku vzhůru (kreuje, vytváří energetické kvantum).

**Věta:**

Necht'  $\hat{\mathbf{H}}|n\rangle = E_n|n\rangle$ . Potom  $\hat{\mathbf{a}}^+|n\rangle \sim |n+1\rangle$ .

**Důkaz:**

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{a}}^+|n\rangle &\stackrel{(6)}{=} (\hat{\mathbf{a}}^+\hat{\mathbf{H}} + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^+)|n\rangle = (\hat{\mathbf{a}}^+E_n + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^+)|n\rangle = (E_n + \hbar\omega)\hat{\mathbf{a}}^+|n\rangle \\ &\Downarrow \\ \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{a}}^+|n\rangle &= (E_n + \hbar\omega)\hat{\mathbf{a}}^+|n\rangle \\ &\Downarrow \\ \hat{\mathbf{a}}^+|n\rangle &\sim |n+1\rangle. \end{aligned}$$

Zcela analogicky můžeme z relace (5) ukázat, že pro anihilační operátor platí  $\hat{\mathbf{a}}|n\rangle \sim |n-1\rangle$ . Zavedeme-li normovací konstanty (požadujeme, aby všechny stavy byly normovány k jedné, tj. ortonormální bázi z vlastních vektorů operátoru energie), můžeme posouvání v energetickém spektru prováděné kreačním a anihilačním operátorem jednoduše zapsat jako

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}^+|n\rangle &= \alpha_n^+|n+1\rangle, \\ \hat{\mathbf{a}}|n\rangle &= \alpha_n^-|n-1\rangle. \end{aligned} \quad (2.56)$$

Normovací konstanty  $\alpha$  určíme později. Nyní naše úsilí zaměříme na nalezení spektra Hamiltonova operátoru pro harmonický oscilátor.

Hamiltonův operátor je součtem kvadrátů dvou Hermitových operátorů a je proto pozitivně definitní, tj. jeho vlastní čísla jsou nezáporná. Kreační a anihilační operátory posouvají ve spektru energie o konstantní hodnotu (energetické kvantum). Musí tedy existovat stav s nejnižší možnou energií, která je nezáporná. Tento stav nazýváme základní stav a označujeme ho  $|0\rangle$ . Zapůsobíme-li na základní stav anihilačním operátorem, musíme dostat nulový vektor (není již co anihilovat, jsme v základním stavu s nejnižší možnou energií). Pro základní stav tedy platí:

$$\hat{\mathbf{H}}|0\rangle = E_0|0\rangle; \quad \hat{\mathbf{a}}|0\rangle = \mathbf{0}.$$

Nalezneme kvadrát velikosti poslední relace (skalární součin prvku se sebou samým):

$$\begin{aligned}
\langle 0 | \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} | 0 \rangle &= 0 \quad \stackrel{(2.55.1)}{\Rightarrow} \quad \langle 0 | \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} | 0 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \\
\frac{1}{\hbar\omega} \langle 0 | \hat{\mathbf{H}} | 0 \rangle - \frac{1}{2} \langle 0 | \hat{\mathbf{1}} | 0 \rangle &= 0 \quad \Rightarrow \quad \left( \frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \langle 0 | 0 \rangle = 0 \quad \Rightarrow \\
\frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} &= 0 \quad \Rightarrow \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2} .
\end{aligned}$$

Známe-li hodnotu základního energetického stavu, můžeme další hodnoty energií získat působením kreačního operátoru, ten posouvá v energii o konstantu  $\hbar\omega$ , je tedy jasné, že

$$\begin{aligned}
E_1 &= E_0 + \hbar\omega = \frac{3}{2} \hbar\omega , \\
E_2 &= E_0 + 2\hbar\omega = \frac{5}{2} \hbar\omega , \\
&\vdots \\
E_n &= \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega ; \quad n = 0, 1, 2, \dots .
\end{aligned}$$

Spektrum harmonického oscilátoru jsme získali jen z vlastností Hamiltonova operátoru, resp. jen z formulace úlohy (2.41). Nikde jsme nevolili konkrétní reprezentaci, konkrétní Hilbertův prostor. Kreační a anihilační operátory, se kterými jsme se zde poprvé setkali, mají značný význam v kvantové teorii pole, kde pomocí podobných operátorů kreujeme a anihilujeme jednotlivé částice přítomné v systému. Zde u harmonického oscilátoru jen kreujeme či anihilujeme energetické kvantum a tím se dostáváme o jednu hladinu výše nebo níže. Aby naše odvození bylo úplné určíme na závěr normovací konstanty ve výrazu (2.56). Vytvořme nejprve kvadrát normy obou relací:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}^+ | n \rangle &= \alpha_n^+ | n+1 \rangle & \Rightarrow \quad \langle n | \hat{\mathbf{a}} \hat{\mathbf{a}}^+ | n \rangle &= |\alpha_n^+|^2 \langle n+1 | n+1 \rangle & (2.55.1,2) \\
\hat{\mathbf{a}} | n \rangle &= \alpha_n^- | n-1 \rangle & \Rightarrow \quad \langle n | \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} | n \rangle &= |\alpha_n^-|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle & \Rightarrow \\
\langle n | \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} | n \rangle &= |\alpha_n^+|^2 \langle n+1 | n+1 \rangle & \Rightarrow \quad \left( \frac{E_n}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \right) \langle n | n \rangle &= |\alpha_n^+|^2 \langle n+1 | n+1 \rangle \\
\langle n | \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} | n \rangle &= |\alpha_n^-|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle & \Rightarrow \quad \left( \frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) \langle n | n \rangle &= |\alpha_n^-|^2 \langle n-1 | n-1 \rangle .
\end{aligned}$$

Z požadavku normovanosti vlastních vektorů operátoru energie k jedné máme:

$$\begin{aligned}
|\alpha_n^+|^2 &= \left( \frac{E_n}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \right) = \left( \frac{(n+1/2)\hbar\omega}{\hbar\omega} + \frac{1}{2} \right) = n+1 \\
|\alpha_n^-|^2 &= \left( \frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) = \left( \frac{(n+1/2)\hbar\omega}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} \right) = n .
\end{aligned}$$

Fázový faktor při odmocňování komplexního čísla není podstatný (jednotkovou velikost vektoru neovlivní). Výsledné působení kreačního a anihilačního operátoru (2.56) i s normovací konstantou tedy je:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{a}}^+ | n \rangle &= \sqrt{n+1} | n+1 \rangle , \\
\hat{\mathbf{a}} | n \rangle &= \sqrt{n} | n-1 \rangle .
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Tento výsledek si můžete snadno zapamatovat: Pod odmocninou je vždy pořadové číslo vyššího energetického stavu z obou stran rovnice. Zajímavé vlastnosti má ještě jeden operátor:



$$\hat{\mathbf{N}} \equiv \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} \quad . \quad (2.58)$$

Zapůsobme s tímto operátorem na  $n$ -tý energetický stav:

$$\hat{\mathbf{N}}|n\rangle = \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}}|n\rangle \stackrel{(2.57)}{=} \sqrt{n} \hat{\mathbf{a}}^+|n-1\rangle = \sqrt{n} \sqrt{n}|n\rangle = n|n\rangle \quad .$$

Vlastním číslem tohoto operátoru je počet kvant přítomných v daném energetickém stavu. V kvantové teorii pole má tento operátor význam *operátoru počtu částic*.

### 2.4.3. Řešení pomocí maticové mechaniky (Heisenberg)

Řešme nyní ještě jednu úlohu (2.41) o harmonickém oscilátoru na prostoru nekonečných posloupností  $l^2$  sčitatelných s kvadrátem. Na prostoru  $n$ -tic jsou operátory matice  $n \times n$ . Na prostoru nekonečných posloupností ( $n \rightarrow \infty$ ) budou operátory nekonečně rozměrné matice. Úkol tedy je: najít nekonečně rozměrné matice  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{P}$ ,  $\mathbf{H}$ , které vyhovují úloze (2.41). Tyto matice nemusíme hledat „na zelené louce“. S tím co víme o kreačních a anihilačních operátorech je snadno zkonstruujeme. Tyto matice najdeme v energetické reprezentaci, to znamená, že určíme maticové elementy operátorů  $\hat{\mathbf{X}}$ ,  $\hat{\mathbf{P}}$ ,  $\hat{\mathbf{H}}$  v bázi vytvořené z vlastních vektorů Hamiltonova operátoru. Všechny tři operátory umíme zkonstruovat pomocí kreačních a anihilačních operátorů podle relace (2.55). A působení kreačních a anihilačních operátorů na zvolenou bázi také známe – viz relace (2.57). Konstrukce elementů příslušných matic je tedy víceméně triviální záležitostí:

$$\begin{aligned} X_{kl} &= \langle k | \hat{\mathbf{X}} | l \rangle \stackrel{(2.55)}{=} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \langle k | (\hat{\mathbf{a}}^+ + \hat{\mathbf{a}}) | l \rangle \stackrel{(2.57)}{=} \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{l+1} \langle k | l+1 \rangle + \sqrt{l} \langle k | l-1 \rangle) = \\ &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\sqrt{l+1} \delta_{k, l+1} + \sqrt{l} \delta_{k, l-1}) \quad , \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_{kl} &= \langle k | \hat{\mathbf{P}} | l \rangle \stackrel{(2.55)}{=} i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \langle k | (\hat{\mathbf{a}}^+ - \hat{\mathbf{a}}) | l \rangle \stackrel{(2.57)}{=} \\ &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{l+1} \langle k | l+1 \rangle - \sqrt{l} \langle k | l-1 \rangle) = \\ &= i \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} (\sqrt{l+1} \delta_{k, l+1} - \sqrt{l} \delta_{k, l-1}) \quad , \end{aligned}$$

$$H_{kl} = \langle k | \hat{\mathbf{H}} | l \rangle \stackrel{(2.55)}{=} \hbar\omega \langle k | \left( \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) | l \rangle \stackrel{(2.57)}{=} \dots = \left( l + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \delta_{kl} \quad .$$

Napišme si tyto matice:

$$\mathbf{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix} \quad ,$$

$$\mathbf{P} = i\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

Ověřte si, že skutečně  $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = i\hbar \mathbf{1}$  a  $\mathbf{H} = \mathbf{P}^2/2m + m\omega^2\mathbf{X}^2/2$  podle požadavků úlohy (2.41). Ze znalosti matic  $\mathbf{X}$  a  $\mathbf{P}$  jsme již mohli Hamiltonovu matici určit přímo z této relace. Poslední co zbývá je nalézt vlastní čísla matice  $\mathbf{H}$ . Tato úloha je mimořádně jednoduchá. U diagonální matice jsou vlastní čísla právě prvky na diagonále. Pokud tento fakt nevíte, výpočet je jednoduchý:

$$\mathbf{H}|n\rangle = E|n\rangle \Rightarrow (\mathbf{H} - \mathbf{1}E)|n\rangle = 0 \Rightarrow \det(\mathbf{H} - \mathbf{1}E) = 0 \Rightarrow$$

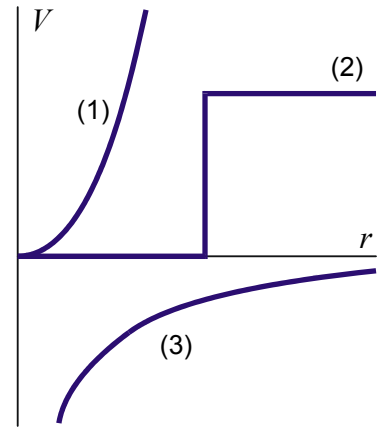
$$\left(\frac{\hbar\omega}{2} - E\right) \cdot \left(\frac{3\hbar\omega}{2} - E\right) \cdot \left(\frac{5\hbar\omega}{2} - E\right) \dots = 0 \Rightarrow$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Opět tedy máme vztah (2.50) pro spektrum harmonického oscilátoru.

## 2.5. SFÉRICKÝ SYMETRICKÝ POTENCIÁL

Sféricky symetrickým (centrálním) nazýváme potenciál, který závisí jen na vzdálenosti od určitého centrálního bodu. Pro popis pohybu těles v sféricky symetrickém potenciálu je velmi výhodný sférický souřadnicový systém. Mezi nejznámější sférické potenciály patří sférický harmonický oscilátor, sférická jáma a Coulombův potenciál. Sférický oscilátor si můžete představit jako tělísko v počátku souřadnic, od kterého vedou pružiny na všechny strany. Kdykoli ho vychýlíme, bude působit vratná síla směrem do centra. Průběh potenciální energie je kvadratický. Sférická jáma přibližně odpovídá potenciálu, který pociťuje neutron zachycený v atomovém jádře. Jaderné síly na hranici jámy ( $r = a$ ) jsou značné (v idealizaci (2.59) dokonce nekonečné) a v jiných oblastech velmi slabé. Coulombův potenciál se uplatní například ve vodíkovém atomu, kdy osamocенý elektron podléhá působení jediného protonu v atomovém jádře. Nezapomínejte, že  $r \in (0, \infty)$ . Průběhy těchto známých potenciálů jsou:



$$(1) \quad V(r) = \frac{1}{2}kr^2 \quad ,$$

$$(2) \quad V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & r \geq a \end{cases} \quad , \quad (2.59)$$

$$(3) \quad V(r) = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{\alpha}{r} \quad .$$

V klasické mechanice bude popsán systém Lagrangeovou funkcí, zobecněnými hybnostmi a energií a Hamiltonovou funkcí ve sférickém souřadnicovém systému takto:

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 - V(r) \quad , \\ p_r &= m\dot{r} \quad , \\ p_\phi &= mr^2\sin^2\theta\dot{\phi} \quad , \\ p_\theta &= mr^2\dot{\theta} \quad , \\ E &= \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\sin^2\theta\dot{\phi}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 + V(r) \quad , \\ H &= \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\phi^2}{2mr^2\sin^2\theta} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r) \quad . \end{aligned} \quad (2.60)$$

Již v klasické mechanice jsme si ukázali, že zobecněné hybnosti odpovídající úhlovým proměnným jsou komponenty momentu hybnosti. Druhá část Hamiltonovy funkce odpovídá *rotačním stupňům volnosti* a lze ji zapsat pomocí vektoru momentu hybnosti  $\mathbf{L}$  vzhledem k ose  $z$ , od které je odvozen sférický souřadnicový systém.

Z předchozího již víme, že jednotlivé komponenty momentu hybnosti nejsou současně měřitelné a nekomutují spolu (2.30). Současně ale můžeme měřit kvadrát momentu hybnosti (2.31) a libovolnou z jeho komponent (2.32). U sféricky symetrického problému budeme preferovat třetí osu a třetí komponentu. Osa  $z$  má preferované postavení při budování sférického souřadnicového systému, ve skutečnosti je však lhostejné, kterou z komponent momentu hybnosti zvolíme do úplné množiny pozorovatelných. Je-li v systému přítomno

vnější magnetické pole, volíme zpravidla souřadnicový systém tak, aby třetí osa mířila ve směru tohoto pole, osa  $z$  je potom současně směrem vnějšího magnetického pole.

Je-li systém sféricky symetrický, potom s operátory  $\hat{\mathbf{L}}^2$  a  $\hat{\mathbf{L}}_3$  ještě komutuje Hamiltonův operátor  $\hat{\mathbf{H}}$ . To je vidět již z klasického rozpisu (2.60). Víme totiž, že zobecněné souřadnice nekomutují jedině se svými zobecněnými hybnostmi. V komutátoru  $[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}]$  mohou tedy být jediné nenulové členy s úhlovou částí Hamiltoniánu, tou je ale právě násobek  $\hat{\mathbf{L}}^2$ . Operátor sám se sebou komutuje, takže výsledek může být jedině nulový. Podobně komutátor  $[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}]$  může mít jediné nenulové části s úhlovou částí Hamiltoniánu, tj.  $\sim [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}^2]$ . Tento komutátor je ale opět nulový podle (2.32).

Nalezli jsme tak trojici nezávislých komutujících operátorů, která tvoří úplnou množinu pozorovatelných u nerelativistického sféricky symetrického problému (v relativistické úloze k těmto proměnným ještě přibude spin):

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}] = [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}] = 0 \quad . \quad (2.61)$$

U soustavy nezávislých vzájemně komutujících operátorů je možné hledat společné vlastní vektory ke všem operátorům. U sféricky symetrického problému budeme tedy řešit soustavu tří rovnic pro vlastní vektory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} |v, l, m\rangle &= E_v |v, l, m\rangle \quad , \\ \hat{\mathbf{L}}^2 |v, l, m\rangle &= \lambda_l |v, l, m\rangle \quad , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 |v, l, m\rangle &= \mu_m |v, l, m\rangle \quad . \end{aligned} \quad (2.62)$$

Index  $v$  čísluje energetické stavy, index  $l$  stavy kvadrátu momentu hybnosti a index  $m$  stavy projekce momentu hybnosti do libovolné osy (zvolili jsme třetí). Vlastní čísla jsme označili  $E, \lambda, \mu$ . Tuto soustavu je třeba řešit současně. Co by se stalo, kdybychom například řešili jen rovnici pro energii? Nalezená vlastní čísla  $E_v$  by samozřejmě byla v pořádku, ale ke každému vlastnímu číslu (každé hodnotě energie) by existovalo více nezávislých vlastních vektorů (ve skutečnosti se od sebe liší čísla  $l$  a  $m$ , to ale nevíme, protože řešíme jen první rovnici). Tomuto typu spektra říkáme *degenerované spektrum*. Znamená to jen to, že k danému vlastnímu číslu existuje více vlastních vektorů. Odlišili bychom je od sebe až pomocí dalších operátorů, které komutují s operátorem, jehož spektrum právě hledáme.

V následujících dvou kapitolách se budeme zabývat momentem hybnosti, tedy druhou a třetí rovnicí v (2.62). Řešení pro moment hybnosti je stejné pro všechny průběhy potenciální energie. V kapitole 2.5.1 nalezneme řešení bez použití konkrétní reprezentace a v kapitole 2.5.2. naznačíme, jak by se při řešení postupovalo v  $x$  reprezentaci. První rovnicí v (2.62) se budeme zabývat v kapitole 2.5.3. Řešení pro energii (energetické spektrum) již samozřejmě závisí na průběhu potenciální energie a je jiné například pro vodík a jiné pro sférický oscilátor. Navíc řešení pro energii závisí na číslech  $l$  a  $m$ . To je logické: moment hybnosti souvisí s rotačními stavy systému a ty k energii přispívají. Vidíme to konec konců i v hamiltoniánu (2.60), kde je právě rotační část energie vyjádřena přes kvadrát momentu hybnosti.

### 2.5.1. Moment hybnosti

Základními komutačními relacemi pro moment hybnosti jsou vztahy (2.30), důležitý je také vztah (2.32):

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] &= i\hbar \hat{\mathbf{L}}_3 + \text{cyklické záměny,} \\ [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] &= 0 \quad . \end{aligned}$$

Zavedme nyní tzv. posuvné operátory

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \equiv \hat{\mathbf{L}}_1 \pm i \hat{\mathbf{L}}_2 \quad . \quad (2.63)$$

Tyto operátory budou mít podobný význam jako kreační a anihilační operátory u energie harmonického oscilátoru. Budou nás totiž posouvat ve spektru momentu hybnosti. Napišme přehledně jejich důležité vlastnosti (všechny lze snadno odvodit z definice posuvných operátorů a z komutačních relací momentu hybnosti):

$$\begin{aligned} (1) \quad \hat{\mathbf{L}}_1 &= \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{L}}_+ + \hat{\mathbf{L}}_-) , \\ (2) \quad \hat{\mathbf{L}}_2 &= \frac{1}{2i} (\hat{\mathbf{L}}_+ - \hat{\mathbf{L}}_-) , \\ (3) \quad \hat{\mathbf{L}}_{\pm}^{\pm} &= \hat{\mathbf{L}}_{\mp} , \\ (4) \quad \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- &= \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 , \\ (5) \quad \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ &= \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 , \\ (6) \quad [\hat{\mathbf{L}}_+, \hat{\mathbf{L}}_-] &= 2\hbar \hat{\mathbf{L}}_3 , \\ (7) \quad [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_{\pm}] &= \pm \hbar \hat{\mathbf{L}}_{\pm} , \\ (8) \quad [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_{\pm}] &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (2.64)$$

Známe-li posuvné operátory, můžeme z relací (1), (2) a (6) zrekonstruovat celý moment hybnosti. Úlohu, kterou budeme nyní řešit, lze zformulovat takto:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 |\lambda, \mu\rangle &= \lambda |\lambda, \mu\rangle \quad , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 |\lambda, \mu\rangle &= \mu |\lambda, \mu\rangle \quad . \end{aligned}$$

Dokažme nejprve, že posuvné operátory posouvají vlastní vektory ve třetí komponentě momentu hybnosti o Planckovu konstantu:

$$\text{Lemma 1:} \quad \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \sim |\lambda, \mu \pm \hbar\rangle \quad .$$

**Důkaz:**

Označme  $|\psi\rangle \equiv \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle$ . Aplikujme operátory  $\hat{\mathbf{L}}_3$  a  $\hat{\mathbf{L}}^2$  na tento vektor:

$$\hat{\mathbf{L}}_3 |\psi\rangle = \hat{\mathbf{L}}_3 \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \stackrel{(2.64.7)}{=} (\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \hat{\mathbf{L}}_3 \pm \hbar \hat{\mathbf{L}}_{\pm}) |\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm \hbar) \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle = (\mu \pm \hbar) |\psi\rangle ,$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |\psi\rangle = \hat{\mathbf{L}}^2 \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle \stackrel{(2.64.8)}{=} \hat{\mathbf{L}}_{\pm} \hat{\mathbf{L}}^2 |\lambda, \mu\rangle = \lambda \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |\lambda, \mu\rangle = \lambda |\psi\rangle .$$

Vidíme, že posuvné operátory  $\hat{\mathbf{L}}_{\pm}$  posouvají ve spektru operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  o konstantu  $\pm \hbar$ . Ve spektru operátoru  $\hat{\mathbf{L}}^2$  nedělají posuvné operátory nic.  $\hat{\mathbf{L}}_{\pm}$  tedy mění jen hodnotu projekce momentu hybnosti do zvolené osy.

**Lemma 2:** Při daném  $\lambda$  je spektrum operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  omezené, tj. existuje  $\mu_{\min}$  a  $\mu_{\max}$ .

**Důkaz:** V relacích

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{L}}^2 |\lambda, \mu\rangle &= \lambda |\lambda, \mu\rangle, \\ (\hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2) |\lambda, \mu\rangle &= (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2) |\lambda, \mu\rangle = (\lambda - \mu^2) |\lambda, \mu\rangle \end{aligned}$$

jsou operátory na levých stranách pozitivně definitní. Proto musí platit  $\lambda \geq 0$ ,  $\lambda - \mu^2 \geq 0$ .

Zřejmě tedy musí být  $\mu^2 \leq \lambda \wedge \lambda \geq 0$  a proto  $\mu \in \langle -\sqrt{\lambda}, +\sqrt{\lambda} \rangle$  a existuje  $\mu_{\min}$  a  $\mu_{\max}$ .

Nyní již spektrum momentu hybnosti odvodíme standardním způsobem. Podobně jako u harmonického oscilátoru zapůsobíme posuvným operátorem na první (resp. poslední stav). Výsledek působení musí být nulový, protože další stav již neexistuje:

$$\hat{\mathbf{L}}_+ |\lambda, \mu_{\max}\rangle = 0 \quad \wedge \quad \hat{\mathbf{L}}_- |\lambda, \mu_{\min}\rangle = 0 \quad .$$

vytvořme kvadrát normy těchto vektorů:

$$\langle \lambda, \mu_{\max} | \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ | \lambda, \mu_{\max} \rangle = 0 \quad \wedge \quad \langle \lambda, \mu_{\min} | \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- | \lambda, \mu_{\min} \rangle = 0 \quad .$$

Součiny operátorů vyjádříme z (2.64.4) a (2.64.5).

$$\langle \lambda, \mu_{\max} | \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 | \lambda, \mu_{\max} \rangle = 0 \quad \wedge \quad \langle \lambda, \mu_{\min} | \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 | \lambda, \mu_{\min} \rangle = 0 \quad .$$

Po zapůsobení operátorů máme:

$$(\lambda - \mu_{\max}^2 - \mu_{\max} \hbar) \| \lambda, \mu_{\max} \|^2 = 0 \quad \wedge \quad (\lambda - \mu_{\min}^2 + \mu_{\min} \hbar) \| \lambda, \mu_{\min} \|^2 = 0 \quad .$$

vy nulováním koeficientů u obou relací dostáváme:

$$\lambda = \mu_{\max}^2 + \mu_{\max} \hbar \quad \wedge \quad \lambda = \mu_{\min}^2 - \mu_{\min} \hbar \quad ,$$

neboli

$$\lambda = \mu_{\max} (\mu_{\max} + \hbar) \quad \wedge \quad \lambda = \mu_{\min} (\mu_{\min} - \hbar) \quad . \quad (*)$$

Posuvné operátory posouvají ve spektru třetí komponenty momentu hybnosti o Planckovu konstantu, proto musí také současně platit:

$$\mu = \mu_{\min}, \mu_{\min} + \hbar, \mu_{\min} + 2\hbar, \mu_{\min} + 3\hbar, \dots, \mu_{\max} - \hbar, \mu_{\max} \quad .$$

zavedme bezrozměrné číslo  $m \equiv \mu / \hbar$ . Potom

$$m = m_{\min}, m_{\min} + 1, m_{\min} + 2, m_{\min} + 3, \dots, m_{\max} - 1, m_{\max} \quad .$$

Označme  $m_{\max} \equiv l$ . Z relací (\*) snadno zjistíme, že  $m_{\min} = -l$ . Číslo  $m$  tedy může nabývat celkem  $2l+1$  různých hodnot z množiny  $m \in \{-l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l\}$ . Počet hodnot  $2l+1$  musí být nezáporné celé číslo a proto samo číslo  $l$  může nabývat jen poločíselných hodnot

$$l \in \{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots\} \quad . \quad \text{Vlastní číslo } \lambda = \mu_{\max} (\mu_{\max} + \hbar) = l \hbar (l \hbar + \hbar) = \hbar^2 l(l+1) \quad .$$

**Závěr:** Výsledky celého odvození můžeme zformulovat takto:

$$\begin{aligned}\hat{L}^2 |l, m\rangle &= l(l+1)\hbar^2 |l, m\rangle, \quad l \in \left\{0, \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, 2, \frac{5}{2}, \dots\right\}; \\ \hat{L}_3 |l, m\rangle &= m\hbar |l, m\rangle, \quad m \in \{-l, -l+1, -l+2, \dots, l-1, l\}; \\ \hat{L}_{\pm} |l, m\rangle &\sim |l, m \pm 1\rangle.\end{aligned}\quad (2.65)$$

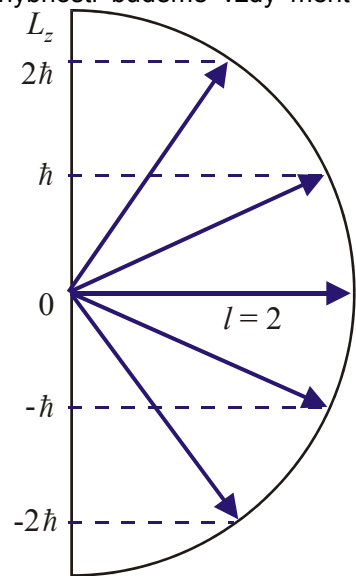
**Poznámky k řešení:** (velmi důležité, čtěte pozorněji než samo řešení!!!)

- 1) Číslo  $l$  čísluje velikost momentu hybnosti a nazývá se *vedlejší kvantové číslo* (hlavní kvantové číslo čísluje energii). Číslo  $m$  čísluje projekci momentu hybnosti do libovolné osy. Vzhledem k tomu, že nabitá rotující částice má nenulový magnetický moment, a toto číslo bylo poprvé zavedeno pro elektron v atomárním obalu vodíku, nazývá se *magnetické kvantové číslo*.
- 2) Možné hodnoty velikosti momentu hybnosti a jeho projekce do třetí osy jsou:

$$\begin{aligned}|L| &= \sqrt{l(l+1)} \hbar, \quad l = 0, 1, 2, 3, \dots; \\ L_3 &= m\hbar, \quad m = -l, -l+1, \dots, l.\end{aligned}\quad (2.66)$$

- 3) *Poločíselné hodnoty*, které jsme odvodili pro číslo  $l$  jsou skutečně také možné. Realizují se u spinu, jehož operátor má stejnou komutační strukturu jako moment hybnosti. V Schrödingerovské  $X$  reprezentaci (následující kapitola) tyto hodnoty nedostaneme. *Volba reprezentace zde znamená ztrátu části řešení*. To, že poločíselné hodnoty  $l$  jsou již součástí komutačních relací (2.30) bylo objeveno až relativně pozdě (v roce 1968 Kaufmannem) postupem podobným našemu odvození.
- 4) Z výsledku (2.66), respektive (2.65) plyne skutečný význam Planckovy konstanty. *Jedná se o elementární kvantum momentu hybnosti*. Při měření momentu hybnosti budeme vždy měřit projekci momentu do určité osy, dané měřicím zařízením. Tato projekce je vždy násobkem Planckovy konstanty.
- 5) Vidíme, že stavy s konkrétním vedlejším kvantovým číslem  $l$  jsou *degenerovány* – existuje více vlastních vektorů  $|l, m\rangle$ , které přísluší stejnému kvantovému číslu  $l$ . Tyto vektory se od sebe liší kvantovým číslem  $m$  a jejich počet je  $2l+1$  (tzv. *stupeň degenerace*, který označujeme #).
- 6) Historicky byly označovány kvantové stavy velikosti momentu hybnosti elektronu v obalu atomu vodíku písmeny  $s, p, d, f$  podle následující tabulky:

$l = 0$	$s$ stav	$m = 0$	# = 1
$l = 1$	$p$ stav	$m = -1, 0, 1$	# = 3
$l = 2$	$d$ stav	$m = -2, -1, 0, 1, 2$	# = 5
$l = 3$	$f$ stav	$m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	# = 7



- 7) Vztah pro velikost kvadrátu momentu hybnosti lze dostat také jako aritmetický průměr všech možných hodnot. Například pro  $l = 2$  jsou možné hodnoty projekcí  $L_x, L_y$  nebo  $L_z$  rovny  $-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$ . Průměrná hodnota kvadrátu je proto dána vztahem

$$\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle = 3 \langle L_z^2 \rangle = 3(4\hbar^2 + \hbar^2 + 0 + \hbar^2 + 4\hbar^2)/5 = 6\hbar^2.$$

Velikost  $|L| = \sqrt{6} \hbar$  přesně podle vztahu (2.66).

- 8) Není obtížné napočítat maticové elementy  $\langle l, m' | \hat{L}_k | l, m \rangle$  operátoru momentu hybnosti ve vlastní reprezentaci pomocí posuvných operátorů podobně jako u harmonického oscilátoru v kapitole (2.4.3). Pro  $l = 0$  může být  $m$  i  $m'$  jen 0 a proto jde o jediný prvek. Tato matice působí na skalární veličiny, hovoříme o *skalární reprezentaci*. Pro  $l = 1/2$  může nabývat  $m$  i  $m'$  hodnot  $-1/2$  a  $+1/2$ . Jde o matice  $2 \times 2$  působící na uspořádané dvojice, které nazýváme spinory. Jedná se o tzv. *spinorovou reprezentaci*. Pro  $l = 1$  může nabývat  $m$  i  $m'$  hodnot  $-1, 0$  a  $+1$ . Jde o matice  $3 \times 3$  působící na uspořádané trojice, které nazýváme vektory. Jedná se o tzv. *vektorovou reprezentaci*. Všimněte si, že matice  $L_3$  jsou diagonální s vlastními čísly na diagonále.

**Spinorová reprezentace ( $l = 1/2$ )**

$$\mathbf{L}_1 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_2 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ +i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_3 = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

**Vektorová reprezentace ( $l = 1$ )**

$$\mathbf{L}_1 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_2 = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} ; \quad \mathbf{L}_3 = \hbar \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} .$$

Matice pro  $l = 1/2$  se nazývají *Pauliho matice* (bez násobících koeficientů).

**2.5.2. Řešení v  $x$  reprezentaci, kulové funkce**

V  $x$  reprezentaci budeme problém sférického potenciálu řešit ve sférických souřadnicích (jsou nejbližší symetrii potenciální energie). Je třeba řešit soustavu rovnic (2.62), která bude mít nyní tvar:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} \psi(r, \varphi, \theta) &= E_v \psi(r, \varphi, \theta) , \\ \hat{\mathbf{L}}^2 \psi(r, \varphi, \theta) &= \lambda_l \psi(r, \varphi, \theta) , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 \psi(r, \varphi, \theta) &= \mu_m \psi(r, \varphi, \theta) . \end{aligned} \quad (2.67)$$

Operátory zapsané ve sférických souřadnicích mají tvar:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} + V(r) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_r - \frac{\hbar^2}{2mr^2} \Delta_{\theta\varphi} + V(r) , \\ \hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2 \Delta_{\theta\varphi} , \\ \hat{\mathbf{L}}_3 &= -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} ; \\ \Delta &= \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} , \\ \Delta_r &\equiv \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r , \\ \Delta_{\theta\varphi} &\equiv \frac{1}{\sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} . \end{aligned} \quad (2.68)$$

Kinetická energie v Hamiltonově operátoru vede v Schrödingerově rovnici na člen

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta = -\frac{\hbar^2}{2m} (\Delta_x + \Delta_y + \Delta_z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \Delta_r + \frac{1}{r^2} \Delta_{\theta\varphi} \right) .$$

V kartézských souřadnicích se Laplaceův operátor štěpí na součet druhých derivací podle jednotlivých os, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na složky  $T_x$ ,  $T_y$  a  $T_z$ . Ve sférických souřadnicích se Laplaceův operátor dělí na radiální a úhlovou část, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na radiální a úhlovou část. Právě úhlová část kinetické energie je rotační energie spojená s momentem hybnosti a proto kvadrátu momentu hybnosti odpovídá úhlová část Laplaceova operátoru.

Hledané řešení  $\psi(r, \varphi, \theta)$  samozřejmě závisí na kvantových číslech  $\nu$ ,  $l$ ,  $m$ . Řešení budeme hledat v separovaném tvaru

$$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r)g(\varphi)h(\theta) . \quad (2.69)$$



Nejdříve řešme poslední z rovnic (2.67):

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f(r)g(\varphi)h(\theta) = \mu_m f(r)g(\varphi)h(\theta) \Rightarrow$$

$$-i\hbar \frac{dg}{d\varphi} = g \Rightarrow g(\varphi) = c \exp\left[i \frac{\mu_m}{\hbar} \varphi\right].$$

Nalezené řešení musí být periodické v úhlu  $\varphi$ :

$$g(0) = g(2\pi) \Rightarrow \mu_m = m\hbar; \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

V  $x$  reprezentaci jsme opět odvodili kvantování projekce momentu hybnosti. Projekce momentu hybnosti může nabývat jen celistvých násobků Planckovy konstanty. Poločíselná řešení nelze v  $x$  reprezentaci nalézt. Přejdem ke konkrétní reprezentaci přicházíme o část řešení. Hledané řešení má nyní tvar:

$$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r) \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} h(\theta); \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (2.70)$$

Konstantu  $c$  jsme zvolili tak, aby nalezené řešení bylo normováno k jedné. Jako další krok dosadíme toto řešení do druhé rovnice (2.68) a budeme ji řešit

$$-\hbar^2 \left[ \frac{1}{\sin\theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left( \sin\theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{\sin^2\theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right] e^{im\varphi} h(\theta) = \lambda_l e^{im\varphi} h(\theta) \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\sin\theta} \frac{d}{d\theta} \left( \sin\theta \frac{dh}{d\theta} \right) + \left( \frac{m^2}{\sin^2\theta} + \frac{\lambda_l}{\hbar^2} \right) h = 0.$$

Výsledkem je obyčejná diferenciální rovnice pro funkci  $h(\theta)$ , která se řeší standardními matematickými postupy přesahujícími rámec tohoto skriptu. Výsledkem jsou polynomiální funkce v  $\cos\theta$  a  $\sin\theta$ , které se nazývají přidružené Legendreovy polynomy  $P_{lm}(\cos\theta)$  a jsou definované vztahem

$$P_{lm}(x) \equiv \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2-1)^l; \quad l = 0, 1, 2, \dots; \quad |m| \leq l; \quad m = 0, \pm 1, \dots \quad (2.71)$$

Pro  $m = 0$  se tyto polynomy nazývají Legendreovy polynomy. Příslušné vlastní číslo je

$$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2 \quad (2.72)$$

Celá úhlová část řešení se nazývá kulová funkce a označuje se

$$Y_{lm}(\varphi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{im\varphi} P_{lm}(\cos\theta). \quad (2.73)$$

Celkové řešení druhých dvou rovnic soustavy (2.67) tedy je

$$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r) Y_{lm}(\varphi, \theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(r) e^{im\varphi} P_{lm}(\cos\theta);$$

$$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

$$\mu_m = m\hbar; \quad m = 0, \pm 1, \dots; \quad |m| \leq l \quad (2.74).$$

Odvozené kvantování momentu hybnosti je až na absenci poločíselných hodnot shodné se vztahy odvozenými jinou cestou v předchozí kapitole. Pro radiální funkci  $f(r)$  lze řešení získat z první rovnice (2.67). Toto řešení závisí na tvaru potenciální energie. Pro některé základní

tvary potenciální energie bude řešení diskutováno v příští kapitole. Na závěr uvedme příklady některých kulových funkcí:

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}; \quad Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos \theta; \quad Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{i\varphi} \sin \theta; \quad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}} e^{-i\varphi} \sin \theta;$$

$$Y_{20} = -\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3\cos^2 \theta); \quad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}} e^{i\varphi} \cos \theta \sin \theta; \quad \dots$$

### 2.5.3. Jednoduché systémy: oscilátor, vodík, jáma

Nyní zbývá řešit první z rovnic (2.67) – rovnici pro energii. Tato rovnice nám poskytne energetické spektrum a radiální část celého řešení  $\psi(r, \varphi, \theta)$ . Jak energetické spektrum, tak radiální část mohou záviset na kvantových číslech  $l$  a  $m$  z předchozího řešení a budou závislé na konkrétním tvaru potenciální energie  $V(r)$ .

V poslední rovnici (2.67) známe působení rotační části kinetické energie Hamiltonova operátoru na celkovou vlnovou funkci. To je dáno působením kvadrátu momentu hybnosti podle druhé z rovnic (2.67). Známe již i vlastní číslo  $\lambda_l$  podle vztahu (2.72). Po zapůsobení rotační části zkrátíme úhlové části  $g(\varphi)$  a  $h(\theta)$  na obou stranách rovnice a získáme rovnici pro radiální část řešení:

$$\left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d}{dr} \frac{1}{r} \frac{d}{dr} r + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] f_{\nu l}(r) = E f_{\nu l}(r). \quad (2.75)$$

Povšimněte si, že v rovnici vystupuje vedlejší kvantové číslo  $l$  a energetické spektrum proto nezávisí jen na radiálním čísle  $\nu$ , které čísluje energii, ale i na vedlejším kvantovém čísle  $l$ . Řešení rovnice (2.75) se provádí standardními metodami (rozvoj do řady, hledání asymptotického chování, oříznutí nekonečné řady). Uvedeme výsledky výpočtů pro potenciální energii sférického harmonického oscilátoru, prostorové jámy a Coulombův potenciál (2.59).

#### Harmonický oscilátor

Pro potenciální energii harmonického oscilátoru vychází energetické spektrum

$$V(r) = \frac{1}{2} m \omega^2 r^2 \quad \Rightarrow \quad E_{\nu l} = (2\nu + l + 3/2) \hbar \omega = (n + 3/2) \hbar \omega. \quad (2.76)$$

Nejmenší možná hodnota energie (nulové kmity) je  $3/2 \hbar \omega$ . Radiální kvantové číslo  $\nu$  čísluje pořadí radiálních stavů a zpravidla také počet průsečíků radiálního řešení s osou  $x$ . Většinou se zavádí tzv. hlavní kvantové číslo  $n$ , které skutečně čísluje stavy energie:

$$n \equiv 2\nu + l; \quad n = 0, 1, 2, \dots, \quad l = 0, 1, \dots, n. \quad (2.77)$$

Spektrum oscilátoru je degenerované (ke každé hodnotě energie přísluší více stavů, každé  $n$  lze složit z více kombinací  $\nu$  a  $l$ ). Snadno určíme stupeň degenerace, uvědomíme-li si, že ke každému vedlejšímu kvantovému číslu existuje  $2l + 1$  hodnot magnetických čísel  $m$ :

$$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2(n - 2\nu) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2n - 4\nu + 1 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}. \quad (2.78)$$

Řadu (2.78) jsme sečetli jako aritmetickou řadu. Každá energetická slupka  $n$  obsahuje  $(n+1)(n+2)/2$  stavů.

**Coulombický potenciál**

Pro Coulombický potenciál vychází energetické spektrum

$$V(r) = \frac{qQ}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r} = -\frac{\alpha}{r} \quad \Rightarrow \quad E_{\nu l} = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2(\nu+l+1)^2} = -\frac{\alpha^2 m}{2\hbar^2 n^2} . \quad (2.79)$$

Hlavní kvantové číslo  $n$  číslující stavy energie jsme zavedli vztahem

$$n = \nu + l + 1 \quad ; \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad , \quad l = 0, 1 \dots n-1 . \quad (2.80)$$

Stupeň degenerace bude

$$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n-1} 2(n-\nu-1) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n-1} 2n - 2\nu - 1 = n^2 . \quad (2.81)$$

Jde-li o atom vodíku, může mít každý elektron ještě dva spinové stupně volnosti  $m_s = \pm 1/2$  a celkový počet stavů v jedné energetické slupce je proto  $2n^2$ . Tyto stavy se liší hodnotou kvantových čísel  $l, m, m_s$ .

**Kvantová jáma**

Sférická konečná kvantová jáma s potenciálem

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & r \geq a \end{cases} \quad (2.82)$$

nemá analytické řešení. Problém lze řešit jen numericky nebo graficky.

## 2.6. ČASOVÝ VÝVOJ

Prozatím jsme se v kvantové teorii zabývali stacionárními stavy, tj. stavy systému, které se v čase nevyvíjí. Skutečné kvantové stavy jsou lineárními kombinacemi stacionárních stavů (prvků báze) a koeficienty těchto kombinací se mění s časem. Přejít stavu z jednoho času do času pozdějšího provádí tzv. *evoluční operátor* (operátor časového vývoje).

### 2.6.1. Evoluční operátor

Evoluční operátor převádí známý stav čase  $t_0$  na stav, do kterého se vyvine v čase  $t$ :

$$|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t, t_0) |\psi(t_0)\rangle. \quad (2.83)$$

Evoluční operátor musí splňovat některé podmínky a požadavky:

**1) počáteční podmínka:** vývoj z počátečního času do počátečního času nemění stav

$$\hat{U}(t_0, t_0) = \hat{1}.$$

**2) semigrupová podmínka:** vývoj ze stavu  $t_1$  do  $t_2$  dopadne stejně, je-li proveden naráz nebo přes mezičas  $t$ :

$$\begin{aligned} t_1 \rightarrow t_2 & \Leftrightarrow t_1 \rightarrow t \rightarrow t_2 \\ |\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1) |\psi(t_1)\rangle & \Leftrightarrow |\psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t) \hat{U}(t, t_1) |\psi(t_1)\rangle \end{aligned}$$

Porovnáním obou postupů získáme *semigrupovou podmínku*

$$\hat{U}(t_2, t) \hat{U}(t, t_1) = \hat{U}(t_2, t_1).$$

**3) unitarita:** časový vývoj nemění normování stavu:

$$\begin{aligned} \langle \psi(t_0) | \psi(t_0) \rangle &= \langle \psi(t) | \psi(t) \rangle, \\ \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle &= \langle \psi_0 | \hat{U}^\dagger \hat{U} | \psi_0 \rangle \\ \hat{U}^\dagger \hat{U} &= \hat{1}. \end{aligned}$$

**4) inverze:** inverzní evoluční operátor má obrácené pořadí argumentů. Odvodíme ze semigrupové podmínky:

$$\begin{aligned} \hat{U}(t, t) &= \hat{U}(t, t_0) \hat{U}(t_0, t) = \hat{1} \Rightarrow \\ \hat{U}^{-1}(t_0, t) &= \hat{U}(t, t_0). \end{aligned}$$

**5) spojitost:** samovolný vývoj stavu (bez aktu měření), který popisuje evoluční operátor musí být spojitý:

$$\langle \varphi | \hat{U}(t_0, t) | \psi(t_0) \rangle \text{ je spojitý pro } \forall t_0 \text{ a } \forall |\varphi\rangle \in \mathcal{H}.$$

Nyní odvodíme základní rovnici pro evoluční operátor. Vyjdeme z definice střední hodnoty dynamické proměnné (viz tabulka v kapitole 2.3.2) a tuto střední hodnotu budeme derivovat podle času:

$$\frac{d\bar{a}}{dt} = \frac{d}{dt} \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle = \frac{d}{dt} \langle \psi_0 | \hat{U}^\dagger \hat{A} \hat{U} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \frac{d\hat{U}^\dagger}{dt} \hat{A} \hat{U} + \hat{U}^\dagger \hat{A} \frac{d\hat{U}}{dt} | \psi_0 \rangle.$$

Jinou možností je přímo zavést operátor časové derivace dynamické proměnné vztahem

$$\frac{d\bar{a}}{dt} \equiv \langle \psi | \dot{\hat{A}} | \psi \rangle = \langle \psi_0 | \hat{U}^\dagger \dot{\hat{A}} \hat{U} | \psi_0 \rangle.$$

Porovnáním obou postupů získáme rovnici

$$\frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} = \hat{\mathbf{U}}^+ \dot{\hat{\mathbf{A}}}\hat{\mathbf{U}}, \quad (*)$$

ve které za časovou derivaci operátoru dynamické proměnné dosadíme časový vývoj dynamické proměnné zapsaný v Poissonových závorkách (1.53) převedený do kvantové podoby pomocí principu korespondence (2.28):

$$\dot{A} = \{A, H\} \quad \Rightarrow \quad \dot{\hat{\mathbf{A}}} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}].$$

Získáme tak rovnici, ze které se budeme snažit získat rovnici pro evoluční operátor:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= \hat{\mathbf{U}}^+ \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}] \hat{\mathbf{U}} \Rightarrow \\ \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} (\hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{U}}) \end{aligned} \quad (**)$$

Ve všech následujících úpravách využíváme unitaritu  $\mathbf{U}\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{1}$ . Z rovnice (\*\*) je třeba vyloučit operátor  $\mathbf{U}^+$  a jeho derivaci podle času, kterou získáme derivováním definice unitarity podle času a násobením výsledku operátorem  $\mathbf{U}^+$  zprava:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{1}} \Rightarrow \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} \hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+ \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= 0 \Rightarrow \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} + \hat{\mathbf{U}}^+ \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} \hat{\mathbf{U}}^+ = 0 \Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d\hat{\mathbf{U}}^+}{dt} &= - \hat{\mathbf{U}}^+ \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} \hat{\mathbf{U}}^+ . \end{aligned}$$

Výsledek dosadíme do rovnice (\*\*) a vynásobíme ji operátorem  $\mathbf{U}$  zleva a  $\mathbf{U}^+$  zprava:

$$\begin{aligned} - \hat{\mathbf{U}}^+ \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} (\hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}} - \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{U}}) \Rightarrow \\ - \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} \hat{\mathbf{U}}^+ \hat{\mathbf{A}} + \hat{\mathbf{A}} \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} \hat{\mathbf{U}}^+ &= \frac{1}{i\hbar} (\hat{\mathbf{A}} \hat{\mathbf{H}} - \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{A}}) \Rightarrow \\ \left[ \hat{\mathbf{A}}, \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} \hat{\mathbf{U}}^+ \right] &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}] \Rightarrow \\ \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} \hat{\mathbf{U}}^+ &= \frac{1}{i\hbar} \hat{\mathbf{H}} \Rightarrow \\ i\hbar \frac{d\hat{\mathbf{U}}}{dt} &= \hat{\mathbf{H}} \hat{\mathbf{U}} . \end{aligned} \quad (2.84)$$

Právě odvozená rovnice se nazývá *rovnice časového vývoje*. Zapůsobíme-li touto operátorovou rovnicí na počáteční stav  $|\psi_0\rangle$ , provede evoluční operátor vývoj stavu do času  $t$  a získaná rovnice pro  $|\psi(t)\rangle$  se nazývá *časová Schrödingerova rovnice*:

$$i\hbar \frac{d|\psi(t)\rangle}{dt} = \hat{\mathbf{H}}|\psi(t)\rangle . \quad (2.85)$$

### 2.6.2. Časová Schrödingerova rovnice

Řešení časového vývoje lze najít relativně snadno, není-li Hamiltonův operátor explicitní funkcí času, tj. závisí jen na operátorech zobecněných souřadnic a hybností. V takovém případě je výhodné volit v Hilbertově prostoru popisovaného systému bázi generovanou vlastními vektory Hamiltonova operátoru (2.35):

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle \quad ; \quad \langle m|n\rangle = \delta_{nm} \quad ; \quad \sum_n |n\rangle\langle n| = \hat{1}.$$

Do těchto vektorů rozvineme hledaný stav, koeficienty rozvoje budou funkcemi času:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n a_n(t)|n\rangle.$$

Řešení v tomto tvaru dosadíme do časové Schrödingerovy rovnice získáme lineární rovnici pro koeficienty  $a_n(t)$ .

$$\begin{aligned} i\hbar \sum_n \frac{d a_n}{dt} |n\rangle &= \hat{H} \sum_n a_n(t) |n\rangle; \\ i\hbar \sum_n \frac{d a_n}{dt} |n\rangle &= \sum_n a_n(t) E_n |n\rangle; \quad / \langle m| \text{ zleva} \\ i\hbar \frac{d a_m}{dt} &= a_m(t) E_m \quad ; \\ a_m(t) &= c_m e^{-\frac{i}{\hbar} E_m (t-t_0)}. \end{aligned}$$

Řešení časového vývoje tedy je:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n e^{-\frac{i}{\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle. \quad (2.86)$$

Poněkud elegantnější řešení je nalézt přímo evoluční operátor jako superpozici projektorů generovaných Hamiltonovým operátorem pomocí věty o spektrálním rozvoji. Řešení rovnice pro evoluční operátor lze formálně zapsat jako

$$i\hbar \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H}\hat{U} \quad \Rightarrow \quad \hat{U}(t, t_0) = e^{\frac{1}{i\hbar} \hat{H}(t-t_0)} \quad \Rightarrow \quad \hat{U}(t, t_0) = \sum_n e^{\frac{1}{i\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle\langle n|.$$

Nyní zapůsobíme nalezeným evolučním operátorem na počáteční stav  $|\psi_0\rangle$ :

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n e^{\frac{1}{i\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle\langle n| \psi_0\rangle$$

a získáme tak okamžitě řešení časové Schrödingerovy rovnice:

$$\begin{aligned} |\psi(t)\rangle &= \sum_n c_n e^{\frac{1}{i\hbar} E_n (t-t_0)} |n\rangle; \\ |\psi_0\rangle &= \sum_n c_n |n\rangle; \\ c_n &\equiv \langle n| \psi_0\rangle. \end{aligned} \quad (2.86')$$

**Příklad:**

Naleznete vývoj pravděpodobnosti systému, jehož počáteční stav je zadán jako reálná lineární kombinace dvou reálných vlastních funkcí Hamiltonova operátoru. Například může jít o dva stavy harmonického oscilátoru nebo kvantové jámy či o dvoustavový systém. Požadavek reálnosti vlastních funkcí a koeficientů je jen z důvodu jednoduchosti výpočtu.

**Řešení:** Počáteční stav je kombinací dvou vlastních stavů 1 a 2 Hamiltoniánu

$$\psi_0(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x) ,$$

časový vývoj je

$$\psi(t, x) = c_1 e^{-\frac{i}{\hbar}E_1 t} \psi_1(x) + c_2 e^{-\frac{i}{\hbar}E_2 t} \psi_2(x)$$

a výsledná hustota pravděpodobnosti pro reálné vlastní funkce vychází

$$w(t, x) \equiv \psi^2 = (c_1\psi_1)^2 + (c_2\psi_2)^2 + c_1c_2\psi_1\psi_2 \left[ e^{\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t} + e^{-\frac{i}{\hbar}(E_2-E_1)t} \right] .$$

Celková pravděpodobnost je součtem pravděpodobnosti, že se systém nachází ve stavu 1, ve stavu 2 a interferenčního členu, který je pro kvantové procesy typický. Výsledek lze jednoduše zapsat takto:

$$w(t, x) = w_1(x) + w_2(x) + f(x) \cos(\omega t) ; \quad \omega \equiv \Delta E/\hbar .$$

Frekvence časových oscilací pravděpodobnosti odpovídá Planckovu kvantování  $\Delta E = \hbar\omega$ .

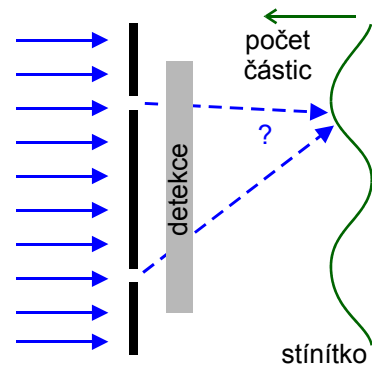
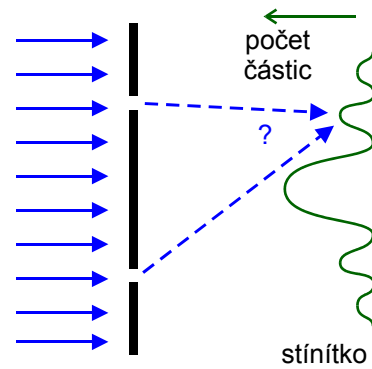
**Poznámka:** Známé jsou například oscilace elektronového a mionového neutrina. Částice se s pevně danou frekvencí mění z jedné na druhou. Ve vztahu pro frekvenci oscilací vystupuje namísto rozdílu energií rozdíl klidových hmotností obou stavů  $\omega \equiv \Delta m c^2 / \hbar$ . Z jevu oscilací dvou neutrin lze usuzovat jen na nenulový rozdíl hmotností obou neutrin.

**2.6.3. Dvoušterbinový experiment**

Představme si, že na dvě šterbiny dopadá proud částic. Po průchodu šterbinami se na stínítku zaznamenává, kam která dopadla. Výsledkem je klasický interferenční vlnový obrazec s maximem dopadů paradoxně mezi oběma šterbinami. Podobně jako v předchozí kapitole se sčítají amplitudy pravděpodobností obou možností, nikoli samotné pravděpodobnosti.

Na výsledku nic nezmění ani počet přítomných částic: bude-li tok zleva velmi slabý a v průměru se bude vyskytovat v oblasti experimentu jediná částice, nikdy nezjistíme, kterým otvorem prošla. Po dosti dlouhé době získáme statistický obraz dopadu částic na stínítko podle obrázku. Můžeme si třeba myslet, že část částice prošla jedním otvorem a část druhým, nebo že interferovala sama se sebou. Takové úvahy nemají reálný smysl. Pro posouzení statistického výsledku mnoha opakovaných dopadů je důležitý jen souhlas experimentálního výsledku s předpovědí danou teorií.

Jiný obraz se nám ale naskytne, pokusíme-li se zjistit, kudy částice prolétla. Zakryjeme-li jeden či druhý otvor, bude maximum dopadajících částic samozřejmě proti otevřenému otvoru. Můžeme vymyslet rafinovanější postup. Budeme sledovat například pomocí částic světla – fotonů, kudy částice prolétla. Bude-li foton málo energetický, bude mít příliš dlouhou vlnovou délku na to, aby zjistil, kudy částice prolétla. Bude-li ale foton mít pro detekci dosti krátkou vlnovou délku, můžeme skutečně rozhodnout, kudy prolétla částice. Ale něco za něco: krátkovlnný foton má značnou energii a silně ovlivní stav prolétající částice. Dokonce natolik, že interferenční



obrazec zmizí. Obecně platí: nepokusíme-li se o detekci, sčítají se amplitudy pravděpodobností a statistika dopadů má charakter interferenčního jevu. Pokusíme-li se o detekci, interference zaniká a sčítají se klasicky samotné pravděpodobnosti. Těžko se nám tento fakt přijímá. Je to vlastnost mikrosvěta, která se nám zdá velmi podivná. Naše zkušenosti z makrosvěta jsou založeny na komutujících objektech. Právě nekomutativnost jevů v mikrosvěte vede ke skládání amplitud pravděpodobností jednotlivých možností a k interferenčnímu jevu.

## 2.6.4. Ehrenfestovy teoremy, viriálový teorem

V této kapitole si probereme tři základní teoremy týkající se časového vývoje.

### 1. Ehrenfestův teorem

První Ehrenfestův teorem se týká časového vývoje operátoru souřadnice. Pro jednoduchost ho odvodíme v jednorozměrném případě, vyjdeme z principu korespondence a časového vývoje (1.53) ve tvaru Poissonových závorek:

$$\begin{aligned} \frac{d\hat{\mathbf{X}}}{dt} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}] = \frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{\mathbf{X}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) \right] = \frac{1}{2mi\hbar} [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}^2] + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{X}}, V(\hat{\mathbf{X}})] = \\ &= \frac{1}{2mi\hbar} \left( \hat{\mathbf{P}} [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] + [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] \hat{\mathbf{P}} \right) = \frac{1}{2mi\hbar} (i\hbar \hat{\mathbf{P}} + i\hbar \hat{\mathbf{P}}) = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} . \end{aligned}$$

Získali jsme tak výsledek, který je analogický definici hybnosti z klasické mechaniky a je znám pod názvem *první Ehrenfestův teorem*:

$$\frac{d\hat{\mathbf{X}}}{dt} = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m} . \quad (2.87)$$

### 2. Ehrenfestův teorem

Druhý Ehrenfestův teorem se týká časového vývoje operátoru hybnosti. Budeme postupovat podobně jako v předchozím případě:

$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] = \frac{1}{i\hbar} \left[ \hat{\mathbf{P}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}) \right] = \frac{1}{2mi\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}^2] + \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})] = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})] .$$

Hodnotu posledního komutátoru určíme takto: Nejprve nalezneme komutátor operátoru hybnosti s libovolnou mocninou operátoru souřadnice (indukcí) a výsledek budeme člen po členu aplikovat na operátor potenciálu rozvinutý do mocninného Taylorova rozvoje:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] &= -[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}] = -i\hbar \hat{\mathbf{1}} , \\ [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^2] &= \hat{\mathbf{X}} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] + [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] \hat{\mathbf{X}} = -i\hbar 2\hat{\mathbf{X}} \\ &\vdots \\ [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n] &= -i\hbar n \hat{\mathbf{X}}^{n-1} , \\ [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^{n+1}] &= \hat{\mathbf{X}} [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n] + [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}] \hat{\mathbf{X}}^n = -i\hbar (n+1) \hat{\mathbf{X}}^{n+1} , \\ [\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})] &= -i\hbar \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} . \end{aligned}$$

Základním předpokladem těchto úvah je samozřejmě rozvinutelnost potenciální energie do Taylorovy řady. Po dosazení za vypočtený komutátor druhý Ehrenfestův teorem vychází:



$$\frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} = - \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}}, \quad (2.88)$$

což je vlastně kvantovou analogií Newtonových pohybových rovnic (záporně vzatý gradient potenciální energie je působící sílou).

### Viriálový teorém

Viriálový teorém je velmi užitečný nejen v kvantové teorii, ale i ve statistické fyzice. Určuje střední hodnotu kinetické energie obsažené v systému z tvaru energie potenciální. Určeme nejprve maticové elementy komutátoru dynamické proměnné  $A$  s Hamiltonovým operátorem v energetické reprezentaci:

$$\langle n | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}] | m \rangle = \langle n | \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}} - \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}} | m \rangle = (E_m - E_n) \langle n | \hat{\mathbf{A}} | m \rangle = (E_m - E_n) A_{nm}.$$

Pro  $n = m$  máme

$$\langle n | [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle = 0.$$

Za operátor dynamické proměnné  $A$  budeme nyní volit součin souřadnice a hybnosti:

$$\begin{aligned} \langle n | [\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle &= 0, \\ \langle n | [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}]\hat{\mathbf{P}} | n \rangle + \langle n | \hat{\mathbf{X}}[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle &= 0, \\ \langle n | \frac{d\hat{\mathbf{X}}}{dt} \hat{\mathbf{P}} | n \rangle + \langle n | \hat{\mathbf{X}} \frac{d\hat{\mathbf{P}}}{dt} | n \rangle &= 0. \end{aligned}$$

Za časový vývoj souřadnice a hybnosti dosadíme z Ehrenfestových teorémů:

$$\langle n | \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} | n \rangle = \langle n | \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}} \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} | n \rangle.$$

Ve třech dimenzích je výsledek součtem příspěvků v jednotlivých osách. Na levé straně stojí střední hodnota kinetické energie systému, napravo tzv. operátor viriálu:

$$\langle n | \hat{\mathbf{T}} | n \rangle = \langle n | \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}}_k \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}_k} | n \rangle. \quad (2.89)$$

Pro jednorozměrný harmonický oscilátor je operátor viriálu přímo roven potenciální energii:

$$V(\hat{\mathbf{X}}) = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}} \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2.$$

Střední hodnoty kinetické a potenciální energie jsou si proto v každém stavu rovny.

**Poznámka:** Již v roce 1933 upozornil F. Zwicky, že ve vnějších oblastech galaxií jsou rotační rychlosti vyšší než teoretické, což odpovídá většímu množství hmoty v galaxiích než se pozoruje. Proto by galaxie měly obsahovat skrytou hmotu, kterou nevidíme. tyto první experimenty byly nezávisle potvrzeny pomocí viriálového pohybu měřily se střední hodnoty kinetické energie hvězd v galaxiích a výsledek byl v příkrém rozporu se střední hodnotou viriálu pro gravitační potenciální energii. Viriálový teorém může být proto velmi užitečný i pro makroskopické nekvantové systémy. Svítící (registrované) hmoty v galaxiích je jen asi 1%. V roce 2000 se pomocí HST ukázalo, že až 50 procent hmoty Galaxie může být soustředěno ve velmi starých a málo svítících bílých trpaslících, které doposud nebyly pozorovatelné. Patřily pravděpodobně k první generaci hvězd před cca 12 miliardami let a vyplňují celé haló Galaxie. Obdobně tomu bude asi i u ostatních galaxií. K řešení problému skryté hmoty však jen bílí trpaslíci nestačí. Snad jde o neznámou formu hmoty nebaryonové povahy.

## 2.7. RELATIVISTICKÁ KVANTOVÁ TEORIE, SPIN

### 2.7.1. Prostorová rotace a Lorentzova transformace

#### Prostorová rotace

Pootočíme-li souřadnicovým systémem kolem osy  $z$  o úhel  $\varphi$ , lze transformaci zapsat jako

$$\begin{aligned}t' &= t, \\x' &= x \cos \varphi - y \sin \varphi, \\y' &= x \sin \varphi + y \cos \varphi, \\z' &= z.\end{aligned}$$

Časovou souřadnici budeme dávat na nultou pozici, při prostorové rotaci se čas nemění. Celou transformaci popíšeme pomocí rotační matice  $\mathbf{R}_z$ . Podobně můžeme popsat rotace kolem ostatních souřadnicových os (stačí cyklicky zaměnit  $x \rightarrow y \rightarrow z \rightarrow x$ ):

$$\mathbf{R}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad \mathbf{R}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

Rotace patří mezi unitární transformace. Připomeňme si, že unitární operátory zachovávají skalární součin, proto platí

$$\mathbf{U}^+ \mathbf{U} = \mathbf{1} \Rightarrow \det \mathbf{U} \det \mathbf{U}^+ = 1 \Rightarrow |\det \mathbf{U}| = 1.$$

Pro reálné matice může být determinant všech unitárních transformací roven buď  $+1$  (rotace) nebo  $-1$  (zrcadlení). Snadno se přesvědčíme, že determinant všech tří rotačních matic je roven jedné. S rotační symetrií se pojí zachování veličiny, kterou nazýváme **moment hybnosti**. Tato veličina je danou symetrií definována (viz teorém Noetherové, kap. 1.3.1).

#### Lorentzova transformace

Velmi příbuznou transformací k rotacím je Lorentzova transformace popisující přechod mezi dvěma vzájemně se rovnoměrně pohybujícími inerciálními souřadnicovými systémy, předpokládejme, že v ose  $x$ :

$$\begin{aligned}t' &= \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\x' &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\y' &= y, \\z' &= z.\end{aligned}$$

Tuto známou transformaci lze zapsat podstatně elegantněji v maticové podobě. Zavedeme-li relativistické proměnné  $x_0 \equiv ct$ ,  $x_1 \equiv x$ ;  $x_2 \equiv y$ ;  $x_3 \equiv z$  a relativistické koeficienty

$$\beta \equiv v/c; \quad \gamma \equiv 1/\sqrt{1 - \beta^2},$$

budou matice Lorentzovy transformace (v ostatních osách matice získáme cyklickou záměnou) mít tvar

$$\Lambda_x = \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_y = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & -\gamma\beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_z = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}.$$

Determinant transformačních matic je roven

$$\det \Lambda = \gamma^2 - \gamma^2 \beta^2 = \gamma^2 (1 - \beta^2) = 1$$

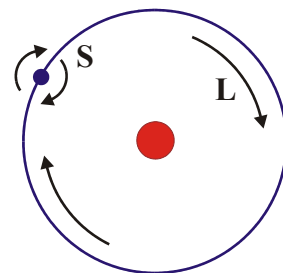
a jde tedy opět o rotace, tentokrát v rovině dané časovou a jednou prostorovou osou. Charakter rotací lépe vynikne, zapíšeme-li Lorentzovy matice pomocí rapidity  $u \equiv \operatorname{arcth}(v/c)$ :

$$\Lambda_x = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} u & \operatorname{sh} u & 0 & 0 \\ \operatorname{sh} u & \operatorname{ch} u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_y = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} u & 0 & \operatorname{sh} u & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ \operatorname{sh} u & 0 & \operatorname{ch} u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \Lambda_z = \begin{pmatrix} \operatorname{ch} u & 0 & 0 & \operatorname{sh} u \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ \operatorname{sh} u & 0 & 0 & \operatorname{ch} u \end{pmatrix}.$$

S Lorentzovou symetrií (experiment dopadne stejně ve dvou inerciálních soustavách, které se navzájem pohybují rovnoměrně přímočaře) se pojí existence nové zachovávaní se veličiny, která se nazývá **spin**.

### 2.7.2. Spin

V minulé kapitole jsme viděli, že podobnou úlohu, jakou má prostorová rotace má i Lorentzova transformace. Jde také o rotaci, ale v rovině dané časovou a jednou prostorovou souřadnicí o imaginární úhel nazývaný rapidita. Rotační symetrie odpovídá symetrii systému vzhledem k pootočení, Lorentzova symetrie odpovídá stejnému chování systému v různých, navzájem se rovnoměrně pohybujících, inerciálních souřadnicových systémech. S oběma symetriemi se pojí odpovídající zákony zachování:



rotační symetrie	→	moment hybnosti <b>L</b>
Lorentzova symetrie	→	spin <b>S</b>

Spin má velmi podobné vlastnosti jako moment hybnosti, lze si ho však jen velmi těžko představit. Značně nepřesné, ale přesto ilustrativní, je představit si částici obíhající kolem centra a současně rotující kolem vlastní osy. V této klasické představě odpovídá momentu hybnosti orbitální rotace a spinu vlastní rotace. Skutečně částice ani neobíhají kolem centra, ani nerotují kolem vlastní osy. Jejich celkový rotační stav je dán dvěma veličinami – momentem hybnosti (orbitálním momentem) a spinem (vnitřním momentem). Obě veličiny se mohou skládat, potom hovoříme o spinorbitální interakci, neboli *LS* interakci či *LS* vazbě. Operátor spinu má stejné komutační relace jako moment hybnosti (2.30, 2.32)

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] &= i\hbar \hat{\mathbf{S}}_3 + \text{cyklické záměny}, \\ [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{S}}_3] &= 0 \quad . \end{aligned} \quad (2.90)$$

Stejně tak jako u momentu hybnosti zavádíme dvě kvantová čísla popisující spin: spinové číslo neboli spin  $s$  určující velikost a magnetické spinové číslo  $m_s$  určující projekci spinu do třetí osy. Pro spin lze pomocí posuvných operátorů odvodit stejně jako pro moment hybnosti vztah (2.66)

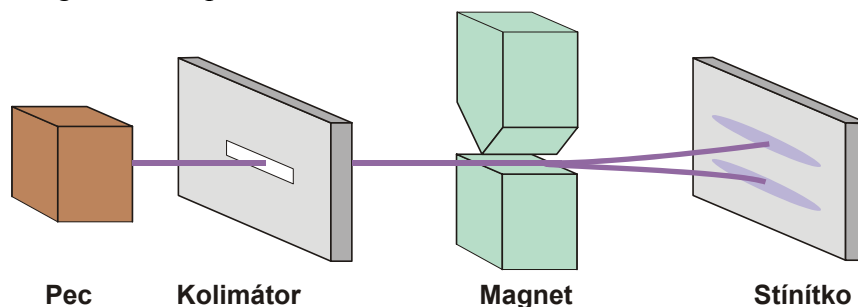
$$\begin{aligned} |S| &= \sqrt{s(s+1)} \hbar, & s &= 0, 1/2, 1, 3/2, \dots; \\ S_3 &= m_s \hbar, & m_s &= -s, -s+1, \dots, s. \end{aligned} \quad (2.91)$$

Tentokrát se ale realizují i poločíselné hodnoty, které jsme pro komutační strukturu (2.90) resp. (2.30) odvodili dříve. Hodnota spinu  $s$  je pro elementární částice neměnnou charakteristikou, stejně tak jako hodnota elektrického náboje  $Q$  nebo klidové hmotnosti  $m_0$ .

Spin některých částic	
leptony (elektron, tauon, mion, neutrina)	1/2
kvarky ( $d, u, s, c, b, t$ )	1/2
skalární mezony ( $\pi$ , kaony)	0
vektorové mezony ( $\rho$ , kaony)	1
hadrony (neutron, proton, $\Lambda$ hyperon)	1/2
hadrony ( $\Delta$ , $\Omega$ )	3/2
intermediální bosony ( $\gamma$ , $W^\pm$ , $Z^0$ , gluony)	1
gravitony	2

Přítomnost spinu zvyšuje stupeň degenerace energetických stavů. Například elektron v atomárním obalu, který má energetický stav určený hlavním kvantovým číslem, již nemá stupeň degenerace  $n^2$ , ale  $2n^2$ . Elektron má totiž spin 1/2 a jeho stavy jsou určeny čtveřicí čísel  $n, l, m, m_s$ . Projekce spinu  $m_s$  může nabývat dvou hodnot  $\pm 1/2$  a počet stavů se zdvojnásobuje.

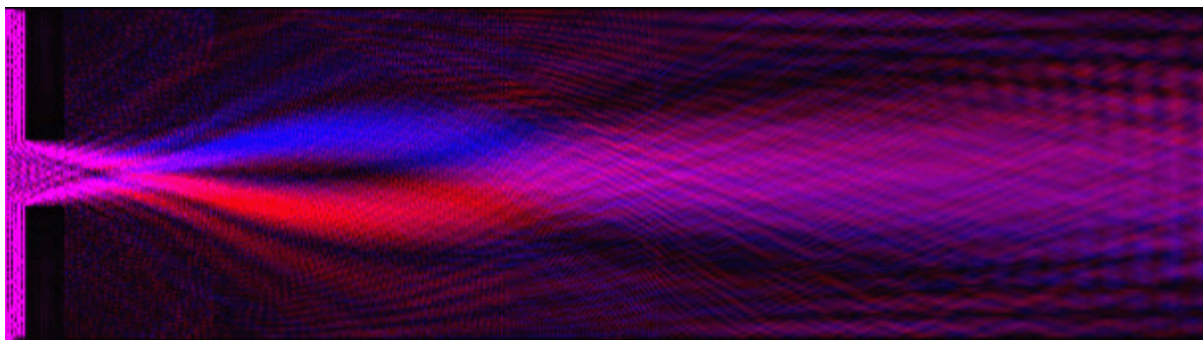
Částice s nenulovým spinem vykazují magnetický moment, aniž by měly orbitální moment hybnosti. Magnetické vlastnosti částic proto nemusí souviset jen se skutečným rotačním pohybem částic, ale i s „vlastním momentem“ – spinem. V přítomnosti nehomogenního magnetického pole reagují částice na toto pole. Stavy, které původně odpovídaly jediné energii se štěpí na multiplety blízkých energetických podhladin. Stupeň degenerace se snižuje, stavy s různým  $m$  a  $m_s$  mají různou energii. Hovoříme o tzv. sejmutí degenerace v přítomnosti magnetického pole.



Spin byl poprvé pozorován ve Stern Gerlachově experimentu (1925). Atomy stříbra odpařující se z píčky byly kolimovány do svazku procházejícího nehomogenním magnetickým polem. Na tyto elementární magnetické momenty v nehomogenním poli působí síla (1.124)  $\mathbf{F} = -\mu \nabla B$ . Magnetický moment jednotlivých stavů je různý a proto je různá i výsledná působící síla a energie daného stavu. Kdyby neexistoval spin, nebude se stav  $l = 0$  štěpit vůbec ( $m = 0$ ), stav  $l = 1$  se bude štěpit na tři různé podstavy ( $m = 0, \pm 1$ ) a na stínítku se vytvoří jedna nebo tři stříbrné skvrny (i ve vyšších stavech  $l$  půjde vždy o lichý počet skvrn).

Na stínítku však byly pozorovány dvě stříbrné skvrny, což svědčí o elektronu s orbitálním stavem  $l = 0$  a spinovým stavem  $s = 1/2$  (magnetické vlastnosti jsou určeny *dvěma* projekcemi  $m_s = \pm 1/2$ ). Sudý počet projekcí znamená poločíselné řešení komutačních relací (2.90) respektive (2.30). Hypotézu o existenci vlastního momentu elektronu, který má podobné vlastnosti jako orbitální moment, podali ještě před teoretickým objasněním spinu Uhlenbeck a Goudsmit v roce 1925.

Na následujícím obrázku je numerická simulace (Yamanashi University) Stern Gerlachova experimentu. Stavů s projekcí  $m_s = +1/2$  jsou označeny modře, stavy  $m_s = -1/2$  červeně. V malé vzdálenosti se na stínítku objeví dvě výrazné stříbrné skvrny, ve větší vzdálenosti nejsou pravděpodobnosti dopadu atomů v jednotlivých stavech výrazně prostorově oddělené.



### 2.7.3. Klein-Gordonova a Diracova Rovnice

Schrödingerova rovnice není relativistická a proto nemůže správně popsat spin. Při jejím odvození jsme používali nerelativistický tvar Hamiltonovy funkce. Výsledkem byla Schrödingerova časová rovnice (2.85), která má v  $x$  reprezentaci tvar

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V \right) \psi = 0 .$$

V rovnici se nachází první časová derivace a druhé prostorové derivace, čas a prostor není rovnoprávný, rovnice zjevně není relativistická. Relativistickou konstrukci lze vytvořit jak ve druhých (Klein-Gordonova rovnice), tak v prvních (Diracova rovnice) derivacích. Obě konstrukce mají své místo, rovnice Klein-Gordonova správně popisuje chování částic se spinem 0 a rovnice Diracova chování částic se spinem 1/2.

#### Klein-Gordonova rovnice (Oskar Klein, Walter Gordon)

Při odvození Schrödingerovy rovnice v  $x$  reprezentaci jsme hybnosti přiřadili operátor

$$\mathbf{P} \rightarrow -i\hbar \nabla .$$

Toto přiřazení je nyní nutné zobecnit na časoprostor. Hybnost souvisí se symetrií vzhledem k posunutí v prostoru, s posunutím v čase souvisí veličina nazývaná energie. Relativistické přiřazení by tedy mělo být:

$$\begin{aligned} E &\rightarrow +i\hbar \partial / \partial t , \\ \mathbf{P} &\rightarrow -i\hbar \partial / \partial \mathbf{x} . \end{aligned}$$

Odlíšné znaménko u časové proměnné souvisí s relativistickými transformačními vlastnostmi čtyřvektorů a je pro naše odvození nepodstatné (je dáno tím, že čas a prostor se v derivacích vyskytují v jmenovateli). Nyní převedeme do operátorové podoby relativistický vztah pro energii

$$E^2 = \mathbf{p}^2 c^2 + m^2 c^4 \rightarrow \left( -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hbar^2 c^2 \Delta - m^2 c^4 \right) \psi = 0 .$$

Jednoduchou úpravou získáme Klein-Gordonovu rovnici pro volnou částici

$$\left(\Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \frac{m^2 c^2}{\hbar^2}\right) \psi = 0 . \quad (2.92)$$

Klein-Gordonova rovnice je správnou relativistickou rovnicí pro volnou částici se spinem nula. Jde o vlnovou rovnici s konstantním členem, která limitně přechází v nerelativistickou Schrödingerovu rovnici.

Jde o lineární rovnici a každé její „rozumné“ řešení je možné zapsat pomocí Fourierovy transformace jako superpozici rovinných vln

$$\psi(t, \mathbf{x}) = \exp[i \mathbf{kx} - \omega t]; \quad k = \frac{2\pi}{\lambda}, \quad \omega = \frac{2\pi}{T} .$$

Po dosazení rovinné vlny do Klein-Gordonovy rovnice získáme disperzní relaci

$$\omega^2 = c^2 k^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} .$$

Standardním postupem určíme fázovou a grupovou rychlost:

$$v_f = \frac{\omega}{k} = c \sqrt{1 + \frac{m^2}{\hbar^2 k^2}} = c \sqrt{1 + \frac{m^2 \lambda^2}{4\pi^2 \hbar^2}} ,$$

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{c}{\sqrt{1 + \frac{m^2}{\hbar^2 k^2}}} = \frac{c}{\sqrt{1 + \frac{m^2 \lambda^2}{4\pi^2 \hbar^2}}} .$$

Na první pohled je zřejmé, že grupová rychlost je vždy podsvětelná. Z Hamiltonových rovnic mechaniky

$$v_g = \frac{\partial \omega}{\partial k} = \frac{\partial \hbar \omega}{\partial \hbar k} = \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}$$

plyne, že grupová rychlost vlnového balíku je analogem mechanické rychlosti pohybující se částice. Oproti tomu fázová rychlost je vždy nadsvětelná a nemá význam přenosu informace.

Mezi oběma rychlostmi je jednoduchý vztah  $v_f v_g = c^2$ . Obě rychlosti závisí na vlnové délce parciální vlny (tzv. disperze).

### Diracova rovnice (Paul Adrien Maurice Dirac)

Relativistickou konstrukci rovnice pro volnou částici, která limitně přechází na Schrödingerovu rovnici, lze také provést v prvních derivacích. Tuto úlohu řešil P. A. M. Dirac, který hledal správné koeficienty u prvních derivací:

$$\left(c_0 \frac{\partial}{\partial t} + c_1 \frac{\partial}{\partial x} + c_2 \frac{\partial}{\partial y} + c_3 \frac{\partial}{\partial z} + d\right) \psi = 0 .$$

Z transformačních požadavků Dirac odvodil, že různé koeficienty  $c_k$  musí navzájem antikomutovat. Tuto vlastnost nelze splnit, pokud jsou koeficienty obyčejná čísla. Je to ale možné, jde-li o 4 nezávislé antikomutující matice. Čtveřici nezávislých antikomutujících matic lze nalézt až pro matice  $4 \times 4$  a větší. U matic  $4 \times 4$  existuje 16 nezávislých matic, ze kterých lze vybrat čtyři antikomutující. Dirac tak odvodil rovnici

$$\left(i \hbar \gamma^\mu \partial_\mu - mc\right) \psi = 0 , \quad (2.93)$$

ve které jsou koeficienty derivací tzv. Diracovy matice

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

$$\partial_\mu = \begin{pmatrix} \partial/\partial t \\ \partial/\partial x \\ \partial/\partial y \\ \partial/\partial z \end{pmatrix}; \quad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_2 \\ \psi_3 \\ \psi_4 \end{pmatrix}$$

Diracova rovnice popisuje chování částic se spinem 1/2 (například elektron). Čtveřice  $\psi$  se nazývá *bispinor*. Má speciální transformační vlastnosti. Horní dvě komponenty bispinoru popisují stavy *částice* s projekcí spinu +1/2 a -1/2 a mají kladnou energii. Dolní dvě komponenty mají zápornou energii a Dirac je interpretoval jako stavy *antičástice* s projekcí spinu +1/2 a -1/2. Diracova rovnice je v jistém smyslu "odmocněním" Klein-Gordonovy rovnice postavené na vztahu  $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$ . Proto stavy se zápornou energií nejsou překvapením. Elegantní však bylo Diracovo vysvětlení: Všechny záporné stavy jsou zaplněny (Diracovo moře elektronů se zápornou energií). Nezaplněný stav se chová jako "díra", kterou Dirac interpretoval jako antičástici. Rozborem tvaru rovnice a jejích řešení teoreticky Dirac předpověděl existenci pozitronu ještě před jeho experimentálním objevem.

Spin se tak stal automatickou součástí relativistických rovnic kvantové teorie. Rovnice Klein-Gordonova řeší problémy skalárních polí a skalárních částic, rovnice Diracova problémy elektronu, neutrin a kvarků. Právě na ní je postavena dnešní kvantová elektrodynamika.



## 2.8. SOUSTAVA STEJNÝCH ČÁSTIC

Stejnými částicemi nazýváme dvě částice se shodnými parametry (hmotou, nábojem, spinem, ...). Z hlediska teoretické mechaniky je trajektorie těchto částic dána Hamiltonovými rovnicemi a známe-li počáteční polohy a rychlosti částic, lze přesně predikovat budoucí polohy částic a v každém okamžiku říci která je která.

V kvantové teorii můžeme předpovědět jen pravděpodobnost výskytu částice v nějakém místě a čase. Tato pravděpodobnost má maximum v místě klasické trajektorie a se vzdáleností od ní zpravidla exponenciálně ubývá a dosti daleko od klasické trajektorie je sice velmi malá, nikoli však nulová. Máme-li dvě stejné částice, nikdy si nemůžeme být jisti, která částice je která. Pravděpodobnost výskytu jedné částice v místě druhé je nenulová. Hovoříme o tom, že stejné částice jsou v kvantové teorii *nerozlišitelné*. Hamiltonův operátor se při záměně dvou stejných částic nezmění:

$$\hat{H}_{12} = \hat{H}_{21}. \quad (2.94)$$

### 2.8.1. Operátor výměny dvou částic

Pro jednoduchost budeme uvažovat jen dvě částice, u kterých sledujeme dynamickou proměnnou  $A$  (nejlépe celou úplnou množinu pozorovatelných). Stav, ve kterém má první částice hodnotu  $a_1$  a druhá částice hodnotu  $a_2$  označíme

$$|\psi\rangle = |a_1, a_2\rangle.$$

Opačnou situaci, kdy první částice má hodnotu  $a_2$  a druhá  $a_1$ , označíme

$$|\varphi\rangle = |a_2, a_1\rangle.$$

Díky nerozlišitelnosti identických částic v kvantové mechanice musí být oba stavy závislé (vyjadřují ve skutečnosti jeden a tentýž kvantový stav), proto

$$|a_2, a_1\rangle = \beta |a_1, a_2\rangle. \quad (2.95)$$

Zavedme nyní operátor vzájemné výměny částic vztahem

$$\hat{P}_{12} |a_2, a_1\rangle \equiv |a_1, a_2\rangle \quad (2.96)$$

a prozkoumejme jeho vlastnosti:

$$\begin{aligned} (1) \quad & \hat{P}^2 = \hat{1}, \\ (2) \quad & \lambda_{1,2} = \pm 1, \\ (3) \quad & [\hat{P}, \hat{H}] = 0. \end{aligned} \quad (2.97)$$

**Důkaz (1):** Dvojnásobná záměna částic vede na původní konfiguraci.

**Důkaz (2):** Vlastními vektory jsou vektory  $|\psi\rangle$  a  $|\varphi\rangle$  definované výše:

$$\hat{P}_{12} |a_1, a_2\rangle \equiv |a_2, a_1\rangle = \beta |a_1, a_2\rangle. \quad (2.98)$$

Číslo  $\beta$  je vlastním číslem operátoru výměny. Provedme nyní dvojnásobnou výměnu jednak pomocí vztahu (2.97.1) a jednak podle (2.98):

$$P^2 |a_1, a_2\rangle = \begin{cases} |a_1, a_2\rangle \\ \beta^2 |a_1, a_2\rangle \end{cases} \Rightarrow \beta^2 = 1 \Rightarrow \beta = \pm 1.$$



Hodnota vlastních čísel operátoru výměny je zřejmá již ze vztahu (2.97.1). Jde o unitární a hermitovský operátor. Vlastní čísla musí ležet na jednotkové kružnici v komplexní rovině a současně být reálná. Jediné takové hodnoty jsou  $\pm 1$ .

**Důkaz (3):** V důkazu využijeme časovou Schrödingerovu rovnici (2.85):

$$\begin{aligned} \hat{H}_{12} \hat{P}_{12} |a_1, a_2\rangle &= \hat{H}_{12} |a_2, a_1\rangle = \hat{H}_{21} |a_2, a_1\rangle = \frac{1}{i\hbar} \frac{d}{dt} |a_2, a_1\rangle = \frac{1}{i\hbar} \hat{P}_{12} \frac{d}{dt} |a_1, a_2\rangle = \\ &= \frac{1}{i\hbar} \hat{P}_{12} i\hbar \hat{H}_{12} |a_1, a_2\rangle = \hat{P}_{12} \hat{H}_{12} |a_1, a_2\rangle. \end{aligned}$$

### 2.8.2. Bosony a fermiony, Pauliho princip

Z předchozího rozboru je zřejmé, že

$$|a_2, a_1\rangle = \hat{P} |a_1, a_2\rangle = \pm |a_1, a_2\rangle. \quad (2.99)$$

Vlnová funkce dvou částic může být jen symetrická nebo antisymetrická. Neexistuje nic mezitím. Částice mohou být jen dvojího druhu: se symetrickými vlnovými funkcemi (*bosony*) nebo s antisymetrickými vlnovými funkcemi (*fermiony*) vzhledem ke vzájemné záměně. Tuto vlastnost nelze změnit ani časovým vývojem, protože operátor výměny částic podle (2.97.3) komutuje s Hamiltonovým operátorem a jeho časový vývoj je proto nulový. Vznikne-li částice jako fermion či boson, zůstává takovou až do svého zániku.

#### Bosony

Bosony mají symetrickou vlnovou funkci

$$|a_2, a_1\rangle = |a_1, a_2\rangle. \quad (2.100)$$

Budou li oba stavy stejné, tj.  $a_1 = a_2 = a$ , získáme relaci  $|a, a\rangle = |a, a\rangle$ , která je vždy splněna a proto může existovat více bosonů ve stejném kvantovém stavu. Při nízkých teplotách mají bosony dokonce snahu kumulovat se v nejnižším možném energetickém stavu a vytvářet tzv. bosonový kondenzát. Ten je známý zejména v supratekutosti a supravodivosti. Statistika, které podléhá soustava bosonů se nazývá Bose-Einsteinova statistika a zabýváme se jí v části TF3 (Statistická fyzika). Z dalšího vývoje kvantové mechaniky se ukázalo, že bosony jsou vždy částice s celočíselným spinem (0, 1, 2, ...) a pro tyto částice lze zavést kreační operátory splňující jednoduché komutační relace (viz následující kapitola). Nejtypičtějšími představiteli této rodiny jsou skalární ( $s = 0$ ) a vektorové ( $s = 1$ ) mezony, dále všechny intermediální částice (foton,  $W^\pm$ ,  $Z^0$  a gluony se spinem 0 a graviton se spinem 2).

#### Fermiony

Fermiony mají antisymetrickou vlnovou funkci

$$|a_2, a_1\rangle = -|a_1, a_2\rangle. \quad (2.101)$$

Budou li oba stavy stejné, tj.  $a_1 = a_2 = a$ , získáme relaci  $|a, a\rangle = -|a, a\rangle$ , která není nikdy splněna a proto nemůže existovat více fermionů ve stejném kvantovém stavu. Tomuto faktu se říká *Pauliho vylučovací princip*. Při nízkých teplotách obsazují fermiony postupně jednotlivé energetické hladiny, například v atomárním obalu může být na každé hladině jen tolik elektronů, kolik kvantových stavů tato hladina představuje (to je dáno stupněm degenerace). V atomárním obalu tedy nemohou existovat dva elektrony se stejnými kvantovými čísly  $n, l, m, m_s$ . Statistika, které podléhá soustava fermionů se nazývá Fermi-Diracova statistika a budeme se jí zabývat v části TF3 tohoto skriptu. Fermiony jsou vždy částice s poločíselným spinem (1/2, 3/2, ...) a pro tyto částice lze zavést kreační operátory splňující jednoduché antikomutační relace (viz následující kapitola). Nejtypičtějšími představiteli této rodiny částic jsou leptony (elektron, mion, tauon a neutrina se spinem 1/2),

kvarky ( $d, u, s, c, b, t$  se spinem  $1/2$ ), částice složené ze tří kvarků, neboli baryony (neutron, proton,  $\Lambda$  hyperon se spinem  $1/2$  a například  $\Delta$  baryony se spinem  $3/2$ ).

	<b>BOSONY</b>	<b>FERMIONY</b>
spin	celočíslný	poločíslný
vlnová funkce	symetrická	antisymetrická
statistika	Bose-Einsteinova	Fermi-Diracova
Pauliho princip	nesplňují	splňují
kreační operátory	splňují komutační relace	splňují antikomutační relace

### 2.8.3. Druhé kvantování

Představme si, že máme  $N$  stejných částic, které obsazují stavy nějaké dynamické proměnné.  $N_1$  částic je v prvním stavu (hodnota  $a_1$ ),  $N_2$  částic je ve druhém stavu (hodnota  $a_2$ ), atd. Čísla  $N_k$  nazýváme obsazovací čísla stavu  $k$ . Součet všech obsazovacích čísel je roven počtu částic:

$$\sum_k N_k = N . \quad (2.102)$$

Pro bosony je  $N_k = 0, 1, 2, 3, \dots$ . Pro fermiony je situace jednodušší. V daném stavu může být nejvýše jeden fermion, tj.  $N_k = 0, 1$ . Příslušný stav soustavy  $N$  stejných částic s danými obsazovacími čísly označíme

$$|\psi\rangle = |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle . \quad (2.103)$$

Tomuto zápisu říkáme reprezentace obsazovacích čísel. Dále se situace bude lišit pro bosony a pro fermiony.

#### Bosony

Zavedme podobně jako u harmonického oscilátoru *kreační a anihilační operátory* do stavu  $k$  definičními vztahy (normovací konstanty ponecháme stejné jako u harmonického oscilátoru):

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^+ |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle &\equiv \sqrt{N_k + 1} |N_1, N_2, \dots, N_k + 1, \dots\rangle , \\ \hat{a}_k |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle &\equiv \sqrt{N_k} |N_1, N_2, \dots, N_k - 1, \dots\rangle . \end{aligned} \quad (2.104)$$

Přímo z těchto definičních relací (pouhým zapůsobením na stavový vektor (2.103) snadno spočteme komutační relace kreačních a anihilačních operátorů:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k, \hat{a}_l] &= 0 , \\ [\hat{a}_k^+, \hat{a}_l^+] &= 0 , \\ [\hat{a}_k, \hat{a}_l^+] &= \delta_{kl} . \end{aligned} \quad (2.105)$$

Zavedme další operátor

$$\hat{N}_k \equiv \hat{a}_k^+ \hat{a}_k . \quad (2.106)$$

Tento operátor se nazývá (analogicky jako u harmonického oscilátoru) *operátor počtu částic* ve stavu  $k$ , protože zapůsobením na stavový vektor získáme počet částic ve stavu  $k$ :

$$\begin{aligned}\hat{a}_k^+ \hat{a}_k | N_1, N_2, \dots, N_k, \dots \rangle &= \sqrt{N_k} \hat{a}_k^+ | N_1, N_2, \dots, N_k - 1, \dots \rangle = \\ &= \sqrt{N_k} \sqrt{N_k} | N_1, N_2, \dots, N_k, \dots \rangle = N_k | N_1, N_2, \dots, N_k, \dots \rangle.\end{aligned}$$

Operátor celkového počtu částic potom je

$$\hat{N} \equiv \sum_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k. \quad (2.107)$$

Je-li úplná množina pozorovatelných spojitá můžeme celý postup zopakovat pro spojitě proměnné. Například v  $x$  reprezentaci lze zavést

$$\begin{aligned}\hat{\psi}^+(x) & \quad \text{kreační operátor do polohy } x, \\ \hat{\psi}(x) & \quad \text{anihilační operátor z polohy } x.\end{aligned}$$

Komutační relace budou obdobné, jen místo Kroneckerova symbolu vystupuje na pravé straně Diracova  $\delta$  distribuce (viz příloha):

$$\begin{aligned}[\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)] &= 0, \\ [\hat{\psi}^+(x), \hat{\psi}^+(y)] &= 0, \\ [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^+(y)] &= \delta(x - y).\end{aligned} \quad (2.108)$$

Operátor hustoty počtu částic se zavádí vztahem

$$\hat{N}_k \equiv \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x), \quad (2.109)$$

operátor počtu částic vyskytujících se v intervalu  $\langle a, b \rangle$  je

$$\hat{N}(a, b) \equiv \int_a^b \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) dx \quad (2.110)$$

a operátor celkového počtu částic je

$$\hat{N}(a, b) \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) dx. \quad (2.111)$$

Obdobně by se postupovalo ve třech dimenzích. Celý přechod od fyziky jedné částice k fyzice mnoha stejných částic lze formálně provést nahrazením vlnové funkce kreačními a anihilačními operátory a nahrazením hustoty pravděpodobnosti operátorem hustoty počtu částic:

$$\begin{array}{ccc} \psi(x) & \rightarrow & \hat{\psi}(x) \\ w(x) \equiv \psi^*(x) \psi(x) & \rightarrow & \hat{N}(x) \equiv \hat{\psi}^+(x) \hat{\psi}(x) \end{array}. \quad (2.112)$$

Tomuto postupu se říká *druhé kvantování*, vlnové funkce popisující systém se stávají operátory a kvantová teorie přechází v *kvantovou teorii pole*, ve které jsou právě veličiny popisující klasická spojitá pole nahrazovány operátory. Druhý řádek přiřazení (2.112) má ještě jeden důležitý význam: U soustavy stejných částic vyjadřujeme pravděpodobnost děje operátorem hustoty počtu částic, tak jak to bývá u skutečných systémů (například svazku stejných částic v experimentu). U jedné částice můžeme hovořit o hustotě pravděpodobnosti jejího výskytu  $\psi^*(x) \psi(x)$ . Celková pravděpodobnost je rovna jedné, tak, jak to odpovídá normování stavového vektoru.

**Fermiony**

U fermionů probíhá druhé kvantování obdobně. Opět zavádíme kreační a anihilační operátory  $\hat{b}_k^+$ ,  $\hat{b}_l$  do stavů  $k$  a  $l$ . Vzhledem k antisymetrii vlnových funkcí musí tyto operátory splňovat antikomutační relace:

$$|k, l\rangle = -|l, k\rangle \quad \Rightarrow \quad |k, l\rangle + |l, k\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \hat{b}_k^+ \hat{b}_l^+ + \hat{b}_l^+ \hat{b}_k^+ = 0.$$

Antikomutátory značíme složenými závorkami a relace (2.105) pro bosony tak získá tvar:

$$\begin{aligned} \{\hat{b}_k, \hat{b}_l\} &= 0, \\ \{\hat{b}_k^+, \hat{b}_l^+\} &= 0, \\ \{\hat{b}_k, \hat{b}_l^+\} &= \delta_{kl}. \end{aligned} \tag{2.113}$$

Definice spojitých operátorů i operátoru hustoty počtu částic zůstávají shodné. U fermionů jsou všude nahrazeny relace komutační relacemi antikomutačními. V mnoha situacích se chování fermionů a bosonů liší pouze znaménkem (symetrie vlnové funkce; komutační a antikomutační relace; BE a FD statistika).

Některé další informace o kvantové teorii interakcí a pokusech jejich sjednocování můžete najít online na serveru <http://www.aldebaran.cz> v sekci Astrofyzika, v pasáži věnované interakcím.

## PŘÍLOHA – ZOBECNĚNÉ FUNKCE

### P1. Diracova distribuce

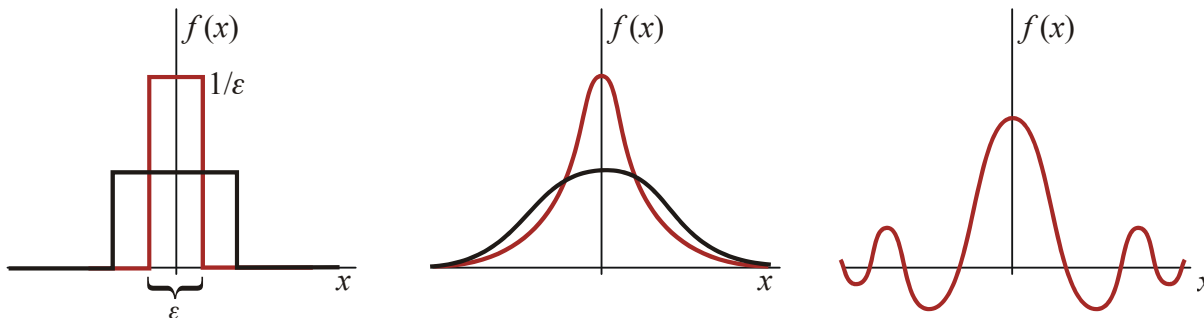
Ve fyzice se velmi často setkáváme s nutností popsat bodový náboj nebo hmotný bod. Náboj či hmotnost částice si představujeme lokalizované v jediném místě, což s sebou nese problém nekonečné hustoty náboje či hmoty v tomto místě. Řešením je zavedení tzv. zobecněných funkcí, zejména Diracovy distribuce. Ukažme si problém na lineární hustotě náboje lokalizovaného v místě  $x = 0$ :

$$\rho(x) = \begin{cases} 0; & x \neq 0 \\ \neq 0 & x = 0. \end{cases} \quad (2.114)$$

Integrál z hustoty ale musí dát celkový náboj  $Q$ :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \rho(x) dx = Q. \quad (2.115)$$

Je jasné, že hustota náboje není „normální“ funkcí. Má nenulovou hodnotu v jediném bodě a integrál z ní by přesto měl dát konečné číslo. Takové funkce ale neexistují, můžeme je zavádět jako limitu posloupností funkcí a jejich význam je jen ve skalárním součinu s jinou, tzv. testovací funkcí.



#### Posloupnost obdélníků

Zavedme si obdélníkové funkce

$$f_\varepsilon(x) \equiv \begin{cases} 1/\varepsilon, & x \in \langle -\varepsilon/2, \varepsilon/2 \rangle; \\ 0, & x \notin \langle -\varepsilon/2, \varepsilon/2 \rangle. \end{cases} \quad (2.116)$$

Všechny obdélníky mají stejnou plochu rovnou jedné a funkce mají zajímavé vlastnosti:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_\varepsilon(x) dx = 1; \quad f_\varepsilon(0) = \frac{1}{\varepsilon}; \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & \text{pro } x = 0 \\ 0 & \text{pro } x \neq 0 \end{cases}. \quad (2.117)$$

Diracovu distribuci můžeme formálně zavést jako limitu těchto obdélníkových funkcí

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_\varepsilon(x). \quad (2.118)$$

#### Posloupnost kopečků

Obdélníky z předchozí ukázky nejsou hladké funkce. To ale není nepřekonatelný problém, místo obdélníků můžeme použít funkce spojitě se všemi svými derivacemi podle vztahu

$$f_\varepsilon(x) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2}. \quad (2.119)$$

Plocha pod těmito funkcemi je rovna jedné pro každé  $\varepsilon$ , protože

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_\varepsilon(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2} dx = \frac{1}{\pi} \left[ \arctan \frac{x}{\varepsilon} \right]_{-\infty}^{+\infty} = \frac{1}{\pi} \left( \frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2} \right) = 1. \quad (2.220)$$

Pro malá  $\varepsilon$  se „kopce“ zužují a přitom se zvětšuje jejich výška:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_{\varepsilon}(x) dx = 1; \quad f_{\varepsilon}(0) = \frac{1}{\pi \varepsilon}; \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_{\varepsilon}(x) = \begin{cases} \infty & \text{pro } x = 0 \\ 0 & \text{pro } x \neq 0 \end{cases}. \quad (2.221)$$

Opět můžeme zavést Diracovu distribuci jako limitu těchto spojitých funkcí:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} f_{\varepsilon}(x). \quad (2.222)$$

### Posloupnost Dirichletových jader

Diracovu Distribuci můžeme zavést také pomocí jednoduché funkce

$$f(x) \equiv \frac{\sin x}{x}; \quad f(0) \rightarrow 1; \quad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x) dx = \pi.$$

Zavedme posloupnost

$$f_k(x) = \frac{k}{\pi} \frac{\sin kx}{kx}, \quad (2.223)$$

která má jednoduché vlastnosti

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_k(x) dx = 1; \quad f_k(0) = \frac{k}{\pi}; \quad \lim_{k \rightarrow \infty} f_k(x) = \begin{cases} \infty & \text{pro } x = 0 \\ 0 & \text{pro } x \neq 0 \end{cases}.$$

Diracovu distribuci lze zavést jako limitu funkcí

$$\delta(x) = \lim_{k \rightarrow \infty} f_k(x).$$

Poznamenejme, že funkce  $f_k(x)$  jsou známé z důkazu věty o Fourierově rozvoji do řady a nazývají se *Dirichletovo jádro*.

### Fourierův obraz jednotkové funkce

Spočtěme nejprve následující integrál:

$$\int_{-k}^{+k} e^{ikx} dk = \left[ \frac{1}{ix} e^{ikx} \right]_{-k}^{+k} = \frac{e^{ikx} - e^{-ikx}}{ix} = 2k \frac{\sin kx}{kx}.$$

Integrál až na koeficient  $\pi/2$  dává Dirichletovo jádro. Diracovu distribuci lze proto napsat jako

$$\delta(x) = \lim_{k \rightarrow \infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-k}^{+k} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{ikx} dk. \quad (2.224)$$

Integrál v nevlastních mezích chápeme právě ve smyslu uvedené limity. Diracova distribuce je tak Fourierovým obrazem jednotkové funkce.

Diracova distribuce nemá vlastnosti běžných funkcí. Přestože je její hodnota nenulová v jediném bodě, dá integrál z ní nenulovou hodnotu. To plyne z limitního charakteru zavedení této distribuce. K jejím základním vlastnostem patří:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x) dx = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(0) dx = f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) dx = f(0). \quad (2.225)$$

Důvod je snad zřejmý. Distribuce  $\delta$  je všude nulová kromě jediného bodu  $x = 0$ . Proto výsledek integrálu může ovlivnit jen hodnota funkce  $f$  v počátku. Tu však můžeme vytknout před integrál a dostaneme jako výsledek hodnotu funkce v počátku.

**Poznámka 1.:** Distribuci lze také chápat jako velmi jednoduché zobrazení, které přiřadí funkci její hodnotu v počátku (zobrazení, které přiřadí funkci číslo se nazývá *funkcionál*).

$$\hat{T}_\delta f(x) \equiv f(0); \quad \text{resp. } f(x) \xrightarrow{T_\delta} f(0).$$

**Poznámka 2.:** Distribuci lze chápat jako funkcionál daný skalárním součinem

$$\hat{T}_g f(x) \equiv \langle g | f \rangle;$$

Skalární součin působí na libovolnou funkci  $f$  z tzv. prostoru testovacích funkcí. Funkce  $g$  je pevně daná, definuje toto zobrazení a nazývá se temperovaná distribuce. Čím hezčí vlastnosti budou mít funkce z testovacího prostoru (například budou dostatečně rychle konvergovat k nule na hranicích oblasti), tím horší vlastnosti může mít funkce  $g$  definující zobrazení. Za prostor testovacích funkcí může posloužit například Sobolevův prostor.

**Poznámka 3.:** Často se hledají řešení celých rovnic „ve smyslu skalárního součinu“. Například místo rovnice

$$\Delta\varphi = f$$

řešíme rovnici

$$\langle \Delta\varphi - f | \psi \rangle = 0,$$

kde  $\varphi$  je hledané řešení a  $\psi$  je libovolná funkce z prostoru testovacích funkcí. Tato řešení se nazývají slabá řešení. Jejich třída je mnohem bohatší než byla třída řešení původní rovnice. Nacházená řešení mohou mít „divočejší“ charakter a jsou bližší fyzikální realitě. Jejich hledáním se zabývala vynikající matematika Ladyženská.

## P2. Konvoluce

Na separabilních prostorech (se spočetnou bází) můžeme zobrazení  $\hat{A}|f\rangle = |g\rangle$  psát v konkrétní reprezentaci v maticovém tvaru

$$\sum_l A_{kl} f_l = g_k. \quad (2.226)$$

Jednotkové zobrazení  $\hat{1}|f\rangle = |f\rangle$  je dáno jednotkovou maticí, jejíž prvky tvoří Kroneckerův symbol:

$$\sum_l \delta_{kl} f_l = f_k. \quad (2.227)$$

V případě neseparabilních prostorů je zobrazení dáno funkcí dvou proměnných

$$\int_{\Omega} A(x, y) f(y) dy = g(x). \quad (2.228)$$

Integrál (2.228) se nazývá *konvoluce* a označuje se

$$A * f \equiv \int_{\Omega} A(x, y) f(y) dy. \quad (2.229)$$

Konvoluce je analogií maticového násobení na neseparabilních prostorech. Roli indexů přebírají spojité proměnné  $x$  a  $y$ . Roli matice přebírá tzv. *jádro konvoluce*  $A(x, y)$ . Speciálním případem konvolucí jsou různé integrální transformace (Laplaceova, Fourierova, Abelova, atd.). Jádrem jednotkového operátoru je Diracova distribuce (je nenulová jen pro  $x = y$ ):

$$\int \delta(x - y) f(y) dy = f(x)$$

Diracova distribuce tak na neseparabilních prostorech přebírá úlohu Kroneckerova symbolu.

### P3. Greenův operátor a Greenova funkce

Napišme maticové elementy jednotkového operátoru v  $x$  reprezentaci (maticové elementy jednotkového operátoru jsou právě Diracovou distribucí):

$$\delta(x-y) = \langle y | \hat{1} | x \rangle = \sum_n \langle y | n \rangle \langle n | x \rangle = \sum_n f_n^*(y) f_n(x).$$

Ve spojitých prostorech

$$\delta(x-y) = \int_k f_k^*(y) f_k(x) dk \quad (2.230)$$

Distribuci lze tak napsat pomocí libovolných bázevých funkcí, například pomocí báze

$$|k\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{ikx},$$

dostaneme

$$\delta(x-y) = \frac{1}{2\pi} \int_k e^{-iky} e^{ikx} dk = \frac{1}{2\pi} \int_k e^{ik(x-y)} dk \quad \Rightarrow \quad \delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_k e^{ikx} dk, \quad (2.231)$$

což je výše odvozený vztah (2.224).

#### Greenův operátor

Hledejme řešení lineární operátorové rovnice s pravou stranou

$$\hat{L}|\phi\rangle = f. \quad (2.232)$$

Z věty o spektrálním rozvoji víme, že řešení je možné zapsat pomocí vlastních vektorů (tvořili ortonormální bázi) a vlastních ve tvaru

$$|\phi\rangle = \sum_l \frac{1}{\lambda_l} |l\rangle \langle l| f \rangle.$$

Přepíšme řešení takto

$$|\phi\rangle = \hat{G}|f\rangle; \quad \hat{G} = \sum_l \frac{1}{\lambda_l} |l\rangle \langle l|. \quad (2.233)$$

Operátor  $\hat{G}$  se nazývá *Greenův operátor* a je inverzním operátorem k operátoru  $\hat{L}$ . V případě operátoru se spojitým spektrem přejde sumace v integraci.

#### Greenova funkce

Zabývejme se nyní speciálním případem - rovnicí s lineárním operátorem a nenulovou pravou stranou na prostoru  $L^2$

$$\hat{L}\phi = f. \quad (2.234)$$

Hledejme nejprve řešení pro jednotkový impuls na pravé straně (bude reprezentovaný Diracovou distribucí):

$$\hat{L}G(x) = \delta(x)$$

Toto řešení se nazývá *Greenova funkce*. Obecné řešení rovnice (2.234) je konvolucí Greenovy funkce a pravé strany rovnice

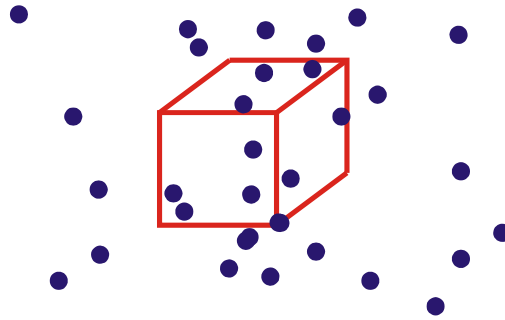
$$\phi(x) = G * f = \int G(x-y)f(y) dy.$$

Důkaz je velmi jednoduchý. Ukážeme, že působením operátoru  $\hat{L}$  na nalezené řešení dostaneme pravou stranu původní rovnice:

$$\hat{L}\phi(x) = \int \hat{L}G(x-y)f(y) dy = \int \delta(x-y)f(y) dy = f(x).$$



# *TF3: STATISTICKÁ FYZIKA*



**STUDIJNÍ TEXT PRO DOKTORSKÉ STUDIUM**

**PETR KULHÁNEK**

## PŘEDMLUVA

Chceme-li popisovat chování velkého souboru mnoha stejných systémů (klasickým příkladem je plyn složený z mnoha stejných molekul), můžeme v podstatě použít jen čtyři přístupy:

- 1) chování prohlásíme za „boží zázrak“ a dále nezkoumáme.
- 2) na základě výsledků jednoduchých experimentů se snažíme nalézt zákony, kterými se soubor řídí. Například zjistíme, že v uzavřené nádobě roste tlak s rostoucí teplotou či rostoucím počtem částic a naopak tlak plynu klesá, budeme-li zvětšovat rozměry nádoby. Kombinací těchto vztahů můžeme nalézt stavovou rovnici. Vždy však musíme mít na mysli, že jde o odvození na základě experimentů, bez zkoumání podstaty jevů samotných a ne vždy budeme zcela rozumět, kdy odvozené zákony přesně platí. Tímto přístupem se zabývá *termodynamika* a nazývá se popisný, odvozený ze zkušenosti, neboli *fenomenologický*.
- 3) pokusíme se vypočítat trajektorii každé 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 a podobně.
- 4) zákony popisující chování souboru jako celku se pokoušíme odvodit teoreticky ze znalosti chování jednotlivých členů systému statistickými metodami. Získané výsledky mají pravděpodobnostní charakter, ale u souborů mnoha částic to vůbec není na závadu, spíše naopak. Tímto přístupem se zabývá *statistická fyzika*, která je náplní tohoto skriptu.

Soubor systémů popisovaný metodami statistické fyziky může být velmi rozmanitý. Může jít o jednoduchý monoatomární plyn, o neutronovou hvězdu složenou z neutronů či o feromagnetikum složené z mnoha elementárních magnetků (spinů). Systémy popisovaného souboru mohou být jak klasické tak kvantové. Již v kvantové teorii jsme se zmínili o mimořádné důležitosti harmonického oscilátoru a proto i zde budeme věnovat pozornost souboru kvantových harmonických oscilátorů.

Samozřejmě si odvodíme jednoduché zákony ideálního plynu, stavovou rovnici, ze statistického hlediska se seznámíme s pojmem entropie. Stejně tak ale budeme studovat kvantové systémy fermionů a bosonů nebo mnoha elementárních kvantových rotátorů (například rotujících molekul).

Přeji všem hodně úspěchů při studiu této mimořádně krásné a elegantní partie fyziky, s jejímiž počátky jsou spjata jména takových velikánů, jako byl například Ludwig Boltzmann či Josiah Gibbs nebo v kvantové statistice Enrico Fermi, Paul Dirac, Satyendra Bose a Albert Einstein.

Aktuální verzi skriptu naleznete na serveru [www.aldebaran.cz](http://www.aldebaran.cz) v sekci Studium.

### 3. STATISTICKÁ FYZIKA

#### 3.1. (M) NĚCO Z MATEMATIKY

##### 3.1.1. Užitečné vztahy

Na úvod uvedu přehled vzorců užitečných ve statistické fyzice. Neučte se je zpaměti, ale naučte se je používat. Odvození naleznete v každé základní učebnici matematiky a pro nás není podstatné. Ve vztazích je  $n! = n(n-1)\dots 1$ ;  $n!! = n(n-2)(n-4)\dots 1$ .

$$\int_0^{\infty} x^n e^{-ax} dx = \frac{n!}{a^{n+1}}; a > 0; n = 1, 2, \dots \quad (\text{V1})$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n} e^{-ax^2} dx = \frac{(2n-1)!! \sqrt{\pi}}{2^{n+1} a^{(2n+1)/2}}; a > 0; n = 1, 2, \dots \quad (\text{V2})$$

$$\int_0^{\infty} x^{2n+1} e^{-ax^2} dx = \frac{n!}{2a^{n+1}}; a > 0; n = 0, 1, 2, \dots \quad (\text{V3})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}; a > 0 \quad (\text{Gaussův integrál}) \quad (\text{V4})$$

$$\int_0^{\infty} e^{-ax^2} dx = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\pi}{a}}; a > 0 \quad (\text{V5})$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2+bx} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} e^{-b^2/4a}; a > 0 \quad (\text{V6})$$

$$\sum_{n=0}^{\infty} q^n = \frac{1}{1-q}; |q| < 1 \quad (\text{součet geometrické řady}) \quad (\text{V7})$$

$$V_{2N} = \frac{\pi^N}{N!} R^{2N}; \quad (\text{objem koule v sudém počtu dimenzí}) \quad (\text{V8})$$

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x+1} dx \cong 5.6822; \quad \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x-1} dx = \frac{\pi^4}{15}. \quad (\text{V9})$$

##### 3.1.2. Pfaffovy diferenciální formy

Určitě si vzpomínáte na pojem malého přírůstku funkce více proměnných, neboli diferenciálu. Například k funkci

$$f(x, y) = x^2 + y^2 \quad (3.1)$$

je prvním diferenciálem výraz

$$df = 2x dx + 2y dy. \quad (3.2)$$

Zkusme nyní úlohu obrátit. Představme si, že napíšeme podobný výraz jako je na pravé straně rovnice (3.2) a budeme se ptát, zda existuje funkce, ke které by výraz byl prvním diferenciálem. Například

$$d\omega_1 = 2x dx + 2y dy, \quad (3.3)$$

$$d\omega_2 = 2y dx + xy dy. \quad (3.4)$$

K prvnímu výrazu taková funkce existuje, jde o funkci (3.1), zatímco k druhému výrazu takovou funkci nikdy nenajdeme. Obecně výrazy tohoto typu nazýváme Pfaffovy diferenciální formy a zapisujeme je ve tvaru

$$d\omega = a_1(x_1, \dots, x_n) dx_1 + \dots + a_n(x_1, \dots, x_n) dx_n \quad (3.5)$$

nebo použijeme-li úspornější sumační konvenci, má zápis jednodušší tvar

$$d\omega = a_k(\mathbf{x}) dx_k. \quad (3.6)$$

Položená otázka tedy je: Kdy je Pfaffova forma ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce? Odpověď je velmi zajímavá. Všechny diferenciální formy se dělí na dvě veliké skupiny. První z nich není ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce a tento typ nemá žádné „hezké“ vlastnosti. Druhý typ je ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce, má mnoho velmi elegantních vlastností a velmi snadno se s ním pracuje. Proto matematici i fyzici vždy dávají přednost diferenciálním formám ve tvaru úplného diferenciálu. Zformulujme nyní tzv. větu o pěti ekvivalencích:

**Věta o pěti ekvivalencích:** Necht' má diferenciální forma  $d\omega = a_k dx_k$  koeficienty, které mají spojitě derivace do druhého řádu včetně. Potom jsou následující tvrzení ekvivalentní:

- 1) Existuje funkce  $f(x_1, \dots, x_n)$  taková, že forma je jejím prvním diferenciálem, tj. koeficienty formy jsou parciálními derivacemi této funkce:

$$a_k = \frac{\partial f}{\partial x_k}. \quad (3.7)$$

- 2) Existuje funkce  $\phi$  taková, že křivkový integrál mezi dvěma body je jen rozdílem koncové a počáteční hodnoty této funkce (nazýváme ji potenciálem diferenciální formy):

$$\int_A^B a_k dx_k = \phi(B) - \phi(A). \quad (3.8)$$

- 3) Křivkový integrál mezi dvěma body nezávisí na křivce (cestě integrace):

$$\int_{\gamma} a_k dx_k \quad \text{nezávisí na křivce } \gamma. \quad (3.9)$$

- 4) Křivkový integrál po jakékoli uzavřené křivce z diferenciální formy je nulový:

$$\oint a_k dx_k = 0. \quad (3.10)$$

- 5) Koeficienty formy splňují relace:

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} = \frac{\partial a_l}{\partial x_k} \quad \text{pro } \forall k, l. \quad (3.11)$$

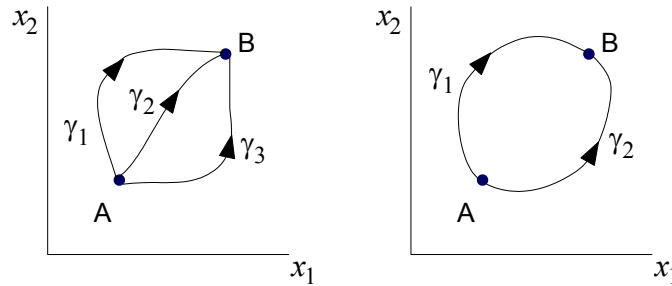
#### Poznámky:

- Máme-li diferenciální formu, buď pro ni platí všechny vlastnosti vyjmenované ve větě o pěti ekvivalencích nebo žádná z nich. Neexistuje nic mezitím.
- V důkazu věty by stačilo dokázat jen implikace „kruhem“  $1 \Rightarrow 2 \Rightarrow \dots \Rightarrow 5 \Rightarrow 1$ . Tím je možné se od každého tvrzení dostat ke kterémukoli dalšímu. Celý důkaz zde provádět nebudeme, omezíme se jen na některé části.
- Páté tvrzení je vlastně návodem jak poznat „správné“ diferenciální formy, tj. formy ve tvaru úplného diferenciálu. Ověříme-li, že platí vlastnost 5), platí už i všechny vlastnosti ostatní.

- Ve fyzice bychom řekli, že koeficienty  $a_k$  diferenciální formy tvoří konzervativní pole, jde například o pole gravitační. Křivkový integrál z gravitační síly má význam vykonané mechanické práce. Ta nezávisí na cestě mezi dvěma body, po uzavřené křivce je nulová, existuje potenciální energie a vykonaná práce je rozdílem potenciální energie v koncovém a počátečním bodě. I poslední podmínka je snadno interpretovatelná. Převědeme-li oba členy na levou stranu,

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} - \frac{\partial a_l}{\partial x_k} = 0 \quad \text{pro } \forall k, l,$$

nejde o nic jiného, než o podmínku, že rotace pole je nulová a jde tedy o nevírové pole.



**Důkaz:** Naznačme nyní důkaz některých implikací věty o pěti ekvivalencích:

**Implikace 1 ⇒ 2:**

Zkusme najít ve fázovém prostoru  $(x_1, \dots, x_n)$  integrál z diferenciální formy ve tvaru úplného diferenciálu mezi dvěma body A a B:

$$\int_A^B d\omega = \int_A^B a_k dx_k \stackrel{(1)}{=} \int_A^B \frac{\partial f}{\partial x_k} dx_k = \int_A^B df = f(B) - f(A).$$

Je-li diferenciální forma ve tvaru úplného diferenciálu, potom jsou koeficienty dány parciálními derivacemi funkce  $f$  a výsledný integrál je pouze rozdílem hodnot funkce  $f$  v počátečním a koncovém bodě. Hledaným potenciálem diferenciální formy je tak sama funkce  $f$ .

**Implikace 2 ⇒ 3:**

Záleží-li hodnota integrálu jen na koncové a počáteční hodnotě funkce  $f$ , nezávisí potom na integrační křivce. Je zcela lhostejné, zda integrujeme po křivce  $\gamma_1$ ,  $\gamma_2$  nebo  $\gamma_3$  na obrázku.

**Implikace 3 ⇒ 4:**

Uzavřenou křivku v pravé části obrázku si představíme jako součet dvou jednotlivých křivek. Musíme ale dávat pozor na orientaci křivky, která mění znaménko křivkového integrálu:

$$\oint d\omega = \int_{\gamma_1} d\omega + \int_{-\gamma_2} d\omega = \int_{\gamma_1} d\omega - \int_{\gamma_2} d\omega \stackrel{(3)}{=} 0.$$

**Implikace 1 ⇒ 5:**

Důkaz je velmi jednoduchý a je založen na záměnnosti druhých derivací funkce  $f$ :

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} \stackrel{(1)}{=} \frac{\partial}{\partial x_l} \left( \frac{\partial f}{\partial x_k} \right) = \frac{\partial}{\partial x_k} \left( \frac{\partial f}{\partial x_l} \right) = \frac{\partial a_l}{\partial x_k}.$$

**Příklad 1:** Zjistěte zda je forma  $d\omega$  ve tvaru úplného diferenciálu:

$$d\omega = 2xy dx + x^2 dy.$$

Z podmínky (5) věty o pěti ekvivalencích nalezneme „křížové“ derivace

$$a_x = 2xy; \quad a_y = x^2 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial a_x}{\partial y} = 2x; \quad \frac{\partial a_y}{\partial x} = 2x.$$

Obě derivace jsou si rovné a diferenciální forma je proto ve tvaru úplného diferenciálu. Snadno ověříte, že jde o úplný diferenciál funkce

$$f(x, y) = x^2 y. \quad \blacklozenge$$

**Příklad 2:** Zjistěte zda je forma  $d\omega$  ve tvaru úplného diferenciálu:

$$d\omega = \frac{x}{y} dx + dy.$$

Pro „křížové“ derivace máme:

$$a_x = \frac{x}{y}; \quad a_y = 1 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial a_x}{\partial y} = -\frac{1}{y^2}; \quad \frac{\partial a_y}{\partial x} = 0.$$

Derivace si rovný nejsou a proto diferenciální forma není ve tvaru úplného diferenciálu a neexistuje funkce  $f$  taková, že by forma byla jejím prvním diferenciálem.  $\blacklozenge$

Ne všechny diferenciální formy, které nejsou ve „správném“ tvaru je však třeba zatratit. Některé z nich lze snadno „spravit“. Formu z příkladu 2 lze opravit vynásobením funkcí  $y$ :

$$d\sigma = y d\omega = y \left( \frac{x}{y} dx + dy \right) = x dx + y dy.$$

Nová diferenciální forma zjevně má potenciál a je diferenciálem funkce  $(x^2 + y^2)/2$ . Zjistíme-li, že diferenciální forma není ve tvaru úplného diferenciálu, můžeme se pokusit najít tzv. integrační faktor  $\mu$ , aby nová forma

$$d\sigma = \mu(x_1, \dots, x_n) d\omega \quad (3.12)$$

již byla ve tvaru úplného diferenciálu. To se ale bohužel ne vždy musí podařit, zejména u diferenciálních forem mnoha proměnných je hledání integračního faktoru mimořádně obtížné. Pro diferenciální formy s počtem proměnných do tří ale existuje integrační faktor vždy:

**Věta:** Pro  $n \leq 3$  existuje vždy integrační faktor Pfaffovy diferenciální formy.

**Důkaz:** Zkoumejme, zda je nová forma  $d\sigma = \mu(x_1, \dots, x_n) a_k(x_1, \dots, x_n) dx_k$  ve tvaru úplného diferenciálu. Hledáme tedy funkci  $f$ , již je nová forma úplným diferenciálem, tj.

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \mu a_k.$$

To bude možné tehdy, když si budou rovné křížové derivace koeficientů:

$$\frac{\partial \mu a_k}{\partial x_l} = \frac{\partial \mu a_l}{\partial x_k} \quad \text{pro } \forall k, l.$$

Z těchto rovnic je třeba určit integrační faktor. Aby byla úloha řešitelná, musí být jejich celkový počet menší než dimenze fázového prostoru  $n$ :

$$\binom{n}{2} \leq n \quad \Rightarrow \quad \frac{n(n-1)}{2} \leq n \quad \Rightarrow \quad n \leq 3.$$

Pro diferenciální formy s více jak třemi proměnnými nemáme obecně existenci integračního faktoru žádným způsobem zaručenu.

Existují i vytríbenější věty, které za určitých podmínek umožňují existenci integračního faktoru ve více dimenzích (například Caratheodóryho princip), ale ty jsou nad rámec tohoto sylabu.

### 3.2. VYBRANÉ PARTIE Z TERMODYNAMIKY

Tato část není v žádném případě nějakým systematickým výkladem termodynamiky. Jde jen o přehled některých pojmů z tohoto oboru, které budou potřeba k porovnání výsledků termodynamiky a statistické fyziky. V termodynamice budeme hovořit o popisované *soustavě*. Ve statistické fyzice pak budeme důsledně rozlišovat *system* (jedna popisovaná entita) a *soubor* (velké množství těchto entit).

#### 3.2.1. První a druhá věta termodynamická

První věta termodynamická není nic jiného než zákon zachování energie soustavy:

*Vnitřní energie soustavy se může zvýšit dodaným teplem nebo přidáním dalších částic a snížit soustavou vykonanou prací.*

$$dU = dQ - dA + dU_N \quad (3.13)$$

Sama vnitřní energie soustavy je úplným diferenciálem. Členy na pravé straně ale úplnými diferenciály nejsou. Plyne to z mnoha experimentů. Dodané teplo  $\int dQ$  je různé po různých cestách ve fázovém prostoru  $(p, V, T)$  a závisí tak na cestě. Podobně je to i s dalšími členy na pravé straně. Podívejme se na jednotlivé členy podrobněji:

##### Práce vykonaná soustavou ( $dA$ )

Práce vykonaná soustavou může být nejrůznější povahy: mechanické, elektrické, magnetické, polarizační, elastické, atd. a výsledný výraz je součtem mnoha členů. Prozatím se ale spokojíme jen s výrazem pro mechanickou práci, elektrické a magnetické členy budeme diskutovat později.

$$dA = F dl + \dots = pS dl + \dots = p dV + \dots \quad (3.14)$$

##### Vnitřní energie spojená se změnou počtu částic ( $dU_N$ )

Přicházejí-li do soustavy další částice z vnějšku, roste vnitřní energie soustavy úměrně přírůstku částic:

$$dU_N = \mu dN. \quad (3.15)$$

Koeficient úměrnosti  $\mu$  se nazývá chemický potenciál soustavy a závisí na typu látky, ze které se soustava skládá. Z matematického hlediska o žádný skutečný potenciál nejde a název má jen historický původ. Obsahuje-li soustava více druhů částic, je přírůstek vnitřní energie spojený se změnou počtu částic dán součtem podobných členů přes všechny druhy částic (používáme sumační konvenci):

$$dU_N = \mu_k dN_k \quad (3.16)$$

##### Tepelná energie ( $dQ$ )

Teplo je jedním z ústředních pojmů termodynamiky a je proto obzvláště nepříjemnou záležitostí, že není ve tvaru úplného diferenciálu. Naštěstí lze ukázat, že vždy existuje integrační faktor, který teplo převede na diferenciální formu ve tvaru úplného diferenciálu. To je obsahem *druhé věty termodynamické*, která se vyskytuje v mnoha podobách. Pro nás bude nejdůležitější tvar:

*K diferenciálu tepla existuje integrační faktor. Je jím převrácená hodnota absolutní teploty. Nově vzniklou úplnou diferenciální formu nazýváme entropie a označujeme ji  $dS$ :*

$$dS \equiv \frac{1}{T} dQ \quad (3.17)$$

- Existují i jiné formulace druhé věty termodynamické, které mají hluboký význam pro termodynamiku, například: *Neexistuje perpetuum mobile druhého druhu (stroj trvale*

a cyklicky konající práci ochlazováním teplotní lázně). To jak spolu obě formulace souvisí může čtenář nalézt v každé učebnici termodynamiky.

- Ke správnému integračnímu faktoru lze dojít například rozбором Carnotova cyklu, kde se ukazuje, že integrace  $dQ$  závisí na cestě integrace, ale integrace veličiny  $dQ/T$  je nezávislá na cestě a je proto úplným diferenciálem.
- To že převrácená hodnota teploty je správným integračním faktorem diferenciálu tepla lze také ukázat porovnáním derivací „křížem“ u diferenciálu entropie.
- V termodynamice rovnovážných dějů má entropie význam diferenciálu tepla, který je integračním faktorem opraven na úplný diferenciál. Pro entropii platí všechny tvrzení věty o pěti ekvivalencích: integrál z entropie nezávisí na cestě, integrál po uzavřené křivce (cyklický děj) je nulový, atd. Proto vždy dáváme přednost entropii a místo diferenciálu tepla píšeme:

$$dQ = T dS \quad (3.18)$$

Po vyjádření všech veličin na pravé straně první věty termodynamické (3.13) získáme tvar, který budeme používat:

$$! \quad dU = T dS - p dV + \mu_k dN_k \quad (3.19)$$

V posledním členu používáme sumační konvenci, sčítá se přes všechny druhy částic, jejichž počet se může měnit (například v plazmatu elektrony, neutrální částice a ionty).

### 3.2.2. Termodynamické potenciály

V minulé kapitole jsme se seznámili se dvěma veličinami, které tvoří diferenciální formy ve tvaru úplného diferenciálu. Jde o vnitřní energii a entropii. Existuje však postup, kterým můžeme vytvářet celou řadu dalších, velmi užitečných úplných diferenciálních forem. Zde se zmíníme o entalpii, volné energii, Gibbsově potenciálu a grandkanonickém potenciálu. Právě význam těchto veličin je pro statistickou fyziku velmi důležitý.

#### Entalpie H

Pravou stranu diferenciálu vnitřní energie (3.19) „zúplníme“ v členu  $p dV$ . Zapišeme ho jako  $d(pV) - V dp$  a první člen převedeme na levou stranu. Tak získáme novou veličinu ve tvaru úplného diferenciálu, tzv. entalpii:

$$\begin{aligned} dU &= T dS - p dV + \mu_k dN_k, \\ dU &= T dS - d(pV) + V dp + \mu_k dN_k, \\ d(U + pV) &= T dS + V dp + \mu_k dN_k. \end{aligned}$$

Pro nově zavedenou veličinu můžeme napsat celou řadu relací. Jednak známe její definici (nalevo v závorce), známe její první diferenciál (pravá strana rovnosti). Z tvaru prvního diferenciálu poznáme, na kterých veličinách entalpie závisí. Navíc víme, že jde o úplný diferenciál, tj. parciální derivace entalpie dají koeficienty diferenciální formy na pravé straně:

$$\begin{aligned} H &\equiv U + pV, \\ dH &= T dS + V dp + \mu_k dN_k, \\ H &= H(S, p, N_k) \end{aligned} \quad (3.20)$$

$$T = \left( \frac{\partial H}{\partial S} \right)_{p, N_k}, \quad V = \left( \frac{\partial H}{\partial p} \right)_{S, N_k}, \quad \mu_k = \left( \frac{\partial H}{\partial N_k} \right)_{S, p, N_{i \neq k}}.$$



Ze znalosti entalpie můžeme určit teplotu, objem a chemické potenciály soustavy. Z první relace (3.20) můžeme také určit za pomoci entalpie vnitřní energii soustavy:

$$U = H - pV = H - p \left( \frac{\partial H}{\partial p} \right). \quad (3.21)$$

Tato rovnice se nazývá *Gibbs-Helmholtzova rovnice prvního druhu*. Z vnitřní energie pak můžeme počítat tepelné kapacity soustavy i další veličiny.

- Indexy u parciálních derivací znamenají, že příslušné veličiny jsou při derivování konstantní, zkrátka si jich nevšímáme, tak jak jsme běžně zvyklí. V termodynamice, kde děje závisí na cestě, bývá zvykem tuto cestu explicitně vyznačovat. V našem textu budeme automaticky rozumět, že veličiny, podle kterých se derivace neprovádí jsou konstantní a indexy nadále nebudeme psát.
- Písmeno H znamená velké řecké éta (souvisí se slovem enthalpy).

### Volná energie F

Budeme postupovat obdobně jako u entalpie, jen nyní ve výrazu (3.19) pro vnitřní energii zúplníme člen  $TdS$ :

$$dU = T dS - p dV + \mu_k dN_k,$$

$$d(U - TS) = -S dT - p dV + \mu_k dN_k.$$

Opět tak získáváme novou diferenciální formu ve tvaru úplného diferenciálu, kterou nazýváme *volná energie*. Stejně jako u entalpie můžeme kromě definice ihned napsat celou řadu relací:

$$F \equiv U - TS,$$

$$dF = -S dT - p dV + \mu_k dN_k,$$

$$F = F(T, V, N_k), \quad (3.22)$$

$$S = - \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right), \quad p = - \left( \frac{\partial F}{\partial V} \right), \quad \mu_k = \left( \frac{\partial F}{\partial N_k} \right).$$

Právě volná energie má ve statistické fyzice mimořádný význam. Uvidíme totiž, že tuto veličinu na základě statistických úvah budeme schopni zjistit. Volná energie je funkcí snadno představitelných veličin: teploty, objemu soustavy a počtu částic různých druhů. Poznáme-li tuto funkci, snadno pouhým derivováním určíme entropii soustavy, jejíž intuitivní pochopení často naráží na problémy. Derivováním volné energie podle objemu zjistíme tlak v soustavě, tedy stavovou rovnici a derivováním podle počtu částic můžeme určit chemické potenciály soustavy. Co více si přát? Snad ještě vnitřní energii, ale ani to není problém. Z definice volné energie  $F = U - TS$  určíme  $U = F + TS$  a dosadíme již vypočtenou hodnotu entropie:

$$U = F - T \left( \frac{\partial F}{\partial T} \right). \quad (3.23)$$

Jde o tzv. *Gibbs-Helmholtzovu rovnici druhého druhu* a je východiskem k mnoha dalším odvozeným veličinám které se počítají z vnitřní energie.

**Příklad 3:** Dokažte, že Gibbs-Helmholtzovu rovnici (3.23) lze zapsat jako  $U = \partial(\beta F) / \partial \beta$ .

### Gibbsův potenciál G

Naprostu stejným postupem jako v předchozích případech zúplníme diferenciál vnitřní energie v obou členech  $pdV$  a  $TdS$ . Výsledkem je nová veličina, Gibbsův potenciál, pro který zřejmě platí:

$$\begin{aligned}
 G &\equiv U - TS + pV, \\
 dG &= -S dT + V dp + \mu_k dN_k, \\
 G &= G(T, p, N_k),
 \end{aligned}
 \tag{3.24}$$

$$S = -\left(\frac{\partial G}{\partial T}\right), \quad V = \left(\frac{\partial G}{\partial p}\right), \quad \mu_k = \left(\frac{\partial G}{\partial N_k}\right).$$

Gibbsův potenciál má velký význam pro chemii a termodynamiku, my ho ve statistické fyzice nevyužijeme. Kulaté závorky znamenají, že veškeré ostatní veličiny (kromě té, podle které se derivuje) jsou drženy konstantní, indexy již nevypisujeme.

### Grandkanonický potenciál $\Omega$

Posledním z potenciálů, který pro nás bude mít velký význam je grandkanonický potenciál. Diferenciál vnitřní energie zúplníme v členech  $TdS$  a  $\mu dN$ . Výsledek je:

$$\begin{aligned}
 \Omega &\equiv U - TS - \mu_k N_k, \\
 d\Omega &= -S dT - p dV - N_k d\mu_k, \\
 \Omega &= \Omega(T, V, \mu_k),
 \end{aligned}
 \tag{3.25}$$

$$S = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right), \quad p = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial V}\right), \quad N_k = \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_k}\right).$$

Ve statistické fyzice souborů s proměnným počtem částic budeme schopni, alespoň teoreticky, určit právě grandkanonický potenciál. Z něho pak již snadno nalezneme entropii soustavy, tlak (stavovou rovnici) a počty jednotlivých částic. Z definice grandkanonického potenciálu potom vypočteme vnitřní energii:

$$U = \Omega + TS + \mu_k N_k = \Omega - T\left(\frac{\partial \Omega}{\partial T}\right) - \mu_k \left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu_k}\right), \tag{3.26}$$

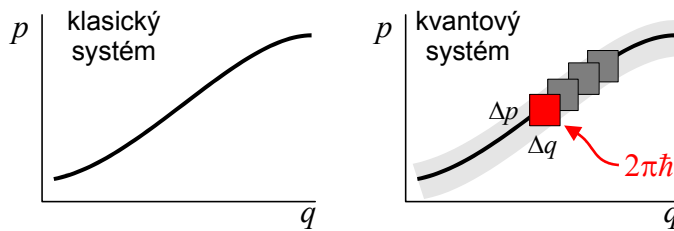
která je východiskem k výpočtu mnoha dalších veličin.

### 3.3. ZÁKLADNÍ POJMY STATISTICKÉ FYZIKY

#### 3.3.1. Slovníček pojmů

##### Systém

Systémem rozumíme jakoukoli popisovanou entitu. Sadu nezávislých parametrů nutných k popisu nazýváme zobecněné souřadnice. Standardními postupy (TF1) přiřadíme každé zobecněné souřadnici zobecněnou hybnost. Známe-li počáteční hodnoty souřadnic a hybností, můžeme předpovědět trajektorii systému za pomoci Hamiltonových rovnic. Jde-li o kvantový systém, je stav dán vektorem v Hilbertově prostoru a časový vývoj určíme působením evolučního operátoru (TF2). V tomto případě má trajektorie pravděpodobnostní charakter a je kvantově „rozmazána“ s velikostí „pixelu“  $2\pi\hbar$  danou relacemi neurčitosti.



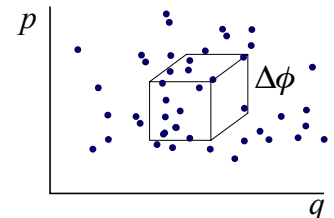
##### Fázový prostor

Fázovým prostorem nazýváme prostor zobecněných souřadnic a hybností  $(q, p)$ . Nepíšeme-li indexy, automaticky myslíme celé množiny všech zobecněných souřadnic a hybností. Proč se používají hybnosti namísto rychlostí? Je pro to hned několik důvodů:

- Chceme-li sledovat časový vývoj, používáme Hamiltonovy rovnice pro souřadnice a hybnosti.
- Svět na elementární úrovni je kvantově rozmazán díky Heisenbergovým relacím neurčitosti. Ty platí opět mezi zobecněnou souřadnicí a jí příslušející zobecněnou hybností.
- Je-li situace symetrická vzhledem k posunutí v některé zobecněné souřadnici, zachovává se příslušná zobecněná hybnost. Tyto dvě veličiny neoddělitelně patří k sobě.
- Poissonovy závorky zobecněných souřadnic a odpovídajících zobecněných hybností jsou rovny jedné, ostatní závorky jsou nulové.
- Ve statistické fyzice uvidíme, že ve fázovém prostoru s osami  $(q, p)$  se při statistickém vývoji mnoha systémů zachovává objem a soubor systémů se chová jako nestlačitelná kapalina (Liouvilleův teorém), což je pro popis velmi výhodné.

##### Soubor

Souborem rozumíme velké množství stejných systémů se stejným fázovým prostorem. Systémy mohou mít různé počáteční podmínky a ve fázovém prostoru jsou v daném okamžiku reprezentovány množinou mnoha bodů. tak jak se soubor s časem vyvíjí, jednotlivé body se přesouvají po svých fázových trajektoriích daných Hamiltonovými rovnicemi.



##### Fázový objem

Ve fázovém prostoru můžeme standardním způsobem zavést elementární objem fázového prostoru jako  $2f$  rozměrný diferenciál ( $f$  je počet stupňů volnosti)

$$d\phi = dq_1 \cdots dq_f dp_1 \cdots dp_f = \prod_k dq_k \prod_k dp_k = d^f q d^f p \quad (3.27)$$

Konečná oblast  $\Omega$  fázového prostoru má potom objem

$$\Delta\phi = \int_{\Omega} d\phi = \int_{\Omega} d^f q d^f p . \quad (3.28)$$

### Váhový faktor

Každý stupeň volnosti je ve WKB aproximaci rozmazán s hodnotou „pixelu“  $2\pi\hbar$ . Stejný rozměr také přináší každý stupeň volnosti do integrálu (3.28). Je velmi výhodné zavést bezrozměrný fázový objem výrazem

$$d\Gamma \equiv \frac{d\phi}{(2\pi\hbar)^f} ; \quad \Delta\Gamma = \int_{\Omega} \frac{d^f q d^f p}{(2\pi\hbar)^f} . \quad (3.29)$$

Tato bezrozměrná veličina se nazývá váhový faktor, využívá se zejména u kvantových systémů a má význam počtu kvantových stavů obsažených v oblasti  $\Omega$ , protože jeden stupeň volnosti zaujímá objem  $2\pi\hbar$  a jeden stav  $(2\pi\hbar)^f$ .

### Rozdělovací funkce (hustota pravděpodobnosti)

Bude-li soubor obsahovat velké množství systémů, můžeme zavést *hustotu počtu systémů* v elementu fázového objemu  $\Delta N/\Delta\phi$ . Čím bude toto číslo vyšší, tím více je v daném místě systémů a tím vyšší je pravděpodobnost nalézt v dané oblasti nějaký systém. *Hustota pravděpodobnosti* je úměrná hustotě počtu systémů ve fázovém prostoru a liší se jen normovací konstantou. Proto zavádíme společný název *rozdělovací funkce*. Právě z důvodu normování se někdy rozdělovací funkce dělí ještě celkovým počtem částic. Také je možné využít bezrozměrný fázový objem (váhový faktor) a tak jsou celkem 4 možnosti zavedení a normování rozdělovací funkce:

$$\begin{aligned} \rho &\equiv \frac{dN}{d\phi}, & dw &= \rho d\phi, & \int dw &= \int \frac{dN}{d\phi} d\phi = N; \\ \rho &\equiv \frac{1}{N} \frac{dN}{d\phi}, & dw &= \rho d\phi, & \int dw &= \frac{1}{N} \int \frac{dN}{d\phi} d\phi = 1; \\ \rho &\equiv \frac{dN}{d\Gamma}, & dw &= \rho d\Gamma, & \int dw &= \int \frac{dN}{d\Gamma} d\Gamma = N; \\ \rho &\equiv \frac{1}{N} \frac{dN}{d\Gamma}, & dw &= \rho d\Gamma, & \int dw &= \frac{1}{N} \int \frac{dN}{d\Gamma} d\Gamma = 1. \end{aligned} \quad (3.30)$$

Celková pravděpodobnost je normována buď k jedné (tak to mu je nejčastěji v matematice) nebo k celkovému počtu částic. V tomto sylabu budeme využívat druhé a čtvrté možnosti normování rozdělovací funkce (k jedné).

### Středování přes fázový prostor

Je-li známa rozdělovací funkce, můžeme průměrovat dynamické proměnné přes fázový prostor. Sečteme hodnoty dynamické proměnné  $A$  pro všechny systémy s vahou danou rozdělovací funkcí  $\rho$ :

$$\begin{aligned} \langle A \rangle &\equiv \int A(q, p) dw = \int A(q, p) \rho d\phi && \text{nebo} \\ \langle A \rangle &\equiv \int A(q, p) dw = \int A(q, p) \rho d\Gamma && \text{nebo} \\ \langle A \rangle &\equiv \sum A_n w_n . \end{aligned} \quad (3.31)$$

První případ platí, použijeme-li fázový prostor, druhý použijeme-li váhový faktor, třetí pro systém s diskretními stavy, kde prostě sčítáme přes pravděpodobnosti jednotlivých stavů.

**Příklad 4**

**Zadání:** Určete fázový objem soustavy  $N$  nezávislých lineárních harmonických oscilátorů, jejichž maximální energie je  $E$ .

**Řešení:** Hamiltonova funkce a fázový objem tohoto systému jsou

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{m_i \omega_i^2 x_i^2}{2}; \quad \phi = \int_{H \leq E} dx_1 \cdots dx_N dp_1 \cdots dp_N .$$

Provedeme-li substituce  $\xi_n = (m_n \omega_n^2 / 2)^{1/2} x_n$ ;  $\eta_n = p_n / (2m_n)^{1/2}$

zjednoduší se oblast integrace na  $2N$  rozměrnou kouli

$$\phi = \frac{2^N}{\omega_1 \cdots \omega_N} \int_{\Omega} d^N \xi d^N \eta; \quad \Omega = \{(\xi, \eta) : \xi_1^2 + \cdots + \xi_N^2 + \eta_1^2 + \cdots + \eta_N^2 \leq E\} .$$

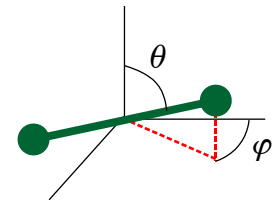
Výsledkem integrálu je objem  $2N$  rozměrné koule o poloměru  $\sqrt{E}$ :

$$\phi = \frac{2^N}{\omega_1 \cdots \omega_N} V_{2N}(\sqrt{E}) \stackrel{(V7)}{=} \frac{2^N}{\omega_1 \cdots \omega_N} \frac{\pi^N}{N!} E^N .$$

**Příklad 5**

**Zadání:** Vypočítejte fázový objem, který ohraničuje energetická nadplocha molekuly chovající se jako tuhá činka.

**Řešení:** Molekula má celkem 5 stupňů volnosti. Může se pohybovat jako celek (tento pohyb popíšeme souřadnicemi těžiště molekuly  $x, y, z$ ) a může rotovat ve dvou nezávislých úhlech (popíšeme je úhly  $\theta$  a  $\varphi$  sférických souřadnic). Fázový prostor má tak 5 souřadnicových os a 5 hybnostních os, je tedy desetirozměrný. Molekula se ve fázovém prostoru vždy nachází v některém bodě tzv. energetické nadplochy



$$E = \frac{1}{2} m (\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + m \left( \frac{l}{2} \right)^2 (\dot{\theta}^2 + \sin^2 \theta \dot{\varphi}^2) = \text{const.}$$

Standardním postupem určíme hamiltonián

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + \frac{1}{4ml^2} \left( p_\theta^2 + \frac{p_\varphi^2}{\sin^2 \theta} \right) .$$

Nyní se již můžeme pustit do výpočtu objemu oblasti fázového prostoru, kterou uzavírá energetická nadplocha:

$$\phi = \int_{H \leq E} dx dy dz d\varphi d\theta dp_x dp_y dp_z dp_\varphi dp_\theta \Rightarrow$$

$$\phi = \int_V dx dy dz \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \int_{p_1^2 + \cdots + p_5^2 \leq E} 8\sqrt{2} m^{5/2} l^2 d^5 p \Rightarrow$$

$$\phi = 32\sqrt{2}\pi V m^{5/2} l^2 E^{5/2} V_5(1) .$$

V druhém řádku jsme provedli standardní substituce, podobně jako v předchozím příkladě. Veličina  $V_5(1)$  je objem jednotkové pětirozměrné koule. ♦

### 3.3.2. Liouvilleův teorém

Proudění zpravidla popisujeme hustotou a tokem nějaké aditivní veličiny  $A$ . Může jít o tok hmotnosti, náboje, tepla, energie a podobně. Hustota a tok jsou definovány vztahy

$$\rho = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta A}{\Delta V}, \quad (3.32)$$

$$\mathbf{j} = \rho \mathbf{v}$$

a tvoří relativistický čtyřvektor  $(\rho, \mathbf{j})$  transformující se pomocí Lorentzovy matice. Veličina  $\mathbf{v}(t, \mathbf{x})$  je rychlostní pole. Jestliže se při prodělení veličina  $A$  zachovává, platí rovnice kontinuity

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0. \quad (3.33)$$

Jde o součet přes časovou i všechny prostorové derivace:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho v_k}{\partial x_k} = 0.$$

V našem případě je věc jen nepatrně složitější. Aditivní veličinou je počet systémů v souboru, hustotou je rozdělovací funkce. Tok ale musíme brát ve fázovém prostoru všech souřadnic a hybností

$$\mathbf{j} = (\rho \dot{q}_1, \dots, \rho \dot{q}_f, \rho \dot{p}_1, \dots, \rho \dot{p}_f)$$

stejně tak jako divergence v rovnici kontinuity bude obsahovat derivace přes všechny osy fázového prostoru:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho \dot{q}_k}{\partial q_k} + \frac{\partial \rho \dot{p}_k}{\partial p_k} = 0.$$

Je jasné, že pokud se systémy ve fázovém prostoru neztrácejí musí takový zákon zachování počtu systémů platit. Provedme nyní derivace součinů:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \dot{q}_k}{\partial q_k} \rho + \frac{\partial \rho}{\partial p_k} \dot{p}_k + \frac{\partial \dot{p}_k}{\partial p_k} \rho = 0.$$

Ve třetím a pátém členu využijeme Hamiltonovy rovnice

$$\dot{q}_k = \frac{\partial H}{\partial p_k}; \quad \dot{p}_k = -\frac{\partial H}{\partial q_k}$$

a dostaneme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial^2 H}{\partial q_k \partial p_k} \rho + \frac{\partial \rho}{\partial p_k} \dot{p}_k - \frac{\partial^2 H}{\partial p_k \partial q_k} \rho = 0.$$

Díky záměnnosti druhých parciálních derivací se nakonec oba zmíněné členy vyruší. Dostáváme tak rovnici kontinuity ve tvaru

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial q_k} \dot{q}_k + \frac{\partial \rho}{\partial p_k} \dot{p}_k = 0.$$

Vzhledem k tomu, že  $\rho = \rho(t, q_k, p_k)$  dostáváme tak

$$\mathbf{!} \quad \frac{d\rho}{dt} = 0. \quad (3.34)$$

Hustota (rozdělovací funkce) se nemění a pravděpodobnost výskytu systémů ve fázovém prostoru se chová jako nestlačitelná kapalina. Rovnice (3.34) se nazývá Liouvilleův teorém a má ve statistické fyzice zásadní důležitost.

**Poznámka:** Rovnici kontinuity můžeme obdobně upravit i u proudění běžné tekutiny:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \rho \mathbf{v} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \partial_k (\rho v_k) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial \rho}{\partial x_k} v_k + \frac{\partial v_k}{\partial x_k} \rho = 0.$$

První dva členy dávají úplnou derivaci hustoty a poslední lze upravit za pomoci divergence:

$$\frac{d\rho}{dt} + \rho \operatorname{div} \mathbf{v} = 0$$

Je jasné, že proudění normální tekutiny je nestlačitelné ( $d\rho/dt = 0$ ) je-li  $\operatorname{div} \mathbf{v} = 0$ .

Rozdělovací funkce je podle vztahu (3.34) konstantní. Kolik konstant máme ve výpočtu k dispozici? Počítáme-li zobecněné souřadnice a zobecněné hybnosti z Hamiltonových rovnic, vyjde řešení závislé na počátečním stavu ( $f$  polohách a  $f$  hybnostech), tj. obsahuje  $2f$  integračních konstant pohybu, přesněji  $2f-1$ , protože jednu konstantu spotřebujeme na volbu počátku časové osy  $t_0$ :

$$q_k = q_k(t, \alpha_1, \dots, \alpha_{2f-1}),$$

$$p_k = p_k(t, \alpha_1, \dots, \alpha_{2f-1}).$$

Kdybychom získané řešení dokázali beze zbytku invertovat a spočítat tyto integrační konstanty

$$\alpha_k = \alpha_k(q_1, \dots, q_f, p_1, \dots, p_f),$$

získali bychom všechny zákony zachování souboru. Bohužel ne vždy jsou definovány na celém oboru a z mechaniky máme zajištěnu existenci jen sedmi základních zákonů zachování: energie, hybnosti a momentu hybnosti. Má-li být úplná derivace rozdělovací funkce podle Liouvillova teorému konstantní, je rozumné předpokládat, že je funkcí těchto známých integrálů pohybu:

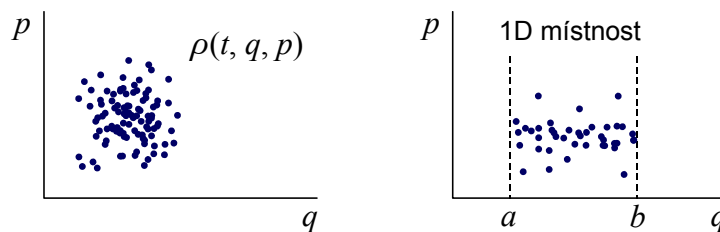
$$\rho = \rho(E, \mathbf{p}, \mathbf{L})$$

Vybereme-li souřadnicový systém pohybující se s těžištěm souboru a rotující spolu s ním, zůstává jediná nenulová veličina, na které může záviset rozdělovací funkce – energie:

!

$$\rho = \rho(E). \tag{3.35}$$

Jde o nejzávažnější důsledek Liouvillova teorému.



Díky nestlačitelnosti „proudící pravděpodobnosti“ se nemění fázový objem zaujímaný vybranou makroskopickou částí systémů. Jestliže systémy zaujímaly na začátku ve fázovém prostoru určitý objem  $\phi$ , bude se tento objem v průběhu časového vývoje různě deformovat, ale jeho velikost se nebude měnit. Tento objem (nebo váhový faktor) tedy bude opět jen funkcí energie systému

!

$$\phi = \phi(E); \quad \Gamma = \Gamma(E). \tag{3.36}$$

To je jen jiná formulace Liouvillova teorému.

### Hustota energetických stavů

Pro element pravděpodobnosti můžeme díky Liouvillovu teorému psát

$$dw = \rho d\Gamma = \rho(E) d\Gamma(E) = \rho \frac{d\Gamma}{dE} dE = \rho(E) \gamma(E) dE \quad (3.37)$$

kde jsme označili

$$\gamma(E) \equiv \frac{d\Gamma}{dE} \quad (3.38)$$

tzv. hustotu energetických stavů (vzpomeňte si, že  $\Gamma$  má význam počtu kvantových stavů v uvažovaném fázovém objemu). U spojitých problémů je hustota energetických stavů spojitou funkcí, mnohdy má však i diskrétní část:

$$\gamma(E) = g(E) + \sum_n g_n \delta(E - E_n). \quad (3.39)$$

Symbol  $\delta$  znamená Diracovu distribuci (analogie Kroneckerova delta v prostorech  $l_2$  u prostorů  $L_2$ ). Koeficienty  $g_n$  nazýváme stupeň degenerace stavu  $n$ .

### 3.3.3. Ergodický problém

Střední hodnotu dynamické proměnné  $A(q, p)$  v souboru mohou v zásadě určit dvojitým způsobem. První z možností je středování přes soubor pomocí zavedené rozdělovací funkce:

$$\langle A \rangle \equiv \int A(q, p) dw = \int A(q, p) \rho d\Gamma. \quad (3.40)$$

Druhou z možností je zvolit si jeden ze systémů souboru a průměrovat veličinu  $A$  po dostatečně dlouhou dobu v čase:

$$\bar{A} \equiv \lim_{\tau \rightarrow \infty} \frac{1}{\tau} \int_{t_0}^{t_0 + \tau} A(q(t), p(t)) dt. \quad (3.41)$$

Samozřejmě by výsledek limity neměl záviset na počátečním čase  $t_0$ . Velmi diskutovanou a velmi starou je otázka, zda obojím způsobem získáme též výsledek:

$$\langle A \rangle \stackrel{?}{=} \bar{A}. \quad (3.42)$$

Tento problém se nazývá ergodický problém, je vyřešen kladně v mnoha jednotlivých případech, ale obecné řešení pro mechanické systémy známo není. V tomto sylabu budeme budovat statistiku, veličiny budeme středovat pomocí vztahu (3.40) a budeme doufat, že i průměrování (3.41) by vedlo ke stejnému výsledku.

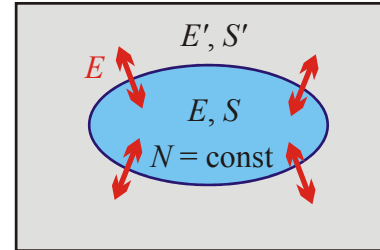


### 3.4. GIBBSOVO KANONICKÉ ROZDĚLENÍ

#### 3.4.1. Odvození rozdělení

Při odvození kanonického rozdělení použijeme následující předpoklady:

- Systém o  $N$  částicích může vyměňovat energii s okolím. Znamená to tedy například možnost výměny tepelné energie přes stěny systému.
- Počet částic systému je konstantní. Systém nevyměňuje částice s okolím, částice v něm nevznikají ani nezanikají.
- Jediným vnějším parametrem je objem systému (je dán vnějšími faktory, tvarem nádoby). Práce obecně může záviset na mnoha vnějších faktorech:  $dA = A_k da_k$ . Veličiny  $A_k$  nazýváme zobecněné síly a veličiny  $a_k$  vnější parametry. V našem jednoduchém příkladě máme jediný člen  $dA = pdV$ .
- Energie vázaná na povrch soustavy je zanedbatelná vzhledem k celkové energii soustavy (zanedbáme povrchové jevy).
- Budeme podle Liouvillova teorému předpokládat, že rozdělovací funkce i fázový objem závisí jen na energii soustavy.



První věta termodynamická bude pro tuto soustavu mít jednoduchý tvar

$$dU = TdS - pdV. \quad (3.43)$$

Vzhledem k tomu, že počet částic soustavy se nemění, je poslední člen v (3.19) nulový. Proměnné okolí budeme označovat čárkou. Pravděpodobnost, že systém i s okolím nalezneme ve stavu s určitou energií je dána aditivností energie a multiplikativností fázového objemu:

$$dw_{\text{tot}} = \rho(E_{\text{tot}}) d\Gamma_{\text{tot}} = \rho(E + E') d\Gamma d\Gamma'. \quad (3.44)$$

Pro nezávislé subsystémy se ale pravděpodobnosti násobí a mělo by proto také platit:

$$dw_{\text{tot}} = dw(E) dw(E') = \rho(E) d\Gamma(E) \rho(E') d\Gamma(E') = \rho(E) \rho(E') d\Gamma d\Gamma'. \quad (3.45)$$

Porovnáním obou možností zjistíme, že pro rozdělovací funkci musí platit vztah

$$\rho(E + E') = \rho(E) \rho(E'). \quad (3.46)$$

V matematice se ukazuje, že existuje jediná funkce s touto vlastností a tou je obecná exponenciála

$$\rho(E) = e^{c_1 + c_2 E}. \quad (3.47)$$

V exponenciále označíme konstanty lineární kombinace písmeny  $\alpha$  a  $\beta$ . U energie zvolíme záporné znaménko. Volba znaménka je v tuto chvíli nepodstatná a kdyby nebyla správná,  $\beta$  by vyšlo záporné. Uvidíme, že ve skutečnosti s rostoucí energií systému klesá pravděpodobnost jeho výskytu a proto je minus před energií správné. Uveďme výraz jak pro spojité, tak pro diskrétní případ:

$$\rho(E) = e^{\alpha - \beta E}; \quad w_n = e^{\alpha - \beta E_n}. \quad (3.48)$$

Hodnoty konstant  $\alpha$  a  $\beta$  odvodíme z podmínky, že statistické výsledky musí limitně přecházet ve známé zákony termodynamiky. V diskrétním případě závisí možné hodnoty energetického spektra na vnějších parametrech systému, v našem případě na objemu zaujímaném systémem, tj.  $E_n = E_n(V)$ .

### 3.4.2. Konstanty rozdělení

Určeme nyní konstanty  $\alpha$  a  $\beta$ . Nalezneme diferenciál střední hodnoty energie a porovnáme ho s první větou termodynamickou. Odvození je možné provést spojitě nebo diskrétně, například pro střední hodnotu energie můžeme ve spojitém případě psát

$$U = \int E dw = \int E \rho(E) d\Gamma = \int E \rho(E) \gamma(E) dE \quad (3.49)$$

a v diskrétním

$$U = \sum E_n w_n = \sum E_n(V) w_n. \quad (3.50)$$

My se v tomto odvození budeme držet diskrétního případu a naopak některé příští odvození pro změnu povedeme spojitě. Nalezneme tedy diferenciál výrazu (3.50):

$$dU = \sum \left[ \left( \frac{\partial E_n}{\partial V} dV \right) w_n \right] + \sum E_n dw_n.$$

Hustota energie  $n$ -tého stavu odpovídá tlaku generovanému  $n$ -tým stavem (až na znaménko). Tlak je vždy hustotou energie:  $p = \Delta F / \Delta S = \Delta F \Delta l / (\Delta S \Delta l) = \Delta E / \Delta V$ . Znaménko se volí záporné (síla je minus gradient energie). V druhém výrazu použijeme geniální trik, energii  $E_n$  vyjádříme z rozdělovací funkce (3.48):

$$dU = - \sum (p_n w_n dV) + \sum \left( \frac{\alpha}{\beta} - \frac{1}{\beta} \ln w_n \right) dw_n.$$

V součtech ponecháme jen výrazy přes které se opravdu sčítá, ostatní členy vytkneme:

$$dU = - \sum (p_n w_n) dV + \frac{\alpha}{\beta} d \sum w_n - \frac{1}{\beta} \sum (\ln w_n dw_n).$$

V prvním výrazu je střední hodnota parciálních tlaků rovna celkovému tlaku. V druhém výrazu je součet všech pravděpodobností roven jedné a diferenciál jednotky je nulový. Třetí výraz upravíme podle vztahu  $f dg = d(fg) - g df$ :

$$dU = - p dV - \frac{1}{\beta} d \sum (w_n \ln w_n) + \frac{1}{\beta} \sum (w_n d \ln w_n)$$

Nyní ukažme, že poslední výraz je nulový:

$$\sum (w_n d \ln w_n) = \sum \left( w_n \frac{1}{w_n} dw_n \right) = \sum dw_n = d \sum w_n = d(1) = 0.$$

Ze statistických úvah jsme tak konečně dostali výraz pro diferenciál energie, který můžeme porovnat s první větou termodynamickou  $dU = p dV + T dS$ :

$$dU = - p dV - \frac{1}{\beta} d \sum (w_n \ln w_n) \quad (3.51)$$

Je zřejmé, že koeficient  $\beta$  musí být úměrný převrácené hodnotě absolutní teploty a suma v druhém výrazu entropii. To platí až na libovolný multiplikativní koeficient, který musí být určen experimentálně:

$$\beta = \frac{1}{kT}, \quad (3.52)$$

!

$$S = - k \sum (w_n \ln w_n). \quad (3.53)$$

#### Poznámky:

- Tak jako v každé fyzikální teorii je i ve statistice jedna volitelná konstanta  $k$ . Nazýváme ji Boltzmannova konstanta a volbou její hodnoty můžeme vytvářet různé statistické teorie. Jen jedna z nich bude ale odpovídat reálné přírodě. Jde o stejnou situaci, jakou jsme poznali v kvantové teorii při zavedení Planckovy konstanty. Po porovnání prvních odvozených vztahů

(například stavové rovnice ideálního plynu) se skutečností zjistíme hodnotu Boltzmannovy konstanty

$$k = 1,38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1} \quad (3.54)$$

- Navíc jsme získali statistický výraz pro entropii (3.53), který středuje logaritmus pravděpodobnosti  $n$ -tého stavu. Z hlediska statistiky je až na konstanty entropie rovna střední hodnotě logaritmu pravděpodobnosti:

$$S = -k \langle \ln w \rangle$$

- Vztah mezi entropií a pravděpodobností realizace systému odvodil již L. Boltzmann a je znám jako Boltzmannova rovnice ve tvaru

$$S = -k \ln P \quad (3.55)$$

Porovnáním s první větou termodynamickou jsme zjistili význam koeficientu  $\beta$  v rozdělovací funkci. Dalšími úpravami statistické definice entropie a opětovným porovnáním s termodynamikou získáme ještě význam koeficientu  $\alpha$ :

$$\begin{aligned} S = -k \sum [w_n \ln w_n] &= \left| w_n = e^{\alpha - \beta E_n} \Rightarrow \ln w_n = \alpha - \beta E_n \right| = -k \sum [w_n (\alpha - \beta E_n)] = \\ &= -k \alpha \sum w_n + k \beta \sum E_n w_n . \end{aligned}$$

Interpretace součtů je zjevná a tedy můžeme psát:

$$S = -k \alpha + k \beta U$$

Snadno nyní určíme neznámý koeficient  $\alpha$ :

$$\alpha = \frac{-S + k \beta U}{k} = \frac{-S + U/T}{k} = \frac{U - TS}{kT} = \frac{F}{kT} .$$

Získali jsme tak hodnoty obou koeficientů:

$$! \quad \alpha = \frac{F}{kT} ; \quad \beta = \frac{1}{kT} . \quad (3.56)$$

Rozdělovací funkce tedy je (pro spojitý i diskrétní případ):

$$! \quad \rho(E) = e^{\frac{F-E}{kT}} ; \quad w_n(E) = e^{\frac{F-E_n}{kT}} . \quad (3.57)$$

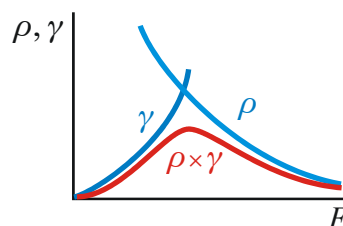
Často výrazy zkracujeme právě pomocí koeficientu  $\beta = 1/kT$ :

$$! \quad \rho(E) = e^{\beta(F-E)} ; \quad w_n(E) = e^{\beta(F-E_n)} . \quad (3.58)$$

Odvozené vztahy se nazývají Gibbsovo kanonické rozdělení podle významného amerického fyzika Josiaha Gibbse (1839-1903), který se zabýval termodynamikou a statistickou fyzikou. Mimo jiné také zformuloval známé Gibbsovo pravidlo fází platné při změně skupenství.

V kvantové teorii se používá místo rozdělovací funkce operátor hustoty  $\hat{\rho} = e^{-\beta(F-\hat{H})}$ .

**Poznámka:** Ve výrazu pro pravděpodobnost  $dw = \rho d\Gamma = \rho \gamma dE$  je rozdělovací funkce  $\rho$  exponenciálně klesající funkcí energie. Naopak hustota energetických stavů  $\gamma$  s rostoucí energií roste. Výsledná hustota pravděpodobnosti proto má maximum v okolí určité charakteristické energie, která je v systému zastoupena s největší pravděpodobností.



### 3.4.3. Partiční suma

Nyní známe obě dvě konstanty rozdělení a z normovací podmínky můžeme určit volnou energii. A to je právě klíč k vítězství. Známe-li volnou energii, můžeme jejím derivováním zjistit mnoho informací o systému, například stavovou rovnici. Výpočet volné energie provedeme paralelně v diskrétním i spojitém případě, abyste oba postupy mohli porovnat. V levé části bude diskrétní výpočet, v pravé spojitý:

$$\begin{aligned} \sum w_n = 1 &\Rightarrow \int \rho d\Gamma = 1 \Rightarrow \\ \sum e^{\beta(F - E_n)} = 1 &\Rightarrow \int e^{\beta(F - E)} d\Gamma = 1 \Rightarrow \\ \sum e^{-\beta E_n} = e^{-\beta F} &\Rightarrow \int e^{-\beta E} d\Gamma = e^{-\beta F} \Rightarrow \\ \ln\left(\sum e^{-\beta E_n}\right) = -\beta F &\Rightarrow \ln\left(\int e^{-\beta E} d\Gamma\right) = -\beta F \Rightarrow \\ F = -kT \ln\left(\sum e^{-\beta E_n}\right) & \quad F = -kT \ln\left(\int e^{-\beta E} d\Gamma\right) \end{aligned}$$

Veličina nacházející se v logaritmu v kulaté závorce se nazývá *partiční funkce* (partiční suma, stavová suma) a je ústřední veličinou statistické fyziky, označujeme ji  $Z$ . Vzhledem k tomu, že argument logaritmu by měl být bezrozměrný, je použití váhového faktoru namísto fázového objemu vhodnější. V podstatě každý statistický výpočet začíná určením partiční (stavové) sumy. Popišme si nyní základní konstrukci statistického výpočtu:

#### Schéma statistického výpočtu:

1. Zjistíme, jakých energií  $E_n$  může systém nabývat. V klasickém případě jde o všechny hodnoty energií, které se v systému mohou vyskytnout. V kvantovém případě musíme určit spektrum Hamiltonova operátoru (například řešit Schrödingerovu rovnici).
2. Nalezneme partiční funkci  $Z$  jako součet tzv. Boltzmannových faktorů  $e^{-\beta E}$  přes celý obor energetického spektra:

$$Z = \sum e^{-\beta E_n}; \quad \text{resp.} \quad Z = \int e^{-\beta E} d\Gamma. \quad (3.59)$$

Právě tento krok může být velmi, velmi komplikovaný. Často se řeší různými grafickými či numerickými metodami. Je třeba počítat skutečně všechny možnosti a na žádnou nezapomenout.

3. Logaritmováním nalezneme volnou energii  $F$ :

$$F = -kT \ln Z. \quad (3.60)$$

4. Ze znalosti volné energie určíme entropii, tlak (stavovou rovnici) a chemický potenciál systému podle vztahu (3.22):

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right), \quad p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right), \quad \mu_k = \left(\frac{\partial F}{\partial N_k}\right).$$

5. Určíme další odvozené veličiny, tj. vnitřní energii a její derivace (například měrná tepla, susceptibilitu, atd.). Výchozím bodem může být Gibbs Helmholtzova rovnice (3.23) pro výpočet vnitřní energie ze známé volné energie.

$$U = F + TS = F - T \left(\frac{\partial F}{\partial T}\right).$$

**Význam partiční sumy:**

- Partiční suma je součtem všech Boltzmannových faktorů přes možné hodnoty energie

$$Z = \sum e^{-\beta E_n} ; \quad \text{resp.} \quad Z = \int e^{-\beta E} d\Gamma .$$

- V kvantové teorii lze partiční sumu zapsat takto:

$$Z = \sum e^{-\beta E_n} = \sum_n \langle n | e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle = \text{Tr} \left( e^{-\beta \hat{H}} \right) .$$

Tr znamená stopu (součet diagonálních prvků v nějaké reprezentaci) funkce operátoru uvedeného v závorce. Výsledný výraz je znám jako Slaterova rovnice. Je pojmenovaná podle významného amerického fyzika Johna Clarka Slatera (1900-1976), který se zabýval především kvantovou teorií.

- Partiční suma má jednoznačný vztah k volné energii a můžeme ji určit z experimentálního měření volné energie:

$$F = -kT \ln Z \quad \Rightarrow \quad Z = e^{-\beta F} .$$

- Partiční suma je převrácenou hodnotou normovací konstanty v rozdělovací funkci, stačí dosadit za  $F$  z předchozího vztahu:

$$\rho(E) = e^{\beta(F-E)} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E} ; \quad w_n(E) = e^{\beta(F-E_n)} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_n} .$$

- Partiční suma je Laplaceovým obrazem hustoty energetických stavů  $\gamma(E)$ :

$$Z = \int_0^\infty e^{-\beta E} d\Gamma = \int_0^\infty e^{-\beta E} \gamma(E) dE .$$

Naopak, známe-li partiční sumu (například z experimentálního změření volné energie), dostaneme po provedení inverzní Laplaceovy transformace hustotu energetických stavů:

$$\gamma(E) = \frac{1}{2\pi i} \int_{\sigma-i\infty}^{\sigma+i\infty} e^{\beta E} Z(\beta) d\beta .$$

Nyní již víme vše, co je třeba k zahájení a někdy i k úspěšnému dokončení statistického výpočtu. V příští kapitole se s tímto postupem seznámíme na jednoduchých příkladech.

**Příklad 6:** Dokažte, že kanonické rozdělení má maximum při  $E_n = \langle E \rangle$ .

**Řešení:** Uvažujme diskrétní kanonické rozdělení

$$w_n(\beta) = A e^{-\beta E_n} .$$

Z normovací podmínky nalezneme normovací konstantu  $A$ :

$$\sum w_k = 1 \quad \Rightarrow \quad A = \frac{1}{\sum_k e^{-\beta E_k}} \quad \Rightarrow \quad w_n = \frac{e^{-\beta E_n}}{\sum_k e^{-\beta E_k}} .$$

Tak, jak už víme z dřívějších, je normovací konstanta rovna převrácené hodnotě partiční sumy. Nyní najdeme podmínku pro maximum vzhledem k parametru  $\beta$ :

$$\frac{\partial w_n}{\partial \beta} = 0 \quad \Rightarrow \quad E_n = \sum_k E_k w_k \quad \Rightarrow \quad E_n = \langle E \rangle .$$

Nejvíce je v systému zastoupen stav odpovídající střední hodnotě energie. ♦

### 3.5. JEDNODUCHÉ PŘÍKLADY

#### 3.5.1. Rozdělovací funkce částice ve vnějším poli

V tomto prvním jednoduchém příkladu se zatím omezíme jen na prozkoumání vlastností rozdělovací funkce. Teprve v následujícím příkladu provedeme kompletní statistický výpočet od začátku do konce.

Budeme předpokládat, že systém tvoří jedna jediná částice ve vnějším potenciálním poli  $V(x, y, z)$ . Souborem je mnoho takovýchto částic. Fázovým prostorem bude  $n$ -tice souřadnic a hybností  $(x, y, z, p_x, p_y, p_z)$ . Energie systému má tvar

$$E = \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z).$$

Element pravděpodobnosti bude

$$dw = \rho d\phi = e^{\beta(F-E)} d^3x d^3p = K e^{-\beta E} d^3x d^3p.$$

Po dosazení za energii získáváme výslednou rozdělovací funkci:

$$dw = K \exp \left[ -\beta \left( \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x, y, z) \right) \right] d^3x d^3p. \quad (3.61)$$

Vzhledem k vlastnostem exponenciely vidíme, že výsledek lze napsat jako součin pravděpodobnosti pro souřadnice a pro hybnosti, tj. rozdělení souřadnic a hybností je nezávislé

$$dw = dw(\mathbf{x}) dw(\mathbf{p}) ;$$

$$dw = K_1 \exp \left[ -\frac{V(x, y, z)}{kT} \right] d^3x \times K_2 \exp \left[ -\frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2mkT} \right] d^3p.$$

V případě vhodného tvaru potenciální energie se může rozdělení rozpadnout dokonce i na násobky pravděpodobností v jednotlivých osách. Pro hybnosti to jde vždy automaticky.

$$dw(\mathbf{p}) = dw(p_x) dw(p_y) dw(p_z) ;$$

$$dw(\mathbf{p}) = K_x \exp \left[ -\frac{p_x^2}{2mkT} \right] dp_x \times K_y \exp \left[ -\frac{p_y^2}{2mkT} \right] dp_y \times K_z \exp \left[ -\frac{p_z^2}{2mkT} \right] dp_z.$$

Konstanty rozdělení můžeme snadno určit z normovací podmínky  $\int dw = 1$ , která platí pro každou část rozdělení zvlášť.

#### Barometrická formule

Zabývejme se nyní rozdělením poloh částic v tíhovém poli  $V = mgy$ . Hmotnost jedné částice je  $m$ , výška nad povrchem  $y$ . Pravděpodobnost výskytu částice bude

$$dw(x, y, z) = K \exp \left[ -\frac{mgy}{kT} \right] dx dy dz.$$

Je evidentní, že pravděpodobnost výskytu částice nezávisí na souřadnicích  $x, z$ , přes které můžeme integrovat a výsledek integrace zahrnout do normovací konstanty. Zůstane jen pravděpodobnost výskytu částice ve svislém směru:

$$dw(y) = C \exp \left[ -\frac{mgy}{kT} \right] dy. \quad (3.62)$$

Hustotu pravděpodobnosti výskytu částice  $dw/dy$  sleduje například koncentrace částic nad zemí:

$$n(y) = n_0 \exp\left[-\frac{mgy}{kT}\right]. \quad (3.63)$$

Jde o známou Boltzmannovu *barometrickou formuli*, která popisuje pokles počtu částic s výškou. S tím souvisí i pokles tlaku v atmosféře.

**Příklad 7:** Určete hustotu plynu ve válci o poloměru  $R$  a délce  $L$ , který rotuje kolem své osy úhlovou rychlostí  $\omega$ .

**Řešení:** Potenciální energie jedné rotující částice je záporně vzatá rotační energie

$$V(r) = -\frac{J\omega^2}{2} = -\frac{mr^2\omega^2}{2}.$$

Z barometrické formule máme okamžitě koncentraci částic

$$n(r) = n_0 \exp\left[\frac{mr^2\omega^2}{2kT}\right]. \quad \blacklozenge$$

### Boltzmannovo rozdělení

Zabývejme se nyní rozdělením jedné složky hybnosti či rychlosti. Pro konkrétnost uvažujme projekci hybnosti či rychlosti do osy  $x$ , mohli bychom však zvolit libovolnou osu:

$$dw(p_x) = K \exp\left[-\frac{p_x^2}{2mkT}\right] dp_x$$

Určeme nejprve konstantu rozdělení z normovací podmínky (integrace podle vztahu V4):

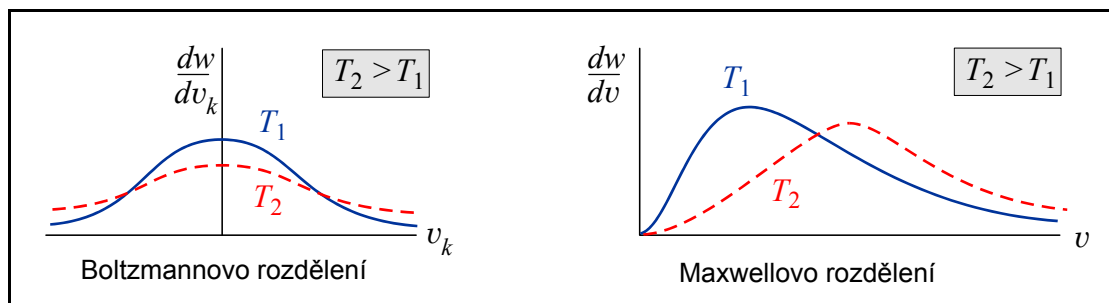
$$\begin{aligned} \int dw(p_x) &= 1 \quad \Rightarrow \\ \int_{-\infty}^{+\infty} K \exp\left[-\frac{p_x^2}{2mkT}\right] dp_x &= 1 \quad \Rightarrow \\ K\sqrt{2\pi mkT} &= 1 \quad \Rightarrow \\ K &= 1/\sqrt{2\pi mkT}. \end{aligned}$$

Boltzmannovo rozdělení v hybnostech či rychlostech má tedy charakter Gaussova balíku  $y = \exp(-x^2)$ :

$$\begin{aligned} dw(p_x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi mkT}} \exp\left[-\frac{p_x^2}{2mkT}\right] dp_x; \\ dw(v_x) &= \frac{m}{\sqrt{2\pi mkT}} \exp\left[-\frac{mv_x^2}{2kT}\right] dv_x. \end{aligned} \quad (3.64)$$

Nejpravděpodobnější projekcí hybnosti nebo rychlosti je nulová hodnota, to je dáno chaotičností pohybu. Čím vyšší je teplota, tím vyšší je podíl částic s vysokými rychlostmi.

Kladné i záporné projekce jsou zastoupeny stejně, rozdělení je symetrické. Plocha pod rozdělením je vždy rovna jedné, tj. celkové pravděpodobnosti výskytu částice.

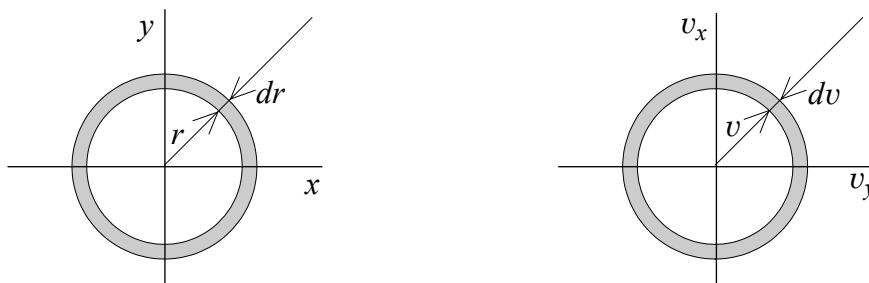


**Maxwellovo rozdělení**

V tomto odstavci se budeme zabývat rozdělením velikosti celkové rychlosti částice, tzv. Maxwellovým rozdělením. Nejprve napíšeme rozdělení ve všech třech rychlostech, které je součinem rozdělení v jednotlivých osách:

$$dw(\mathbf{v}) = dw(v_x)dw(v_y)dw(v_z) = \frac{m^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} \exp\left[-\frac{m(v_x^2 + v_y^2 + v_z^2)}{2kT}\right] dv_x dv_y dv_z .$$

Přejdeme-li v prostoru  $(x, y, z)$  k sférickým souřadnicím a přes úhlové proměnné integrujeme, zůstane jediná proměnná – vzdálenost od počátku  $r$  a objemový element bude  $dV = 4\pi r^2 dr$ . Nyní provedeme tutéž operaci, ale v rychlostním prostoru, tj. s osami označenými  $(v_x, v_y, v_z)$ . Výsledek je analogický. Zůstane velikost rychlosti  $v$  a objemový element bude  $dv_x dv_y dv_z = 4\pi v^2 dv$ .



Nyní již můžeme snadno napsat rozdělení ve velikostech rychlostí (Maxwellovo rozdělení)

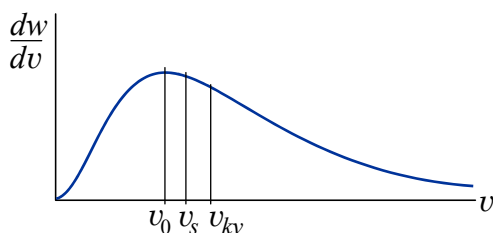
!

$$dw(v) = \frac{4\pi m^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} v^2 \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] dv . \tag{3.65}$$

Jde o funkci typu  $y = x^2 \exp[-x^2]$ . Pravděpodobnost nalézt částici s konkrétní rychlostí má maximum závislé na teplotě. Je málo pravděpodobné nalézt částici s nízkou i s vysokou rychlostí. U vysokých rychlostí pravděpodobnost nalezení částice s touto rychlostí exponenciálně klesá. Částice s vysokými rychlostmi z chvostu Maxwellova rozdělení mohou mít únikovou rychlost od Země a zemská atmosféra je ztrácí. Prohlédněte si hustotu pravděpodobnosti  $dw/dv$  na obrázku.

**Typické rychlosti**

Ze znalosti rozdělení můžeme snadno určit nejpravděpodobnější hodnotu rychlosti (při ní má rozdělení maximum), střední hodnotu rychlosti (dělí





plochu pod křivkou rozdělení na dvě stejné poloviny) a střední kvadratickou rychlost (ta je důležitá pro určení středních kvadratických fluktuací, kterým budeme věnovat samostatnou kapitolu). Nejpravděpodobnější rychlost určíme jako maximum hustoty pravděpodobnosti:

$$\frac{d}{dv} v^2 \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] = 0 \quad \Rightarrow \quad v_0 = \sqrt{\frac{2kT}{m}}.$$

Střední hodnotu rychlosti spočteme z definice, která vede na integrál typu (V3):

$$v_s = \langle v \rangle = \int_0^\infty v dw(v) = \frac{4\pi m^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int_0^\infty v^3 \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] dv = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}}.$$

Střední kvadratická hodnota vede na jednoduchý integrál typu (V2):

$$v_{kv} = \sqrt{\langle v^2 \rangle} = \sqrt{\int_0^\infty v^2 dw(v)} = \sqrt{\frac{4\pi m^3}{(2\pi mkT)^{3/2}} \int_0^\infty v^4 \exp\left[-\frac{mv^2}{2kT}\right] dv} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}.$$

Všechny tři charakteristické rychlosti se liší nepatrně a jsou řádově shodné:

$$! \quad v_0 = \sqrt{\frac{2kT}{m}} \quad ; \quad v_s = \sqrt{\frac{8kT}{\pi m}} \quad ; \quad v_{kv} = \sqrt{\frac{3kT}{m}}. \quad (3.66)$$

S rostoucí teplotou se hodnota střední rychlosti částic zvyšuje.

### 3.5.2. Ideální plyn

Nyní poprvé provedeme kompletní statistický výpočet podle postupu uvedeném v kapitole 3.4.3. Systémem bude  $N$  stejných klasických částic, které neinteragují ani vzájemně, ani s okolím (potenciální energie je nulová). Souborem by bylo mnoho těchto systémů (systémem je například celá nádoba naplněná plynem, soubor je mnoho těchto nádob). Rozhodli jsme se tedy popisovat nádobu jako celek, to nám umožní například zjistit tlak v této nádobě. Postupujme nyní přesně podle dříve uvedeného schématu:

**1. energetické spektrum.** Energie systému může nabývat libovolné kladné hodnoty a je dána pouze součtem kinetických energií všech částic:

$$E = \sum_{a=1}^N \frac{\mathbf{p}_a^2}{2m}.$$

**2. partiční funkce.** Nalezneme partiční funkci jako součet všech Boltzmannových faktorů:

$$Z = \int e^{-\beta E} d\Gamma = \int \exp\left[-\sum_{a=1}^N \frac{\mathbf{p}_a^2}{2mkT}\right] \frac{d^{3N}x d^{3N}p}{(2\pi\hbar)^{3N}},$$

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} V^N \int \exp\left[-\sum_{a=1}^N \frac{\mathbf{p}_a^2}{2mkT}\right] d^{3N}p,$$

$$Z = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} V^N \left( \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\xi^2}{2mkT}\right] d\xi \right)^{3N} = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3N}} V^N (\sqrt{2\pi mkT})^{3N}.$$

kde jsme rozepsali do složek jednotlivé hybnosti,  $3N$  součtů v argumentu exponenciely jsme převedli na součin exponencií. Integrál se tak stal součinem  $3N$  stejných integrálů Gaussova typu (V4). Výsledná partiční suma tedy je

$$Z(T, V, N) = a^N V^N T^{3N/2}; \quad a = (2\pi mk)^{3/2} / (2\pi\hbar)^3. \quad (3.67)$$

**3. Volná energie.** Volnou energii snadno určíme ze vztahu (3.60):

$$F(T, V, N) = -kT \ln Z = -NkT \ln(a VT^{3/2}).$$

**4. Termodynamické veličiny.** Určíme nyní entropii a tlak (stavovou rovnici) jako parciální derivace (3.22) volné energie. Chemický potenciál je vzhledem ke konstantnímu počtu částic nepotřebný.

$$S = -\left(\frac{\partial F}{\partial T}\right) = \frac{3Nk}{2} + Nk \ln(a VT^{3/2})$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right) = \frac{NkT}{V}$$

V entropii automaticky vyšla její integrační konstanta  $S_0 = 3Nk/2$ , která je hodnotou entropie při teplotě absolutní nuly (její hodnota je mimo jiné předmětem třetí věty termodynamické, o které jsme se zde nezmiňovali). Entropie závisí prostřednictvím koeficientu  $a$  na Planckově konstantě. To je proto, že Planckova konstanta určuje velikost jednoho stavu ve fázovém prostoru a entropie jako statistická veličina souvisí s pravděpodobností výskytu určitého stavu. Entropii budeme věnovat samostatnou kapitulu později. Povšimněte si, že velikost entropie je úměrná počtu částic. To je logické, jde o tepelnou energii vynásobenou integračním faktorem a energie je v počtu částic aditivní.

Druhý odvozený vztah je stavovou rovnicí ideálního plynu ( $pV = NkT$ ) a na Planckově konstantě samozřejmě nemůže záviset. Jde o klasické vlastnosti klasického plynu.

**5. Vnitřní energie.** Vnitřní energii bychom mohli určit přímou integrací z definice  $U = \langle E \rangle = \int E dw$ , ale rychlejší je využít definici volné energie  $F = U - TS$ :

$$U = F + TS = -NkT \ln(a VT^{3/2}) + \frac{3NkT}{2} + NkT \ln(a VT^{3/2}) = \frac{3}{2} NkT.$$

Vnitřní energie opět nezávisí na Planckově konstantě, povšimněte si, že každý stupeň volnosti systému přispívá k vnitřní energii hodnotou  $kT/2$ . Toto tvrzení je známo jako *ekvipartiční teorém*.

Na závěr vypišme odvozené vztahy pro ideální plyn:

$$Z = a^N V^N T^{3N/2}; \quad a = \frac{(2\pi mk)^{3N/2}}{(2\pi\hbar)^{3N}},$$

$$F = -NkT \ln(a VT^{3/2}),$$

!

$$S = \frac{3Nk}{2} + Nk \ln(a VT^{3/2}), \quad (3.68)$$

$$p = \frac{NkT}{V},$$

$$U = \frac{3}{2} NkT.$$

**Poznámka:** Zpravidla se výpočet partiční sumy provádí jen pro systém s jednou jedinou částicí. Partiční sumu jedné částice označujeme malým písmenem  $z$ . Jak je z výpočtu vidět, budeme-li mít  $N$  nezávislých částic, bude celková partiční suma součinem integrálů partičních sum jednotlivých částic. Pro identické nekvantové částice proto platí

$$Z = z_1 z_2 \dots z_N = z^N \quad (3.69)$$

Partiční suma je multiplikativní v počtu částic, volná energie, entropie, tlak a vnitřní energie jsou aditivní veličiny.

### 3.5.3. Klasický oscilátor

#### Termodynamické veličiny

Za systém budeme nyní považovat soustavu  $N$  stejných nezávislých oscilátorů. Označme  $\varepsilon$  energii jednoho oscilátoru a  $z$  partiční sumu jednoho oscilátoru. Určeme tyto veličiny:

$$\varepsilon = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2 + \frac{p^2}{2m} .$$

$$z = \int \exp \left[ -\frac{m \omega^2 x^2}{2kT} - \frac{p^2}{2mkT} \right] \frac{dx dp}{2\pi\hbar} \Rightarrow$$

$$z = \frac{1}{2\pi\hbar} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{m \omega^2 x^2}{2kT} \right] dx \right) \left( \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left[ -\frac{p^2}{2mkT} \right] dp \right) = \frac{1}{2\pi\hbar} \sqrt{\frac{2\pi kT}{m\omega^2}} \sqrt{2\pi mkT} \Rightarrow$$

$$z = \frac{kT}{\hbar\omega} ; \quad Z = \left( \frac{kT}{\hbar\omega} \right)^N .$$

Povšimněte si, že partiční suma je bezrozměrná, je podílem tepelné energie a energie elementárního kvanta energie oscilátoru. Váhový prostor nám opět zanesl Planckovu konstantu i do nekvantového výpočtu. V klasických veličinách Planckova konstanta přirozeným způsobem vymizí. Dále již jen určíme jednotlivé termodynamické veličiny:

$$F = -kT \ln Z = -NkT \ln \frac{kT}{\hbar\omega} ,$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk \left[ 1 + \ln \frac{kT}{\hbar\omega} \right] ,$$

$$U = F + TS = NkT .$$

Partiční suma je opět multiplikativní v počtu částic, ostatní veličiny jsou aditivní. Zapišme znovu přehledně dosažené výsledky pro klasický oscilátor

$$! \quad Z = \left( \frac{kT}{\hbar\omega} \right)^N ; \quad F = -NkT \ln \frac{kT}{\hbar\omega} ; \quad S = Nk \left[ 1 + \ln \frac{kT}{\hbar\omega} \right] ; \quad U = NkT . \quad (3.70)$$

#### Rozdělovací funkce

Napišme na závěr ještě rozdělovací funkci v polohách a hybnostech klasického oscilátoru s určenými normovacími konstantami (normovací konstanty jsou převrácenou hodnotou odpovídající části partiční sumy):

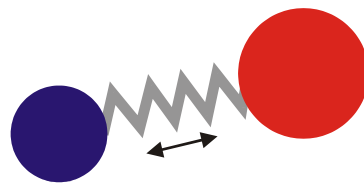
$$dw(x) = \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi kT}} \exp \left[ -\frac{m\omega^2 x^2}{2kT} \right] ,$$

$$dw(p) = \sqrt{\frac{1}{2\pi m kT}} \exp \left[ -\frac{p^2}{2m kT} \right] .$$
(3.71)

Obě rozdělení mají charakter Gaussova balíku a v principu jsou u souboru mnoha oscilátorů při dané teplotě možné i velmi velké výchylky z rovnovážné polohy a velké hybnosti. Jsou ale velmi nepravděpodobné.

### 3.6. DALŠÍ PŘÍKLADY

#### 3.6.1. Kvantový oscilátor (vibrátor)



##### Termodynamické veličiny

Problém jednoho harmonického oscilátoru je definován vztahy (2.41)

$$\hat{H}|n\rangle = E_n|n\rangle; \quad \hat{H} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{\mathbf{X}}^2 .$$

Energetické spektrum harmonického oscilátoru (2.52) jsme odvodili v druhém dílu sylabu několika způsoby (Schrödingerova, Diracova, Heisenbergova reprezentace):

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar\omega, \quad |n\rangle = \psi_n(\xi) = \alpha_n H_n(\xi) e^{-\xi^2/2}; \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Nezávislá proměnná a normovací koeficienty jsou dány vztahy

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x; \quad \alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2} n! 2^n}} .$$

Nyní již můžeme přistoupit k výpočtu partiční funkce, nejprve pro jeden oscilátor

$$z = \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{(n+\frac{1}{2})\hbar\omega}{kT}\right] = \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right] \sum_{n=0}^{\infty} \exp\left[-\frac{n\hbar\omega}{kT}\right] = \exp\left[-\frac{\hbar\omega}{2kT}\right] \sum_{n=0}^{\infty} \left[\exp\left[-\frac{\hbar\omega}{kT}\right]\right]^n .$$

Zbylá řada je geometrická řada, kterou lze snadno sečíst podle (V7), exponentem je kvantové číslo  $n$ :

$$z = \frac{e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}}{1 - e^{-\frac{\hbar\omega}{kT}}} = \frac{1}{e^{+\frac{\hbar\omega}{2kT}} - e^{-\frac{\hbar\omega}{2kT}}} = \frac{1}{2 \operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right)} .$$

Pro  $N$  nezávislých oscilátorů je partiční funkce příslušnou mocninou,

$$Z = 2^{-N} \operatorname{sh}^{-N}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) .$$

Nyní nalezneme standardním postupem volnou energii, entropii a vnitřní energii systému:

$$F = -kT \ln Z = NkT \ln \left[ 2 \operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \right];$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = -Nk \ln \left[ 2 \operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \right] + \frac{N\hbar\omega}{2T} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT};$$

$$U = F + TS = \frac{N\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \frac{\hbar\omega}{2kT} .$$

Shrňme dosažené výsledky (místo teploty použijeme koeficient  $\beta$ ):

$$Z = 2^{-N} \operatorname{sh}^{-N}(\beta\hbar\omega/2);$$

$$F = NkT \ln \left[ 2 \operatorname{sh}(\beta\hbar\omega/2) \right];$$

$$S = -Nk \ln \left[ 2 \operatorname{sh}(\beta\hbar\omega/2) \right] + N\beta\hbar\omega \operatorname{cth}(\beta\hbar\omega/2); \quad (3.72)$$

$$U = \frac{N\hbar\omega}{2} \operatorname{cth}(\beta\hbar\omega/2) .$$

Poslední vztah pro vnitřní energii odvodil Albert Einstein v roce 1906. Nalezneme střední energii soustavy harmonických oscilátorů v limitě nízkých a vysokých teplot:

$$1) T \rightarrow 0: \quad U = \lim_{T \rightarrow 0} \frac{N\hbar\omega}{2} \operatorname{cth}(\beta\hbar\omega/2) = N \frac{\hbar\omega}{2}.$$

$$2) kT \gg \hbar\omega: \quad U = \frac{N\hbar\omega}{2} \operatorname{cth}(\beta\hbar\omega/2) \rightarrow \frac{N\hbar\omega}{2} \frac{2}{\beta\hbar\omega} = NkT.$$

Případ nízkých teplot je ryze kvantový. Při absolutní nule jsou všechny oscilátory v základním stavu a vnitřní energie je rovna počtu oscilátorů krát energie základního stavu. Při vysokých teplotách jde naopak o ryze klasický případ. Střední tepelná energie je podstatně větší než základní energetické kvantum a vnitřní energie je dána klasickým vztahem (3.70).

Teplota, při které je střední tepelná energie rovna vibračnímu kvantu (argument exponenciál je roven jedné,  $\hbar\omega \cong kT$ ) se nazývá *vibrační teplota*, označujeme ji  $T_V$ . Limita nízkých teplot znamená  $T \ll T_V$ , limita vysokých teplot znamená  $T \gg T_V$ . Pro vibrační teplotu máme vztah

$$! \quad T_V = \frac{\hbar\omega}{k}. \quad (3.73)$$

Pro různé kvantové vibrátory (například vibrující molekuly či krystalovou mříž) jde o charakteristickou veličinu.

#### Pravděpodobnost nalezení vibrátoru v daném energetickém stavu

Pravděpodobnost je dána Boltzmannovým faktorem

$$w_n = C \exp\left[-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{kT}\right].$$

Normovací konstantu určíme buď z podmínky, že součet všech pravděpodobností je roven jedné, nebo si uvědomíme, že jde o převrácenou hodnotu partiční sumy. Výsledný vztah je:

$$! \quad w_n = 2 \operatorname{sh}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) e^{-\beta(n+1/2)\hbar\omega}. \quad (3.74)$$

Opět provedme rozbor v limitě nízkých a vysokých teplot:

$$1) T \ll T_V: \quad w_n = \lim_{T \rightarrow 0} 2 \operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{kT}\right) = \begin{cases} 1 & \text{pro } n = 0 \\ 0 & \text{pro } n \neq 0 \end{cases}.$$

$$2) T \gg T_V: \quad w_n = 2 \operatorname{sh}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) \exp\left(-\frac{(n+1/2)\hbar\omega}{kT}\right) \rightarrow 2 \cdot \frac{\hbar\omega}{2kT} \cdot 1 = \frac{\hbar\omega}{kT}.$$

První případ je opět ryze kvantový a vidíme, že při absolutní nule je obsazen jen základní energetický stav. Druhý případ je naopak klasický. Při vysoké teplotě jsou všechny stavy zastoupeny rovnoměrně.

#### Pravděpodobnost nalezení vibrátoru v dané poloze

Výpočet hustoty pravděpodobnosti lze provést buď přímo nebo pomocí triku, na který přišel americký jaderný fyzik Felix Bloch (1905-1983). Přímý výpočet by se vedl takto:

$$\rho(x) = \langle x | \hat{\rho} | x \rangle = \langle x | e^{-\beta\hat{H}} | x \rangle = \langle x | n \rangle \langle n | e^{-\beta\hat{H}} | m \rangle \langle m | x \rangle = \sum_{n,m} \psi_n^* w_n \delta_{nm} \psi_m = \sum_n \psi_n^* \psi_n w_n.$$

Za vlnové funkce se dosadí příslušné Hermitovy polynomy a za pravděpodobnosti rozdělení v energetické reprezentaci (3.74). Je třeba „jen“ sečíst příslušnou řadu Hermitových polynomů. Nepřímé odvození Blochovým trikem využije působení operátorů  $\hat{p}\hat{p}$  a  $\hat{x}\hat{p}$  v  $x$  reprezentaci a v Heisenbergově maticové reprezentaci:

$$\begin{aligned}
 -i\hbar \frac{d\rho}{dx} &= \langle x | \hat{p} \hat{\rho} | x \rangle = \langle x | \hat{p} e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \sum_{n,k} \psi_n \psi_k P_{nk} w_k = \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} i\sqrt{2m\hbar\omega} \left( \sqrt{k+1} \psi_{k+1} \psi_k - \sqrt{k} \psi_{k-1} \psi_k \right) w_k = \\
 &= i\sqrt{2m\hbar\omega} \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} (w_k - w_{k+1}) \psi_{k+1} \psi_k = \\
 &= i\sqrt{2m\hbar\omega} \left( 1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right) \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} w_k \psi_{k+1} \psi_k .
 \end{aligned}$$

Při výpočtu jsme použili maticového rozpisu operátoru hybnosti podle kapitoly (2.4.3). Zcela analogicky budeme hledat působení operátoru  $\hat{x}\hat{\rho}$ :

$$\begin{aligned}
 x\rho &= \langle x | \hat{x} \hat{\rho} | x \rangle = \langle x | \hat{x} e^{-\beta \hat{H}} | x \rangle = \sum_{n,k} \psi_n \psi_k X_{nk} w_k = \\
 &= \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( \sqrt{k+1} \psi_{k+1} \psi_k + \sqrt{k} \psi_{k-1} \psi_k \right) w_k = \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} (w_k + w_{k+1}) \psi_{k+1} \psi_k = \\
 &= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( 1 + e^{-\beta\hbar\omega} \right) \sum_{k=0}^{\infty} \sqrt{k+1} w_k \psi_{k+1} \psi_k .
 \end{aligned}$$

Působení obou dvou operátorů vede na tutéž řadu. V tom právě tkví geniální Blochův trik. Vydělením obou získaných rovností se zbavíme nepříjemné řady a získáme jednoduchou rovnici

$$\frac{-i\hbar \frac{d\rho}{dx}}{x\rho} = \frac{i\sqrt{2m\hbar\omega} \left( 1 - e^{-\beta\hbar\omega} \right)}{\sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} \left( 1 + e^{-\beta\hbar\omega} \right)} ,$$

kteřá vede na diferenciální rovnici v separovaném tvaru

$$\frac{d\rho}{\rho} = -\frac{2m\omega}{\hbar} \operatorname{th}\left(\frac{\beta\hbar\omega}{2}\right) x dx .$$

Řešení je snadné, integrační konstantu určíme jako vždy z normovací podmínky:

!

$$\rho(x) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} \exp\left[-\lambda x^2\right]; \quad \lambda(T) \equiv \frac{m\omega}{\hbar} \operatorname{th}\left(\frac{\hbar\omega}{2kT}\right) . \quad (3.75)$$

Tuto, dnes slavnou, Blochovu formuli odvodil F. Bloch v roce 1932. Formule má velký význam v teorii kmitů krystalové mříže. Odvodme, tak jako v minulých případech, limitu při nízkých a vysokých teplotách:

1)  $T \ll T_V$ :

$$\rho(x) \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \exp\left[-\frac{m\omega x^2}{\hbar}\right] = \psi_0^2(x) .$$

2)  $T \gg T_V$ :

$$\rho(x) \rightarrow \sqrt{\frac{m\omega^2}{2\pi kT}} \exp\left[-\frac{m\omega^2 x^2}{2kT}\right] .$$

První případ odpovídá opět ryze kvantovému řešení, jde o hustotu pravděpodobnosti oscilátoru v základním kvantovém stavu. Případ vysokých teplot dává klasický výsledek (3.71).

**Příklad 8:** Určete vibrační teplotu pro dvojici atomů, jejichž interakce je popsána Morseovým potenciálem  $V(r) = V_0 \left( 1 - e^{\alpha^2(r-r_0)^2} \right)$ .

**Řešení:** Nejprve určíme tuhost oscilací při malých výchylkách z rovnovážné polohy (1.37) jako druhou derivaci potenciální energie v minimu, z tuhosti oscilátoru určíme frekvenci:

$$\omega = \sqrt{\frac{V''(r_0)}{m}} = \sqrt{\frac{2\alpha^2 V_0}{m}} .$$

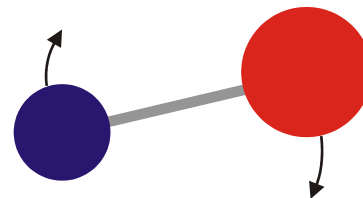
Nyní již snadno odvodím vibrační teplotu:

$$T_V = \frac{\hbar\omega}{k} = \frac{\hbar\alpha}{k} \sqrt{\frac{2V_0}{m}}$$

Z charakteristického průběhu potenciální energie lze snadno určit vibrační teplotu. ♦

### 3.6.2. Kvantový rotátor

Prozkoumejme nyní vlastnosti rotující částice s nenulovým momentem hybnosti  $L$  a nenulovým momentem setrvačnosti  $J$ . Může jít například o rotující dvouatomovou molekulu nebo nějaký podobný systém. Nejprve odvodíme partiční sumu pro systém tvořený jedinou molekulou. Standardní translační vztah  $p^2/2m$  u rotačních pohybů přejde v  $L^2/2J$ :



$$\varepsilon = \frac{L^2}{2J} = \frac{l(l+1)\hbar^2}{2J}; \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

Využili jsme vztah (2.65) pro kvantování velikosti momentu hybnosti. Nesmíme zapomenout, že každý takový energetický stav je degenerován, vyskytuje se  $2l+1$  krát, jednotlivé stavy se stejnou energií se liší magnetickým kvantovým číslem  $m = -l, -l+1, \dots, 0, \dots, l-1, l$ . Proto v partiční sumě musíme každý Boltzmannův faktor vzít v úvahu tolikrát, kolikrát je daný stav degenerován:

$$z = \sum_{l=0}^{\infty} g_l \exp\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2J kT}\right] = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2J kT}\right] .$$

Poprvé se setkáváme s řadou, která není analyticky řešitelná. Tuto řadu můžeme sečíst jen numericky nebo v limitě nízkých či vysokých teplot. Oblast nízkých a vysokých teplot je dána argumentem exponenciely. Je-li argument roven jedné, dostáváme charakteristickou teplotu, při níž je tepelná energie rovna rotační energii. Vyjdeme-li ze vztahu  $\hbar^2 \approx 2J kT$ , dostaneme pro tzv. *rotační teplotu* vztah

$$T_R = \frac{\hbar^2}{2kJ} . \tag{3.76}$$

Rotační teplota je pro daný systém, podobně jako vibrační teplota, zcela charakteristickou veličinou. V následující kapitole se seznámíme s rotačními a vibračními teplotami jednotlivých molekul. Nyní se pokusíme sečíst řadu pro partiční sumu alespoň v limitě nízkých a vysokých teplot.

1)  $T \ll T_R$ . Při nízkých teplotách exponenciely v řadě s rostoucím  $l$  prudce klesají, členy řady velmi rychle konvergují a proto stačí vzít v úvahu první dva členy řady:

$$z = 1 + 3 \exp\left[-\frac{\hbar^2}{JkT}\right] = 1 + 3 \exp(-2T_R/T).$$

Standardním postupem určíme termodynamické veličiny v limitě nízkých teplot:

$$Z = [1 + 3 \exp(-2T_R/T)]^N,$$

$$F = -kT \ln Z = -NkT \ln [1 + 3 \exp(-2T_R/T)],$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk \ln [1 + 3 \exp(-2T_R/T)] + 6Nk \frac{T_R}{T} \frac{\exp(-2T_R/T)}{1 + 3 \exp(-2T_R/T)},$$

$$U = F + TS = 6NkT_R \frac{\exp(-2T_R/T)}{1 + 3 \exp(-2T_R/T)} \approx 6NkT_R \exp(-2T_R/T).$$

2)  $T \gg T_R$ . Při vysokých  $T$  je obsazeno mnoho stavů s velkým  $l$  a sumu nahradíme integrací:

$$z = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \exp\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2JkT}\right] \approx \int_0^{\infty} (2x+1) \exp\left[-\frac{x(x+1)\hbar^2}{2JkT}\right] dx.$$

V integrálu provedeme substituci  $\xi = x(x+1)$ :

$$z \approx \int_0^{\infty} \exp\left[-\frac{\hbar^2}{2JkT} \xi\right] d\xi = \frac{2JkT}{\hbar^2} = \frac{T}{T_R}.$$

Standardním postupem určíme termodynamické veličiny v limitě vysokých teplot:

$$Z = (T/T_R)^N,$$

$$F = -kT \ln Z = -NkT \ln(T/T_R),$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk [1 + \ln(T/T_R)],$$

$$U = F + TS = NkT.$$

Jak jsme mohli očekávat, dostáváme v limitě vysokých teplot klasické výsledky. Sepišme na závěr výsledky v limitě nízkých i vysokých teplot do přehledné tabulky:

$T \ll T_R$	$T \gg T_R$
$Z = [1 + 3 \exp(-2T_R/T)]^N$	$Z = (T/T_R)^N$
$F = -3NkT \exp(-2T_R/T)$	$F = -NkT \ln(T/T_R)$
$S = 3Nk \exp(-2T_R/T) + 6Nk \frac{T_R}{T} \exp(-2T_R/T)$	$S = Nk [1 + \ln(T/T_R)]$
$U = 6NkT_R \exp(-2T_R/T)$	$U = NkT$

(3.77)

**Příklad 9:** Určete nejpravděpodobnější rotační kvantové číslo pro kvantový rotátor (stav s nejvyšším zastoupením).

**Řešení:** Pravděpodobnost, že se systém nachází ve stavu s vedlejším kvantovým číslem  $l$  je

$$w_l = A(2l+1) \exp\left[-\frac{l(l+1)\hbar^2}{2JkT}\right] = A(2l+1) \exp\left[-l(l+1) \frac{T_R}{T}\right].$$



Při nízkých teplotách systém nerotuje, pravděpodobnost je téměř nulová. Při vysokých teplotách nalezneme standardním postupem maximum (s proměnnou  $l$  budeme zacházet jako se spojitou proměnnou):

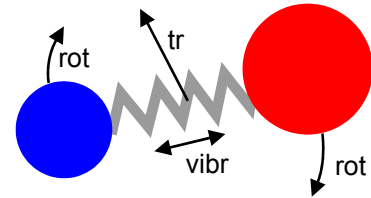
$$\frac{\partial w_l}{\partial l} = 0 \quad \Rightarrow \quad l_{\max} = \sqrt{\frac{T}{2T_R}} - \frac{1}{2} \approx \sqrt{\frac{T}{2T_R}} .$$

Z vypočteného vztahu můžeme zjistit typická vedlejší kvantová čísla rotujících molekul při dané teplotě. Hodnoty rotačních a vibračních teplot některých plynů naleznete v tabulce:

Plyn	Rotační teplota	Vibrační teplota
N <sub>2</sub>	3 K	3340 K
O <sub>2</sub>	2 K	2230 K
H <sub>2</sub>	85 K	6100 K
HCl	15 K	4140 K
HCN	30 K	1500 K

### 3.6.3. Dvouatomový plyn

Uvažujme nyní systém složený z  $N$  dvouatomových molekul s rozlišitelnými atomy (jinak bychom se museli zabývat symetrií vlnových funkcí). Tak se chová řada plynů. Energie jedné molekuly bude složena z translační energie, vibrační energie, rotační energie a energie dalších (například jaderných) stupňů volnosti. Partiční suma pro jednu molekulu bude *součinem* partičních sum jednotlivých stupňů volnosti a termodynamické veličiny budou *součtem* odpovídajících členů:



$$\varepsilon = \varepsilon_{tr} + \varepsilon_{vib} + \varepsilon_{rot} + \varepsilon_{nucl} + \dots .$$

$$z = \sum e^{-\beta(\varepsilon_{tr} + \varepsilon_{vib} + \varepsilon_{rot} + \dots)} = \int e^{-\beta\varepsilon_{tr}} d\Gamma \cdot \sum e^{-\beta\varepsilon_{vib}} \cdot \sum e^{-\beta\varepsilon_{rot}} \dots = z_{tr} \cdot z_{vib} \cdot z_{rot} \dots$$

Celková partiční suma pro  $N$  částic potom bude:

$$Z = z_{tr}^N \cdot z_{vib}^N \cdot z_{rot}^N \dots$$

Základní termodynamické veličiny jsou podle své definice aditivní a bude pro ně platit

$$F = -kT \ln Z = F_{tr} + F_{vibr} + F_{rot} + \dots ,$$

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = S_{tr} + S_{vibr} + S_{rot} + \dots ,$$

$$U = F + TS = U_{tr} + U_{vibr} + U_{rot} + \dots ,$$

$$C_V = \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = C_{tr} + C_{vibr} + C_{rot} + \dots .$$

Zkoumejme nyní příspěvek k tepelné kapacitě jednotlivých stupňů volnosti:

#### Translační stupně volnosti

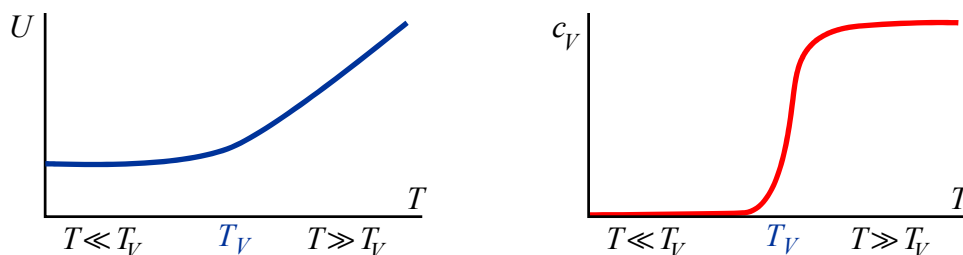
$$U_{tr} = \frac{3}{2} NkT \quad \Rightarrow \quad c \equiv \frac{1}{N} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = \frac{3}{2} k .$$

Translační stupně volnosti přispívají k měrné tepelné kapacitě plynu (tepelná kapacita vztažená na počet částic) konstantní hodnotou.

### Vibrační stupně volnosti

$$U_{vib} = \frac{N\hbar\omega}{2} \operatorname{cth} \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right) \Rightarrow c \equiv \frac{1}{N} \left( \frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = k \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right)^2 \operatorname{sh}^{-2} \left( \frac{\hbar\omega}{2kT} \right).$$

Na následujících obrázcích jsou vykresleny vypočtené průběhy. Při nízkých teplotách je vnitřní energie dána nulovými kmity ( $N\hbar\omega/2$ ), při vysokých teplotách je lineární funkcí teploty. K přechodu mezi oběma průběhy dochází v okolí vibrační teploty. Při nízkých teplotách vibrační stupně volnosti nepřispívají k měrnému teplu. Říkáme, že při teplotách výrazně nižších než je vibrační teplota jsou vibrační stupně volnosti „zamrzlé“. Při vysokých teplotách přispívají vibrační stupně volnosti k měrnému teplu konstantní hodnotou.



Provedeme-li limity malých a velkých teplot, dostaneme:

$$\begin{aligned} T \ll T_V &\Rightarrow U = N\hbar\omega/2, & C = 0; & c = 0; \\ T \gg T_V &\Rightarrow U = NkT, & C = Nk, & c = k. \end{aligned}$$

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.

### Rotační stupně volnosti

Pro rotační stupně volnosti neznáme analytický průběh vnitřní energie a tepelné kapacity při konstantním objemu. Známe ale hodnoty v limitě nízkých a vysokých teplot vzhledem k rotační teplotě, viz (3.77):

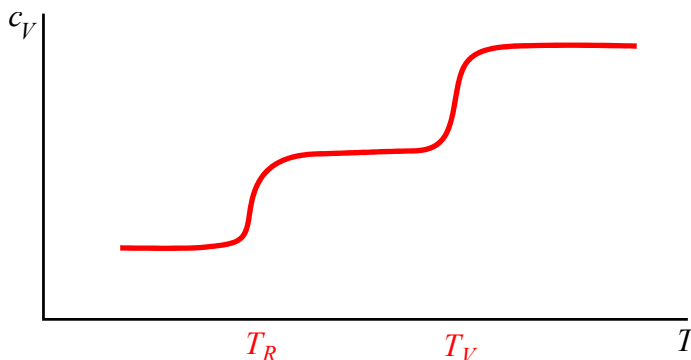
$$\begin{aligned} T \ll T_V &\Rightarrow U = 6NkT_R \exp(-2T_R/T), & C \approx 0; & c \approx 0; \\ T \gg T_V &\Rightarrow U = NkT, & C = Nk, & c = k. \end{aligned}$$

Vidíme, že rotační stavy přispívají k měrnému teplu stejným způsobem jako vibrační stavy, příspěvek se projeví při teplotách vyšších než je rotační teplota. Při teplotách nižších jsou rotační stavy opět „zamrzlé“. Každý rotační stav přispěje k tepelné kapacitě opět hodnotou Boltzmannovy konstanty.

Výsledný průběh měrné tepelné kapacity má schodovitý charakter:

Při zvyšování teploty přibývají další a další stupně volnosti, každý „rozmrzlý“ stupeň volnosti přispěje k měrné tepelné kapacitě hodnotou  $k$ .

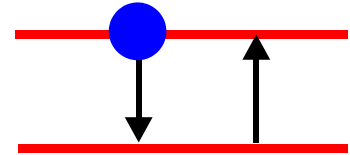
Translační stupně přispívají k měrné tepelné kapacitě nezávisle na teplotě hodnotou  $k/2$ .



**Poznámka:** U kyanu HCN odpovídá přechod mezi druhou a první rotační hladinou vlnové délce 1.3 mm, což koresponduje s vlnovým maximem reliktního záření. Právě reliktní záření proto způsobuje rotační excitace mezihvězdného kyanu.

**Příklad 10:**

**Zadání:** Kvantový systém má dvě blízké energetické hladiny  $\varepsilon_0 = 0$  a  $\varepsilon_1 = \varepsilon$  s degeneračními faktory  $g_0$  a  $g_1$ . Nalezněte průběh  $c_V(\beta)$  příspěvku k měrnému teplotu systému.



**Řešení:** Partiční suma pro jednu částici bude mít jen dva členy

$$z = g_0 + g_1 \exp(-\beta\varepsilon).$$

Nyní budeme postupovat standardně:

$$Z = [g_0 + g_1 \exp(-\beta\varepsilon)]^N,$$

$$F = -kT \ln Z = -NkT \ln [g_0 + g_1 \exp(-\beta\varepsilon)],$$

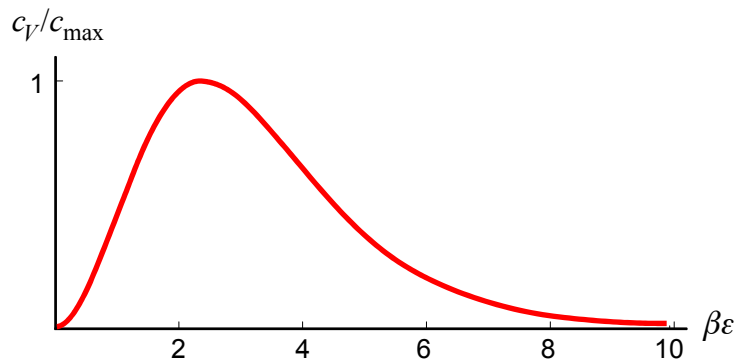
$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = Nk \ln [g_0 + g_1 \exp(-\beta\varepsilon)] + \frac{N\varepsilon k\beta}{[1 + g \exp(\beta\varepsilon)]}; \quad g \equiv \frac{g_0}{g_1},$$

$$U = F + TS = \frac{N\varepsilon}{[1 + g \exp(\beta\varepsilon)]},$$

$$C_V = \frac{\partial U}{\partial T} = Ng k\varepsilon^2 \frac{\beta^2 \exp(\beta\varepsilon)}{[1 + g \exp(\beta\varepsilon)]^2},$$

$$c_V = \frac{C_V}{N} = g k\varepsilon^2 \frac{\beta^2 \exp(\beta\varepsilon)}{[1 + g \exp(\beta\varepsilon)]^2}.$$

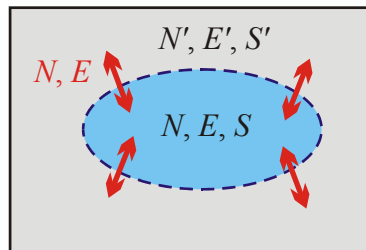
Dostali jsme velmi známý vztah pro příspěvek dvouhladinového systému k měrnému teplotu. Příspěvek konverguje k nule v oblasti nízkých i vysokých teplot. To znamená, že existuje teplota, při které je příspěvek k měrnému teplotu maximální. Maximum je možné určit numericky, pro  $g = 1$  vychází  $c_{\max} \sim 0,34 k$ .



### 3.7. GRANDKANONICKÉ ROZDĚLENÍ

#### 3.7.1. Odvození rozdělení

Na rozdíl od kanonického rozdělení připouštíme u grandkanonického rozdělení výměnu částic s okolím. Ostatní předpoklady jsou stejné jako u kanonického rozdělení. Systém samozřejmě může s okolím vyměňovat energii, zanedbáme povrchové jevy a jediným vnějším parametrem systému bude prozatím objem. Opět předpokládáme platnost Liouvillova teorému. První větu termodynamickou budeme psát ve standardním tvaru (pro jednoduchost uvažujeme jeden druh částic):



$$dU = T dS - p dV + \mu d\bar{N} \quad (3.78)$$

Vzhledem k tomu, že  $N$  ve statistice znamená okamžitý počet částic v systému, musíme střední počet v první větě označit symbolem s pruhem. Rozdělovací funkci v disktrétním, resp. spojitém případě označíme

$$w_{nN} = w_{nN}(E); \quad \text{resp.} \quad \rho_N = \rho_N(E) . \quad (3.79)$$

Index  $n$  čísluje kvantové stavy systému, index  $N$  počet částic v systému. Požadujeme aditivnost v energii a počtu částic systému a jeho okolí:

$$E_{\text{tot}} = E + E'; \quad N_{\text{tot}} = N + N' . \quad (3.80)$$

Podobně jako v kanonickém případě požadujeme nezávislost (multiplikativnost) pravděpodobnostních rozdělení systému a okolí:

$$w_{nN+N'}(E + E') = w_{nN}(E) w_{nN'}(E') . \quad (3.81)$$

Řešením je jediná exponenciální funkce typu

$$w_{nN} = e^{c_1 + c_2 E_{nN} + c_3 N} = e^{\alpha - \beta E_{nN} + \gamma N} . \quad (3.82)$$

Konstanty lineární kombinace jsme označili  $\alpha, -\beta, \gamma$  a určíme je v následující kapitole.

#### 3.7.2. Konstanty rozdělení

Při určení konstant budeme postupovat obdobně jako u kanonického rozdělení, tj. porovnáme diferenciál vnitřní energie s termodynamickým vztahem. Postup je poněkud pracný a student, kterého to nezajímá si může přecíst výsledek na konci této kapitoly. V principu pro určení tří konstant musíme využít tři rovnice, jde o normování pravděpodobnosti, středování energie a středování počtu částic (poslední rovnice nebyla třeba u kanonického rozdělení). Problém můžeme řešit jak disktrétně, tak spojitě (v levém sloupci naleznete disktrétní vztahy, v pravém spojitě analogie):

$$\begin{aligned} \sum_{n,N} w_{nN} &= 1, & \sum_N \int \rho_N(E) d\Gamma_N &= 1, \\ \sum_{n,N} E_{nN} w_{nN} &= U, & \sum_N \int E \rho_N(E) d\Gamma_N &= U, \\ \sum_{n,N} N w_{nN} &= \bar{N}. & \sum_N N \int \rho_N(E) d\Gamma_N &= \bar{N}. \end{aligned} \quad (3.83)$$

I ve spojitém případě musíme počítat přes všechny možné počty částic. Odvození budeme provádět v disktrétním případě. Podobně jako u kanonického rozdělení nejprve nalezeme diferenciál vnitřní energie:

$$dU = d \sum_{n,N} E_{nN}(V) w_{nN} = \sum_{n,N} \left[ \left( \frac{\partial E_{nN}}{\partial V} dV + \frac{\partial E_{nN}}{\partial N} dN \right) w_{nN} \right] + \sum_{n,N} E_{nN} dw_{nN} .$$

Derivaci energie podle objemu budeme opět interpretovat jako parciální tlak, změna energie s počtem částic je parciální chemický potenciál, v posledním členu vyjádříme  $E_{nN}$  z rozdělení (3.82):

$$dU = \sum_{n,N} (-p_{nN} w_{nN} dV) + \sum_{n,N} (\mu_{nN} w_{nN} dN) + \sum_{n,N} \left( \frac{\alpha}{\beta} + \frac{\gamma}{\beta} N - \frac{1}{\beta} \ln w_{nN} \right) dw_{nN} .$$

První člen interpretujeme stejně jako u kanonického rozdělení jako mechanickou práci. Poslední člen roznásobíme a vytkneme konstanty:

$$dU = -pdV + \sum_{n,N} \mu_{nN} w_{nN} dN + \frac{\gamma}{\beta} \sum_{n,N} N dw_{nN} + \frac{\alpha}{\beta} d \sum_{n,N} w_{nN} - \frac{1}{\beta} \sum_{n,N} \ln w_{nN} dw_{nN} .$$

Třetí a pátý člen upravíme podle vztahu pro derivaci součinu  $fdg = d(fg) - gdf$ , čtvrtý člen je nulový (součet pravděpodobností je roven jedné a diferenciál jednotky je nulový):

$$dU = -pdV + \sum_{n,N} \mu_{nN} w_{nN} dN + \frac{\gamma}{\beta} d \sum_{n,N} N w_{nN} - \frac{\gamma}{\beta} \sum_{n,N} w_{nN} dN - \frac{1}{\beta} d \sum_{n,N} (\ln w_{nN}) w_{nN} .$$

Jako jeden z posledních kroků sloučíme druhý a čtvrtý člen:

$$dU = -pdV + \sum_{n,N} \left( \mu_{nN} - \frac{\gamma}{\beta} \right) w_{nN} dN + \frac{\gamma}{\beta} d\bar{N} - \frac{1}{\beta} d \sum_{n,N} w_{nN} \ln w_{nN}$$

Má-li tento výraz korespondovat s první větou termodynamickou ve tvaru (3.78), musí být

$$! \quad \beta = \frac{1}{kT}, \quad \gamma = \frac{\mu}{kT}, \quad S = -k \sum_{n,N} w_{nN} \ln w_{nN} . \quad (3.84)$$

Druhá podmínka ( $\gamma/\beta = \mu$ ) nám zajistí korespondenci třetího členu s odpovídajícím členem první věty termodynamické a současně vypadnutí členu druhého. Ostatní podmínky jsou shodné kanonickým rozdělením. V tuto chvíli tedy máme určeny dvě konstanty. Zbývá jediná neurčená konstanta rozdělení – konstanta  $\alpha$ . Tu určíme například ze vztahu pro entropii:

$$S = -k \sum_{n,N} w_{nN} \ln w_{nN} = -k \sum_{n,N} w_{nN} (\alpha - \beta E_{nN} + \gamma N) = -k\alpha + k\beta U - k\gamma \bar{N} .$$

Po triviálním výpočtu určíme hledanou konstantu:

$$! \quad \alpha = \frac{U - TS - \mu \bar{N}}{kT} = \frac{\Omega}{kT} \quad (3.85)$$

Nyní známe všechny konstanty a můžeme napsat výsledné rozdělení v diskrétním i spojitým případě:

$$! \quad w_{nN} = e^{\beta(\Omega - E_{nN} + \mu N)}; \quad \rho_N = e^{\beta(\Omega - E_N + \mu N)} . \quad (3.86)$$

Grandkanonický potenciál zjevně souvisí s normováním pravděpodobnosti, použijeme-li explicitně vypsanou normovací konstantu, má rozdělení často používaný tvar

$$! \quad w_{nN} = K \exp \left[ \frac{-E_{nN} + \mu N}{kT} \right]; \quad \rho_N = K \exp \left[ \frac{-E_N + \mu N}{kT} \right] . \quad (3.87)$$

### 3.7.3. Partiční suma

Podobný význam, jako měla volná energie u kanonického rozdělení, má grandkanonický potenciál u systémů s proměnným počtem částic. Grandkanonický potenciál vypočteme z normovací podmínky rozdělení. Výpočet provedeme v diskrétním (nalevo) i spojitým (napravo) případě.

$$\begin{aligned} \sum_{n,N} w_{nN} = 1 &\Rightarrow \sum_N \int \rho_N d\Gamma_N = 1 \Rightarrow \\ \sum_{n,N} e^{\beta(\Omega - E_{nN} + \mu N)} = 1 &\Rightarrow \sum_N \int e^{\beta(\Omega - E_N + \mu N)} d\Gamma_N = 1 \Rightarrow \\ \sum_{n,N} e^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N} = e^{-\beta \Omega} &\Rightarrow \sum_N \int e^{-\beta E_N + \beta \mu N} d\Gamma_N = e^{-\beta \Omega} \Rightarrow \\ \ln \left( \sum_{n,N} e^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N} \right) = -\beta \Omega &\Rightarrow \ln \left( \sum_N \int e^{-\beta E_N + \beta \mu N} d\Gamma_N \right) = -\beta \Omega \Rightarrow \\ \Omega = -kT \ln \left( \sum_{n,N} e^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N} \right) &\quad \Omega = -kT \ln \left( \sum_N \int e^{-\beta E_N + \beta \mu N} d\Gamma_N \right). \end{aligned}$$

Veličina nacházející se v logaritmu v kulaté závorce se nazývá *grandkanonická partiční funkce* a je ústřední veličinou statistické fyziky s proměnným počtem částic, označujeme ji  $\Xi$ . Vzhledem k tomu, že argument logaritmu by měl být bezrozměrný, je použití váhového faktoru namísto fázového objemu vhodnější.

#### Schéma statistického výpočtu s proměnným počtem částic:

1. Zjistíme, jakých energií  $E_{nN}$  může systém nabývat. V klasickém případě jde o všechny hodnoty energií, které se v systému mohou vyskytnou. V kvantovém případě musíme určit spektrum Hamiltonova operátoru (například řešit Schrödingerovu rovnici).
2. Nalezneme partiční funkci  $\Xi$  jako součet veličin  $e^{-\beta E + \beta \mu N}$  přes celý obor energetického spektra:

$$\Xi = \sum_{n,N} e^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N}; \quad \text{resp.} \quad \Xi = \sum_N \int e^{-\beta E_N + \beta \mu N} d\Gamma_N \quad (3.88)$$

3. Určíme grandkanonický potenciál

$$\Omega = -kT \ln \Xi. \quad (3.89)$$

4. Určíme základní termodynamické veličiny  $S, p, N$ :

$$S = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial T} \right), \quad p = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial V} \right), \quad \bar{N} = - \left( \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} \right). \quad (3.90)$$

5. Určíme vnitřní energii  $U$  a její derivace:

$$U = \Omega + TS + \mu \bar{N}. \quad (3.91)$$

6. Vzhledem k tomu, že grandkanonický potenciál je funkcí chemického potenciálu  $\mu$ , je třeba ho ze všech odvozených termodynamických vztahů vyloučit. Teoreticky to lze provést z relace

$$\bar{N} = \sum_{n,N} N w_{nN} \Rightarrow \mu = \mu(\bar{N}, T, V). \quad (3.92)$$

Prakticky může vyloučení chemického potenciálu z rovnic činit problémy. Chemický potenciál lze také chápat jako parametr v parametrickém zadání křivek. Poznáme-li například z (3.90) závislosti  $p = p(T, V, \mu)$  a  $\bar{N} = \bar{N}(T, V, \mu)$  můžeme do grafu s osami  $(p, \bar{N})$  vykreslovat souřadnice  $(p, \bar{N})$  pro určitý interval hodnot  $\mu$  a tím zkonstruovat graficky závislost tlaku na průměrném počtu částic.

### Vztah grandkanonické a kanonické partiční sumy

Upravme nyní vztah pro grandkanonickou partiční sumu:

$$\Xi = \sum_{n, N} e^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N} = \sum_N \left[ \left( \sum_n e^{-\beta E_{nN}} \right) \cdot (e^{\beta \mu})^N \right].$$

Označíme-li  $Z_N$  kanonickou partiční sumu pro  $N$  částic a zavedeme tzv. *fugacitu*

$$\zeta \equiv e^{\beta \mu}, \quad (3.93)$$

dostaneme přehledný vztah

$$\Xi = \sum_N Z_N \zeta^N. \quad (3.94)$$

Uvedený vztah platí v klasické fyzice, kde jsou v systému  $N$  částic jednotlivé částice v principu rozlišitelné. V kvantové teorii jsou částice nerozlišitelné a každá z  $N!$  možných permutací částic je stejným stavem. Ve vztahu (3.94) je každá permutace v součtu započítána, to znamená, že jeden stav je započten namísto jednou vícekrát ( $N!$  krát). V kvantové teorii je proto správným vztahem výraz

$$\Xi = \sum_N \frac{Z_N}{N!} \zeta^N, \quad (3.95)$$

který silně připomíná Taylorův rozvoj v proměnné nazývané fugacita. Koeficienty jsou kanonické partiční sumy pro  $N$  částic.

### 3.8. FERMIONY A BOSONY

#### Nerozlišitelné částice

V kvantové teorii můžeme předpovědět jen pravděpodobnost výskytu částice v nějakém místě a čase. Tato pravděpodobnost má maximum v místě klasické trajektorie a se vzdáleností od ní zpravidla exponenciálně ubývá a dosti daleko od klasické trajektorie je sice velmi malá, nikoli však nulová. Máme-li dvě stejné částice, nikdy si nemůžeme být jisti, která částice je která. Pravděpodobnost výskytu jedné částice v místě druhé je nenulová. Hovoříme o tom, že stejné částice jsou v kvantové teorii *nerozlišitelné*. To ve svém důsledku vede k rozdělení všech částic na dva základní typy, *fermiony* a *bosony*, které se liší svými vlastnostmi a chováním (viz kapitola 2.8). Fermiony mají poločíselný spin, dva nemohou být ve stejném kvantovém stavu (splňují Pauliho vylučovací princip), jejich vlnová funkce je antisymetrická a jejich kreační a anihilační operátory splňují komutační relace. Naopak bosony mají celočíselný spin, ve stejném kvantovém stavu jich může být libovolné množství, jejich vlnová funkce je symetrická a jejich kreační a anihilační operátory splňují antikomutační relace. Všechny intermediální částice tvořící interakce (fotony, gluony,  $W^+$ ,  $W^-$ ,  $Z^0$ ) jsou bosony se spinem 1. K bosonům také patří částice složené ze dvou kvarků (mezony), které mají spin roven 0 (skalární mezony) nebo 1 (vektorové mezony). Všechny základní stavební kameny hmoty (kvarky a leptony) jsou naopak fermiony se spinem 1/2. K fermionům také patří částice složené ze tří kvarků (hadrony), například neutron a proton. Z hlediska statistiky mají, zejména při nízkých teplotách, fermiony a bosony zcela odlišné chování a jejich rozdělovací funkce jsou různé. Fermiony podléhají Fermi-Diracovu rozdělení a bosony Bose-Einsteinovu rozdělení.

#### Reprezentace obsazovacích čísel

Obsazovacím číslem nazýváme počet částic v daném energetickém stavu:

Energie stavu	Obsazovací číslo
$\varepsilon_1$	$N_1$
$\varepsilon_2$	$N_2$
$\vdots$	$\vdots$

Pro fermiony může obsazovací číslo (z důvodu platnosti Pauliho vylučovacího principu) nabývat jen hodnot 0, 1. Pro bosony může jít o jakékoli celé nezáporné číslo 0, 1, 2, ...

V reprezentaci obsazovacích čísel můžeme pro počet částic a celkovou energii psát

$$\begin{aligned}
 N &= \sum_i N_i, \\
 E_N &= \sum_i \varepsilon_i N_i.
 \end{aligned}
 \tag{3.96}$$

Grandkanonickou partiční sumu můžeme upravit v reprezentaci obsazovacích čísel takto:

$$\Xi = \sum_{N,n} e^{-\beta E_{nN} + \beta \mu N} = \sum_{N_1, N_2, \dots} \exp \left[ -\beta \sum_i (\varepsilon_i N_i - \mu N_i) \right] = \prod_i \sum_{N_i} \exp[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu)].$$

Čárka v prvním součtu má naznačit, že všechny permutace částic považujeme v kvantové teorii za jeden jediný stav a do celkového součtu přispějí tyto permutace jediným členem. Je vidět, že celková grandkanonická suma se rozpadá na součin parciálních grandkanonických sum jednotlivých stavů:

$$\Xi = \prod_i \Xi_i; \quad \Xi_i = \sum_{N_i} \exp[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu)].
 \tag{3.97}$$

V důsledku toho jsou termodynamické veličiny dány součtem příslušných parciálních členů:



$$\begin{aligned}
 \Omega &= \sum_i \Omega_i ; & \Omega_i &= -kT \ln \Xi_i , \\
 S &= \sum_i S_i ; & S_i &= - \left( \frac{\partial \Omega_i}{\partial T} \right) , \\
 p &= \sum_i p_i ; & p_i &= - \left( \frac{\partial \Omega_i}{\partial V} \right) , \\
 \bar{N} &= \sum_i \bar{N}_i ; & \bar{N}_i &= - \left( \frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} \right) .
 \end{aligned}
 \tag{3.98}$$

### 3.8.1. Fermi-Diracovo a Bose-Einsteinovo rozdělení

#### Fermi-Diracovo rozdělení

Zabývejme se nejprve fermiony. Podle Pauliho vylučovacího principu nemohou být dva fermiony ve stejném kvantovém stavu. V daném stavu tedy není buď žádný fermion, nebo je přítomen jeden jediný

$$N_i = 0, 1 . \tag{3.99}$$

Partiční suma  $i$ -tého stavu má proto v reprezentaci obsazovacích čísel jen dva členy:

$$\Xi_i = \sum_{N_i} \exp[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu)] = 1 + \exp[-\beta (\varepsilon_i - \mu)] .$$

Snadno dopočteme grandkanonický potenciál  $i$ -tého stavu

$$\Omega_i = -kT \ln \Xi_i = -kT \ln(1 + \exp[-\beta (\varepsilon_i - \mu)])$$

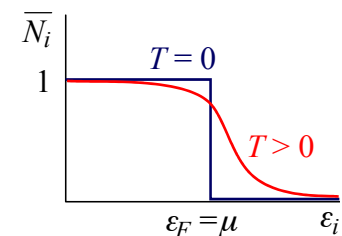
a střední počet částic v  $i$ -tém stavu

$$! \quad \bar{N}_i = - \frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} = \frac{1}{\exp[\beta (\varepsilon_i - \mu)] + 1} . \tag{3.100}$$

Tento výraz se nazývá Fermi-Diracovo rozdělení. Nalezněme jeho průběh v limitě nízkých teplot ( $T \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty$ ):

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \bar{N}_i = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\exp[\beta (\varepsilon_i - \mu)] + 1} = \begin{cases} 1 & \text{pro } \varepsilon_i < \mu , \\ 0 & \text{pro } \varepsilon_i > \mu . \end{cases}$$

Všechny stavy jsou zaplněné po jedné částici až po tzv. Fermiho mez  $\varepsilon_F = \mu$ . Nad Fermiho mezí jsou stavy neobsazené. Fermiho mez je tak poslední obsazenou energetickou hladinou při nulové teplotě. Chemický potenciál je při absolutní nule roven Fermiho mezí. Fermiony se chovají „nesnášenlivě“. Je-li nějaký stav obsazen částicí, další částice již tento stav nemůže obsadit. Při absolutní nule se snaží zaujmout stav s co nejnižší energií. Je-li již obsazen, obsadí nejbližší další volný. Tím dojde k tomu, že při absolutní nule jsou obsazené všechny stavy až po Fermiho mez.



#### Bose-Einsteinovo rozdělení

Nalezněme nyní rozdělení souboru bosonů. Bosony nesplňují Pauliho vylučovací princip a v daném stavu jich může být libovolné množství. Obsazovací čísla proto jsou:

$$N_i = 0, 1, 2, \dots \tag{3.101}$$

Grandkanonická partiční suma  $i$ -tého stavu bude nekonečnou řadou

$$\Xi_i = \sum_{N_i=0}^{\infty} \exp[-\beta N_i (\varepsilon_i - \mu)] = \sum_{N_i=0}^{\infty} (\exp[-\beta (\varepsilon_i - \mu)])^{N_i} .$$

Jde o geometrickou řadu, kterou bez problémů sečteme:

$$\Xi_i = \frac{1}{1 - \exp[-\beta (\varepsilon_i - \mu)]} . \tag{3.102}$$

Snadno dopočteme grandkanonický potenciál  $i$ -tého stavu

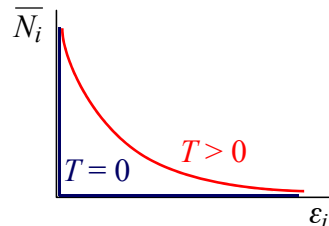
$$\Omega_i = -kT \ln \Xi_i = +kT \ln(1 - \exp[-\beta (\varepsilon_i - \mu)])$$

a střední počet částic v  $i$ -tém stavu

!

$$\bar{N}_i = -\frac{\partial \Omega_i}{\partial \mu} = \frac{1}{\exp[\beta (\varepsilon_i - \mu)] - 1} . \tag{3.103}$$

Tento výraz se nazývá Bose-Einsteinovo rozdělení. Povšimněte si, že od Fermi-Diracova rozdělení se liší jen znaménkem. To je pro vztahy popisující fermiony a bosony typické (symetrická a antisymetrická vlnová funkce, komutátor a antikomutátor). Z podmínky pro konvergenci geometrické řady plyne, že chemický potenciál souboru bosonů musí splňovat podmínku



$$\mu \leq \varepsilon_0 . \tag{3.104}$$

Nalezněme průběh rozdělení v limitě nízkých teplot ( $T \rightarrow 0, \beta \rightarrow \infty$ ):

$$\lim_{\beta \rightarrow \infty} \bar{N}_i = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{\exp[\beta (\varepsilon_i - \mu)] - 1} = \begin{cases} \infty & \text{pro } \varepsilon_i = \varepsilon_0 = \mu , \\ 0 & \text{pro } \varepsilon_i > \varepsilon_0 . \end{cases}$$

Mlčky jsme při součtu geometrické řady předpokládali nekonečný počet částic. Při absolutní nule všechny obsadí základní energetický stav. V reálných systémech je počet částic konečný. Stav látky při které se částice hromadí v základním stavu nazýváme *bosonový kondenzát*. Typickým příkladem jsou například Cooperovy páry elektronů, které při nízkých teplotách vykazují jako bosonový kondenzát supravodivé a supratekuté vlastnosti.

Obě rozdělení lze je souhrnně zapsat

$$\bar{N}_i = \frac{1}{\exp[\beta (\varepsilon_i - \mu)] \pm 1} .$$

Znaménko „+“ platí pro fermiony a „-“ pro bosony. Za jakých podmínek obě rozdělení splynou? Je zřejmé, že k tomu dojde tehdy, lze-li zanedbat jedničku ve jmenovateli, tj. exponenciela převládne a  $\bar{N}_i \ll 1$ . Potom

$$\bar{N}_i \ll 1 \quad \Rightarrow \quad \bar{N}_i \sim \frac{1}{\exp[\beta (\varepsilon_i - \mu)]} \sim K \exp[-\beta \varepsilon_i]$$

a obě rozdělení přechází v Boltzmannovo rozdělení. Kvantové stavy jsou většinou prázdné a jen tu a tam je některý obsazený. K této situaci dochází, je-li

- vysoký počet kvantových stavů,
- řídký plyn (malý počet částic),
- vysoké teploty (částice excitovány do vysokých energetických stavů).

Shrňme na závěr vlastnosti fermionů a bosonů do přehledné tabulky:

	Fermiony	Bosony
Spin	1/2, 3/2, ...	0, 1, 2, ...
Hamiltonián	$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1)$	$\hat{H}(1,2) = \hat{H}(2,1)$
Vlnová funkce	$ 1,2\rangle = - 2,1\rangle$	$ 1,2\rangle = + 2,1\rangle$
Kreační a anihilační operátory	$[a_k^+, a_l]_+ = \delta_{kl}$	$[a_k^+, a_l]_- = \delta_{kl}$
Statistika	$\bar{N}_i = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_i - \mu)] + 1}$	$\bar{N}_i = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon_i - \mu)] - 1}$

### 3.8.2. Soubor fotonů (Planckův vyzařovací zákon)

Fotony jsou částice elektromagnetické interakce šířící se rychlostí světla. Jejich základní charakteristiky (spin, chemický potenciál, klidová hmotnost, elektrický náboj) jsou

$$s = 1; \quad \mu = 0; \quad m_0 = 0; \quad Q_e = 0. \quad (3.105)$$

Mezi částicovými a vlnovými vlastnostmi platí převod daný de Broglieho relacemi (2.2)

$$\varepsilon = \hbar\omega, \quad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \quad (3.106)$$

Ze vztahu pro fázovou rychlost určíme snadno vztah mezi energií a hybností pro částice s nulovou klidovou hmotností (jen ty se šíří rychlostí světla):

$$c = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar\omega}{\hbar k} = \frac{\varepsilon}{p} \quad \Rightarrow \quad \varepsilon = pc. \quad (3.107)$$

Tento vztah nahrazuje pro částice s nulovou klidovou hmotností vztah  $\varepsilon = p^2/2m$ . Představme si soubor fotonů uzavřený v nějaké oblasti o objemu  $V$  při teplotě  $T$ . Na fotony budeme v prvním přiblížení nahlížet jako na spojitý systém (WKB aproximace) a určíme element váhového prostoru systému skládajícího se z jednoho fotonu. Degenerační faktor  $g = 2$ , protože elektromagnetické záření je příčné a existují dva nezávislé příčné mody (polarizace) záření. U elementu váhového faktoru provedeme automaticky všechny triviálně proveditelné integrace, element hybnostního prostoru převedeme do sférických souřadnic a hybnost převedeme podle vztahu (3.107) na energii:

$$d\Gamma_\varepsilon = g \frac{d\phi}{(2\pi\hbar)^3} = 2 \frac{dx dy dz dp_x dp_y dp_z}{(2\pi\hbar)^3} \rightarrow \frac{2V}{(2\pi\hbar)^3} 4\pi p^2 dp = \frac{V \varepsilon^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3} d\varepsilon.$$

Získali jsem tak vztah pro hustotu energetických stavů, která kvadraticky roste s energií stavu:

$$d\Gamma_\varepsilon = \gamma(\varepsilon) d\varepsilon; \quad \gamma(\varepsilon) = \frac{V \varepsilon^2}{\pi^2 \hbar^3 c^3}. \quad (3.108)$$

Napišme přehledně další základní statistické a termodynamické veličiny pro jeden stav:

$$\Xi_\varepsilon = \sum_{N_\varepsilon=0}^{\infty} e^{-\beta N_\varepsilon \varepsilon} = \frac{1}{1 - e^{-\beta \varepsilon}}, \quad (3.109)$$

$$\Omega_\varepsilon = -kT \ln \Xi_\varepsilon = kT \ln [1 - e^{-\beta \varepsilon}], \quad (3.110)$$

$$\bar{N}_\varepsilon = - \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{\partial \Omega_\varepsilon}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon} - 1}. \quad (3.111)$$

Všechny tyto vztahy již byly odvozeny dříve, viz např. (3.100), stačilo jen položit  $\mu=0$ . Nyní přistoupíme k výpočtu celkových termodynamických veličin:

$$\Omega = \int_0^\infty \Omega_\varepsilon d\Gamma_\varepsilon = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3 c^3} kT \int_0^\infty \varepsilon^2 \ln[1 - e^{-\beta\varepsilon}] d\varepsilon.$$

Vzniklý integrál budeme řešit per partes

$$\Omega = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3 c^3} kT \left\{ \left[ \frac{\varepsilon^3}{3} \ln(1 - e^{-\beta\varepsilon}) \right]_0^\infty - \frac{\beta}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \right\}.$$

První člen ve složené závorce je nulový, druhý je snadno řešitelný (V.9), ale pro tuto chvíli ho ponecháme v nevyřešeném tvaru (podobný integrál pro fermiony nebude řešitelný a chci, abyste viděli, že i bez řešení integrálu získáme jednoduché vztahy):

$$\Omega = -\frac{V}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \frac{1}{3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon \quad (3.112)$$

Nyní určíme střední počet fotonů, tlak, vnitřní energii a hustotu vnitřní energie:

$$\bar{N} = \int \bar{N}_\varepsilon d\Gamma_\varepsilon = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^2}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon, \quad (3.113)$$

$$p = -\frac{\partial \Omega}{\partial V} = \frac{1}{3} \frac{1}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon, \quad (3.114)$$

$$U = \int_0^\infty \varepsilon \bar{N}_\varepsilon d\Gamma_\varepsilon = \frac{V}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon, \quad (3.115)$$

$$u \equiv \frac{U}{V} = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \int_0^\infty \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon. \quad (3.116)$$

Všimněte si, že i bez provedení integrace zjistíme porovnáním rovnic (3.114) a (3.116) vztah mezi tlakem záření a hustotu energie

!

$$p = \frac{1}{3} u. \quad (3.117)$$

Ze vztahu 3.116 nalezneme snadno diferenciál hustoty energie

$$du = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3 c^3} \frac{\varepsilon^3}{e^{\beta\varepsilon} - 1} d\varepsilon. \quad (3.118)$$

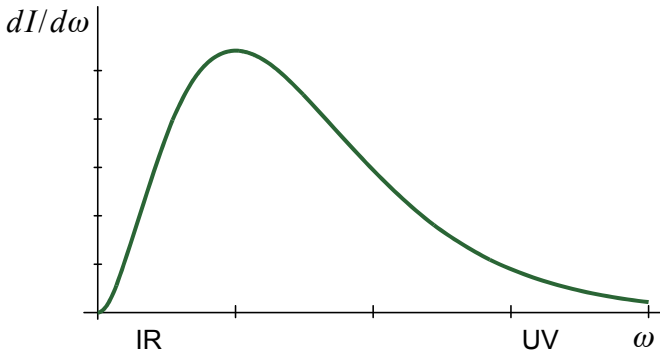
Tok energie neboli intenzitu záření ( $I \equiv uc$ ) můžeme nyní snadno napsat jako funkci energie stavu  $\varepsilon$ , úhlové frekvence ( $\varepsilon = \hbar\omega$ ) nebo vlnové délky ( $\omega = 2\pi c/\lambda$ ):

$$dI(\varepsilon) = \frac{1}{\pi^2 \hbar^3 c^2} \frac{\varepsilon^3}{\exp\left(\frac{\varepsilon}{kT}\right) - 1} d\varepsilon; \quad (3.119)$$

$$dI(\omega) = \frac{h}{\pi^2 c^2} \frac{\omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1} d\omega; \quad (3.120)$$

$$dI(\lambda) = -16\pi^2 \hbar c^2 \frac{\lambda^{-5}}{\exp\left(\frac{2\pi\hbar c}{\lambda kT}\right) - 1} d\lambda. \quad (3.121)$$

Jde o slavný Planckův vyzařovací zákon odvozený v roce 1901. Asi nejčastěji se používá intenzita záření připadající na frekvenční interval  $dI/d\omega$ . Průběh vidíme na přiloženém obrázku



Pro nízké frekvence je  $dI/d\omega \sim \omega^2$  (ve jmenovateli  $\exp[x] - 1 \approx x$ ). Pro vysoké frekvence dominuje exponenciála a platí  $dI/d\omega \sim \exp[-\hbar\omega/kT]$ . Vztah pro nízké frekvence se nazývá Rayleigh-Jeansův zákon. Byl znám před objevem Planckova zákona. Vztah diverguje pro vysoké frekvence (tzv. UV katastrofa)

**Příklad 11:** Nalezněte vlnovou délku maxima vyzařování.

**Řešení:** Toto maximum je závislé na teplotě a určíme ho derivováním vztahu (3.120):

$$\frac{d}{d\omega} \left( \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\hbar\omega}{kT} \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) = 3 \left[ \exp\left(\frac{\hbar\omega}{kT}\right) - 1 \right].$$

Výsledná rovnice je transcendentní rovnice typu

$$x e^x = 3(e^x - 1),$$

kteřou lze snadno řešit numericky nebo graficky, vyjde  $x_0 = 2,822$  a proto

$$\frac{\hbar\omega_{\max}}{kT} = 2,822.$$

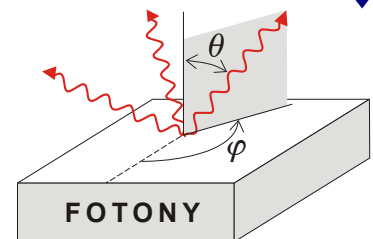
Převedením na vlnovou délku získáme Wienův posunovací zákon:

! 
$$\lambda_{\max} = \frac{b}{T}; \quad b = 0,00289 \text{ K m}. \quad (3.122)$$

Čím teplejší těleso, tím na kratších vlnových délkách vyzařuje. Reliktní záření ( $T \sim 3 \text{ K}$ ) má maximum pro vlnové délky přibližně 1 mm, člověk ( $T \sim 300 \text{ K}$ ) pro vlnové délky asi 10  $\mu\text{m}$ , chladné hvězdy ( $T \sim 3000 \text{ K}$ ) vyzařují v IR oboru na délce asi 1000 nm, hvězdy jako Slunce ( $T \sim 6000 \text{ K}$ ) ve viditelném spektru na vlnové délce 500 nm a velmi horké hvězdy ( $T \sim 30\,000 \text{ K}$ ) vyzařují v UV na vlnové délce 100 nm. ♦

**Příklad 12:** Nalezněte celkovou vyzářenou energii za jednotku času z jednotkové plochy tělesa.

**Řešení:** Intenzita vyzářená v daném směru ( $\varphi, \theta$ ) na frekvenční interval  $d\omega$  a prostorový úhel  $d\omega$  je podle (3.120) rovna (celý prostorový úhel je  $4\pi$ )



$$I = \left\langle \int_0^\infty dI(\omega) \cos\theta d\omega \right\rangle_o = \frac{1}{4\pi} \int \left[ \int_0^\infty \frac{\hbar}{\pi^2 c^2} \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \cos\theta d\omega \right] d\omega;$$

Vztah budeme integrovat přes celé frekvenční spektrum a přes vnější prostorovou polokouli:

$$I = \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \left( \int_0^{\pi/2} \left( \int_0^{2\pi} \frac{\hbar}{\pi^2 c^2} \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} \cos\theta \sin\theta d\varphi \right) d\theta \right) d\omega.$$

Integrace přes úhly je triviální a dává

$$I = \frac{\hbar}{4\pi^2 c^2} \int_0^\infty \frac{\omega^3}{\exp(\hbar\omega/kT) - 1} d\omega.$$

Jako poslední krok provedeme substituci  $x = \hbar\omega/kT$ :

$$I = \frac{k^4}{4\hbar^3 \pi^2 c^2} T^4 \int_0^\infty \frac{x^3}{\exp(x) - 1} dx \stackrel{(V9)}{=} \frac{k^4}{4\hbar^3 \pi^2 c^2} T^4 \cdot \frac{\pi^4}{15} = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2} T^4.$$

Výsledkem je známý Stefanův-Boltzmannův zákon

! 
$$I = \sigma T^4; \quad \sigma = \frac{\pi^2 k^4}{60 \hbar^3 c^2} = 5,8 \times 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}. \quad (3.123) \blacklozenge$$

**Příklad 13:** Nalezněte závislost hustoty energie záření na rozměrech Vesmíru při jeho expanzi.

**Řešení:** Celý Vesmír nemá žádné okolí se kterým by si vyměňoval tepelnou energii a proto je dokonale tepelně izolovaný,  $dQ = 0$ . Jako celek Vesmír nevyměňuje částice s okolím a proto z první věty termodynamické zůstane jen

$$\begin{aligned} dU &= -p dV, \\ d(uV) &= -\frac{1}{3} u dV, \\ d(uV) + \frac{1}{3} u dV &= 0, \\ d(uR^3) + \frac{1}{3} u dR^3 &= 0, \\ R^3 du + 3R^2 u dR + u R^2 dR &= 0, \\ \frac{du}{u} + 4 \frac{dR}{R} &= 0, \\ \ln uR^4 = K &\Rightarrow u \sim \frac{1}{R^4}. \end{aligned}$$

Hustota energie záření klesá rychleji než hustota energie hmoty. To je dáno tím, že s rostoucím objemem klesá hustota jako  $1/R^3$ , ale navíc se při expanzi prodlužuje vlnová délka fotonů, která expanzi Vesmíru „sleduje“. Tím se dále snižuje energie fotonů a výsledný pokles je roven  $1/R^4$ . ◆

**Poznámky**

- Při odvození Planckova zákona jsme váhový faktor odvodili spojitě. Fotony jsme si ale mohli představit jako stojaté vlny v krabici ve tvaru kvádru, které mají vlnové vektory ve směru souřadnicových os a uzly na hranicích kvádru. Výsledek by byl stejný jako při našem odvození.
- Známé problémy s vyzařováním absolutně černého tělesa z konce 19. století byly dány využitím klasických vztahů pro energii a počet částic

$$dU = \varepsilon \cdot N_\varepsilon \cdot \gamma(\varepsilon) \cdot d\varepsilon = kT \cdot 1 \cdot K \varepsilon^2 \cdot d\varepsilon \sim \varepsilon^2 \cdot d\varepsilon.$$

Tyto úvahy vedly na chybný Rayleigh-Jeansův vztah, který nebyl v souhlasu s experimentem a dával jen nízkofrekvenční část Planckovy křivky.

### 3.8.3. Soubor fermionů (bílý trpaslík, neutronová hvězda)

V závěrečných fázích vývoje hvězd může snahu gravitace zhroutit hvězdu do černé díry zastavit tlak degenerovaného elektronového planu (bílý trpaslík) nebo degenerovaného neutronového plynu (neutronová hvězda). Proto se budeme zabývat souborem fermionů nenulové hmotnosti. Výpočet bude podobný jako v předchozí kapitole, jen vztahy pro energii a pro hustotu energetických stavů se budou lišit. Základní charakteristiky obou částic jsou

$$s = 1/2; \quad \mu \neq 0; \quad m_0 \neq 0. \quad (3.124)$$

Nenulovost chemického potenciálu znamená provést dopočet podle vztahu (3.92), nenulovost klidové hmotnosti znamená jiný vztah mezi hybností a energií stavu než v minulé kapitole:

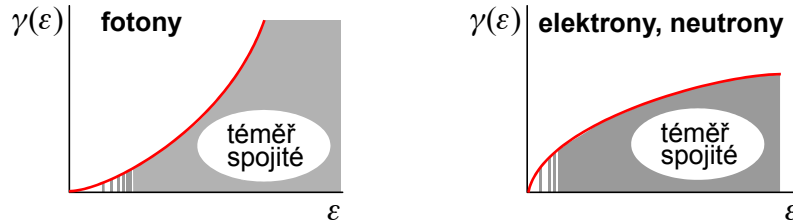
$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m}; \quad p = \sqrt{2m\varepsilon}; \quad dp = \frac{1}{2}\sqrt{2m} \varepsilon^{-1/2} d\varepsilon. \quad (3.125)$$

Určeme nyní element váhového faktoru

$$d\Gamma_\varepsilon = g \frac{d^3x d^3p}{(2\pi\hbar)^3} \rightarrow \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp = \frac{4\pi gV}{(2\pi\hbar)^3} \cdot 2m\varepsilon \cdot \frac{1}{2}\sqrt{2m} \varepsilon^{-1/2} d\varepsilon;$$

$$d\Gamma_\varepsilon = \gamma(\varepsilon) d\varepsilon; \quad \gamma(\varepsilon) = \alpha V \varepsilon^{1/2}; \quad \alpha \equiv \frac{g m^{3/2}}{\sqrt{2\pi^2 \hbar^3}}. \quad (3.126)$$

Na rozdíl od souboru fotonů neroste s energií počet kvantových stavů tak drastickým způsobem, přesto má rostoucí tendenci a pro vyšší energie lze hustotu energetických stavů považovat za téměř spojitou.



Určeme statistické a termodynamické veličiny odpovídající jednomu energetickému stavu:

$$\Xi_\varepsilon = \sum_{N_\varepsilon=0}^1 e^{-\beta N_\varepsilon(\varepsilon-\mu)} = 1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}; \quad (3.127)$$

$$\Omega_\varepsilon = -kT \ln \Xi_\varepsilon = -kT \ln [1 + e^{-\beta(\varepsilon-\mu)}]; \quad (3.128)$$

$$\bar{N}_\varepsilon = -\frac{\partial \Omega_\varepsilon}{\partial \mu} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}; \quad (3.129)$$

$$U_\varepsilon = \varepsilon \bar{N}_\varepsilon = \frac{\varepsilon}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1}. \quad (3.130)$$

Nyní nalezneme integrální veličiny, podobně jako v minulé kapitole je třeba grandkanonický potenciál integrovat per partes. Výpočty jsou jinak zcela přímočaré:

$$\Omega = \int \Omega_\varepsilon d\Gamma_\varepsilon = \dots = -\frac{2}{3} \alpha V \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon; \quad (3.131)$$

$$p = -\frac{\partial \Omega}{\partial V} = \frac{2}{3} \alpha \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon; \quad (3.132)$$

$$\bar{N} = \int \bar{N}_\varepsilon d\Gamma_\varepsilon = \alpha V \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{1/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon; \quad (3.133)$$

$$U = \int U_\varepsilon d\Gamma_\varepsilon = \alpha V \int_0^\infty \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} d\varepsilon. \quad (3.134)$$

Integrály v jednotlivých vztazích je nutné nalézt numericky, ale i bez jejich výpočtu je patrný vztah mezi tlakem a hustotou vnitřní energie pro fermiony o nenulové hmotnosti:

!

$$p = \frac{2}{3} u. \quad (3.135)$$

Hvězdy ve fázích bílého trpaslíka nebo neutronové hvězdy jsou v závěrečných fázích svého vývoje. V centru neprobíhá termojaderní reakce a i když teplota nitra je z „lidského“ hlediska značná, z hlediska aktivního života hvězdy je zanedbatelná a pro hvězdu v podstatě znamená nulovou teplotu. V limitě nízkých teplot ( $\beta \rightarrow \infty$ ) lze integrály snadno vypočítat, protože

$$\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)} + 1} \rightarrow \begin{cases} 1 & \text{pro } \varepsilon \leq \mu_0 \\ 0 & \text{pro } \varepsilon > \mu_0 \end{cases}$$

a integrace se tak stává triviální záležitostí:

$$\Omega = -\frac{4}{15} \alpha V \mu_0^{5/2}; \quad p = \frac{4}{15} \alpha \mu_0^{5/2}; \quad \bar{N} = \frac{2}{3} \alpha V \mu_0^{3/2}; \quad U = \frac{2}{5} \alpha V \mu_0^{5/2}.$$

Povšimněme si intenzivních veličin (tlak  $p$ , koncentrace částic  $\bar{N}/V$ , hustota energie  $U/V$ ):

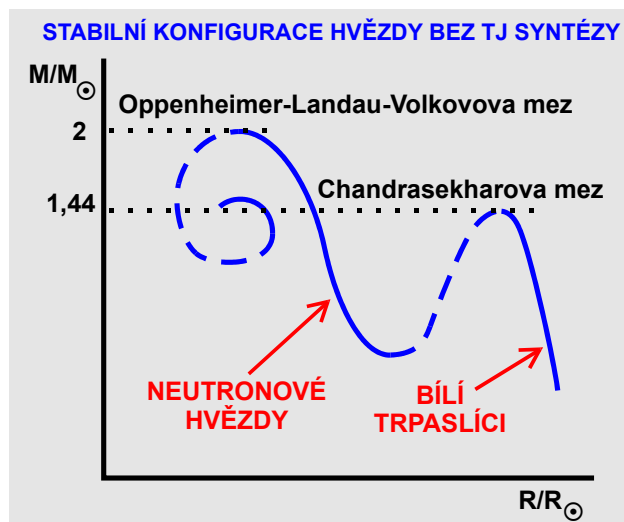
$$p = \frac{4}{15} \alpha \mu_0^{5/2}; \quad n = \frac{2}{3} \alpha \mu_0^{3/2}; \quad u = \frac{2}{5} \alpha \mu_0^{5/2}. \quad (3.136)$$

Chemický potenciál je parametrem rovnic a lze ho vyloučit z rovnice pro koncentraci částic:

!

$$\mu_0 = \text{const } n^{2/3} \quad \Rightarrow \quad p = \text{const } n^{5/3}; \quad u = \frac{3}{2} p.$$

Fermionový plyn vykazuje polytropní chování s koeficientem 5/3. I při nulové teplotě existuje obrovský nenulový tlak způsobený kvantovými procesy („nesnášenlivostí“ fermionů). Plyn se střední tepelnou energií menší než Fermiho mez ( $kT < \mu_0$ ) nazýváme degenerovaný. V případě relativistického výpočtu vyjde polytropní koeficient 4/3, což je právě na hranici stability a nestability polytropní hvězdy.





### 3.9. FLUKTUACE A ENTROPIE

#### 3.9.1. Fluktuační

V minulých kapitolách jsme zavedli střední hodnotu dynamické proměnné  $A$  středovanou přes soubor

$$\langle A \rangle \equiv \sum_n A_n w_n.$$

Definujme nyní odchylku veličiny  $A$  od střední hodnoty

$$\Delta A \equiv A - \langle A \rangle \quad (3.137)$$

Střední hodnota odchylek je samozřejmě nulová (je zhruba stejně kladných i záporných odchylek od střední hodnoty):

$$\langle \Delta A \rangle = 0 \quad (3.138)$$

Chceme-li přesto znát průměrnou velikost odchylek, musíme průměrovat buď absolutní hodnoty odchylek nebo kvadráty odchylek (průměr z kvadrátů je třeba samozřejmě nakonec odmocnit):

$$\Delta A_{abs} \equiv \langle |\Delta A| \rangle; \quad \Delta A_{kv} \equiv \sqrt{\langle (\Delta A)^2 \rangle}. \quad (3.139)$$

Druhá z veličin se nazývá *střední kvadratická fluktuace* veličiny  $A$ . Velký význam má ve statistice i sama neodmocněná veličina (průměr z kvadrátů odchylek, *rozptyl*, *variance* nebo *druhý centrální moment* veličiny  $A$ ):

$$\text{var } A \equiv \overline{(\Delta A)^2} = \overline{(A - \bar{A})^2} = \overline{(A^2 - 2A\bar{A} + \bar{A}^2)} = \bar{A}^2 - 2\bar{A}^2 + \bar{A}^2 = \bar{A}^2 - \bar{A}^2.$$

Pro jednoduchost zápisu jsme pro střední veličiny použili pruh nad proměnnou. Výsledek je samozřejmě možné zapsat standardním způsobem:

$$\text{var } A \equiv \langle (\Delta A)^2 \rangle = \langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2. \quad (3.140)$$

Fluktuační různých fyzikálních veličin úzce souvisí s důležitými charakteristikami systému. Například fluktuační velikosti rychlosti  $v$  souvisí s teplotou, fluktuační energie  $E$  souvisí s měrným teplem, fluktuační počtu částic  $N$  s kompresibilitou systému a fluktuační magnetizace  $M$  (hustoty dipólového momentu) se susceptibilitou. Tyto charakteristiky systému lze relativně snadno experimentálně měřit. Při počítačových simulacích je naopak snadné sledovat fluktuační simulovaných veličin a z nich usuzovat na měrná tepla, kompresibilitu a susceptibilitu systému. Uvedme nyní vztahy pro fluktuační některých veličin:

$$\begin{aligned} \text{var } v &= \frac{kT}{m} (3 - 8/\pi); & \text{var } v^2 &= 6 \left( \frac{kT}{m} \right)^2; \\ \text{var } E &= kT^2 C_V; & \text{var } S &= k C_p; \\ \text{var } N &= kT \frac{\bar{N}^2}{V^2} K; & \text{var } M &= \frac{1}{\mu_0} \frac{kT}{V} \chi. \end{aligned} \quad (3.141)$$

V uvedených vztazích je  $C$  tepelná kapacita,  $K$  komprese a  $\chi$  susceptibilita:

$$C \equiv \frac{\partial U}{\partial T}; \quad K \equiv - \frac{\partial V}{\partial p}; \quad \chi \equiv \frac{\partial M}{\partial H}. \quad (3.142)$$

Odpovídající intenzivní veličiny jsou měrné teplo (měrná tepelná kapacita) a kompresibilita:

$$c \equiv \frac{1}{N} \frac{\partial U}{\partial T}; \quad \mathcal{K} \equiv -\frac{1}{V} \frac{\partial V}{\partial p}. \quad (3.143)$$

V této kapitole se budeme zabývat fluktuací rychlosti a energie. V kapitole 3.10.2 dokážeme vztah pro fluktuaci magnetizace. Důkazy ostatních vztahů přesahují rámec tohoto sylabu. Čtenář je nalezne v každé učebnici statistické fyziky (např. J. Kvasnica: *Statistická fyzika*, ACADEMIA 1983).

### Fluktuace rychlosti

Odvoďme první ze vztahů pro fluktuace velikosti rychlosti. Využijeme při tom hodnotu střední kvadratické rychlosti a střední rychlosti ze vztahu (3.66):

$$\text{var } v = \langle v^2 \rangle - \langle v \rangle^2 = v_{kv}^2 - v_s^2 = \frac{3kT}{m} - \frac{8kT}{\pi m} = \frac{kT}{m} (3 - 8/\pi).$$

Přímým výpočtem z Maxwellova rozdělení můžeme odvodit vztah pro fluktuace kvadrátu rychlosti:

$$\text{var } v^2 = \langle v^4 \rangle - \langle v^2 \rangle^2 = \dots = 6(kT/m)^2.$$

### Fluktuace energie

Spočtěme z definice tepelnou kapacitu při stálém objemu

$$\begin{aligned} C_V &= \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial}{\partial T} \left( \sum_n E_n w_n \right) = \frac{\partial}{\partial T} \left( \sum_n E_n(V) \exp \left[ \frac{F(T,V) - E_n(V)}{kT} \right] \right) \Rightarrow \\ C_V &= \sum_n E_n \left( \frac{\frac{\partial F}{\partial T} kT - (F - E_n)k}{(kT)^2} \right) \exp \left[ \frac{F - E_n}{kT} \right] \Rightarrow \\ C_V &= \sum_n E_n \left( \frac{-SkT - (F - E_n)k}{(kT)^2} \right) w_n. \end{aligned}$$

Získaný výraz rozdělíme na jednotlivé členy a ze součtu vytkneme veličiny, přes které se nesčítá:

$$C_V = -\frac{S}{kT} \sum_n E_n w_n - \frac{F}{kT^2} \sum_n E_n w_n + \frac{1}{kT^2} \sum_n E_n^2 w_n.$$

Nyní jsou již úpravy jednoduché:

$$\begin{aligned} C_V &= -\frac{S}{kT} U - \frac{F}{kT^2} U + \frac{1}{kT^2} \langle E^2 \rangle \Rightarrow \\ C_V &= \frac{-(F + TS)U + \langle E^2 \rangle}{kT^2} = \frac{-UU + \langle E^2 \rangle}{kT^2} = \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{kT^2}. \end{aligned}$$

Rozptyl energie proto je

$$\text{var } E = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = kT^2 C_V.$$

Tím jsme dokázali třetí z fluktuačních vztahů. Tepelná kapacita je dána fluktuacemi energie systému!! Kdyby energie nefluktuovala, systém by měl nulovou tepelnou kapacitu.

### Relativní fluktuace energie (disperze)

Předpokládejme ideální plyn, pro který je  $U = fNkT/2$  a  $C_V = fNk/2$ . Určeme relativní fluktuaci energie (disperzi) definovanou vztahem

$$(\delta_E)^2 \equiv \frac{\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2}{\langle E \rangle^2} = \frac{kT^2 C_V}{U^2} = \frac{2}{fN} \sim \frac{1}{N} \Rightarrow$$

$$\delta_E \sim \frac{1}{\sqrt{N}}.$$

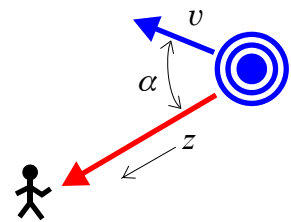
Disperze je bezrozměrná veličina charakterizující fluktuace energie systému. Čím větší počet částic systém obsahuje, tím menší fluktuace vykazuje. Systémy s velkým počtem částic mají minimální relativní fluktuace celkové energie. Systémy s malým počtem částic mají velké relativní fluktuace energie.

Fluktuace fyzikálních veličin mají ve fyzice mimořádný význam. Sama příroda na nejelementárnější úrovni nutí veličiny fluktuovat. Malá fluktuace libovolné zobecněné souřadnice vede podle Heisenbergových relací neurčitosti na velkou fluktuaci odpovídající zobecněné hybnosti a naopak. I sama kvantová pole lze chápat jako zobecněné souřadnice a přísluší jim zobecněné hybnosti. Ani u polí nelze fluktuace potlačit a jsou jim vlastní. Zodpovídají za tvorbu virtuálních párů ve vakuu i za samotnou složitou strukturu časoprostoru v malých měřících. Fluktuace mají význam také v teorii chyb, právě fluktuace způsobují předpověditelné chyby měření. Další význam fluktuací je v numerických simulacích. Sledováním fluktuací lze zjišťovat měrné teplo, susceptibilitu či kompresibilitu systému. Přestože jsme fluktuacím věnovali relativně malou část tohoto sylabu, mají pro statistickou fyziku mimořádný význam.

**Příklad 14:** Nalezněte profil spektrální čáry způsobený chaotickým pohybem atomů zdroje.

**Řešení:** Pohybuje-li se zdroj záření vzhledem k pozorovateli, mění se přijímaná frekvence podle Dopplerova jevu

$$\omega = \omega_0 \left( 1 + \frac{v}{c} \cos \alpha \right) = \omega_0 \left( 1 + \frac{v_z}{c} \right)$$



Je-li zdrojem záření například nějaký zahřátý plyn či obálka hvězdy, jednotlivé atomy se pohybují různými rychlostmi ve shodě s Maxwell-Boltzmannovým rozdělením. Pozorovatel vidí jednotlivé emisní akty frekvenčně posunuté a celkovým výsledkem je Dopplerovo rozšíření spektrální čáry. Ze vztahu pro Dopplerův jev určíme fluktuaci frekvence záření:

$$! \quad \omega - \omega_0 = \omega_0 \frac{v_z}{c} \quad \Rightarrow \quad \Delta\omega^2 = \omega_0^2 \frac{v_z^2}{c^2} \quad \Rightarrow \quad \overline{\Delta\omega^2} = \omega_0^2 \frac{\overline{v_z^2}}{c^2} = \omega_0^2 \frac{kT}{mc^2}.$$

Nalezli jsme tak kvadratickou fluktuaci frekvence. Je úměrná kvadrátu základní frekvence a podílu tepelné energie a klidové energie jedné zářivé částice. Čím chladnější plyn září, tím užší je spektrální čára. Nalezneme nyní přesný profil čáry. Napíšeme profil intenzity pomocí rozdělení rychlostí zdrojů záření:

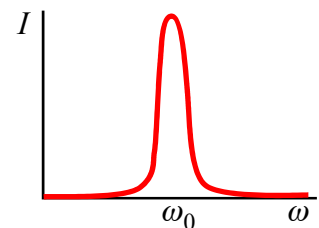
$$dI(v_z) = I_0 \exp\left[-mv_z^2/2kT\right] dv_z.$$

Rychlost  $v_z$  převedeme na frekvenci pomocí Dopplerova vztahu

$$\omega = \omega_0 (1 + v_z/c) \quad \Rightarrow \quad v_z = c(\omega - \omega_0)/\omega_0$$

a dosadíme do vztahu pro intenzitu:

$$! \quad dI(\omega) = I_0 \exp\left[-\frac{mc^2}{2kT} \left(\frac{\omega - \omega_0}{\omega_0}\right)^2\right] d\omega.$$



Spektrální čára získává vlivem Dopplerova jevu profil Gaussova balíku. ♦

### 3.9.2. Entropie

Entropie je veličina, kterou jsme zavedli v termodynamice rovnovážných procesů jako diferenciál tepla vynásobený integračním faktorem. Entropie je úplnou diferenciální formou. Statistická fyzika nám poskytla další možnou (statistickou) definici entropie jako střední hodnotu logaritmu pravděpodobnosti (až na nepodstatnou konstantu):

$$dS = \frac{dQ}{T}; \quad dS = -k \sum_n w_n \ln w_n.$$

Tím entropie souvisí s pravděpodobností realizace daného stavu systému. Pro entropii platí velmi zajímavé tvrzení:

**!** Entropie rovnovážného stavu je extrémální  $\Leftrightarrow$  systém podléhá kanonickému, respektive grandkanonickému rozdělení.

Tedy platí-li kanonické (grandkanonické) rozdělení, potom entropie dosahuje při rovnováze extrému (maxima). Nerovnovážné děje v uzavřeném izolovaném systému směřují k tomuto maximu a zvyšují neuspořádanost systému. A naopak, přijmeme-li extrémalnost entropie v rovnovážném stavu jako výchozí princip, musí platit kanonické (grandkanonické) rozdělení. Dokažme tuto implikaci pro grandkanonické rozdělení:

$$\begin{aligned} \delta S &= 0, \\ \sum_n w_n &= 1, \\ \sum_n E_n w_n &= U, \\ \sum_n N w_n &= \bar{N}. \end{aligned}$$

Jde o hledání extrému za tří vazebních podmínek. Extrémy s vazebními podmínkami se hledají metodou Lagrangeových multiplikátorů. Zavedeme funkci:

$$\phi(w_l, \lambda_1, \lambda_2, \lambda_3) = -k \sum_n w_n \ln w_n + \lambda_1 \left( \sum_n w_n - 1 \right) + \lambda_2 \left( \sum_n E_n w_n - U \right) + \lambda_3 \left( \sum_n N w_n - \bar{N} \right).$$

Jde o entropii, k níž jsou přidány vazby (nulové výrazy) s multiplikátory  $\lambda$ . Nyní budeme zkoumat podmínku extrémalnosti nově zavedené funkce tří proměnných.

$$\frac{\partial \phi}{\partial w_l} = 0 \quad \Rightarrow \quad -k \ln w_l - k + \lambda_1 w_l + \lambda_2 E_l + \lambda_3 N \quad \Rightarrow \quad w_l = e^{c_1 + c_2 E_l + c_3 N}.$$

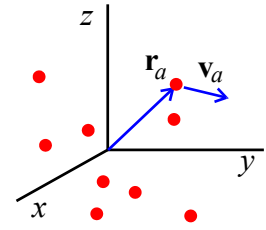
Grandkanonické rozdělení je tak přirozeným způsobem provázáno s extrémalností entropie. V případě kanonického rozdělení je počet částic konstantní a extrémalnost entropie zkoumáme jen za přítomnosti dvou vazeb. Výsledkem stejné úvahy je kanonické rozdělení.

### 3.10. ELEKTRICKY A MAGNETICKY AKTIVNÍ SYSTÉMY

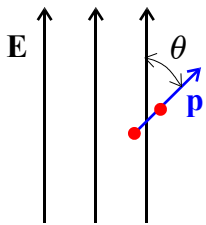
#### 3.10.1. Základní pojmy

##### Soustava nabitých částic

Představme si systém složený z  $N$  nabitých částic, které jsou schopné reagovat na vnější elektrická a magnetická pole, vytvářet vlastní pole a vzájemně interagovat prostřednictvím těchto polí. Budeme-li chtít úlohu řešit komplexně, musíme počítat *pole* z Maxwellových rovnic doplněných o materiálové vztahy (vztahy popisující jak systém reaguje na přítomnost polí jako celek) a dále počítat *pohyby částic* z Lorentzovy pohybové rovnice. Označme polohu  $a$ -té částice  $\mathbf{r}_a$  a rychlost  $a$ -té částice  $\mathbf{v}_a$ . Soustava částic vykazuje jako celek dipólový elektrický a magnetický moment. Zopakujme v této kapitole některé pojmy z elektřiny a magnetismu, které budeme ke statistickému popisu potřebovat.



##### Elektrický dipól



Dipólový moment  $\mathbf{p}$  soustavy částic je definován vztahem

$$\mathbf{p} = \sum_a \mathbf{p}_a = \sum_a Q_a \mathbf{r}_a . \quad (3.144)$$

*Elementární dipól:* Pro dvojici částic s opačným nábojem a vzájemnou polohou  $\mathbf{d}$  dá tato definice výraz

$$\mathbf{p} = +Q\mathbf{r}_+ - Q\mathbf{r}_- = Q(\mathbf{r}_+ - \mathbf{r}_-) = Q\mathbf{d} .$$

*Interakce dipólu* s vnějším elektrickým polem je dána prostřednictvím energetického předpisu

$$W_{\text{int}} = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} . \quad (3.145)$$

*Polarizace P* systému je definována jako hustota elektrického dipólového momentu:

$$\mathbf{P} = \frac{1}{V} \sum_a Q_a \mathbf{r}_a . \quad (3.146)$$

*Materiálový vztah* mezi indukci a intenzitou elektrického pole lze zapsat s pomocí polarizace (právě polarizace popisuje reakci systému na elektrické pole) takto:

$$\mathbf{D} = \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}(\mathbf{E}) . \quad (3.147)$$

*Elektrická susceptibilita:* Pro slabá pole lze odezvu systému považovat za lineární a provést Taylorův rozvoj vektoru polarizace do prvního řádu (používáme sumační konvenci):

$$D_k = \varepsilon_0 E_k + \frac{\partial P_k}{\partial E_l} E_l = \varepsilon_0 E_k + \varepsilon_0 \kappa_{kl} E_l = \varepsilon_0 (\delta_{kl} + \kappa_{kl}) E_l .$$

Příslušná matice koeficientů se nazývá tenzor elektrické susceptibility

$$\kappa_{kl} \equiv \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial P_k}{\partial E_l} . \quad (3.148)$$

Při lineární odezvě lze proto psát vztah mezi indukci a intenzitou v maticovém tvaru

$$D_k = \varepsilon_{kl} E_l ; \quad \varepsilon_{kl} \equiv \varepsilon_0 (\delta_{kl} + \kappa_{kl}) . \quad (3.149)$$

Matice  $\varepsilon_{kl}$  se nazývá tenzor permitivity. Pole  $\mathbf{D}$  a  $\mathbf{E}$  nemusí mířit ve stejném směru.

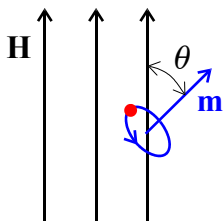
*Hustota vnitřní energie:*

Z celkové hustoty energie elektrického pole  $du_E = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{D} = \mathbf{E} \cdot d(\varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P})$  odpovídá vnitřní energii druhý člen, který souvisí s reakcí systému na pole, tedy s polarizací:

! 
$$du = \mathbf{E} \cdot d\mathbf{P} \quad (3.150)$$

Stejně jako u elektrického dipólu budeme postupovat s přehledem základních vztahů pro interakci magnetického pole se systémem (magnetického dipólu).

**Magnetický dipól**



Dipólový moment soustavy částic je definován vztahem

! 
$$\mathbf{m} = \sum_a \mathbf{m}_a = \frac{1}{2} \sum_a Q_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a \quad (3.151)$$

Elementární dipól: Pro jednu po kružnici rotující nabitou částici je velikost magnetického dipólového momentu ( $T$  označuje periodu oběhu,  $I$  proud způsobený oběhem náboje)

$$|\mathbf{m}| = \frac{Qrv}{2} = \frac{ITrv}{2} = \frac{I \frac{2\pi r}{v} rv}{2} = I \pi r^2 = IS.$$

Magnetický dipólový moment systému stejných částic souvisí s celkovým momentem hybnosti  $\mathbf{L}$  (hmotnost částice je označena  $m_0$ , aby se nepletla s velikostí momentu):

$$\mathbf{m} = \frac{Q}{2} \sum_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a = \frac{Q}{2m_0} \sum_a m_0 \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a = \frac{Q}{2m_0} \mathbf{L} \quad (3.152)$$

Interakce dipólu s vnějším magnetickým polem je dána prostřednictvím energetického předpisu

! 
$$W_{\text{int}} = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B} = -\mu_0 \mathbf{m} \cdot \mathbf{H} \quad (3.153)$$

Magnetizace  $\mathbf{M}$  systému je definována jako hustota magnetického dipólového momentu:

! 
$$\mathbf{M} = \frac{1}{V} \sum_a \frac{1}{2} Q_a \mathbf{r}_a \times \mathbf{v}_a \quad (3.154)$$

Materiálový vztah mezi indukci a intenzitou magnetického pole lze zapsat s pomocí vektoru magnetizace (právě magnetizace popisuje reakci systému na magnetické pole) takto:

! 
$$\mathbf{B} = \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M}(\mathbf{H})) \quad (3.155)$$

Magnetická susceptibilita: Pro slabá pole lze odezvu systému považovat za lineární a provést Taylorův rozvoj vektoru polarizace do prvního řádu (používáme sumační konvenci):

$$B_k = \mu_0 H_k + \mu_0 \frac{\partial M_k}{\partial H_l} H_l = \mu_0 H_k + \mu_0 \chi_{kl} H_l = \mu_0 (\delta_{kl} + \chi_{kl}) H_l.$$

Příslušná matice koeficientů se nazývá tenzor magnetické susceptibility

! 
$$\chi_{kl} \equiv \frac{\partial M_k}{\partial H_l} \quad (3.156)$$

Při lineární odezvě lze proto psát vztah mezi indukci a intenzitou v maticovém tvaru

$$B_k = \mu_{kl} H_l; \quad \mu_{kl} \equiv \mu_0 (\delta_{kl} + \chi_{kl}) \quad (3.157)$$

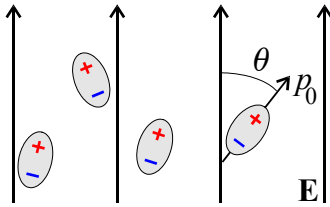
Matice  $\mu_{kl}$  se nazývá tenzor permitivity. Pole  $\mathbf{B}$  a  $\mathbf{H}$  nemusí mířit ve stejném směru.

Hustota vnitřní energie:

Z celkové hustoty energie magnetického pole  $du_M = \mathbf{H} \cdot d\mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{H} \cdot d(\mathbf{H} + \mathbf{M})$  odpovídá vnitřní energii druhý člen, který souvisí s reakcí systému na pole, tedy s magnetizací:

! 
$$du = \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} \quad (3.158)$$

**Příklad 15:** Nalezněte rozdělení souboru elektrických dipólů ve vnějším poli.



$$W_{\text{int}} = -\mathbf{p} \cdot \mathbf{E} = -p_0 E \cos \theta \quad \Rightarrow$$

$$dw(\varphi, \theta) = K \cdot \exp\left[\frac{p_0 E \cos \theta}{kT}\right] d\varphi d\theta \quad \Rightarrow$$

$$dw(\varphi, \theta) = K \cdot \exp\left[\frac{p_0 E \cos \theta}{kT}\right] \sin \theta d\varphi d\theta.$$

### 3.10.2. Magneticky aktivní materiály

#### První věta termodynamická a volná energie

Pro interakci elektrických a magnetických polí se systémem známe hustotu vnitřní energie. Proto budeme muset i první větu termodynamickou přepsat do hustot. Zaveďme

$$u = \frac{U}{V}; \quad a = \frac{A}{V}; \quad s = \frac{S}{V}; \quad f = \frac{F}{V}; \quad n = \frac{N}{V}.$$

Pozor na kolize tohoto zavedení. Písmen abecedy je žalostně málo a tak v místech, kde je význam veličiny zřejmý použijeme k označení i písmeno, které má již jiný význam (typické kolize: magnetický dipólový moment – hmotnost, elektrický dipólový moment – hybnost, hustota volné energie – počet stupňů volnosti, hustota hmoty – rozdělovací funkce, atd.). Převeďme nyní do hustot první větu termodynamickou pro konstantní počet částic (3.19).

$$du = Tds - \frac{1}{V} pdV + \mathbf{E} \cdot d\mathbf{P} + \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M}$$

V zákonu zachování energie se objevují další členy vyjadřující, že systém může konat práci elektricky a magneticky. Nezapomeňte, že poslední členy jsou skalárním součinem, tj. každý z nich je součtem tří členů. Nalezneme diferenciál objemu

$$\rho V = M \quad \Rightarrow \quad \rho dV + V d\rho = 0 \quad \Rightarrow \quad dV = -V \frac{d\rho}{\rho}.$$

Diferenciál objemu dosadíme do členu pro mechanickou práci a získáme výsledný vztah

$$! \quad du = Tds + \frac{p}{\rho} d\rho + \mathbf{E} \cdot d\mathbf{P} + \mu_0 \mathbf{H} \cdot d\mathbf{M} \quad (3.159)$$

Proveďme zúplnění diferenciálů prvního, třetího a čtvrtého členu na pravé straně:

$$d(u - Ts - \mathbf{E} \cdot \mathbf{P} - \mu_0 \mathbf{H} \cdot \mathbf{M}) = -sdT + \frac{p}{\rho} d\rho - \mathbf{P} \cdot d\mathbf{E} - \mu_0 \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}.$$

Získáváme tak vztah pro diferenciál volné energie se všemi přidruženými vztahy:

$$f = u - Ts - \mathbf{E} \cdot \mathbf{P} - \mu_0 \mathbf{H} \cdot \mathbf{M};$$

$$df = -sdT + \frac{p}{\rho} d\rho - \mathbf{P} \cdot d\mathbf{E} - \mu_0 \mathbf{M} \cdot d\mathbf{H}; \quad (3.160)$$

$$f = f(T, \rho, \mathbf{E}, \mathbf{H}).$$

Derivace hustoty volné energie podle jejích proměnných dají jednotlivé koeficienty diferenciálu:

$$s = -\frac{\partial f}{\partial T}; \quad p = \rho \frac{\partial f}{\partial \rho}; \quad \mathbf{P} = -\frac{\partial f}{\partial \mathbf{E}}; \quad \mathbf{M} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial f}{\partial \mathbf{H}}. \quad (3.161)$$

Znalost hustoty volné energie umožňuje zjistit hustotu entropie, stavovou rovnici, vektor polarizace a vektor magnetizace, tedy reakce vyvolané v systému vnějšími poli. Poslední dvě relace jsou vektorové, ve složkách mají tvar

$$P_k = -\frac{\partial f}{\partial E_k}; \quad M_k = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial f}{\partial H_k}.$$

Pomocí vztahů (3.148) a (3.156) můžeme z hustoty volné energie určit i tenzory elektrické a magnetické susceptibility

$$\kappa_{kl} = -\frac{1}{\varepsilon_0} \frac{\partial^2 f}{\partial E_k \partial E_l}; \quad \chi_{kl} = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial^2 f}{\partial H_k \partial H_l} \quad (3.162)$$

a samozřejmě podle vztahů (3.149) a (3.157) i tenzory permitivity a permeability:

$$\varepsilon_{kl} \equiv \varepsilon_0 \delta_{kl} - \frac{\partial^2 f}{\partial E_k \partial E_l}; \quad \mu_{kl} \equiv \mu_0 \delta_{kl} - \frac{\partial^2 f}{\partial H_k \partial H_l}. \quad (3.163)$$

Znalost hustoty volné energie nám umožní výpočet základních charakteristik systému, a to jak termodynamických, tak elektrických a magnetických.

### **Střední kvadratická fluktuační magnetizace**

Uvažujme jen magneticky aktivní materiál. Odvození provedeme diskrétně, magnetizace souvisí s momentem hybnosti částic a ten je kvantovaný. Jednotlivé možné stavy magnetizace budeme indexovat indexem  $\alpha$ .

$$w_\alpha = \exp[\beta(F - W_{\text{int},\alpha})] = \exp[\beta(F + \mu_0 V \mathbf{M}_\alpha \cdot \mathbf{H})].$$

Nalezneme susceptibilitu, pro jednoduchost jen v jednorozměrném problému:

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\partial \bar{M}}{\partial H} = \frac{\partial}{\partial H} \left( \sum_{\alpha} M_{\alpha} \exp[\beta f(T, H) V + \beta \mu_0 M_{\alpha} V H] \right) \Rightarrow \\ \chi &= \sum_{\alpha} \left( M_{\alpha} \beta \left( \frac{\partial f}{\partial H} V + \mu_0 V M_{\alpha} \right) \exp[\dots] \right). \end{aligned}$$

Podobně jako jsme postupovali u odvození fluktuační energie oddělíme jednotlivé členy a vytkneme ze součtu veličiny, přes které se nesčítá:

$$\begin{aligned} \chi &= \sum_{\alpha} \left( M_{\alpha} \beta (-\mu_0 \bar{M} V + \mu_0 M_{\alpha} V) w_{\alpha} \right); \\ \chi &= -\beta \mu_0 \bar{M} V \sum_{\alpha} M_{\alpha} w_{\alpha} + \beta \mu_0 V \sum_{\alpha} M_{\alpha}^2 w_{\alpha}; \\ \chi &= -\beta \mu_0 V \bar{M}^2 + \beta \mu_0 V \overline{M^2}; \\ \chi &= \beta \mu_0 V \left( \overline{M^2} - \bar{M}^2 \right). \end{aligned}$$

Získali jsme tak jednoduchý vztah pro fluktuační magnetizaci mezi susceptibilitou a fluktuační magnetizací:

$$\text{!} \quad \chi = \beta \mu_0 V \left( \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2 \right) = \beta \mu_0 V \text{ var } M. \quad (3.164)$$

Dokázali jsme tak další z fluktuačních vztahů (3.141).

### **Zdroje magnetického momentu, Landéův faktor**

Zdrojem magnetického momentu částice může být jak orbitální (**L**), tak spinový (**S**) moment hybnosti částice. Jak se vůbec v kvantové teorii sčítají dva momenty hybnosti? Uveďme jen přehled výsledků pro dva momenty označené **L** a **S** bez ohledu na to, co znamenají:



$$\begin{array}{lll} \mathbf{L} & L = \sqrt{l(l+1)} \hbar & L_3 = m_L \hbar; \quad m_L = -l, -l+1, \dots, l-1, l \\ \mathbf{S} & S = \sqrt{s(s+1)} \hbar & S_3 = m_S \hbar; \quad m_S = -s, -s+1, \dots, s-1, s \\ \mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} & J = \sqrt{j(j+1)} \hbar; & J_3 = m_J \hbar; \quad m_J = -j, -j+1, \dots, j-1, j \end{array}$$

samo výsledné kvantové číslo  $j$  může nabývat hodnot  $j = |l-s|, \dots, l+s$ .

I neutrální částice (například neutron) může být zdrojem magnetického dipólového momentu, za který odpovídá nenulový spin. Magnetický dipólový moment (3.152) je modifikován takto:

$$\mathbf{m} = g \frac{Q}{2m_0} \mathbf{J}. \quad (3.165)$$

Veličina  $\mathbf{J}$  je celkový moment částice a faktor  $g$  je charakteristický pro konkrétní částici:

$$\begin{array}{ll} g = -2, & \text{elektron;} \\ g = +5.68, & \text{proton;} \\ g = -3.86, & \text{neutron.} \end{array}$$

Trochu složitější je situace v komplexním systému, jakým je celý atom. Zde dochází k  $LS$  vazbě – interakci kolektivních orbitálních a spinových stupňů volnosti celého systému. Výsledek je shodný se vztahem (3.165) jen faktor  $g$  je dán složitější formulí

$$g = 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \quad (3.166)$$

a nazývá se *Landéův faktor*. Naznačme zde odvození tohoto faktoru. V kvantově mechanickém Hamiltoniánu popisuje interakci atomu s vnějším polem člen

$$\hat{H}_{\text{int}} = \text{const} (\hat{\mathbf{L}} + 2\hat{\mathbf{S}}) \cdot \mathbf{H}.$$

Koeficient 2 u spinového momentu je dán anomálním magnetickým momentem elektronu. V časovém průměru přispívají k interakci z orbitální i spinové části jen složky rovnoběžné s celkovým momentem  $\mathbf{J}$ . Nalezneme proto projekci kombinace vektorů  $\mathbf{L}+2\mathbf{S}$  do celkového momentu  $\mathbf{J}$ :

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \frac{|\mathbf{J}\rangle \langle \mathbf{J} | \mathbf{L} + 2\mathbf{S} \rangle}{\langle \mathbf{J} | \mathbf{J} \rangle} = \frac{\mathbf{J} \cdot (\mathbf{L} + 2\mathbf{S})}{J^2} \mathbf{J}$$

Tuto projekci se pokusíme převést na kvadráty velikostí základních momentů  $J^2, L^2, S^2$ :

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \frac{\mathbf{J} \cdot (\mathbf{J} + \mathbf{S})}{J^2} \mathbf{J} = \frac{J^2 + \mathbf{J} \cdot \mathbf{S}}{J^2} \mathbf{J} = \frac{J^2 + (\mathbf{L} + \mathbf{S}) \cdot \mathbf{S}}{J^2} \mathbf{J} = \frac{J^2 + S^2 + \mathbf{L} \cdot \mathbf{S}}{J^2} \mathbf{J}.$$

Člen  $\mathbf{L} \cdot \mathbf{S}$  určíme z rovnosti  $J^2 = (\mathbf{L} + \mathbf{S})^2 = L^2 + 2\mathbf{L} \cdot \mathbf{S} + S^2$ . Výsledek je

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \frac{J^2 + S^2 + (J^2 - L^2 - S^2)/2}{J^2} \mathbf{J} = \frac{3J^2 + S^2 - L^2}{2J^2} \mathbf{J} = \left( 1 + \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2} \right) \mathbf{J}.$$

Využijeme-li nyní kvantování těchto veličin, máme výsledek

$$P_{\mathbf{J}}(\mathbf{L} + 2\mathbf{S}) = \left( 1 + \frac{j(j+1) + s(s+1) - l(l+1)}{2j(j+1)} \right) \mathbf{J}.$$

Faktor v závorce je právě Landéův faktor, který multiplikativně modifikuje celkový moment hybnosti  $\mathbf{J}$  v důsledku  $LS$  vazby.

### Interakce magnetických momentů

Energie interakce magnetického momentu s vnějším polem je dána vztahem

$$W_{\text{int}} = - \mathbf{m} \cdot \mathbf{B} = - g \frac{Q}{2m_0} \mathbf{J} \cdot \mathbf{B} . \quad (3.167)$$

Moment  $\mathbf{J}$  bude mít snahu orientovat se buď ve směru vnějšího pole nebo proti směru pole podle znaménka faktoru  $g$ . Celý výraz se často píše v podobě

$$W_{\text{int}} = - g \frac{Q}{2m_0} J_z B = - g \frac{Q}{2m_0} m_J \hbar B = - m_J g \frac{Q\hbar}{2m_0} B .$$

Zlomek ve výrazu se nazývá *Bohrův magneton*  $\mu_B$ , znaménko je nepodstatné, protože magnetické kvantové číslo  $m_J$  probíhá záporné i kladné hodnoty.

! 
$$W_{\text{int}} = m_J g \mu_B B ; \quad \mu_B \equiv \frac{Q\hbar}{2m_0} , \quad m_J = -j, -j+1, \dots, j-1, j . \quad (3.168)$$

Pro systém magnetických momentů musíme uvážit i interakci momentů mezi sebou a namísto indukce magnetického pole je výhodná intenzita pole, která souvisí s volnou energií systému:

$$W_{\text{int}} = \sum_{a,b} W_0(\mathbf{m}_a, \mathbf{m}_b) - g \mu_0 \frac{Q}{2m_0} \sum_a \mathbf{J}_a \cdot \mathbf{H} \quad (3.169)$$

### Zeemanův jev

Ve vnějším magnetickém poli se původně jedna energetická hladina podle vztahu (3.168) rozštěpí na  $2j+1$  podhladin. To vede na štěpení spektrálních čar nazývané *Zeemanův jev*. Rozdíl energie dvou sousedních podhladin je  $\Delta E = g \mu_B B$ , z tohoto vztahu můžeme snadno určit vzdálenost mezi rozštěpenými čarami.

### Magnetická rezonance

Systém magnetických dipólů ve vnějším magnetickém poli je schopen pohlcovat kvanta elektromagnetického záření, která odpovídají rozdílu energetických hladin interakce dipólu s vnějším polem. Procházející elektromagnetické pole vlastně způsobuje přeskoky magnetického dipólu mezi stavy s různým  $m_J$ . Energetické spektrum (3.168) je ekvidistantní a rezonanční (pohlcované) fotony tak musí splňovat relaci:

$$\hbar \omega_{\text{rez}} = g \mu_B B .$$

Snadno dopočteme rezonanční frekvenci

$$f_{\text{rez}} = K B ; \quad K = \begin{cases} 1,44 \text{ MHz T}^{-1} & \text{pro atom ,} \\ 0,76 \text{ kHz T}^{-1} & \text{pro jádro .} \end{cases} \quad (3.170)$$

Magnetická rezonance se využívá jako úspěšná zobrazovací metoda. Předmět je vnořen do pole  $B$  a ozářen elektromagnetickým zářením rezonanční frekvence. Rezonance na celých atomech (respektive jejich obalech) se nazývá *elektronová magnetická rezonance* (EMR) a rezonance na částicích jádra *jaderná magnetická rezonance* (NMR – Nuclear Magnetic Resonance).

### Curieův zákon

Uvažujme nyní nejjednodušší možný systém složený z  $N$  elementárních magnetických dipólů, které neinteragují mezi sebou a jejich magnetický moment může nabývat jen dvou hodnot ( $m_J = \pm 1/2$ ). Provedeme klasický statistický výpočet podle dříve uvedeného schématu. Interakce jednoho dipólu s vnějším magnetickým polem má jen dvě energetické hodnoty:

$$W_{\text{int}} = \pm \frac{1}{2} g \mu_0 \mu_B H$$

Partiční suma jednoho dipólu bude mít jen dva členy

$$z = \exp\left[+\frac{g\mu_0\mu_B H}{2kT}\right] + \exp\left[-\frac{g\mu_0\mu_B H}{2kT}\right] = 2 \operatorname{ch}\left[\frac{g\mu_0\mu_B H}{2kT}\right].$$

Partiční suma soustavy  $N$  vzájemně neinteragujících dipólů bude

$$Z_N = z^N = \left(2 \operatorname{ch}\left[\frac{g\mu_0\mu_B H}{2kT}\right]\right)^N.$$

Standardním způsobem určíme hustotu volné energie a z ní magnetizaci, susceptibilitu a permeabilitu:

$$f = -\frac{1}{V} kT \ln Z_N = -\frac{NkT}{V} \ln \left[2 \operatorname{ch}\left(\frac{g\mu_0\mu_B H}{2kT}\right)\right],$$

$$M = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial f}{\partial H} = n \frac{\mu_B g}{2} \operatorname{th}\left[\frac{\mu_0\mu_B g H}{2kT}\right], \quad (3.171)$$

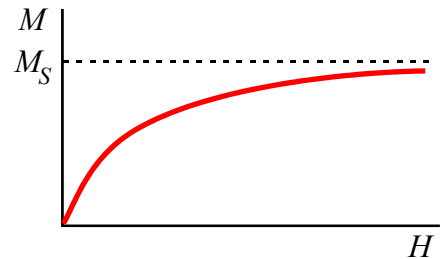
$$\chi = -\frac{1}{\mu_0} \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} = n \frac{\mu_0\mu_B^2 g^2}{4kT} \operatorname{cosh}^{-2}\left[\frac{\mu_0\mu_B g H}{2kT}\right], \quad (3.172)$$

$$\mu \equiv \mu_0 - \frac{\partial^2 f}{\partial H^2} = \mu_0 + n \frac{\mu_0^2\mu_B^2 g^2}{4kT} \operatorname{cosh}^{-2}\left[\frac{\mu_0\mu_B g H}{2kT}\right]. \quad (3.173)$$

**Poznámky:**

- I takto jednoduchý systém (dvě možnosti orientace spinů) má nelineární chování. Magnetizace není lineární funkcí intenzity pole, ale obecnou funkcí  $M = M(H)$ .
- Magnetizace vykazuje při vysokých polích a nízkých teplotách saturaci (získá maximální hodnotu nezávislou na velikosti pole). Všechny spiny jsou za těchto podmínek zorientovány ve směru pole. Hodnota saturace je

$$M_S = n \mu_B g / 2$$

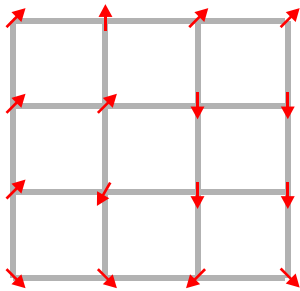


Provedeme-li linearizaci vztahu pro slabá pole, dostáváme

$$M = \chi H; \quad \chi \equiv \left. \frac{\partial M}{\partial H} \right|_{H=0} = \frac{n\mu_0\mu_B^2 g^2}{4kT}. \quad (3.174)$$

Susceptibilita je nepřímo úměrná teplotě magnetika. Tento vztah se nazývá *Curieův zákon* a platí jen v limitě slabých polí.

**3.10.3. Mřížové modely**



Připustíme-li více možných hodnot spinů a jejich interakci navzájem, je výpočet partiční sumy většinou nepřekonatelným problémem. Proto se často využívá relativně jednoduchý model spinů lokalizovaných ve vrcholech pravoúhlé mříže, který v mnoha případech svým chováním velmi dobře odpovídá skutečným materiálům. Zpravidla se předpokládá, že spolu vzájemně interagují jen nejbližší spiny v sousedních vrcholech mříže, takové sousední vrcholy označujeme  $\langle a, b \rangle$ . Interakční předpis je analogický výrazu (3.169), jen součet vzájemné interakce probíhá přes nejbližší sousedy:

$$W_{\text{int}} = \sum_{\langle a, b \rangle} W_0(\mathbf{m}_a, \mathbf{m}_b) - K \sum_a \mathbf{m}_a \cdot \mathbf{H}. \quad (3.175)$$

Podle typu vzájemné interakce  $W_0$  rozlišujeme jednotlivé modely.

### Isingův model

Jde o nejjednodušší možný model. Spiny mohou nabývat jen dvou hodnot a interakční energie je dána předpisem ( $1/2$  i ostatní konstanty jsou zahrnuty do  $J$ )

$$W_0 = -J \sum_{\langle a,b \rangle} m_a m_b ; \quad m_a \in \{-1, +1\}. \quad (3.176)$$

Pro  $J > 0$  přispějí dva sousední shodně orientované spiny k energii hodnotou  $-J$ , dva opačně orientované spiny hodnotou  $+J$ . Při nízkých teplotách má systém snahu zaujmout co nejnižší energii a vznikají proto domény souhlasně orientovaných spinů (*Weissovy domény*). Při vysokých teplotách jsou spiny orientovány náhodně. Již tento jednoduchý model vykazuje základní vlastnosti *feromagnetik*. Při nízkých teplotách existuje *uspořádaná fáze*, při vysokých teplotách *chaotická fáze*. Mezi oběma fázemi nastává fázový přechod při tzv. Curieově teplotě. Pro  $J < 0$  jsou při nízkých teplotách preferovány nesouhlasně orientované spiny a systém vykazuje *antiferomagnetické* vlastnosti. V jednorozměrném problému je nalezení partiční sumy i za přítomnosti vnějších polí triviální záležitost. Ve dvou dimenzích vyřešil problém Lars Onsager v roce 1944 (1903-1976, získal Nobelovu cenu za chemii v roce 1968) s pomocí vytříbených grafických metod. Analytické řešení ve třech dimenzích není známé dodnes a partiční suma, magnetizace a susceptibilita se dohledávají numericky.

### Pottsův model

Jde o  $Q$  stavový model s podobným interakčním předpisem jako Isingův model:

$$W_0 = -J \sum_{\langle a,b \rangle} \delta_{m_a m_b} ; \quad m_a \in \{1, \dots, Q\}. \quad (3.177)$$

Spiny se mohou orientovat do  $Q$  směrů, sousední souhlasně orientované spiny přispějí k energii hodnotou  $-J$ , ostatní k energii nepřispějí. Model má opět uspořádanou nízkoteplotní fázi, ve které se vyskytují domény souhlasně orientovaných spinů a vysokoteplotní chaotickou fázi. Obě fáze jsou odděleny Curieovým fázovým přechodem za Curieovy teploty.

### $Z_Q$ model

Jde o  $Q$  stavový model s interakcí dvou spinů danou kosinem vzájemného úhlu mezi nimi:

$$W_0 = -J \sum_{\langle a,b \rangle} \cos(\alpha_a - \alpha_b) ; \quad \alpha_a = \frac{2\pi}{Q} m_a ; \quad m_a \in \{1, \dots, Q\}. \quad (3.178)$$

Model má tři fáze: Nízkoteplotní uspořádanou fázi s charakteristickými doménami, „soft“ fázi při středních teplotách, při které se sousední spiny svou orientací liší jen velmi málo. Vznikají charakteristické víry spinů nebo spinové vlny. Další fází je vysokoteplotní chaotická fáze. Fázový přechod z nízkoteplotní fáze k „soft“ fázi se nazývá Curieův přechod ( $T_C$ ), fázový přechod ze „soft“ fáze do vysokoteplotní neuspořádané fáze se nazývá Kosterlitz-Thoulessův přechod ( $T_K$ ).

### Heisenbergův model

Jde o spojité model, který připouští veškeré orientace spinů. Energetický předpis je:

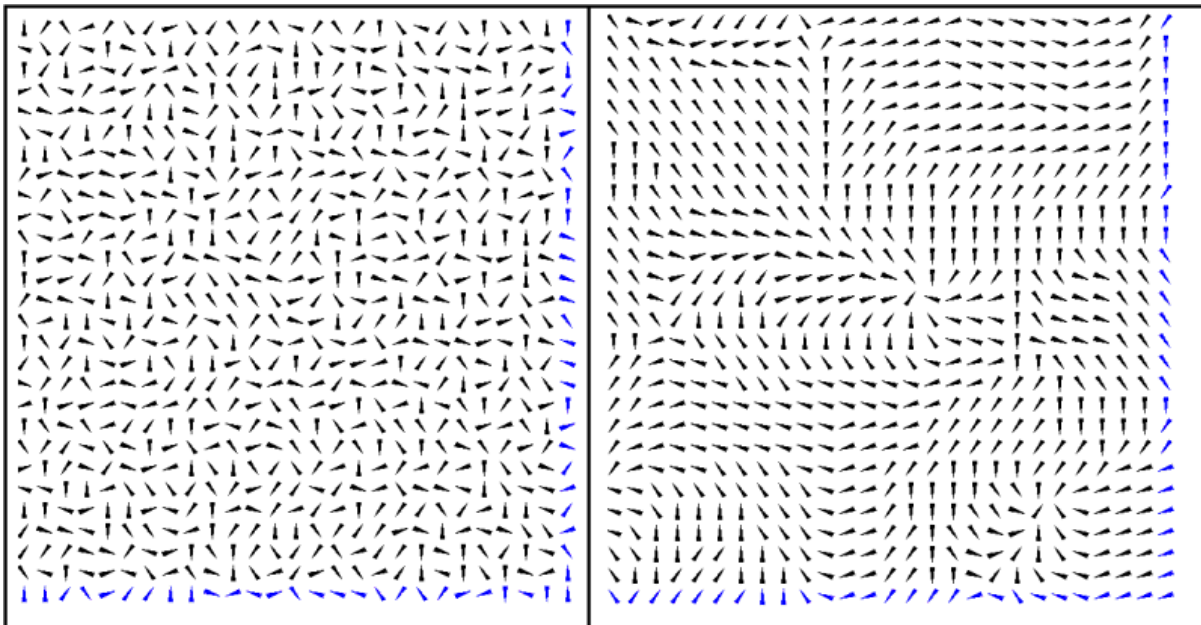
$$W_0 = -J \sum_{\langle a,b \rangle} \cos(\alpha_a - \alpha_b) ; \quad \alpha_a \in \langle 0, 2\pi \rangle. \quad (3.179)$$

Model má jen dvě fáze, nízkoteplotní soft fázi s charakteristickými dvojicemi vírů a se spinovými vlnami a vysokoteplotní neuspořádanou fázi. Obě fáze jsou oddělené Kosterlitz-Thoulessovým přechodem. Materiály popisované Heisenbergovým modelem nemají fázi s oddělenými doménami.

**Spinová skla**

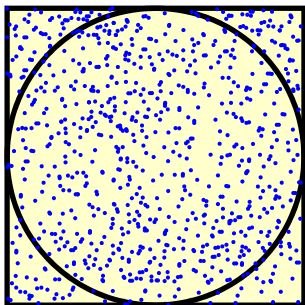
Jde o materiály, u kterých se vazbová konstanta  $J$  liší od dvojice spinů ke dvojici. Často má náhodný charakter. Energetický předpis je

$$W_0 = - \sum_{\langle a,b \rangle} J_{ab} f(m_a, m_b) : \tag{3.180}$$



Na levém obrázku vidíte výsledek Monte Carlo simulace  $Z_Q$  modelu Metropolisovou metodou při vysoké teplotě (neuspořádaná vysokoteplotní fáze) a na pravém obrázku „soft“ fázi při nižší teplotě. Modré krajní šipky označují společnou levou a pravou, respektive horní a dolní hranu systému (byly použity periodické okrajové podmínky).

### 3.11. MONTE CARLO METODY



Monte Carlo metody využívají k výpočtům generátorů náhodných čísel a u mnohazměrných integrálů nebo při výpočtu partiční sumy jsou často jediným způsobem zjištění výsledku. Téměř každý programovací jazyk má implementováno několik generátorů náhodných čísel v intervalu  $(0,1)$  různé kvality. Ukažme si princip metody na algoritmu pro nalezení čísla  $\pi$  jednoduchou Monte Carlo metodou. V kartézském souřadnicovém systému budeme mít čtverec  $(0,1) \times (0,1)$ . Využijeme nějaký vestavěný generátor  $\gamma_i$  čísel v intervalu  $(0,1)$  a vygenerujeme mnoho bodů

„padnoucích“ do plochy čtverce:

$$\begin{aligned} x &= \gamma_{2i-1}, \\ y &= \gamma_{2i}, \quad i = 1, 2, \dots \end{aligned}$$

Budeme sledovat celkový počet generovaných bodů  $N$  a dále počet bodů  $N_1$ , které padly do jednotkového kruhu na obrázku (splňují relaci  $x^2 + y^2 < 1$ ). Pro dosti velký počet bodů jsou jejich počty úměrné plochám obrazců:

$$\frac{N_1}{N} \doteq \frac{\text{plocha kruhu}}{\text{plocha čtverce}} = \frac{\pi R^2}{(2R)^2} = \frac{\pi}{4}.$$

Pouhým počítáním generovaných bodů tak můžeme při značném počtu kroků určit s vysokou přesností číslo  $\pi$ .

Je jasné, že pro Monte Carlo výpočty je dosti často rozhodující kvalita a rychlost generátoru náhodných čísel. K nejčastěji používaným generátorům při MC výpočtech patří:

a) *Lineární multiplikativní kongruenční generátor (LCG)*, má maximální periodu  $M-1$ .

$$\gamma_i = (\lambda \cdot \gamma_{i-1} + C) \bmod P, \quad (3.181)$$

V generované posloupnosti dochází ke korelacím typu  $2^N$ . Tento typ generátoru je výhodný, využívá-li k provedení funkce modulo architektury počítače:

$$P = 2^k, \quad \lambda = 8n + 3; \quad \text{např.:} \quad P = 2^{31}, \quad \lambda = 2^{16} + 3.$$

b) *Kombinovaný LCG generátor* s maximální periodou  $P_1 \cdot P_2$ :

$$\begin{aligned} \xi_i &= (\lambda_1 \cdot \xi_{i-1} + C_1) \bmod P_1, \\ \eta_i &= (\lambda_2 \cdot \eta_{i-1} + C_2) \bmod P_2; \\ \gamma_i &= (\xi_i + \eta_i) \bmod \max(P_1, P_2). \end{aligned} \quad (3.182)$$

c) *Fibonacciho generátory*, které využívají ke generování  $i$  starší členy posloupnosti náhodných čísel:

$$\gamma_i = f(\gamma_{i-p}, \gamma_{i-q}) \bmod P. \quad (3.183)$$

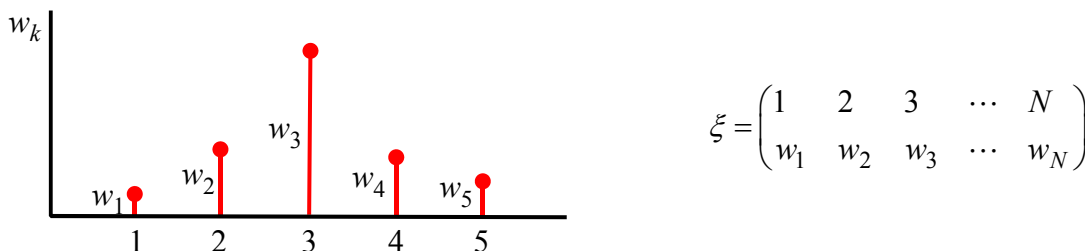
Tyto generátory mají zpravidla vynikající vlastnosti, je však třeba uchovávat určitý počet vygenerovaných čísel. Funkce  $f$  může být například prostým násobením.

#### 3.11.1. Realizace rozdělení

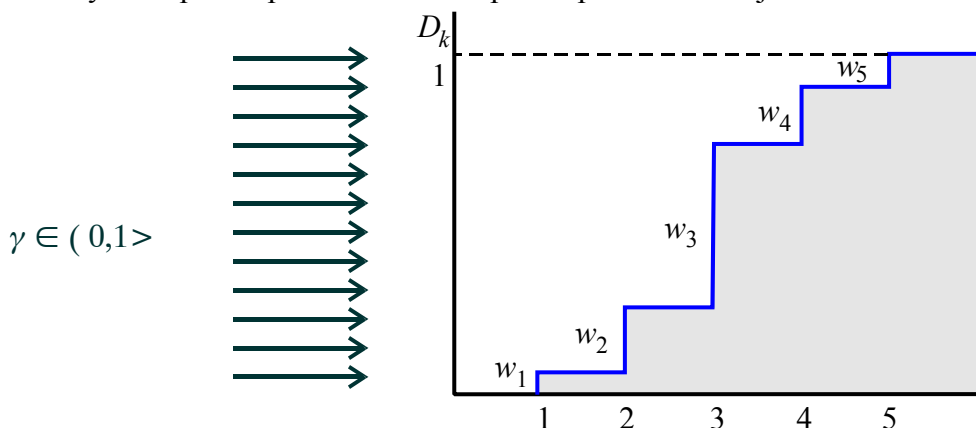
Často potřebujeme jiný generátor než je rovnoměrný. Například můžeme chtít zkonstruovat generátor, který nám bude generovat děje ve shodě s nějakým pravděpodobnostním rozdělením. V této kapitole se naučíme některé způsoby realizace pravděpodobnostních rozdělení.

**Metoda střelby (distribuční funkce)**

Představme si, že máme  $N$  dějů s pravděpodobnostmi  $w_1, w_2, \dots, w_N$ . Graficky můžeme pravděpodobnostní rozdělení znázornit takto (na obrázku vlevo bylo zvoleno 5 dějů):



V matematice se někdy zavádí náhodná veličina  $\xi$ , v prvním řádku je hodnota veličiny  $\xi$  (pořadí děje) a ve druhém řádku pravděpodobnost děje. Vytvořme schody, u kterých bude výška jednotlivých stupňů odpovídat velikosti pravděpodobnosti děje:



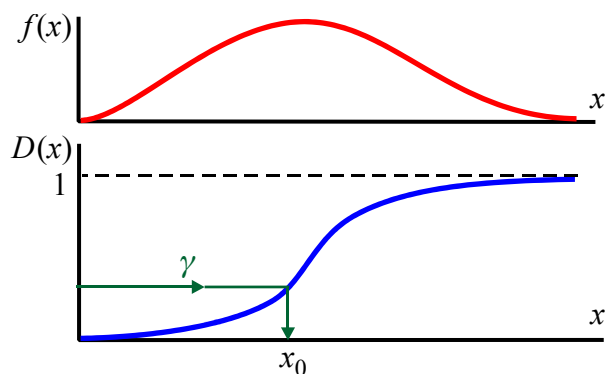
V matematice se takovéto schody nazývají distribuční posloupnost (ve spojitém případě distribuční funkce), jde o postupné načítání hodnot pravděpodobností. Poslední schod musí proto být ve výšce 1, protože je součtem všech pravděpodobností. Distribuční posloupnost je definována předpisem

$$D_k \equiv \sum_{j=1}^k w_j . \tag{3.184}$$

Vždy jde o rostoucí posloupnost s hodnotami mezi 0 a 1. Právě toho se využívá při MC realizaci děje. Mnohokrát opakovaně generujeme náhodné číslo z intervalu  $(0,1)$  a každé si představíme si ho jako střelu, která zleva nalétává na naše schody. Zjistíme do kterého schodu se střela trefila (viz obrázek). Padla-li do schodu  $k$ , prohlásíme, že nastal děj  $k$ . Vzhledem k tomu, že výška schodu odpovídá pravděpodobnosti děje, generujeme náhodné děje přesně ve shodě s pravděpodobnostním rozdělením.

Ve spojitém případě můžeme postupovat podobně. Je-li hustota pravděpodobnosti  $f(x)$ , zavedeme distribuční funkci předpisem

$$D(x) = \int_{-\infty}^x f(x) dx . \tag{3.185}$$



Opět jde o rostoucí funkci s limitou v pravém krajním bodě danou součtem všech pravděpodobností  $\lim_{x \rightarrow \infty} D(x) = 1$ .



Metodou střelby můžeme stejně jako v diskrétním případě realizovat rozdělení pomocí rovnoměrného generátoru  $\gamma$  z intervalu  $\langle 0,1 \rangle$ . Řekneme, že padl děj  $x_0$ , je-li  $D(x_0) = \gamma$ . Pro uskutečněný děj tedy platí

$$x = D^{-1}(\gamma). \tag{3.186}$$

Celý postup realizace daného rozdělení je proto ve spojitém případě následující:

1. nalezneme distribuční funkci  $D(x)$ ,
2. nalezneme inverzní funkci k  $D(x)$ ,
3. generujeme rovnoměrně náhodné číslo  $\gamma \in \langle 0,1 \rangle$ ,
4. prohlásíme, že „padl“ děj  $x = D^{-1}(\gamma)$ .

**Příklad 16:** Realizujte rovnoměrné rozdělení na intervalu  $(a, b)$ .

Hustota pravděpodobnosti rovnoměrného rozdělení je konstantní funkce  $f(x)$ . Hodnotu konstanty určíme z normovací podmínky:

$$f(x) = K; \quad \int_a^b f(x) dx = 1 \quad \Rightarrow \quad K(b-a) = 1 \quad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{1}{b-a}.$$

Nyní snadno nalezneme distribuční funkci

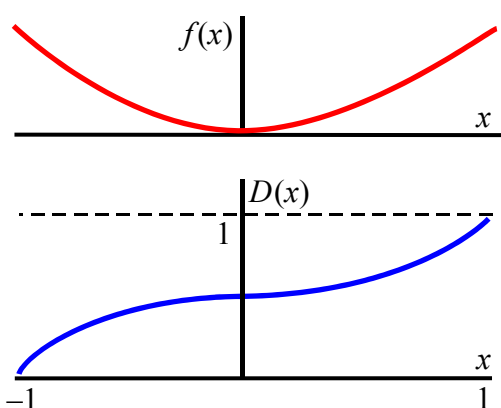
$$D(x) = \int_a^x f(x) dx = \frac{x-a}{b-a}$$

a položíme ji funkci rovnou náhodnému číslu  $\gamma$  z intervalu  $\langle 0,1 \rangle$  a provedeme inverzi:

$$D(x) = \gamma \quad \Rightarrow \quad \frac{x-a}{b-a} = \gamma \quad \Rightarrow \quad x = a + \gamma(b-a).$$

Výsledek je zcela přirozený: Náhodné číslo  $\gamma$  mezi 0 a 1 roztáhneme koeficientem  $(b-a)$  na nový interval a posuneme o hodnotu  $a$  do počátku nového intervalu. ♦

**Příklad 17:** Realizujte rozdělení  $Kx^2$  na intervalu  $(-1, +1)$ .



Nejprve určíme normovací konstantu rozdělení  $K$ :

$$f(x) = Kx^2; \quad \int_{-1}^{+1} f(x) dx = 1 \quad \Rightarrow$$

$$K = \frac{3}{2} \quad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{3}{2}x^2.$$

Jako další krok nalezneme distribuční funkci  $D(x)$ :

$$D(x) = \int_{-1}^x f(x) dx = \frac{x^3 + 1}{2}.$$

Distribuční funkci položíme rovnou náhodnému číslu  $\gamma$  z intervalu  $\langle 0,1 \rangle$  a provedeme inverzi:

$$D(x) = \gamma \quad \Rightarrow \quad \frac{x^3 + 1}{2} = \gamma \quad \Rightarrow \quad x = \sqrt[3]{2\gamma - 1}.$$

Výsledkem je nerovnoměrný generátor na intervalu  $(-1,1)$ . Ve shodě s parabolickou hustotou pravděpodobnosti nejčastěji padají hodnoty na krajích intervalu a nejméně často



uprostřed. Na distribuční funkci je dobře patrné, že trefit se „střelou“ do pozice  $x = 0$  je téměř nemožné. ♦

**Příklad 18:** Realizujte rozdělení  $\exp[-x]$  na intervalu  $(0, \infty)$ .

Normovaná hustota pravděpodobnosti je  $f(x) = \exp[-x]$ , distribuční funkce po výpočtu integrálu vyjde  $D(x) = 1 - \exp[-x]$ . Položme  $D(x) = \gamma$ , tedy  $1 - \exp[-x] = \gamma$ , a po inverzi máme výsledek  $x = -\ln[1 - \gamma]$ . Vzhledem k tomu, že  $\gamma$  a  $1 - \gamma$  mají na intervalu  $(0,1)$  stejné rovnoměrné rozdělení, postačí volit

$$x = -\ln \gamma .$$

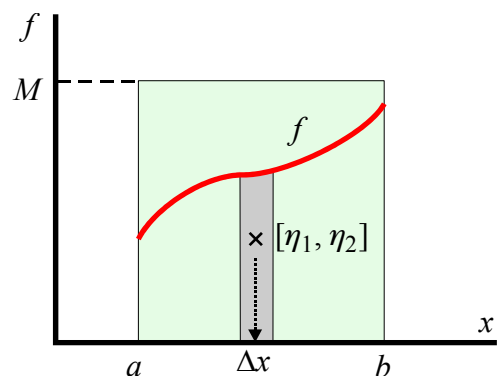
**Poznámka:** Pozor na názvosloví: *Hustota pravděpodobnosti* se ve fyzice nazývá *rozdělovací funkce* (někdy také distribuční funkce). V matematice je vždy *distribuční funkce* je integrálem s horní proměnnou mezí z hustoty pravděpodobnosti. Tak budeme chápat distribuční funkci i v tomto sylabu.

**Metoda von Neumanna**

Mějme hustotu pravděpodobnosti  $f(x)$  definovanou na konečném intervalu  $(a, b)$ . Nalezneme co nejmenší obdélník, do kterého se vejde graf křivky  $f(x)$ . Na volbě výšky  $M$  nezáleží, postačí  $M > f(x)$  pro  $\forall x$ , ale metoda je neúčinnější pro co možná nejmenší hodnotu  $M$ . Nejprve generujeme náhodný bod v obdélníku:

$$\eta_1 = a + \gamma_1 (b - a),$$

$$\eta_2 = M \gamma_2 .$$



Pravděpodobnost, že padne děj v intervalu  $\Delta x$  je úměrná ploše pod křivkou, protože  $\Delta P = f \Delta x$ . Stačí tedy algoritmus doplnit tak, aby odpovídal úměrnosti této ploše:

$$\eta_2 < f(\eta_1) \quad \Rightarrow \quad \text{padl děj } x = \eta_1 ;$$

$$\eta_2 \geq f(\eta_1) \quad \Rightarrow \quad \text{volíme nový bod } [\eta_1, \eta_2] .$$

Metodu von Neumanna lze aplikovat vždy, ale není tak účinná jako metoda střelby (inverzní funkce, distribuční funkce). Tyto metody jsou lepší, pokud se podaří nalézt inverzní funkci k distribuční funkci.

**Metoda superpozice**

Nechť

$$f(x) = \sum_{i=1}^m c_i f_i(x); \quad \sum_{i=1}^m c_i = 1; \quad \int_{\Omega} f(x) dx = \int_{\Omega} f_i(x) dx = 1 .$$

Zavedme součet parciálních distribučních funkcí pro jednotlivá  $f_i$ :

$$D(x) = \sum_{i=1}^m c_i D_i(x)$$

K realizaci rozdělení vede tento algoritmus:

1. Zavedeme náhodnou veličinu  $\xi = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & m \\ c_1 & c_2 & \dots & c_m \end{pmatrix}$  a generujeme rovnoměrné náhodné číslo  $\gamma_1 \in (0, 1)$ . Podle některé z předchozích metod (nejlépe metodou střelby). Potom zvolíme podle pravděpodobností  $c_1, c_2, \dots, c_m$  některý z dějů  $k \in \{1, 2, \dots, m\}$ .

2. Generujeme náhodné číslo  $\gamma_2 \in (0, 1)$  a realizujeme rozdělení  $f_k(x)$  některou z metod (inverzní funkce, von Neumannova).

**Příklad 19:** Realizujte rozdělení  $f(x) = \frac{5}{12} [1 + (x-1)^4]$  na intervalu  $(0, 2)$ .

Metoda inverzní funkce pro celou hustotu pravděpodobnosti je principiálně možná, ale zbytečně složitá. Hustotu pravděpodobnosti rozložíme takto (určíme  $f_1$  a  $f_2$  s koeficienty tak, aby byly normovány k jedné a poté nalezneme koeficienty  $c_1$  a  $c_2$ ):

$$f_1(x) = \frac{1}{2}; \quad f_2(x) = \frac{5}{2}(x-1)^4 \quad \Rightarrow \quad f(x) = \frac{5}{6} f_1(x) + \frac{1}{6} f_2(x).$$

Distribuční funkce nyní bude:

$$D(x) = \frac{5}{6} D_1(x) + \frac{1}{6} D_2(x); \quad D_1(x) = \frac{x}{2}; \quad D_2(x) = \frac{1}{2} [1 + (x-1)^5].$$

Nejprve generujeme číslo  $\gamma_1$  a rozhodneme se podle předpisu:

$$\gamma_1 < \frac{5}{6} \quad \Rightarrow \quad \text{padl děj 1};$$

$$\gamma_1 \geq \frac{5}{6} \quad \Rightarrow \quad \text{padl děj 2}.$$

Poté použijeme metodu inverzní funkce. Generujeme  $\gamma_2$  a využijeme předpis:

$$\text{pro děj 1:} \quad x = 2\gamma_2;$$

$$\text{pro děj 2:} \quad x = 1 + \sqrt[5]{2\gamma_2 - 1}.$$

Celou metodu můžeme shrnout takto: Generujeme dvojici náhodných čísel v intervalu  $(0, 1)$  a využijeme předpis:

$$x = \begin{cases} 2\gamma_2, & \gamma_1 < \frac{5}{6}; \\ 1 + \sqrt[5]{2\gamma_2 - 1}, & \gamma_1 \geq \frac{5}{6}. \end{cases} \quad \blacklozenge$$

### Zajímavé realizace některých rozdělení

Gaussovo rozdělení:

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp\left[-\frac{x^2}{2}\right]; \quad x \in (-\infty, \infty).$$

generujeme dvojici  $\gamma_1, \gamma_2$  náhodných čísel z intervalu  $(0, 1)$ . Potom dvě hodnoty Gaussova rozdělení jsou:

$$x_1 = \sqrt{-2 \ln \gamma_1} \cos(2\pi\gamma_2);$$

$$x_2 = \sqrt{-2 \ln \gamma_1} \sin(2\pi\gamma_2).$$

Gama rozdělení:

$$f(x) = \frac{1}{n-1} x^{n-1} \exp[-x]; \quad x \in (0, \infty); \quad n = 2, 3, \dots$$

Generujeme  $\gamma_1, \gamma_2, \dots, \gamma_n, \dots$  a určíme hodnoty

$$x_n = -\ln(\gamma_1 \cdot \gamma_2 \cdots \gamma_n).$$

Body uvnitř koule o poloměru  $R$ :

Budeme generovat rovnoměrně body v kouli o poloměru  $R$ . K řešení využijeme sférické souřadnice  $(r, \varphi, \theta)$ :

$$r = R\sqrt[3]{\gamma_1}; \quad \varphi = 2\pi\gamma_2; \quad \cos\theta = 2\gamma_3 - 1.$$

**Výpočet určitého integrálu  $\int_a^b f(x)dx$ :**

Mnohokrát po sobě generujeme bod z definičního intervalu hledaného integrálu  $(a, b)$ :

$$x_i = a + \gamma_i(b - a).$$

Nyní najdeme střední hodnotu integrované funkce  $f$  na intergračním intervalu  $(a, b)$ :

$$\bar{f} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n f(x_i).$$

Integrál je potom přibližně roven ploše obdélníka s výškou rovnou střední hodnotě  $f$ :

$$\int_a^b f(x)dx \doteq \bar{f} \cdot (b - a).$$

**3.11.2. MC metody pro mřížové modely**

Využití Monte Carlo metod ve fyzice a přírodních vědách ukážeme na problematice mřížových modelů feromagnetik. Každý možný stav spinů na mříži budeme chápat jako určitou možnou konfiguraci  $\mathcal{K}_i$ . Partiční suma je potom součtem Boltzmannových faktorů přes všechny možné konfigurace na mříži ( $H_N$  je hamiltonián pro  $N$  spinů na mříži):

$$Z = \sum_i \exp[-\beta H_N(\mathcal{K}_i)].$$

Vzhledem k tomu, že sčítání přes všechny konfigurace znamená velké množství součtů přes jednotlivé stupně volnosti systému, není vhodné při výpočtu používat přímé numerické metody. Ani náhodný MC výběr členů sumace není vhodný vzhledem k faktoru  $\exp[-\beta H_N]$ , který se může měnit o mnoho řádů. Účinnější je vybrat statisticky „reprezentativ-ní“ posloupnost konfigurací  $\{\mathcal{K}_i\}_R$ , která simuluje soubor stavů v termodynamické rovnováze při teplotě  $T$ . Označme  $P_i$  pravděpodobnost výskytu konfigurace  $\mathcal{K}_i$  v reprezentativní posloupnosti. Nyní je třeba reprezentativní posloupnost zkonstruovat tak, aby pravděpodobnosti výskytu jednotlivých konfigurací konvergovaly ke kanonickému rovnovážnému rozdělení:

$$P_i \rightarrow P_i^{eq}. \quad (3.187)$$

Tuto konstrukci lze provést Markovovým procesem, který je určen pravděpodobnostmi přechodu  $w_{i \rightarrow j}$  z konfigurace  $\mathcal{K}_i$  do konfigurace  $\mathcal{K}_j$ . Postačující podmínkou pro konvergenci je tzv. *balanční podmínka*

$$P_i^{eq} w_{i \rightarrow j} = P_j^{eq} w_{j \rightarrow i}, \quad (3.188)$$

kteřou musejí splňovat pravděpodobnosti  $w_{i \rightarrow j}$ . Tato podmínka zajišťuje, že matice  $w_{i \rightarrow j}$  má za vlastní vektor Boltzmannovo rozdělení a tedy převede soubor v termodynamické rovnováze na sebe. Konvergenci (3.187) lze potom dokázat z věty o kontrahujícím zobrazení. Balanční podmínka (3.188) vyjadřuje fakt, že v termodynamické rovnováze je počet systémů

souboru přecházejících z  $\mathcal{K}_i$  do  $\mathcal{K}_j$  roven počtu systémů souboru přecházejících z  $\mathcal{K}_j$  do  $\mathcal{K}_i$ . Pomocí kanonického rozdělení lze balanční podmínku přepsat na tvar

$$\frac{w_{i \rightarrow j}}{w_{j \rightarrow i}} = \exp\left[-\beta(H_N(\mathcal{K}_j) - H_N(\mathcal{K}_i))\right]. \quad (3.189)$$

Je-li balanční podmínka splněna, můžeme střední hodnotu libovolné dynamické proměnné odhadnout prostým středováním přes generovanou reprezentativní posloupnost:

$$\langle A \rangle \approx \bar{A} = \frac{1}{M} \sum_{\{\mathcal{K}_i\}_{i=1}^M} A(\mathcal{K}_i). \quad (3.190)$$

Při  $M$  dosti velkém  $\bar{A}$  dosti dobře aproximuje  $\langle A \rangle$ .

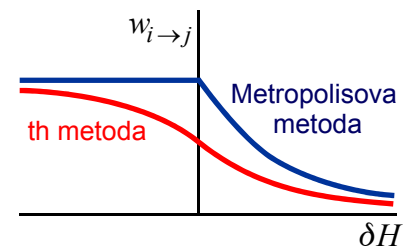
Balanční podmínka neurčuje pravděpodobnosti přechodu  $w_{i \rightarrow j}$  jednoznačně. Reprezentativní posloupnost  $\{\mathcal{K}_i\}_R$  lze například získat tak, že dvě následné konfigurace  $\mathcal{K}_i$  a  $\mathcal{K}_{i+1}$  se od sebe liší jen hodnotami spinů na nějaké podmnožině mříže nebo dokonce v jediném vrcholu mříže. V tomto případě další člen reprezentativní posloupnosti získáme tak, že systematicky nebo náhodně vybíráme vrchol mříže a v tomto vrcholu zaměníme spin s odpovídající pravděpodobností. Ani nyní není pravděpodobnost  $w_{i \rightarrow j}$  určena jednoznačně. Existují tři základní metody, které balanční podmínku splňují a pomocí nichž lze generovat reprezentativní posloupnost.

### Metropolisova metoda

Splnění balanční podmínky lze například zajistit tímto předpisem:

$$w_{i \rightarrow j} = \begin{cases} \exp[-\beta\delta H] & \text{pro } \delta H > 0 \\ 1 & \text{pro } \delta H \leq 0 \end{cases}; \quad \delta H \equiv H_N(\mathcal{K}_j) - H_N(\mathcal{K}_i). \quad (3.191)$$

Náhodně vybereme novou konfiguraci  $\mathcal{K}_j$ . Je-li  $\delta H \leq 0$  považujeme  $\mathcal{K}_j$  za následující člen reprezentativní posloupnosti. Je-li  $\delta H > 0$  generujeme náhodné číslo  $\gamma \in (0,1)$  a pro  $\gamma \leq \exp[-\beta\delta H]$  považujeme  $\mathcal{K}_j$  za novou konfiguraci, pro  $\gamma > \exp[-\beta\delta H]$  ponecháme původní konfiguraci  $\mathcal{K}_i$  jako nový člen posloupnosti. Konfiguraci s nižší energií tedy volíme za novou vždy. Pravděpodobnost volby konfigurace s vyšší energií než stávající exponenciálně klesá s rozdílem energií.



### Metoda teplotní lázně

Další předpis, kterým splníme balanční podmínku je

$$w_{i \rightarrow j} = \frac{\exp[-\beta H_N(\mathcal{K}_j)]}{\sum_k \exp[-\beta H_N(\mathcal{K}_k)]}. \quad (3.192)$$

Tato metoda je pomalejší než Metropolisova metoda (je nutné počítat sumu ve jmenovateli), ale rychleji konverguje k termodynamické rovnováze a pro středování (3.190) přes reprezentativní posloupnost lze vzít menší počet členů. To je způsobeno tím, že výběr spinu v daném vrcholu nezávisí na původní hodnotě spinu v tomto vrcholu.

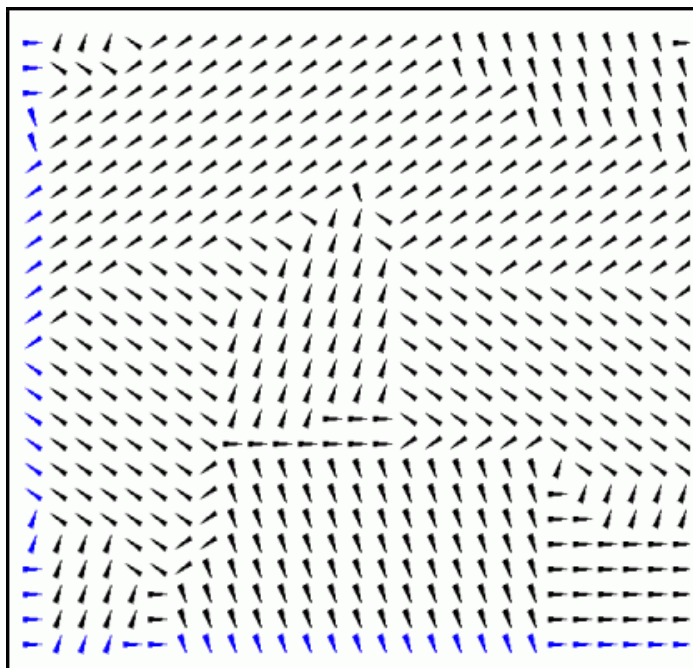
**Metoda s hyperbolickou tangentou**

$$w_{i \rightarrow j} = \frac{1}{2} \left[ 1 - \operatorname{th} \left( \frac{\beta \delta H}{2} \right) \right]; \quad \delta H \equiv H_N(\mathcal{K}_j) - H_N(\mathcal{K}_i). \quad (3.193)$$

Metoda je velmi podobná Metropolisově metodě, z hlediska konvergence dokonce mívá někdy i lepší výsledky, ale za cenu trochu složitějšího předpisu (algoritmu).

**Poznámky:**

- MC metody zpravidla selhávají v blízkosti fázových přechodů, kdy se neúměrně prodlužují relaxační časy.
- MC výpočet probíhá při konstantní teplotě. Další výpočet můžeme odstartovat s pozměněnou teplotou a postupně tímto způsobem simulovat teplotní průběh veličin.
- Měrná tepla a susceptibility je výhodnější počítat z fluktuací než z derivací závislostí na teplotě a magnetickém poli získaných ze simulací.
- Závislost na velikosti mřížce lze částečně eliminovat periodickými okrajovými podmínkami.



Weissovy domény v Pottsově modelu simulované Metropolisovou metodou. Při simulaci byly použity periodické okrajové podmínky (levá a pravá strana mají společné modré spiny, horní a dolní taktěž).

**3.11.3. Optimalizace a řízené ochlazování**

Typickou úlohou pro Monte Carlo metody je optimalizace nějaké situace. Uveďme příklady optimalizačních problémů:

- *Nalezení základního stavu* (stavu s minimální energií) pro systém s komplikovaným Hamiltoniánem, například pro spinové sklo.
- *Nalezení extrému komplikované funkce* s tisíci maximy a minimy. Zejména je třeba, aby numerická metoda neskončila v některém z četných lokálních minim či maxim.
- *Problém obchodníka*. Obchodník má navštívit větší počet měst, známy jsou silniční vzdálenosti mezi jednotlivými městy. Je třeba navrhnout pro obchodníka optimální trajektorii tak, aby vyřizováním záležitostí strávil co nejméně času.
- *Problém rozvrhu*. Je třeba optimálně navrhnout využití učeben, času pedagogů a žáků na nějaké velké škole (nikoli na FEL, zde se přesouvají kartičky v rozvrhu ručně).

- Návrhy plošného spoje. Ze znalosti rozměrů součástek, rozmístění vývodů, schématu jejich propojení a různých omezení známých při rozmístování součástek navrhnout optimální řešení plošného spoje.

Jednou z možných metod řešení těchto úkolů je metoda SA (Simulated Annealing – řízené ochlazování). Ústřední veličinou je zavedení funkce nákladů (tzv. Cost function)  $C$ . Do této funkce musí být zahrnuta veškerá problematika optimalizace. Například při hledání základního stavu je optimalizovanou funkcí sám hamiltonián, hledáme nejnižší energetický stav. U problému obchodníka může být optimalizovanou funkcí celkový čas strávený na cestách, atd. K problému jako parametr uměle přiřadíme teplotu a podle například Metropolisovy metody generujeme reprezentativní posloupnost. Úlohu energie převezme optimalizovaná funkce:

$$w_{i \rightarrow j} = \begin{cases} \exp[-\beta \delta C] & \text{pro } \delta C > 0 \\ 1 & \text{pro } \delta C \leq 0 \end{cases}; \quad \delta C \equiv C(\mathcal{H}_j) - C(\mathcal{H}_i).$$

Po mnoha krocích nepatrně snížíme teplotu a opět generujeme reprezentativní posloupnost. Generujeme typické stavy problému při dané teplotě. Postupným snižováním teploty se blížíme ke stavu s nejnižší hodnotou energie (funkce nákladů). Nenulová teplota vnáší do metody náhodný prvek a zajišťuje nenulovou pravděpodobnost uniknout z lokálních minim a vyvarovat se tak nalezení nesprávného minima či metastabilního stavu. Nenulová teplota vlastně určuje jakou šanci máme uniknout z „falešných“ lokálních minim u systémů, kde počet těchto minim může jít do tisíců a jejich poloha je nepřehledná.

Základní podmínkou metody je, aby teplota klesala dostatečně pomalu, při simulovaném ochlazování musí mít systém v každém teplotním kroku dostatečný čas pro termalizaci. Jedině tak je možné dosáhnout základního stavu (optimálního řešení). Lze ukázat, že k cíli vždy vede logaritmické ochlazování

$$T_k = \frac{T_0}{\log k},$$

pokud byla počáteční teplota dostatečně vysoká. Tento proces ochlazování je ale velmi pomalý a zpravidla se volí rychlejší postupy, které ale nezajišťují nalezení správného řešení.

### Výhody SA

- Lze řešit problémy s libovolnými systémy a libovolnou funkcí nákladů.
- Nalezení optimálního řešení je statisticky zaručeno.
- I pro složité problémy je programový algoritmus velmi jednoduchý.

### Nevýhody SA

- Ochlazování typu  $1/\log k$ , které zaručuje statistické nalezení řešení, je velmi pomalé.
- Je-li funkce nákladů jednoduchá, hladká a má jen několik minim, jsou jiné metody výrazně rychlejší.
- Nikdy si nemůžeme být zcela jisti, zda jsme již skutečně našli optimální řešení a je-li možné již výpočet ukončit.

Monte Carlo metody si v přírodních vědách vydobily mimořádně významnou pozici. Využívají se k simulacím typických konfigurací při dané teplotě, k sledování fázových přechodů a jejich kritických koeficientů, k simulacím povrchových jevů, simulacím lavinovitého růstu (výboje, tvorba krystalů), k simulacím srážek v plazmatu, k simulacím tvorby clusterů a růstu kolonií, k simulaci kondenzačních procesů, k optimalizačním procedurám atd.

### 3.12. NEROVNOVÁŽNÁ STATISTIKA

Zatím jsme se zabývali systémy v termodynamické rovnováze, ze které vyplynulo kanonické nebo grandkanonické rozdělení. Hustota pravděpodobnosti se ale v obecném případě mění s časem. Systém může být složen z několika druhů částic (elektrony, neutrály, ionty), které budeme označovat indexem  $\alpha$ . Označme hustotu pravděpodobnosti výskytu částic druhu  $\alpha$

$$f_\alpha = f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) .$$

V termodynamické rovnováze hustota pravděpodobnosti nezávisí na čase a splývá s dosud probíranou rozdělovací funkcí  $\rho$ . Hustotu pravděpodobnosti závislou na čase budeme normovat vzhledem k počtu částic, tj.

$$\begin{aligned} \int f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{v}_\alpha &= n_\alpha(t, \mathbf{x}); \\ \int f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{v}_\alpha &= N_\alpha(t); \end{aligned} \quad (3.194)$$

Integrováním přes rychlostní prostor získáme koncentraci částic  $n_\alpha = \Delta N_\alpha / \Delta V$  a dostaneme se tak na pozici kontinua. Dalším středováním přes prostorové proměnné dostaneme celkový počet částic  $N_\alpha$ . Při středování obecné proměnné  $A_\alpha$  musíme vzhledem ke způsobu normování pravděpodobnosti výsledek dělit součtem všech pravděpodobností:

$$\mathcal{A}(t, \mathbf{x}) = \frac{\int A_\alpha f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{v}_\alpha}{\int f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{v}_\alpha}; \quad A(t) = \frac{\int A_\alpha f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{v}_\alpha}{\int f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{x} d^3 \mathbf{v}_\alpha} . \quad (3.195)$$

Díky normování je

$$\int A_\alpha f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{v}_\alpha = n_\alpha(t, \mathbf{x}) \langle A_\alpha \rangle_{\mathbf{v}} . \quad (3.196)$$

#### 3.12.1. Boltzmannova rovnice

Hustota pravděpodobnosti výskytu částic druhu  $\alpha$  se s časem mění z důvodu srážek částic se sebou samými i s ostatními druhy:

$$\frac{d}{dt} f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) = \sum_{\beta} S_{\alpha\beta}$$

Členy napravo se nazývají Boltzmannovy srážkové integrály a budou diskutovány v příští kapitole. Rozepišme úplnou derivaci na levé straně:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_k} \frac{dx_k}{dt} + \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_{k\alpha}} \frac{dv_{k\alpha}}{dt} = \sum_{\beta} S_{\alpha\beta} .$$

Časové derivace poloh jsou rychlosti a časové derivace rychlostí zrychlení, které vyjádříme pomocí síly z druhého Newtonova zákona:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + v_{k\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_k} + \frac{F_{k\alpha}}{m_\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_{k\alpha}} = \sum_{\beta} S_{\alpha\beta} .$$

Členy přes které se počítá zapíšeme jako působící operátory:

$$\frac{\partial f_\alpha}{\partial t} + (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) f_\alpha + \frac{1}{m_\alpha} (\mathbf{F}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{v}}) f_\alpha = \sum_{\beta} S_{\alpha\beta} . \quad (3.197)$$

Odvozená rovnice se nazývá Boltzmannova rovnice a je základní rovnicí statistiky nerovnovážných procesů. Členy na pravé straně se nazývají Boltzmannův srážkový integrál (lze je vyjádřit jako integrál přes část fázového prostoru). Podle možných způsobů vyjádření srážkového integrálu tuto rovnici nazýváme různými způsoby:



- **Boltzmanova rovnice:** Srážky obecné a vyjadřují se pomocí srážkového integrálu (viz. 3.12.2)
- **Fokker-Planckova rovnice:** Srážkový člen započítává jen párové Coulombovy interakce, pro které je účinný průřez dobře znám.
- **Landauova rovnice:** Jako dolní mez vzdálenosti párových Coulombových srážek zvolíme vzdálenost, při které se srážející se částice odchýlí o pravý úhel (srážek na menší vzdálenosti je málo pravděpodobná) a jako maximální vzdálenost srážky Debyeovu vzdálenost (vzdálenost přirozeného stínění bodových zdrojů).
- **Krookova rovnice:** Uvažují se jen srážky s neutrály ve tvaru  $S_{\alpha\beta} = (f_\alpha - f_\beta) / \tau$ .
- **Vlasovova rovnice:** Srážky zcela zanedbáváme (na pravé straně je nula) a působící síla je jen Lorentzova síla. Nejméně přesná, ale nejčastěji používaná aproximace.

**Příklad 20.** Ukažte, že stacionární řešení Boltzmannovy rovnice vede na kanonické rozdělení. Řešte v jedné dimenzi, pro jediný druh částic, které nepodléhají srážkám a pro potenciální silové pole.

**Řešení:** Z Boltzmannovy rovnice v tomto případě zbude

$$v \frac{\partial f}{\partial x} - \frac{1}{m_\alpha} \frac{\partial V}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial v} = 0.$$

Rovnici řešíme substitucí  $f(x, v) = F(x)G(v)$ . Pokusíme se separovat proměnné:

$$v \frac{dF}{dx} G - \frac{1}{m} \frac{dV}{dx} F \frac{dG}{dv} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{dF}{F dx} = \frac{1}{m} \frac{dG}{G v dv}$$

Na levé straně rovnosti jsou všechny proměnné funkcí souřadnice, na pravé straně funkcí rychlosti. Je zřejmé, že mají-li se sobě rovnat dvě funkce různých proměnných, musí být obě konstantní. Označme tuto konstantu  $-\beta$ :

$$\frac{dF}{F dx} = -\beta \quad \Rightarrow \quad \frac{dF}{F} = -\beta dx \quad \Rightarrow \quad F(x) = K_x \exp[-\beta V(x)]$$

$$\frac{1}{m} \frac{dG}{G v dv} = -\beta \quad \Rightarrow \quad \frac{dG}{G} = -\beta m v dv \quad \Rightarrow \quad G(v) = K_v \exp[-\beta m v^2 / 2]$$

Celkové řešení je

$$f(x, v) = F(x) \cdot G(v) = \exp \left[ -\beta \left( \frac{mv^2}{2} + V(x) \right) \right]$$

Řešení má skutečně charakter kanonického rozdělení. Hodnotu koeficientu  $\beta$  bychom zjistili porovnáním s termodynamikou, stejně jako při odvození kanonického rozdělení. ♦

### Boltzmannova rovnice v chaotických rychlostech

Vždy musíme rozlišovat mezi třemi rychlostmi:

$\mathbf{v}_\alpha$	fázová proměnná	
$\mathbf{u}_\alpha(t, \mathbf{x}) \equiv \langle \mathbf{v}_\alpha \rangle$	rychlostní pole (průměrná, středovaná rychlost)	(3.198)
$\mathbf{w}_\alpha \equiv \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{u}_\alpha$	chaotická (tepelná) složka rychlosti	



Doposud jsem využívali fázový prostor se sedmi proměnnými  $(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha)$ . Fázová rychlost obsahuje část odpovídající proudění i tepelnou část  $(\mathbf{v}_\alpha = \mathbf{u}_\alpha + \mathbf{w}_\alpha)$ . Někdy je výhodné pracovat s proměnnými obsahujícími jen tepelnou část pohybu, tj. provést transformaci

$$(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) \rightarrow (t, \mathbf{x}, \mathbf{w}_\alpha).$$

V Boltzmannově rovnici potom musíme nahradit derivace a rychlosti podle schématu:

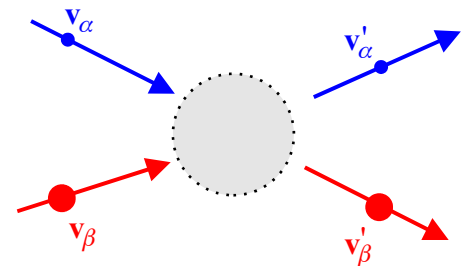
$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\partial w_k}{\partial t} \frac{\partial}{\partial w_k} = \frac{\partial}{\partial t} - \frac{\partial u_k}{\partial t} \frac{\partial}{\partial w_k}, \\ \frac{\partial}{\partial x_j} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial x_j} + \frac{\partial w_k}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial w_k} = \frac{\partial}{\partial x_j} - \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \frac{\partial}{\partial w_k}, \\ \frac{\partial}{\partial v_j} &\rightarrow \frac{\partial}{\partial w_j}, \\ v_j &\rightarrow w_j + u_j(t, \mathbf{x}). \end{aligned}$$

Výsledek je

$$\begin{aligned} \frac{df_\alpha}{dt} + (\mathbf{w}_\alpha \cdot \nabla) f_\alpha + \left( \frac{\mathbf{F}_\alpha}{m_\alpha} - \frac{d\mathbf{u}_\alpha}{dt} \right) \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{w}_\alpha} - (\mathbf{w}_\alpha \cdot \nabla) \left( \mathbf{u}_\alpha \cdot \frac{\partial f_\alpha}{\partial \mathbf{w}_\alpha} \right) &= \sum_\beta S_{\alpha\beta}, \\ \text{kde } \frac{d}{dt} &\equiv \frac{\partial}{\partial t} + \mathbf{u}_\alpha \cdot \nabla. \end{aligned} \quad (3.199)$$

### 3.12.2. Boltzmannův srážkový člen

V této kapitole se budeme zabývat pravou stranou Boltzmannovy rovnice, tedy srážkami. Předpokládejme srážku dvou částic  $\alpha$  a  $\beta$ . Nejprve přejdeme od rychlostí částic  $\mathbf{v}_\alpha$  a  $\mathbf{v}_\beta$  k relativní  $\mathbf{v}_{\alpha\beta}$  a těžišťové  $\mathbf{v}_{(\alpha\beta)}$  rychlosti. Transformace jedním směrem má tvar:



$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{\alpha\beta} &= \mathbf{v}_\alpha - \mathbf{v}_\beta; \\ \mathbf{v}_{(\alpha\beta)} &= \frac{m_\alpha \mathbf{v}_\alpha + m_\beta \mathbf{v}_\beta}{m_\alpha + m_\beta}. \end{aligned} \quad (3.200)$$

Inverzní transformace má tvar:

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_\alpha &= \mathbf{v}_{(\alpha\beta)} + \frac{m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \mathbf{v}_{\alpha\beta}; \\ \mathbf{v}_\beta &= \mathbf{v}_{(\alpha\beta)} - \frac{m_\alpha}{m_\alpha + m_\beta} \mathbf{v}_{\alpha\beta}. \end{aligned} \quad (3.201)$$

Zformulujme v nových proměnných zákon zachování energie a hybnosti:

$$\begin{aligned} \mathbf{p} &= m_\alpha \mathbf{v}_\alpha + m_\beta \mathbf{v}_\beta = (m_\alpha + m_\beta) \mathbf{v}_{(\alpha\beta)} = \text{const}, \\ E &= \frac{1}{2} m_\alpha \mathbf{v}_\alpha^2 + \frac{1}{2} m_\beta \mathbf{v}_\beta^2 = \frac{1}{2} (m_\alpha + m_\beta) \mathbf{v}_{(\alpha\beta)}^2 + \frac{1}{2} \frac{m_\alpha m_\beta}{m_\alpha + m_\beta} \mathbf{v}_{\alpha\beta}^2 = \text{const}. \end{aligned}$$

Zákon zachování hybnosti vede na zachování těžišťové rychlosti. Zákon zachování energie v kombinaci se zákonem zachování hybnosti vede na zachování velikosti vzájemné rychlosti:

- *Těžišťová rychlost obou částic se při srážce nemění.*
- *Velikost vzájemné rychlosti dvou částic se při srážce nemění.*

$$\begin{aligned} \mathbf{v}_{(\alpha\beta)} &= \text{const} , \\ |\mathbf{v}_{\alpha\beta}| &= \text{const} . \end{aligned} \quad (3.202)$$

Jediná veličina, která se při srážce mění je směr vzájemné rychlosti. Zavedme proto dvě nové veličiny charakterizující srážku:

$$\begin{aligned} g_{\alpha\beta} &\equiv |\mathbf{v}_{\alpha\beta}| ; \\ \mathbf{k}_{\alpha\beta} &\equiv \frac{\mathbf{v}_{\alpha\beta}}{|\mathbf{v}_{\alpha\beta}|} . \end{aligned} \quad (3.203)$$

První veličina je velikost vzájemné rychlosti a po celou dobu srážky se nemění ( $g_{\alpha\beta} = g'_{\alpha\beta}$ ). Druhá veličina je směr vzájemné rychlosti a představuje 2 stupně volnosti srážky (dvě složky vektoru  $\mathbf{k}$ , třetí lze dopočítat, protože jde o vektor jednotkový).

### Účinný průřez srážky

Dále zavedme účinný průřez srážky  $\sigma$  při konstantním  $g_{\alpha\beta}$  jako pravděpodobnost

$$\sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta}) ,$$

která je normována tak, aby

$$dW = g_{\alpha\beta} \sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta}) d^2\mathbf{k}'_{\alpha\beta} dt \quad (3.204)$$

byla podmíněná pravděpodobnost, že jednotkový vektor ve směru relativní rychlosti bude po srážce ležet v intervalu  $(\mathbf{k}'_{\alpha\beta}, \mathbf{k}'_{\alpha\beta} + d\mathbf{k}'_{\alpha\beta})$ .

Účinný průřez se nemění při:

- obrácení pohybu částic:  $\sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta}) = \sigma(-\mathbf{k}'_{\alpha\beta} | -\mathbf{k}_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta})$
- Při inverzi souřadnicové soustavy:  $\sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta}) = \sigma(-\mathbf{k}_{\alpha\beta} | -\mathbf{k}'_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta})$

Z obou vlastností plyne důležitý symetrický vztah

$$! \quad \sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta}) = \sigma(\mathbf{k}'_{\alpha\beta} | \mathbf{k}_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta}) . \quad (3.205)$$

### Boltzmannův srážkový integrál

Nyní již můžeme napsat srážkový člen na pravé straně Boltzmannovy rovnice jako

$$\begin{aligned} S_{\alpha\beta} &= \int \left[ f_{\alpha}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}'_{\alpha}) f_{\beta}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}'_{\beta}) - f_{\alpha}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_{\alpha}) f_{\beta}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_{\beta}) \right] \cdot \\ &\quad \cdot g_{\alpha\beta} \sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta} ; g_{\alpha\beta}) d^2\mathbf{k}'_{\alpha\beta} d^3\mathbf{v}_{\beta} \end{aligned} \quad (3.206)$$

Interpretace je zřejmá. Pravděpodobnost srážky dvou částic je úměrná součinu hustot pravděpodobností obou částic (tj. výskytu částic v daném místě fázového prostoru) násobené účinným průřezem srážky. První člen popisuje příznivé jevy, kdy ze všech ostatních oblastí fázového prostoru se po srážce částice dostanou do daného místa fázového prostoru. Druhý člen jsou nepříznivé případy, kdy částice z daného místa fázového prostoru po srážce uniknou. Integrace je provedena přes volné parametry srážky. Díky vlastnosti (3.205) bylo možné oba účinné průřezy zapsat jednotně a vytknout z hranaté závorky.

### Srážkový invariant

Označme  $\psi_\alpha$  nějaký sumační invariant (hmotnost, hybnost, energie). Potom pro srážkový člen platí velmi důležitý vztah

$$! \quad \sum_{\alpha, \beta} \int \psi_\alpha S_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_\alpha = 0. \quad (3.207)$$

Důkaz tohoto vztahu je sice jednoduchý, ale poněkud pracný a proto ho může méně pozorný student vynechat.

**Důkaz:**

$$| \quad S = \sum_{\alpha, \beta} \int \psi_\alpha S_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_\alpha = \sum_{\alpha, \beta} \int \psi_\alpha [f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta] \cdot g_{\alpha\beta} \sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta}; g_{\alpha\beta}) d^2 \mathbf{k}'_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_\alpha d^3 \mathbf{v}_\beta$$

V integraci provedeme transformaci k těžišťové a relativní rychlosti podle schématu

$$d^3 \mathbf{v}_\alpha d^3 \mathbf{v}_\beta = d^3 \mathbf{v}_{(\alpha\beta)} d^3 \mathbf{v}_{\alpha\beta} = d^3 \mathbf{v}_{(\alpha\beta)} g_{\alpha\beta}^2 d g_{\alpha\beta} d^2 \mathbf{k}_{\alpha\beta}.$$

Výsledek bude

$$| \quad S = \sum_{\alpha, \beta} \int \psi_\alpha [f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta] g_{\alpha\beta}^3 \sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta}; g_{\alpha\beta}) d^2 \mathbf{k}'_{\alpha\beta} d^2 \mathbf{k}_{\alpha\beta} d g_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_{(\alpha\beta)}.$$

Nyní zaměníme čárkované a nečárkované veličiny a použijeme relace

$$g'_{\alpha\beta} = g_{\alpha\beta}; \quad \mathbf{v}'_{(\alpha\beta)} = \mathbf{v}_{(\alpha\beta)}; \quad \sigma(\mathbf{k} | \mathbf{k}'; g_{\alpha\beta}) = \sigma(\mathbf{k}' | \mathbf{k}; g_{\alpha\beta})$$

Výsledek bude

$$| \quad S = \sum_{\alpha, \beta} \int \psi'_\alpha [f_\alpha f_\beta - f'_\alpha f'_\beta] g_{\alpha\beta}^3 \sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta}; g_{\alpha\beta}) d^2 \mathbf{k}'_{\alpha\beta} d^2 \mathbf{k}_{\alpha\beta} d g_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_{(\alpha\beta)}.$$

Jako další krok provedeme symetrizaci, napíšeme výsledek jako polovinu posledního kroku a polovinu předposledního:

$$| \quad S = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} \int (\psi_\alpha - \psi'_\alpha) [f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta] g_{\alpha\beta}^3 \sigma(\mathbf{k}_{\alpha\beta} | \mathbf{k}'_{\alpha\beta}; g_{\alpha\beta}) d^2 \mathbf{k}'_{\alpha\beta} d^2 \mathbf{k}_{\alpha\beta} d g_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_{(\alpha\beta)}.$$

V dalším kroku zaměníme indexy  $\alpha$  a  $\beta$  a opět provedeme symetrizaci:

$$| \quad S = \frac{1}{4} \sum_{\alpha, \beta} \int (\psi_\alpha + \psi_\beta - \psi'_\alpha - \psi'_\beta) [f'_\alpha f'_\beta - f_\alpha f_\beta] g_{\alpha\beta}^3 \sigma(\dots) d^2 \mathbf{k}'_{\alpha\beta} d^2 \mathbf{k}_{\alpha\beta} d g_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_{(\alpha\beta)}.$$

Pro sumační invarianty je ale první závorka nulová a proto  $S = 0$ . ◆

### 3.12.3. Rovnice přenosu (momentová rovnice)

Často nepotřebujeme pravděpodobnostní informace o celém fázovém prostoru, ale postačí nám informace jen o vývoji dynamických proměnných v čase a v poloze. Přes informace o rozložení v rychlostech je možné vystředovat. Nezapomeňte, že pravděpodobnosti jsou normovány k počtu částic a proto podle (3.195) je

$$\mathbf{u}_\alpha(t, \mathbf{x}) = \frac{\int \mathbf{v}_\alpha f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{v}_\alpha}{\int f_\alpha(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) d^3 \mathbf{v}_\alpha}.$$

Ztráta informace o proměnné  $\mathbf{v}_\alpha$  způsobená středováním vede od statistiky k rovnicím kontinua. Vynásobme Boltzmannovu rovnici (3.197) libovolným sumačním invariantem  $\phi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha)$  a vystředujme přes rychlostní proměnné:

$$\int \phi_\alpha \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} d^3 \mathbf{v}_\alpha + \int \phi_\alpha (\mathbf{v} \cdot \nabla_{\mathbf{x}}) f_\alpha d^3 \mathbf{v}_\alpha + \int \frac{\phi_\alpha}{m_\alpha} (\mathbf{F}_\alpha \cdot \nabla_{\mathbf{v}}) f_\alpha d^3 \mathbf{v}_\alpha = \int \phi_\alpha \sum_{\beta} S_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_\alpha.$$

Postupně nyní upravíme všechny tři členy na levé straně:

*První člen:*

$$\int \phi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) \frac{\partial f_\alpha}{\partial t} d^3 \mathbf{v}_\alpha = \frac{\partial}{\partial t} \int \phi_\alpha f_\alpha d^3 \mathbf{v}_\alpha = \frac{\partial}{\partial t} n_\alpha(t, \mathbf{x}) \langle \phi_\alpha \rangle_{\mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial t} \langle n_\alpha \phi_\alpha \rangle_{\mathbf{v}}.$$

*Druhý člen:*

$$\int \phi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) v_{i\alpha} \frac{\partial f_\alpha}{\partial x_i} d^3 \mathbf{v}_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_i} \int \phi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha) v_{i\alpha} f_\alpha d^3 \mathbf{v}_\alpha = \frac{\partial}{\partial x_i} n_\alpha(t, \mathbf{x}) \langle \phi_\alpha v_{i\alpha} \rangle_{\mathbf{v}} = \frac{\partial}{\partial x_i} \langle n_\alpha \phi_\alpha v_{i\alpha} \rangle_{\mathbf{v}}$$

*Třetí člen:*

$$\begin{aligned} \int \frac{\phi_\alpha(\mathbf{v}_\alpha)}{m_\alpha} F_{k\alpha}(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha) \frac{\partial f_\alpha}{\partial v_{k\alpha}} d^3 \mathbf{v}_\alpha & \stackrel{\text{(p.p.)}}{=} \left[ \frac{\phi_\alpha F_{k\alpha} f_\alpha}{m_\alpha} \right]_{\partial\Omega} - \frac{1}{m_\alpha} \int \frac{\partial}{\partial v_{k\alpha}} [\phi_\alpha F_{k\alpha}] f_\alpha d^3 \mathbf{v}_\alpha = \\ & = -\frac{1}{m_\alpha} \left\langle n_\alpha \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_\alpha} (\phi_\alpha \mathbf{F}_\alpha) \right\rangle_{\mathbf{v}}. \end{aligned}$$

Při úpravě třetího členu musíme předpokládat, že silové pole může být i funkcí rychlostí (například magnetická složka Lorentzovy síly). Provedli jsme integraci per partes. První člen je nulový, protože na hranicích oblasti předpokládáme nulové hustoty pravděpodobnosti výskytu částic. Středováním přes rychlostní prostor z Boltzmannovy rovnice zůstane

$$\text{!} \quad \frac{\partial}{\partial t} \langle n_\alpha \phi_\alpha \rangle_{\mathbf{v}} + \frac{\partial}{\partial x_i} \langle n_\alpha \phi_\alpha v_{i\alpha} \rangle_{\mathbf{v}} - \frac{1}{m_\alpha} \left\langle n_\alpha \frac{\partial}{\partial \mathbf{v}_\alpha} (\phi_\alpha \mathbf{F}_\alpha) \right\rangle_{\mathbf{v}} = \int \phi_\alpha \sum_{\beta} S_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_\alpha. \quad (3.208)$$

Jde o rovnici přenosu (momentovou rovnici), která je základem *teorie kontinua*. Než si o této rovnici řekneme trochu více, napíšeme ji pro elektromagnetickou interakci

$$\mathbf{F}_\alpha = Q_\alpha \mathbf{E} + Q_\alpha \mathbf{v}_\alpha \times \mathbf{B}.$$

Při derivování třetího členu v rychlostech musíme přejít buď ke složkám nebo využít definice vektorového součinu přes Levi-Civitův tenzor. Postup je přímočarý s výsledkem:

$$\frac{\partial}{\partial t} \langle n_\alpha \phi_\alpha \rangle_{\mathbf{v}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle n_\alpha \phi_\alpha \mathbf{v}_\alpha \rangle_{\mathbf{v}} - \frac{Q_\alpha}{m_\alpha} \left\langle n_\alpha (\mathbf{E} + \mathbf{v}_\alpha \times \mathbf{B}) \frac{\partial \phi_\alpha}{\partial \mathbf{v}_\alpha} \right\rangle_{\mathbf{v}} = \int \phi_\alpha \sum_{\beta} S_{\alpha\beta} d^3 \mathbf{v}_\alpha \quad (3.209)$$

### Poznámky:

- Statistická fyzika využívá proměnné  $(t, \mathbf{x}, \mathbf{v}_\alpha)$ . Po středování přes rychlostní prostor ztrácíme část informace. Vystředované proměnné jsou jen funkcí  $(t, \mathbf{x})$ . Sama střední hodnota rychlosti  $\mathbf{u}_\alpha(t, \mathbf{x})$  se ale v rovnicích kontinua samozřejmě objevuje. Jen ztrácíme statistickou informaci o rozložení rychlostí.
- Celá rovnice přenosu má tvar rovnice kontinuity. První člen je časová derivace hustoty aditivní veličiny, pak následuje divergence toku veličiny. Třetí člen odpovídá zdrojovým členům od polí a pravá strana zdrojovým členům od srážek. Proto se rovnici říká rovnice přenosu – popisuje jak tečou (přenášá se) různé veličiny.
- V rovnici přenosu je volná funkce rychlosti  $\phi_\alpha$ . Za ní se dosazují různé mocniny rychlosti a tím získáváme tzv. momenty Boltzmannovy rovnice. Proto se rovnici přenosu říká *momentová rovnice*.

- Sečteme-li momentové rovnice pro všechny druhy částic  $\alpha$ , bude pravá strana podle vztahu (3.207) nulová:

$$\sum_{\alpha} \frac{\partial}{\partial t} \langle n_{\alpha} \phi_{\alpha} \rangle_{\mathbf{v}} + \nabla_{\mathbf{x}} \cdot \langle n_{\alpha} \phi_{\alpha} \mathbf{v}_{\alpha} \rangle_{\mathbf{v}} - \frac{Q_{\alpha} n_{\alpha}}{m_{\alpha}} \left\langle (\mathbf{E} + \mathbf{v}_{\alpha} \times \mathbf{B}) \frac{\partial \phi_{\alpha}}{\partial \mathbf{v}_{\alpha}} \right\rangle_{\mathbf{v}} = 0.$$

Tomuto přiblížení říkáme jednotekutinový model. Příspěvky od srážek se v jednotekutinovém modelu vzájemně vyruší.

- Pro nultý moment můžeme položit  $\phi_{\alpha}$  rovno jedné a v jednotekutinovém přiblížení dostaneme rovnici kontinuity:

$$\frac{\partial}{\partial t} n + \frac{\partial}{\partial x_i} j_i = 0; \quad n \equiv \sum_{\alpha} n_{\alpha}, \quad \mathbf{j} \equiv \sum_{\alpha} n_{\alpha} \mathbf{u}_{\alpha}.$$

Z rovnice kontinuity počítáme časový vývoj koncentrace (nultého momentu Boltzmannovy rovnice). Ve druhém členu se ale objevila nová veličina - tok částic  $\mathbf{j}$  obsahující střední hodnotu rychlosti proudění. Proto musíme mít i rovnici pro časový vývoj toku částic (rychlosti) neboli pohybovou rovnici. Získáme ji jako první moment Boltzmannovy rovnice položením  $\phi_{\alpha} = v_{i\alpha}$ . Výsledkem je:

$$\frac{\partial}{\partial t} J_i + \frac{\partial}{\partial x_j} P_{ij} = 0.$$

V pohybové rovnici se objevuje další nová veličina – tenzor tlaku. Obsahuje dynamický tlak (tok hybnosti), běžný tlak látky (skalární složka odpovídající chaotickému pohybu), viskozitu (tenzorová část tlaku) a u elektromagnetické interakce Maxwellův tenzor prnutí (tlak způsobený přítomností elektrických a magnetických polí. Jako další moment Boltzmannovy rovnice získáme rovnici pro časový vývoj tenzoru tlaku (odpovídá rovnici pro přenos energie, jde o kvadráty rychlostí):

$$\frac{\partial}{\partial t} P_{ij} + \frac{\partial}{\partial x_k} Q_{ijk} = 0.$$

V druhém členu se opět objevuje nová veličina popisující tepelný tok. V této proceduře bychom mohli pokračovat libovolně daleko a získáme tak nekonečnou posloupnost momentových rovnic pro kontinuum. V praxi se soustava uzavírá nějakým algebraickým vztahem (například Fourierovým zákonem pro tepelný tok) po konečném počtu momentů.

- V teorii plazmatu se často využívá i vícetekutinový model (plazma se skládá z tekutiny elektronů, tekutin různých typů iontů a tekutiny neutrálních částic). V tomto přiblížení nevymizí srážkové členy a je třeba s nimi počítat.
- Chceme-li úplnější informaci o systému, musíme řešit Boltzmannovou rovnici doplněnou o příslušné polní rovnice. Postačí-li nám informace na úrovni kontinua, opíráme naše výpočty o soustavu momentových rovnic.

### 3.12.4. První tři momenty

Uveďme na závěr první tři momenty Boltzmannovy rovnice zapsané pomocí střední rychlosti proudění  $\mathbf{u}_{\alpha} \equiv \langle \mathbf{v}_{\alpha} \rangle$  a tepelné rychlosti  $\mathbf{w}_{\alpha} \equiv \mathbf{v}_{\alpha} - \mathbf{u}_{\alpha}$ . V momentové rovnici (3.209) dosadíme za  $\phi_{\alpha}$  postupně funkce  $m_{\alpha}$ ,  $m_{\alpha} v_{\alpha k}$  a  $m_{\alpha} v_{\alpha}^2 / 2$  a poté rychlost rozdělíme na uspořádanou a tepelnou část  $v_{\alpha k} = u_{\alpha k} + w_{\alpha k}$ . Nezapomeňte, že  $\langle \mathbf{w}_{\alpha} \rangle = 0$ .

#### Nultý moment ( $\phi_{\alpha} = m_{\alpha}$ ), rovnice kontinuity

Po sečtení momentových rovnic pro všechny druhy částic (přes  $\alpha$ ) získáme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial J_k}{\partial x_k} = 0, \tag{3.210}$$

kde jsme označili hustotu a tok hmoty

$$\rho_\alpha \equiv m_\alpha n_\alpha, \quad \rho \equiv \sum \rho_\alpha, \quad \mathbf{J}_\alpha \equiv \rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha, \quad \mathbf{J} \equiv \sum \mathbf{J}_\alpha.$$

Pokud bychom nesečetli všechny momentové rovnice, získali bychom oddělené rovnice kontinuity pro každý druh částic:

$$\frac{\partial \rho_\alpha}{\partial t} + \frac{\partial J_{k\alpha}}{\partial x_k} = 0, \quad (3.211)$$

### První moment ( $\phi_\alpha = m_\alpha v_{k\alpha}$ ), pohybová rovnice (zachování hybnosti)

Po dosazení prvního momentu budou mít momentové rovnice pro jednotlivé druhy částic nenulové pravé strany. Vzhledem k tomu, že ale  $\phi_\alpha$  je sumační invariant, získáme po sečtení všech rovnic a elementárních úpravách jednoduchý výraz s nulou na pravé straně

$$\frac{\partial}{\partial t} [\rho \mathbf{u} + \mathbf{D} \times \mathbf{B}]_i + \frac{\partial}{\partial x_j} \left[ \sum_\alpha T_{ij}^\alpha + T_{ij}^E + T_{ij}^M \right] = 0, \quad (3.212)$$

ve kterém jsme označili

$$\begin{aligned} \mathbf{u} &\equiv \sum_\alpha n_\alpha m_\alpha \mathbf{u}_\alpha / \rho, & \text{neboli} & & \rho \mathbf{u} &= \sum_\alpha \mathbf{J}_\alpha; \\ T_{ij}^\alpha &\equiv \rho_\alpha \langle v_{i\alpha} v_{j\alpha} \rangle, & & & \mathbf{T}^\alpha &= \rho_\alpha \langle \mathbf{v}_\alpha \otimes \mathbf{v}_\alpha \rangle; \\ T_{ij}^E &\equiv \varepsilon_0 \left( \frac{E^2}{2} \delta_{ij} - E_i E_j \right), & & & \mathbf{T}^E &= \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}}{2} \hat{\mathbf{1}} - \mathbf{E} \otimes \mathbf{D}; \\ T_{ij}^M &\equiv \frac{1}{\mu_0} \left( \frac{B^2}{2} \delta_{ij} - B_i B_j \right), & & & \mathbf{T}^M &= \frac{\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}}{2} \hat{\mathbf{1}} - \mathbf{H} \otimes \mathbf{B}. \end{aligned} \quad (3.213)$$

Odvozená rovnice je zákonem zachování hybnosti pro soustavu částic a elektromagnetického pole. První člen v časové derivaci má význam hustoty hybnosti látky  $\rho \mathbf{u}$ , což je ale současně tok hmoty z rovnice kontinuity. Druhý člen  $\mathbf{D} \times \mathbf{B}$  je hustotou hybnosti elektromagnetického pole. V prostorových derivacích se nacházejí *tenzory toku hybnosti* částic, elektrického a magnetického pole. Středování se provádí přes rychlostní prostor:

$$T_{ij}^\alpha \equiv \rho_\alpha \langle v_{i\alpha} v_{j\alpha} \rangle = m_\alpha \int v_{i\alpha} v_{j\alpha} f_\alpha d^3 v_\alpha.$$

Celková hybnost soustavy látka + pole se zachovává. Hybnost samotného pole ani částic se nezachovává:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{D} \times \mathbf{B}) + \vec{\nabla} \cdot (\tilde{\mathbf{T}}^E + \tilde{\mathbf{T}}^M) &= -\rho_Q \mathbf{E} - \rho_Q \mathbf{v} \times \mathbf{B}, \\ \frac{\partial}{\partial t} (\rho \mathbf{u}) + \vec{\nabla} \cdot \left( \sum_\alpha \tilde{\mathbf{T}}^\alpha \right) &= \rho_Q \mathbf{E} + \rho_Q \mathbf{v} \times \mathbf{B}. \end{aligned}$$

Časovou změnou hustoty hybnosti je u částic hustota Lorentzovy síly vystupující na pravé straně. U elektromagnetického pole je na pravé straně člen s opačným znaménkem, vztah lze odvodit přímo z Maxwellových rovnic. Teprve součet obou rovnic dá na pravé straně nulu. Kdybychom chtěli rozepsat zákon zachování hybnosti pro jednotlivé druhy částic (momentové rovnice nesečteme), objeví se na pravých stranách ještě srážkové členy:

$$\frac{\partial}{\partial t} (\rho_\alpha \mathbf{u}_\alpha) + \vec{\nabla} \cdot \tilde{\mathbf{T}}^\alpha = \rho_Q^\alpha \mathbf{E} + \rho_Q^\alpha \mathbf{u}_\alpha \times \mathbf{B} + \sum_\beta \int m_\alpha \mathbf{v}_\alpha S_{\alpha\beta} d^3 v_\alpha.$$

V součtu přes  $\alpha$  potom vymizí neboť jde o srážkové invarianty.

Tenzor toku hybnosti částic lze snadno rozepsat pomocí uspořádané a chaotické složky rychlosti ( $\mathbf{v} = \mathbf{u} + \mathbf{w}$ ) na dvě části:

$$T_{ij}^\alpha = \rho_\alpha u_{i\alpha} u_{j\alpha} + P_{ij}^\alpha; \quad P_{ij}^\alpha \equiv \rho_\alpha \langle w_{i\alpha} w_{j\alpha} \rangle = m_\alpha \int (v_{i\alpha} - u_{i\alpha})(v_{j\alpha} - u_{j\alpha}) f_\alpha d^3 v_\alpha.$$

První část souvisí s přenosem hybnosti prouděním, druhá se nazývá tenzor tlaku a souvisí s chaotickými pohyby. V invariantním zápisu lze pro tenzor tlaku psát

$$\vec{\mathbf{P}}^\alpha \equiv m_\alpha \int \mathbf{w}_\alpha \otimes \mathbf{w}_\alpha f_\alpha d^3 v_\alpha = m_\alpha \int (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{u}_\alpha) \otimes (\mathbf{v}_\alpha - \mathbf{u}_\alpha) f_\alpha d^3 v_\alpha$$

Tenzor tlaku lze dále rozdělit na skalární tlak a viskózní část s nulovou stopou (součtem diagonálních členů):

$$P_{ij}^\alpha \equiv \rho_\alpha \langle w_{i\alpha} w_{j\alpha} \rangle = \rho_\alpha \left\langle \frac{\mathbf{w}_\alpha^2}{3} \delta_{ij} \right\rangle + \rho_\alpha \left\langle w_{i\alpha} w_{j\alpha} - \frac{\mathbf{w}_\alpha^2}{3} \delta_{ij} \right\rangle \equiv p_\alpha \delta_{ij} - V_{ij}^\alpha.$$

Viskózní tenzor brání toku hybnosti a proto se definuje se záporným znaménkem.

### Druhý moment ( $\phi_\alpha = m_\alpha v_\alpha^2 / 2$ ), pohybová rovnice (zachování hybnosti)

Obdobným postupem jako u předchozích momentů lze získat zákon zachování energie ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho u^2}{2} + e + \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}}{2} + \frac{\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\rho u^2}{2} \mathbf{u} + e \mathbf{u} + \vec{\mathbf{P}} \cdot \vec{\mathbf{u}} + \mathbf{q} + \mathbf{E} \times \mathbf{H} \right) = 0. \quad (3.214)$$

Vnitřní energii a tepelný tok jsme označili

$$\mathbf{e}_\alpha \equiv \rho_\alpha \left\langle \frac{w_\alpha^2}{2} \right\rangle; \quad \mathbf{e} \equiv \sum_\alpha \mathbf{e}_\alpha; \quad \mathbf{q}_\alpha \equiv \rho_\alpha \left\langle \frac{w_\alpha^2}{2} \mathbf{w}_\alpha \right\rangle; \quad \mathbf{q} \equiv \sum_\alpha \mathbf{q}_\alpha.$$

V časové derivaci jsou hustoty energií (kinetické, vnitřní, elektrické, magnetické), v prostorové derivaci jsou *toky energií* (proudění, tok vnitřní energie, tok tlakové energie, tepelný tok, tok elektromagnetické energie – Poyntingův vektor). Zákon zachování energie opět platí pro soustavu všech druhů částic a pole. Oddělené zákony zachování mají nenulové pravé strany, na kterých se objevuje hustota Jouleova výkonu.:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho u^2}{2} + e \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\rho u^2}{2} \mathbf{u} + e \mathbf{u} + \vec{\mathbf{P}} \cdot \vec{\mathbf{u}} + \mathbf{q} \right) = \mathbf{j} \cdot \mathbf{E},$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\mathbf{E} \cdot \mathbf{D}}{2} + \frac{\mathbf{H} \cdot \mathbf{B}}{2} \right) + \nabla \cdot (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) = -\mathbf{j} \cdot \mathbf{E}.$$

Pokud nesečteme momentové rovnice a budeme uvažovat zákony zachování energie pro jednotlivé druhy částic zvlášť, objeví se na pravé straně ještě srážkové členy (ty dají v součtu jakožto srážkový invariant nulu):

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\rho_\alpha u_\alpha^2}{2} + e_\alpha \right) + \nabla \cdot \left( \frac{\rho_\alpha u_\alpha^2}{2} \mathbf{u}_\alpha + e_\alpha \mathbf{u}_\alpha + \vec{\mathbf{P}}^\alpha \cdot \vec{\mathbf{u}}_\alpha + \mathbf{q}_\alpha \right) = \mathbf{j}_\alpha \cdot \mathbf{E} + \sum_\beta \int \frac{m_\alpha v_\alpha^2}{2} S_{\alpha\beta} d^3 v_\alpha.$$

Pochopitelně by bylo možné odvozovat další momenty Boltzmannovy rovnice, jejich struktura bude ale stále složitější a interpretace jednotlivých členů obtížnější.