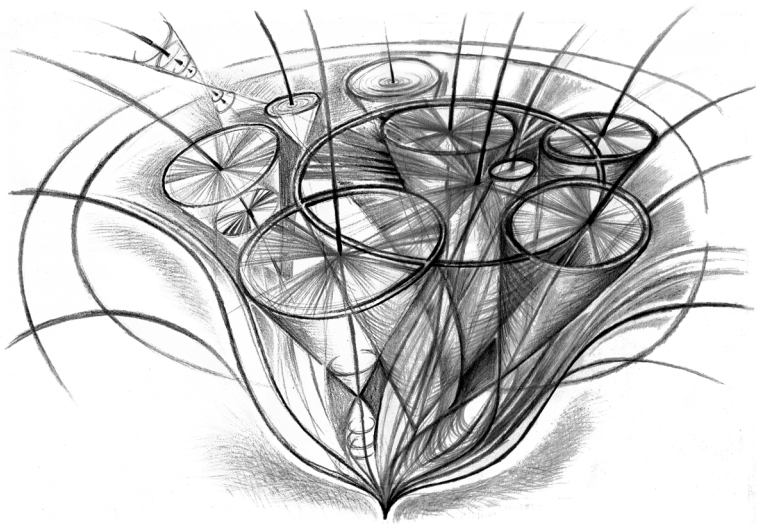
VYBRANÉ KAPITOLY Z TEORETICKÉ FYZIKY I



Petr Kulhánek

Teoretická mechanika
Kvantová teorie
Matematika pro fyziku

AGA 2020/2024

Text © Petr Kulhánek
ISBN: 978-80-906638-2-4

Obsah

PŘEDMLUVA **9**

ÚVOD **11**

1. TEORETICKÁ MECHANIKA **15**

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

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

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

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

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

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

2. KVANTOVÁ TEORIE 109

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

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

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

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

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

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

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

2.8 SOUSTAVA STEJNÝCH ČÁSTIC 223
2.8.1 Operátor výměny dvou částic 223
2.8.2 Bosony a fermiony, Pauliho princip 224

2.8.3 Druhé kvantování ... 225
2.8.4 Ukázka druhého kvantování pro Kleinovo-Gordonovo pole ... 228

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

3. MATEMATIKA PRO FYZIKU ... 241

3.1 EINSTEINOVA SUMAČNÍ KONVENCE ... 242
3.1.1 Zavedení sumační konvence ... 242
3.1.2 Jednoduché příklady ... 242
3.1.3 Délkový element ... 246

3.2 KOMPLEXNÍ ČÍSLA A FUNKCE ... 248
3.2.1 Reprezentace komplexního čísla ... 248
3.2.2 Goniometrický tvar ... 250
3.2.3 Rotace v rovině ... 253
3.2.4 Kvaterniony ... 257
3.2.5 Holomorfní funkce ... 260
3.2.6 Laurentův rozvoj a reziduová věta ... 261
3.2.7 Příklady na výpočty integrálů ... 263
3.2.8 Cauchyho integrální formule a holografický princip ... 268

3.3 VEKTORY A TENZORY ... 270
3.3.1 Lineární vektorový prostor ... 270
3.3.2 Skalární součin ... 271
3.3.3 Vektorový součin ... 279
3.3.4 Vektorové identity ... 284
3.3.5 Lieova algebra ... 287
3.3.6 Tenzory a metrika ... 290

3.4 DIRACOVA SYMBOLIKA A OPERÁTORY V KVANTOVÉ TEORII ... 295
3.4.1 Hilbertovy prostory ... 295
3.4.2 Operátory ... 297
3.4.3 Projekční operátory ... 303
3.4.4 Rozvoj prvku do báze ... 306
3.4.5 Spektrální teorie ... 309

3.5 OD GRADIENTU K HELICITĚ ... 316
3.5.1 Gradient ... 317
3.5.2 Divergence ... 320
3.5.3 Rotace ... 325
3.5.4 Helicita ... 328

3.6 VÍCEROZMĚRNÉ INTEGRÁLY ... 330
3.6.1 Křivkový integrál ... 330
3.6.2 Plošný a objemový integrál ... 334
3.6.3 Integrace per partes v N dimenzích ... 337

3.6.4 Vnější algebra ... 338
3.6.5 Míra a metrika ... 339

3.7 Některé speciální funkce ... 341
3.7.1 Besselovy funkce ... 341
3.7.2 Kulové funkce ... 344
3.7.3 Chybová funkce a Chandrasekharova funkce ... 346

3.8 Zobecněné funkce ... 348
3.8.1 Diracova distribuce ... 348
3.8.2 Temperované distribuce ... 350
3.8.3 Konvoluce a Fourierova transformace ... 352
3.8.4 Greenova funkce ... 354

3.9 Pfaffovy diferenciální formy ... 357
3.9.1 Věta o pěti ekvivalencích ... 357
3.9.2 Věta o existenci integračního faktoru ... 360

3.10 Důležité vztahy ... 362
3.10.1 Kuželosečky ... 362
3.10.2 Trigonometrie ... 364
3.10.3 Operátory v křivočarých souřadnicích ... 367
3.10.4 Některé integrály a řady ... 369
3.10.5 Rozvoje některých funkcí ... 371

SEZNAM SYMBOLŮ ... 373

REJSTŘÍK OSOBNOSTÍ ... 379
Teoretická mechanika ... 380
Kvantová teorie ... 384
Matematika ... 395

REJSTŘÍK POJMŮ ... 404

LITERATURA ... 408

CO NAJDETE V DALŠÍCH DÍLECH? ... 411
Vybrané kapitoly z teoretické fyziky II ... 412
Vybrané kapitoly z teoretické fyziky III ... 414

Předmluva

Milí čtenářové,

tento text vznikal v průběhu mnoha let na základě mých přednášek na Českém vysokém učení technickém v Praze, kde po roce 1989 konečně přestala platit omezení minulého režimu, a já mohl začít přednášet. Na elektrotechnické fakultě tehdy vzniknul čtyřsemestrální kurz teoretické fyziky pro magisterské a doktorské studium. Tento kurz po několika proměnách funguje dodnes a volně na něj navazuje dvousemestrální přednáška z teorie plazmatu na Fakultě jaderné a fyzikálně inženýrské. V roce 2011 vyšla učebnice *Úvod do teorie plazmatu* a až poté, v roce 2016 se objevila kniha *Vybrané kapitoly z teoretické fyziky*. Po čtyřech dalších letech jsem se rozhodl k celému cyklu přednášek, který existuje i v nahrané podobě na YouTube, vydat kompletní učební text tvořený trojicí knih *Vybrané kapitoly z teoretické fyziky I, II a III*. První díl této trilogie právě držíte v rukou. Naleznete v něm základy teoretické mechaniky, která je odrazovým můstkem ke studiu kvantové mechaniky, statistické fyziky, elektromagnetizmu, relativity, teorie plazmatu i dalších odvětví fyziky. Text obsahuje klasické pasáže týkající se Lagrangeových a Hamiltonových rovnic, zákonů zachování, Poissonových závorek a kanonických transformací. Zařazena je i kapitola o adiabatických invariantech, která je důležitá v teorii plazmatu. V kapitole 1.4 jsou probrané partie ukázány na některých důležitých úlohách. Je zde například odvozen pohyb v rotující soustavě, nalezeny pohybové rovnice v případě disipace energie nebo proveden výpočet Lagrangeových bodů v tzv. restriktivním problému tří těles. V kapitole 1.4.6 nalezne čtenář metodu, jak v některých případech vyřešit inverzní úlohu, tj. ze znalosti pohybových rovnic nalézt Lagrangeovu funkci problému. V závěru je nastíněna problematika Lagrangeových rovnic pro polní problémy, která končí Lagrangeovou formulací Maxwellových rovnic.

Druhá část této učebnice je věnována kvantové teorii. Relativně standardní partie týkající se stavby a interpretace kvantové teorie, momentu hybnosti, spinu, časového vývoje a jednoduchých příkladů nalezení spektra Hamiltonova operátoru jsou doplněny aktuální problematikou týkající se hranice mezi kvantovým a klasickým světem, vyvrácením existence skrytých parametrů, EPR paradoxem a Bellovými nerovnostmi. Problematika je většinou řešena v Diracově symbolice, která je objasněna v kapitole 3.4 této knihy. Závěr části věnované základům kvantové teorie se týká Kleinovy-Gordonovy a Diracovy rovnice. Jde o jakési minimum, které umožní čtenáři číst pokročilejší učebnice kvantové teorie.

Poslední část učebnice je věnována základům matematiky, které jsou nutné ke studiu fyzikálních dějů. Čtenář může do této části učebnice nahlédnout, kdykoli nebude znát matematiku potřebnou pro četbu fyzikálních partií. Je zde zavedena Einsteinova sumační konvence, probrány základy komplexní analýzy, lineárních vektorových prostorů, Hilbertových prostorů, definována Lieova algebra, ukázány základy zacházení s kovariantními a kontravariantními složkami tenzorů, popsány kuželosečky, vysvětlena Diracova symbolika, probrány některé speciální funkce a mnoho dalších užitečných partií matematiky pro fyziky.

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

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

Co říci na závěr? Mé poděkování patří řadě mých studentů, kteří se z textů, na jejichž základě vznikala tato kniha, učili a pečlivě objevovali překlepy a nejasnosti. Zejména bych chtěl poděkovat Ing. et Ing. Petru Endelovi, Ing. Radku Beňovi, RNDr. Davidu Břeňovi, Ph.D., Ing. Miroslavu Horkému, Ph.D., Davidu Maňasovi, Ing. Antonínu Krpenskému a mnohým dalším. Velký dík patří Danielu Handlovi, který zcela nezištně kurz teoretické fyziky natočil na video, a Ing. Janu Slámovi, který se zasloužil o natočení dalších částí kurzu na FEL ČVUT v Praze. V neposlední řadě patří mé poděkování Ing. arch. Ivanu Havlíčkovi, který se postaral o úvodní grafiku k jednotlivým kapitolám, obálku a některé obrázky. Budoucím studentům bych chtěl popřát především bystrý úsudek, bez něhož by studium přírodních dějů nemělo žádný smysl. V dnešní uspěchané době jsou zde ale i další potřebné faktory: klid ke studiu, dostatek času a adekvátní rodinné a finanční zázemí. Doufám, že čtenáři této knihy naleznou vše potřebné k úspěšnému studiu učebnice, kterou právě otevřeli.

Petr Kulhánek, 2020, Lešany

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

Úvod

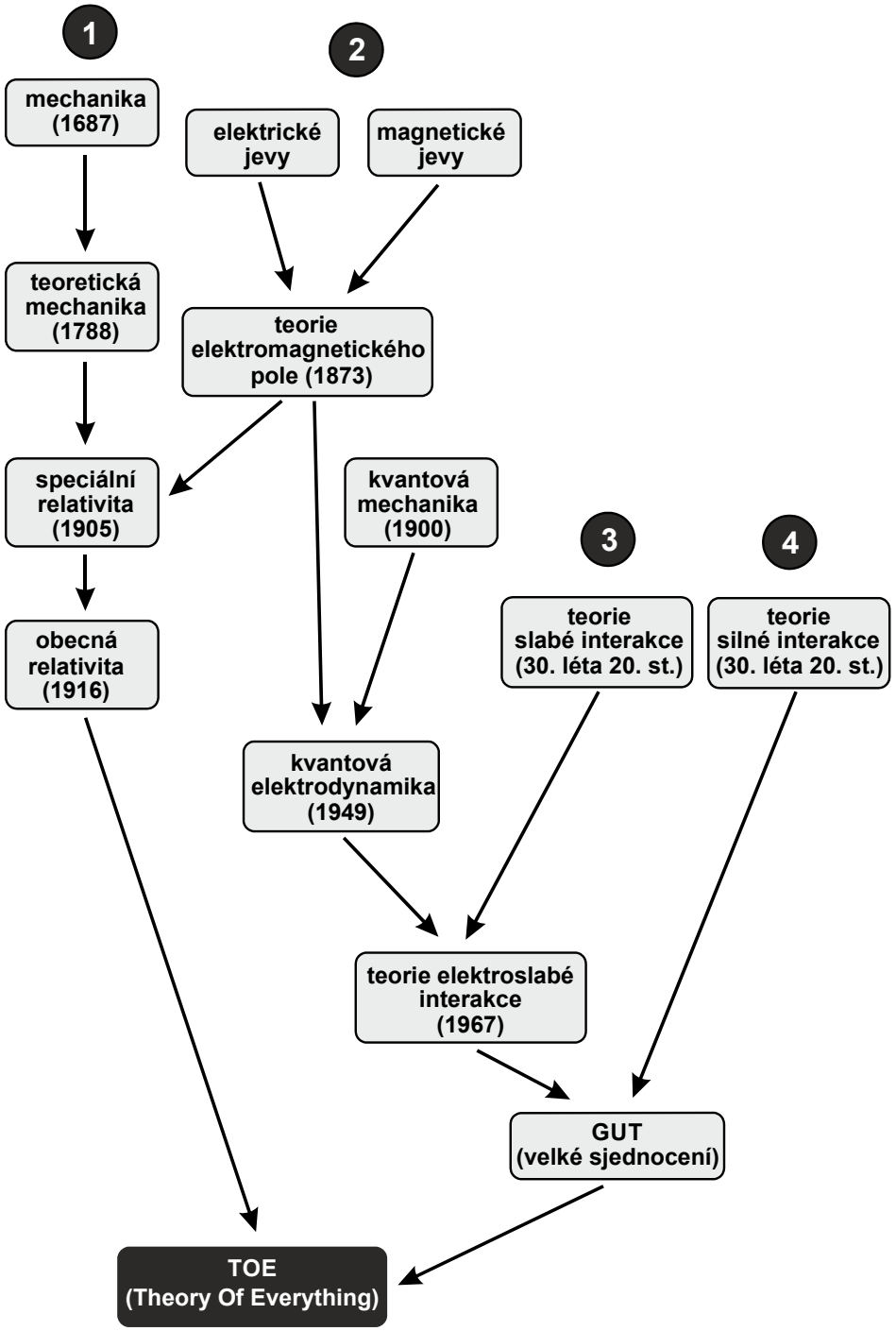
Není to tak dávno, co se fyzikové dělili na dvě velké skupiny – experimentátory a teoretiky. Příslušník každé skupiny věděl, že se bez členů druhé skupiny neobejde. Výsledkem byla plodná spolupráce plná zdánlivé řevnivosti a úsměvných historek. S nástupem výpočetní techniky se vše změnilo. Postupně vznikala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

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

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

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

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



Integrační tendence ve fyzice

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

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

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

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

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

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

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

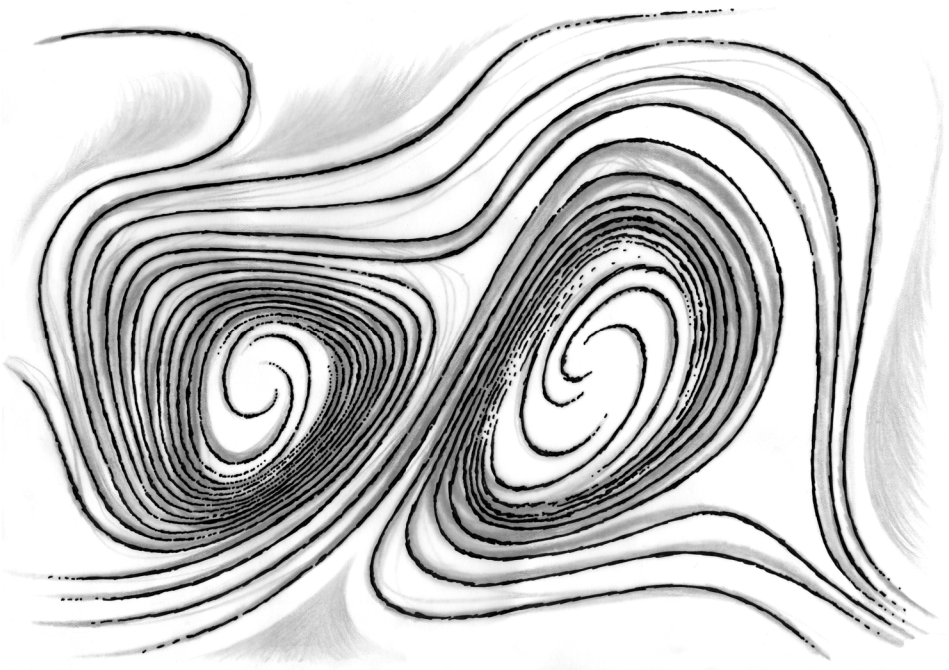
- každé těleso svou přítomností zakřivuje časoprostor kolem sebe;
- každé těleso se v tomto zakřiveném časoprostoru pohybuje po nejrovnějších možných drahách – tzv. *geodetikách*.

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

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

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

1. Teoretická mechanika



1.1 Integrální principy mechaniky

V teoretické mechanice se hojně používá Einsteinova sumační konvence, diferenciálu a Lagrangeova věta o přírůstku. Pokud s těmito matematickými základy čtenář není seznámen, měl by si nejprve pozorně pročíst kapitolu 3.1, kde jsou tyto pojmy vysvětleny. Další informace ke studiu teoretické mechaniky může čtenář čerpat v učebnicích [3]–[7].

1.1.1 Základní pojmy z mechaniky

Mechanický systém

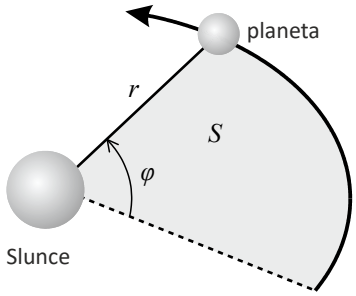
Mechanickým systémem nazýváme jakoukoli soustavu částic nebo těles, kterou se rozhodneme popisovat (elektron, atom, Zeměkoule, planetární systém, …).

Kartézské souřadnice

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

Zobecněné souřadnice

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



Obr. 1.1: Souřadnice pro planetu obíhající kolem Slunce

◖ Příklad 1.1: Pohyb planety kolem Slunce

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

◗

Zobecněné rychlosti

Zobecněnou rychlostí nazýváme časovou změnu zobecněné souřadnice.

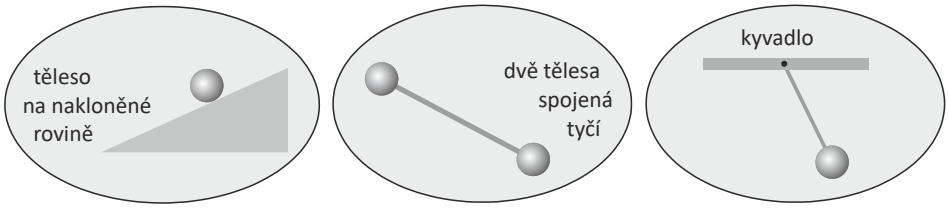
◖ Příklad 1.2

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

◗

Vazby

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



Obr. 1.2: Vazby v systému

Stupeň volnosti

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

◖ Příklad 1.3

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

◗

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

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

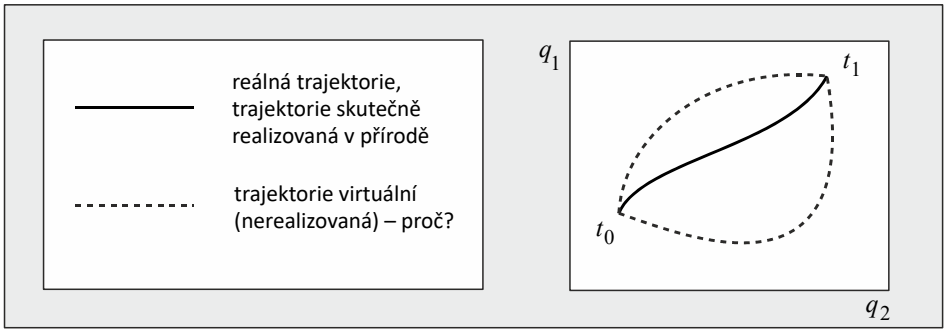
Konfigurační prostor

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

Stav systému

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

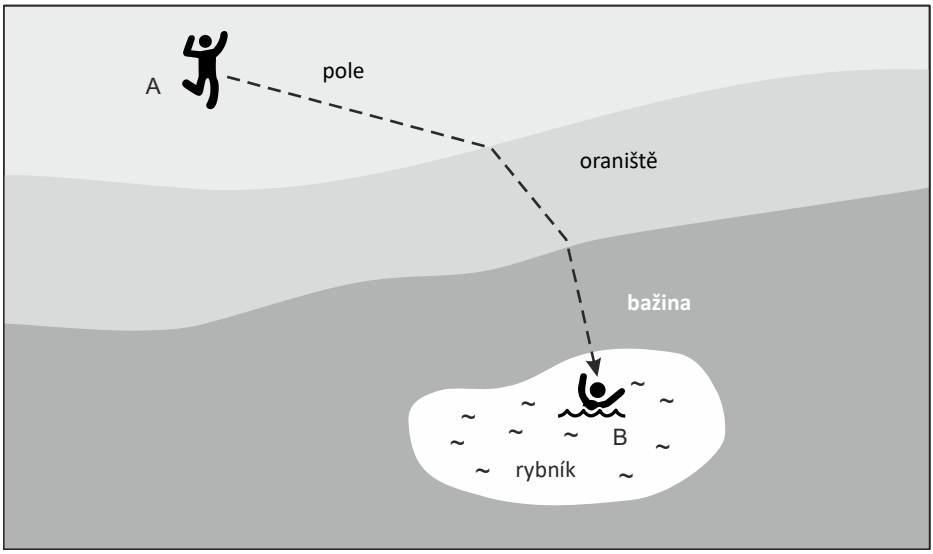
Reálná a virtuální trajektorie:



Obr. 1.3: Reálná a virtuální trajektorie

1.1.2 Integrální principy

◖ **Příklad 1.4.** 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):



Obr. 1.4: Jaká je optimální cesta k tonoucímu z hlediska času?

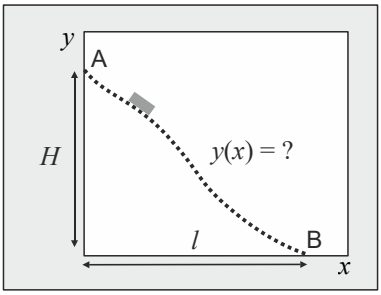
Celkový čas, po který se bude pohybovat zachránce, určíme takto:

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

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

◗

◖ **Příklad 1.5: Brachystochrona.** Řešme následující úlohu. Těleso má klouzat po nakloněné rovině obecného tvaru mezi dvěma body A a B, které jsou v různé výšce. Úkolem je nalézt rovnici tvaru nakloněné roviny tak, aby se těleso do bodu B dostalo za nejkratší čas. Název křivky pochází z řečtiny (βραχιστος = nejkratší, χρονος = čas).



Obr. 1.5: Brachystochrona

Výpočet je obdobný předchozímu:

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

Rychlost určíme ze zákona zachování energie

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

Výsledná doba pohybu je

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

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

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

1.1.3 Hamiltonův princip nejmenší akce

Oba dva úvodní příklady vedly na optimalizaci integrálu typu

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

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

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

Hamiltonův princip

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

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

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

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

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

1.1.4 Lagrangeovy rovnice

Zaveďme *virtuální posunutí*

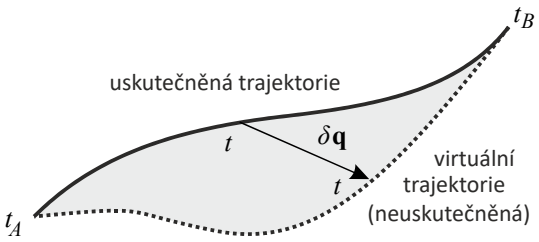
$$\begin{aligned} \delta q_k &= q_{k,\mathrm{virt}}(t) - q_{k,\mathrm{real}}(t)\,, \quad \text{resp.} \\ \delta\mathbf{q} &= \mathbf{q}_{\mathrm{virt}}(t) - \mathbf{q}_{\mathrm{real}}(t) \end{aligned} \tag{1.4}$$

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

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

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

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



Obr. 1.6: K definici virtuálního posunutí

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

Odvoďme nyní nutné podmínky extremálnosti integrálu akce:

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

tj. zadat stav v nějakém počátečním čase t_0.

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

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

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

Tedy splňuje-li Hamiltonův variační princip původní Lagrangeova funkce, splňuje ho i nová (posunutá o df/dt). Toho lze využít při úpravě hledané Lagrangeovy funkce (viz příklad 1.27 na konci kapitoly 1.4.6).

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

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

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

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

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

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

nezávisí na volbě souřadnic). Pro jednoduché mechanické problémy známe dvě důležité skalární funkce: kinetickou a potenciální energii. V nejjednodušším případě by Lagrangeova funkce mohla být jejich lineární kombinací $L = \alpha T + \beta V$. Skutečně lze ukázat, že pro volbu $\alpha = 1$, $\beta = -1$ dostáváme správné pohybové rovnice, v kartézském souřadnicovém systému jde o rovnice Newtonovy (viz příklad 1.6 v následující kapitole). Proto

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

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

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

1.1.5 Jednoduché příklady

◖ **Příklad 1.6: Hmotný bod v potenciálním poli V.** Hmotný bod má tři stupně volnosti, za zobecněné souřadnice zvolíme

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

potom

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

Příslušné Lagrangeovy rovnice mají tvar

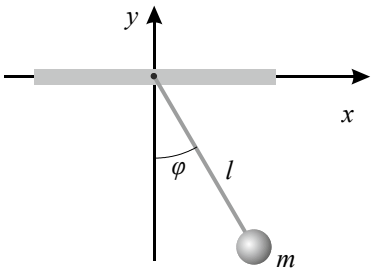
$$\begin{aligned} &\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} (m\dot{x}) + \frac{\partial V}{\partial x} \;=\; 0 \qquad \Rightarrow \qquad m\,\ddot{x} \;=\; -\frac{\partial V}{\partial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

Všechny tři pohybové rovnice můžeme přepsat do běžného tvaru

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

◗

◖ **Příklad 1.7: Rovinné kyvadlo**. Rovinné kyvadlo má jediný stupeň volnosti. Za zobecněnou souřadnici zvolíme úhel φ:



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

Odpovídající Lagrangeova rovnice je

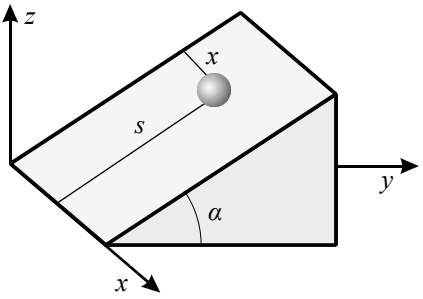
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial\dot{\varphi}} - \frac{\partial L}{\partial\varphi} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \ddot{\varphi} + \frac{g}{l}\sin\varphi = 0\,.$$

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

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

◗

◖ **Příklad 1.8: Pohyb po nakloněné rovině**. Pohyb po nakloněné rovině má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice budeme volit vzdálenosti od hran nakloněné roviny x, s. Standardním postupem získáme



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

a pohybové rovnice jsou

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

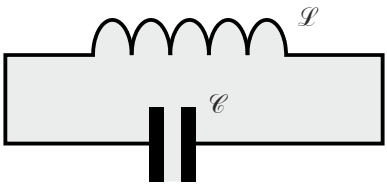
Po dosazení za L získáme finální tvar rovnic pro pohyb na nakloněné rovině:

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

◗

1.1.6 Další příklady

◖ **Příklad 1.9: LC obvod**. Za zobecněnou souřadnici budeme volit náboj $Q(t)$ odteklý z kondenzátorové baterie. Zobecněnou rychlostí je elektrický proud $I = \mathrm{d}Q/\mathrm{d}t$.



Obr. 1.9: LC obvod

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

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

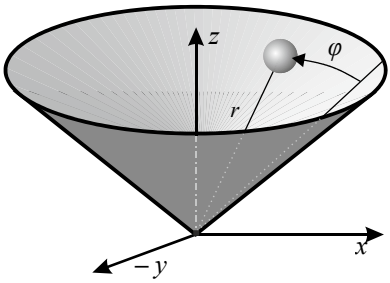
poskytne správnou rovnici LC obvodu:

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

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

◗

◖ **Příklad 1.10: Hmotný bod v tíži na kuželové ploše**. Pohyb má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice budeme volit vzdálenost částice od vrcholu kužele r a polární úhel φ. Využijeme tedy dvě ze sférických souřadnic, třetí – odklon θ_0 od osy z je na kuželové ploše konstantní. Za použití (3.30) příp. (3.33) snadno odvodíme



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

Odpovídající Lagrangeovy rovnice jsou

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

Po dosazení máme:

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

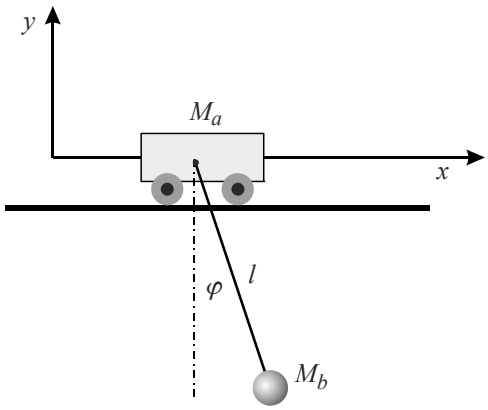
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(mr^2\dot{\varphi}\sin^2\theta_0\right) = 0\,.$$

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

◗

◖ **Příklad 1.11: Kyvadlo na vozíčku.** Vodorovně pohyblivý závěs můžeme realizovat např. vozíčkem na kolejničce. Systém má dva stupně volnosti. Za zobecněné souřadnice zvolíme vodorovnou polohu $x(t)$ vozíčku a úhel $\varphi(t)$ kyvadla. Kartézské souřadnice vozíčku budeme značit indexem a a kartézské souřadnice kyvadla indexem b. Další postup je již standardní.

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



Obr. 1.11: Kyvadlo na vozíčku (příklad pochází od Lva Davidoviče Landaua)

◗

1.2 Zákony zachování v přírodě

1.2.1 Teorém Emmy Noetherové

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

1.2.2 Zákon zachování hybnosti

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

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

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

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

Nalezli jsme tedy příslušnou zachovávající se veličinu.

Definice zobecněné hybnosti

Zobecněnou hybností odpovídající zobecněné souřadnici q_k nazveme

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

Tato veličina se zachovává, je-li zobecněná souřadnice q_k cyklická (nevyskytuje se v L), tj. fyzikální situace je symetrická vzhledem k prostorovému posunutí v zobecněné souřadnici q_k. Určeme nyní zobecněné hybnosti k příkladům 1.6 až 1.11 z kapitol 1.1.5 a 1.1.6.

◖ Příklad 1.12: Hmotný bod v potenciálovém poli V (dokončení)

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

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

Příklad 1.13: Rovinné kyvadlo (dokončení)

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

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

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

Příklad 1.14: Pohyb po nakloněné rovině (dokončení)

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

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

Příklad 1.15: LC obvod (dokončení)

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

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

Příklad 1.16: Hmotný bod v tíži na kuželové ploše (dokončení)

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

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

Příklad 1.17: Kyvadlo na vozíčku (dokončení)

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

Zachovává se hybnost soustavy p_x , nezachovává se moment hybnosti p_φ

◗

1.2.3 Zákon zachování energie

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

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

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

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

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

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

Členy napravo upravíme za pomoci vztahu pro derivaci součinu dvou funkcí

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

a po převedení na jednu stranu rovnosti zjistíme, že

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

Opět jsme tedy našli zachovávající se veličinu.

Definice zobecněné energie

Zobecněnou energií nazveme

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

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

V příkladech 1.6 až 1.11 se energie zachovává, Lagrangeovy funkce nezávisí explicitně na čase, všechny situace jsou symetrické vůči časovému posunutí. Postupně máme:

$$E_{1.6} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{y}}\dot{y} + \frac{\partial L}{\partial \dot{z}}\dot{z} - L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + V(x,y,z)\,,$$

$$E_{1.7} = \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}ml^2\dot{\varphi}^2 - mgl\cos\varphi\,,$$

$$E_{1.8} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{s}}\dot{s} - L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{s}^2) + mgs\sin\alpha\,,$$

$$E_{1.9} = \frac{\partial L}{\partial \dot{Q}}\dot{Q} - L = \frac{1}{2}\mathscr{L}\dot{Q}^2 + \frac{Q^2}{2\mathscr{C}}\,,$$

$$E_{1.10} = \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\dot{r} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\sin^2\theta_0\dot{\varphi}^2) + mgr\cos\theta_0\,,$$

$$E_{1.11} = \frac{\partial L}{\partial \dot{x}}\dot{x} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}M_a\dot{x}^2 + \frac{1}{2}M_b(\dot{x}^2 + l^2\dot{\varphi}^2 + 2l\dot{x}\dot{\varphi}\cos\varphi) - M_b gl\cos\varphi\,.$$

Povšimněte si, že ve všech těchto jednoduchých příkladech je

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

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

◖ **Příklad 1.18: Nezachování energie**. Uveďme na závěr příklad, kdy se energie nezachovává. Uvažujme kyvadlo, jehož závěs je pomalu namotáván pomocným motorkem v místě úchytu (jeřáb se zavěšeným břemenem). Délka závěsu se s časem zkracuje

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

c je rychlost navíjení. Lagrangeova funkce kyvadla

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

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

◗

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

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

◖ **Příklad 1.19: Brachystochrona (dokončení)**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Výraz umocníme na druhou

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

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

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

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

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

Separací máme

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

po integraci

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

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

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

1.3 Hamiltonovy kanonické rovnice

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

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

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

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

1.3.1 Hamiltonovy rovnice

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

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

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

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

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

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

Členy s diferenciály zobecněných rychlostí se odečtou a zbývá

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

Funkci, jejíž diferenciál jsme právě nalezli, označíme

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

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

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

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

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

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

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

Při řešení problému Hamiltonovými rovnicemi

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

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

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

◖ Příklad 1.20: Rovinný pohyb planety (2D úloha)

Hmotnost planety označíme m, hmotnost Slunce M. Předpokládáme $M \gg m$; tj. Slunce se nepohybuje. Pohyb má dva stupně volnosti, za zobecněné souřadnice zvolíme polární souřadnice $q_1 = r(t)$; $q_2 = \varphi(t)$, tj. vzdálenost planety od Slunce a úhel spojnice planety se Sluncem měřený od zvolené polopřímky. Z (3.33) a z gravitačního zákona víme, že

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

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

Kdybychom řešili úlohu z Lagrangeových rovnic, měli bychom

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Hamiltonovy kanonické rovnice jsou

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

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

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

◗

Definice fázového prostoru

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

1.3.2 Harmonický oscilátor

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

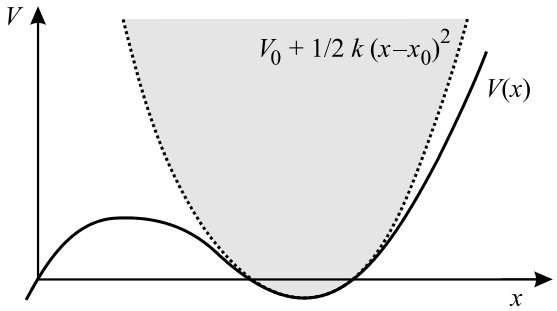
Představme si částici v poli potenciální energie s minimem v bodě x_0 a hodnotou minima $V_0 = V(x_0)$. Proveďme Taylorův rozvoj $V(x)$ v okolí minima do druhého řádu:

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

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

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

Potenciální energii jsme tedy nahradili parabolickou závislostí – viz obrázek 1.12.



Obr. 1.12: Harmonický oscilátor

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

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

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

Obecné řešení této rovnice je

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

Pro následující počáteční podmínky plyne řešení:

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

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

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

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

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

Po vyloučení rychlosti z energie E dostáváme Hamiltonovu funkci

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

a Hamiltonovy rovnice

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

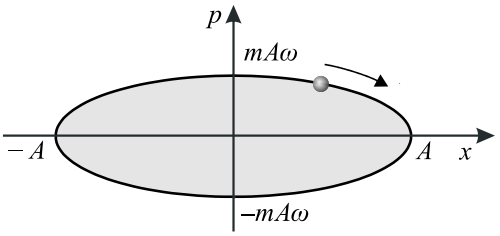
Řešení této soustavy se stejnými počátečními podmínkami vede ke vztahům

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

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

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

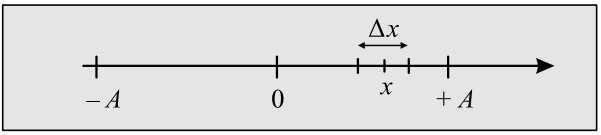
Fázovou trajektorií harmonického oscilátoru je elipsa. Pohyb si můžeme představit jako souřadnice bodu obíhajícího po elipse (jeho projekci do obou os).



Obr. 1.13: Fázový portrét harmonického oscilátoru

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

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



Obr. 1.14: K odvození pravděpodobnosti výskytu oscilátoru

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

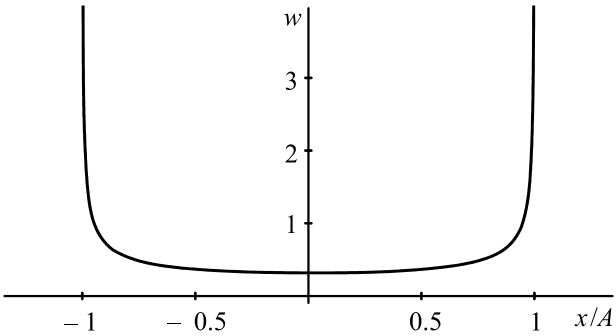
$$w(x) = \frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}x} = \frac{\omega}{\pi v(x)}\,. \tag{1.34}$$

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

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

Konečný vztah má tvar

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



Obr. 1.15: Pravděpodobnost výskytu harmonického oscilátoru

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

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

1.3.3 Poissonova formulace Hamiltonových rovnic

Před čtením této kapitoly by měl být čtenář seznámen s definicí a vlastnostmi Lieovy algebry (viz kapitola 3.3.5). Uvažujme obecnou dynamickou proměnnou $A(\mathbf{q}, \mathbf{p})$, která je funkcí zobecněných souřadnic a zobecněných hybností (souřadnice, hybnost, potenciální energie, součin potenciální a kinetické energie…). Její časový vývoj je dán vztahem

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

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

Definice Poisssonových závorek

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

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

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

► $$\dot{A} = \{A, H\}. \tag{1.40}$$

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

Vlastnosti Poissonových závorek:

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

Důkaz těchto vztahů je triviální a plyne přímo z definice Poissonovy závorky (1.39). *Poissonovy závorky tvoří Lieovu algebru na prostoru funkcí* (viz kap. 3.3.5). Velmi důležité je znát Poissonovy závorky mezi zobecněnými souřadnicemi a hybnostmi:

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

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

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

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

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

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

◖ **Příklad 1.21: Harmonický oscilátor**

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

◗

1.3.4 Numerické řešení Hamiltonových rovnic

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

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

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

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

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

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

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

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

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



1.4 Vybrané úlohy z teoretické mechaniky

1.4.1 Pohyb nabité částice v elektromagnetickém poli

Pohyb částic v elektromagnetickém poli je podrobně probrán v navazující učebnici [2]. Nyní jen pro úplnost uvedeme základní vztahy v nerelativistickém případě v předem daném elektromagnetickém poli. Elektrická a magnetická pole můžeme popsat buď elektrickou intenzitou **E** a magnetickou indukcí **B**, nebo za pomoci čtyřpotenciálu (ϕ, **A**). Převodní vztahy jsou

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

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

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

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

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

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

První člen je kinetická energie volné částice, zbylé dva členy reprezentují interakci částice s elektrickým a magnetickým polem. Odvození naleznete buď v kapitole 1.6.3 vztah (1.260), nebo v učebnici [2]. Druhý a třetí člen jsou ve skutečnosti skalárním součinem čtyřpotenciálu pole a čtyřvektoru toku náboje způsobeného pohybem částice. Tím je zaručeno, že jde o skalární veličinu. Zde budeme předpokládat, že jsme správnou Lagrangeovu funkci „uhodli“. Pak ale musíme dokázat, že z ní plynoucí pohybové rovnice jsou ve shodě s přírodou. Ukážeme, že příslušné Lagrangeovy rovnice jsou totožné s dobře známou Lorentzovou pohybovou rovnicí. Ve složkách máme

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

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

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

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

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

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

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

což je známá Lorentzova pohybová rovnice. Úpravu členu $\mathbf{v}\times\mathrm{rot}\,\mathbf{A}$ lze udělat standardně za pomoci Levi-Civitova tenzoru (viz kapitola 3.3.4 Vektorové identity). Nyní odvodíme běžným postupem hybnost, energii a Hamiltonovu funkci částice:

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

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

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

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

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

◖ Příklad 1.22: Konstantní homogenní elektrické pole

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

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

Přímou integrací postupně dostaneme

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

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

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

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

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

Vyloučíme-li z řešení čas, získáme rovnici paraboly:

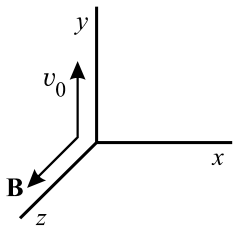
$$x = \frac{QE}{2m v_0^2} y^2 . \tag{1.55}$$

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

◗

◖ Příklad 1.23: Konstantní homogenní magnetické pole

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



Obr. 1.16: Orientace jednotlivých vektorů

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

Obecné řešení je lineární kombinací obou nalezených modů:

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

Integrační konstanty nalezneme snadno z počátečních podmínek

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

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

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

Výsledné řešení má proto tvar

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

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

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

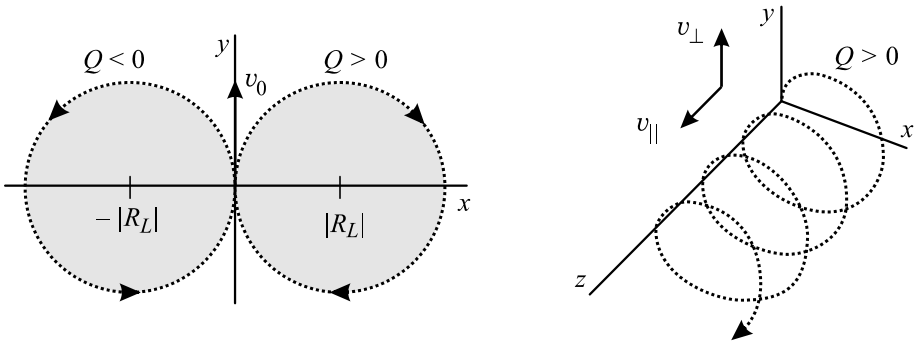
Rovnici trajektorie nalezneme po vyloučení času z (1.64):

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

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

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

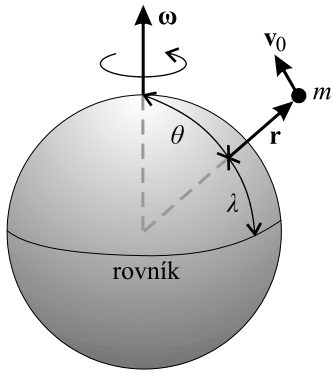
Samotné elektrické pole naopak nepůsobí na pohyb částice napříč pole (v nerelativistickém případě) nebo jen velmi málo (v relativistickém případě). Ve směru pole dochází k urychlování.



Obr. 1.17. Pohyb nabité částice v homogenním magnetickém poli

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

1.4.2 Pohyb v rotující soustavě



Obr. 1.18: Rotující soustava

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

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

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

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

Jejich odvození je snadné za pomoci definice vektorového součinu přes Levi-Civitův tenzor (viz kapitoly 3.3.4 a 3.3.4). První identita ukazuje, že v součinu $(\mathbf{a}\times\mathbf{b})\cdot\mathbf{c}$ lze

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

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

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

Rychlosti tělesa o hmotnosti m (viz obrázek 1.18) budou v obou soustavách různé, budou se lišit o rychlost v_0 způsobenou rotací Země. Ta je úměrná velikosti úhlové rychlosti, vzdálenosti od středu Země a sinu polárního úhlu θ (na pólu je rychlost nulová, na rovníku maximální), tj.

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

K nalezení hybnosti, energie a k sestavení pohybové rovnice budeme potřebovat parciální derivace $\partial L / \partial \mathbf{v}$, $\partial L / \partial \mathbf{r}$. Za tím účelem roznásobíme první člen v lagranžiánu:

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

$$L = \frac{1}{2} m \mathbf{v}^2 + m (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) \cdot \mathbf{v} + \frac{1}{2} m (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2 - V(\mathbf{r}) \tag{1.76}$$

Z této podoby Lagrangeovy funkce určíme derivaci podle rychlostních proměnných:

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

Pro zjištění derivace podle prostorových proměnných musíme Lagrangeovu funkci (1.76) poněkud upravit. Ve druhém členu na pravé straně posuneme jednotlivé členy podle vztahu (1.66) tak, aby **r**, podle kterého chceme derivovat, bylo vně vektorového součinu. Ve třetím členu upravíme skalární součin $(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\cdot(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})$ podle Crammerova vztahu (1.68):

$$L = \frac{1}{2}m\,\mathbf{v}^2 + m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega})\cdot\mathbf{r} + \frac{1}{2}m\,\omega^2\mathbf{r}^2 - \frac{1}{2}m\,(\boldsymbol{\omega}\cdot\mathbf{r})^2 - V(\mathbf{r}) \tag{1.78}$$

Nyní již snadno nalezneme i derivaci Lagrangeovy funkce podle proměnné **r**:

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

Druhý a třetí člen na pravé straně upravíme podle identity (1.67) do finálního tvaru:

$$\frac{\partial L}{\partial \mathbf{r}} = m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega}) + m\,\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega}) - \frac{\partial V}{\partial \mathbf{r}} \tag{1.80}$$

Vztahy (1.77) a (1.80) jsou hledané derivace Lagrangeovy funkce podle rychlosti a polohového vektoru. Nyní již snadno určíme hybnost a energii pohybujícího se objektu.

► $$\mathbf{p} \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}} = m\mathbf{v} + m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})\,, \tag{1.81}$$

► $$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \mathbf{v}}\cdot\mathbf{v} - L = \frac{1}{2}m\mathbf{v}^2 - \frac{1}{2}m(\boldsymbol{\omega}\times\mathbf{r})^2 + V(\mathbf{r})\,. \tag{1.82}$$

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

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

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

► $$\frac{\mathrm{d}m\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = \mathbf{F} + 2m(\mathbf{v}\times\boldsymbol{\omega}) + m\,\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega})\,. \tag{1.83}$$

Rovnice (1.83) je hledaná pohybová rovnice tělesa pohybujícího se v rotující neinerciální soustavě. Nalevo je časová změna mechanické hybnosti, první člen napravo je síla působící na částici v potenciálním poli, druhý člen je Coriolisova síla a třetí odstředivá síla. Coriolisova síla je částečně zodpovědná za směr roztáčení víru ve výlevce (na každé polokouli je jiný), za stáčení roviny kyvadla i za další jevy. Na Slunci je Coriolisova síla velmi důležitá při vzniku helikálních fluktuací rychlostního pole, které ve finále přispívají k překlápění slunečního magnetického dipólu. Coriolisova síla nepůsobí na tělesa pohybující se rovnoběžně se zemskou rotační osou. Odstředivá síla je nulová na pólech a maximální na rovníku, kde dosáhne hodnoty $mr\omega^2$.

◖ Příklad 1.24: Padající kámen

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

Řešení: Budeme řešit pohybovou rovnici s tíhovou a Coriolisovou silou

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

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

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

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

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

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

$$\mathbf{r}(t) \doteq \mathbf{r}^{(2)}(t) = \mathbf{r}_0 + \mathbf{g}\frac{t^2}{2} + (\mathbf{g}\times\boldsymbol{\omega})\frac{t^3}{3}. \tag{1.84}$$

Zvolme nyní konkrétní souřadnicový systém na povrchu Země (řešení posuneme ze středu Země k povrchu, poloha vystupuje jen v prvním členu na pravé straně). Osa z bude mířit svisle, osu x orientujeme na východ a osu y na sever. Jde o pravotočivý souřadnicový systém, což ve výsledku zajišťuje správná znaménka vektorových součinů. Na obrázku 1.18 je θ polární úhel a $\lambda = 90° - \theta$ zeměpisná šířka. Jednotlivé vektory v řešení (1.84) budou:

$$\mathbf{r}^{(0)} = (0, 0, H);$$
$$\mathbf{g} = (0, 0, -g); \tag{1.85}$$
$$\boldsymbol{\omega} = (0, \omega\cos\lambda, \omega\sin\lambda).$$

Volný pád kamene je tedy po rozepsání vektorového součinu popsán vztahy

$$x = \frac{g\omega t^3}{3}\cos\lambda\,;$$
$$y = 0\,; \tag{1.86}$$
$$z = H - \frac{gt^2}{2}\,.$$

Kámen se bude při pádu odchylovat vlivem Coriolisovy síly ve směru osy x, tedy na východ. Nyní zbývá určit velikost odklonu. Položíme-li v třetí rovnici (1.86) $z = 0$, zjistíme dobu, za kterou kámen dopadl. Tu dosadíme do vztahu pro x a máme výslednou vzdálenost

$$\Delta x = x_{\text{fin}} - x_0 = \frac{g\omega}{3}\left(\frac{2H}{g}\right)^{3/2}\cos\lambda \approx 7\ \text{mm}. \tag{1.87}$$

◗

1.4.3 Problém dvou těles, Keplerova úloha

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

$$m_1\ddot{\mathbf{r}}_1 = \mathbf{F}_{12}\,;$$
$$m_2\ddot{\mathbf{r}}_2 = \mathbf{F}_{21}\,. \tag{1.88}$$

Ze zákona akce a reakce platí:

$$\mathbf{F}_{12} = -\mathbf{F}_{21} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{F}_{12} + \mathbf{F}_{21} = 0\,. \tag{1.89}$$

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

$$\mathbf{r}_{\text{T}} \equiv \frac{m_1\mathbf{r}_1 + m_2\mathbf{r}_2}{m_1 + m_2}\,;$$
$$\mathbf{r} \equiv \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1\,. \tag{1.90}$$

Z rovnic (1.88) snadno nalezneme pohybové rovnice v nových proměnných:

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

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

V nových proměnných mají tedy pohybové rovnice velmi jednoduchý tvar

$$\ddot{\mathbf{r}}_{\mathrm{T}} = 0\,; \qquad \mu\,\ddot{\mathbf{r}} = \mathbf{F}_{21}\,, \tag{1.91}$$

kde μ je tzv. redukovaná hmotnost daná vztahem

$$\mu \equiv \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}\,. \tag{1.92}$$

Z první rovnice (1.91) je vidět, že těžiště soustavy se může pohybovat jen konstantní rychlostí. Z druhé rovnice je zřejmé, že pohyb dvou těles lze řešit jako pohyb jediného tělesa s redukovanou hmotností μ, které se pohybuje vzhledem k prvnímu z obou těles. Pokud je hmotnost prvního tělesa podstatně větší než hmotnost druhého tělesa, je redukovaná hmotnost přibližně rovna hmotnosti menšího z obou těles. Velké těleso se v tomto přiblížení vůbec nepohybuje. Jde například o pohyb planet kolem Slunce. Obíhající planety ovlivní pohyb Slunce minimálně.

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

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{b}}{\mathrm{d}t} = 0 \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathbf{r}\times m\mathbf{v}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{v}\times m\mathbf{v} + \mathbf{r}\times m\mathbf{a} = 0 \quad \Rightarrow$$
$$\mathbf{r}\times m\mathbf{a} = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a} \parallel \mathbf{r}\,. \tag{1.93}$$

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

Keplerova úloha

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

$$L(r,\dot{r},\dot{\varphi}) = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) + G\frac{mM}{r}\,. \tag{1.94}$$

V soustavě se budou zachovávat moment hybnosti a energie:

$$b \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}} = mr^2\dot{\varphi}\,, \tag{1.95}$$

$$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{r}}\dot{r} + \frac{\partial L}{\partial \dot{\varphi}}\dot{\varphi} - L = \frac{1}{2}m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2) - G\frac{mM}{r} = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{b^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r}\,. \tag{1.96}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}\varphi}{\mathrm{d}t} = \frac{b}{mr^2}, \tag{1.97}$$

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t} = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{b^2}{2mr^2} + G\frac{mM}{r}\right)}. \tag{1.98}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}\varphi} = \frac{\sqrt{\frac{2}{m}\left(E - \frac{b^2}{2mr^2} + G\frac{mM}{r}\right)}}{b/mr^2}. \tag{1.99}$$

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

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

Čárka označuje derivaci podle proměnné φ. Zvolíme substituci

$$r = \frac{1}{\xi}; \qquad r' = -\frac{1}{\xi^2}\xi', \tag{1.100}$$

po které dostaneme

$$\frac{b^2}{2Gm^2M}\left(\xi'\right)^2 + \frac{b^2}{2Gm^2M}\xi^2 - \xi = \frac{E}{GmM}. \tag{1.101}$$

Pokud rovnici ještě jednou derivujeme, získáme

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

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

$$\xi'' + \xi = 1/p; \qquad p \equiv \frac{b^2}{Gm^2M}. \tag{1.102}$$

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

$$\xi = C\cos(\varphi - \varphi_0) + \frac{1}{p}. \tag{1.103}$$

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

stantu C určíme tak, aby nalezené řešení splňovalo původní rovnici (1.101), tj. rovnici před derivováním (což není ekvivalentní úprava):

$$C = \sqrt{\frac{2E}{GmMp} + \frac{1}{p^2}} \quad . \tag{1.104}$$

Konstantu C dosadíme do řešení (1.103) a vrátíme se k původní proměnné r:

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

Výsledné řešení má tedy tvar

$$\blacktriangleright \qquad r = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos\varphi} \, ; \qquad \varepsilon \equiv \sqrt{\frac{2Ep}{GmM} + 1} \, ; \qquad p \equiv \frac{b^2}{Gm^2 M} \, . \tag{1.105}$$

Jde o rovnici kuželosečky (viz kap. 3.10.1) s numerickou excentricitou ε. V gravitačním poli centrálního tělesa se tedy budou jiná tělesa pohybovat po kuželosečkách. Pro $E < 0$ je $\varepsilon < 1$ a pohyb se koná po elipse. Záporná energie znamená vazbu obou těles. Tento případ platí pro planety Sluneční soustavy. Pro $E = 0$ je $\varepsilon = 1$ a pohyb je parabolický. Pro $E > 0$ je $\varepsilon > 1$ a těleso se pohybuje po hyperbole. Minimální a maximální vzdálenost oběhu bychom ve všech případech dostali hledáním extrémů závislosti (1.105).

Efektivní potenciál

Energie pohybujícího se tělesa je z Lagrangeovy funkce dána formulí (1.96)

$$E \equiv \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{1}{2} mr^2 \dot{\varphi}^2 - G\frac{mM}{r} \, . \tag{1.106}$$

Energie se skládá z radiální kinetické energie, úhlové složky kinetické energie a potenciální energie. Výrazy se zobecněnými rychlostmi tvoří kinetickou energii a výraz obsahující jen polohu potenciální energii. Pokud ale vyjádříme druhý člen za pomoci zákona zachování momentu hybnosti (1.95), dostaneme

$$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{b^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r} \, . \tag{1.107}$$

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

$$\blacktriangleright \qquad \begin{aligned} E &= \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + V_{\text{eff}}(r) \, ; \\ V_{\text{eff}}(r) &\equiv \frac{b^2}{2mr^2} - G\frac{mM}{r} \, . \end{aligned} \tag{1.108}$$

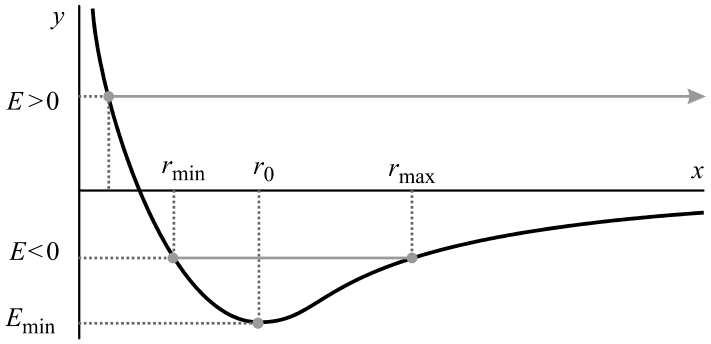
Z první rovnice snadno určíme radiální rychlost tělesa

$$\dot{r} = \sqrt{\frac{2}{m}\left(E - V_{\text{eff}}(r)\right)}\,. \tag{1.109}$$

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

$$E \geq V_{\text{eff}}(r)\ . \tag{1.110}$$

Průběh efektivního potenciálu je znázorněn na obrázku 1.19, kde je patrné, že pro $E > 0$ je pohyb neomezený, $r \in < r_{\min}, \infty)$, pohyb se koná po hyperbole. Naopak pro $E < 0$ je pohyb omezený, $r \in < r_{\min}, r_{\max} >$ a pohyb se koná po elipse. Limitními případy jsou $E = 0$ (pohyb po parabole) a $E = E_{\min}$ (pohyb po kružnici $r = r_0$).



Obr. 1.19: Efektivní potenciál

◖ Příklad 1.25: Země jako oscilátor

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

Řešení: Standardním postupem (viz kapitola 1.3.2) určíme minimum efektivního potenciálu (1.108) a tuhost oscilací. Z tuhosti pak již snadno nalezneme periodu pohybu:

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

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

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

◗

Keplerovy zákony

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

Třetí Keplerův zákon lze vyjádřit jednoduchým vztahem:

► $$\frac{T^2}{a^3} = \frac{4\pi^2}{G(m+M)} . \tag{1.111}$$

Malým m značíme hmotnost planety, velkým M hmotnost Slunce.

Ad 1). Pohyb po elipse plyne okamžitě ze vztahu (1.105).

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

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

Pro plošnou rychlost potom máme

$$\frac{\mathrm{d}\mathbf{S}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{2}\mathbf{r}\times\mathbf{v} = \frac{1}{2m}\mathbf{r}\times m\mathbf{v} = \frac{\mathbf{b}}{2m} . \tag{1.112}$$

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

Ad 3). V relativních souřadnicích podle vztahu (1.91) pro problém dvou těles platí

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

V relativních souřadnicích u problému dvou těles vystupuje namísto hmotnosti Slunce součet hmotností obou těles, jinak je pohybová rovnice identická s rovnicí pro centrální gravitační pole. Integrujme nyní velikost vztahu (1.112) pro plošnou rychlost

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

$$2\pi a_0 b_0 m = bT . \tag{1.113}$$

V odvození jsme použili vztah (3.524) pro plochu elipsy $S = \pi a_0 b_0$, který je uveden kapitole 3.10.1 (přidali jsme indexy 0, aby nedošlo k záměně s momentem hybnosti). Veškeré veličiny se pokusíme převést na charakteristiky eliptické dráhy. Za moment hybnosti dosadíme ze vztahu (1.105), na rozdíl od centrálního pole zde bude ale hmotnost Slunce vystupovat v součtu s hmotností planety, tj.

$$p = \frac{b^2}{Gm^2(m+M)}. \tag{1.114}$$

Po dosazení za b ze vztahu (1.114) do vztahu (1.113) dostaneme

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

Veškeré parametry elipsy nyní převedeme na velkou poloosu a excentricitu. Využijeme vztahy (3.153), tj. $b_0^2 = a_0^2(1-\varepsilon^2)$; $p = a_0(1-\varepsilon^2)$. Výsledkem je hledaný zákon

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

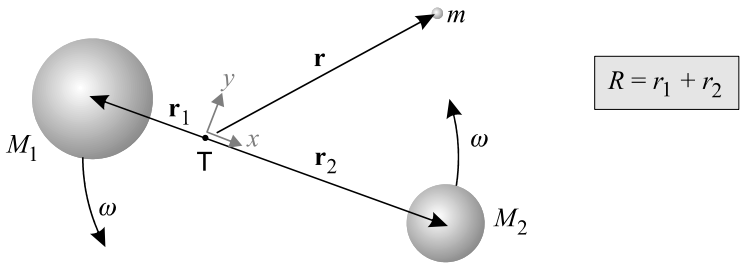
1.4.4 Lagrangeovy body

Problém tří těles, které na sebe vzájemně gravitačně působí, není v plné šíři analyticky řešitelný. V případě tzv. *restriktivního kruhového problému tří těles* (viz předpoklady dále) lze v okolí dvou vzájemně obíhajících těles nalézt pět rovnovážných bodů. Pokud do nich vložíme malé testovací tělísko, budou v rovnováze gravitační síly od obou těles s odstředivou silou pohybu v daném místě. Tyto body poprvé nalezl francouzsko-italský matematik Joseph Louis Lagrange, proto nesou jeho jméno [9]–[10].

Předpoklady

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

Formulace úlohy



Obr. 1.20: Ke Keplerově úloze, těžiště je označeno T, vzájemná vzdálenost velkých těles *R*

Předpokládáme, že dvě hmotná tělesa o hmotnostech M_1, M_2 obíhají kolem společného těžiště T takovým způsobem, že jejich vzájemná vzdálenost R zůstává konstantní, tj. jedno těleso obíhá kolem druhého po kružnici (na grafu efektivního potenciálu jde o minimum). Hledáme takové polohy testovacího tělíska o malé hmotnosti m ($m \ll M_1$, M_2), ve kterých jsou veškeré síly (gravitační, odstředivá) nulové a tělísko se nepohybuje (tím je nulová i Coriolisova síla). Problém budeme formulovat v souřadnicové soustavě, která má počátek v těžišti a rotuje spolu s oběma tělesy úhlovou rychlostí danou třetím Keplerovým zákonem (1.111)

$$\omega^2 = \frac{G(M_1 + M_2)}{R^3}; \qquad R = r_1 + r_2 . \tag{1.115}$$

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

$$L = \frac{1}{2} m(\mathbf{v} + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2 + G\frac{mM_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} + G\frac{mM_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} \tag{1.116}$$

Lagrangeovu funkci lze zapsat za pomoci efektivní potenciální energie ve tvaru

$$L = T - V_{\text{eff}} ; \tag{1.117}$$

$$T \equiv \frac{1}{2} m\mathbf{v}^2 , \tag{1.118}$$

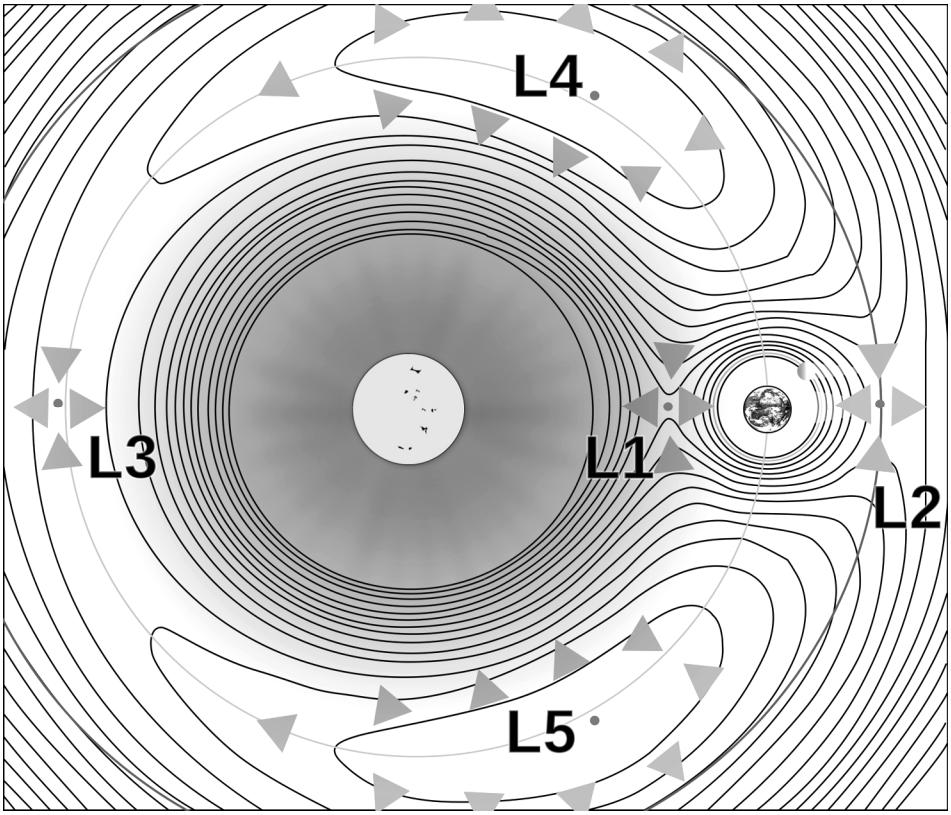
$$V_{\text{eff}} \equiv -m\mathbf{v} \cdot (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}) - \frac{1}{2} m(\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r})^2 - G\frac{mM_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|} - G\frac{mM_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|} . \tag{1.119}$$

Silové působení na naše testovací tělísko (resp. pohybová rovnice) má tvar (1.83), který jsme odvodili pro neinerciální souřadnicovou soustavu:

► $$\frac{\mathrm{d}m\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = 2m(\mathbf{v} \times \boldsymbol{\omega}) + m\,\boldsymbol{\omega} \times (\mathbf{r} \times \boldsymbol{\omega}) - G\frac{mM_1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_1|^3}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) - G\frac{mM_2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}_2|^3}(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) . \tag{1.120}$$

Napravo jsou jednotlivé silové členy (Coriolisova síla, odstředivá síla a gravitační síly působící od obou těles). Souřadnicovou soustavu volíme tak, že osa x leží na spojnici obou těles, osa y je kolmá na osu x (v rovině oběhu) a osa z je kolmá na rovinu oběhu. Při hledání rovnovážných bodů můžeme postupovat dvojím způsobem. První možností je hledání extrémů efektivního potenciálu (1.119). První člen bude nulový, protože hledáme jen rovnovážné body, ve kterých se testovací tělísko nepohybuje ($\mathbf{v} = 0$). Tento postup je vhodný pro grafické řešení – ekvipotenciály funkce V_{eff} můžeme vykreslovat vhodným softwarem (například v programu Mathematica).

Druhou možností je řešit podmínku na nulovou sílu (1.120). V rovnovážných bodech se testovací těleso nehýbe, jeho rychlost je vůči naší souřadnicové soustavě nulová, a proto je nulový i první člen (Coriolisova síla). Jde tedy pouze o rovnováhu gravitační a odstředivé síly. Coriolisova síla má ale podstatný vliv na stabilitu nalezených Lagrangeových bodů.



Obr. 1.21. Ekvipotenciály efektivního potenciálu soustavy Slunce-Země.
Šipkami je znázorněn směr „z kopce do údolí“. NASA/WMAP.

Lagrangeovy body

Lagrangeovy body hledáme z rovnice

$$m\,\boldsymbol{\omega}\times(\mathbf{r}\times\boldsymbol{\omega})-G\frac{mM_1}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_1\right|^3}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_1\right)-G\frac{mM_2}{\left|\mathbf{r}-\mathbf{r}_2\right|^3}\left(\mathbf{r}-\mathbf{r}_2\right)=0\,, \tag{1.121}$$

která vyjadřuje rovnováhu odstředivé síly a gravitačních sil. Polohové vektory $\mathbf{r}_1$ a $\mathbf{r}_2$ jsou v námi zvolené souřadnicové soustavě známé, do (1.121) dosadíme:

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

$$\boldsymbol{\omega}=(0,0,\omega);\qquad \omega^2=\frac{GM}{R^3}; \tag{1.122}$$

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

kde jsme označili proměnné

$$\mu_1 \equiv \frac{M_1}{M}; \qquad \mu_2 \equiv \frac{M_2}{M}; \qquad M \equiv M_1 + M_2;$$
$$\bar{x} \equiv \frac{x}{R}; \qquad \bar{y} \equiv \frac{y}{R} \tag{1.123}$$

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

$$\bar{x} - \frac{\mu_1(\bar{x}+\mu_2)}{\left[(\bar{x}+\mu_2)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} - \frac{\mu_2(\bar{x}-\mu_1)}{\left[(\bar{x}-\mu_1)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} = 0;$$
$$\bar{y} - \frac{\mu_1\bar{y}}{\left[(\bar{x}+\mu_2)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} - \frac{\mu_2\bar{y}}{\left[(\bar{x}-\mu_1)^2+\bar{y}^2\right]^{3/2}} = 0. \tag{1.124}$$

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

$$\bar{x} - \frac{\mu_1 \operatorname{sgn}(\bar{x}+\mu_2)}{(\bar{x}+\mu_2)^2} - \frac{\mu_2 \operatorname{sgn}(\bar{x}-\mu_1)}{(\bar{x}-\mu_1)^2} = 0. \tag{1.125}$$

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

$$\bar{x}(\bar{x}+\mu_2)^2(\bar{x}-1+\mu_2)^2 \pm (1-\mu_2)(\bar{x}-1+\mu_2)^2 \pm \mu_2(\bar{x}+\mu_2)^2 = 0. \tag{1.126}$$

Možné kombinace znamének u druhého a třetího členu jsou

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

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

► $$L_1 = R\left[1-\left(\frac{\mu_2}{3}\right)^{1/3}, 0\right]; \quad L_2 = R\left[1+\left(\frac{\mu_2}{3}\right)^{1/3}, 0\right]; \quad L_3 = -R\left[1+\frac{5\mu_2}{12}, 0\right]. \tag{1.127}$$

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

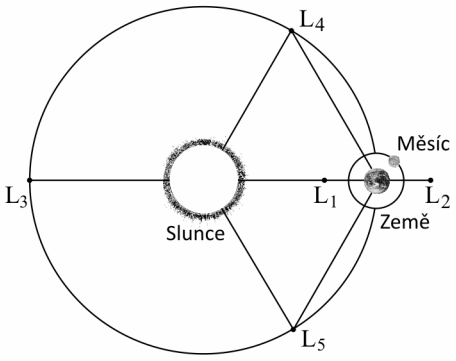
K nalezení řešení pro $\bar{y} \neq 0$ se vrátíme k rovnicím (1.124). Můžeme využít symetrie problému podél osy *x*. Řešení lze nalézt v tomto případě analyticky:

$$L_4 = R\left[\frac{\mu_1-\mu_2}{2}, +\frac{\sqrt{3}}{2}\right]; \qquad L_5 = R\left[\frac{\mu_1-\mu_2}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right]. \tag{1.128}$$

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

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

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



Obr. 1.22: Lagrangeovy body soustavy Slunce-Země

1.4.5 Disipace energie

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

$$\frac{\mathrm{d}\, m\mathbf{v}}{\mathrm{d}t} = m\mathbf{g} - \alpha\mathbf{v}\,. \tag{1.129}$$

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

$$\mathscr{L}\frac{\mathrm{d}I}{\mathrm{d}t} + \frac{Q}{\mathscr{C}} + \mathscr{R}I = 0\,. \tag{1.130}$$

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

$$\mathscr{L}\ddot{Q} + \mathscr{R}\dot{Q} + \frac{Q}{\mathscr{C}} = 0\,. \tag{1.131}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} + \alpha_{kl}\dot{q}_l = 0\,. \tag{1.132}$$

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

► $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = -\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k}\,; \qquad R = \frac{1}{2}\alpha_{kl}\dot{q}_k\dot{q}_l\,. \tag{1.133}$$

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

◖ Příklad 1.26: RLC obvod

Rovnici (1.131) získáme z Lagrangeových rovnic (1.133), pokud zvolíme

$$L(Q,\dot{Q}) = \frac{1}{2}\mathscr{L}\dot{Q}^2 - \frac{Q^2}{2\mathscr{C}}; \qquad R(\dot{Q}) = \frac{1}{2}\mathscr{R}\dot{Q}^2 . \tag{1.134}$$

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

◗

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

$$p_k \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}; \tag{1.135}$$

$$E \equiv \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k}\dot{q}_k - L . \tag{1.136}$$

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

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

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

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

$$\frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}t} = -2R \tag{1.137}$$

jasně dává do souvislosti Rayleighovu disipační funkci se ztrátou energie ze systému za jednotku času. Vztah (1.137) lze zapsat jako zákon zachování energie takto:

$$E + \int_0^t 2R\,\mathrm{d}t = \mathrm{const} . \tag{1.138}$$

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

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

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

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

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

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

Při úpravě prvního vztahu jsme využili Lagrangeovy rovnice ve tvaru (1.133) a definici hybnosti (1.135). Vzhledem k tomu, že hamiltonián H je pouze funkcí zobecněných souřadnic a hybností, musí být koeficienty u příslušných diferenciálů rovny odpovídajícím parciálním derivacím, tj.

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

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

► $$\begin{aligned} \dot{q}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k}; \\ \dot{p}_k &= -\frac{\partial H}{\partial q_k} - \frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k}. \end{aligned} \tag{1.139}$$

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

1.4.6 Inverzní úloha

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

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

$$\varepsilon_k \equiv \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = 0 \tag{1.140}$$

Inverzní úlohou rozumíme nalezení Lagrangeovy funkce ze známých diferenciálních rovnic ve tvaru $\varepsilon_k = 0$. Tato úloha nemusí mít vždy řešení, tedy k některým soustavám rovnic Lagrangeova funkce neexistuje a variační formulace není možná. Italský teoretický fyzik Enzo Tonti v roce 1969 odvodil postačující podmínky pro existenci Lagrangeovy funkce [8]. Pokud levé strany diferenciálních rovnic splňují podmínky

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

$$\frac{\partial \varepsilon_k}{\partial \dot{q}_l} + \frac{\partial \varepsilon_l}{\partial \dot{q}_k} = 2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial \varepsilon_l}{\partial \ddot{q}_k}\,; \tag{1.141}$$

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

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

$$L = -q_k \int_0^1 \varepsilon_k(t, \tau q, \tau \dot{q}, \tau \ddot{q})\,\mathrm{d}\tau\,. \tag{1.142}$$

Ve vztahu (1.142) platí sumační konvence. Znaménko minus je zde jen proto, aby pohybové rovnice vyšly ve tvaru (1.140). Při opačném znaménku bychom získali rovnice $-\varepsilon_k = 0$. Nejsou-li splněny Tontiho podmínky variačnosti (1.141), je možné hledat funkce f_k tak, aby existovala Lagrangeova funkce k rovnicím

$$\tilde{\varepsilon}_k \equiv f_k \varepsilon_k = 0\,. \tag{1.143}$$

V tomto vztahu se přes k nesčítá, tj. každou z rovnic odděleně vynásobíme nějakou funkcí f_k. V případě, že nevariačnost rovnic způsobují členy lineární v zobecněných rychlostech $\mathrm{d}q_k/\mathrm{d}t$, rozdělíme rovnice na dvě části tak, aby

$$\varepsilon_k = \varepsilon_0(k)\, q_k + \alpha_{kl}\dot{q}_k\,; \qquad \alpha_{kl} = \alpha_{lk}\,. \tag{1.144}$$

V systému probíhající disipační procesy lze popsat Rayleighovou funkcí

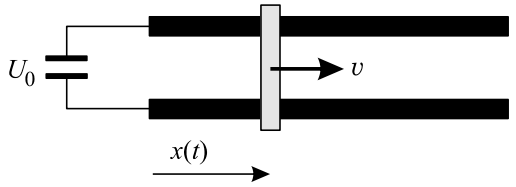
$$R = \frac{1}{2}\alpha_{kl}\dot{q}_k\dot{q}_l\,. \tag{1.145}$$

Inverzní variační problém lze řešit tak, že najdeme Lagrangeovu funkci k rovnicím $\varepsilon_0(k) = 0$ a systém pak splňuje Lagrangeovy rovnice ve tvaru (1.133) s Rayleighovou disipační funkcí

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_k} - \frac{\partial L}{\partial q_k} = -\frac{\partial R}{\partial \dot{q}_k}\,. \tag{1.146}$$

◖ Příklad 1.27: Pohyb příčky

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



Obr. 1.23: Pohyb příčky

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

$$m\ddot{x} = \frac{1}{2}\mathscr{L}_1\dot{Q}^2 - \beta\dot{x}\,; \tag{1.147}$$

$$(\mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x)\ddot{Q} + \mathscr{R}\dot{Q} + \frac{Q}{\mathscr{C}} + \mathscr{L}_1\dot{x}\dot{Q} = U_0\,. \tag{1.148}$$

Z elektrického hlediska jde o obvod s kapacitou kondenzátorové baterie $\mathscr{C}$, odporem $\mathscr{R}$ a proměnnou indukčností $\mathscr{L} = \mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x$. Poslední člen na levé straně rovnice (1.148) popisuje vzájemnou vazbu mezi mechanickou a elektrickou částí. Z mechanického hlediska je příčka urychlována silou $\mathscr{L}_1(\mathrm{d}Q/\mathrm{d}t)^2/2$ a brzděna třecí silou $-\beta\,\mathrm{d}x/\mathrm{d}t$. Označme

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

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

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

$$R \equiv \frac{1}{2}\mathscr{R}\dot{Q}^2 \;+\; \frac{1}{2}\beta\dot{x}^2 \tag{1.151}$$

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

$$\varepsilon_{0x} \equiv m\ddot{x} - \frac{1}{2}\mathscr{L}_1\dot{Q}^2\,; \tag{1.152}$$

$$\varepsilon_{0Q} \equiv (\mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x)\ddot{Q} + \frac{Q}{\mathscr{C}} + \mathscr{L}_1\dot{x}\dot{Q} - U_0\,. \tag{1.153}$$

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

$$L = -x\int_0^1 \varepsilon_{0x}(\tau x, \tau Q, \tau\dot{x}, \tau\dot{Q}, \tau\ddot{x}, \tau\ddot{Q})\,\mathrm{d}\tau - Q\int_0^1 \varepsilon_{0Q}(\tau x, \tau Q, \tau\dot{x}, \tau\dot{Q}, \tau\ddot{x}, \tau\ddot{Q})\,\mathrm{d}\tau\,. \quad (1.154)$$

Po dosazení a jednoduché integraci máme Lagrangeovu funkci

$$L = -x\left(\frac{m_0\ddot{x}}{2} - \frac{\mathscr{L}_1\dot{Q}^2}{6}\right) - Q\left(\frac{\mathscr{L}_0\ddot{Q}}{2} + \frac{\mathscr{L}_1 x\ddot{Q}}{3} + \frac{\mathscr{L}_1\dot{x}\dot{Q}}{3} + \frac{Q}{2\mathscr{C}} - U_0\right). \quad (1.155)$$

Lagrangeova funkce (1.155) spolu s Rayleighovou funkcí (1.151) dá sice správné výchozí rovnice, ale Lagrangeova funkce je značně nepřehledná. Využijeme toho, že se rovnice nezmění, pokud k Lagrangeově funkci přičteme (nebo od ní odečteme) úplnou derivaci jakékoli funkce podle času. Členy s druhými derivacemi upravíme takto:

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

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

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

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

$$L = \frac{1}{2}m\dot{x}^2 + \frac{1}{2}(\mathscr{L}_0 + \mathscr{L}_1 x)\dot{Q}^2 - \frac{Q^2}{2\mathscr{C}} + QU_0\,. \quad (1.156)$$

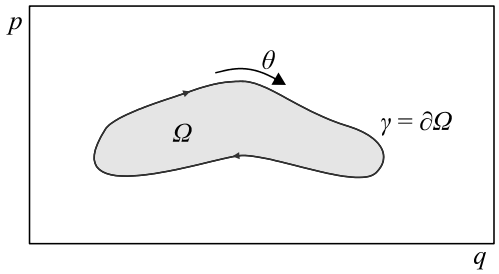
Interpretace této Lagrangeovy funkce je zřejmá. První člen je kinetická energie částice, druhý je energie na indukčnosti, třetí je energie související s kapacitou soustavy (má význam potenciální energie, proto má znaménko minus) a poslední člen souvisí s definicí proměnné Q (celkový náboj proteklý od počátku obvodem). Pokud bychom za zobecněnou proměnnou volili náboj na kondenzátorové baterii, byl by tento člen nulový. Lagrangeova funkce (1.156) spolu s Rayleighovou funkcí (1.151) jsou přirozeným řešením naší úlohy. Podrobnější řešení pro případ, kdy příčku tvoří plasma v kolejnicovém urychlovači, nalezne čtenář v [13].

◗

1.4.7 Adiabatické invarianty

Přesný periodický pohyb

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



Obr. 1.24: Periodický pohyb ve fázovém prostoru

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

► $$J = \oint_{\gamma} p \,\mathrm{d}q \,. \tag{1.157}$$

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

$$H = p\,\dot{q} - L \,. \tag{1.158}$$

Lagrangeovu funkci můžeme vyjádřit jako

$$L = p\,\dot{q} \,. \tag{1.159}$$

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

$$\begin{aligned} S &= \int_{t}^{t+T} L \,\mathrm{d}t \;=\; \int_{t}^{t+T} p\dot{q} \,\mathrm{d}t = \\ &= \int_{t}^{t+T} p \frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} \mathrm{d}t \;=\; \oint_{\gamma} p \,\mathrm{d}q = J \end{aligned} \,. \tag{1.160}$$

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

$$J = J(H); \qquad H = H(J). \tag{1.161}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial J}. \tag{1.162}$$

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

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial \theta}\frac{\partial H}{\partial J}. \tag{1.163}$$

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

Adiabatické přiblížení

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

► $$\frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{d}t} \ll \frac{\lambda}{T}; \tag{1.164}$$

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

$$A(H, \lambda) = \text{const}. \tag{1.165}$$

Takovou veličinu nazýváme *adiabatický invariant*. Dokažme nyní, že adiabatickým invariantem je plocha fázové trajektorie, tj. zobecněná hybnost J daná vztahem (1.157). Tato veličina se při adiabatických změnách na rozdíl od energie zachovává. Nalezněme proto časovou změnu J, při které využijeme parametrizaci křivky kanonicky sdruženou proměnnou θ k zobecněné hybnosti J:

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

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

Časové derivace na hranici oblasti nahradíme podle vztahu (1.163), tj.

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

V druhém členu provedeme integraci per partes

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

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

► $$J = \oint p\mathrm{d}q = \mathrm{const}\,. \tag{1.166}$$

◖ Příklad 1.28: Harmonický oscilátor

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

$$\frac{1}{2}m\omega^2x^2 + \frac{p^2}{2m} = E\,. \tag{1.167}$$

Poloosy naší elipsy odečteme z úsekového tvaru

$$\left(\frac{x}{a}\right)^2 + \left(\frac{p}{b}\right)^2 = 1\,; \qquad a = \sqrt{\frac{2E}{m\omega^2}}\,; \qquad b = \sqrt{2mE}\,. \tag{1.168}$$

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

$$J = \oint p\mathrm{d}x = \pi ab = \frac{2\pi E}{\omega} = \mathrm{const}\,. \tag{1.169}$$

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

◗

◖ Příklad 1.29: Proměnné magnetické pole

Předpokládejme, že elektron koná Larmorovu rotaci (viz příklad 1.23) v pomalu proměnném magnetickém poli. Za souřadnici zvolíme úhel φ, který určuje pozici na kružnici. Příslušnou zobecněnou hybností je moment hybnosti obíhajícího elektronu:

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

Po dosazení za Larmorův poloměr ze vztahu (1.63) máme

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

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

$$J_1 = \frac{m_\mathrm{e} v^2}{2B} = \mathrm{const} . \tag{1.170}$$

Podrobněji se o adiabatických invariantech pro nabitou částici pohybující se v magnetickém poli dozvíte v [1]. Obecnější pohled poskytuje literatura [11].

◗

1.4.8 Kanonické transformace

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

$$\begin{aligned} \{p_k, q_l\} &= \delta_{kl} ; \\ \{P_k, Q_l\} &= \delta_{kl} , \end{aligned} \tag{1.171}$$

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

$$\begin{aligned} q_1, q_2, \ldots, q_f, p_1, p_2, \ldots, p_f \quad &\rightarrow \quad Q_1, Q_2, \ldots, Q_f, P_1, P_2, \ldots, P_f , \\ H(t, q, p) \quad &\rightarrow \quad \bar{H}(t, Q, P) , \end{aligned} \tag{1.172}$$

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

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

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

$$p_k \dot{q}_k - H = P_k \dot{Q}_k - \bar{H} + \frac{\mathrm{d}\mathscr{V}}{\mathrm{d}t}\,; \qquad \mathscr{V} = \mathscr{V}(t, q, Q)\,. \tag{1.173}$$

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

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

Proveďme nyní derivaci funkce $\mathscr{V}(t\,, q, Q)$ ve vztahu (1.173)

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

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

Tuto rovnost splníme jednoduchými požadavky:

► $$p_k = \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial q_k}\,; \qquad P_k = -\frac{\partial \mathscr{V}}{\partial Q_k}\,; \qquad \bar{H} = H + \frac{\partial \mathscr{V}}{\partial t}\,. \tag{1.174}$$

Funkci $\mathscr{V}$ nazýváme *vytvořující funkce*. Jde o libovolnou funkci času, starých proměnných q a nových proměnných Q, tj. $\mathscr{V}(t\,, q, Q)$. Pokud budou platit relace (1.174), tj. spočítáme podle tohoto předpisu nové hybnosti, budou v nových proměnných platit Hamiltonovy rovnice a navíc budou takto vytvořené nové proměnné kanonicky sdružené, tj. $\{Q_k, P_l\} = \delta_{kl}$.

Hamiltonova-Jacobiho rovnice

Pomocí vytvořující funkce si můžeme vymýšlet nejrůznější transformace k novým proměnným. Vytvořující funkce je totiž libovolnou funkcí starých a nových souřadnic. V principu by mohla být i funkcí starých souřadnic a nových hybností, starých hybností a nových souřadnic nebo starých hybností a nových hybností. Rozdíly mezi souřadnicemi a hybnostmi se v Hamiltonově teorii stírají. Transformační vztahy (1.174) by byly jen nepatrně odlišné.

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

$$Q_k = \mathrm{const} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{Q}_k = +\frac{\partial \bar{H}}{\partial P_k} = 0\,;$$
$$P_k = \mathrm{const} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{P}_k = -\frac{\partial \bar{H}}{\partial Q_k} = 0\,. \tag{1.175}$$

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

zobecněné souřadnice a hybnosti, označujeme S a nazýváme ji *hlavní (principiální) Hamiltonova funkce*. Transformační rovnice (1.174) nyní budou:

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

$$P_k = -\frac{\partial S}{\partial Q_k}; \tag{1.176}$$

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

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

$$\frac{\partial S}{\partial t} + H(t, q_k, \frac{\partial S}{\partial q_k}) = 0 \qquad \Rightarrow \qquad S(t, q_k, \alpha_k) \tag{1.177}$$

$$\beta_k = -\frac{\partial S(t, q_k, \alpha_k)}{\partial \alpha_k} \qquad \Rightarrow \qquad q_k = q_k(t, \alpha_k, \beta_k); \tag{1.178}$$

Rovnice (1.177) se nazývá Hamiltonova-Jacobiho rovnice [12]. Vytvořující funkce S, která vede na konstantní zobecněné souřadnice a hybnosti má význam integrálu akce:

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

Postup řešení je následující:

1) V nějakých zobecněných souřadnicích a hybnostech zkonstruujeme Hamiltonovu funkci (tj. energii vyjádřenou za pomoci zobecněných souřadnic a hybností).
2) V této Hamiltonově funkci nahradíme všechny výskyty hybností p_k výrazem $\partial S/\partial q_k$ a sestavíme Hamiltonovu-Jacobiho rovnici (1.177) pro vytvořující funkci S.
3) Řešíme Hamiltonovu-Jacobiho rovnici. Řešením je vytvořující funkce $S(t, q_k, \alpha_k)$, ve které jsou α_k integrační konstanty. Tyto konstanty mají význam nových zobecněných souřadnic.
4) Víme, že transformace (1.178) daná vytvořující funkcí S vede na nové hybnosti, které jsou také konstantní, proto je označíme β_k. Tyto transformační vztahy obsahují nové zobecněné souřadnice α_k (konstanty), nové zobecněné hybnosti β_k (konstanty) a čas. Proto z nich můžeme vyjádřit původní souřadnice q_k jako funkce času a nalezených konstant. Tím jsme se vrátili k řešení problému v původních souřadnicích.

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

◖ Příklad 1.30: Volný pád

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

$$L = \frac{1}{2}mv^2 - mgy\,; \qquad H = \frac{p^2}{2m} + mgy\,. \tag{1.179}$$

Nyní sestavíme Hamiltonovu-Jacobiho rovnici (krok 2):

$$\frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial y}\right)^2 + mgy = 0\,. \tag{1.180}$$

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

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

$$S(t, y, \alpha) = -\alpha t - \frac{(2m\alpha - 2m^2 gy)^{3/2}}{3m^2 g}\,. \tag{1.181}$$

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

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

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

$$y = h - \frac{1}{2}g(t - t_0)^2\,. \tag{1.182}$$

◗

1.5 Nelineární dynamické systémy

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

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= f_1(t, \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,; \\ \dot{\xi}_2 &= f_2(t, \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,; \\ &\vdots \\ \dot{\xi}_N &= f_N(t, \xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)\,, \end{aligned} \tag{1.183}$$

neboli

$$\dot{\xi}_k = f_k(t, \boldsymbol{\xi})\,, \qquad k = 1, \ldots, N\,. \tag{1.184}$$

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

$$\dot{\xi}_k = f_k(\boldsymbol{\xi})\,, \qquad k = 1, \ldots, N\,. \tag{1.185}$$

Nejjednodušší je případ lineárních rovnic tvaru

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= a_{11}\xi_1 + \cdots, a_{1N}\xi_N\,, \\ &\vdots \\ \dot{\xi}_N &= a_{N1}\xi_1 + \cdots, a_{NN}\xi_N\,. \end{aligned} \tag{1.186}$$

neboli

$$\dot{\boldsymbol{\xi}} = \mathbf{A}\boldsymbol{\xi}\,. \tag{1.187}$$

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

$$\mathbf{A}\boldsymbol{\eta}^{(l)} = \lambda_l \boldsymbol{\eta}^{(l)}\,. \tag{1.188}$$

Úpravou rovnice (1.188) dostaneme $(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{1})\boldsymbol{\eta} = 0$. Tato rovnice bude mít netriviální řešení jen, je-li

$$\det(\mathbf{A} - \lambda\,\mathbf{1}) = 0\,, \tag{1.189}$$

což je rovnice pro vlastní čísla λ. Z tvaru (1.188) potom dopočteme vlastní vektory. Řešením soustavy lineárních diferenciálních rovnic je každý výraz

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

protože

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

Obecné řešení je lineární kombinací řešení pro jednotlivá vlastní čísla:

$$\boldsymbol{\xi}(t) = c_1\boldsymbol{\eta}^{(1)}\,\mathrm{e}^{\lambda_1 t} + c_2\boldsymbol{\eta}^{(2)}\,\mathrm{e}^{\lambda_2 t} + \cdots. \tag{1.190}$$

Jde-li o problém kmitů, λ jsou komplexní ($\lambda_k = \delta + \mathrm{i}\,\omega_k$). Jednotlivé členy v součtu (1.190) jsou tzv. vlastní mody kmitů. Počet vlastních frekvencí je menší nebo roven řádu matice $\mathbf{A}$.

Poznámka: Výsledek (1.190) platí jen, jsou-li vlastní čísla matice **A**, určená z rovnice (1.189), navzájem různá. Je-li některé vlastní číslo k-násobným kořenem rovnice (1.189), potom odpovídající koeficient lineární kombinace (1.190) bude polynom stupně $k - 1$.

◖ Příklad 1.31: Harmonický oscilátor

Hamiltonovy rovnice pro harmonický oscilátor mají tvar

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

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

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

ve které $\xi_1 = x$, $\xi_2 = p$. Z rovnice pro vlastní čísla (1.189) snadno určíme vlastní čísla $\lambda_{1,2} = \pm\,\mathrm{i}$ a z rovnice pro vlastní vektory (1.188) odpovídající vlastní vektory

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

Obecné řešení soustavy tedy je

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

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

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

◗

1.5.1 Matice stability a fázový portrét systému

Je-li soustava diferenciálních rovnic nelineární, může být řešení mnohem komplikovanější než výsledek (1.190).

Stacionární body řešení

Jde o takové body fázového prostoru, ze kterých se systém samovolně nevyvíjí. Jsou definovány vztahem $\mathrm{d}\xi_k/\mathrm{d}t = 0$. Nalezneme je tak, že pravé strany soustavy diferenciálních rovnic (1.183) položíme rovny nule:

► $$f_k(\boldsymbol{\xi}) = 0\,; \qquad \text{rovnice pro stacionární body.} \tag{1.191}$$

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

Stabilita řešení

Budeme zkoumat, zda stacionární body jsou stabilní vzhledem k malým poruchám (perturbacím). Můžeme si představit, že systém vložený do stacionárního bodu nepatrně vychýlíme a zkoumáme, zda se samovolně do stacionárního bodu vrátí (stabilní bod) nebo zda se od něho bude vzdalovat (nestabilní bod). Hledejme tedy řešení soustavy rovnic (1.183) ve tvaru

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

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

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

a provedeme Taylorův rozvoj pravé strany do prvního řádu

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

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

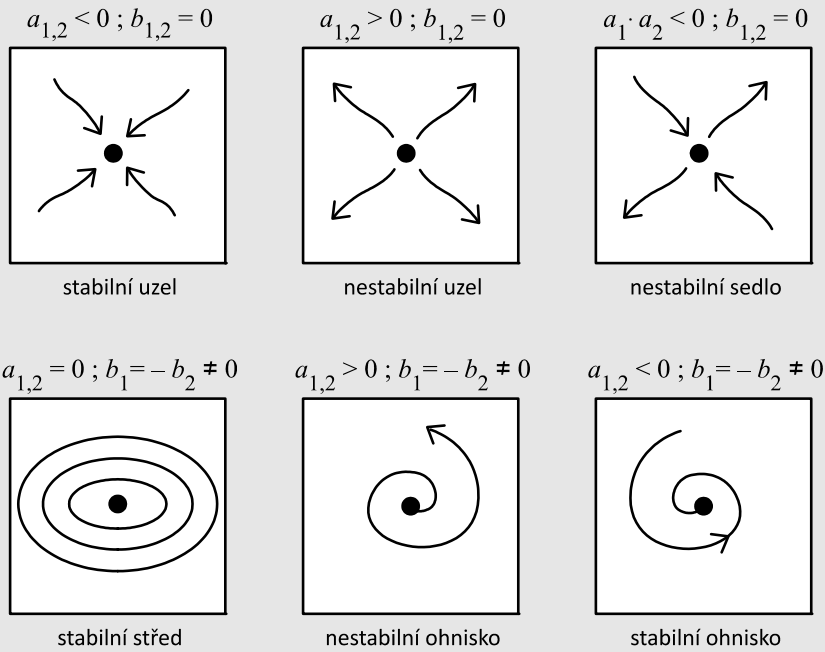
► $$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\begin{pmatrix}\delta\xi_1\\ \vdots\\ \delta\xi_N\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}a_{11} & \cdots & a_{1N}\\ \vdots & \ddots & \vdots\\ a_{N1} & \cdots & a_{NN}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}\delta\xi_1\\ \vdots\\ \delta\xi_N\end{pmatrix}, \tag{1.192}$$

kde jsme označili

► $$a_{kl} \equiv \left.\frac{\partial f_k}{\partial \xi_l}\right|_{\boldsymbol{\xi}^{(S)}} \tag{1.193}$$

je tzv. *matice stability.* Jde o parciální derivace pravých stran rovnic (1.183) podle jednotlivých proměnných ve zkoumaném stacionárním bodě. Soustava rovnic (1.192) pro malé poruchy $\delta\boldsymbol{\xi}$ je linearizovaná a její řešení umíme najít pomocí vlastních čísel a vlastních směrů matice $\mathbf{A}$. Je-li $\mathrm{Re}(\lambda) < 0$, bude daný mod $\exp(\lambda t)$ utlumen a řešení je stabilní v příslušném vlastním směru. Je-li $\mathrm{Re}(\lambda) > 0$, je mod v daném směru nestabilní. Je-li $\lambda = \pm \mathrm{i}\, b$, malá porucha systém v okolí stacionárního bodu rozkmitá.

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



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

◖ Příklad 1.32: Nelineární oscilátor

Uvažujme soustavu rovnic

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

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

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

a zakreslíme je do fázového prostoru. Potom nalezneme matici stability (1.193) v obecném tvaru:

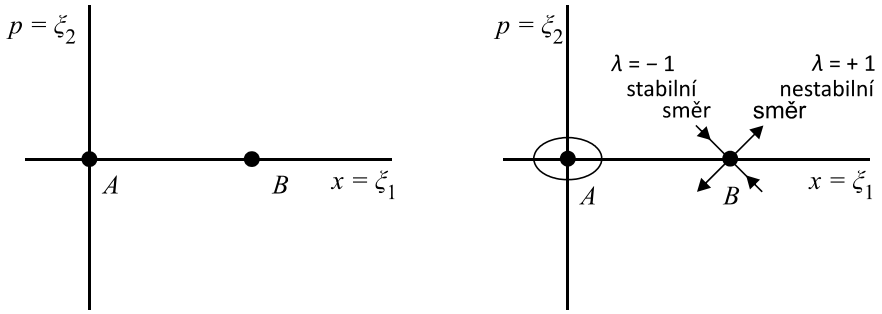
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_2} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1+2\varepsilon\xi_1 & 0 \end{pmatrix} \,.$$

Tuto matici určíme v stacionárních bodech A a B. Vypočteme vlastní čísla a vlastní vektory z rovnic (1.189) a: (1.188)

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

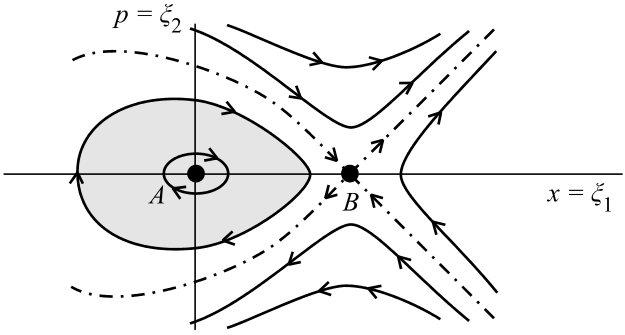
$$B: \quad \mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix} \quad \Rightarrow \quad \begin{cases} \lambda_1 = +1\,, \quad \boldsymbol{\eta}_1 = c \begin{pmatrix} +1 \\ +1 \end{pmatrix}, \quad \text{porucha } \mathrm{e}^{+t} \\ \lambda_2 = -1\,, \quad \boldsymbol{\eta}_2 = c \begin{pmatrix}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

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



Obr. 1.26: Postupná tvorba fázového portrétu nelineárního oscilátoru

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



Obr. 1.27: Fázový portrét nelineárního oscilátoru

◗

◖ Příklad 1.33: Částice v periodickém potenciálu

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

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

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

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

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

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

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

stacionární body:

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

matice stability:

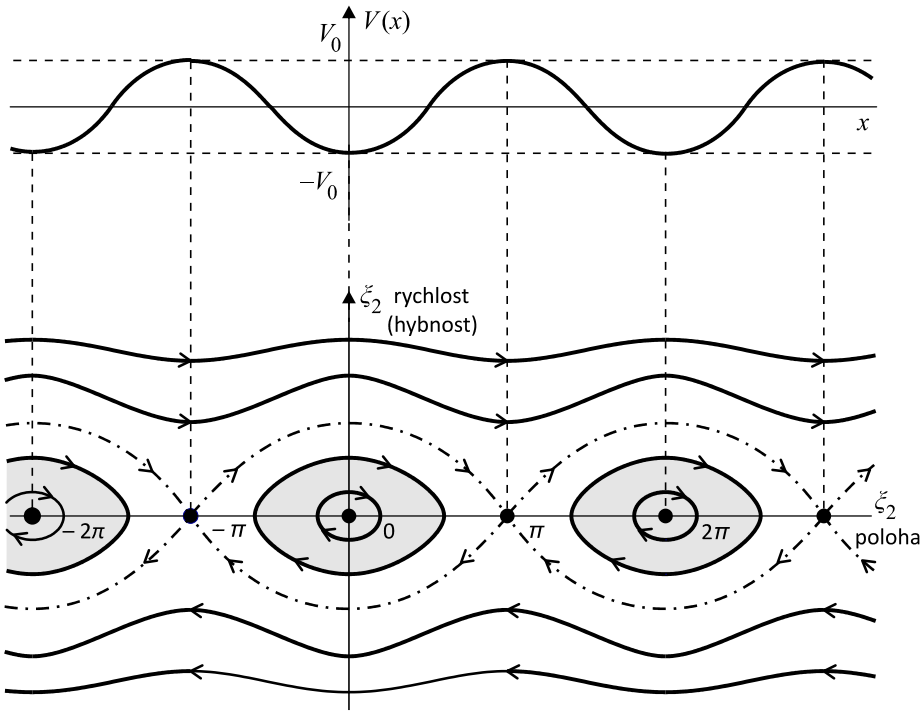
$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_1}{\partial \xi_2} \\ \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_1} & \dfrac{\partial f_2}{\partial \xi_2} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -\cos\xi_1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pro *k* sudé:

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

Pro *k* liché:

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



Obr. 1.28: Fázový portrét částice v periodickém potenciálu

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

◗

1.5.2 Metoda potenciálu

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

V jednodimenzionálním případě máme jedinou diferenciální rovnici

$$\dot{\xi} = f(\xi)\,. \tag{1.194}$$

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

Definice potenciálu

Potenciálem rovnice (1.194) nazýváme veličinu

► $$\phi(\xi) \equiv -\int f(\xi)\,\mathrm{d}\xi\,. \tag{1.195}$$

Přímo z definice snadno ukážeme, že platí

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

Ve vícedimenzionálním případě se pro soustavu (1.183) postupuje obdobně. Definujeme diferenciální formu

$$\mathrm{d}\phi \equiv -f_1(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\xi_1 - f_2(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\xi_2 \;-\; \cdots \;- f_N(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\xi_N \tag{1.196}$$

a hledáme potenciál ϕ tak, aby $f_k = -\partial\phi/\partial\xi_k$. Výraz (1.196) je potom úplným diferenciálem funkce ϕ. Není-li diferenciální forma (1.196) integrabilní, lze hledat integrační faktor $\mu(\boldsymbol{\xi})$ tak, aby byla integrabilní forma

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

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

◖ Příklad 1.34: Potenciál „dna koňakové lahve“

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

$$\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t} = \varepsilon\xi - \delta\xi^3 ; \qquad \delta > 0 ; \qquad \xi \in R . \tag{1.197}$$

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

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

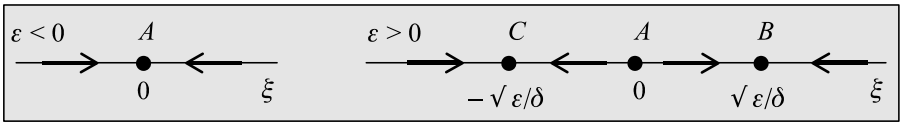
matice stability: $a = \varepsilon - 3\delta\xi_S^2 = \varepsilon < 0 \quad \Rightarrow$

bod A je stabilní.

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

matice stability:

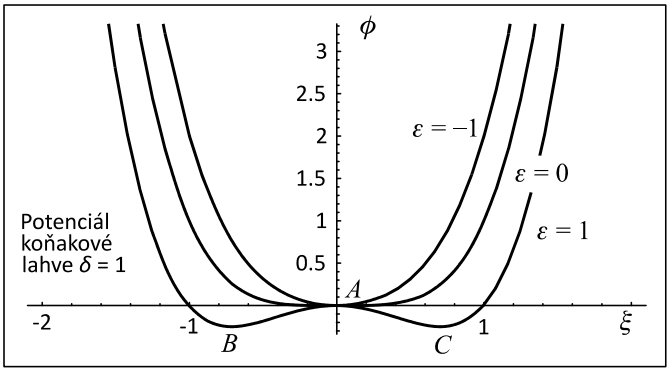
$$a = \varepsilon - 3\delta\xi_S^2 = \begin{cases} \varepsilon & \text{pro bod } A \quad \Rightarrow \quad A \text{ je nestabilní} \\ -2\varepsilon & \text{pro body } B, C \quad \Rightarrow \quad B, C \text{ jsou stabilní} \end{cases}$$



Obr. 1.29: Stabilita stacionárních bodů

Řešme nyní stejnou úlohu metodou potenciálu:

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



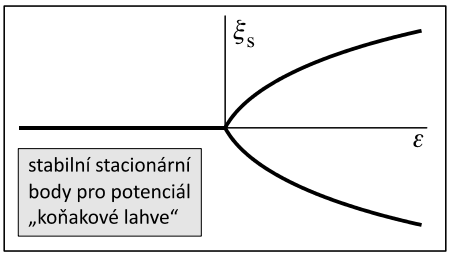
Obr. 1.30: Potenciál dna koňakové lahve

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

◗

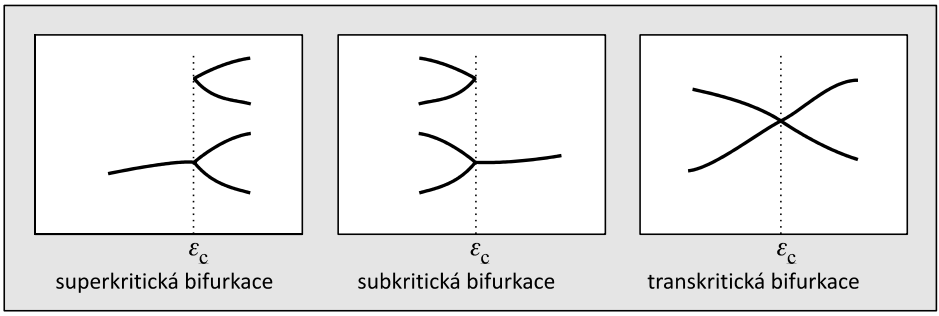
1.5.3 Bifurkace

Bifurkací nazýváme náhlou změnu fázového portrétu soustavy při spojité změně některého řídicího parametru výchozích rovnic. V příkladu 1.34 z minulé kapitoly vypadá fázový portrét jinak pro $\varepsilon < 0$ a jinak pro $\varepsilon > 0$. Při pomalé změně ε se pomalu mění fázový portrét soustavy. Výjimkou je bod $\varepsilon = 0$. Fázové portréty pro $\varepsilon < 0$ a $\varepsilon > 0$ nejsou topologicky ekvivalentní (nelze je na sebe převést spojitým zobrazením).



Obr. 1.31: Bifurkace – větvení řešení

Typickým jevem při bifurkaci je větvení řešení. V příkladu 1.34 je pro $\varepsilon < 0$ jediný stabilní bod $\xi_S = 0$, pro $\varepsilon > 0$ existují dva stabilní body $\xi_S = \pm (\varepsilon/\delta)^{1/2}$, bod $\xi_S = 0$ se stává nestabilní. Podle typu větvení řešení můžeme bifurkace dělit na superkritické, subkritické a transkritické:



Obr. 1.32. Různé typy bifurkací

Fázové přechody druhého druhu – typická bifurkace

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

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

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

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

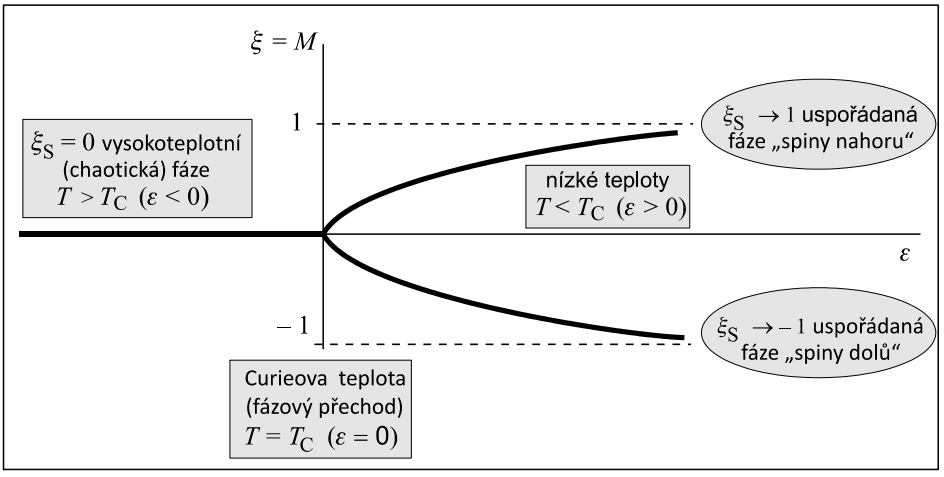
Sumace probíhá přes nejbližší sousedy. Jsou-li tedy dva sousední spiny orientovány souhlasně, přispějí k celkové energii hodnotou $-J$, jsou-li orientovány nesouhlasně, nepřispějí vůbec. Při nízkých teplotách ($T < T_C$) mají spiny snahu zaujmout stav s co možná nejnižší energií, tj. orientují se *převážně*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

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

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

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

potom v nízkoteplotní fázi s klesající teplotou $M \to \pm 1$ a ve vysokoteplotní fázi s rostoucí teplotou $M \to 0$. Potenciál „koňakové lahve“ a s ním souvisící rovnice (1.197) velmi dobře popisuje právě takový fázový přechod. Veličina ξ odpovídá parametru uspořádání tj. $\xi = M$ a řídicímu parametru odpovídá veličina $\varepsilon = T_C - T$:



Obr. 1.33: Fázový přechod ve feromagnetiku

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

◖ Příklad 1.35: Hopfova bifurkace

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

$$\begin{aligned} &\dot{r} = r(\varepsilon + \delta r^2); \\ &\dot{\varphi} = \omega; \qquad\qquad \delta > 0, \quad r \geq 0, \quad \varphi \in R. \end{aligned} \tag{1.198}$$

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

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

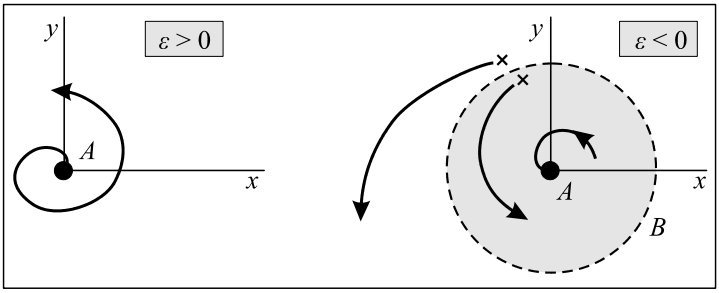
matice stability:

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

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

matice stability:

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



Obr. 1.34: Hopfova bifurkace

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

◗

1.5.4 Ljapunova stabilita, limitní cyklus, atraktor

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



Obr. 1.35: Ljapunova nestabilita (nalevo)

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

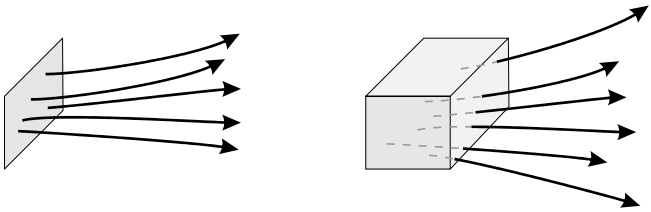
$$||\boldsymbol{\xi}(t,\boldsymbol{\xi}_0+\boldsymbol{\varepsilon})-\boldsymbol{\xi}(t,\boldsymbol{\xi}_0)|| \sim \mathrm{e}^{\lambda t}$$

a snadno určíme

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

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

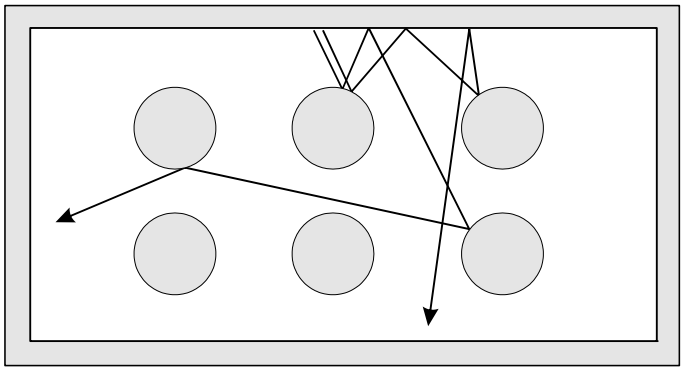
Ve vícedimenzionálních úlohách s $\boldsymbol{\xi} = (\xi_1, \xi_2, \ldots, \xi_N)$ závisí Ljapunovův exponent na způsobu provedení limity $\boldsymbol{\varepsilon}\to 0$. Získáme tak N Ljapunových koeficientů 1. řádu (ve směru souřadnicových os). Můžeme ale sledovat i celý svazek blízkých trajektorií ze dvou nebo třídimenzionální oblasti (viz obrázek 1.36).



Obr. 1.36: 2D a 3D Ljapunovy exponenty

Potom hovoříme o vícerozměrných Ljapunových exponentech (2. řádu, 3. řádu, ...). Trajektorie je ljapunovsky stabilní, jsou-li všechny Ljapunovy koeficienty $\lambda \le 0$. Příkladem ljapunovsky nestabilní trajektorie je množina $r_S = \sqrt{(|\varepsilon|/\delta)}$ pro $\varepsilon < 0$ v posledním příkladu na Hopfovu bifurkaci. Trajektorie s $r \ge r_S$ jsou ljapunovsky nestabilní. Trajektorie, pro něž je $r < r_S$, jsou ljapunovsky stabilní. Jiným příkladem Ljapunovy nesta-

bility je kulečník s překážkami podle obrázku 1.37. Povšimněte si, že dvě blízké trajektorie spolu v pozdějších časech přestávají rychle souviset.



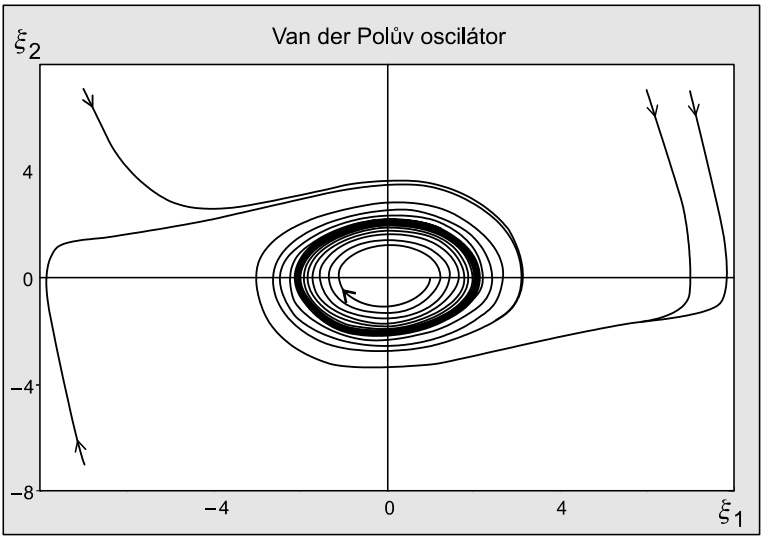
Obr. 1.37: Kulečník jako ukázka Ljapunovy nestability

◖ Příklad 1.36: Van der Polův oscilátor

Systém je popsán diferenciálními rovnicemi, které navrhnul holandský fyzik Balthasar van der Pol (1889–1959) pro popis elektrického obvodu vakuové trubice:

$$\begin{aligned} \dot{\xi}_1 &= \xi_2 \,, \\ \dot{\xi}_2 &= -\xi_1 + \varepsilon(1-\delta\xi_1^2)\xi_2 \,; \qquad \delta > 0 \,. \end{aligned} \tag{1.199}$$

V tomto systému se trajektorie s libovolnou počáteční podmínkou blíží k jediné periodické trajektorii, kterou nazýváme *limitní cyklus*. Za dosti dlouhou dobu se každá trajektorie přiblíží libovolně blízko k trajektorii limitního cyklu. Všechny trajektorie z blízkého okolí limitního cyklu jsou ljapunovsky stabilní. Na obrázku 1.38 jsou fázové trajektorie pro různé počáteční podmínky van der Polova oscilátoru s $\delta = 1$ a $\varepsilon = 0.1$:



Obr. 1.38: Van der Polův oscilátor. Limitním cyklem je tlustá uzavřená křivka ◗

Některé pojmy z teorie množin

Vzdálenost dvou bodů $\rho(\mathbf{A}, \mathbf{B})$:

Definujme vzdálenost dvou bodů co nejjednodušeji, například jako kartézskou vzdálenost danou Pythagorovou větou

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

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

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

Jde o normu (velikost) rozdílového vektoru **A**–**B**.

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

Vzdálenost bodu od množiny definujeme jako minimum vzdáleností od všech bodů množiny, včetně její hranice $(\bar{\mathcal{M}})$:

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

Okolí bodu $U_\varepsilon(\mathbf{A})$

Za okolí bodu budeme považovat kouli bez hranice se středem v **A** a poloměrem ε:

► $$U_\varepsilon(\mathbf{A}) \equiv \{\mathbf{X};\, \rho(\mathbf{A},\mathbf{X}) < \varepsilon\} \, .$$

Otevřená množina $\mathcal{M}_\mathrm{O}$

Otevřená množina je taková množina, že kolem každého jejího bodu lze zkonstruovat okolí, které je celé v množině $\mathcal{M}_\mathrm{O}$:

► $$\text{ke } \forall\, \mathbf{X} \in \mathcal{M}_\mathrm{O} \ \exists\, U_\varepsilon(\mathbf{X}) \subset \mathcal{M}_\mathrm{O} \ .$$

Zjednodušeně lze říci, že otevřené množiny neobsahují svou hranici.

Uzavřená množina $\mathcal{M}_\mathrm{U}$

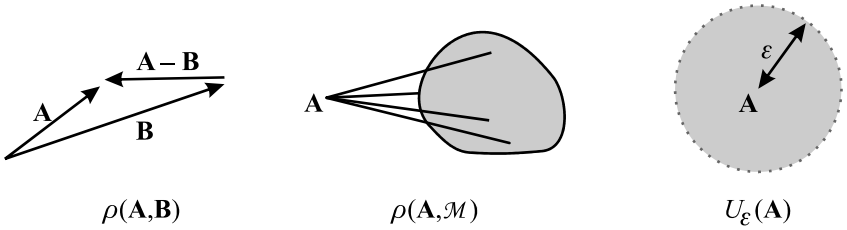
Uzavřená množina je taková množina, ve které konvergentní posloupnost bodů konverguje vždy k nějakému prvku této množiny. Tedy nikdy se nestane, že bychom nalezli posloupnost, která konverguje, ale její limita leží mimo naši množinu. Platí tedy:

► $$\mathbf{X}^{(k)} \in \mathcal{M}_\mathrm{U} \ ; \qquad \mathbf{X}^{(k)} \to \mathbf{X} \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{X} \in \mathcal{M}_\mathrm{U} \ ;$$

Zjednodušeně lze říci, že uzavřené množiny obsahují svou hranici.

Poznámka 1: V našem případě fázového prostoru jsou body **A**, **B**, **X** vždy nějaké N-tice $(\xi_1, \ldots, \xi_N)$.

Poznámka 2: Uzavřený interval a kruh s hranicí jsou uzavřené množiny; otevřený interval a kruh bez hranice jsou otevřené množiny; polouzavřený interval není ani otevřená ani uzavřená množina; prázdná množina a celý prostor R^N jsou ve smyslu předchozích definic otevřené i uzavřené množiny.



Obr. 1.39: K definici vzdálenosti a okolí

Pojmy vztahující se k řešení soustavy diferenciálních rovnic

Invariantní množina $\mathcal{J}$

O množině řekneme, že je invariantní, pokud se z libovolného bodu množiny $\mathcal{J}$, chápaného jako počáteční podmínka soustavy diferenciálních rovnic (1.183), vyvine fázová trajektorie, která bude celá ležet v množině $\mathcal{J}$. Jakmile se tedy systém dostane do množiny $\mathcal{J}$, potom v ní bude setrvávat i ve všech pozdějších časech:

► $$\mathcal{J} = \{\mathbf{X};\quad \mathbf{X}_0 = \boldsymbol{\xi}(t_0) \in \mathcal{J} \quad \Rightarrow \quad \mathbf{X} = \boldsymbol{\xi}(t) \in \mathcal{J} \quad \text{pro } \forall\, t > t_0\}\,.$$

Hustě pokrytá množina $\mathcal{D}$

O množině řekneme, že je hustě pokrytá, pokud libovolně malým okolím každého bodu množiny $\mathcal{D}$ prochází nějaká fázová trajektorie.

Chaotická množina $\mathcal{X}$

1) každá trajektorie v $\mathcal{X}$ je ljapunovsky nestabilní,
2) existuje trajektorie, která $\mathcal{X}$ hustě pokryje,
3) $\mathcal{X}$ je invariantní množina.

Atraktor $\mathcal{A}$

1) trajektorie z okolí $\mathcal{A}$ jsou k $\mathcal{A}$ „přitahovány“, tj. s rostoucím časem se k $\mathcal{A}$ blíží:
$$\exists\, U_{\mathcal{A}} \supset \mathcal{A},\ \text{že pro}\ \forall\, \boldsymbol{\xi}(t_0) \in U_{\mathcal{A}}\ \text{platí}\ \lim_{t\to\infty} \rho(\boldsymbol{\xi}(t), \mathcal{A}) = 0\,,$$
2) existuje trajektorie, která $\mathcal{A}$ hustě pokryje,

3) $\mathcal{A}$ je invariantní množina,

4) $\mathcal{A}$ je uzavřená množina.

Podivný atraktor $\mathcal{S}$

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

Limitní cyklus C

Limitní cyklus je uzavřená fázová trajektorie, která je atraktorem.

Poznámka 1: Každý stacionární bod je invariantní množinou. Také každá uzavřená trajektorie, například harmonického oscilátoru, je invariantní množinou.

Poznámka 2: Každá uzavřená trajektorie tvoří automaticky invariantní uzavřenou hustě pokrytou množinu. Limitní cyklus navíc „přitahuje“ trajektorie z okolí, tj. má první vlastnost atraktoru.

Poznámka 3: Příkladem chaotické množiny je plocha kulečníku na obrázku 1.37.

Poznámka 4: Podivný atraktor může vzniknout jen v problému s dimenzí $N \geq 3$.

Poznámka 5: Pokud pro soustavu dvou rovnic nemění výraz $\partial f_1/\partial \xi_1 + \partial f_2/\partial \xi_2$ v jednoduše souvislé oblasti znaménko, potom v této oblasti neexistuje uzavřená trajektorie. Uvedené kritérium se nazývá *Bendixsonovo kriterium*. (podle švédského matematika Ivara Otto Bendixsona).

◖ Příklad 1.37: Bruselátor (2D)

Budeme zkoumat chemickou reakci typu

$$\begin{aligned} A &\xrightarrow{k_1} X \\ B + X &\xrightarrow{k_2} Y + D \\ 2X + Y &\xrightarrow{k_3} 3X \\ X &\xrightarrow{k_4} E \end{aligned}$$

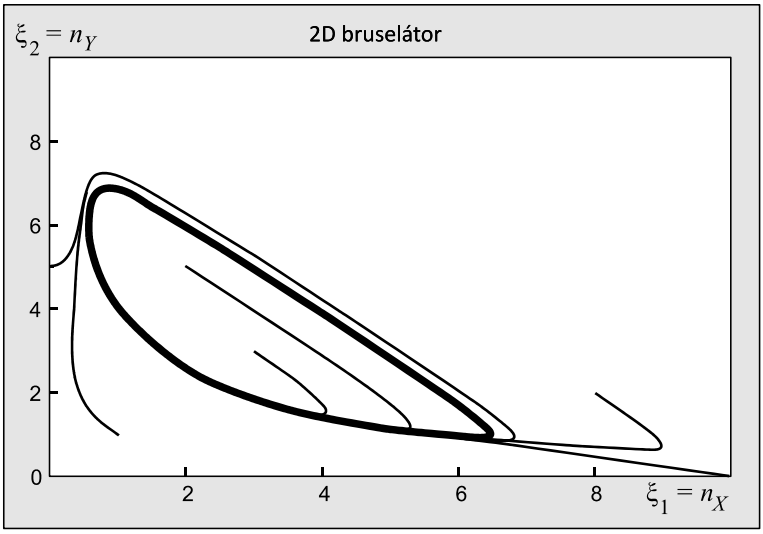
Rychlosti jednotlivých reakcí jsou označeny $k_1, \ldots, k_4$. Koncentrace výchozích látek a produktů označíme n_A, n_B, n_D, n_E . Proměnnými budou koncentrace látek X a Y: $\xi_1 = n_X$, $\xi_2 = n_Y$. Z tvaru reakcí sestavíme výchozí soustavu diferenciálních rovnic

$$\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} = k_1 n_A - k_2 n_B \xi_1 + k_3 \xi_1^2 \xi_2 - k_4 \xi_1 ,$$
$$\frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} = k_2 n_B \xi_1 - k_3 \xi_1^2 \xi_2 .$$

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

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha - (\beta+1)\xi_1 + \xi_1^2\,\xi_2\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \beta\,\xi_1 - \xi_1^2\xi_2\,.\end{aligned} \tag{1.200}$$

Tyto rovnice poskytují řešení ve tvaru limitního cyklu. Pro hodnoty $\alpha = 2$ a $\beta = 5{,}9$ a různé počáteční podmínky jsou fázové trajektorie na následujícím obrázku. Po dosti dlouhém čase se koncentrace ξ_1 a ξ_2 periodicky mění (oscilují) kolem jistých středních hodnot. Tento teoretický model chemické reakce navrhnul rusko-belgický chemik Ilja Prigogine (1917–2003) na Svobodné univerzitě v Bruselu.



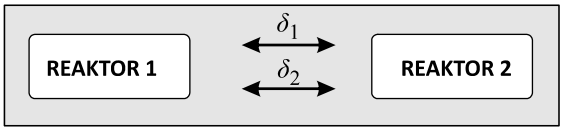
Obr. 1.40: Fázový portrét 2D bruselátoru, limitní cyklus je znázorněn silnou čarou

◗

◖ Příklad 1.38: Bruselátor (4D)

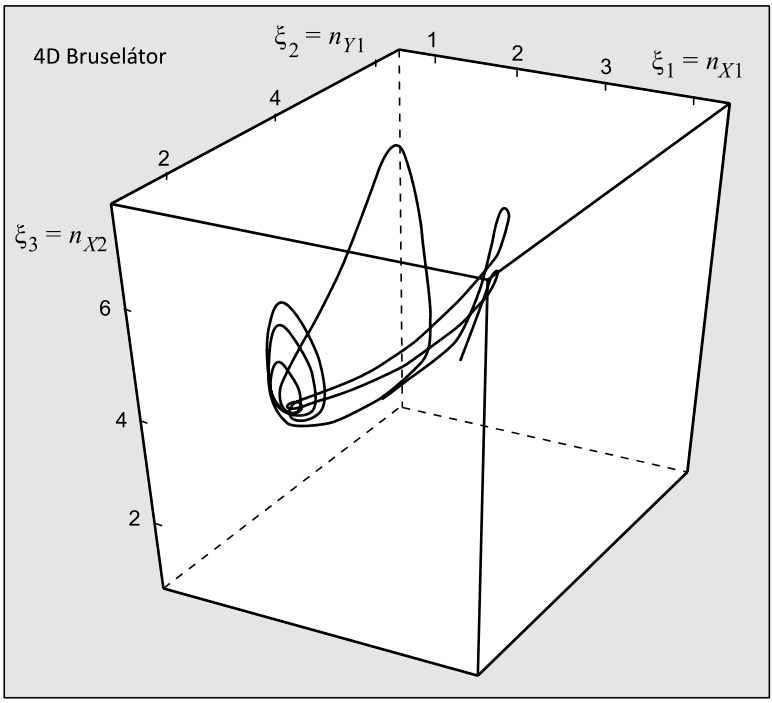
Budeme předpokládat, že předchozí reakce probíhá současně ve dvou reaktorech s možností výměny látky X rychlostí δ_1 a látky Y rychlostí δ_2. Koncentrace látek X a Y v reaktorech 1 a 2 označíme takto: $\xi_1 = n_{X1}$, $\xi_2 = n_{Y1}$, $\xi_3 = n_{X2}$, $\xi_4 = n_{Y2}$. Výchozí rovnice budou

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha - (\beta+1)\xi_1 + \xi_1^2\xi_2 + \delta_1(\xi_3 - \xi_1)\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \beta\xi_1 - \xi_1^2\xi_2 + \delta_2(\xi_4 - \xi_2)\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_3}{\mathrm{d}t} &= \alpha - (\beta+1)\xi_3 + \xi_3^2\xi_4 + \delta_1(\xi_1 - \xi_3)\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_4}{\mathrm{d}t} &= \beta\xi_3 - \xi_3^2\xi_4 + \delta_2(\xi_2 - \xi_4)\,.\end{aligned} \tag{1.201}$$



Obr. 1.41: Spřažené bruselátory

Rovnice (1.201) jsou soustavou čtyř nelineárních diferenciálních rovnic, jejichž řešení vede pro některé parametry na podivný atraktor (dimenze systému je větší než 3). Na následujícím obrázku je část fázové trajektorie, která by hustě pokryla oblast podivného atraktoru pro $\alpha = 2$; $\beta = 5{,}9$; $\delta_1 = 1{,}21$ a $\delta_2 = 12{,}1$.



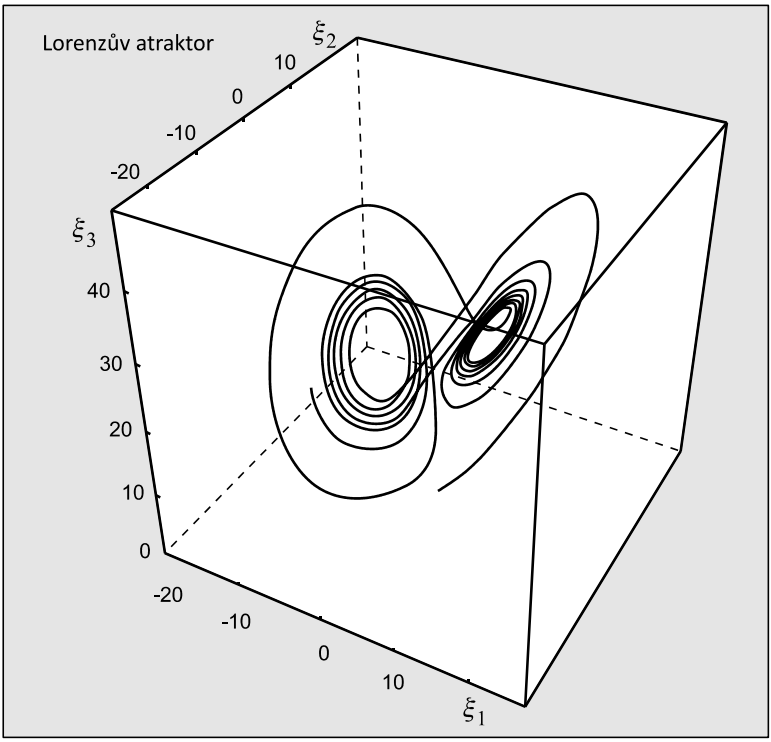
Obr. 1.42: Fázový portrét 4D bruselátoru

◖ Příklad 1.39: Lorenzův atraktor

Jde o nejznámější příklad podivného atraktoru. Výchozí sada rovnic

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha(\xi_2 - \xi_1)\,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= -\xi_1\xi_3 + \beta\xi_1 - \xi_2\,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_3}{\mathrm{d}t} &= \xi_1\xi_2 - \gamma\xi_3 \end{aligned} \qquad (1.202)$$

popisuje proudění kapaliny mezi dvěma planparalelními deskami s různými teplotami (viz [14], [15]). Veličiny ξ_1, ξ_2, ξ_3 mají postupně význam: první Fourierova komponenta rychlosti, první a druhá Fourierova komponenta teploty. Na následujícím obrázku je opět zakreslena část fázové trajektorie, která by hustě pokryla oblast atraktoru. Rovnice byly numericky řešeny pro hodnoty $\alpha = 3$; $\beta = 26{,}5$; $\gamma = 1$.



Obr. 1.43: Lorenzův atraktor

1.5.5 Evoluční rovnice

◖ Příklad 1.40: Elektrono-děrové plazma v silném elektrickém poli

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

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha_1 \xi_1 - \beta \xi_1 \xi_2 \,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \alpha_2 \xi_2 - \beta \xi_1 \xi_2 \,. \end{aligned} \tag{1.203}$$

První členy na pravé straně popisují ionizační procesy (přírůstek nosičů), druhé členy rekombinační procesy (úbytek nosičů). Stejný tvar rovnic mají i následující úlohy. ◗

◖ Příklad 1.41: Systém dravec a kořist

Předpokládáme, že dravec se živí kořistí (například vlk a zajíci), kořist má potravy dostatek (jí například trávu). Označíme-li $\xi_1 = n_\mathrm{d}$ počet dravců v určité oblasti a $\xi_2 = n_\mathrm{k}$ množství potenciální kořisti, budou mít základní rovnice pro časový vývoj počtu zvířat tvar podobný jako v předchozím příkladu:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= -\alpha_1 \xi_1 + \beta_1 \xi_1 \xi_2 \,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= +\alpha_2 \xi_2 - \beta_2 \xi_1 \xi_2 \,. \end{aligned} \tag{1.204}$$

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

◗

◖ Příklad 1.42: Dvě sociální skupiny

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

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha_1 \xi_1 + \beta_1 \xi_1 \xi_2 \,, \\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \alpha_2 \xi_2 - \beta_2 \xi_1 \xi_2 \,. \end{aligned} \tag{1.205}$$

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

◗

◖ Příklad 1.43: Chemické reakce

Uvažme chemickou reakci typu

$$\begin{aligned} A + B &\xrightarrow{k_1} C \,, \\ A + C &\xrightarrow{k_2} B + D \,. \end{aligned}$$

Rovnice pro časový vývoj jednotlivých koncentrací mají tvar:

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{A}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 n_\mathrm{A} n_\mathrm{B} - k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,, & \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{C}}{\mathrm{d}t} &= +k_1 n_\mathrm{A} n_\mathrm{B} - k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,, \\ \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{B}}{\mathrm{d}t} &= -k_1 n_\mathrm{A} n_\mathrm{B} + k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,, & \frac{\mathrm{d}n_\mathrm{D}}{\mathrm{d}t} &= +k_2 n_\mathrm{A} n_\mathrm{C} \,. \end{aligned} \tag{1.206}$$

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

◗

Všechny rovnice z předchozích příkladů mají společný tvar

$$\frac{\mathrm{d}\xi_k}{\mathrm{d}t} = \alpha_{kj}\,\xi_j + \beta_k^{jl}\,\xi_j\,\xi_l \tag{1.207}$$

a nazývají se *evoluční rovnice*. Poznamenejme, že přes dvojné indexy se sčítá. Charakteristická je lineární kombinace různých párových interakcí. Typickými řešeními jsou oscilace, limitní cykly, ve více než třech dimenzích vznikají chaotické množiny a podivné atraktory. Rozeberme nyní řešení soustavy dvou rovnic tvaru

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= \alpha_1\,\xi_1 + \beta_1\,\xi_1\,\xi_2\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= \alpha_2\,\xi_2 + \beta_2\,\xi_1\,\xi_2\,.\end{aligned} \tag{1.208}$$

Standardním postupem zjistíme stacionární body:

$$\xi^{(1)} = (0,0)\,;$$

$$\xi^{(2)} = \left(-\frac{\alpha_2}{\beta_2}, -\frac{\alpha_1}{\beta_1}\right).$$

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

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

Druhý stacionární bod

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

$\alpha_1\,,\alpha_2 > 0$	nestabilní v jednom směru,
$\alpha_1\,,\alpha_2 < 0$	nestabilní v jednom směru,
$\alpha_1 \cdot \alpha_2 < 0$	střed oscilací (různá znaménka $\alpha_1\,,\alpha_2$).

V posledním případě jde o oscilace kolem stacionárního bodu s frekvencí

$$\omega = \sqrt{|\,\alpha_1 \cdot \alpha_2\,|}. \tag{1.209}$$

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 1.41). V systému elektronů a děr v silném elektrickém poli (příklad 1.40) není možné dosáhnout oscilující rovnováhy. Počty jedinců dvou sociálních skupin (příklad 1.42) mohou a nemusí oscilovat, stejně tak jako koncentrace látek v chemických reakcích (příklad 1.43).

Volterrovy-Lotkovy rovnice

Doplníme-li na pravých stranách evolučních rovnic regulační členy f_k, dostaneme tzv. *Volterrovy-Lotkovy rovnice*:

► $$\frac{\mathrm{d}\xi_k}{\mathrm{d}t} = \alpha_{kj}\,\xi_j \;+\; \beta_k^{jl}\xi_j\xi_l \;+\; f_k\,. \tag{1.210}$$

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

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\xi_1}{\mathrm{d}t} &= -\,\xi_1 + \xi_1\xi_2 + 1/4\,,\\ \frac{\mathrm{d}\xi_2}{\mathrm{d}t} &= +\,\xi_2 - \xi_1\xi_2\,.\end{aligned} \tag{1.211}$$

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

Logistická rovnice

Nejjednodušším případem evolučních rovnic je diferenciální rovnice, ve které je časová změna úměrná samotnému počtu jedinců:

$$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = \alpha n\,. \tag{1.212}$$

Podle znaménka α je řešením rostoucí nebo klesající exponenciála

$$n(t) = n(0)\,\mathrm{e}^{\alpha t}\,. \tag{1.213}$$

Toto řešení je vždy jen určitým přiblížením reality. Nikdy nemůže nic růst exponenciálně po dosti dlouhou dobu. Exponenciální řešení popisuje počáteční nárůst nestabilit nebo různá přechodná řešení. Po určité době převládnou párové procesy, které vedou k saturaci řešení. Tuto situaci popisuje tzv. logistická rovnice

► $$\frac{\mathrm{d}n}{\mathrm{d}t} = \alpha n - \beta n^2\,. \tag{1.214}$$

Ustálené (saturované) řešení snadno nalezneme tak, že dosadíme za dn/dt nulu:

$$n_\mathrm{S} \equiv \lim_{t\to\infty} n(t) = \frac{\alpha}{\beta}\,. \tag{1.215}$$

K vyřešení rovnice (1.214) použijeme substituci

$$n(t) = \frac{\alpha}{\beta}\xi^r(t)\,. \tag{1.216}$$

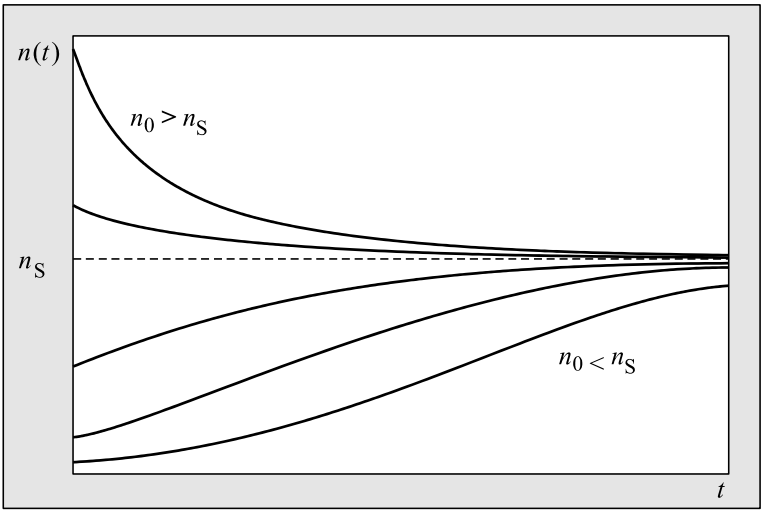
Konstanta před řešením reprezentuje saturovanou hodnotu. Mocninu r budeme hledat tak, aby se diferenciální rovnice co nejvíce zjednodušila. Po provedení substituce dostaneme rovnici

$$r\frac{\mathrm{d}\xi}{\mathrm{d}t} = \alpha\xi - \alpha\xi^{r+1}\,. \tag{1.217}$$

Je zjevné, že volba $r = -1$ převede tuto rovnici na lineární rovnici s konstantní pravou stranou, jejíž řešení již snadno najdeme. Analytické řešení původní logistické rovnice je

► $$n(t) \;=\; n_\mathrm{S}\frac{\mathrm{e}^{\alpha t}}{\mathrm{e}^{\alpha t} + n_\mathrm{S}/n_0 - 1} \;=\; \frac{n_\mathrm{S}}{1 + \left(n_\mathrm{S}/n_0 - 1\right)\mathrm{e}^{-\alpha t}}\,. \tag{1.218}$$

Snadno ověříme, že limita řešení pro $t \to \infty$ dá saturovanou hodnotu (1.215) a limita bez párové interakce, tj. pro $\beta \to 0$ ($n_\mathrm{S} \to \infty$) dá exponenciální funkci (1.213). Logistickou rovnici popisující omezený exponenciální růst poprvé navrhnul belgický matematik Pierre Francois Verhulst (1804–1849) v roce 1838.



Obr. 1.44: Řešení logistické rovnice

1.6 Lagrangeovy rovnice pro polní problémy

1.6.1 Lagrangeovy rovnice, skalární pole

Pro studium této kapitoly je nutné umět zacházet s kovariantními a kontravariantními indexy. Pokud tuto techniku neovládáte, přečtěte si nejprve kapitolu 3.3.6 Tenzory a metrika. V klasické mechanice jsme hledali závislost zobecněných souřadnic $q_k(t)$ na čase. U polních problémů budeme hledat časoprostorovou závislost polí $\varphi_k(t, \mathbf{x})$. Namísto Lagrangeovy funkce budeme používat hustotu Lagrangeovy funkce, která závisí na čase, prostoru, polích a jejich derivacích:

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}(t, x, y, z, \varphi_1, \ldots \varphi_N, \partial\varphi_1/\partial t, \partial\varphi_1/\partial x, \ldots \partial\varphi_N/\partial z),$$

což budeme zkráceně zapisovat ve tvaru

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha}).$$

Pro integrál akce bude platit

$$S = \int_\Omega \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha})\,\mathrm{d}^3\mathbf{x}\,\mathrm{d}t = \int_\Omega \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha})\,\mathrm{d}^4x.$$

Stejně jako v mechanice těles budeme hledat nutné podmínky extremálnosti integrálu akce a variace polí budou definovány ve stejném čase (ale tentokrát i prostorové souřadnici), což nám zajistí záměnnost variací a parciálních derivací. Na hranici oblasti $\partial\Omega$ požadujeme, aby variace byly nulové, tedy musí zde platit vztahy obdobné vztahům (1.4), (1.5) a (1.6):

$$\begin{gathered}\delta\varphi_k = \varphi_{k,\mathrm{virt}}(x^\mu) - \varphi_{k,\mathrm{real}}(x^\mu);\\ \delta\varphi_k(\partial\Omega) = 0;\\ \delta\partial_\mu\varphi_k = \partial_\mu\delta\varphi_k.\end{gathered} \tag{1.219}$$

Požadujme tedy, aby variace integrálu akce byla nulová:

$$\delta\int_\Omega \mathscr{L}(x^\mu, \varphi_k, \varphi_{k,\alpha})\,\mathrm{d}^4x = 0.$$

Díky záměnnosti variací a derivací můžeme přejít s variací do integrálu a zapůsobit s ní na všechny proměnné (s výjimkou x^μ, jde o variace ve stejné události):

$$\int_\Omega \left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k}\delta\varphi_k + \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\delta\varphi_{k,\alpha}\right]\mathrm{d}^4x = 0.$$

V posledním členu zaměníme variaci a derivaci: $\delta\varphi_{k,\alpha} = \delta\partial_\alpha\varphi_k = \partial_\alpha\delta\varphi_k$ a provedeme integraci per partes (použijeme Gaussovu větu). Integrál na hranici je vzhledem k (1.219) nulový, a proto máme:

$$\int_\Omega \left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} - \partial_\alpha\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\right]\delta\varphi_k\,\mathrm{d}^4x = 0\,.$$

Vzhledem k tomu, že integrace musí dát nulu pro jakoukoli časoprostorovou oblast Ω, musí být i integrand nulový (přesněji řečeno *skoro všude*, tedy až na množiny dimenze menší než 4):

$$\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} - \partial_\alpha\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\right]\delta\varphi_k = 0\,. \tag{1.220}$$

Pokud jsou pole φ_k nezávislá, budou koeficienty lineární kombinace (1.220) nulové (celý výraz má tvar $\Sigma c_k\,\delta\varphi_k = 0$), tedy

$$\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} - \partial_\alpha\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}} = 0\,.$$

Výraz upravíme do standardního tvaru Lagrangeových rovnic

► $$\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{k,\alpha}}\right] - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_k} = 0\,; \qquad k = 1,\ldots,N\,. \tag{1.221}$$

Na rozdíl od Lagrangeových rovnic pro hmotné body a pevná tělesa není v prvním členu jen časová derivace, ale jsou zde derivace podle všech čtyř proměnných. Lagrangeovy rovnice rozepsané pro jedno jediné pole mají tvar:

$$\frac{\partial}{\partial t}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial t)}\right] + \frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial x)}\right] + \frac{\partial}{\partial y}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial y)}\right] + \frac{\partial}{\partial z}\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial(\partial\varphi/\partial z)}\right] - \frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi} = 0\,. \tag{1.222}$$

Poznámka: Lagrangeova funkce není jednoznačně určena. Funkce $\tilde{\mathscr{L}} \equiv \mathscr{L} + \partial_\mu K^\mu$ vede na stejné polní rovnice pro libovolný čtyřvektor K^μ. Této libovůle lze využít ke konstrukci co možná „nejelegantnějšího“ lagranžiánu.

◖ Příklad 1.44: Vlnová rovnice

Nalezněme Lagrangeovy rovnice pro Lagrangeovu funkci skalárního pole φ, která obsahuje jen derivace tohoto pole podle předpisu:

$$\mathscr{L} = \left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial^\mu\varphi\right)\,. \tag{1.223}$$

Řešení: Lagrangeova funkce je skalárem (to zajišťuje jeden horní a jeden dolní index, při změně báze/souřadnicové soustavy se výraz nezmění). Pokud Lagrangeovu funkci rozepíšeme, máme:

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{c^2}\left(\frac{\partial\varphi}{\partial t}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\varphi}{\partial z}\right)^2\,. \tag{1.224}$$

Po provedení všech derivací dá Lagrangeova rovnice (1.222)

$$-\frac{2}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+2\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+2\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+2\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=0 \qquad \Rightarrow$$

$$-\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2\varphi}{\partial t^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial x^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial y^2}+\frac{\partial^2\varphi}{\partial z^2}=0\,.$$

Nejjednodušší varianta Lagrangeovy funkce skalárního pole tedy vede na vlnovou rovnici. V Lagrangeově funkci (1.223) se většinou píše koeficient ½:

► $$\mathscr{L}=\frac{1}{2}\left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial^\mu\varphi\right) \qquad \Rightarrow \qquad \Box\varphi=0\,. \tag{1.225}$$

Důvody jsou dva: Lagrangeovy rovnice dají vlnovou rovnici (bez nutnosti krácení koeficientem 2) a celý výraz (1.225) je analogií kinetické energie (polovina z kvadrátu derivací).

Jiné řešení: Řešme stejný příklad pro Lagrangeovu funkci (1.223) bez rozpisu do komponent. Levá strana Lagrangeových rovnic je:

$$\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\alpha}}\right]-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi}=\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\alpha}}\right]=\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\left(\partial_\alpha\varphi\right)}\right]=$$

$$=\partial_\alpha\frac{\partial}{\partial\left(\partial_\alpha\varphi\right)}\left[\frac{1}{2}\left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial^\mu\varphi\right)\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\partial_\alpha\frac{\partial}{\partial\left(\partial_\alpha\varphi\right)}\left[g^{\mu\nu}\left(\partial_\mu\varphi\right)\left(\partial_\nu\varphi\right)\right]=$$

$$=\frac{1}{2}g^{\mu\nu}\partial_\alpha\left[\delta^\alpha{}_\mu\left(\partial_\nu\varphi\right)+\left(\partial_\mu\varphi\right)\delta^\alpha{}_\nu\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\partial_\alpha\left[\delta^\alpha{}_\mu\left(\partial^\mu\varphi\right)+\left(\partial^\nu\varphi\right)\delta^\alpha{}_\nu\right]=$$

$$=\frac{1}{2}\partial_\alpha\left[\left(\partial^\alpha\varphi\right)+\left(\partial^\alpha\varphi\right)\right]=$$

$$=\partial_\alpha\partial^\alpha\varphi=\Box\varphi\,.$$

Výsledek je opět vlnovou rovnicí

$$\Box\varphi=0\,.$$

Nejkratší řešení:

$$\partial_\alpha\left[\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi_{,\alpha}}\right]-\frac{\partial\mathscr{L}}{\partial\varphi}=\frac{1}{2}\partial_\alpha\frac{\partial}{\partial\varphi_{,\alpha}}\left(\varphi_{,\beta}\varphi^{,\beta}\right)=\frac{1}{2}\partial_\alpha 2\varphi^{,\alpha}=\partial_\alpha\partial^\alpha\varphi=\Box\varphi\,.$$

◗

Kleinovo–Gordonovo pole

► $$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \varphi\right)\left(\partial^\mu \varphi\right) + \frac{1}{2}\kappa^2\varphi^2 \qquad \Rightarrow \qquad (\Box - \kappa^2)\varphi = 0\,. \tag{1.226}$$

Lagrangeova funkce tohoto pole je kvadratická v derivacích i v samotném poli. Druhý člen by odpovídal hustotě potenciální energie v klasické mechanice ($L = T - V$). Výsledná Lagrangeova rovnice je lineární a je vhodnou rovnicí například pro plazmové vlny nebo pro kvantový popis částic se spinem nula.

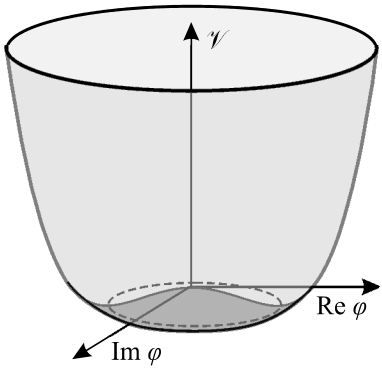
Dno koňakové láhve

► $$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \varphi\right)\left(\partial^\mu \varphi\right) + \frac{1}{2}\kappa^2\varphi^2 - \frac{\beta}{4}\varphi^4 \quad \Rightarrow \quad \Box\varphi - \kappa^2\varphi + \beta\varphi^3 = 0\,. \tag{1.227}$$

Pokud budeme druhý člen interpretovat jako hustotu potenciální energie, dostaneme hodnotu

► $$\mathscr{V} = -\frac{1}{2}\kappa^2\varphi^2 + \frac{\beta}{4}\varphi^4\,.$$

S obdobnou funkcí reálné proměnné jsme se již setkali v kapitole 1.5.2.



Obr. 1.45: Potenciál dna koňakové lahve

Potenciál má válcovou symetrii a nekonečně mnoho minim lokalizovaných na kružnici o poloměru R. Při výběru některého z minim se naruší válcová symetrie. Odpovídající Lagrangeova rovnice je nelineární. Nelineární člen může eliminovat rozplývání vlnového balíku (disperzi) způsobenou lineárním členem. Rovnice má proto některá řešení ve tvaru *solitonu* – vlnového balíku s neproměnným tvarem.

sin-Gordonova rovnice

► $$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \varphi\right)\left(\partial^\mu \varphi\right) - \kappa^2\cos\varphi \qquad \Rightarrow \qquad \Box\varphi - \kappa^2\sin\varphi = 0\,. \tag{1.228}$$

Tato známá nelineární rovnice poskytuje opět solitonová řešení. Pokud provedeme rozvoj trigonometrické funkce do lineárního členu, dostaneme Kleinovu-Gordonovu rovnici, pokud provedeme rozvoj do prvních dvou členů, dostaneme rovnici odpovídající potenciálu „koňakové lahve“.

1.6.2 Kanonicky sdružené pole

Obdobně jako jsme dříve zavedli k dané zobecněné souřadnici kanonicky sdruženou hybnost a poté energii, můžeme i ve spojitém případě definovat kanonicky sdružené pole a hustotu energie vztahy

► $$\pi_k(t,\mathbf{x}) \equiv \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi_{k,t}}; \tag{1.229}$$

► $$\mathscr{H}(t,\mathbf{x}) \equiv \sum_k \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial \varphi_{k,t}} \varphi_{k,t} \right) - \mathscr{L}. \tag{1.230}$$

Analogický výsledek jako dříve dají i Poissonovy závorky mezi poli a sdruženými poli

$$\{\varphi_k(t,\mathbf{x}), \varphi_l(t,\mathbf{x}')\} = 0,$$

► $$\{\pi_k(t,\mathbf{x}), \pi_l(t,\mathbf{x}')\} = 0, \tag{1.231}$$

$$\{\varphi_k(t,\mathbf{x}), \pi_l(t,\mathbf{x}')\} = \delta_{kl}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}').$$

Obdobný je i zápis rovnice pro časový vývoj polí φ_k:

► $$\dot{\varphi}_k = \{\varphi_k, \mathscr{H}\}. \tag{1.232}$$

Ve všech těchto výrazech se jakoby ztratila kovariance (stejný tvar v různých souřadnicových soustavách) rovnic vzhledem k Lorentzově transformaci, výrazy (1.229) až (1.232) nevypadají relativisticky. To je ale jen zdánlivé. Pokud zavedeme tenzor energie a hybnosti vztahem (jde o relativistické zobecnění vztahů 1.226 a 1.227)

$$T^{\alpha}{}_{\beta} \equiv \frac{1}{c}\sum_k \left(\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial(\partial_\alpha \varphi_k)} \partial_\beta \varphi_k \right) - \frac{1}{c} g^{\alpha}{}_{\beta} \mathscr{L}, \tag{1.233}$$

bude hustota energie pole dána složkou

$$\mathscr{H} = cT^0{}_0 \tag{1.234}$$

a hustota hybnosti pole bude úměrná kanonicky sdruženým polím

$$\mathscr{P}_n = T^0{}_n = \sum_k \pi_k \partial_n \varphi_k \qquad \Rightarrow \qquad \vec{\mathscr{P}} = \sum_k \pi_k \vec{\nabla} \varphi_k. \tag{1.235}$$

Veličiny $T^l{}_0$ reprezentují tok energie a $T^l{}_n$ tok hybnosti. Z vyjádření tenzoru (1.233) a polních rovnic (1.221) lze snadno ukázat, že tenzor energie a hybnosti splňuje rovnici kontinuity

$$\partial_\alpha T^{\alpha}{}_{\beta} = 0. \tag{1.236}$$

Ostatní relace lze také snadno přepsat do relativistického tvaru.

1.6.3 Maxwellovy rovnice, elektromagnetické pole

Elektromagnetické pole většinou popisujeme Maxwellovými rovnicemi

► $$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0\,, \tag{1.237}$$

► $$\operatorname{rot}\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\,, \tag{1.238}$$

► $$\operatorname{div}\mathbf{D} = \rho_Q\,, \tag{1.239}$$

► $$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j}_Q + \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\,, \tag{1.240}$$

které doplníme o materiálové vztahy

► $$\begin{aligned} \mathbf{D} &= \varepsilon_0 \mathbf{E} + \mathbf{P}\,, \\ \mathbf{B} &= \mu_0 (\mathbf{H} + \mathbf{M})\,, \end{aligned} \tag{1.241}$$

kde vektor **P** je polarizace prostředí (hustota elektrického dipólového momentu) a **M** je magnetizace (hustota magnetického dipólového momentu).

Potenciály pole

Z rovnice (1.237) plyne existence funkce **A**(*t*, **x**), takové, že

► $$\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{A}\,. \tag{1.242}$$

Rovnice je pak splněna automaticky, protože divergence z rotace každé funkce je nulová. Veličina **A** se nazývá vektorový potenciál. Dosadíme-li vyjádření (1.242) do rovnice (1.238), získáme vztah

$$\operatorname{rot}\left(\mathbf{E} + \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\right) = 0\,,$$

ze kterého plyne existence funkce ϕ takové, že $\mathbf{E} + \partial\mathbf{A}/\partial t = -\nabla\phi$. Rovnice (1.238) je opět splněna automaticky a pro elektrické pole máme vyjádření

► $$\mathbf{E} = -\nabla\phi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}\,. \tag{1.243}$$

Funkci ϕ nazýváme skalární potenciál, v případě stacionárních polí přejde (1.243) ve známý vztah

$$\mathbf{E} = -\nabla\phi\,, \tag{1.244}$$

kde znaménko minus jen odráží fyzikální skutečnost, že působící síla míří do minima potenciální energie. Elektromagnetické pole tak můžeme popsat pouhou čtveřicí veličin: skalárním a vektorovým potenciálem. Tyto čtyři veličiny tvoří relativistický čtyřvektor (viz kapitola 3.3.6 Tenzory a metrika, podrobněji v navazující učebnici [1]).

► $$A^{\mu} = \begin{pmatrix} \phi/c \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}. \tag{1.245}$$

Známe-li čtveřici A^{μ}, určíme elektrické a magnetické pole snadno ze vztahů (1.243) a (1.242). Vektory **E** a **B** jsou tak v jistém smyslu preferovány oproti vektorům **D** a **H**, neboť je můžeme přímo určit z potenciálů. Elektromagnetické pole je derivacemi potenciálů, oba vztahy (1.242) a (1.243) lze jednoduše zapsat za pomoci tenzoru elektromagnetického pole

► $$F^{\mu\nu} \equiv \partial^{\mu} A^{\nu} - \partial^{\nu} A^{\mu} = \begin{pmatrix} 0 & E^x/c & E^y/c & E^z/c \\ -E^x/c & 0 & B^z & -B^y \\ -E^y/c & -B^z & 0 & B^x \\ -E^z/c & B^y & -B^x & 0 \end{pmatrix}. \tag{1.246}$$

Jde o antisymetrický tenzor druhého řádu, který má jen šest nezávislých složek (těmi je elektrické a magnetické pole). Složky pole lze snadno odečíst z příslušných pozic tenzoru.

Nejednoznačnost potenciálů, kalibrační invariance

Již dříve jsme viděli, že potenciály nejsou určeny jednoznačně, dvěma různým potenciálům může odpovídat stejné elektromagnetické pole. Pokud zavedeme nové, přetransformované potenciály za pomoci tzv. *gradientní transformace*

► $$\tilde{A}^{\mu} \equiv A^{\mu} + \partial^{\mu} f\,, \tag{1.247}$$

kde f je zcela libovolná dvakrát spojitě diferencovatelná funkce, pole se nezmění:

$$\tilde{F}^{\mu\nu} = \partial^{\mu}\left(A^{\nu} + \partial^{\nu} f\right) - \partial^{\nu}\left(A^{\mu} + \partial^{\mu} f\right) = \partial^{\mu} A^{\nu} - \partial^{\nu} A^{\mu} = F^{\mu\nu}\,. \tag{1.248}$$

Této libovůle v potenciálech lze s výhodou využít při konstrukci co nejjednodušší varianty Maxwellových rovnic v potenciálech.

Maxwellovy rovnice zapsané za pomoci tenzoru pole

Maxwellovy rovnice (1.237) a (1.238) jsme využili k zavedení potenciálů elektromagnetického pole. Zbývající dvě rovnice se zdrojovými členy můžeme za pomoci tenzoru elektromagnetického pole snadno přepsat do tvaru

► $$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = \mu_0 j^{\mu}\,, \tag{1.249}$$

kde čtyřvektor j^{μ} prezentuje zdroje magnetických polí

$$j^{\mu} \equiv \begin{pmatrix} \rho_Q c \\ \mathbf{j}_Q \end{pmatrix}. \tag{1.250}$$

Tento tvar Maxwellových rovnic je zjevně relativistický.

Maxwellovy rovnice v potenciálech

Přepišme Maxwellovy rovnice ve tvaru (1.249) za pomoci potenciálů:

$$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = \mu_0 j^\mu ;$$

$$\partial_\nu \left(\partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \right) = \mu_0 j^\mu ;$$

$$\partial^\mu \partial_\nu A^\nu - \partial_\nu \partial^\nu A^\mu = \mu_0 j^\mu . \tag{1.251}$$

Druhý člen na levé straně je D'Alambertův vlnový operátor aplikovaný na čtyřpotenciál pole, pravá strana zjevně prezentuje zdroje polí. Jedinou „vadou na kráse" rovnic zapsaných v potenciálech je první člen. Zde využijeme velké libovůle v potenciálech dané kalibrační transformací. Předpokládejme, že veličina $\partial_\nu A^\nu$ je rovna nějaké funkci času a prostoru $F(t, \mathbf{x})$, tj.

$$\partial_\nu A^\nu = F(t, \mathbf{x}) ,$$

a zvolme za pomoci gradientní transformace (1.247) jiný čtyřpotenciál, pro který budeme požadovat, aby

$$\partial_\nu \tilde{A}^\nu = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \partial_\nu A^\nu + \partial_\nu \partial^\nu f = 0 \qquad \Rightarrow \qquad F(t, \mathbf{x}) + \Box f = 0 .$$

Taková gradientní transformace bude vždy existovat. Funkci f, která generuje transformaci, stačí volit tak, aby splňovala rovnici

$$\Box f = -F(t, \mathbf{x}) . \tag{1.252}$$

V nových potenciálech je první člen v rovnici (1.251) nulový a Maxwellovy rovnice získají jednoduchý tvar

$$\Box \tilde{A}^\mu = -\mu_0 j^\mu ; \tag{1.253}$$

$$\partial_\mu \tilde{A}^\mu = 0 . \tag{1.254}$$

Jde o obyčejné vlnové rovnice pro čtyřpotenciál A^μ, u kterých jsou zdrojovými členy složky čtyřvektoru j^μ. Rovnice jsou ještě doplněny Lorenzovou kalibrační podmínkou (1.254). Ukázali jsme, že libovůle potenciálů lze využít k tomu, aby Lorenzova kalibrační podmínka byla splněna. Avšak dokonce ani požadavek na její splnění neurčuje potenciály jednoznačně! Z rovnice (1.252) je zřejmé, že funkce f není určena jednoznačně a lze k ní přičíst jakékoli řešení vlnové rovnice

$$\Box f_0 = 0 . \tag{1.255}$$

Proto je možná ještě další gradientní transformace

$$\tilde{\tilde{A}}^\mu = \tilde{A}^\mu + \partial^\mu f_0 ,$$

kterou lze využít například k vynulování skalárního potenciálu. Uzavřeme tuto partii konstatováním, že můžeme vždy zvolit takové potenciály, aby Maxwellovy rovnice měly jednoduchý tvar

► $$\Box A^\mu = -\mu_0 j^\mu ;$$
$$\partial_\mu A^\mu = 0 . \tag{1.256}$$

Lagrangeova formulace Maxwellových rovnic

Hustota Lagrangeovy funkce pro interakci nabitých částic s polem má tvar

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{\text{part}} + \mathscr{L}_{\text{int}} + \mathscr{L}_{\text{field}} \,. \tag{1.257}$$

První část popisuje pohyby částic a věnovali jsme se jí v kapitole 1.4.1. Interakční část musí být nějakou kombinací čtyřtoku j^μ (popisuje částice) a čtyřpotenciálu A^μ (popisuje pole). Hned nejjednodušší skalární varianta vede na správné polní rovnice:

$$\mathscr{L}_{\text{int}} = j_\mu A^\mu \,. \tag{1.258}$$

Pro bodovou částici je čtyřtok dán vztahem

$$\begin{pmatrix} Qc\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \\ Q\mathbf{v}\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}') \end{pmatrix}, \tag{1.259}$$

vektor $\mathbf{x}$ je polohový vektor částice a vektor $\mathbf{x}'$ popisuje polohu pozorovatele. Lagrangeova funkce interakce bude dána integrací

$$L_{\text{int}} = \int \mathscr{L}_{\text{int}} \,\mathrm{d}^3\mathbf{x}' = \int j_\mu A^\mu \,\mathrm{d}^3\mathbf{x}' = \int \left(-Q\phi + Q\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}\right)\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,\mathrm{d}^3\mathbf{x}' \quad \Rightarrow$$

$$L_{\text{int}} = -Q\phi(t,\mathbf{x}) + Q\mathbf{A}(t,\mathbf{x})\cdot\mathbf{v} \,. \tag{1.260}$$

Polní část Lagrangeovy funkce musí být tvořena tenzorem elektromagnetického pole, nejjednodušším skalárem je kombinace $F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}$ a polní část Lagrangeovy funkce by měla být tomuto výrazu úměrná. Konstantu úměrnosti určíme tak, abychom dostali správné polní rovnice (v tomto případě Maxwellovy rovnice):

$$\mathscr{L}_{\text{field}} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} \tag{1.261}$$

Obě části hustoty Lagrangeovy funkce pro elektromagnetické pole jsou

$$\mathscr{L}_{\text{elmg}} = \mathscr{L}_{\text{field}} + \mathscr{L}_{\text{int}} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu}F^{\mu\nu} + j_\mu A^\mu \tag{1.262}$$

Ověřme na závěr, že polní Lagrangeovy rovnice dají Maxwellovy rovnice:

$$\partial_\alpha \left[\frac{\partial \mathscr{L}}{\partial A^\beta{}_{,\alpha}}\right] - \frac{\partial \mathscr{L}}{\partial A^\beta} = 0 \,;$$

$$-\frac{1}{4\mu_0}\partial^\alpha \left[\frac{\partial\left(F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}\right)}{\partial A^{\beta,\alpha}}\right] - j_\beta = 0 \,;$$

$$-\frac{1}{4}\partial^\alpha \left[2F_{\mu\nu}\frac{\partial F^{\mu\nu}}{\partial A^{\beta,\alpha}}\right] = \mu_0 j_\beta \,;$$

$$-\frac{1}{2}\partial^{\alpha}\left[\left(\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu}\right)\frac{\partial}{\partial(\partial^{\alpha}A^{\beta})}\left(\partial^{\mu}A^{\nu}-\partial^{\nu}A^{\mu}\right)\right]=\mu_0 j_{\beta}\,;$$

$$-\frac{1}{2}\left[\partial^{\alpha}\left(\partial_{\mu}A_{\nu}-\partial_{\nu}A_{\mu}\right)\left(\delta^{\mu}{}_{\alpha}\delta^{\nu}{}_{\beta}-\delta^{\nu}{}_{\alpha}\delta^{\mu}{}_{\beta}\right)\right]=\mu_0 j_{\beta}\,;$$

$$-\frac{1}{2}\partial^{\alpha}\left[\partial_{\alpha}A_{\beta}-\partial_{\beta}A_{\alpha}+\partial_{\alpha}A_{\beta}-\partial_{\beta}A_{\alpha}\right]=\mu_0 j_{\beta}\,;$$

$$-\partial^{\alpha}F_{\alpha\beta}=\mu_0 j_{\beta}\,;$$

$$-F^{\alpha\beta}{}_{,\alpha}=\mu_0 j^{\beta}\,;$$

$$F^{\beta\alpha}{}_{,\alpha}=\mu_0 j^{\beta}\,.$$

což jsou Maxwellovy rovnice ve tvaru (1.249).

Lorentzova pohybová rovnice

Pro pohyb částic samozřejmě nadále platí Lorentzova pohybová rovnice (1.47), kterou lze snadno zapsat za pomoci tenzoru elektromagnetického pole. Zaveďme nejprve vlastní čas částice dτ jako čas plynoucí přímo u částice. Pro interval v místě částice máme

$$\mathrm{d}s^2=-c^2\mathrm{d}t^2+\mathrm{d}\mathbf{x}^2=-c^2\mathrm{d}\tau^2\,. \tag{1.263}$$

Mezi vlastním a obecným časem tedy existuje vztah

$$\begin{aligned}-c^2\mathrm{d}\tau^2&=-c^2\mathrm{d}t^2+\mathrm{d}\mathbf{x}^2 \qquad \Rightarrow\\ \mathrm{d}\tau&=\sqrt{1-v^2/c^2}\;\mathrm{d}t=\frac{\mathrm{d}t}{\gamma}\end{aligned}\,. \tag{1.264}$$

Vlastní čas je invariantem, který využijeme při zavedení čtyřrychlosti a čtyřhybnosti:

► $$U^{\alpha}\equiv\frac{\mathrm{d}x^{\alpha}}{\mathrm{d}\tau}\,; \tag{1.265}$$

► $$P^{\alpha}\equiv m_0 U^{\alpha}\,. \tag{1.266}$$

Pohybová rovnice nabité částice má potom tvar

► $$\frac{\mathrm{d}P^{\alpha}}{\mathrm{d}\tau}\equiv QF^{\alpha\beta}U_{\beta}\,. \tag{1.267}$$

Pouhým dosazením za tenzor elektromagnetického pole (1.246) a s využitím rovnosti $\mathrm{d}/\mathrm{d}\tau=\gamma\,\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ snadno ověříme, že vztah (1.267) je jen elegantním přepisem Lorentzovy pohybové rovnice.

Shrnutí

Uveďme nyní klíčové Lagrangeovy funkce a integrály akce $S = \int L \, \mathrm{d}t = \int \mathscr{L} \, \mathrm{d}^4x$. pro elektřinu a magnetizmus

	částice	interakce	pole
$\mathscr{L}$	–	$j_\mu A^\mu$	$-\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu}$
L	$-m_0 c^2 \sqrt{1 - \frac{\mathbf{v}^2}{c^2}}$	$-Q\phi + Q\mathbf{A} \cdot \mathbf{v}$	–
S	$-m_0 c^2 \int \mathrm{d}\tau$	$\int j_\mu A^\mu \, \mathrm{d}^4x$	$-\frac{1}{4\mu_0} \int F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \, \mathrm{d}^4x$

Pro hmotný bod postrádá smysl hustota Lagrangeovy funkce, i když je možné ji v principu napsat. U vyjádření částicového lagranžiánu jsme využili vztah $\mathrm{d}\tau = (1 - \mathbf{v}^2/\mathrm{c}^2)^{1/2} \mathrm{d}t$. Stejně tak postrádá smysl celková Lagrangeova funkce pro pole, které je rozprostřené v času a prostoru. Pokud vezmeme v úvahu pouze částicovou Lagrangeovu funkci, dostaneme pohybovou rovnici volné částice:

$$\frac{\mathrm{d}P^\alpha}{\mathrm{d}\tau} = 0 \,. \tag{1.268}$$

Pokud vezmeme v úvahu Lagrangeovy funkce pro částici a pro interakce, dostaneme pohybovou rovnici

$$\frac{\mathrm{d}P^\alpha}{\mathrm{d}\tau} = QF^{\alpha\beta} U_\beta \,. \tag{1.269}$$

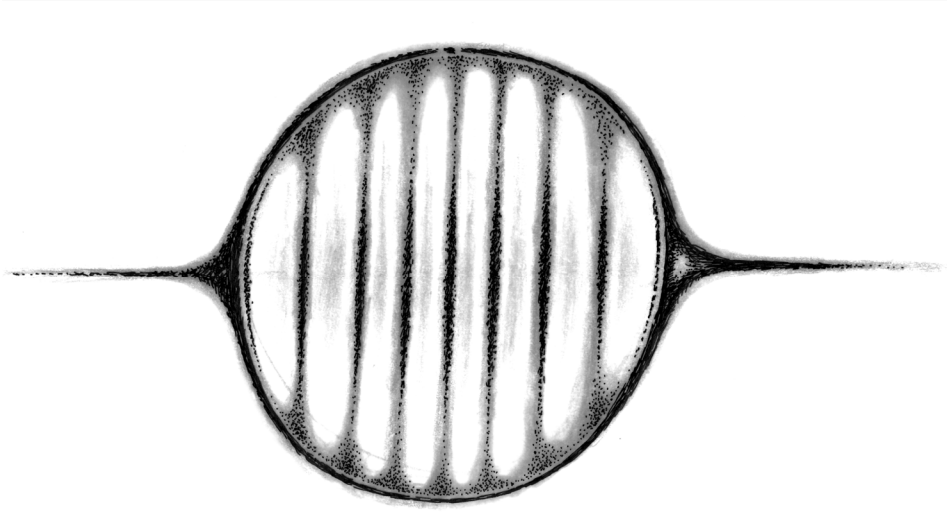
Pokud vezmeme v úvahu pouze Lagrangeovu funkci pro pole, dostaneme Maxwellovy rovnice ve vakuu:

$$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = 0 \,. \tag{1.270}$$

A pokud uvážíme polní a interakční části Lagrangeovy funkce, dostaneme Maxwellovy rovnice se zdrojovými členy:

$$F^{\mu\nu}{}_{,\nu} = \mu_0 j^\mu \,. \tag{1.271}$$

2. Kvantová teorie



2.1 Úvod

2.1.1 Mikrosvět a makrosvět

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

První jevy v mikrosvětě, které byly v příkrém rozporu s teoretickou mechanikou, byly objeveny na počátku 20. století. Jejich analýza vedla ke zrodu kvantové teorie – jedné ze dvou nejúspěšnějších teorií v dějinách lidstva (druhou je Einsteinova obecná teorie relativity). Předpovědi dnešní kvantové teorie se shodují s experimentem na mnoho platných cifer. Základní rovnice a vztahy zůstávají shodné s teoretickou mechanikou, platí však pro zcela jiné objekty. Například Lieova algebra Poissonových závorek je aplikována na operátory, které představují dynamické proměnné. Proto je nutné se před studiem kvantové teorie důkladně seznámit s kapitolami 3.4 a 3.3.5.

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

► Diskrétní hodnoty některých dynamických proměnných

V určitých situacích můžeme u sledované veličiny naměřit jen některé hodnoty a žádné jiné. Nejčastěji jde o energii nebo moment hybnosti. V makrosvětě jsou měřené hodnoty vždy spojité. Přesněji řečeno jsou tak blízko u sebe, že je nejsme schopni rozlišit.

► Dualismus vln a částic

Objekty mikrosvěta se mohou chovat někdy jako vlny a jindy jako částice. Například světlo se při fotoelektrickém jevu projevuje jako částice (fotony) a při interferenci nebo ohybu jako vlnění. A nejde jen o světlo. Elektron, který si představujeme jako částici, se v elektronovém mikroskopu chová jako vlnění a v jiných situacích má vlnovou povahu. Obdobně je to s neutrony a dalšími elementárními „částicemi“.

► Nekomutativnost aktu měření

Při měření hodnot dvou dynamických proměnných (například polohy a rychlosti) může výsledek záležet na pořadí provedení měření. Akt měření totiž ovlivňuje stav systému, po měření se systém obecně nachází v jiném stavu než před měřením.

► Relace neurčitosti

Zvýšení přesnosti měření jedné dynamické proměnné sníží v některých případech přesnost měření jiné dynamické proměnné. Tato měření se navzájem ovlivňují a jsou nekomutativní. Vždy se ovlivní měření určité zobecněné souřadnice a jí odpovídající zobecněné hybnosti.

► Nedeterminizmus kvantové teorie

Dva experimenty připravené za stejných podmínek mohou dopadnout různě. Při provedení mnoha pokusů zjistíme, že výsledky mají pravděpodobnostní charakter. Jsme tedy schopni předpovědět jen to, s jakou pravděpodobností naměříme ten či onen možný jev, nikoli to, který jev konkrétně nastane.

► Superpozice stavů

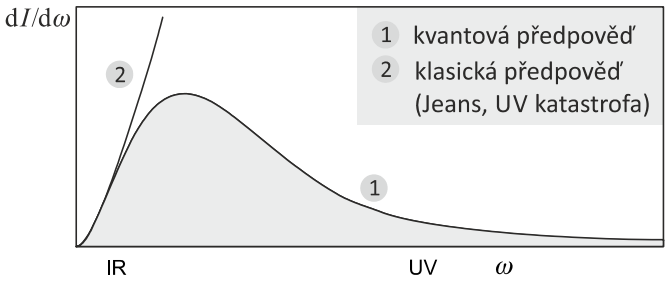
V makrosvětě nikdy nemůžete být na dvou místech současně, například v posluchárně na přednášce a v restauraci na večírku. V mikrosvětě taková situace možná je. Objekty mikrosvěta mohou být, a také běžně jsou, v superpozici dvou i více stavů.

2.1.2 Experimenty, které vedly ke kvantové teorii

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

Záření absolutně černého tělesa

V absolutně černém tělese (lze za ně považovat například každou hvězdu) je v rovnováze látka a záření při nějaké konkrétní teplotě *T*. Sledujeme-li vyzařování absolutně černého tělesa, zjistíme, že na různých frekvencích vyzařuje s různou intenzitou. Experimentálně pozorovaný průběh energie vyzářené na jednotkovou frekvenci je na obrázku. Teoretické výpočty křivky záření absolutně černého tělesa, které prováděli lord Rayleigh, James Jeans a Wilhelm Wien, vedly k odlišným závislostem. Buď divergovaly v infračervené (IR), nebo v ultrafialové (UV) oblasti spektra.



Obr. 2.1: Záření absolutně černého tělesa

Správnou formuli uhodnul až Max Planck v srpnu 1900 tím, že zkoušel porovnávat různé funkce s naměřenými údaji. Jeho výsledek zněl: $\mathrm{d}I/\mathrm{d}\omega \sim \omega^3 \exp[-\mathrm{const}\,\omega/T]$. Za další dva měsíce odvodil Planck tuto závislost i teoreticky za předpokladu, že energie světla o určité frekvenci ω se nemění spojitě, ale je celistvým násobkem základního energetického kvanta

$$E = \hbar\omega; \qquad \hbar = 1{,}05457\times10^{-34}\ \mathrm{Js}. \tag{2.1}$$

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

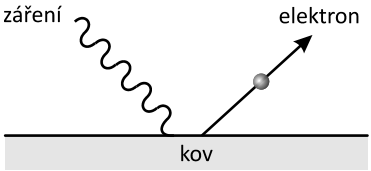
Poznámka: Planck ve svých úvahách použil namísto kruhové frekvence obyčejnou frekvenci, a tak měla jím zavedená konstanta úměrnosti jinou hodnotu:

$$E = h\nu; \qquad h = 2\pi\hbar = 6.62607\times10^{-34}\ \mathrm{Js}. \tag{2.2}$$

Skutečný fyzikální význam má redukovaná Planckova konstanta (je elementárním kvantem momentu hybnosti), kterou označujeme přeškrtnutým písmenem $\hbar$ a kterou budeme používat v této učebnici.

Fotoelektrický jev (fotoefekt)

Při dopadu světla (elektromagnetického záření) na povrch kovu může být z kovu vytržen elektron, který opustí povrch kovu. K uvolňování elektronů z kovu dochází při frekvencích světla vyšších než prahová frekvence ω_0, která je pro daný kov charakteristická. Máme-li k dispozici světlo s frekvencí nižší než prahovou, emise elektronů nenastane, byť bychom použili světlo se sebevětší intenzitou. Tento experiment je v rozporu s představou o světle jako elektromagnetickém vlnění. K fotoefektu by mělo docházet při každé frekvenci a dostatečnou energii k emisi by mělo jít získat zvýšením intenzity dopadajícího světla.



Obr. 2.2: Fotoelektrický jev

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

$$\hbar\omega = E_{\mathrm{i}} + \frac{1}{2} m_{\mathrm{e}} v^2 \tag{2.3}$$

se nazývá Einsteinova rovnice pro fotoefekt. Energie dopadlého fotonu se spotřebuje na vytržení elektronu z kovu a na kinetickou energii vylétávajícího elektronu. Elektromagnetické vlnění tedy můžeme považovat za soubor fotonů. Proto i při záření absolutně černého tělesa se mění energie záření o dané frekvenci skokem – tento skok představuje přírůstek nebo úbytek jednoho fotonu.

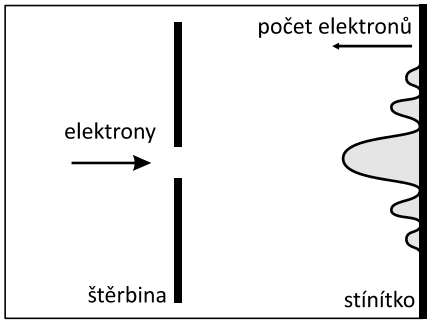
Poznámka: Albert Einstein získal za objasnění fotoelektrického jevu Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1921. Jeho obecná relativita byla sice významnějším počinem, ale v té době ji mnoho fyziků považovalo spíže za kontroverzní hypotézu než za novou teorii gravitační interakce.

Comptonův jev

Arthur Compton v roce 1923 zjistil, že rentgenové paprsky odražené od povrchu grafitu mění svoji vlnovou délku. Podle klasických představ by vlny měly rozkmitat povrchové elektrony a ty generovat vlnu se stejnou frekvencí. Vysvětlení bylo nakonec jednoduché. Fotony se opět chovají jako částice, srážejí se s elektrony a při srážce ztrácí část energie, a proto mění svou vlnovou délku. V extrémně horkém plazmatu může docházet k opačnému jevu, fotony zde při srážkách s energetickými elektrony naopak energii získávají, hovoříme o tzv. *inverzním Comptonově jevu*.

Ohyb elektronů

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



Obr. 2.3: Ohyb elektronu na štěrbině

Dnes jsou vlnové vlastnosti elektronů využívány například v elektronových mikroskopech. Elektrony mají výrazně kratší vlnovou délku než viditelné světlo, a proto je rozlišovací schopnost elektronového mikroskopu podstatně vyšší než optického. Poprvé byly vlnové vlastnosti elektronu pozorovány americkými fyziky Clintonem Davissonem

a Lesterem Germerem v roce 1927. Zkoumali odraz elektronů od povrchu niklu. Po vyžíhání niklu došlo k rekrystalizaci a odražené elektrony začaly vykazovat na přesných velkých krystalech ohybový obrazec.

Poznámka: Částice popisujeme čtveřicí veličin (E, $\mathbf{p}$). Definice energie E a hybnosti $\mathbf{p}$ souvisí se symetriemi při posunutí v čase a v prostoru (viz teorém Noetherové v kapitole 1.2). Vlnění popisujeme čtveřicí veličin (ω, $\mathbf{k}$). Úhlová frekvence ω je definována jako změna fáze vlnění s časem $\omega = \partial\varphi/\partial t$ a vlnový vektor $\mathbf{k}$ je změnou fáze vlnění s prostorovými souřadnicemi $\mathbf{k} = \partial\varphi/\partial\mathbf{x}$. Při periodickém ději s konstantní periodou T v čase a λ v prostoru (vlnová délka) lze psát $\omega = 2\pi/T$, $k = 2\pi/\lambda$. Louis de Broglie vyslovil hypotézu, že objekty mikrosvěta se chovají jako vlny i jako částice (hovoříme o tzv. dualismu vln a částic). Převodní vztah dnes píšeme ve tvaru:

► $$E = \hbar\omega, \qquad \mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}. \tag{2.4}$$

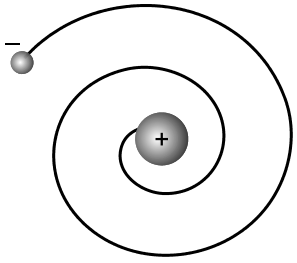
Pokud bychom používali přirozenou soustavu jednotek, která se volí tak, aby $\hbar = 1$, měly by vztahy (2.4) ještě jednodušší tvar. Často nás zajímá vlnová délka vlnění odpovídajícího konkrétní částici, například elektronu v elektronovém mikroskopu. Z druhého vztahu (2.4) máme $mv = 2\pi\hbar/\lambda$ a tedy

$$\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv}. \tag{2.5}$$

Existence atomu

Podle klasického planetárního modelu atomu obíhají záporně nabité elektrony kolem kladně nabitého jádra tak, jako ve Sluneční soustavě obíhají planety kolem Slunce. Planety jsou na oběžné dráze drženy gravitační silou, zatímco u elektronů v obalu je odstředivá síla vyrovnána přitažlivou Coulombovou silou.

Mezi gravitačními a elektromagnetickými jevy je ale podstatný rozdíl. Z Maxwellovy teorie elektromagnetického pole plyne, že každá nabitá částice, která se pohybuje se zrychlením, vyzařuje elektromagnetické vlnění a ztrácí tak energii. Při kruhovém pohybu elektronu kolem jádra se mění směr rychlosti, zrychlení $\mathrm{d}\mathbf{v}/\mathrm{d}t$ je nenulové (míří do centra atomu, jde o dostředivé zrychlení) a elektron ztrácí energii zářením. Měl by se proto pohybovat po spirále a nakonec dopadnout na jádro atomu. Tento proces by měl například pro vodík trvat pouhých 10^{-11} s. Podle klasické teorie by tedy za velice krátkou dobu neměly žádné atomy existovat! Na tento paradox upozornil poprvé dánský fyzik Niels Bohr.



Obr. 2.4: Paradox atomového obalu

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

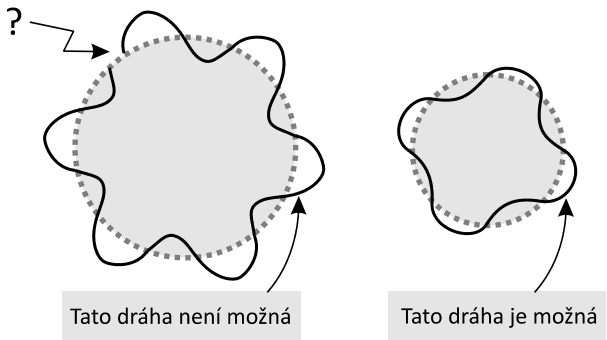
5) Elektrony se pohybují jen po tzv. *stacionárních drahách* – tj. po takových drahách, ve kterých je odpovídající de Broglieho vlnová délka ze vztahu (2.5) „namotána" na oběžnou dráhu tj. obvod dráhy je *n*-násobkem vlnové délky. Výsledkem je jednoduchá kvantovací podmínka

$$2\pi r_n = n\lambda; \qquad \lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv_n}. \tag{2.6}$$

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

6) Na stacionární dráze elektron nezáří.

7) Při přeskoku elektronu mezi dvěma stacionárními hladinami dojde k vyzáření fotonu o energii odpovídající rozdílu energií těchto hladin.



Obr. 2.5: Bohrův model atomu

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

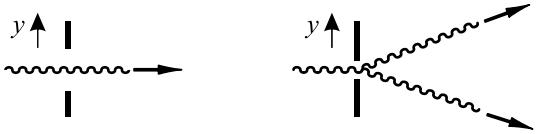
Heisenbergovy relace neurčitosti

Při měření polohy a hybnosti objektu mikrosvěta budou nepřesnosti měření Δx, Δp splňovat relaci, kterou objevil Werner Heisenberg

► $$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.7}$$

Čím přesněji určíme polohu objektu, tím méně přesně určíme odpovídající hybnost a naopak. Samotný akt měření ovlivňuje náš objekt, ale relace (2.7) je splněna i tehdy, neprovedeme-li měření vůbec. Jde o principiální hranici danou přírodou, za kterou nelze nahlédnout. Tato relace platí pro jakoukoli zobecněnou souřadnici a jí odpovídající zobecněnou hybnost.

Například obyčejný ohyb světla na štěrbině lze chápat jako důsledek relací neurčitosti pro fotony. Průchod fotonů štěrbinou není nic jiného než pokus o určení jejich polohy y s přesností Δy (velikost štěrbiny). Fotony, které prošly štěrbinou, určitě měly v okamžiku průchodu souřadnici y rovnou souřadnici y štěrbiny. Zmenšíme-li šířku štěrbiny Δy, zvýšíme přesnost měření y; podle relací (2.7) se ale zvýší nepřesnost Δp_y určení odpovídající složky hybnosti. Výsledkem je známý ohybový jev – fotony za štěrbinou vyletují do různých směrů se střední kvadratickou fluktuací hybnosti Δp_y danou Heisenbergovými relacemi neurčitosti.



Obr. 2.6: Ohyb částice na štěrbině a relace neurčitosti

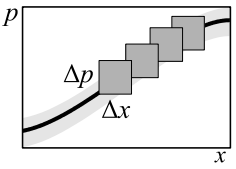
Výčet experimentálních faktů, které jsme uvedli výše, není zdaleka úplný. Všechny ale přispěly ke zrodu kvantové teorie popisující pro nás nezvyklý svět atomů a elementárních částic.

2.2 Základní principy kvantové teorie

Jak už víme, klasická mechanika selhala při popisu dějů mikrosvěta zejména proto, že je postavena na komutujících objektech. V mikrosvětě děje ale nekomutují. Základním cílem bude tedy místo dynamických proměnných používat nekomutující objekty (operátory) a nalézt vztah mezi operátory a reálnými měřenými veličinami. Základy matematiky, kterou je třeba znát pro pochopení kvantové teorie a pro studium této učebnice, naleznete v kapitole 3.4, se kterou byste se měli seznámit, než budete číst dále.

2.2.1 Základní axiomy a definice

I. Redefinice stavu



V klasické mechanice je stav částice určen polohou a hybností. Vzhledem k tomu, že v mikrosvětě nelze současně tyto veličiny měřit a měření jedné ovlivní měření druhé, je nutné pojem stavu definovat novým způsobem. Fázové trajektorie již nelze v mikrosvětě popsat křivkami. Vnímáme je s přesností danou relacemi neurčitosti $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$. Můžeme si představit, že fázovou trajektorii vidíme rozmazanou čáru s rozlišením daným obdélníčkem o ploše $\hbar/2$ (pokud sledujeme jednu souřadnici a jí odpovídající hybnost). Zaveďme si nejprve některé pojmy.

Kompatibilita: Řekneme, že dvě dynamické proměnné jsou kompatibilní, jestliže měření jedné veličiny neovlivní měření veličiny druhé. Příkladem kompatibilních proměnných jsou souřadnice (x, y), příkladem nekompatibilních proměnných jsou souřadnice a jí odpovídající hybnost (x, p_x). Kompatibilita je symetrická vlastnost:

$$(A \text{ komp } B) \quad \Rightarrow \quad (B \text{ komp } A) \ . \tag{2.8}$$

Kompatibilita ale není tranzitivní vlastnost. Z toho, že $(x \text{ komp } y) \wedge (y \text{ komp } p_x)$ neplyne, že by muselo platit $(x \text{ komp } p_x)$. Obecně můžeme psát

$$(A \text{ komp } B) \wedge (B \text{ komp } C) \quad \not\Rightarrow \quad (A \text{ komp } C) \ . \tag{2.9}$$

Úplná množina pozorovatelných: Jde o maximální nezávislou množinu vzájemně kompatibilních dynamických proměnných. Jakákoli další dynamická proměnná už s nimi není kompatibilní. Například v nerelativistické teorii jsou nejznámější úplné množiny pozorovatelných (x, y, z) nebo (p_x, p_y, p_z). Pro centrální pole je úplnou množinou pozorovatelných také energie, druhá mocnina momentu hybnosti a jeho jedna složka (E, L^2, L_3). Současně lze tedy změřit všechny tři souřadnice nebo všechny tři složky hybností. Nelze již ale současně změřit všechny tři složky momentu hybnosti.

Stav systému: Řekneme, že známe stav systému, známe-li výsledek měření některé úplné množiny pozorovatelných. Stavem tedy nazveme jen to, co lze ve skutečnosti současně změřit.

Základním rysem nové teorie musí být nekomutující objekty – operátory. Místo dynamických proměnných z klasické mechaniky (souřadnice, hybnost, energie, moment hybnosti,…) budeme používat operátory (operátor souřadnice, hybnosti,…). Nekomu-

tativnost těchto operátorů bude vyjadřovat nekomutativnost aktu měření dynamických proměnných v mikrosvětě. Veličiny naměřené přístrojem v mikrosvětě jsou reálná čísla, někdy spojitá (poloha částice), někdy diskrétní (například jednotlivé hladiny energie elektronu vázaného v atomu). Jak získat z operátoru dynamické proměnné sadu reálných čísel spojitého nebo diskrétního charakteru? Takovou sadou je právě spektrum hermitovských operátorů (viz kapitola 3.4.5 Spektrální teorie). *Dynamickým proměnným budeme tedy přiřazovat hermitovské operátor*y.

Každý operátor působí na prvky nějakého Hilbertova prostoru $\mathcal{H}$. Musíme se tedy ptát, jaký význam bude v naší teorii mít sám Hilbertův prostor a také prvky, na které operátory působí. Později uvidíme, že příliš nezáleží na volbě Hilbertova prostoru. Podstatné jsou spíše vztahy mezi dynamickými proměnnými, nyní operátory. Kvantová mechanika založená na prostoru $\mathcal{L}^2$ funkcí integrovatelných s kvadrátem je známá Schrödingerova vlnová mechanika vedoucí na Schrödingerovu rovnici a vlnové funkce. Kvantová teorie založená na prostoru l^2 posloupností sčitatelných s kvadrátem je Heisenbergova maticová mechanika. Obě teorie se na první pohled zdají naprosto odlišné. Přesto vlastní čísla operátorů v obou teoriích jsou stejná a obě teorie tak dávají stejné předpovědi. Hilbertův prostor se všemi svými prvky a s operátory, které na prvky působí, koresponduje s vlastnostmi celého systému z klasické mechaniky. *Místo systému budeme proto v kvantové teorii hovořit o Hilbertově prostoru daného systému* (například Hilbertův prostor elektronu).

Zbývá rozluštit poslední hádanku – k čemu jsou prvky Hilbertova prostoru? Již v úvodu jsme si řekli, že v mikrosvětě sám akt měření ovlivní stav systému. Před měřením je systém v jiném stavu než po měření. Akt měření dynamické proměnné zastupuje v kvantové teorii hermitovský operátor této proměnné. Působením tohoto operátoru na prvek prostoru dostáváme jiný prvek tohoto prostoru. A to je přesně to, co hledáme. *Prvky (vektory) prostoru tedy představují stav systému*. Akt měření koresponduje s působením příslušného operátoru na stav (prvek prostoru) a nový stav je prvek, který vznikl působením operátoru.

Vlastní číslo operátoru prezentuje naměřenou hodnotu a vypovídá tak o stavu systému. Víme už, že násobky každého vlastního vektoru jsou opět vlastním vektorem. V $\mathcal{H}$ tedy existuje k danému vlastnímu číslu celý vlastní směr (paprsek). Stavu systému proto musí odpovídat celý paprsek v $\mathcal{H}$, nikoli jen jeden jediný vektor. Přicházíme tak ke třem základním *axiomům* kvantové teorie, které říkají, jak spolu korespondují klasické a kvantové pojmy:

systém	$\rightarrow$	Hilbertův prostor $\mathcal{H}$
stav systému	$\rightarrow$	paprsek natažený na $\|\psi\rangle$
dynamická proměnná A	$\rightarrow$	hermitovský operátor $\hat{\mathbf{A}}$

S linearitou budované teorie se pojí velmi důležitý princip:

■ **Princip superpozice:** Nechť $|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$ a $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$ a reprezentují dva různé stavy systému. Potom je každý vektor $\alpha_1|\varphi\rangle + \alpha_2|\psi\rangle$ také fyzikálně realizovatelný stav. Bez tohoto požadavku by nebylo možné vybudovat lineární teorii. Navíc jde o již výše zmíněnou vlastnost kvantového světa. Systém v mikrosvětě může být (na rozdíl od makrosvěta) v superpozici více stavů.

II. Měření v kvantové teorii

Akt měření dynamické proměnné A v nějakém stavu znamená aplikaci operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ této dynamické proměnné na daný stav $|\psi\rangle$. Operátorem $\hat{\mathbf{A}}$ 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, můžeme na systému naměřit jen některou z vlastních hodnot $\{a_j\}$ operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ této dynamické proměnné:

$$\hat{\mathbf{A}}|j\rangle = a_j\ |j\rangle\,. \tag{2.10}$$

■ **Postulát B:** Pozorování dynamické proměnné A na systému, který byl připraven ve vlastním stavu $|j\rangle$ operátoru $\hat{\mathbf{A}}$, 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

$$\langle A\rangle = \langle\psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle\,. \tag{2.11}.$$

Poznámka 1: Opakovaná měření si nemusíme představovat tak, že bychom na stejném systému opakovali neustále tatáž měření. V praxi by to nebylo proveditelné. Těžko můžeme na jednom jediném elektronu zopakovat nějaké měření. Musíme mít připraveno velké množství systémů ve stejném stavu (například svazek elektronů) a opakovat měření na mnoha různých elektronech (systémech).

Poznámka 2: Výraz pro střední hodnotu je nejjednodušším možným výrazem složeným z operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ a stavu $|\psi>$, který dá jako výsledek reálné číslo. Střední hodnotu bývá zvykem označovat $\langle A\rangle$ nebo $\overline{A}$.

Poznámka 3: Automaticky předpokládáme, že stavové vektory jsou normovány k jedné. Není-li stavový vektor normován, musíme výraz pro střední hodnotu vydělit ještě kvadrátem normy stavového vektoru:

► $$\langle A\rangle = \frac{\langle\psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle}\,. \tag{2.12}$$

Poznámka 4: Výraz pro střední hodnotu rozepsaný v prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ dá:

$$\langle A\rangle = \frac{\int \psi^*(\mathbf{x})\,\hat{\mathbf{A}}\,\psi(\mathbf{x})\,\mathrm{d}^3\mathbf{x}}{\int \psi^*(\mathbf{x})\,\psi(\mathbf{x})\,\mathrm{d}^3\mathbf{x}}\,. \tag{2.13}$$

Poznámka 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 $|\, n >$ nebo nespočetné báze $|\, x >$, bude mít rozvoj tvar (viz kapitola 3.4.4 Rozvoj prvku do báze)

$$|\,\psi\,\rangle = \sum |\,n\,\rangle\langle\, n\,|\,\psi\,\rangle = \sum \psi_n\,|\,n\,\rangle \text{ resp.}$$
$$|\,\psi\,\rangle = \int |\,x\,\rangle\langle\, x\,|\,\psi\,\rangle\,\mathrm{d}x = \int \psi(x)|\,x\,\rangle\mathrm{d}x\,. \tag{2.14}$$

Koeficienty rozvoje ψ_n, respektive $\psi(x)$ chápeme jako *amplitudu 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 normovanosti stavu k jedné okamžitě plyne

$$\sum \psi_n^* \psi_n = 1\,, \text{ resp.} \qquad \int \psi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x = 1 \tag{2.15}$$

a výrazy

► $$w_n = \psi_n^* \psi_n\,, \text{ resp.} \qquad w(x) = \psi^*(x)\psi(x) \tag{2.16}$$

proto chápeme jako pravděpodobnost realizace stavu $|\, n\,\rangle$ resp. hustotu pravděpodobnosti nalezení systému ve stavu $|\, x\,\rangle$. Pravděpodobnosti jsou automaticky normovány k jedné. Druhý ze vztahů (2.14) představuje superpozicí systému v několika polohách.

IV. Princip korespondence

Posledním ze základních principů kvantové teorie je princip korespondence. Vymezuje, které části z teoretické mechaniky je možné převzít v kvantové teorii.

■ **Princip korespondence pro základní relace.** Základní relace mezi dynamickými proměnnými v teoretické mechanice a příslušnými operátory v kvantové mechanice se mohou lišit jen pořadím operátorů.

■ **Princip korespondence pro algebru Poissonových závorek.** Struktura Poissonových závorek v teoretické mechanice je shodná se strukturou komutátorů v kvantové teorii:

$$\begin{matrix} A \;\to\; \hat{\mathbf{A}} \\ B \;\to\; \hat{\mathbf{B}} \\ C \;\to\; \hat{\mathbf{C}} \end{matrix} \qquad \Rightarrow \qquad \{A,B\} = C \;\to\; [\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] \;=\; k\,\hat{\mathbf{C}}\,.$$

První část principu korespondence platí pro jednoduché relace mezi dynamickými proměnnými, které neobsahují derivace. Například definice Hamiltonovy funkce v potenciálním poli V

$$H \;\equiv\; \frac{p_x^2 + p_y^2 + p_z^2}{2m} + V(x,y,z) \tag{2.17}$$

přejde v definici Hamiltonova operátoru

► $$\hat{\mathbf{H}} \;\equiv\; \frac{\hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{Y}},\hat{\mathbf{Z}})\,. \tag{2.18}$$

Výraz pro potenciální energii je typickou funkcí operátoru (viz kapitoly 3.4.2, 3.4.5). Pro výrazy typu $A = xp$ nelze kvantový analog jednoznačně určit. Může jím být buď

$$\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}, \text{ nebo } \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{X}}.$$

Operátory nekomutují, a proto záleží na jejich pořadí. Správná varianta z obou možných musí být vybrána na základě experimentu. Stejně tak můžeme z různých Lagrangeových funkcí téhož systému obdržet různé kvantové teorie a správnou variantu je třeba opět vybrat na základě toho, jak se ve skutečnosti chová příroda.

Druhá část principu korespondence se týká Poissonových závorek – výrazů, které v klasické mechanice obsahují derivace dynamických proměnných. Poissonovým závorkám v kvantové teorii odpovídají komutátory dynamických proměnných. Nelze však položit rovnost mezi komutační relací a Poissonovou závorkou. Důvody jsou hned dva:

1) *rozměrový*: Poissonova závorka obsahuje derivace, které do výrazů vnášejí fyzikální rozměr, komutátory nikoli. Proto je třeba použít rozměrový převodní koeficient k.
2) *principiální*: Dynamickým proměnným v kvantové teorii můžeme přiřazovat jen hermitovské operátory (mají reálná vlastní čísla, která interpretujeme jako měřitelné hodnoty). Jsou-li operátory odpovídající A a B hermitovské, musí být operátor odpovídající C také hermitovský. To lze opět zajistit pomocí konstanty k.

Určeme nyní podmínku na konstantu k, která plyne z požadavku hermitovosti operátorů:

$$\begin{aligned}
[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] &= k\hat{\mathbf{C}} \\
\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} - \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} &= k\hat{\mathbf{C}} \qquad /\,^{\dagger} \\
\hat{\mathbf{B}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}^{\dagger} - \hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\hat{\mathbf{B}}^{\dagger} &= k^{*}\hat{\mathbf{C}}^{\dagger} \qquad /\,\hat{\mathbf{O}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{O}} \\
\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} - \hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} &= k^{*}\hat{\mathbf{C}} \\
-[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] &= k^{*}\hat{\mathbf{C}}.
\end{aligned}$$

Při úpravě jsme použili vztah (3.267) pro hermitovské sdružení součinu dvou operátorů. Porovnáme-li počáteční a koncový výraz, musí platit $k^{*} = -k$. To ale splňují jen ryze imaginární čísla. Převodní konstanta tedy musí mít tvar:

$$k = \mathrm{i}\hbar. \tag{2.19}$$

Konstanta $\hbar$ je nějaké reálné číslo a je jedinou fundamentální konstantou kvantové teorie. Tato konstanta se bude vyskytovat ve všech předpovědích kvantové teorie (například v energetickém spektru elektronu vázaného v atomech, ve vztazích pro záření absolutně černého tělesa, v Heisenbergových relacích neurčitosti atd.). Její hodnotu je možné změřit experimentálně na základě těchto předpovědí a je rovna:

► $$\hbar = 1{,}054572\times10^{-34}\ \mathrm{J\,s}. \tag{2.20}$$

Jde o tzv. redukovanou Planckovu konstantu. Princip korespondence pro Poissonovy závorky můžeme stručně zapsat jako

► $$\{A, B\} \rightarrow \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}]. \tag{2.21}$$

Tím jsme zakončili přehled základních principů kvantové teorie. Jelikož jde o základní neodvoditelné principy, na kterých teorii stavíme, bylo by možné jen stroze vypsat axiomy, postuláty a principy označené v této kapitole čtverečkem. Doplňující texty se snaží jen poukázat na to, že právě tato volba základních axiomů je přirozená a povede k cíli. O správnosti základních principů však mohou rozhodnout jedině experimenty ověřující výpovědi z těchto principů plynoucí.

2.2.2 Kompatibilita měření a Heisenbergovy relace

Rozhodnout o tom, zda se měření dvou dynamických proměnných ovlivňují či nikoli, je jednoduché. Stačí znát komutátor operátorů těchto proměnných. Je-li tento komutátor nulový, je

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}} = \hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}} \tag{2.22}$$

a měření se neovlivňují. Základní komutátory pro souřadnice a hybnosti můžeme odvodit z principu korespondence, ostatní už pak z vlastností komutátorů. Pro Poissonovy závorky mezi souřadnicemi a hybnostmi platí vztah (1.42):

$$\{x_k, x_l\} = \{p_k, p_l\} = 0\,, \qquad \{x_k, p_l\} = \delta_{kl}\,. \tag{2.23}$$

Tomu odpovídají podle principu korespondence komutační relace:

► $$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{X}}_k,\ \hat{\mathbf{X}}_l] = [\hat{\mathbf{P}}_k,\ \hat{\mathbf{P}}_l] = 0, \\ [\hat{\mathbf{X}}_k,\ \hat{\mathbf{P}}_l] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{1}}\delta_{kl}\,. \end{aligned} \tag{2.24}$$

Z nich je zřejmé, že současně lze u objektu změřit všechny tři souřadnice nebo hybnosti. Také se vzájemně neovlivní měření například souřadnice x a hybnosti p_y. *Jediná měření, která se vzájemně ovlivňují a u kterých záleží na pořadí měření* (nenulový komutátor) *je měření zobecněné souřadnice a jí odpovídající zobecněné hybnosti*.

Rovnice (2.24) jsou základními komutačními relacemi v kvantové teorii. Bylo by samozřejmě možné hledat ostatní složitější komutační relace také z Poissonových závorek. Výhodnější je ale odvozovat je ze základních relací (2.24) a vlastností Lieovy algebry komutátorů. Tím se oprostíme od klasické mechaniky a nemusíme se k ní při každé komutační relaci vracet. Kvantová mechanika začíná „žít vlastním životem“. To, co přebrala z klasické mechaniky prostřednictvím principu korespondence, jsou jen relace (2.24) mezi souřadnicemi a hybnostmi.

Odvoďme nyní komutační relaci mezi první a druhou složkou momentu hybnosti:

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] &= [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1] - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_2 + \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3] + [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2 = \\ &= \hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1] + \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1 + \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 + [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{P}}_3] - \hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{P}}_3, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3 - \hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_3 - [\hat{\mathbf{X}}_2, \hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3\hat{\mathbf{P}}_3 - \\ &- \hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{P}}_1] - \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1 - \hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{P}}_1]\hat{\mathbf{P}}_2 - [\hat{\mathbf{X}}_3, \hat{\mathbf{X}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1\hat{\mathbf{P}}_2 + \end{aligned}$$

$$+\hat{\mathbf{X}}_3\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{P}}_2,\hat{\mathbf{P}}_3]+\hat{\mathbf{X}}_3[\hat{\mathbf{P}}_2,\hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3+\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2+[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{X}}_1]\hat{\mathbf{P}}_3\hat{\mathbf{P}}_2=$$
$$=0-\hat{\mathbf{X}}_2[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_1+0+0-0-0-0-0-0-0-0-0-0+0+0+\hat{\mathbf{X}}_1[\hat{\mathbf{X}}_3,\hat{\mathbf{P}}_3]\hat{\mathbf{P}}_2+0=$$
$$=-\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{P}}_1+\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{1}}\hat{\mathbf{P}}_2=\mathrm{i}\hbar(\hat{\mathbf{X}}_1\hat{\mathbf{P}}_2-\hat{\mathbf{X}}_2\hat{\mathbf{P}}_1)=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_3.$$

Je jasné, že postup je velmi zdlouhavý, ale přímočarý. Hledanou komutační relaci postupně „rozmělňujeme“ podle pravidel Lieovy algebry až na elementární relace mezi souřadnicemi a hybnostmi. Prakticky všechny symbolicky orientované programy či programovací jazyky bez problémů tuto úlohu řeší za nás a obsahují balíky pro výpočet komutačních relací.

Analogickým postupem můžeme nalézt komutační relace pro ostatní složky momentu hybnosti. Není to ale nutné, stačí je získat cyklickou záměnou souřadnicových os ($1 \to 2 \to 3 \to 1$). Kompletní komutační relace pro moment hybnosti potom jsou:

$$\blacktriangleright \qquad \begin{aligned}[\hat{\mathbf{L}}_1,\hat{\mathbf{L}}_2]&=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_3\,,\\ [\hat{\mathbf{L}}_2,\hat{\mathbf{L}}_3]&=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1\,,\\ [\hat{\mathbf{L}}_3,\hat{\mathbf{L}}_1]&=\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2\,.\end{aligned} \tag{2.25}$$

Výsledkem je, že současně není možné změřit žádné dvě složky momentu hybnosti. Měření každé složky ovlivní měření kterékoli jiné složky. Zaveďme operátor kvadrátu velikosti momentu hybnosti

$$\hat{\mathbf{L}}^2\equiv\hat{\mathbf{L}}_1^2+\hat{\mathbf{L}}_2^2+\hat{\mathbf{L}}_3^2\,. \tag{2.26}$$

Stejným postupem jako dříve dopočteme komutační relace kvadrátu momentu s jednotlivými složkami. Tentokráte při „rozmělňování“ komutační relace postačí dostat se jen k relacím (2.25) pro moment hybnosti. Jejich výsledek už známe. Výpočet provedeme například pro třetí složku:

$$[\hat{\mathbf{L}}^2,\hat{\mathbf{L}}_3]=[\hat{\mathbf{L}}_1^2+\hat{\mathbf{L}}_2^2+\hat{\mathbf{L}}_3^2,\hat{\mathbf{L}}_3]=[\hat{\mathbf{L}}_1^2,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_2^2,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_3^2,\hat{\mathbf{L}}_3]=$$
$$\hat{\mathbf{L}}_1[\hat{\mathbf{L}}_1,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_1,\hat{\mathbf{L}}_3]\hat{\mathbf{L}}_1+\hat{\mathbf{L}}_2[\hat{\mathbf{L}}_2,\hat{\mathbf{L}}_3]+[\hat{\mathbf{L}}_2,\hat{\mathbf{L}}_3]\hat{\mathbf{L}}_2+0+0=$$
$$-\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1\hat{\mathbf{L}}_2-\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2\hat{\mathbf{L}}_1+\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2\hat{\mathbf{L}}_1+\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1\hat{\mathbf{L}}_2=0\,.$$

Stejný výsledek dostaneme pro jakoukoli složku:

$$\blacktriangleright \qquad [\hat{\mathbf{L}}^2,\hat{\mathbf{L}}_k]=0\,,\qquad k=1,2,3\,. \tag{2.27}$$

Není tedy možné současně změřit dvě různé složky momentu hybnosti. Vždy je ale možné změřit kvadrát velikosti momentu hybnosti a jednu z jeho libovolných složek, zpravidla se používá třetí složka. Ze zatím provedených úvah je zřejmé, že současně můžeme měřit dynamické proměnné $\{x, y, z\}$ nebo $\{p_x, p_y, p_z\}$ nebo $\{L^2, L_3\}$. V kapitole 2.5 uvidíme, že v případě sféricky symetrického potenciálu je s poslední množinou kompatibilní ještě energie, tj. úplnou množinu pozorovatelných tvoří trojice $\{E, L^2, L_3\}$.

Nalezli jsme tedy jednoduchý postup, pomocí kterého zjistíme, které veličiny lze současně měřit a které ne. Postačí nalézt komutátor odpovídajících operátorů. Tento postup nám ale umožní odpověď typu ano/ne. V případě, že dynamické proměnné spolu současně měřit nelze, nás zajímá, jak moc naruší akt měření jedné proměnné akt měření proměnné druhé. Na tuto otázku odpovídají Heisenbergovy relace neurčitosti, které si

nyní odvodíme. Předtím si uveďme přehled základních statistických pojmů a jejich operátorových analogií v kvantové teorii:

statistika		**kvantová teorie**	
střední hodnota	$\overline{a}$	střední hodnota	$\overline{a} \equiv \langle \psi \mid \hat{\mathbf{A}} \mid \psi \rangle$
odchylka	$\Delta a \equiv a - \overline{a}$	operátor odchylky	$\Delta \hat{\mathbf{A}} \equiv \hat{\mathbf{A}} - \overline{a}\,\hat{\mathbf{1}}$
průměr odchylek	$\overline{\Delta a} = 0$	průměr odchylek	$\langle \psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}} \mid \psi \rangle = 0$
variance	$\overline{(\Delta a)^2} = \overline{a^2} - \overline{a}^2$	variance	$\langle \psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}}^2 \mid \psi \rangle = \langle \psi \mid \hat{\mathbf{A}}^2 \mid \psi \rangle - \langle \psi \mid \hat{\mathbf{A}} \mid \psi \rangle^2$
střední kvadratická odchylka	$\Delta a_{\mathrm{kv}} = \sqrt{\overline{(\Delta a)^2}}$	střední kvadratická odchylka	$\Delta a_{\mathrm{kv}} = \sqrt{\langle \psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}}^2 \mid \psi \rangle}$

Zkuste si dokázat oba dva statistické vztahy v klasické statistice i v kvantové teorii. V obou případech stačí jen dosadit z příslušných definic. Nyní již můžeme přistoupit k odvození relací neurčitosti. Předpokládejme, že máme dvě nekompatibilní proměnné:

$$A, B \to \hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}\,; \qquad [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = \hat{\mathbf{C}}\,. \tag{2.28}$$

Nalezněme součin středních kvadratických chyb měření:

$$\begin{aligned}
(\Delta a_{\mathrm{kv}})^2 (\Delta b_{\mathrm{kv}})^2 &= \langle \psi \mid (\Delta \hat{\mathbf{A}})^2 \mid \psi \rangle \langle \psi \mid (\Delta \hat{\mathbf{B}})^2 \mid \psi \rangle \overset{(*1)}{=} \\
&= \langle \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \rangle \langle \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \mid \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \rangle = \| \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \|^2 \cdot \| \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \|^2 \overset{(*2)}{\geq} \\
&\geq | \langle \Delta \hat{\mathbf{A}} \psi \mid \Delta \hat{\mathbf{B}} \psi \rangle |^2 = | \langle \psi \mid \Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} \mid \psi \rangle |^2 \overset{(*3)}{=} \\
&= | \langle \psi \mid \frac{1}{2} (\Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} + \Delta \hat{\mathbf{B}} \Delta \hat{\mathbf{A}}) + \frac{1}{2} (\Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} - \Delta \hat{\mathbf{B}} \Delta \hat{\mathbf{A}}) \mid \psi \rangle |^2 \overset{(*4)}{\geq} \\
&\geq | \langle \psi \mid \frac{1}{2} (\Delta \hat{\mathbf{A}} \Delta \hat{\mathbf{B}} - \Delta \hat{\mathbf{B}} \Delta \hat{\mathbf{A}}) \mid \psi \rangle |^2 = \\
&= | \frac{1}{2} \langle \psi \mid [\Delta \hat{\mathbf{A}}, \Delta \hat{\mathbf{B}}] \mid \psi \rangle |^2 \overset{(*5)}{=} \\
&= | \frac{1}{2} \langle \psi \mid [\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] \mid \psi \rangle |^2 = \\
&= | \frac{1}{2} \langle \psi \mid \hat{\mathbf{C}} \mid \psi \rangle |^2 .
\end{aligned}$$

Při odvození byly použity tyto triky a postupy (ve výpočtu označené hvězdičkou):

(1) využití hermitovosti operátorů;
(2) Schwarzovo lemma, viz kapitola 3.3.2, vztah (3.165);
(3) rozdělení na symetrickou (S) a antisymetrickou (D) část;
(4) symetrická část S je reálná (je součtem dvou navzájem komplexně sdružených čísel), antisymetrická část D je naopak ryze imaginární (je rozdílem dvou navzájem komplexně sdružených čísel) a tvoří dohromady komplexní číslo, pro které platí $|S+D| = |x+iy| = (x^2+y^2)^{1/2} \geq |y| = |D|$;
(5) jednotkový operátor v definici $\Delta\hat{\mathbf{A}}$ komutuje s čímkoli.

Po odmocnění posledního výrazu dostáváme konečný tvar Heisenbergových relací:

► $$\Delta a_{\mathrm{kv}}\, \Delta b_{\mathrm{kv}} \;\geq\; \frac{1}{2} |\langle \psi | \hat{\mathbf{C}} | \psi \rangle| . \tag{2.29}$$

Známe-li výsledek komutační relace operátorů příslušících dvěma dynamickým proměnným, můžeme z Heisenbergových relací určit míru ovlivnění jednoho měření druhým. Toto vzájemné ovlivnění výsledků měření závisí na stavu, ve kterém je systém připraven. Jen jsou-li obě dynamické proměnné ve vztahu *zobecněná souřadnice – zobecněná hybnost*, nezávisí vzájemné ovlivnění na stavu systému:

$$[\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{P}}] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{1}} \qquad \Rightarrow \qquad \Delta x\, \Delta p \;\geq\; \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \hat{\mathbf{1}} | \psi \rangle| \;=\; \frac{\hbar}{2} |\langle \psi | \psi \rangle| \;=\; \frac{\hbar}{2} .$$

To je nejznámější tvar relací neurčitosti

► $$\Delta x\, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} . \tag{2.30}$$

Jde o první měřitelný výsledek námi budované teorie, který obsahuje Planckovu konstantu. Heisenbergovy relace jsou velmi důležitým rysem kvantové teorie, se kterým musíme při posuzování jevů v mikrosvětě počítat. V úvodu jsme již zmínili příklad štěrbiny, kterou prolétá paprsek světla. Je-li štěrbina dostatečně široká, nedojde k výraznému ohybu světla. Hybnost fotonů ve směru štěrbiny známe téměř přesně (je přibližně nulová, fotony letí kolmo na rovinu štěrbiny), ale neznáme místo, kterým foton štěrbinou prošel. Pokud štěrbinu výrazně zúžíme, získáme sice přesnější informaci o poloze fotonu, nicméně dojde k ohybu světla a ztratíme informaci o hybnosti fotonu ve směru štěrbiny. Akt měření polohy zhoršil dostupnou informaci o odpovídající hybnosti.

Jiným příkladem je elektron v atomárním obalu. Je lokalizovaný v určité malé oblasti (řádově 10^{-10} m, přesnou polohu samozřejmě neznáme) a tomu musí odpovídat určitá hybnost (resp. rychlost) ve shodě s Heisenbergovými relacemi neurčitosti. Elektron se nemůže například v atomárním obalu „zastavit“. Obdobná situace panuje v krystalické látce při velmi nízké teplotě. Se snižováním teploty látky se snižuje chaotický pohyb částic, nicméně tento pohyb se nemůže nikdy zcela zastavit. Pokud by při absolutní nule ustal veškerý pohyb látky, nacházely by se ionty přesně ve vrcholech krystalické mříže (znali bychom přesně jejich polohu) a nehýbaly by se (znali bychom přesně jejich hybnost, byla by nulová). Znalost obou veličin odporuje Heisenbergovým relacím neurčitosti. Krystal bude i při absolutní nule vykonávat tzv. nulové kmity. Absolutní nula není stav látky s nulovým pohybem částic, ale stav s minimálním možným pohybem, který připouštějí zákony kvantové mechaniky. Ze stejného důvodu není nejnižší energetický stav harmonického oscilátoru nulový, ale harmonický oscilátor vždy vykonává alespoň tzv. nulové kmity (viz kapitola 2.3).

Jak jsme viděli, relace neurčitosti ve tvaru (2.30) platí pro jakoukoli zobecněnou souřadnici a jí odpovídající zobecněnou hybnost. Není proto možné například současně změřit u kyvadla úhel a jemu odpovídající moment hybnosti. Obecně pro každé dvě kanonicky sdružené proměnné (q, p) platí

► $$\Delta q \, \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.31}$$

V teoretické mechanice jsme se zabývali také Lagrangeovou formulací teorie elektromagnetického pole (viz kapitola 1.6). Viděli jsme, že potenciály elektromagnetického pole můžeme chápat jako spojitou zobecněnou souřadnici a že k nim existuje odpovídající kanonicky sdružená hybnost pole. Pro obě veličiny opět platí Heisenbergovy relace neurčitosti, a tak není možné, aby ve vakuu bylo současně nulové pole i jeho kanonicky sdružená hybnost. Vakuum není tedy prostor bez polí, ale s minimálním množstvím různých fluktuací všech možných polí, které nám připouštějí zákony kvantové mechaniky. Situace je velmi podobná definici absolutní nuly. Skutečné vakuum nemůže být díky kvantové teorii nikdy prázdné, půjde o netriviální dynamický systém plný fluktuací různých polí. Tyto fluktuace se mohou projevovat dočasnou kreací párů částice-antičástice. Takový pár po dosti krátké době opět zanikne.

Relace neurčitosti odvozené ve tvaru (2.30) platí pro všechny tři složky polohového vektoru objektu. V rámci relativity jsou ale prostorové složky součástí čtyřvektoru (ct, $\mathbf{x}$), stejně tak jako hybnosti jsou součástí čtyřvektoru (E/c, $\mathbf{p}$). Rychlost světla v časové oblasti čtyřvektorů pouze zajišťuje, aby měly všechny čtyři složky stejný rozměr. Relace neurčitosti je možné napsat i pro časovou složku čtyřvektorů:

► $$\Delta E \, \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}. \tag{2.32}$$

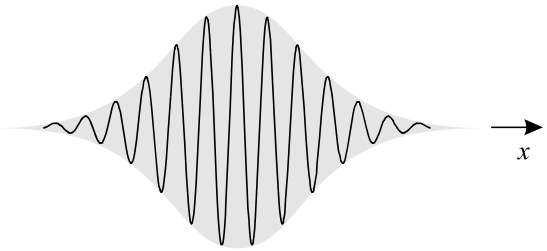
Ve shodě s tímto vztahem může ve vakuu jakoby z ničeho vzniknout pár částice-antičástice s celkovou energií ΔE, pokud zase zanikne v době kratší než $\Delta t = \hbar/(2\Delta E)$. Takový proces sice porušuje zákon zachování energie, jde o jakési vypůjčení si energie z vakua „na dluh“, nicméně pro nás bude nepozorovatelný, protože porušuje relace neurčitosti (2.32). K těmto procesům skutečně ve vakuu dochází, důsledkem neustálého vzniku a zániku elektron-pozitronových párů je například pozorovatelná polarizace vakua nebo Lambův posuv spektrálních čar. Spekuluje se o tom, že zrychlená expanze vesmíru, která byla objevena Adamem Riessem a Saulem Perlmutterem v roce 1998, by mohla mít původ v netriviálním chování kvantového vakua.

Vztah (2.32) můžeme také uplatnit při popisu vzniku spektrálních čar v atomárním obalu. Pokud přeskok elektronu mezi dvěma hladinami trvá konečnou dobu Δt, nebude mít vzniklý foton přesně definovanou energii, minimální neurčitost energie bude $\Delta E \sim \hbar/(2\Delta t)$ a spektrální čára nebude nikdy dokonale ostrá – bude mít vždy konečnou šířku danou relacemi neurčitosti (jde o statistický jev způsobený mnoha přeskoky elektronů, jež jsou zodpovědné za vznik spektrální čáry).

Relace neurčitosti platí v podobě (2.29) i pro proměnné, které nejsou vzájemně kanonicky sdružené. Míra ovlivnění jednoho měření druhým potom závisí na stavu, ve kterém se systém nachází. Například operátory kinetické a potenciální energie zpravidla vzájemně nekomutují. To má za následek, že není současně přesně zjistitelná kinetická i potenciální energie a částice se může (na rozdíl od klasické fyziky) „přehoupnout“ přes potenciálovou bariéru. Jde o tzv. tunelový jev, který je dalším zajímavým důsledkem kvantové mechaniky a jehož podstata tkví v Heisenbergových relacích neurčitosti.

◖ Příklad 2.1: Gaussův vlnový balík

Ukažme nyní, že pokud má částice vlnovou funkci ve tvaru Gaussova balíku, platí pro ni $\Delta x \Delta p = \hbar/2$, tj. v Heisenbergových relacích neurčitosti (2.30) platí rovnost a aktem měření lze získat maximální možnou informaci. Veškeré potřebné integrály k výpočtu jednotlivých kroků tohoto příkladu naleznete v kapitole 3.10.4.



Obr. 2.8: Gaussův vlnový balík

Předpokládejme, že vlnová funkce ve tvaru balíku má tvar, ve kterém je základní vlna dána funkcí $\cos(k_0 x)$ a obálka je tvarována Gaussovou exponenciální funkcí:

$$\psi(x) \approx \cos(k_0 x)\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2} . \tag{2.33}$$

Vlnový vektor vlny je k_0, tomu odpovídá z částicově-vlnové duality hybnost popisovaného objektu $\hbar k_0$. V exponenciální notaci včetně normování k jedné budou mít vlnová funkce a jí odpovídající pravděpodobnost tvar, viz vztah (3.576):

$$\begin{aligned} \psi(x) &= (2\alpha/\pi)^{1/4}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x}\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2} ; \\ w(x) &\equiv \psi^* \psi = (2\alpha/\pi)^{1/2}\, \mathrm{e}^{-2\alpha x^2} . \end{aligned} \tag{2.34}$$

V případě zahrnutí časového vývoje by naše vlnová funkce měla ještě časovou část. Spočtěme nyní střední polohu, střední hodnotu kvadrátu polohy a střední kvadratickou fluktuaci. Výpočty jsou přímočaré za pomoci vztahů z kapitoly 3.10.4:

$$\begin{aligned} \langle x \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x\, w(x)\, \mathrm{d}x = 0 ; \\ \langle x^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{+\infty} x^2\, w(x)\, \mathrm{d}x = 1/(4\alpha) ; \\ \Delta x &\equiv \sqrt{\langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2} = 1/\sqrt{4\alpha} . \end{aligned} \tag{2.35}$$

Naši vlnovou funkci můžeme rozložit do jednotlivých Fourierových komponent za pomoci Fourierovy transformace (3.495) a (3.496)

$$\begin{aligned} \psi(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{A}(k)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}k ; \\ \mathcal{A}(k) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x . \end{aligned} \tag{2.36}$$

Výpočet provedeme doplněním argumentu v exponenciále na čtverec.

$$\mathscr{A}(k) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \psi(x)\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{\mathrm{i}k_0 x}\, \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha[x^2 - \mathrm{i}(k-k_0)x/\alpha]}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha[x - \mathrm{i}(k-k_0)x/(2\alpha)]^2}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \left(\frac{2\alpha}{\pi}\right)^{1/4} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha[x-x_0]^2}\, \mathrm{d}x =$$

$$= \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)}\,.$$

Pro amplitudu $\mathscr{A}(k)$ máme tedy finální vztah

► $$\mathscr{A}(k) = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/4}} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(4\alpha)}\,. \tag{2.37}$$

Amplitudu $\mathscr{A}(k)$ lze chápat jako vlnovou funkci v k prostoru (resp. v hybnostním prostoru, protože $p = \hbar k$) a její kvadrát je hustotou pravděpodobnosti v k prostoru:

$$w_p(k) = \mathscr{A}^* \mathscr{A} = \frac{1}{(2\pi\alpha)^{1/2}} \mathrm{e}^{-(k-k_0)^2/(2\alpha)}\,. \tag{2.38}$$

Snadno zkontrolujeme, že pravděpodobnost je již správně normovaná, tj. $\int w_p(k)\, \mathrm{d}k = 1$. Jako další krok určíme střední hodnoty hybnosti a kvadrátu hybnosti objektu:

$$\langle\, p \,\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \hbar k\, w_p(k)\, \mathrm{d}k = \hbar k_0\,;$$

► $$\langle\, p^2 \,\rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} (\hbar k)^2\, w_p(k)\, \mathrm{d}k = \hbar^2\alpha + \hbar^2 k_0^2\,; \tag{2.39}$$

$$\Delta p \equiv \sqrt{\langle\, p^2 \,\rangle - \langle\, p \,\rangle^2} = \hbar\sqrt{\alpha}\,.$$

Nyní již máme vše potřebné k sestavení levé strany Heisenbergovy relace neurčitosti:

► $$\Delta x \Delta p = \frac{1}{\sqrt{4\alpha}} \hbar\sqrt{\alpha} = \frac{\hbar}{2}\,. \tag{2.40}$$

Gaussův vlnový balík tedy minimalizuje Heisenbergovy relace neurčitosti. Jinými slovy: *minimum Heisenbergových relací neurčitosti se nabývá pro Gaussův vlnový balík.*

◗

2.2.3 Vlastní stavy energie, Schrödingerova rovnice

V minulé kapitole jsme se naučili rozhodnout, které dynamické proměnné lze společně měřit a které ne. Pomocí Heisenbergových relací neurčitosti jsme schopni i kvalitativně postihnout míru narušení jednoho měření měřením druhým. Nyní se budeme věnovat druhé základní úloze kvantové mechaniky: nalézt spektrum operátoru energie – hodnoty energie, které je možné na systému naměřit. Úlohu můžeme zformulovat například takto:

$$\hat{\mathbf{H}} \,|\, n> = E_n \,|\, n>, \tag{2.41}$$

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\vec{\mathbf{P}}}^2}{2m} + V(\hat{\vec{\mathbf{X}}}) = \frac{\hat{\mathbf{P}}_x^2 + \hat{\mathbf{P}}_y^2 + \hat{\mathbf{P}}_z^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{Y}}, \hat{\mathbf{Z}}), \tag{2.42}$$

$$\left[\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{X}}_l\right] = \left[\hat{\mathbf{P}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\right] = 0, \qquad \left[\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l\right] = \mathrm{i}\hbar\,\hat{\mathbf{1}}\,\delta_{kl}. \tag{2.43}$$

Budeme hledat vlastní hodnoty operátoru energie (Hamiltonova operátoru) ze vztahu (2.41). Tato rovnice pro vlastní hodnoty Hamiltonova operátoru se nazývá *Schrödingerova rovnice*. Operátor energie (Hamiltonův operátor) je dán vztahem (2.42). Základní operátory, ze kterých je složen Hamiltonův operátor, podléhají komutačním relacím (2.24), resp. (2.43). Nezáleží příliš na tom, jaký Hilbertův prostor zvolíme. V příští kapitole uvidíme řešení harmonického oscilátoru v různých prostorech $\mathcal{H}$, vždy dostaneme stejné spektrum Hamiltonova operátoru. Na daném prostoru je nejpodstatnější zvolit Hermitovy operátory zobecněných souřadnic a hybností tak, aby splňovaly komutační relace (2.43).

Ukažme si nyní přepis Schrödingerovy rovnice v prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ funkcí integrovatelných s kvadrátem na celém prostoru $\mathcal{R}^3$. Nejjednodušším operátorem na tomto prostoru je operátor násobení souřadnicí. Tento operátor ztotožníme s operátorem souřadnice:

$$\hat{\mathbf{X}} = x; \qquad \hat{\mathbf{Y}} = y; \qquad \hat{\mathbf{Z}} = z. \tag{2.44}$$

Nyní zbývá nalézt hermitovské operátory pro hybnost tak, aby splňovaly komutační relace (2.43). Operátor derivace a operátor násobení souřadnicí splňují v jedné dimenzi komutační relaci (viz příklad 3.31 v kapitole 3.4.2)

$$[\hat{\mathbf{D}}, \hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{1}}, \text{ resp} \qquad [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{D}}] = -\hat{\mathbf{1}} \tag{2.45}$$

Je zřejmé, že relaci (2.43) splňuje v jedné dimenzi operátor

► $$\hat{\mathbf{P}} \equiv -\mathrm{i}\hbar\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x. \tag{2.46}$$

Pokud operátor souřadnice zvolíme jako pouhé násobení souřadnicí, má operátor (2.46) význam operátoru hybnosti. Samotný operátor derivace není hermitovský, ale operátor derivace vynásobený ryze imaginární konstantou již hermitovský je (viz příklad 3.33 v kapitole 3.4.2). Ve třech dimenzích postupujeme zcela analogicky. Pokud požadujeme, aby operátory souřadnice měly jednoduchý tvar (2.44) a přitom platily relace (2.43), musí mít operátor hybnosti tvar

$$\hat{\mathbf{P}}_x = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial x};$$

► $$\hat{\mathbf{P}}_y = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial y}; \tag{2.47}$$

$$\hat{\mathbf{P}}_z = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial z},$$

neboli

► $$\hat{\vec{\mathbf{P}}} = -\mathrm{i}\hbar\nabla. \tag{2.48}$$

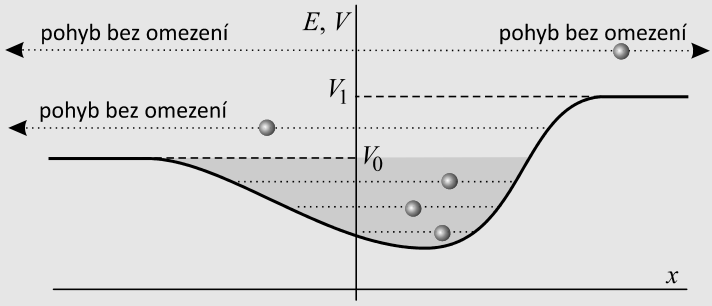
Schrödingerova rovnice (2.41) s operátorem energie (2.42), volbou prostoru $\mathcal{H} = \mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$ a operátory (2.44) a (2.47) vede potom na slavnou Schrödingerovu rovnici v tzv. x reprezentaci (operátor souřadnice je reprezentován násobením souřadnicí):

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(\mathbf{x})\right]\psi_n(\mathbf{x}) \;=\; E_n\,\psi_n(\mathbf{x}). \tag{2.49}$$

Řešení Schrödingerovy rovnice pro konkrétní potenciál V poskytne spektrum operátoru energie $\{E_n\}$ jakožto množinu možných měřitelných hodnot energie pro daný potenciál.

Poznámka 1: Řešení rovnice (2.49) lze nalézt pro každou hodnotu energie. Ne vždy je však toto řešení z prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R}^3)$. Je proto vždy třeba vybrat z možných řešení jen ta, která jsou integrovatelná s kvadrátem, tj. do nekonečna ubývají dostatečně rychle, aby zajistila integrovatelnost.

Poznámka 2: Existuje jednoduchý způsob, jak odhadnout typ spektra pro daný potenciál. Může-li se v klasické mechanice částice vzdálit do nekonečna, je spektrum operátoru energie spojité. Nemůže-li se ani v jednom směru vzdálit do nekonečna, je spektrum operátoru energie diskrétní.

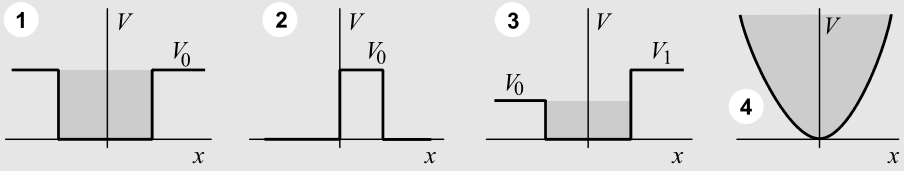


Obr. 2.9: Pohyby v potenciální energii s minimem

Připomeňme, že v klasické mechanice se částice může pohybovat tam, kde je její celková energie větší než potenciální. To plyne ze vztahu $E = mv^2 + V(x)$. Jde vlastně o podmínku nezápornosti kinetické energie. V nakreslené situaci je pro $E < V_0$ spektrum energie diskrétní, pro $E > V_0$ spojité.

Ukázky potenciálů

U jednorozměrného potenciálu může nabývat poloha objektu x jakékoli reálné hodnoty, tj. platí $x \in (-\infty, +\infty)$



Obr. 2.10: Ukázky jednorozměrných potenciálů

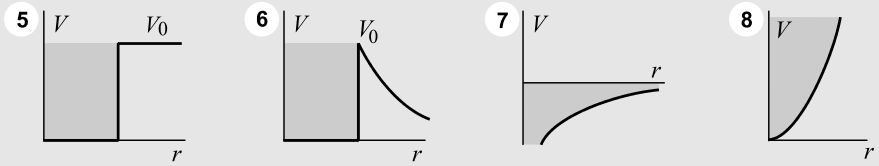
1. Symetrická pravoúhlá jáma. Částice v jámě má diskrétní spektrum energie pro $E < V_0$, kde se v klasickém případě nemůže vzdálit do nekonečna. Tato oblast je zobrazena šedou barvou. Pro $E > V_0$ má částice v tomto potenciálu spojité spektrum energie. Pro nekonečnou jámu ($V_0 \to \infty$) je spektrum jen diskrétní.

2. Bariéra. Částice se v klasickém případě vždy může vzdálit do nekonečna. V kvantové teorii tomu odpovídá zcela spojité spektrum energie.

3. Nesymetrická pravoúhlá jáma. Částice má diskrétní spektrum pro $E < V_0$, kde se v klasickém případě nemůže vzdálit do nekonečna. Spektrum energie je spojité pro $E > V_0$, kdy se v klasickém případě může vzdálit buď na jednu stranu ($E > V_0$ a současně $E < V_1$), nebo na obě strany ($E > V_1$).

4. Harmonický oscilátor. Harmonický oscilátor má parabolický průběh potenciální energie. Částice v klasickém případě osciluje a nikdy se nemůže vzdálit do nekonečna. Tomu odpovídá v kvantové teorii diskrétní spektrum energie.

V následujících ukázkách uvažujeme sféricky symetrické pole, kdy je potenciální energie jen funkcí radiální souřadnice, tj. $V = V(r)$. Na samotnou radiální souřadnici klademe omezení $r \geq 0$, tj. částice nemůže mít zápornou hodnotu radiální souřadnice.



Obr. 2.11: Ukázky třírozměrných potenciálů

5. Sférická jáma. Částice ve sférické jámě má diskrétní spektrum energie pro $E < V_0$, spojité spektrum energie pro $E > V_0$. V podobném potenciálu se pohybuje například neutron v atomovém jádře.

6. Coulombova bariéra. Průběh potenciálu je kombinací potenciálu sférické jámy a potenciálu Coulombova odpuzování. V podobném potenciálu se pohybuje proton nebo α částice v atomovém jádře. Částice má diskrétní spektrum energie pro $E < V_0$,

spojité spektrum energie pro $E > V_0$. Existuje nenulová pravděpodobnost průniku vzniklou potenciálovou bariérou. Tomuto jevu říkáme tunelový jev. Je způsoben tím, že operátory kinetické a potenciální energie spolu nekomutují.

7. Coulombův přitažlivý potenciál. Částice má diskrétní spektrum energie pro $E < 0$, spojité pro $E > 0$. V podobném potenciálu se pohybuje elektron v atomárním obalu. Stavy se zápornou energií jsou vázané stavy, stavy s kladnou energií jsou volné, tj. elektron není vázán k atomovému jádru.

8. Sférický harmonický oscilátor. Částice má v tomto potenciálu jen diskrétní stavy energie. Systém je při vychýlení do kteréhokoli směru vracen do počátku podle předpisu $V(r) = 1/2\ kr^2$.

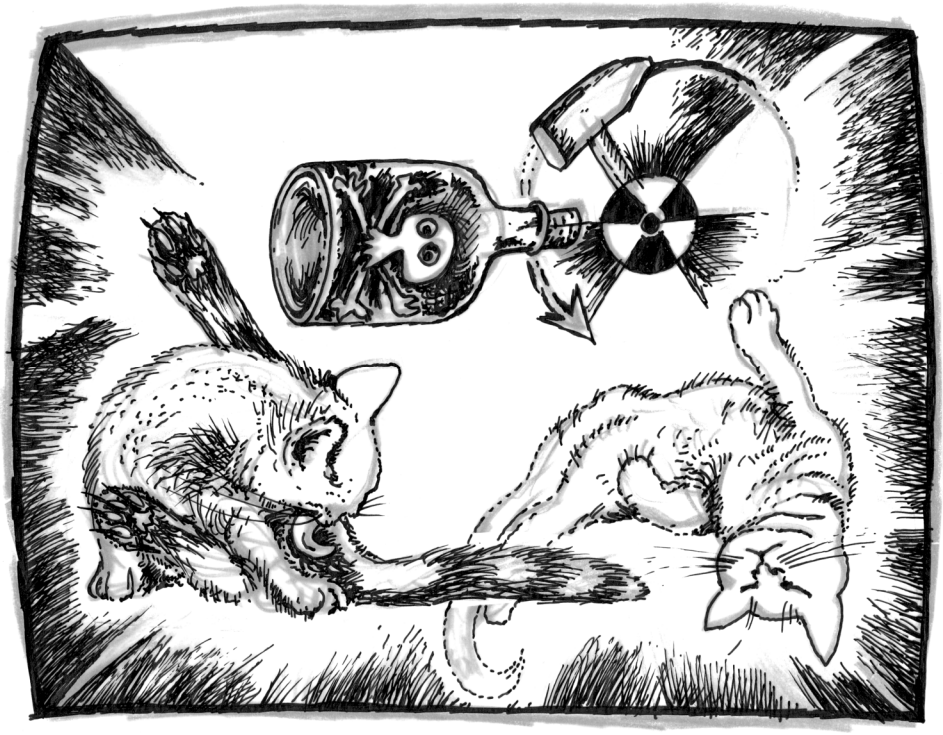
2.2.4 Různé interpretace kvantové teorie

Kvantová teorie je první teorií, jejíž součástí je samotný experiment. Není pochyb, že experiment provedený v mikrosvětě ovlivní objekty mikrosvěta a změní jejich stav. Při experimentu je z mnoha možných výsledků měření vybrán právě jeden jediný. Způsob, jakým k tomu dochází, je spíše filosofickou než fyzikální otázkou a různé skupiny fyziků mají na průběh samotného aktu měření různé názory. Kvantová teorie je elegantní matematickou konstrukcí, jejíž výsledky jsou v mimořádně přesném souladu s prováděnými experimenty. U mnoha částí kvantové teorie ale zcela selhává naše představivost a tzv. „zdravý selský rozum“. Objekty mikrosvěta už nemůžeme ztotožnit s našimi důvěrně známými kuličkami, mají jiné, mnohem bohatší vlastnosti. Příkladem může být vnitřní moment hybnosti, tzv. spin, jehož existence plyne z Lorentzovy symetrie (dva experimenty provedené ve dvou inerciálních souřadnicových soustavách, jež se vzájemně pohybují rovnoměrně přímočaře, dopadnou stejně). Představit si spin je téměř nemožné. Dokážeme spočítat, jak se skládá s momentem hybnosti částice, víme jaké má projevy, jak způsobuje štěpení spektrálních čar v magnetickém poli nebo jak je zodpovědný za vazbu molekul. Můžeme si přestavit, že elektron obíhá kolem jádra (moment hybnosti) a navíc se točí kolem vlastní osy (spin), ale jde jen o představu, která má ke skutečnosti velmi daleko. Elektron ani neobíhá kolem jádra a ani nerotuje kolem nějaké osy. Někdy je ale i špatná představa lepší než žádná. Šlo o jeden příklad za všechny, v kvantové teorii je mnoho věcí nepředstavitelných a neuchopitelných našimi nedokonalými smysly, které nejsou uzpůsobeny pro pozorování mikrosvěta. V následujícím textu se seznámíme s některými názory na úlohu kvantové teorie při popisu reálného světa.

Kodaňská interpretace

Kodaňská interpretace vznikala v Kodani v letech 1924 až 1927. Dnes jde o nejrozšířenější názor na kvantovou teorii. Autory kodaňské interpretace jsou především Niels Bohr a Werner Heisenberg, který byl od roku 1926 Bohrovým asistentem. Kvantová teorie není schopna předpovědět přesně výsledek měření, ale jen hodnoty, které je možné naměřit, a pravděpodobnost, s jakou se tak stane. Ta je rovna kvadrátu vlnové funkce (2.16). Před měřením je systém v superpozici stavů. Tato superpozice je vše, co je možné se o systému dozvědět. V průběhu měření systém přejde do jednoho ze stavů této superpozice. Akt měření se chová jako projekční operátor, který ze superpozice stavů vybere jednu konkrétní projekci, jeden konkrétní stav. Pokud systém popisujeme za pomoci vlnové funkce, říkáme, že dojde k tzv. *kolapsu vlnové funkce*.

Původní vlnová funkce je před aktem měření rozprostřená v prostoru a poskytuje nenulovou hustotu pravděpodobnosti ($\psi^*\psi$) výskytu částice (objektu) v různých místech prostoru. V průběhu měření se musí pravděpodobnost dramaticky změnit, neboť po měření je částice lokalizována v konkrétním místě $\mathbf{x}_0$, kde ji naleznul detektor. Ke stejně prudké změně musí těsně před měřením dojít u celé vlnové funkce. Kolaps vlnové funkce se děje naráz v celém prostoru, a je proto nelokálním procesem. Právě nelokálnost aktu měření a vůbec nelokálnost kvantové teorie v některých situacích byla terčem velké kritiky zastánců lokálních teorií (v daném místě je změna ovlivněna jen nekonečně malým okolím tohoto místa).



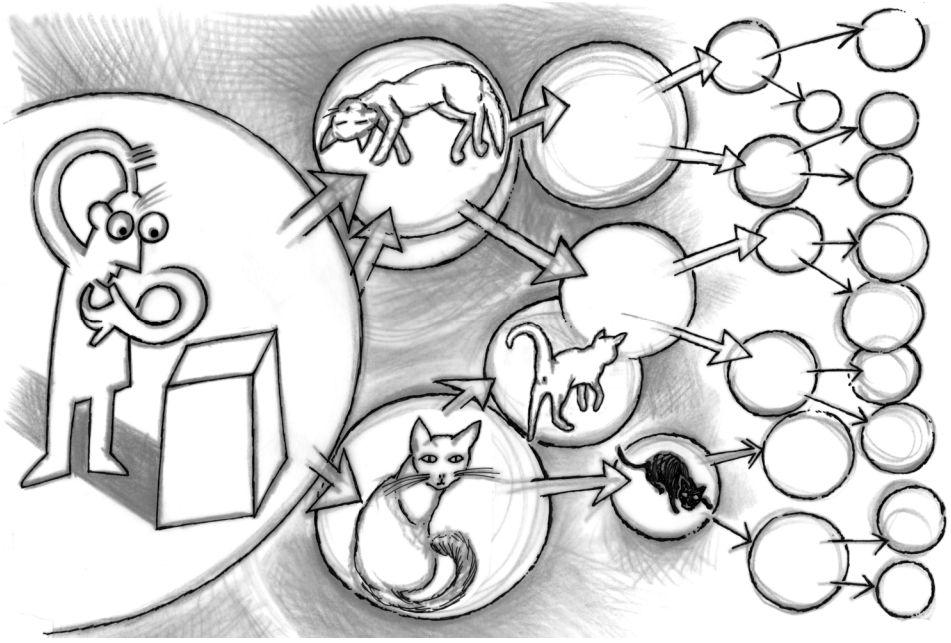
Obr. 2.12: Paradox Schrödingerovy kočky

Kodaňskou interpretaci lze využívat jen pro objekty mikrosvěta. Při její aplikaci na makroskopické objekty dostáváme zjevně nesmyslné výsledky, nejznámější ukázkou je tzv. paradox Schrödingerovy kočky – myšlenkový experiment, který předložil Erwin Schrödinger. Kočka je uzavřena v neprůhledné krabici, kde je umístěna sklenička se smrtícím jedem. Kladivo, které skleničku rozbije, je ovládáno pomocí náhodného radioaktivního rozpadu. Po určité době je padesátiprocentní šance, že došlo k rozbití skleničky a usmrcení kočky. Dokud ale neotevřeme krabici a nepřesvědčíme se o skutečném stavu kočky, je kočka z hlediska kvantové teorie v superpozici obou dvou možných stavů: $|$ mrtvá kočka $\rangle$ a $|$ živá kočka $\rangle$. Teprve akt měření způsobí kolaps vlnové funkce kočky a pro nás bude definitivně živá nebo mrtvá. Z tohoto myšlenkového experimentu je zřejmé, že kvantovou teorii nemůžeme aplikovat na makroskopický objekt. Pak ale nutně vzniká otázka: Kde je hranice mezi kvantovým světem, ve kterém platí kvantové zákony, a makrosvětem, kde zjevně neplatí?

Klasická interpretace

Autorem klasické interpretace je Albert Einstein, který se nikdy nesmířil se statistickou (neboli kodaňskou) interpretací kvantové teorie. Vyjádřil to známou větou: „*Bůh nehraje v kostky*.“ Podle Einsteina je fakt, že systém je před měřením v superpozici stavů, důsledkem a odrazem naší neznalosti všech mikroskopických parametrů systému. Při měření pak vybíráme jednu z možností jen zdánlivě. Ta by byla jednoznačně dána, kdybychom měli veškerou informaci o objektu. O teoriích tohoto typu se hovoří jako o *teorii se skrytými parametry*. Dnes je tato interpretace vyloučena na základě potvrzení neplatnosti tzv. Bellových nerovností v kvantových systémech (viz kapitola 2.9.4). Einsteinovi i dalším vadila kromě statistické interpretace kvantové teorie také její nelokálnost a nemožnost současného měření některých veličin. Einstein spolu s Podolským a Rosenem zformulovali v roce 1935 myšlenkový experiment (viz kapitola 2.9.3), který měl ukázat na vnitřní spornost kvantové teorie. Dnešní pohled zde žádný spor nevidí.

Mnohasvětová interpretace



Obr. 2.13: Mnohasvětová interpretace paradoxu Schrödingerovy kočky

Mnohasvětové chápání kvantové teorie zavedl americký fyzik Hugh Everett roku 1957. Velkým zastáncem a propagátorem mnohosvětové interpretace byl v 60. a 70. letech 20. století americký teoretik Bryce DeWitt. Podstatou je myšlenka, že při měření se v našem světě realizuje jeden ze stavů superpozice. V jiných paralelních světech (vesmírech) se realizují ostatní možnosti. Vše, co se může stát, se stane, ale v různých vesmírech, které paralelně koexistují. Akt měření je tak chápán jako větvení světočáry objektu. U paradoxu Schrödingerovy kočky je kočka až do provedení měření skutečně v superpozici dvou stavů $|$ mrtvá $\rangle$ a $|$ živá $\rangle$. Pokud zjistíme, že je například $|$ živá $\rangle$, bude se tento stav realizovat v našem vesmíru. V nějakém jiném vesmíru se bude realizovat stav $|$ mrtvá $\rangle$. Není jasné, zda tato interpretace přináší nějaká nová měřitelná fakta.

Holografická interpretace

Americko-anglický teoretický fyzik David Bohm (1917–1992) výrazně přispěl k pochopení nelokálnosti kvantové teorie. Objekty, jako jsou subatomární částice, vnímáme vzájemně oddělené, protože vidíme jen část jejich reality. Vzájemné sepjetí celku nemá nic společného s umístěním částice v prostoru a v čase, které vnímáme. Měřením na jedné části celku se můžeme dozvědět informace o jiné části, která se nám jeví jako prostorově vzdálená. Každá částice je součástí tohoto nedílného celku, který měl při velkém třesku jednu jedinou vlnovou funkci. Dnes je celek je zahrnut do každé jeho části. Nelokálnost je proto kvantové teorii vlastní. Často se při této interpretaci vyjadřuje souhrnným potenciálem, který všechny částice ovlivňují a na který každá z nich reaguje. Všechno, co existuje ve fyzikální realitě, je uloženo v menších částech a vesmír sám je obrazem tohoto základu, který můžeme nazvat *hologramem* (z menšího celku je možné rekonstruovat větší celek, ten již není skutečností, ale jen jakýmsi obrazem skutečnosti, kterou vnímáme svými smysly). Tato interpretace přináší nový úhel pohledu na nelokálnost kvantové teorie a v budoucnu by mohla sehrát roli při pochopení stavby kvantové teorie.

Interpretace související s vědomím

Se zajímavou interpretací kvantové teorie přišel v roce 1932 maďarský matematik John von Neumann (mj. autor prvního návrhu architektury dnes používaných počítačů). Neuman předpokládal, že kolaps vlnové funkce do určitého stavu při aktu měření způsobí vědomí pozorovatele. Pozorovatel je přirozenou součástí kvantového světa a jeho vědomí může ovlivnit výsledek experimentu. Zastáncem této myšlenky se stal i maďarsko-americký teoretik Eugene Wigner. Obecně nebyla tato interpretace mezi fyziky přijata. Opět je diskutabilní, zda vůbec přináší nová, měřením ověřitelná fakta.

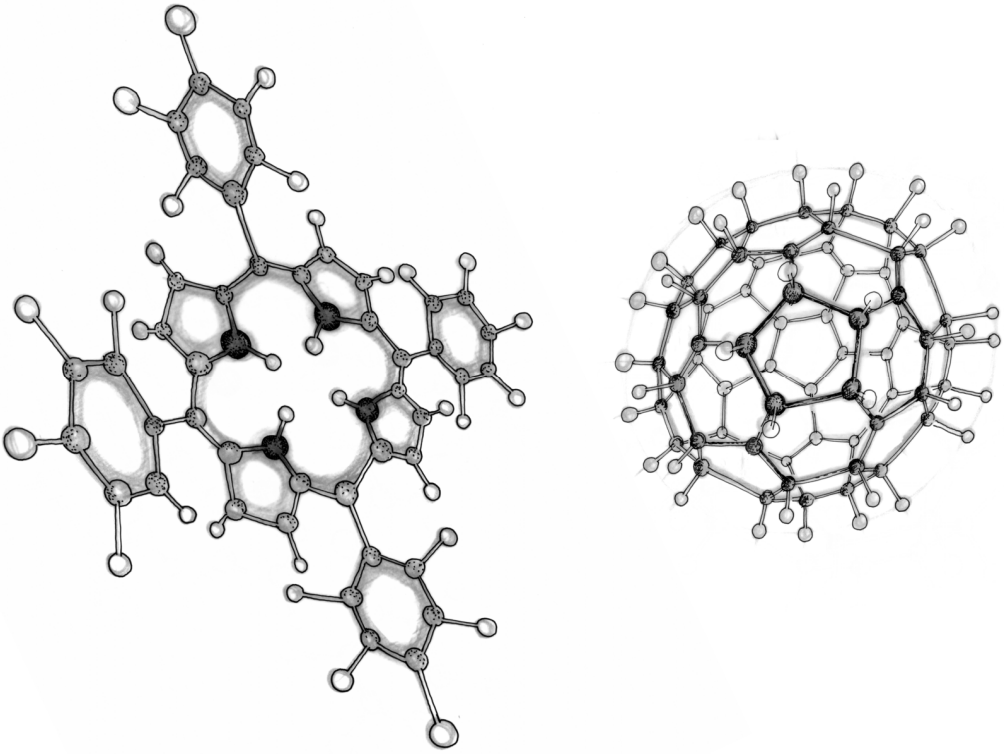
Hranice kvantového světa

Elektron je zcela nepochybně částice kvantového světa se všemi svými podivnými vlastnostmi – někdy se chová jako částice, jindy jako vlna, může být v několika stavech naráz atd. Pokud mu dáme do cesty dvě štěrbiny vhodné šířky a vzdálenosti, neprojde jen jednou z nich, jako částice makrosvěta. Využije superpozice stavů a projde oběma štěrbinami naráz. Oba stavy budou poté interferovat, a tak elektron vlastně interferuje v jistém smyslu sám se sebou. Na stínítku se po dopadu mnoha elektronů objeví interferenční obrazec. Budete-li na dvojštěrbinu házet klasické kamínky nebo kuličky, objeví se na stínítku jen dvě maxima (proti každé štěrbině). Kamínek nemůže být v superpozici stavů a nemůže interferovat sám se sebou.

Pokud vysíláme dostatečný počet elektronů, místa jejich dopadu nebudou proti štěrbinám, jako u klasických kuliček, ale vytvoří proužky obdobné interferenčnímu jevu u vlnění. Tyto proužky nezmizí, ani když bude proud elektronů natolik řídký, že bude v prostoru detektoru v daném okamžiku maximálně jeden jediný elektron. Naopak proužky zmizí, existuje-li principiální možnost detekce polohy elektronu.

Kde je hranice mezi oběma světy? Do jakých rozměrů se částice chovají kvantově, interferují samy se sebou a jsou (pro nás) podivnými objekty mikrosvěta? A kdy nastoupí klasické chování, které je nám tak důvěrně známé? Experimenty prováděné Antonem Zeilingrem a jeho kolegy z Vídeňské univerzity kolem roku 2005 ukázaly, že žádná ostrá hranice neexistuje. Vědci prováděli experimenty s obřími molekulami, které procházely Talbotovým interferometrem (štěrbin je zde větší množství). Největší mole-

kula $C_{60}F_{48}$ v sobě měla 1 632 nukleonů a měla přibližně kulový tvar. Vídeňský tým ale zkoušel použít i molekuly jiných tvarů, například plošnou molekulu porphyrinu.

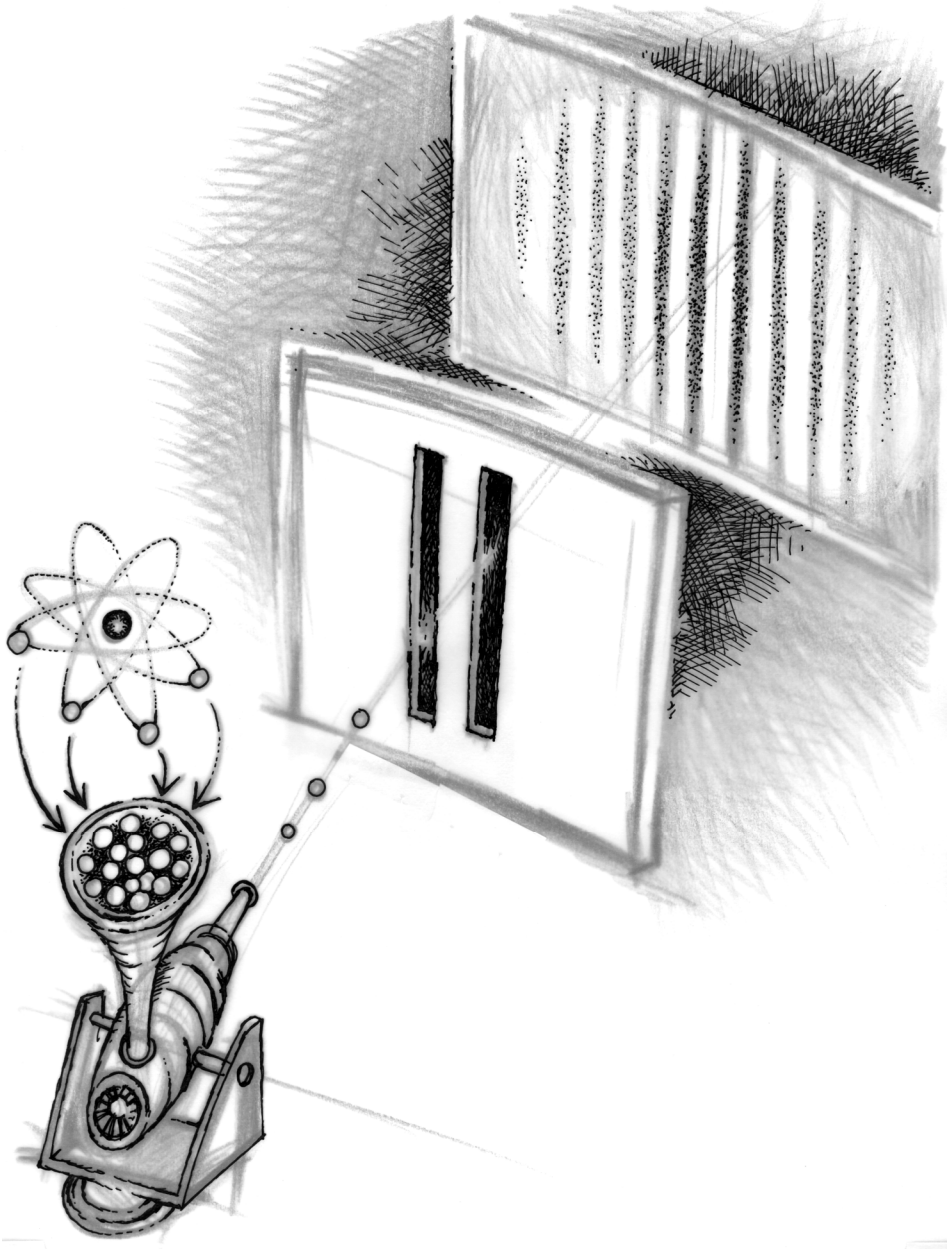


Obr. 2.14 Molekuly porphyrinu (nalevo) a fulerenu $C_{60}F_{48}$ (napravo) používané při víceštěrbinových experimentech ve Vídni

Ukázalo se, že schopnost interferovat sama se sebou tato molekula měla jen tehdy, pokud nijak neinteragovala s okolím a nebylo principiálně možné zjistit její polohu (kterou štěrbivou prošla). Interferenční obrazec se objevoval s poklesem tlaku v aparatuře (nebylo možné detekovat polohu obřích molekul z odrazu atomů atmosféry od těchto molekul). Interferenční obrazec se také objevoval s poklesem teploty. Při nízkých teplotách již molekula nevysílala žádné fotony, ze kterých by se dalo určit, kde se nachází. Závěr je jednoduchý. Objekty se chovají kvantově, pokud nemohou interagovat s okolím, a klasicky, pokud interagují s okolím. V takovém případě říkáme, že mají provázané stavy s okolím, což znamená, že vlnovou funkci objektu spolu s okolím nelze separovat na prostý součin, v němž jedna část závisí pouze na proměnných objektu a druhá pouze na proměnných popisujících okolí.

Pokud tedy chcete, aby se váš kamarád choval kvantově, stal se vlnou a interferoval sám se sebou, musíte ho zamrazit téměř na absolutní nulu (nebude již vysílat žádné fotony) a dát do vakua, kde s ním nebudou interagovat žádné molekuly okolních plynů. V tu chvíli nebudete mít s kamarádem žádnou interakci a nebudete vědět, kde je. Začne se chovat jako kvantový objekt, bude interferovat sám se sebou a třeba projde i více štěrbinami naráz. Alespoň současné experimenty s obřími molekulami to naznačují. Samozřejmě ale může existovat nějaká další principiální hranice mezi kvantovým světem a makrosvětem, kterou jsme zatím neobjevili.

Detailnější informace o různých interpretacích kvantové teorie se čtenář může dozvědět z publikace [31].



Obr. 2.15: Princip dvojštěrbinového experimentu

2.3 Harmonický oscilátor

Na příkladu harmonického oscilátoru, jehož klasické řešení známe z kapitoly 1.3.2, si ukážeme typické postupy při hledání vlastních hodnot operátoru energie. Naše úloha je

$$\hat{\mathbf{H}}\,|\,n\,\rangle = E_n\,|\,n\,\rangle\,,$$

► $$\hat{\mathbf{H}} \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{X}}^2, \qquad (2.50)$$

$$\left[\,\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{P}}\,\right] = \mathrm{i}\,\hbar\,\hat{\mathbf{1}}.$$

Jde o problém vlastních hodnot Hamiltonova operátoru s konkrétním průběhem potenciální energie a zadanými základními komutačními relacemi mezi operátorem polohy a hybnosti.

V kapitole 2.3.1 úlohu vyřešíme v rámci klasické Schrödingerovy vlnové mechaniky. Za Hilbertův prostor zvolíme prostor $\mathcal{L}^2(\mathcal{R})$, volba operátorů (2.44) a (2.47) povede na Schrödingerovu rovnici (2.49) v jedné dimenzi. Řešení této rovnice se provádí rozvojem do nekonečných řad, které je třeba „oříznout“ tak, aby řešení bylo z prostoru $\mathcal{L}^2(\mathcal{R})$, tj. integrovatelné s kvadrátem. Odsud získáme spektrum operátoru energie.

V kapitole 2.3.2 si ukážeme řešení úlohy (2.50) bez volby reprezentace. Nebudeme vůbec volit konkrétní podobu Hilbertova prostoru. Řešení nalezneme jen z formulace úlohy (2.50). Uvidíme tak, že konkrétní volba Hilbertova prostoru není podstatná. Při tomto přístupu si zavedeme kreační a anihilační operátory, které svým působením posouvají energii o jednu hladinu výše či níže. Tyto operátory jsou v kvantové teorii velmi užitečné, a proto se s nimi seznámíme již nyní u jednoduchého příkladu harmonických oscilací.

V kapitole 2.3.3 si ukážeme řešení úlohy (2.50) na prostoru ℓ^2 nekonečných posloupností sčitatelných s kvadrátem (v rámci tzv. Heisenbergovy maticové mechaniky). Operátory zde budou nekonečné matice. Možná se vám zdá obtížné hledat vlastní čísla nekonečných matic. Problém ale není tak složitý. Jestliže za vektory báze zvolíme vlastní vektory příslušného operátoru, bude matice odpovídající tomuto operátoru diagonální. Vlastní čísla diagonálních matic se hledají velmi snadno – jsou to právě prvky na diagonále.

Třemi různými způsoby tak uvidíte řešení jednoho a téhož problému. V kvantové teorii jde totiž o vnitřní strukturu teorie, nikoli o konkrétní reprezentaci, ve které výpočet provádíme.

2.3.1 Řešení pomocí vlnové mechaniky (Schrödinger)

Hamiltonova funkce jednodimenzionálního harmonického oscilátoru je dána součtem kinetické a potenciální energie (1.31)

$$H(x,p) = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\,. \qquad (2.51)$$

Hamiltonův operátor je v prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ potom dán jednoduchou relací

► $$\hat{\mathbf{H}} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 . \tag{2.52}$$

Odpovídající Schrödingerova rovnice pro vlastní funkci $\psi(x)$ z prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$ má jednoduchý tvar

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x) . \tag{2.53}$$

Jde o obyčejnou lineární diferenciální rovnici druhého řádu s nelineárním koeficientem u nulté derivace. Standardní tvar této rovnice (s jednotkovým koeficientem u nejvyšší derivace) je:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + \left(\frac{2mE}{\hbar^2} - \frac{m^2\omega^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi = 0 . \tag{2.54}$$

Rovnici budeme řešit ve čtyřech krocích:

1. substituce ve vnitřní (nezávislé) proměnné

V nezávislé proměnné budeme volit takovou substituci, která „zbezrozměrní“ rovnici. Přesuňme koeficienty tak, aby byly symetrické u proměnné x

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\frac{m\omega}{\hbar}\mathrm{d}x^2} - \frac{m\omega}{\hbar}x^2\psi + \frac{2E}{\hbar\omega}\psi = 0 \tag{2.55}$$

a proveďme substituci

$$\xi \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}\,x , \tag{2.56}$$

po které Schrödingerova rovnice získá bezrozměrný tvar

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi + \lambda\psi = 0 , \qquad \lambda \equiv \frac{2E}{\hbar\omega} . \tag{2.57}$$

2. substituce ve vnější (závislé) proměnné

V závislé proměnné budeme volit takovou substituci, která zohlední chování vlnové funkce pro $\xi \to \pm\infty$. Pro velká ξ můžeme zanedbat poslední člen v rovnici (2.57) oproti předposlednímu. Přibližně platí

$$\xi \to \pm\infty \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\xi^2} - \xi^2\psi \approx 0 \qquad \Rightarrow \qquad \psi \approx \mathrm{e}^{\pm\xi^2/2} .$$

(řešení stačí dosadit do původní rovnice a zanedbat členy s nižšími mocninami ξ). Kladné z nalezených řešení evidentně není z prostoru $\mathcal{L}^2$, integrál z kvadrátu přes celý

prostor by byl nekonečný. Vlnová funkce se tedy pro velká ξ musí chovat jako funkce $\exp[-\xi^2]$. To nás přivádí k substituci pro závislou proměnnou

$$\psi(\xi) = \mathrm{e}^{-\xi^2/2}\, u(\xi)\,, \tag{2.58}$$

po jejímž provedení dostaneme rovnici

$$u'' - 2\xi u' + (\lambda - 1)u = 0\,. \tag{2.59}$$

Derivace se automaticky rozumí podle nové proměnné ξ. V principu by z matematického hlediska bylo v pořádku říci „v rovnici (2.54) provedeme substituce (2.56) a (2.58) a výsledná rovnice je (2.59)“. V bodech 1 a 2 jsme si jen ukázali, jaké pohnutky nás k těmto substitucím vedou, protože postup je obdobný i u jiných průběhů potenciální energie.

3. rozvoj řešení do mocninné řady

Řešení rovnice (2.59) budeme hledat ve tvaru mocninné řady

$$u(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \xi^k.$$

Snadno nalezneme první a druhou derivaci

$$u'(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k\, c_k\, \xi^{k-1}; \qquad u''(\xi) = \sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, c_k\, \xi^{k-2}.$$

Výrazy pro u a její derivace dosadíme do rovnice (2.59):

$$\sum_{k=0}^{\infty} k(k-1)\, c_k\, \xi^{k-2} - \sum_{k=0}^{\infty} 2k\, c_k\, \xi^k + (\lambda - 1) \sum_{k=0}^{\infty} c_k\, \xi^k \;=\; 0\,.$$

Jednotlivé členy upravíme tak, aby mocniny proměnné ξ byly stejné (v prvním členu položíme $k - 2 = l$):

$$\sum_{l=-2}^{\infty} (l+1)(l+2)\, c_{l+2}\, \xi^l - \sum_{l=0}^{\infty} 2l\, c_l\, \xi^l + (\lambda - 1) \sum_{l=0}^{\infty} c_l\, \xi^l \;=\; 0\,.$$

První dva členy prvního součtu jsou nulové, a proto můžeme spodní hranici posunout na hodnotu $l = 0$:

$$\sum_{l=0}^{\infty} \left[(l+1)(l+2)\, c_{l+2} - (2l + 1 - \lambda)\, c_l \right] \xi^l \;= 0\,.$$

Má-li být polynomiální výraz identicky nulový pro každou hodnotu ξ, musí být nulové všechny koeficienty, tj. výrazy v hranaté závorce. Získáváme tak rekurentní relaci pro koeficienty c_l naší řady:

► $$c_{l+2} = \frac{(2l + 1 - \lambda)}{(l+1)(l+2)}\, c_l\,. \tag{2.60}$$

Budeme-li znát koeficienty c_0 a c_1, budeme znát celé řešení, protože z rekurentní relace můžeme spočítat

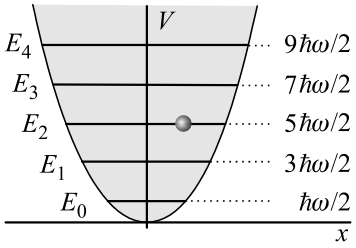
$$c_0 \quad \Rightarrow \quad c_2, c_4, c_6, \ldots$$
$$c_1 \quad \Rightarrow \quad c_3, c_5, c_7, \ldots.$$

Koeficienty c_0 a c_1 tak hrají roli dvou integračních konstant řešení diferenciální rovnice (2.59) druhého řádu. Sudá část řady se počítá z c_0 a lichá z c_1.

4. oříznutí řady

Nalezené řešení je ve tvaru nekonečné mocninné řady. Řeší sice původní rovnici, ale není z prostoru $\mathcal{L}^2$. Aby bylo řešení z $\mathcal{L}^2$ (integrovatelné s kvadrátem), musí být řada konečná, tedy polynomiální. Prakticky to znamená, že koeficienty řady musí být od určitého $l = n$ nulové. V rekurentní relaci (2.60) bude čitatel pro toto $l = n$ nulový a veškeré odvozené koeficienty c_l s $l \geq n$ nulové. Vidíme, že nebude možné takto „oříznout“ současně sudé i liché členy řady. Proto jsou možná jen sudá ($c_0 \neq 0$, $c_1 = 0$) nebo jen lichá řešení ($c_0 = 0$, $c_1 \neq 0$) představující sudý nebo lichý polynom stupně n. Podmínka oříznutí (nulovost čitatele) v (2.60) je $2n + 1 - \lambda = 0$ a plyne z ní po vyjádření λ spektrum energie harmonického oscilátoru:

► $$E_n = (n + 1/2)\hbar\omega. \qquad (2.61)$$



Obr. 2.16: Spektrum harmonického oscilátoru

Poznámka 1: Nezapomínejte, že energie E (vlastní hodnota operátoru $\hat{\mathbf{H}}$) je po celou dobu výpočtu schována v bezrozměrné konstantě (vlastním číslu) λ.

Poznámka 2: Sama Schrödingerova rovnice má řešení pro každou hodnotu energie. Tato řešení ale nejsou integrovatelná s kvadrátem, až výběr integrovatelných funkcí (oříznutí řady) vede k diskrétnímu spektru operátoru energie (jen pro některé vybrané hodnoty energie ubývá řešení v oblasti $\pm\infty$ dostatečně rychle, aby bylo integrovatelné s kvadrátem). Tato situace je typická pro spojité průběhy potenciální energie s minimem.

Poznámka 3: Základní hladina energie $E_0 = \hbar\omega/2$ je nenulová! Ani při nulové absolutní teplotě není harmonický oscilátor v klidu a vykonává tzv. nulové kmity (například oscilace krystalové mříže). Při absolutní nule se hmota nachází ve stavu s nejnižší možnou energií, nikoli však v klidu. To je dáno relacemi neurčitosti: nemůžeme znát současně polohu (nulovou) a hybnost (také nulovou).

Poznámka 4: Spektrum operátoru energie je ekvidistantní, rozdíl dvou libovolných sousedních energetických hladin je $\Delta E = E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$: To je právě známý Planckův vztah z počátku 20. století. Energie jakýchkoli kmitů se nemůže měnit spojitě, ale po skocích (energetických kvantech)

$$\Delta E = \hbar\omega . \tag{2.62}$$

Poznámka 5: Zde se také nachází jedna z prvních možností experimentálního určení Planckovy konstanty měřením energetických kvant (například při fotoelektrickém jevu: vyrážení elektronů z povrchu kovu za pomoci kvant energie elektromagnetického záření – fotonů). Zatím byla Planckova konstanta jediným neurčeným parametrem základních postulátů kvantové teorie. Planckova konstanta se samozřejmě vyskytuje i v jiných vztazích.

Poznámka 6: Polynomiální řešení, která jsme našli pro funkci u, se nazývají Hermitovy polynomy a označujeme je $H_n(\xi)$. Pro dané n nejprve určíme bezrozměrné vlastní číslo λ_n

$$\lambda_n \equiv \frac{2E_n}{\hbar\omega} = \frac{2(n+1/2)\,\hbar\omega}{\hbar\omega} = 2n+1$$

a z rekurentní formule (2.60) určíme pomocí c_0 nebo c_1 (podle toho zda jde o sudý či lichý polynom) ostatní koeficienty rozvoje. Pro $c_0 \neq 0$, $c_1 = 0$ nebo $c_0 = 0$, $c_1 \neq 0$ se nalezené polynomy nazývají Hermitovy. Prvních několik Hermitových polynomů vychází:

$$H_0(\xi) = 1 , \qquad H_3(\xi) = \xi - 2/3\,\xi^3 ,$$
$$H_1(\xi) = \xi , \qquad H_4(\xi) = 1 - 4\xi^2 + 4/3\,\xi^4 ,$$
$$H_2(\xi) = 1 - 2\xi^2 , \qquad H_5(\xi) = \xi - 4/3\,\xi^3 + 4/15\,\xi^5 \ldots$$

Koeficienty c_0 a c_1 jsme volili rovny jedné. Stupeň polynomu n udává současně počet nulových bodů polynomu (počet průsečíků s osou ξ).

Poznámka 7: Hermitovy polynomy se snadno počítají nenormované z rekurentní formule

$$H_{n+1}(\xi) = 2\xi\, H_n(\xi) - 2n\, H_{n-1}(\xi) .$$

Pro první polynomy vychází:

$$H_0(\xi) = 1 , \qquad H_3(\xi) = 8\xi^3 - 12\xi ,$$
$$H_1(\xi) = 2\xi , \qquad H_4(\xi) = 16\xi^4 - 48\,\xi^2 + 12 ,$$
$$H_2(\xi) = 4\xi^2 - 2 , \qquad H_5(\xi) = 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \ldots$$

Normovací koeficienty vlnové funkce $H_n(\xi)\exp[-\xi^2/2])$ jsou dány vztahem

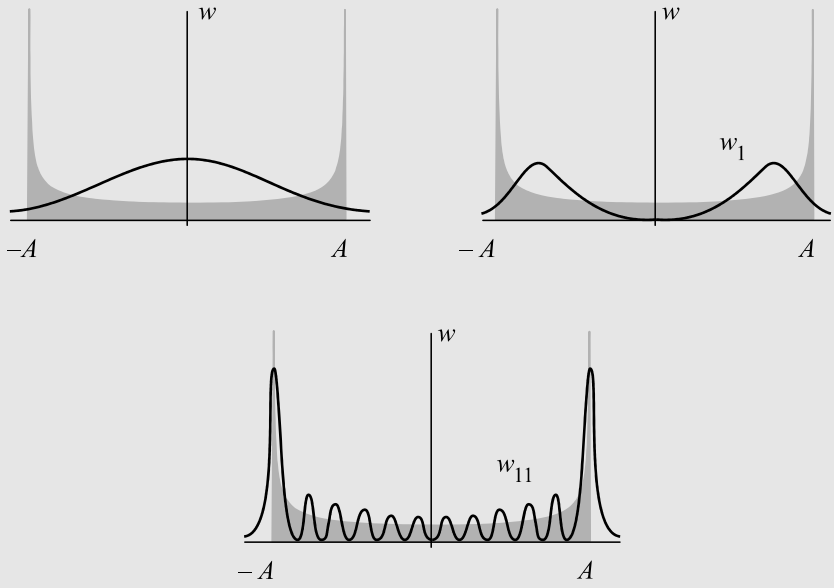
$$\alpha_n = \frac{1}{\sqrt{\pi^{1/2}\; n!\, 2^n}} .$$

Poznámka 8: Celkové řešení spektrálního problému je

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega,$$
$$|\, n \,\rangle = \psi_n(\xi) = \alpha_n H_n(\xi)\, \mathrm{e}^{-\xi^2/2}; \quad n = 0,1,2,\ldots \tag{2.63}$$

Vlastní funkce $\psi_n(\xi)$ tvoří přirozený úplný ortonormální systém na Hilbertově prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, +\infty)$, který pro $\xi \to \pm\infty$ „dosti rychle“ ubývá k nule.

Poznámka 9: Hustota pravděpodobnosti, že částice kmitající s energií E_n (oscilátor ve stavu $|\, n \,\rangle$) se nachází v poloze x (resp. bezrozměrné poloze ξ), je dána výrazem $w_n = \psi_n^* \psi_n$. Pro několik prvních stavů je vykreslena na obrázku. Pravděpodobnost má oscilující charakter a existuje malá nenulová pravděpodobnost výskytu oscilátoru i za klasickými body obratu. Tento obraz nastává pro systémy s nízkou teplotou a je zcela odlišný od klasického řešení. Pro velké energie (vysoká n) by se měla křivka blížit klasické pravděpodobnosti výskytu oscilátoru (1.36). Vidíme však, že oscilace jsou sice velmi husté, ale existuje značné množství bodů, ve kterých je kvantová pravděpodobnost nulová. Nic takového však u makroskopických systémů neměříme. Proč? To je dáno rozlišovací schopností makroskopických přístrojů. Žádný přístroj nebude měřit polohu s takovou přesností, aby registroval jednotlivá minima pravděpodobnosti u vysokých energetických stavů. Přístroj ve skutečnosti určuje polohu s konečnou přesností, do které se vejde řada minim a registruje jen střední hodnotu hustoty pravděpodobnosti. A tou je právě klasická křivka, která je na obrázku znázorněna šedou oblastí.



Obr. 2.17: Kvantová pravděpodobnost výskytu oscilátoru. Povšimněte si, že na okrajích je (s výjimkou základního stavu) pravděpodobnost maximální. Viz také obrázek 2.18.

2.3.2 Řešení bez volby reprezentace (Dirac)

Úlohu (2.50) budeme nyní řešit obecně. Hamiltonův operátor nejprve přepíšeme do bezrozměrného tvaru:

$$\hat{\mathbf{H}}\left(\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{P}}\right) \equiv \frac{1}{2}m\omega^2\hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} \quad \rightarrow \quad \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} \equiv \frac{m\omega}{2\hbar}\hat{\mathbf{X}}^2 + \frac{1}{2m\hbar\omega}\hat{\mathbf{P}}^2 . \qquad (2.64)$$

Převedení do bezrozměrného tvaru naprosto není nutné, veškeré další úvahy by bylo možné provádět i s rozměrovým hamiltoniánem a všechny následující vztahy by se lišily o konstantu $\hbar\omega$, kterou jsme hamiltonián vydělili. Důvodem je to, že vztahy získané z bezrozměrného hamiltoniánu jsou poněkud názornější. Pro komutující čísla je možné součet kvadrátů „odmocnit“ pomocí vztahu $a^2 + b^2 = (a + \mathrm{i}b)(a - \mathrm{i}b)$. U nekomutujících objektů není situace tak jednoduchá. Zaveďme operátory:

$$\hat{\mathbf{a}} \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{\mathbf{X}} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{\mathbf{P}};$$
$$\hat{\mathbf{a}}^\dagger \equiv \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}}\,\hat{\mathbf{X}} - \mathrm{i}\sqrt{\frac{1}{2m\hbar\omega}}\,\hat{\mathbf{P}}. \qquad (2.65)$$

Oba tyto operátory jsou pro kvantovou teorii velmi důležité. Nazývají se anihilační a kreační operátory (smysl tohoto názvu uvidíme za chvíli). Kreační a anihilační operátory, jako jedny z mála v kvantové teorii, nejsou hermitovské a nepůsobí tedy v obou částech skalárního součinu stejně. Kreační operátor je hermitovsky sdruženým operátorem k anihilačnímu. Platí pro ně některé důležité relace, například:

$$\begin{aligned}
&(1) \quad \hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{a}} = \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2},\\
&(2) \quad \hat{\mathbf{a}}\,\hat{\mathbf{a}}^\dagger = \frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2},\\
&(3) \quad \hat{\mathbf{X}} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}}\left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger + \hat{\mathbf{a}}\right),\\
&(4) \quad \hat{\mathbf{P}} = \mathrm{i}\sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\left(\hat{\mathbf{a}}^\dagger - \hat{\mathbf{a}}\right),\\
&(5) \quad \left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{a}}\right] = -\hbar\omega\hat{\mathbf{a}},\\
&(6) \quad \left[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger\right] = +\hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger,\\
&(7) \quad \left[\hat{\mathbf{a}}, \hat{\mathbf{a}}^\dagger\right] = \hat{\mathbf{1}}.
\end{aligned} \qquad (2.66)$$

Důkaz všech relací je triviální. Stačí jen dosadit z definice kreačních a anihilačních operátorů $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$, $\hat{\mathbf{a}}$ (2.65) a využít základní komutační relace

$$[\hat{\mathbf{X}},\hat{\mathbf{P}}] = \mathrm{i}\hbar\,\hat{\mathbf{1}}.$$

Relace (1) a (2) jsou zobecněním vztahu

$$a^2 + b^2 = (a + \mathrm{i}b)(a - \mathrm{i}b)$$

pro nekomutující objekty a představují formální odmocnění hamiltoniánu. Kreační a anihilační operátory jsou lineární kombinací operátoru souřadnice a operátoru hybnosti. Proto je možné naopak operátory souřadnice a hybnosti vyjádřit jako lineární kombinaci kreačních a anihilačních operátorů – viz relace (3) a (4). Známe-li kreační a anihilační operátor, můžeme z relací (1) až (4) zpětně zrekonstruovat také hamiltonián. Komutační relace (5) až (7) vyjadřují základní vlastnosti kreačních a anihilačních operátorů: Uvidíme, že relace (5) znamená, že anihilační operátor posouvá stavy systému o energetickou hladinu $\hbar\omega$ dolů a relace (6) znamená, že kreační operátor posouvá stav o energetickou hladinu $\hbar\omega$ vzhůru. Relace (7) je potom vzájemným vztahem mezi anihilačním a kreačním operátorem.

V následující větě dokážeme, že operátor $\hat{\mathbf{a}}^\dagger$ je kreačním operátorem, tj. posouvá energetické stavy o jednotku vzhůru (kreuje, vytváří energetické kvantum).

Věta o kreačním operátoru

Působením kreačního operátoru na vlastní stav energie se posuneme do následujícího energetického stavu. Nechť $\hat{\mathbf{H}}\,|\,n\,\rangle = E_n\,|\,n\,\rangle$, potom $\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n\,\rangle \sim |\,n+1\,\rangle$.

Důkaz:

$$\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n\,\rangle \overset{(6)}{=} (\hat{\mathbf{a}}^\dagger\hat{\mathbf{H}} + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger)\,|\,n\,\rangle = (\hat{\mathbf{a}}^\dagger E_n + \hbar\omega\hat{\mathbf{a}}^\dagger)\,|\,n\,\rangle = (E_n + \hbar\omega)\,\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n\,\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n\,\rangle = (E_n + \hbar\omega)\,\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n\,\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n> \sim |\,n+1>.$$

■

Zcela analogicky můžeme z relace (5) v sadě (2.66) ukázat, že pro anihilační operátor platí $\hat{\mathbf{a}}\,|\,n\,\rangle \sim |\,n-1\,\rangle$. Zavedeme-li normovací konstanty (požadujeme, aby všechny stavy byly normovány k jedné, tj. tvořily ortonormální bázi z vlastních vektorů operátoru energie), můžeme posouvání v energetickém spektru prováděné kreačním a anihilačním operátorem jednoduše zapsat jako rovnosti

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n\,\rangle &= \alpha_n^+\,|\,n+1\,\rangle\,, \\ \hat{\mathbf{a}}\,|\,n\,\rangle &= \alpha_n^-\,|\,n-1\,\rangle\,. \end{aligned} \tag{2.67}$$

Normovací konstanty α určíme později. Nyní naše úsilí zaměříme na nalezení spektra Hamiltonova operátoru pro harmonický oscilátor, aniž bychom specifikovali volbu příslušného Hilbertova prostoru.

Hamiltonův operátor je součtem kvadrátů dvou Hermitových operátorů a je proto pozitivně definitní, tj. jeho vlastní čísla jsou nezáporná. Kreační a anihilační operátory posouvají ve spektru energie o konstantní hodnotu (energetické kvantum). Musí tedy existovat stav s nejnižší možnou energií, která je nezáporná. Tento stav nazýváme základní stav a označujeme ho $|\,\mathrm{ZS}\,\rangle$. Zapůsobíme-li na základní stav anihilačním operátorem, musíme dostat nulový vektor $|\,\mathbf{0}\,\rangle$ s nulovou velikostí, který netvoří paprsek a není žádným fyzikálním stavem, protože v základním stavu již není co anihilovat, jsme ve stavu s nejnižší možnou energií). Pro základní stav tedy platí:

$$\hat{\mathbf{H}}\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle = E_0\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle\,; \qquad \hat{\mathbf{a}}\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle = |\,\mathbf{0}\,\rangle\,.$$

Nalezněme kvadrát velikosti poslední relace (skalární součin prvku se sebou samým):

$$\langle\,\mathrm{ZS}\,|\,\hat{\mathbf{a}}^{\dagger}\,\hat{\mathbf{a}}\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle = 0 \quad \overset{(2.66.1)}{\Rightarrow} \quad \langle\,\mathrm{ZS}\,|\,\frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{\hat{\mathbf{1}}}{2}\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\hbar\omega}\langle\,\mathrm{ZS}\,|\,\hat{\mathbf{H}}\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle - \frac{1}{2}\langle\,\mathrm{ZS}\,|\,\hat{\mathbf{1}}\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \left(\frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\langle\,\mathrm{ZS}\,|\,\mathrm{ZS}\,\rangle = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{E_0}{\hbar\omega} - \frac{1}{2} = 0 \quad \Rightarrow \quad E_0 = \frac{\hbar\omega}{2}\,.$$

Známe-li hodnotu základního energetického stavu, můžeme další hodnoty energií získat působením kreačního operátoru, ten posouvá v energii o konstantu $\hbar\omega$, je tedy jasné, že

$$\begin{aligned} E_1 &= E_0 + \hbar\omega = \frac{3}{2}\hbar\omega\,, \\ E_2 &= E_0 + 2\hbar\omega = \frac{5}{2}\hbar\omega\,, \\ &\vdots \\ E_n &= E_0 + n\hbar\omega = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega\,; \qquad n = 0,1,2,\ldots \end{aligned}$$

Spektrum harmonického oscilátoru jsme získali jen z vlastností Hamiltonova operátoru, resp. jen z formulace úlohy (2.50). Nikde jsme nevolili konkrétní reprezentaci, konkrétní Hilbertův prostor. Kreační a anihilační operátory, se kterými jsme se zde poprvé setkali, mají značný význam v kvantové teorii pole, kde pomocí podobných operátorů kreujeme a anihilujeme jednotlivé částice přítomné v systému. Zde u harmonického oscilátoru jen kreujeme či anihilujeme energetické kvantum a tím se dostáváme o jednu hladinu výše nebo níže. Aby naše odvození bylo úplné, určíme na závěr normovací konstanty ve výrazu (2.67). Vyjděme ze základních relací pro oba operátory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}^{\dagger}\,|\,n\,\rangle &= \alpha_n^{+}\,|\,n+1\,\rangle\,, \\ \hat{\mathbf{a}}\,|\,n\,\rangle &= \alpha_n^{-}\,|\,n-1\,\rangle\,. \end{aligned}$$

Nejprve určíme kvadráty obou relací

$$\begin{aligned} \langle\,n\,|\,\hat{\mathbf{a}}\,\hat{\mathbf{a}}^{\dagger}\,|\,n\,\rangle &= \left|\alpha_n^{+}\right|^2\,\langle\,n+1\,|\,n+1\,\rangle\,, \\ \langle\,n\,|\,\hat{\mathbf{a}}^{\dagger}\hat{\mathbf{a}}\,|\,n\,\rangle &= \left|\alpha_n^{-}\right|^2\,\langle\,n-1\,|\,n-1\,\rangle\,. \end{aligned}$$

Součiny operátorů nalevo vyjádříme ze vztahů (1) a (2) sady (2.66):

$$\begin{aligned} \langle\,n\,|\,\frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\,|\,n\,\rangle &= \left|\,\alpha_n^{+}\right|^2\,\langle\,n+1\,|\,n+1\,\rangle\,, \\ \langle\,n\,|\,\frac{\hat{\mathbf{H}}}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\,|\,n\,\rangle &= \left|\,\alpha_n^{-}\right|^2\,\langle\,n-1\,|\,n-1\,\rangle\,. \end{aligned}$$

Nalevo zapůsobíme Hamiltonovým operátorem a dostaneme

$$\left(\frac{E_n}{\hbar\omega} + \frac{1}{2}\right)\langle n\,|\,n\rangle = \left|\alpha_n^+\right|^2 \langle n+1\,|\,n+1\rangle,$$
$$\left(\frac{E_n}{\hbar\omega} - \frac{1}{2}\right)\langle n\,|\,n\rangle = \left|\alpha_n^-\right|^2 \langle n-1\,|\,n-1\rangle.$$

Z požadavku normovanosti vlastních vektorů operátoru energie k jedné máme:

$$\left|\alpha_n^+\right|^2 = \left(\frac{E_n}{\hbar\omega}+\frac{1}{2}\right) = \left(\frac{(n+1/2)\,\hbar\omega}{\hbar\omega}+\frac{1}{2}\right) = n+1,$$

$$\left|\alpha_n^-\right|^2 = \left(\frac{E_n}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}\right) = \left(\frac{(n+1/2)\,\hbar\omega}{\hbar\omega}-\frac{1}{2}\right) = n.$$

Fázový faktor při odmocňování komplexního čísla není podstatný (jednotkovou velikost vektoru neovlivní). Výsledné působení kreačního a anihilačního operátoru (2.67) včetně normovací konstanty tedy je:

► $$\begin{aligned}\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n\rangle &= \sqrt{n+1}\,|\,n+1\rangle,\\ \hat{\mathbf{a}}\,|\,n\rangle &= \sqrt{n}\,|\,n-1\rangle.\end{aligned} \tag{2.68}$$

Tento výsledek si můžete snadno zapamatovat: Pod odmocninou je vždy pořadové číslo vyššího energetického stavu z obou stran rovnice. Zajímavé vlastnosti má ještě jeden operátor:

► $$\hat{\mathbf{N}} \equiv \hat{\mathbf{a}}^\dagger\,\hat{\mathbf{a}}. \tag{2.69}$$

Zapůsobme tímto operátorem na stav $|\,n\rangle$, s využitím relací (2.68) dostaneme

$$\hat{\mathbf{N}}\,|\,n\rangle = \hat{\mathbf{a}}^\dagger\,\hat{\mathbf{a}}\,|\,n\rangle = \sqrt{n}\,\hat{\mathbf{a}}^\dagger\,|\,n-1\rangle = \sqrt{n}\,\sqrt{n}\,|\,n\rangle = n\,|\,n\rangle.$$

Vlastním číslem tohoto operátoru je počet kvant přítomných v daném energetickém stavu. V kvantové teorii pole má tento operátor význam *operátoru počtu částic* a platí pro něho vztah

► $$\hat{\mathbf{N}}\,|\,n\rangle = n\,|\,n\rangle. \tag{2.70}$$

2.3.3 Řešení pomocí maticové mechaniky (Heisenberg)

Řešme nyní ještě jednou úlohu (2.50) o harmonickém oscilátoru na prostoru nekonečných posloupností ℓ^2 sčitatelných s kvadrátem. Na prostoru n-tic jsou operátory čtvercové matice $n\times n$. Na prostoru nekonečných posloupností ($n\to\infty$) budou operátory nekonečně rozměrné matice. Úkol tedy je: najít nekonečně rozměrné matice **X**, **P**, **H**, které vyhovují úloze (2.50). Tyto matice nemusíme hledat „na zelené louce“. S tím co víme o kreačních a anihilačních operátorech, je snadno zkonstruujeme. Nalezneme je v energetické reprezentaci – to znamená, že určíme maticové elementy operátorů polohy, hybnosti a energie v bázi vytvořené z vlastních vektorů Hamiltonova operátoru. Všechny tři operátory umíme zkonstruovat pomocí kreačních a anihilačních operátorů podle relace (2.66). A působení kreačních a anihilačních operátorů na zvolenou bázi

také známe – viz relace (2.68). Konstrukce elementů příslušných matic je tedy víceméně triviální záležitostí:

$$X_{k\,l} = \langle\, k \,|\, \hat{\mathbf{X}} \,|\, l \,\rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}}\, \langle\, k \,|\, \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger} + \hat{\mathbf{a}} \right) |\, l \,\rangle =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}}\, \left(\sqrt{l+1}\, \langle\, k \,|\, l+1 \,\rangle + \sqrt{l}\, \langle\, k \,|\, l-1 \,\rangle \right) =$$

$$= \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}}\, \left(\sqrt{l+1}\, \delta_{k,\,l+1} + \sqrt{l}\, \delta_{k,\,l-1} \right), \qquad k,l = 0,1,2\ldots.$$

Operátor polohy jsme nejprve vyjádřili z (2.66) pomocí kreačního a anihilačního operátoru a poté jsme jimi zapůsobili ve shodě s (2.68). Obdobně máme pro hybnost

$$P_{k\,l} = \langle\, k \,|\, \hat{\mathbf{P}} \,|\, l \,\rangle = \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\, \langle\, k \,|\, \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger} - \hat{\mathbf{a}} \right) |\, l \,\rangle =$$

$$= \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\, \left(\sqrt{l+1}\, \langle\, k \,|\, l+1 \,\rangle - \sqrt{l}\, \langle\, k \,|\, l-1 \,\rangle \right) =$$

$$= \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}}\, \left(\sqrt{l+1}\, \delta_{k,\,l+1} - \sqrt{l}\, \delta_{k,\,l-1} \right), \qquad k,l = 0,1,2\ldots$$

Jako poslední nalezneme matici odpovídající Hamiltonovu operátoru. Tato matice jako jediná musí vyjít diagonální, protože jde o bázi z vlastních stavů operátoru energie:

$$H_{k\,l} = \langle\, k \,|\, \hat{\mathbf{H}} \,|\, l \,\rangle = \hbar\omega\, \langle\, k \,|\, \left(\hat{\mathbf{a}}^{\dagger} \hat{\mathbf{a}} + \frac{1}{2} \right) |\, l \,\rangle = \cdots$$

$$= \left(l + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega\, \delta_{kl}\,, \qquad k,l = 0,1,2\ldots.$$

Napišme si nyní nalezené matice:

$$\mathbf{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\,\omega}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{P} = \mathrm{i} \sqrt{\frac{m\hbar\omega}{2}} \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{1} & 0 & 0 & \cdots \\ \sqrt{1} & 0 & -\sqrt{2} & 0 & \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & -\sqrt{3} & \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \\ \vdots & & & & \ddots \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} \frac{\hbar\omega}{2} & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & \frac{3\hbar\omega}{2} & 0 & \\ 0 & 0 & \frac{5\hbar\omega}{2} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix}.$$

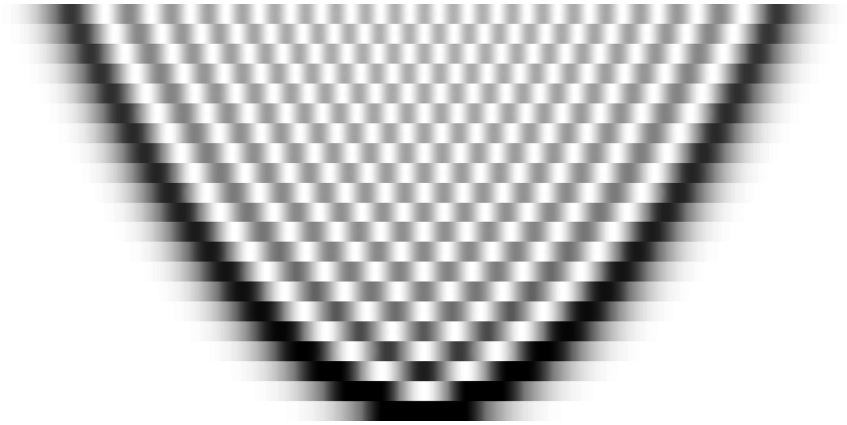
Ověřte si, že skutečně $[\mathbf{X}, \mathbf{P}] = \mathrm{i}\hbar\,\mathbf{1}$ a že také platí $\mathbf{H} = \mathbf{P}^2/2m + m\omega^2\mathbf{X}^2/2$ podle požadavků úlohy (2.50). Ze znalosti matic $\mathbf{X}$ a $\mathbf{P}$ jsme již mohli Hamiltonovu matici určit přímo z této relace. Poslední co zbývá, je nalézt vlastní čísla matice $\mathbf{H}$. Tato úloha je mimořádně jednoduchá. U diagonální matice jsou vlastní čísla právě prvky na diagonále. Výpočet je jednoduchý:

$$\mathbf{H}\,|\psi\rangle = E\,|\psi\rangle \quad \Rightarrow \quad (\mathbf{H} - \mathbf{1}E)\,|\psi\rangle = 0 \quad \Rightarrow \quad \det(\mathbf{H} - \mathbf{1}E) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(\frac{\hbar\omega}{2} - E\right)\cdot\left(\frac{3\hbar\omega}{2} - E\right)\cdot\left(\frac{5\hbar\omega}{2} - E\right)\ \cdots\ = 0 \quad \Rightarrow$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega \quad , \qquad n = 0, 1, 2, \ldots$$

Opět tedy máme vztah (2.61) pro spektrum harmonického oscilátoru.



Obr. 2.18: Hustota pravděpodobnosti výskytu oscilátoru od základního do 20. stavu. Spodní proužek odpovídá základnímu stavu, horní 20. stavu. Bílou barvou je kódována minimální pravděpodobnost, černou maximální pravděpodobnost výskytu. V bodech obratu (na parabole) je zjevně pravděpodobnost výskytu částice nejvyšší. Zdroj: Wikipedia.

2.4 Jednoduché jednorozměrné systémy

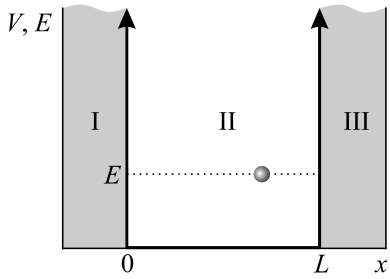
V reálné situaci se částice tu a tam ocitne v minimu potenciálu. Pro obecný tvar potenciálu není analytické řešení možné, a tak přichází na řadu nejrůznější aproximace. Potenciál je možné v okolí minima nahradit parabolickou závislostí a využít známé řešení pro harmonický oscilátor. Jinou možností je nahrazení průběhu potenciálu pravoúhlou jámou. Schrödingerova rovnice na prostoru $\mathcal{L}^2$ vede na diferenciální rovnici s konstantními koeficienty, jejíž řešení je mimořádně jednoduché. Složitější je navázání řešení v různých oblastech, které v případě jámy konečné výšky vede na celkem elegantní grafické řešení energetických hladin. Pokud bude jáma úzká a vysoká, můžeme ji v první aproximaci nahradit nekonečnou potenciálovou jámou a pak je celé řešení mimořádně jednoduché.

2.4.1 Nekonečná jáma

Předpokládejme pohyb částice v potenciálu nekonečné pravoúhlé jámy

$$V(x) = \begin{cases} 0; & x \in (0, L), \\ \infty; & x \notin (0, L). \end{cases} \tag{2.71}$$

Jde samozřejmě o fyzikální idealizaci, kterou ve skutečné přírodě nenajdeme. Potenciál rozdělíme na tři oblasti podle obrázku:



Obr. 2.19: Nekonečná pravoúhlá jáma

V oblastech I a III je potenciál nekonečný a jediným možným řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice je $\psi = 0$. Z fyzikálního hlediska to znamená, že pravděpodobnost výskytu částice mimo jámu je nulová. Kdyby byla jáma konečná (tj. konečný potenciál vně jámy), byla by vlnová funkce ψ v těsné blízkosti hranice jámy nenulová. Částice by měla sice malou, ale nenulovou pravděpodobnost existence i za hranicí jámy. V oblasti II má Schrödingerova rovnice (2.49) tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} = E\psi, \tag{2.72}$$

který lze upravit na standardní rovnici kmitů v proměnné x

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + k^2\psi = 0\,; \qquad k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}\,, \tag{2.73}$$

jejíž řešení je

$$\psi = A\cos kx + B\sin kx\,. \tag{2.74}$$

Vlnová funkce musí být spojitá na obou hranicích jámy, jinak by první derivace vlnové funkce byla derivací skoku, tj. distribucí, a druhá derivace by se dokonce chovala jako derivace distribuce, což odporuje původní rovnici (2.72). Proto musí platit okrajové podmínky $\psi(0) = 0$, $\psi(L) = 0$, ze kterých plyne

$$A = 0\,; \qquad k = n\frac{\pi}{L}\,; \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.75}$$

Kvantování je právě důsledkem aplikace okrajové podmínky. Hodnota k, ve které je podle vztahu (2.73) „zakuklena" energie, nemůže nabývat libovolných hodnot. Podmínka (2.75) tedy není nic jiného než kvantovací podmínka pro energii:

► $$E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\,n^2\,; \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.76}$$

Základní hladina energie je, podobně jako u harmonického oscilátoru, nenulová. Důvodem jsou opět Heisenbergovy relace neurčitosti – částice pohybující se v jámě je lokalizována v konečné oblasti a nemůže proto mít nulovou hybnost nebo energii. Pro $n = 0$ by bylo řešení nulové, tedy ve sporu s tím, že v jámě je přítomna částice. Na rozdíl od harmonického oscilátoru není spektrum energie ekvidistantní a s rostoucím číslem n rozdíl dvou sousedních hladin energie roste. Samotná vlnová funkce má tvar

$$\psi_n(x) = B\sin k_n x = B\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right). \tag{2.77}$$

Řešením jsou celé paprsky v Hilbertově prostoru $\mathcal{L}^2$. Z nich vybereme jednotkové vektory splňující

$$\langle\psi_n|\psi_n\rangle = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \int_0^L B^2\sin^2\left(n\pi x/L\right)\mathrm{d}x = 1 \qquad \Rightarrow \qquad B = \sqrt{\frac{2}{L}}\,.$$

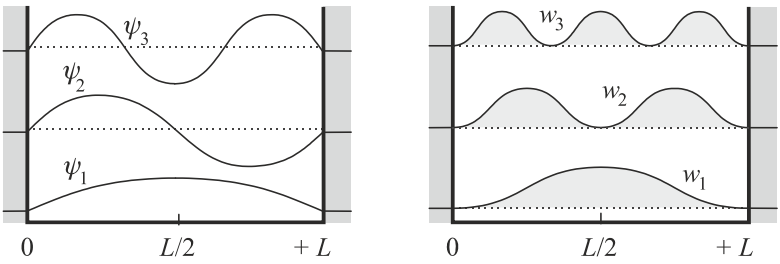
Normovací konstanta by mohla mít po odmocnění i zápornou nebo komplexní hodnotu. Vzhledem k tomu, že úkolem bylo vybrat některý z jednotkových vektorů paprsku, můžeme použít jakékoli řešení. Výsledné řešení v oblasti II tedy je

► $$|n\rangle = \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}}\,\sin\left(n\frac{\pi}{L}x\right); \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.78}$$

Pro pravděpodobnost výskytu částice v jámě (v oblasti II) potom máme

► $$w_n(x) = \psi_n^*\psi_n = \frac{2}{L}\sin^2\left(n\frac{\pi}{L}x\right); \qquad n = 1, 2, 3\ldots \tag{2.79}$$

Průběh prvních tří řešení naleznete na obrázku 2.20. Je zjevné, že uvnitř nekonečné pravoúhlé jámy existují místa, kde je pravděpodobnost výskytu částice nulová (stejně jako u harmonického oscilátoru). Mimo oblast jámy se částice nevyskytuje vůbec.



Obr. 2.20: Vlnové funkce (nalevo) a pravděpodobnosti (napravo) prvních tří stavů

Pokud budeme středovat polohu přes pravděpodobnosti w_n, snadno zjistíme, že průměrná poloha částice je přesně uprostřed jámy, a to nezávisle tom, ve kterém energetickém stavu se částice nachází:

► $$\langle x \rangle = \langle n \mid x \mid n \rangle = \int_0^L \psi_n^* \, x \, \psi_n \, \mathrm{d}x = \int_0^L \frac{2x}{L} \sin^2\left(n \frac{\pi}{L} x \right) \mathrm{d}x = \frac{L}{2}. \qquad (2.80)$$

◖ **Příklad 2.2: Elektron v jámě**

Elektron v polovodiči se nachází v elektrickém poli, jehož potenciál má tvar vysoké jámy o šířce 1 nm. Určete první tři hladiny energie. Poté řešte pro jámu s šířkou 1 mm. Nalezněte energetický rozdíl mezi třetí a druhou energetickou hladinou.

Řešení: Hodnoty určíme ze vztahu (2.76):

šířka	E_1	E_2	E_3	ΔE_{23}
1 nm	6×10^{-20} J = 0,38 eV	1,5 eV	3,4 eV	1,9 eV
1 mm	6×10^{-32} J = 0,38 peV	1,5 peV	3,4 peV	1,9 peV

Pro jámu o šířce 1 nm je kvantování podstatné a hodnoty energetických hladin jsou srovnatelné s energií elektronu v atomárním obalu. Pro jámu širokou 1 mm jsou energie o mnoho řádů nižší a rozdíly mezi energetickými hladinami běžnými prostředky nepozorovatelné.

◗

2.4.2 Konečná jáma

Jinou aproximací potenciálového minima je konečná jáma. Jde o výhodné přiblížení například pro interakce neutronů a protonů v atomovém jádře, i když zde bychom správně měli řešit třírozměrnou konečnou jámu. Šířka jámy je v tomto případě přibližně 10^{-15} m, což je zhruba dosah silné interakce. Narozdíl od nekonečné jámy nelze spektrum energie určit analyticky. Naštěstí existuje jednoduchá geometrická metoda, která vede k nalezení spektra. Budeme předpokládat, že jáma je orientována symetricky vůči počátku souřadnicového systému, což nám usnadní závěrečný výpočet spektra. Výpočet se opět rozpadne na tři oblasti, ve kterých budeme postupovat obdobně jako u nekonečné jámy. První i druhá derivace vlnové funkce musí být na rozhraní spojitá, jinak by druhá derivace ve Schrödingerově rovnici byla nepřípustnou distribucí.

Budeme tedy řešit Schrödingerovu rovnici s potenciálem konečné jámy:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2}+V(x)\psi=E\psi\,,\qquad V(x)=\begin{cases}0\,; & x\in(-L/2,L/2)\,,\\ V_0\,; & x\notin(-L/2,L/2)\,.\end{cases}\tag{2.81}$$

V jednotlivých oblastech I, II a III je potenciál konstantní a řešení je jednoduché. V oblastech I a III je řešení kombinací rostoucí a klesající exponenciály, v dané oblasti je vždy jen jedna z těchto funkcí integrovatelná s kvadrátem a druhou je nutné vyloučit (položit konstantu u ní rovnou 0). V oblasti II je řešení složené z funkcí kosinus a sinus:

$$\begin{aligned}&\psi_{\mathrm{I}}(x)=C\,\mathrm{e}^{hx}\,; && x\in\mathrm{I}\,, && h^2\equiv\frac{2m(V_0-E)}{\hbar^2}\,;\\ &\psi_{\mathrm{II}}(x)=A\cos kx+B\sin kx\,; && x\in\mathrm{II}\,, && \\ &\psi_{\mathrm{III}}(x)=D\,\mathrm{e}^{-hx}\,; && x\in\mathrm{III}\,, && k^2\equiv\frac{2mE}{\hbar^2}\,.\end{aligned}\tag{2.82}$$

Podmínky spojitosti na levé a pravé straně jámy vedou na rovnice

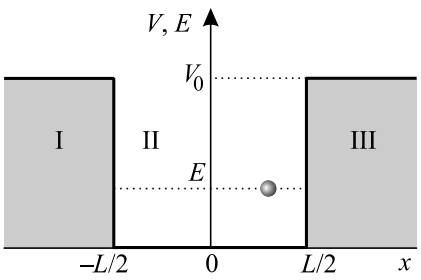
$$\begin{aligned}&\psi_{\mathrm{II}}(-L/2)=\psi_{\mathrm{I}}(-L/2)\,;\\ &\psi_{\mathrm{II}}(+L/2)=\psi_{\mathrm{III}}(+L/2)\,;\\ &\psi'_{\mathrm{II}}(-L/2)=\psi'_{\mathrm{I}}(-L/2)\,;\\ &\psi'_{\mathrm{II}}(+L/2)=\psi'_{\mathrm{III}}(+L/2)\,.\end{aligned}\tag{2.83}$$

Po dosazení dostaneme vztahy mezi konstantami A, B, C a D:

$$\begin{aligned}A\cos(kL/2)-B\sin(kL/2)&=C\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ A\cos(kL/2)+B\sin(kL/2)&=D\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ +Ak\sin(kL/2)+Bk\cos(kL/2)&=Ch\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ -Ak\sin(kL/2)+Bk\cos(kL/2)&=-Dh\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,.\end{aligned}\tag{2.84}$$

Nyní první dvojici rovnic sečteme a odečteme. S druhou dvojicí uděláme totéž:

$$\begin{aligned}2A\cos(kL/2)&=(D+C)\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ 2B\sin(kL/2)&=(D-C)\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ 2Bk\cos(kL/2)&=(C-D)h\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,;\\ 2Ak\sin(kL/2)&=(C+D)h\,\mathrm{e}^{-hL/2}\,.\end{aligned}\tag{2.85}$$



Obr. 2.21: Konečná potenciálová jáma

Pokud je konstanta A různá od nuly, můžeme provést výpočet z první a poslední rovnice, pokud je různé od nuly B, z druhé a třetí rovnice:

$$\begin{aligned} A \neq 0 \quad &\Rightarrow \quad k\,\mathrm{tg}\,(kL/2) = h\,, \\ B \neq 0 \quad &\Rightarrow \quad k\,\mathrm{ctg}\,(kL/2) = -h\,. \end{aligned} \tag{2.86}$$

Pokud by byly obě konstanty nenulové, dostaneme se ihned do sporu. Pokud by byly obě konstanty nulové, máme jen nulové řešení pro vlnovou funkci. V úvahu tedy přicházejí jen dvě možnosti

1. $A \neq 0$, $B = 0$. Podle (2.82) jde o řešení sudá.
2. $A = 0$, $B \neq 0$. Podle (2.82) jde o řešení lichá.

V obou případech je už snadné dopočítat z (2.85) konstanty C a D. Poslední konstantu A (v případě 1), resp. B (v případě 2), určíme z normovací podmínky $\langle \psi | \psi \rangle = 1$. Nás ale spíše zajímá energetické spektrum částice v konečné jámě. To je určeno podmínkami (2.86), které představují transcendentní rovnice. V proměnných k a h je totiž obsažena energie. První podmínka je pro sudá řešení, druhá pro lichá. Zaveďme nové proměnné

$$\xi \equiv kL/2\,; \qquad \eta \equiv hL/2\,. \tag{2.87}$$

Obě proměnné jsou bezrozměrné a spektrální podmínky se změní na

► $$\begin{aligned} \eta &= \xi\,\mathrm{tg}\,\xi\,; \quad \text{sudá řešení}, \\ \eta &= -\xi\,\mathrm{ctg}\,\xi\,; \quad \text{lichá řešení}. \end{aligned} \tag{2.88}$$

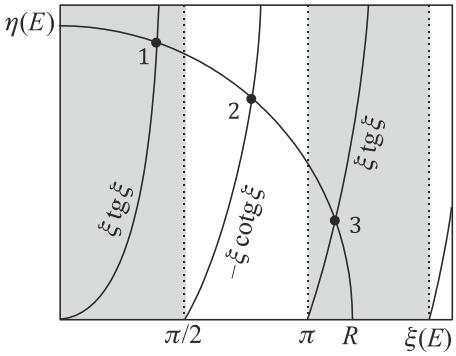
Oba vztahy můžeme snadno vykreslit do grafu v rovině (ξ, η), tj. na vodorovnou osu budeme nanášet hodnoty ξ, na svislou osu hodnoty η vypočtené z pravých stran relace. Pro nové proměnné (ξ, η) platí jedna zajímavá vlastnost, která plyne z definic (2.82):

$$\xi^2 + \eta^2 = \frac{(k^2 + h^2)L^2}{4} = \frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}\,.$$

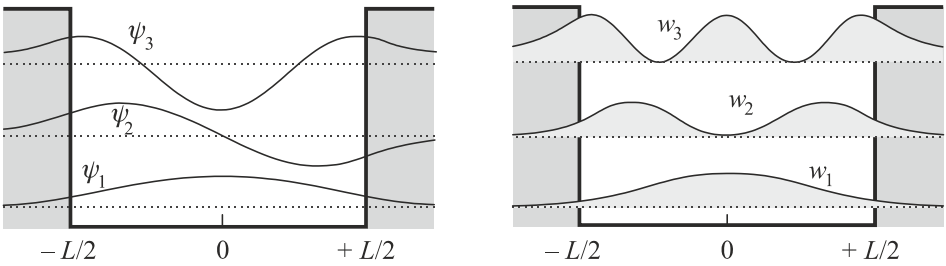
Nejde o nic jiného než o rovnici kružnice s poloměrem daným parametry jámy:

► $$\xi^2 + \eta^2 = R^2\,; \qquad R \equiv \sqrt{\frac{mV_0L^2}{2\hbar^2}}\,. \tag{2.89}$$

Průsečíky této kružnice s křivkami (2.88) dají grafické řešení energetického spektra



Obr. 2.22: Grafické určení energetických hladin. Jsou dány průsečíky kružnice s křivkami



Obr. 2.23: Vlnové funkce (nalevo) a pravděpodobnosti (napravo) prvních tří stavů

Na rozdíl od nekonečné jámy částice proniká i do klasicky zakázaných oblastí, tj. do oblasti $x < -L/2$ a do oblasti $x > +L/2$. Z obrázku je patrné, že hustota pravděpodobnosti je v těchto zakázaných oblastech nenulová. Vlnové funkce se střídají sudé a liché. Hustoty pravděpodobnosti jsou sudé funkce pro všechny stavy. Střední hodnota polohy částice je proto 0, tedy uprostřed jámy.

Poznámka: Pro $E < V_0$, tedy v oblasti, kde se v klasické mechanice nemůže částice vzdálit do nekonečna, je kvantové spektrum operátoru energie diskrétní. Vždy existuje alespoň jeden vázaný stav, a to i v nejplošší jámě. Pokud by částice měla $E > V_0$, tj. byla by nad jámou, bude řešení ve všech třech oblastech lineárními kombinacemi sinů a kosinů a k dispozici budeme mít 6 konstant, 4 podmínky navázání a jednu normovací podmínku. Žádná omezení typu (2.86) nedostaneme a spektrum bude spojité.

2.4.3 Bariéra, tunelový jev a rozptyl

Předpokládejme, že částice o hmotnosti m a energii E dopadá zleva na potenciálovou bariéru (viz obrázek 2.24) o výšce V_0. Energie částice je menší než výška potenciálové bariéry, takže by částice v klasickém případě bariérou nemohla prolétnout, protože nemá dosti velkou energii na to, aby se „přehoupla“ přes bariéru. V kvantové mechanice to možné je. Průběh potenciálu má jednoduchý tvar

$$V(x) = \begin{cases} V_0\,; & x \in (0, L)\,, \\ 0\,; & x \notin (0, L)\,. \end{cases} \tag{2.90}$$

Řešení Schrödingerovy rovnice

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}x^2} + V(x)\psi = E\psi \tag{2.91}$$

rozdělíme, tak jako v předchozích případech, do tří oblastí, ve kterých má potenciál jednu konkrétní konstantní hodnotu. Na bariéře se pro letící částici již řešení nerozdělí na sadu sudých a lichých řešení (tak jak tomu bylo v symetrické jámě), a tak ztrácí smysl psát řešení jako superpozici lichého sinu a sudého kosinu a udržovat počátek souřadnic uprostřed bariéry. Namísto toho využijeme superpozici kmitavých exponenciálních funkcí, se kterými se v obecném případě lépe zachází (například je jednodušší jejich derivace). Řešení Schrödingerovy rovnice v jednotlivých oblastech bude mít tvar:

$$\begin{aligned}
&\psi_{\mathrm{I}}(x) = A_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_{\mathrm{I}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,; && x \in \mathrm{I}\,, && \hbar^2 \equiv \frac{2m(V_0 - E)}{\hbar^2}\,;\\
&\psi_{\mathrm{II}}(x) = A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{hx} + B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-hx}\,; && x \in \mathrm{II}\,, && \\
&\psi_{\mathrm{III}}(x) = A_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} + B_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}\,; && x \in \mathrm{III}\,, && k^2 \equiv \frac{2mE}{\hbar^2}\,.
\end{aligned} \tag{2.92}$$

Vzhledem k pravděpodobnostnímu charakteru kvantové mechaniky musíme pokus mnohokrát opakovat, což znamená, že máme připraveno velké množství částic ve stejném stavu (se stejnou energií a hybností), které opakovaně posíláme zleva na bariéru. Vlnová funkce $\psi(x)$ má význam amplitudy pravděpodobnosti výskytu částic a její kvadrát $w(x) = \psi^*\psi$ má význam hustoty pravděpodobnosti výskytu částic. V klasické teorii vlnění (viz například navazující učebnici [1]) mají rovinné vlny šířící se ve směru (+) a proti směru (–) osy x tvar

$$\begin{aligned}
\varphi_+(t,x) &= A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[kx-\omega t]}\,;\\
\varphi_-(t,x) &= A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[-kx-\omega t]}\,.
\end{aligned} \tag{2.93}$$

Odsud snadno nahlédneme, že řešení v oblastech I a III je superpozicí vln šířících se doprava a doleva. Vzhledem k tomu, že zprava na bariéru žádné částice nepřicházejí, musí platit

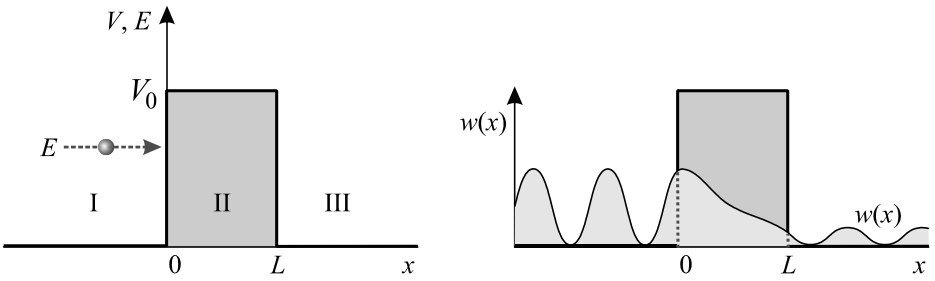
$$B_{\mathrm{III}} = 0\,. \tag{2.94}$$

V levé části (před bariérou) superpozice zůstane. Vlna šířící se doprava koresponduje s částicemi, které posíláme na bariéru, vlna šířící se doleva je způsobena částicemi odraženými od bariéry. Podmínky spojitosti vlnové funkce a její první derivace na levé a pravé straně bariéry vedou na rovnice

$$\begin{aligned}
\psi_{\mathrm{I}}(0) &= \psi_{\mathrm{II}}(0)\,; & \psi'_{\mathrm{I}}(0) &= \psi'_{\mathrm{II}}(0)\,;\\
\psi_{\mathrm{II}}(L) &= \psi_{\mathrm{III}}(L)\,; & \psi'_{\mathrm{II}}(L) &= \psi'_{\mathrm{III}}(L)\,.
\end{aligned} \tag{2.95}$$

Po dosazení dostaneme vztahy mezi konstantami A, B:

$$\begin{aligned}
A_{\mathrm{I}} + B_{\mathrm{I}} &= A_{\mathrm{II}} + B_{\mathrm{II}}\,;\\
A_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{hL} + B_{\mathrm{II}}\,\mathrm{e}^{-hL} &= A_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL}\,;\\
\mathrm{i}kA_{\mathrm{I}} - \mathrm{i}kB_{\mathrm{I}} &= hA_{\mathrm{II}} - hB_{\mathrm{II}}\,;\\
A_{\mathrm{II}}h\,\mathrm{e}^{hL} - B_{\mathrm{II}}h\,\mathrm{e}^{-hL} &= \mathrm{i}kA_{\mathrm{III}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL}\,.
\end{aligned} \tag{2.96}$$



Obr. 2.24: Průběh potenciálu (nalevo) a pravděpodobnost výskytu (napravo) částice letící na jednorozměrnou pravoúhlou potenciálovou bariéru

Vzhledem k tomu, že máme 4 podmínky pro pět konstant, je vše v pořádku a jedna konstanta zůstává volná pro normování nalezené vlnové funkce. Jinou možností je vzít nenormovanou vlnovou funkci a amplitudu dopadajících vln volit rovnou

$$A_{\mathrm{I}} = 1 . \tag{2.97}$$

V tomto případě budeme mít mimořádně jednoduchý výpočet koeficientu propustnosti bariérou. Ten je definován jako podíl počtu prošlých částic ku podílu počtu dopadlých částic a vypočteme ho jako podíl hustot pravděpodobností prošlé a dopadající vlny:

► $$T = \frac{A^*_{\mathrm{III}} A_{\mathrm{III}}}{A^*_{\mathrm{I}} A_{\mathrm{I}}} = A^*_{\mathrm{III}} A_{\mathrm{III}} . \tag{2.98}$$

Obdobně můžeme zavést koeficient odrazu

► $$R = \frac{B^*_{\mathrm{I}} B_{\mathrm{I}}}{A^*_{\mathrm{I}} A_{\mathrm{I}}} = B^*_{\mathrm{I}} B_{\mathrm{I}} . \tag{2.99}$$

Soustavu (2.96) přepíšeme do maticové podoby, volba $A_{\mathrm{I}} = 1$ dá vzniknout pravé straně soustavy:

$$\begin{pmatrix} 1 & -1 & 1 & 0 \\ \mathrm{e}^{hL} & 0 & \mathrm{e}^{-hL} & -\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL} \\ h & \mathrm{i}k & -h & 0 \\ h\mathrm{e}^{hL} & 0 & -h\mathrm{e}^{-hL} & -\mathrm{i}k\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kL} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A_{\mathrm{II}} \\ B_{\mathrm{I}} \\ B_{\mathrm{II}} \\ A_{\mathrm{III}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \mathrm{i}k \\ 0 \end{pmatrix} \tag{2.100}$$

Vzhledem k tomu, že chceme určit koeficienty propustnosti bariéry, stačí určit jen konstantu A_{III} a ostatní eliminovat. Matici můžeme převést na trojúhelníkovou matici nebo použít metodu subdeterminantů, metodu inverzní matice atd. Výpočet je již přímočarý. Výsledek je:

► $$T = \frac{1}{1 + \dfrac{V_0^2 \,\mathrm{sh}^2(hL)}{4E(V_0 - E)}} . \tag{2.101}$$

Koeficient odrazivosti R můžeme snadno určit ze zákona zachování počtu částic:

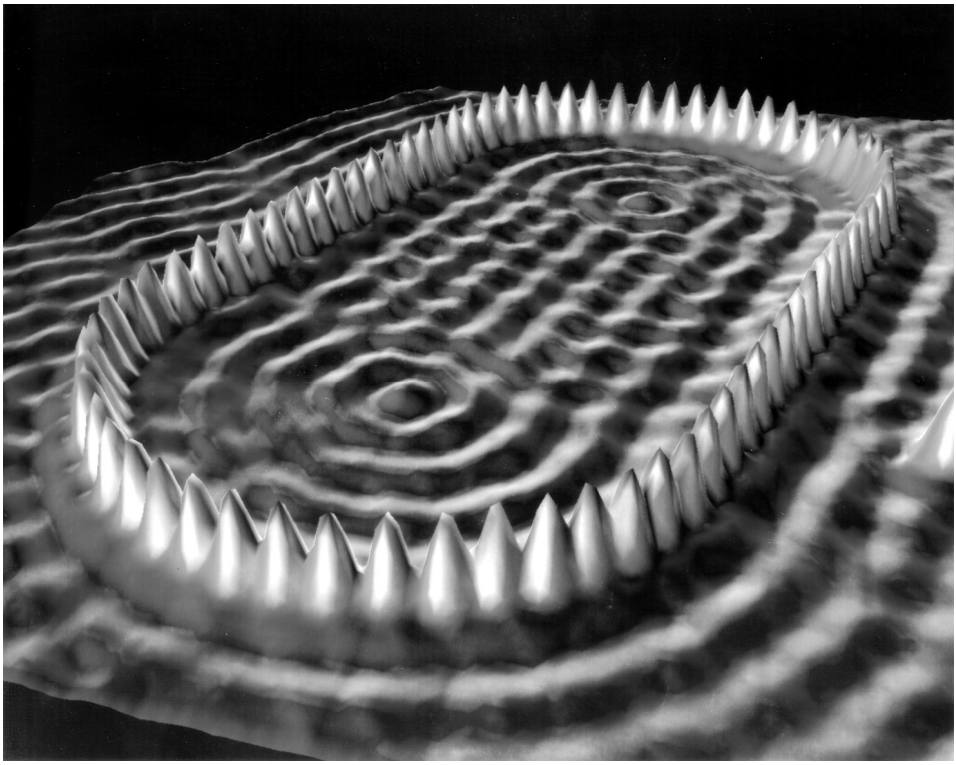
► $$R + T = 1 . \tag{2.102}$$

Kvantová teorie připouští průchod částice bariérou i v případě, že částice má nižší energii, než je hodnota potenciálu na vrcholu bariéry. Je to dáno nekomutativností potenciální a kinetické energie. Z Heisenbergových relací neurčitosti potom plyne, že obě hodnoty nemůžeme současně přesně měřit. Neurčitost kinetické a potenciální energie umožní tu a tam průchod částice bariérou. Tomuto jevu říkáme tunelový jev. Pravděpodobnost jevu exponenciálně klesá s tloušťkou bariéry. Typickým příkladem mohou být dvě oblasti kovu oddělené tenkým izolantem, přes který mohou tunelovat elektrony. Dalším příkladem jsou alfa částice tunelující z atomového jádra přes Coulombovu bariéru (viz potenciál 6 na obrázku 2.11) při radioaktivním alfa rozpadu. Na tunelovém jevu je založena tunelová dioda, rastrovací tunelový mikroskop a další zařízení.

Mikroskop STM

Mikroskop STM (*Scanning Tunneling Microscope*, rastrovací tunelový mikroskop) umožňuje zobrazit povrch pevné látky v rozlišení jednotlivých atomů. Povrch je doslova osaháván piezoelektricky vychylovaným wolframovým hrotem. Mezi povrchem a hrotem je nevodivá mezera, kterou tunelují elektrony. Vzniklý tunelový proud elektronů je velmi citlivý na vzdálenost hrotu od nerovnosti na povrchu látky. Jeho měřením tak vlastně zjistíme jakoukoli nerovnost na povrchu. Ve směru povrchu je rozlišení mikroskopu STM řádově 10^{-10} m, v kolmém směru k povrchu je však rozlišení řádově lepší v důsledku velmi silné nelineární závislosti velikosti proudu na vzdálenosti od povrchu. Na špičce wolframového hrotu je v ideálním případě jediný atom, podle toho, jak se hrot podaří vyleptat. Je to nejostřejší hrot jaký dokážeme vyrobit, používá se také jako studená katoda u rastrovacích elektronových mikroskopů. Rastrovací tunelový mikroskop umožňuje nejenom zviditelnit polohu atomů na povrchu krystalové mříže, ale také je přenášet z místa na místo, když se pomocí přiloženého elektrického napětí překoná chemická vazba s povrchem a atom se hrotem mikroskopu přenese.

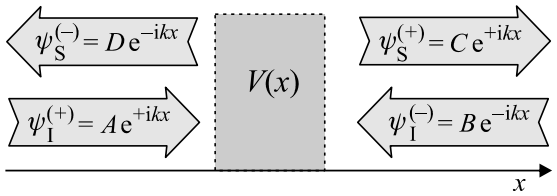
Mikroskop STM byl vyvinut Gerdem Binningem a Heinrichem Rohrerem v laboratořích IBM. Za svůj objev získali Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1986.



Obr. 2.25: Ohrádka z atomů železa byla vytvořena na měděném povrchu za pomoci rastrovacího tunelového mikroskopu (STM). Výsledný povrch je skenován mikroskopem STM a z intenzity tunelového proudu v jednotlivých místech nad povrchem je vytvořena topografická mapa povrchu, na kterou se díváte. Uvnitř ohrádky jsou patrné stojaté hustotní vlny uvězněných elektronů. Tunelový jev umožnil lidstvu zkoumat látky na atomární úrovni a manipulovat s jednotlivými atomy. Crommie, Lutz & Eigler, IBM.

Rozptyl

Bariéra představuje jednoduchý příklad jednorozměrného lokalizovaného potenciálu. Je nenulový v malé prostorové oblasti, na kterou mohou nalétávat částice ze dvou směrů (zprava a zleva). Nalétávající částice popisují vlnové funkce $\psi_{\mathrm{I}}^{\pm}$. Částice interagují s oblastí nenulového potenciálu (říkáme, že se na něm rozptylují) a z oblasti částice vylétávají opět ve dvou směrech (napravo a nalevo). Popisují je vlnové funkce $\psi_{\mathrm{S}}^{\pm}$. Index S znamená rozptýlený (anglicky *scattered*). Vstupující i vystupující (rozptýlené) vlnové funkce jsou řešením Schrödingerovy rovnice s nulovým potenciálem, tedy jde o rovinné vlny. Po určité době se ustálí (v průběhu této doby se zaplní případné vázané stavy v oblasti potenciálu) tok částic jak do oblasti potenciálu, tak z oblasti potenciálu:



Obr. 2.26: Rozptyl na 1D lokalizovaném potenciálu

Chování částic na lokalizovaném 1D potenciálu popisuje matice rozptylu S definovaná vztahem

$$\begin{pmatrix} C \\ D \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A \\ B \end{pmatrix}. \tag{2.103}$$

Matice rozptylu převádí vstupní svazky částic na rozptýlené. Jde o unitární matici, jak je snadno vidět ze zákona zachování toku pravděpodobnosti (rychlost × hustota) v ustáleném stavu:

$$\begin{aligned} j_{\text{zleva}} &= j_{\text{zprava}} \qquad \Rightarrow \\ v_{\text{zleva}} \left(A^* A - D^* D \right) &= v_{\text{zprava}} \left(C^* C - B^* B \right) \qquad \Rightarrow \\ \frac{\hbar k}{m} \left(A^* A - D^* D \right) &= \frac{\hbar k}{m} \left(C^* C - B^* B \right) \qquad \Rightarrow \\ C^* C + D^* D &= A^* A + B^* B \,. \end{aligned}$$

Matice S tedy nemění velikost vektoru. Ten má před a po působení matice stejnou velikost, což je definice unitarity:

$$\langle \psi_{\mathrm{S}} \,|\, \psi_S \rangle = \langle \psi_{\mathrm{I}} \,|\, \psi_{\mathrm{I}} \rangle ;$$

$$\langle S\psi_{\mathrm{I}} \,|\, S\psi_{\mathrm{I}} \rangle = \langle \psi_{\mathrm{I}} \,|\, \psi_{\mathrm{I}} \rangle .$$

Vlastní čísla unitární matice leží v komplexní rovině na jednotkové kružnici a můžeme pro ně psát

$$\lambda_{1,2} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_{1,2}} ; \qquad \delta_{1,2} = f_{1,2}(k) . \tag{2.104}$$

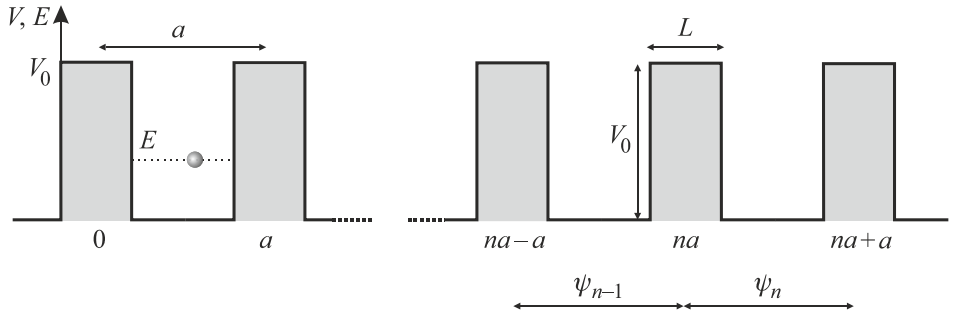
Rozptyl na lokalizovaném 1D potenciálu je proto charakterizován dvěma úhly $\delta_{1,2}(k)$, které jsou fází vlastních čísel matice rozptylu.

2.4.4 Periodický potenciál a pásové spektrum

Velmi častý je také pohyb částic v nelokalizovaném potenciálu, například v periodickém potenciálu krystalické mříže, který splňuje základní podmínku

$$V(x+a)=V(x)\,, \tag{2.105}$$

kde a je perioda potenciálu. K pochopení základních vlastností periodického potenciálu postačí řešit případ nekonečné posloupnosti střídajících se jam a bariér. Tento průběh potenciálu se nazývá Kronigův-Penneyův model. Poprvé ho použili německo-americký fyzik Ralph Kronig a anglický matematik William Penney. Budeme předpokládat, že výška opakujících se bariér je V_0, jejich šířka L a periodicita a.



Obr. 2.27: Kronigův-Penneyův model krystalu s periodickým potenciálem

Kronigův-Penneyův model

Kvalitativní charakter spektra nezávisí na šířce jednotlivých bariér. Budeme je deformovat tak, aby zůstala zachována jejich plocha, tj. provedeme limitu $L \to 0$, $V_0 \to \infty$, tak, aby se součin LV_0 neměnil. Tím získáme potenciál složený z nekonečné řady Diracových impulzů a na každé bariéře postačí jedno jediné navázání vlnové funkce. Budeme tedy mít potenciál

$$V(x)=LV_0\sum_{n=-\infty}^{n=+\infty}\delta(x-na)\,, \tag{2.106}$$

pro který snadno nalezneme řešení na intervalu (na, $na + a$), kde je potenciál nulový:

$$\begin{aligned}\psi_n(x)&=A_n\cos[k(x-na)]+B_n\sin[k(x-na)]\,;\\ \psi_n'(x)&=-A_nk\sin[k(x-na)]+B_nk\cos[k(x-na)]\,;\\ k&\equiv 2mE/\hbar^2\,;\quad n=0,\pm1,\pm2\ldots\end{aligned} \tag{2.107}$$

Argument kmitavého řešení je vhodně posunut do lokálního počátku v místě každého Diracova impulzu, takže sinus začíná u každé jámy od nuly a kosinus od jednotky. Při navazování vlnových funkcí využijeme tři podmínky. Samotná vlnová funkce bude spojitá, první derivace bude mít skok (jde o Diracův impulz) a periodicita potenciálu povede na periodicitu hustoty pravděpodobnosti. Rozepišme nyní tyto tři podmínky pro navázání na n-tém Diracově impulzu (resp. na n-té infinitezimální bariéře):

1. spojitost vlnové funkce

Na každé bariéře musíme předpokládat spojitost vlnové funkce. Kdyby byla nespojitá, první derivace by dala distribuci a druhá derivace obsažená ve Schrödingerově rovnici by byla derivací distribuce, kterou by nebylo možné žádným dalším členem kompenzovat. Musí tedy platit:

$$\psi_{n-1}(na) = \psi_n(na)\,. \tag{2.108}$$

Odsud dostaneme první z výše zmíněných tří podmínek:

► $$A_{n-1}\cos(ka) + B_{n-1}\sin(ka) = A_n. \tag{2.109}$$

2. Skok v první derivaci

Napišme Schrödingerovu rovnici v naší situaci

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\psi'' + V(x)\psi = E\psi\,. \tag{2.110}$$

Rovnici budeme integrovat v ε-okolí n-tého Diracova impulzu:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}\psi''(x)\,\mathrm{d}x + LV_0\int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}\delta(x-na)\psi(x)\,\mathrm{d}x = \int_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon}E\psi(x)\,\mathrm{d}x\,.$$

Prostřední integrál lze spočítat vzhledem k přítomnosti Diracovy distribuce velmi snadno. V ostatních provedeme limitní přechod $\varepsilon \to 0$. Integrál na pravé straně dá díky spojitosti ψ nulu a levý integrál příslušný skok:

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\lim_{\varepsilon\to 0}\left[\psi'\right]_{na-\varepsilon}^{na+\varepsilon} + LV_0\,\psi_n(na) = 0\,,$$

odsud plyne podmínka pro skok první derivace ψ na n-tém Diracově impulzu

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\left[\psi_n'(na) - \psi_{n-1}'(na)\right] + LV_0\,\psi_n(na) = 0\,. \tag{2.111}$$

Po dosazení řešení (2.107) máme druhou podmínku:

► $$B_n + A_{n-1}\sin(ka) - B_{n-1}\cos(ka) = \frac{2mLV_0}{k\hbar^2}A_n\,. \tag{2.112}$$

3. Periodicita

Z periodicity potenciálu (2.105) plyne periodicita hustoty pravděpodobnosti

$$w(x+a) = w(x)\,; \qquad w(x) \equiv \psi^*(x)\,\psi(x)\,. \tag{2.113}$$

Odsud je jasné, že pro vlnovou funkci musí platit

$$\psi(x+a) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,\psi(x)\,, \tag{2.114}$$

kde ϕ je nějaké fázové posunutí. Pro naše konstanty potom plyne:

► $$B_n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,B_{n-1}\,; \qquad A_n = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,A_{n-1}\,. \tag{2.115}$$

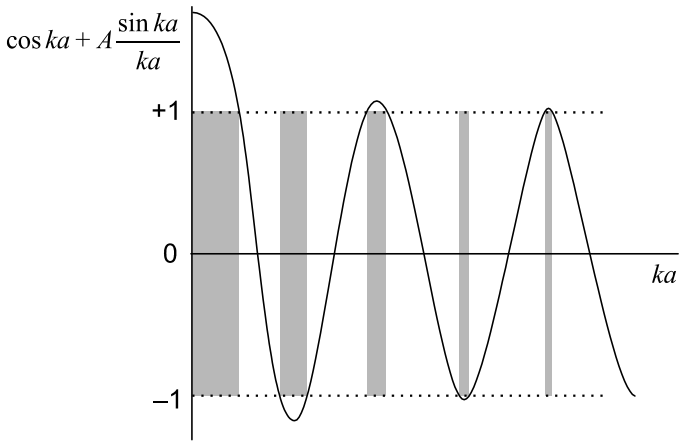
Nyní dosadíme A_{n-1} a B_{n-1} ze vztahu (2.115) do podmínek (2.109) a (2.112). Tím získáme soustavu rovnic pro neznámé konstanty A_n a B_n:

$$\begin{pmatrix} \cos ka - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}, & \sin ka \\ \sin ka - \xi, & -(\cos ka - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = 0\,; \qquad \xi \equiv \frac{2mLV_0}{k\hbar^2}\,. \tag{2.116}$$

Nenulové řešení získáme jen tehdy, pokud bude determinant soustavy nulový, což vede na podmínku:

► $$\cos\phi = \cos ka + A\frac{\sin ka}{ka}\,; \qquad A \equiv \frac{mLaV_0}{\hbar^2}\,. \tag{2.117}$$

Pravá strana této podmínky musí být z intervalu <–1, 1>, jinak úhel ϕ na levé straně nelze nalézt a řešení neexistuje. Výsledkem jsou pásy, ve kterých se částice pohybovat může, a zakázané pásy, ve kterých řešení neexistuje, tj. částice s takovou energií se v periodickém potenciálu nemůže vyskytovat. Připomeňme si, že vlnový vektor **k** je v podmínce (2.117) provázán s energií podle vztahu (2.107), tj. platí $k = 2mE/\hbar^2$.



Obr. 2.28: V grafu je vynesena pravá strana podmínky (2.117). Tam, kde je křivka mimo interval <–1,1>, řešení neexistuje a na grafu je šedou barvou označen zakázaný pás.

Zakázané pásy jsou typické v krystalových mřížích, v polovodičích, ale třeba i v periodických strukturách motýlích křídel, kde způsobují zajímavé, jakoby nepřirozené barvy.

Brillouinova zóna

Představme si nyní třírozměrnou periodicitu krystalické mříže, která se opakuje při každém posunutí o vektor **A**

► $$\mathbf{A} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3\,, \qquad n_1, n_2, n_3 = 1, 2, 3\ldots \tag{2.118}$$

kde $\mathbf{a}_1$, $\mathbf{a}_2$, $\mathbf{a}_3$ jsou tři lineárně nezávislé vektory (neleží ve stejné rovině). Objem elementární buňky je dán objemem rovnoběžnostěnu nataženého na základní vektory mříže, tj.

$$V_{\mathrm{Z}} = \left|\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)\right|. \tag{2.119}$$

Potenciál musí splňovat podmínku periodicity

$$V(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r} + \mathbf{A}) . \tag{2.120}$$

Periodicita mříže se samozřejmě přenáší i na hybnost pohybující se částice, která se při průletu mříží také periodicky mění. Hybnost je vždy provázána s vlnovým vektorem, tj.

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} . \tag{2.121}$$

V *k*-prostoru, do kterého se přeneseme Fourierovou transformací, bude periodicita znamenat jednoduchou podmínku na rovinnou vlnu

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{A}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}+\mathbf{G})\cdot\mathbf{A}} , \text{ tj.} \tag{2.122}$$

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{G}\cdot\mathbf{A}} = 1 ; \qquad \Rightarrow \qquad \mathbf{G}\cdot\mathbf{A} = 2N\pi ; \qquad N = 1, 2, 3\ldots \tag{2.123}$$

Periodicita v *k*-prostoru je tedy **G**, pro energii bude například platit

► $$E(\mathbf{k} + \mathbf{G}) = E(\mathbf{k}) . \tag{2.124}$$

Vektor **G** definuje tzv. reciprokou mříž v *k*-prostoru

► $$\mathbf{G} = m_1\mathbf{g}_1 + m_2\mathbf{g}_2 + m_3\mathbf{g}_3 ; \qquad m_1, m_2, m_3 = 1, 2, 3\ldots \tag{2.125}$$

Vektory $\mathbf{g}_l$ jsou lineárně nezávislé (neleží v rovině) a definují reciprokou mříž. Jejich rozměr je m^{-1}. Ze vztahu (2.123) plyne, že základní vektory reciproké mříže jsou

$$\mathbf{g}_1 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_2\times\mathbf{a}_3}{V_\mathrm{Z}} ; \qquad \mathbf{g}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_3\times\mathbf{a}_1}{V_\mathrm{Z}} ; \qquad \mathbf{g}_2 = 2\pi\frac{\mathbf{a}_1\times\mathbf{a}_2}{V_\mathrm{Z}} . \tag{2.126}$$

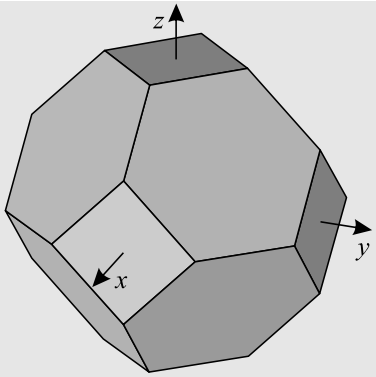
Mezi vektory $\mathbf{a}_k$ původní mříže a $\mathbf{g}_l$ reciproké mříže platí jednoduchý vztah

$$\mathbf{a}_k \cdot \mathbf{g}_l = 2\pi\delta_{kl} . \tag{2.127}$$

V reciproké mříži bude veškerá informace obsažena v základní buňce, kterou nazýváme *Brillouinova zóna*. Jejím nekonečným opakováním zrekonstruujeme celý *k*-prostor. Na hranici Brillouinových zón se veličiny mohou měnit skokem. Objem Brillouinovy zóny je dán objemem rovnoběžnostěnu nataženého na základní vektory mříže, tj.

$$V_\mathrm{B} = \left|\mathbf{g}_1 \cdot (\mathbf{g}_2 \times \mathbf{g}_3)\right| . \tag{2.128}$$

Koncept Brillouinových zón byl vytvořen francouzským fyzikem Léonem Brillouinem (1889–1969) a stal se neodmyslitelnou součástí dnešní teorie pevných látek a zejména polovodičů. Řešení v *k*-prostoru je mnohdy jednodušší a usnadní práci. My jsme se zde seznámili jen s tzv. první Brillouinovou zónou. Jejím opakováním můžeme vytvářet další Brillouinovy zóny. Řešení Schrödingerovy rovnice v třírozměrném periodickém potenciálu krystalu jde za rámec této úvodní učebnice kvantové mechaniky a čtenář ho nalezne ve specializovaných knihách, viz např. [24], [25].

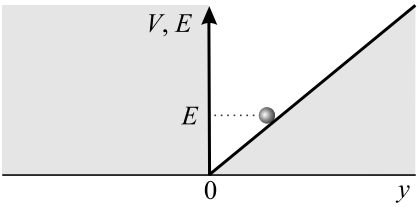


Obr. 2.29: Brillouinova zóna plošně centrované kubické soustavy

2.4.5 Neutron v tíhovém poli

Gravitační interakce je nejslabší ze všech čtyř interakcí v přírodě. Snadno ji detekujeme u planet, hvězd a galaxií, ale dlouho se zdálo, že případné gravitační projevy elementárních částic jsou zcela mimo naše měřící možnosti. V roce 2011 se podařilo týmu z Vídeňské univerzity změřit detekovat kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Poprvé tak byly experimentálně pozorovány gravitační projevy elementární částice.

Uvažujme částici pohybující se v homogenním tíhovém poli. Pohyb částice je zdola omezen podložkou. Jde o kvantovou analogii ping-pongu, kdy míček může poskakovat na stole, ale nemůže se dostat pod jeho desku. Situace je nakreslena na obrázku 2.30. Klasický pohyb částice je omezen zdola deskou stolu a shora maximální výškou, která je dána celkovou energií částice $E = \frac{1}{2}mv^2 + mgy$. Z hlediska kvantové teorie jde o nekonečnou trojúhelníkovou jámu, ve které má částice diskrétní energetické stavy.



Obr. 2.30: Kvantový pingpong

Potenciální energie naší úlohy má tvar

$$V(y) = \begin{cases} \infty\,; & y \le 0\,, \\ mgy\,; & y > 0\,. \end{cases} \tag{2.129}$$

Schrödingerovu rovnici budeme řešit v oblasti $y > 0$ a budeme požadovat, aby $\psi(0) = 0$. Samotná rovnice má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}y^2} + mgy\psi = E\psi\,. \tag{2.130}$$

Rovnici lze řešit obdobným postupem jako harmonický oscilátor v x reprezentaci. Nejprve zavedeme bezrozměrný argument vlnové funkce:

$$\frac{\mathrm{d}^2\psi}{\mathrm{d}\bar{y}^2} - \bar{y}\psi + \lambda\psi = 0\,; \qquad \bar{y} \equiv \frac{y}{y_0}\,; \qquad \lambda \equiv \frac{E}{mg\,y_0}\,; \qquad y_0 \equiv \sqrt[3]{\frac{\hbar^2}{2m^2 g}} \tag{2.131}$$

Vlastní číslo λ je ve skutečnosti bezrozměrnou energií. Proměnnou $\bar{y}$ ještě posuneme podle předpisu

$$\xi \equiv \bar{y} - \lambda \tag{2.132}$$

a výsledná rovnice bude

$$\psi'' - \xi\psi = 0\,; \qquad ' \equiv \mathrm{d}/\mathrm{d}\xi\,. \tag{2.133}$$

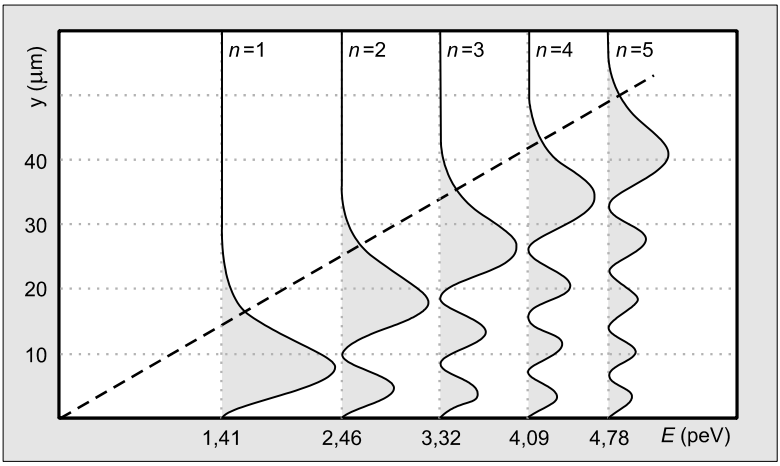
Jde o Airiho rovnici, jejímž řešením jsou Airiho funkce Ai(ξ) a Bi(ξ), viz například [26], [27]. Obě funkce lze definovat za pomoci řady, pomocí Besselových funkcí nebo pomocí integrálního vyjádření:

$$\mathrm{Ai}(\xi) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \cos\left(t^3/3 + \xi t\right)\mathrm{d}t\,;$$
$$\mathrm{Bi}(\xi) = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \left[\exp\left(-t^3/3 + \xi t\right) + \sin\left(t^3/3 + \xi t\right)\right]\mathrm{d}t\,. \tag{2.134}$$

Funkce Bi(ξ) pro velká ξ diverguje a není integrovatelná, proto je řešením úlohy

$$\psi(\xi) = \mathrm{Ai}(\xi)\,. \tag{2.135}$$

Okrajová podmínka $\psi(\xi) = 0$ vede na numerické hledání nulových bodů Airiho funkce a tím na kvantování energie, která je v argumentu Airiho funkce, neboť $\xi = \bar{y} - \lambda(E)$. Hodnoty prvních pěti energetických stavů spolu s hustotou pravděpodobnosti výskytu částice jsou na obrázku:



Obr. 2.31: Kvantový míček v tíhovém poli. Na vodorovné ose je energie míčku, vyznačeny jsou přípustné energetické stavy v kvantové teorii. Na svislé ose je výška nad podložkou. Přerušovanou čárou je znázorněna výška, které by poskakující míček s danou energií dosáhl v klasické mechanice. Šedě je vyznačena kvantová pravděpodobnost výskytu míčku (její hodnota narůstá směrem doprava).

Kvantový pingpong s neutronem

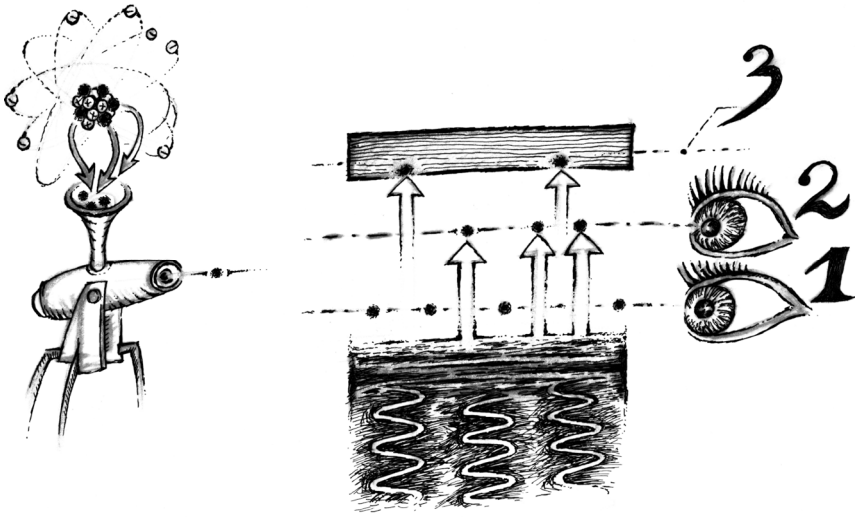
Experimenty s tíhovým polem působícím na elementární částice prováděla skupina vědců pod vedením profesora Hartmuta Abeleho z Vídeňské technické univerzity [28]. Součástí skupiny byli i vědci z Laueho-Langevinova ústavu v Grenoblu (ILL, Institute Laue-Langevin), kde byly experimenty fyzicky prováděny. Jako testovací míček posloužil neutron, který je minimálně ovlivňován všudypřítomnými elektromagnetickými silami. Neutron je velmi obtížně polarizovatelný, takže na něho nepůsobí ani různé dipólové síly, jako je například van der Waalsova síla. Neutron má pro experimenty s gravitací dostatečnou životnost, jeho poločas rozpadu je přes 800 sekund. K experimentům byl použit zdroj ultrachladných neutronů s velmi nízkou energií. Jedině u takových částic bylo možné měřit kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Proto byl použit zdroj neutronů z Laueho-Langevinova ústavu v Grenoblu, který vytváří neutrony s ener-

gií nižší než 300 neV (nanoelektronvoltů), tomu odpovídá teplota nižší než 2 mK (milikelviny) a rychlost nižší než 15 m/s.

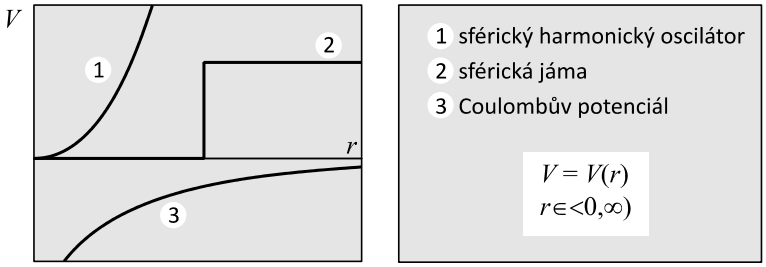
Pokud poskakuje na stole míček, může se dostat do libovolné výšky dané jeho celkovou energií. Kvantový míček v tíhovém poli se nachází jen v určitých energetických stavech daných naším řešením Schrödingerovy rovnice. Kvantový míček vystoupá jen do určitých výšek daných možnými energetickými stavy. Nejnižší energetický stav pro poskakující míček je 1,41 peV (pikoelektronvoltů), druhý 2,46 peV, třetí 3,32 peV atd. Pro normální pinpongový míček jsou tyto stavy neměřitelné, pro ultrachladné neutrony je možné takové stavy detekovat. Pravděpodobnost výskytu míčku v určité výšce nad podložkou je dána kvadrátem Airiho funkce.

Ultrachladné neutrony byly nasměrovány mezi dvě vodorovné desky. Spodní deska sloužila jako podložka, od které se neutron, pohybující se v klasickém případě po oblouku, může odrazit. Horní deska byla pomocná a byla zkonstruována tak, aby pohltila neutrony, které se dostaly až do její výšky. Vzdálenost mezi deskami byla přibližně 20 až 25 mikrometrů, takže neutrony v prvním a druhém kvantovém stavu mohly bez problémů prolétnout mezi deskami (nedosáhly výšky druhé desky). Chladné neutrony to ale neměly tak jednoduché. Spodní deska totiž vibrovala řízeným způsobem. Byla rozkmitána za pomoci piezoelektrického jevu a její kmity byly přesně kontrolovány za pomoci laseru. Pokud deska vibrovala, způsobila rezonanční přeskok neutronů mezi prvním a třetím energetickým stavem a většina neutronů mezi deskami neprolétla, protože třetí energetický stav znamená, že se neutron dostal až do výšky horní desky a byl jí absorbován. Pokud dolní deska nevibrovala, většina neutronů mezi deskami prošla.

Historicky poprvé byly měřeny kvantové stavy částice v gravitačním poli a bylo možné tyto stavy změnit za pomoci vibrující destičky. Tato rezonanční metoda může mít zcela zásadní vliv na poznání gravitační interakce na malých měřítkách, kde dosud chyběla jakákoli měření. Máme vysokou šanci se dozvědět, jak gravitace funguje ve světě elementárních částic a zda se skutečnost odchyluje od Newtonových a Einsteinových představ, či nikoli.



2.5 Sféricky symetrický potenciál



Obr. 2.33: Některé sférické potenciály

Sféricky symetrickým (centrálním) nazýváme potenciál, který závisí jen na vzdálenosti od určitého středového bodu. Pro popis pohybu těles v sféricky symetrickém potenciálu je velmi výhodná sférická souřadnicová soustava. Mezi nejznámější sférické potenciály patří sférický harmonický oscilátor, sférická jáma a Coulombův potenciál. Sférický oscilátor si můžete představit jako tělísko v počátku souřadnic, od kterého vedou pružiny na všechny strany. Kdykoli ho vychýlíme, bude působit vratná síla směrem do středu. Průběh potenciální energie je kvadratický. Sférická jáma přibližně odpovídá potenciálu, který pociťuje neutron zachycený v atomovém jádře. Jaderné síly (derivace potenciálu) na hranici jámy ($r = a$) jsou značné – v idealizaci (2.136) dokonce nekonečné – a v jiných oblastech velmi slabé. Coulombův potenciál se uplatní například ve vodíkovém atomu, kdy osamocený elektron podléhá působení jediného protonu v atomovém jádře. Nezapomínejte, že $r \in <0, \infty)$. Průběhy těchto známých potenciálů jsou:

$$\begin{aligned} &(1) \qquad V(r) = \frac{1}{2}kr^2, \\ &(2) \qquad V(r) = \begin{cases} 0 & r < a \\ V_0 & r \geq a \end{cases}, \\ &(3) \qquad V(r) = \frac{qQ}{4\pi\varepsilon_0 r} = -\frac{\alpha}{r}. \end{aligned} \tag{2.136}$$

V klasické mechanice bude systém popsán Lagrangeovou funkcí, zobecněnými hybnostmi a energií a Hamiltonovou funkcí ve sférickém souřadnicovém systému takto:

$$L = \frac{1}{2}m\dot{r}^2 + \frac{1}{2}mr^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}^2 + \frac{1}{2}mr^2\dot{\theta}^2 - V(r), \tag{2.137}$$

$$\begin{aligned} p_r &= m\dot{r}, \\ p_\varphi &= mr^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}, \\ p_\theta &= mr^2\dot{\theta}, \end{aligned} \tag{2.138}$$

$$E = \frac{1}{2} m\dot{r}^2 + \frac{1}{2} mr^2 \sin^2\theta\, \dot{\varphi}^2 + \frac{1}{2} mr^2 \dot{\theta}^2 + V(r), \tag{2.139}$$

$$H = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{p_\theta^2}{2mr^2} + \frac{p_\varphi^2}{2mr^2 \sin^2\theta} + V(r) = \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\mathbf{L}^2}{2mr^2} + V(r). \tag{2.140}$$

Již v klasické mechanice jsme si ukázali, že zobecněné hybnosti odpovídající úhlovým proměnným jsou komponenty momentu hybnosti. Druhá část Hamiltonovy funkce odpovídá *rotačním stupňům volnosti* a lze ji zapsat pomocí vektoru momentu hybnosti **L** vzhledem k ose *z*, od které je odvozen sférický souřadnicový systém.

Z předchozího již víme, že jednotlivé složky momentu hybnosti nejsou současně měřitelné a nekomutují spolu (2.25). Současně ale můžeme měřit kvadrát momentu hybnosti (2.26) a libovolnou z jeho složek (2.27). U sféricky symetrického problému budeme preferovat třetí osu a třetí složku. Osa *z* má preferované postavení při budování sférického souřadnicového systému, ve skutečnosti je však lhostejné, kterou ze složek momentu hybnosti zvolíme do úplné množiny pozorovatelných. Je-li v systému přítomno vnější magnetické pole, volíme zpravidla souřadnicový systém tak, aby třetí osa mířila ve směru tohoto pole, osa *z* je potom současně směrem vnějšího magnetického pole. Je-li systém sféricky symetrický, potom kvadrát momentu hybnosti komutuje s hamiltoniánem:

$$\left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r)\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}\right] = 0.$$

Víme totiž, že zobecněné souřadnice nekomutují jedině se svými zobecněnými hybnostmi. V komutátoru mezi kvadrátem momentu hybnosti a hamiltoniánem mohou tedy být jediné nenulové členy s úhlovou částí hamiltoniánu, ale operátor sám se sebou komutuje, takže výsledek může být jedině nulový. Podobně tomu je se třetí složkou momentu hybnosti:

$$\left[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}_3, \frac{p_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r)\right] = \left[\hat{\mathbf{L}}_3, \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2}\right] = \frac{1}{2mr^2}\left[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}^2\right] = 0.$$

Nalezli jsme tak trojici nezávislých komutujících operátorů, která tvoří úplnou množinu pozorovatelných u nerelativistického sféricky symetrického problému (v relativistické úloze k těmto proměnným ještě přibude spin):

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = [\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{H}}] = [\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{H}}] = 0. \tag{2.141}$$

U soustavy nezávislých vzájemně komutujících operátorů je možné hledat společné vlastní vektory ke všem operátorům. U sféricky symetrického problému budeme tedy řešit soustavu tří rovnic pro vlastní vektory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} |\, v,l,m \,\rangle &= E_v |\, v,l,m \,\rangle, \\ \hat{\mathbf{L}}^2 |\, v,l,m \,\rangle &= \lambda_l |\, v,l,m \,\rangle, \\ \hat{\mathbf{L}}_3 |\, v,l,m \,\rangle &= \mu_m |\, v,l,m \,\rangle. \end{aligned} \tag{2.142}$$

Index v čísluje energetické stavy, index l stavy kvadrátu momentu hybnosti a index m stavy projekce momentu hybnosti do libovolné osy (zvolili jsme třetí osu). Vlastní čísla

jsme označili E, λ, μ. Tuto soustavu je třeba řešit současně. Co by se stalo, kdybychom například řešili jen rovnici pro energii? Nalezená vlastní čísla E by samozřejmě byla v pořádku, ale ke každému vlastnímu číslu (každé hodnotě energie) by existovalo více nezávislých vlastních vektorů (ve skutečnosti se od sebe liší čísly l a m, to ale nevíme, protože řešíme jen první rovnici). Tomuto typu spektra říkáme *degenerované spektrum*. Znamená to jen to, že k danému vlastnímu číslu existuje více vlastních vektorů. Odlišili bychom je od sebe až pomocí dalších operátorů, které komutují s operátorem, jehož spektrum právě hledáme.

V následujících dvou kapitolách se budeme zabývat momentem hybnosti, tedy druhou a třetí rovnicí v (2.142). Řešení pro moment hybnosti je stejné pro všechny průběhy potenciální energie. V kapitole 2.5.1 nalezneme řešení bez použití konkrétní reprezentace a v kapitole 2.5.2 naznačíme, jak by se při řešení postupovalo v x reprezentaci. První rovnicí v (2.142) se budeme zabývat v kapitole 2.5.3. Řešení pro energii (energetické spektrum) již samozřejmě závisí na průběhu potenciální energie a je jiné například pro vodík a jiné pro sférický oscilátor. Navíc řešení pro energii závisí na číslech l a m. To je logické: moment hybnosti souvisí s rotačními stavy systému a ty k energii přispívají. Vidíme to koneckonců i v hamiltoniánu (2.140), kde je právě rotační část energie vyjádřena přes kvadrát momentu hybnosti.

2.5.1 Moment hybnosti

Základními komutačními relacemi pro moment hybnosti jsou vztahy (2.25) a (2.27):

$$[\hat{\mathbf{L}}_1, \hat{\mathbf{L}}_2] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_3,$$
$$[\hat{\mathbf{L}}_2, \hat{\mathbf{L}}_3] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_1,$$
$$[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_1] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{L}}_2,$$
$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_3] = 0.$$

Zaveďme nyní tzv. posuvné operátory

$$\hat{\mathbf{L}}_\pm \equiv \hat{\mathbf{L}}_1 \pm \mathrm{i}\,\hat{\mathbf{L}}_2 . \tag{2.143}$$

Tyto operátory budou mít podobný význam jako kreační a anihilační operátory u energie harmonického oscilátoru. Budou nás totiž posouvat ve spektru momentu hybnosti. Napišme přehledně jejich důležité vlastnosti (všechny lze snadno odvodit z definice posuvných operátorů a z komutačních relací momentu hybnosti):

$$\begin{aligned}
&(1)\quad \hat{\mathbf{L}}_1 = \frac{1}{2}\left(\hat{\mathbf{L}}_+ + \hat{\mathbf{L}}_-\right), && (5)\quad \hat{\mathbf{L}}_-\hat{\mathbf{L}}_+ = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar\hat{\mathbf{L}}_3 ,\\
&(2)\quad \hat{\mathbf{L}}_2 = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(\hat{\mathbf{L}}_+ - \hat{\mathbf{L}}_-\right), && (6)\quad \left[\hat{\mathbf{L}}_+, \hat{\mathbf{L}}_-\right] = 2\hbar\hat{\mathbf{L}}_3 ,\\
&(3)\quad \hat{\mathbf{L}}_\pm^\dagger = \hat{\mathbf{L}}_\mp , && (7)\quad \left[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_\pm\right] = \pm\hbar\hat{\mathbf{L}}_\pm ,\\
&(4)\quad \hat{\mathbf{L}}_+\hat{\mathbf{L}}_- = \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar\hat{\mathbf{L}}_3 , && (8)\quad \left[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_\pm\right] = 0 .
\end{aligned} \tag{2.144}$$

Známe-li posuvné operátory, můžeme z relací (1), (2) a (6) zrekonstruovat celý moment hybnosti. Úlohu, kterou budeme nyní řešit, lze zformulovat takto:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mid \lambda,\mu \rangle = \lambda \mid \lambda,\mu \rangle ,$$
$$\hat{\mathbf{L}}_3 \mid \lambda,\mu \rangle = \mu \mid \lambda,\mu \rangle .$$

Nejprve odvoďme tři pomocná lemmata týkajících se posuvných operátorů:

Lemma 1

Tvrzení: Posuvné operátory posouvají vlastní vektory ve třetí komponentě momentu hybnosti o Planckovu konstantu:

$$\hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu \rangle \;\approx\; \mid \lambda,\mu \pm \hbar \rangle .$$

Důkaz: Označme $\mid \psi > \equiv \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu \rangle$. Aplikujme operátory $\hat{\mathbf{L}}_3$ a $\hat{\mathbf{L}}^2$ na tento vektor: K vyjádření třetí složky a kvadrátu momentu hybnosti využijeme sadu základních vlastností (2.144). Z vlastnosti (7) určíme třetí složku a z vlastnosti (8) kvadrát momentu hybnosti:

$$\hat{\mathbf{L}}_3 \mid \psi \rangle = \hat{\mathbf{L}}_3 \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu \rangle =$$
$$= (\hat{\mathbf{L}}_\pm \hat{\mathbf{L}}_3 \pm \hbar \hat{\mathbf{L}}_\pm) \mid \lambda,\mu \rangle =$$
$$= (\mu \pm \hbar) \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu \rangle = (\mu \pm \hbar) \mid \psi \rangle ;$$

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mid \psi \rangle = \hat{\mathbf{L}}^2 \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu \rangle =$$
$$= \hat{\mathbf{L}}_\pm \hat{\mathbf{L}}^2 \mid \lambda,\mu \rangle =$$
$$= \lambda \, \hat{\mathbf{L}}_\pm \mid \lambda,\mu \rangle = \lambda \mid \psi \rangle .$$

Vidíme, že posuvné operátory posouvají ve spektru operátoru třetí složky o konstantu $\pm\hbar$. Ve spektru operátoru kvadrátu momentu hybnosti nedělají posuvné operátory nic. Posuvné operátory tedy mění jen hodnotu projekce momentu hybnosti do zvolené osy. ■

Lemma 2

Tvrzení: Při fixním λ je spektrum operátoru $\hat{\mathbf{L}}_3$ omezené, tj. existuje $\mu_{\min}$ a $\mu_{\max}$.

Důkaz: V relacích

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \mid \lambda,\mu \rangle = \lambda \mid \lambda,\mu \rangle ;$$
$$\left(\hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2 \right) \mid \lambda,\mu \rangle = \left(\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 \right) \mid \lambda,\mu \rangle = (\lambda - \mu^2) \mid \lambda,\mu \rangle$$

jsou operátory na levých stranách pozitivně definitní. Proto musí platit $\lambda \geq 0$, $\lambda - \mu^2 \geq 0$. Zřejmě tedy musí být $\mu^2 \leq \lambda \;\wedge\; \lambda \geq 0$, a proto $\mu \in \langle -\sqrt{\lambda}, +\sqrt{\lambda} \rangle$ a existuje $\mu_{\min}$ a $\mu_{\max}$.

■

Lemma 3

Spektrum je symetrické kolem nuly, tj. $\mu_{\min} = -\mu_{\max}$.

Důkaz: Podobně jako u harmonického oscilátoru zapůsobíme posuvným operátorem na první (resp. poslední) stav. Výsledek působení musí být nulový, protože další stav neexistuje. Poté napíšeme kvadrát normy tohoto vektoru a provedeme jednoduché úpravy:

$$\hat{\mathbf{L}}_+ \mid \lambda,\mu_{\max} \rangle = 0 , \qquad \wedge \qquad \hat{\mathbf{L}}_- \mid \lambda,\mu_{\min} \rangle = 0 ,$$
$$\langle \lambda,\mu_{\max} \mid \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ \mid \lambda,\mu_{\max} \rangle = 0 , \qquad \wedge \qquad \langle \lambda,\mu_{\min} \mid \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- \mid \lambda,\mu_{\min} \rangle = 0 ,$$
$$\langle \lambda,\mu_{\max} \mid \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \mid \lambda,\mu_{\max} \rangle = 0 , \quad \wedge \quad \langle \lambda,\mu_{\min} \mid \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hbar \hat{\mathbf{L}}_3 \mid \lambda,\mu_{\min} \rangle = 0 ,$$

$$(\lambda-\mu_{\max}^2-\mu_{\max}\hbar)\,||\,\lambda,\mu_{\max}\,||^2=0\,,\quad\wedge\quad(\lambda-\mu_{\min}^2+\mu_{\min}\hbar)\,||\,\lambda,\mu_{\min}\,||^2=0\,,$$

$$\lambda=\mu_{\max}^2+\mu_{\max}\hbar\quad\wedge\quad\lambda=\mu_{\min}^2-\mu_{\min}\hbar\,. \tag{2.145}$$

Označíme-li $\mu_{\max}\equiv a$, $\mu_{\min}=b$, potom platí

$$a^2+a\hbar=b^2-b\hbar\qquad\Rightarrow$$

$$b^2-b\hbar-(a^2+a\hbar)=0\qquad\Rightarrow$$

$$b=\frac{1}{2}\left(\hbar\pm\sqrt{\hbar^2+4(a^2+a\hbar)}\right)=\frac{1}{2}\left(\hbar\pm\sqrt{\hbar^2+4a\hbar+4a^2}\right)=$$

$$=\frac{1}{2}\left(\hbar\pm\sqrt{(\hbar+2a)^2}\right)=$$

$$\frac{1}{2}\left(\hbar\pm(\hbar+2a)\right)=\begin{cases}a+\hbar,\\-a.\end{cases}$$

První řešení je ve sporu s tím, že a je maximální hodnota, druhé řešení dokazuje lemma o symetričnosti spektra projekce momentu hybnosti. ■

Spektrum projekce momentu hybnosti

Posuvné operátory posouvají třetí komponentu momentu hybnosti o Planckovu konstantu, proto musí platit:

$$\mu=-a,-a+\hbar,-a+2\hbar,\ \ldots,a-\hbar,a\,.$$

Zaveďme bezrozměrné charakteristiky $m\equiv\mu/\hbar$, $l=a/\hbar$. Potom

$$m\in\{-l,-l+1,-l+2,\ldots,l-1,l\}\,. \tag{2.146}$$

Číslo m tedy může nabývat celkem $2l+1$ různých hodnot. Počet hodnot $2l+1$ musí být nezáporné celé číslo, a proto samo číslo l může nabývat jen poločíselných hodnot, tj.

$$l\in\{0,\frac{1}{2},1,\frac{3}{2},2,\frac{5}{2},\ldots\}\,. \tag{2.147}$$

Vlastní číslo $\lambda=\mu_{\max}\,(\mu_{\max}+\hbar)=l\,\hbar\,(l\,\hbar+\hbar)=\hbar^2\,l\,(l+1)$.

Závěr

Výsledky celého odvození můžeme zformulovat takto:

$$\begin{aligned}&\hat{\mathbf{L}}^2\,|\,l,m\,\rangle=l\,(l+1)\hbar^2\,|\,l,m\,\rangle\,, && l\in\{0,\tfrac{1}{2},1,\tfrac{3}{2},2,\tfrac{5}{2},\ldots\}\,;\\ \blacktriangleright\quad&\hat{\mathbf{L}}_3\,|\,l,m\,\rangle=m\,\hbar\,|\,l,m\,\rangle\,, && m\in\{-l,-l+1,\ldots,l-1,l\}\,;\\ &\hat{\mathbf{L}}_{\pm}\,|\,l,m\,\rangle\approx|\,l,m\pm1\,\rangle\,.\end{aligned} \tag{2.148}$$

Poznámky k řešení

Následující poznámky jsou velmi důležité, čtěte je pozorněji než samo řešení!

Poznámka 1: Číslo l čísluje velikost momentu hybnosti a nazývá se *vedlejší kvantové číslo* (hlavní kvantové číslo čísluje energii). Číslo m čísluje projekci momentu hybnosti do libovolné osy a nazývá se *magnetické kvantové číslo*. Název souvisí s tím, že elektron v atomárním obalu má moment hybnosti úměrný magnetickému momentu, takže číslo m popisuje jak kvantování momentu hybnosti, tak magnetického momentu.

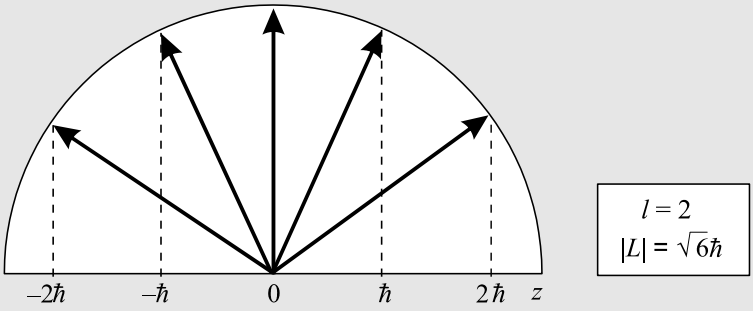
Poznámka 2: Možné hodnoty velikosti momentu hybnosti a jeho projekce jsou:

$$\begin{aligned} |L| &= \sqrt{l(l+1)}\,\hbar\,, & l &= 0, 1, 2, 3, \ldots; \\ L_3 &= m\hbar\,, & m &= -l, -l+1, \ldots, l\,. \end{aligned} \tag{2.149}$$

Poznámka 3: Poločíselné hodnoty, které jsme odvodili pro číslo l, jsou skutečně také možné. Realizují se u spinu, jehož operátor má stejnou komutační strukturu jako moment hybnosti. V Schrödingerově x reprezentaci (následující kapitola) tyto hodnoty nedostaneme. Volba reprezentace zde znamená *ztrátu části řešení*. To, že poločíselné hodnoty l jsou již součástí komutačních relací (2.25) bylo objeveno až relativně pozdě (v roce 1968) postupem podobným našemu odvození.

Poznámka 4: Skutečný význam Planckovy konstanty plyne z výsledku (2.149), respektive (2.148). Jedná se o *elementární kvantum momentu hybnosti*. Při měření momentu hybnosti budeme vždy měřit projekci momentu do určité osy, dané měřicím zařízením. Tato projekce je vždy násobkem redukované Planckovy konstanty (Planckovy-Diracovy konstanty).

Poznámka 5: Vidíme, že stavy s konkrétním vedlejším kvantovým číslem l jsou degenerovány – existuje více vlastních vektorů $|\, l, m \,\rangle$, které přísluší stejnému kvantovému číslu l. Tyto vektory se od sebe liší kvantovým číslem m a jejich počet je $2l+1$ (tzv. stupeň degenerace, který označujeme symbolem #).



Obr. 2.34: Možné projekce momentu hybnosti pro $l = 2$

Poznámka 6: Historicky byly označovány kvantové stavy velikosti momentu hybnosti elektronu v obalu atomu vodíku písmeny s, p, d, f podle tabulky na následující stránce:

$l = 0$	s stav	$m = 0$	$\# = 1$
$l = 1$	p stav	$m = -1, 0, 1$	$\# = 3$
$l = 2$	d stav	$m = -2, -1, 0, 1, 2$	$\# = 5$
$l = 3$	f stav	$m = -3, -2, -1, 0, 1, 2, 3$	$\# = 7$

Poznámka 7: Vztah pro velikost kvadrátu momentu hybnosti lze dostat také jako aritmetický průměr všech možných hodnot. Například pro $l = 2$ jsou možné hodnoty projekcí L_x, L_y nebo L_z rovny $-2\hbar$, $-\hbar$, 0, $\hbar$, $2\hbar$. Průměrná hodnota kvadrátu je proto dána vztahem (výsledek odpovídá hodnotě vypočtené z 2.149)

$$\langle L^2 \rangle = \langle L_x^2 \rangle + \langle L_y^2 \rangle + \langle L_z^2 \rangle = 3\langle L_z^2 \rangle =$$

$$= 3\,\frac{4\hbar^2 + \hbar^2 + 0 + \hbar^2 + 4\hbar^2}{5} = 6\hbar^2.$$

Poznámka 8: Není obtížné napočítat jednotlivé maticové elementy

$$\langle l, m' | \hat{\mathbf{L}}_k | l, m \rangle$$

operátoru momentu hybnosti ve vlastní reprezentaci pomocí posuvných operátorů, podobně jako u harmonického oscilátoru v kapitole 2.3, pokud určíme normovací konstanty. Pro $l = 0$ může být m i m' jen 0, a proto jde o jediný prvek. Tato matice působí na skalární veličiny, hovoříme o *skalární reprezentaci*. Pro $l = 1/2$ může nabývat m i m' hodnot $-1/2$ a $+1/2$. Jde o matice 2×2 působící na uspořádané dvojice, které nazýváme spinory. Jedná se o tzv. *spinorovou reprezentaci*. Pro $l = 1$ může nabývat m i m' hodnot -1, 0 a $+1$. Jde o matice 3×3 působící na uspořádané trojice, které nazýváme vektory. Jedná se o tzv. *vektorovou reprezentaci*. Všimněte si, že matice $\mathbf{L}_3$ jsou diagonální s vlastními čísly na diagonále.

Spinorová reprezentace ($l = 1/2$)

$$\mathbf{L}_1 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{L}_2 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}; \qquad \mathbf{L}_3 = \frac{\hbar}{2}\begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.150}$$

Vektorová reprezentace ($l = 1$)

$$\mathbf{L}_1 = \hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{L}_2 = \hbar\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} & 0 \\ \mathrm{i} & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{L}_3 = \hbar\begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.151}$$

Matice pro $l = 1/2$ (bez násobících koeficientů) se nazývají Pauliho matice.

Poznámka 9: Známé tvrzení Bohrova modelu, že na obvod dráhy elektronu v atomárním obalu musí připadnout celistvý n-násobek vlnových délek, je možné s pomocí vztahu (2.5) přepsat takto:

$$n\lambda = 2\pi r_n \qquad \Rightarrow \qquad n\frac{2\pi\hbar}{m_\mathrm{e} v_n} = 2\pi r_n \qquad \Rightarrow \qquad m_\mathrm{e} v_n r_n = n\hbar$$

a nejde tedy o nic jiného než o kvantování projekce momentu hybnosti.

2.5.2 Řešení v *x* reprezentaci, kulové funkce

V *x* reprezentaci budeme problém sférického potenciálu řešit ve sférických souřadnicích (jsou nejbližší symetrii potenciální energie). Je třeba řešit soustavu rovnic (2.142), která bude mít nyní tvar:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}}\psi(r,\varphi,\theta) &= E_v\,\psi(r,\varphi,\theta)\,, \\ \hat{\mathbf{L}}^2\psi(r,\varphi,\theta) &= \lambda_l\,\psi(r,\varphi,\theta)\,, \\ \hat{\mathbf{L}}_3\psi(r,\varphi,\theta) &= \mu_m\,\psi(r,\varphi,\theta)\,. \end{aligned} \qquad (2.152)$$

Přepišme nyní operátory do sférických souřadnic. K tomu účelu si nejprve rozložme Laplaceův operátor ve sférických souřadnicích na radiální a úhlovou část:

$$\begin{aligned} \nabla^2 &= \nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2\,; \\ \nabla_r^2 &\equiv \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\,r^2\,\frac{\partial}{\partial r}\,, \\ \nabla_{\theta\varphi}^2 &\equiv \frac{1}{\sin\theta}\,\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\,\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\,. \end{aligned} \qquad (2.153)$$

Kinetickou část Hamiltonovy funkce můžeme také snadno rozložit na radiální a úhlovou část:

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{\hat{\mathbf{p}}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2I} + V(r) = \frac{\hat{\mathbf{p}}_r^2}{2m} + \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{2mr^2} + V(r)\,. \qquad (2.154)$$

V *x* reprezentaci má Hamiltonův operátor jednoduchou podobu

$$\hat{\mathbf{H}} = \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2\right) + V(r)\,. \qquad (2.155)$$

Z rozkladu Laplaceova operátoru (2.153) je jasné, že jeho úhlová část musí (až na konstantu) odpovídat kvadrátu momentu hybnosti. Porovnáním obou posledních vztahů získáme operátor kvadrátu momentu hybnosti:

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = -\hbar^2\nabla_{\theta\varphi}^2\,. \qquad (2.156)$$

Operátor pro třetí složku momentu hybnosti je prostým zobecněním vtahu (2.47). Operátory úplné množiny pozorovatelných pro sférický potenciál tedy budou:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} &= \frac{-\hbar^2}{2m}\left(\nabla_r^2 + \frac{1}{r^2}\nabla_{\theta\varphi}^2\right) + V(r)\,; \\ \hat{\mathbf{L}}^2 &= -\hbar^2\nabla_{\theta\varphi}^2\,; \\ \hat{\mathbf{L}}_3 &= -\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\partial}{\partial\varphi}\,. \end{aligned} \qquad (2.157)$$

V kartézských souřadnicích se Laplaceův operátor štěpí na součet druhých derivací podle jednotlivých os, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na složky ve směru os. Ve sférických souřadnicích se Laplaceův operátor dělí na radiální a úhlovou část, tomu odpovídá rozklad kinetické energie na radiální a úhlovou část. Právě úhlová část kinetické energie je rotační energie spojená s momentem hybnosti, a proto kvadrátu momentu hybnosti odpovídá úhlová část Laplaceova operátoru.

Hledané řešení $\psi(r, \varphi, \theta)$ samozřejmě závisí na kvantových číslech v, l, m. Řešení budeme hledat v separovaném tvaru

$$\psi(r,\varphi,\theta) = f(r)\, g(\varphi)\, h(\theta)\,. \tag{2.158}$$

Nejdříve řešme poslední z rovnic (2.152):

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} f(r) g(\varphi) h(\theta) = \mu_m f(r) g(\varphi) h(\theta) \qquad \Rightarrow$$

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}g}{\mathrm{d}\varphi} = \mu_m g \qquad \Rightarrow$$

$$g(\varphi) = c \exp\left[\mathrm{i}\frac{\mu_m}{\hbar}\varphi\right].$$

Nalezené řešení musí být periodické v úhlu φ:

$$g(\varphi) = g(\varphi + 2\pi) \qquad \Rightarrow \qquad \mu_m = m\hbar\,; \qquad m = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \ldots$$

V x reprezentaci jsme opět odvodili kvantování projekce momentu hybnosti. Projekce momentu hybnosti může nabývat jen celistvých násobků Planckovy konstanty. Položíselná řešení nelze v x reprezentaci nalézt. Přechodem ke konkrétní reprezentaci přicházíme o část řešení. Hledané řešení má nyní tvar:

► $$\psi(r, \varphi, \theta) = f(r)\, \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\, h(\theta)\,; \qquad m = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \tag{2.159}$$

Konstantu c jsme zvolili tak, aby nalezené řešení bylo normováno k jedné. Jako další krok dosadíme toto řešení do druhé rovnice (2.152) s využitím (2.157) a budeme ji řešit

$$-\hbar^2 \left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right] \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\, h(\theta) \;=\; \lambda_l\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\, h(\theta) \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\theta}\left(\sin\theta\frac{\mathrm{d}h}{\mathrm{d}\theta}\right) + \left(\frac{\lambda_l}{\hbar^2} - \frac{m^2}{\sin^2\theta}\right) h \;=\; 0\,.$$

Výsledkem je obyčejná diferenciální rovnice pro funkci $h(\theta)$, která se řeší standardními matematickými postupy přesahujícími rámec této učebnice. Výsledkem jsou polynomiální funkce v argumentech $\cos\theta$ a $\sin\theta$, které se nazývají přidružené Legendreovy polynomy $P_{lm}(\cos\theta)$ a jsou definované vztahem

► $$P_{lm}(x) \equiv \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l\, l!}\, \frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}\, (x^2-1)^l\,;$$

$$l = 0, 1, 2, \ldots; \qquad |\,m\,| \le l\,; \quad m = 0, \pm 1, \ \ldots \tag{2.160}$$

Pro $m = 0$ se tyto polynomy nazývají Legendreovy polynomy. Příslušné vlastní číslo je

► $$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2 . \tag{2.161}$$

Celá úhlová část řešení se nazývá kulová funkce a označuje se

► $$Y_{lm}(\varphi,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} P_{lm}(\cos\theta) . \tag{2.162}$$

Celkové řešení zbývajících dvou rovnic soustavy (2.152) tedy je

$$\psi(r,\varphi,\theta) = f(r)\, Y_{lm}(\varphi,\theta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} f(r)\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} P_{lm}(\cos\theta) ;$$

► $$\lambda_l = l(l+1)\hbar^2 ; \quad l = 0, 1, 2, \ldots \tag{2.163}$$

$$\mu_m = m\hbar ; \quad m = 0, \pm 1, \ldots ; \qquad |m| \le l .$$

Odvozené kvantování momentu hybnosti je až na absenci poločíselných hodnot shodné se vztahy odvozenými jinou cestou v předchozí kapitole. Pro radiální funkci $f(r)$ lze řešení získat z první rovnice (2.152). Toto řešení závisí na tvaru potenciální energie. Pro některé základní tvary potenciální energie bude řešení diskutováno v příští kapitole. Na závěr uveďme příklady některých kulových funkcí, které jsou vynikající bází na povrchu sféry:

$$Y_{00} = \frac{1}{2\sqrt{\pi}} ; \qquad Y_{1,-1} = \sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \sin\theta ;$$

$$Y_{10} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta ; \qquad Y_{20} = -\sqrt{\frac{5}{16\pi}} (1 - 3\cos^2\theta) ; \tag{2.164}$$

$$Y_{11} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \sin\theta ; \qquad Y_{21} = -\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \cos\theta \sin\theta .$$

2.5.3 Jednoduché systémy: oscilátor, vodík, jáma

Nyní zbývá řešit první z rovnic (2.152) – rovnici pro energii. Tato rovnice nám poskytne energetické spektrum a radiální část celého řešení $\psi(r, \varphi, \theta)$. Jak energetické spektrum, tak radiální část mohou záviset na kvantových číslech l a m z předchozího řešení a budou závislé na konkrétním tvaru potenciální energie $V(r)$.

V poslední rovnici (2.152) známe působení rotační části kinetické energie Hamiltonova operátoru na celkovou vlnovou funkci. To je dáno působením kvadrátu momentu hybnosti podle druhé z rovnic (2.152). Známe již i vlastní číslo λ_l podle vztahu (2.161). Po zapůsobení rotační části zkrátíme úhlové části $g(\varphi)$ a $h(\theta)$ na obou stranách rovnice a získáme rovnici pro radiální část řešení:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} r^2 \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2mr^2} + V(r) \right] f_{vl}(r) = E\, f_{vl}(r) . \tag{2.165}$$

Povšimněte si, že v rovnici vystupuje vedlejší kvantové číslo l, a energetické spektrum proto nezávisí jen na radiálním číslu ν, které čísluje energii, ale i na vedlejším kvantovém čísle l. Řešení rovnice (2.165) se provádí standardními metodami (rozvoj do řady, hledání asymptotického chování, oříznutí nekonečné řady). Uvedeme výsledky výpočtů pro potenciální energii sférického harmonického oscilátoru, prostorové jámy a Coulombův potenciál (2.136).

Harmonický oscilátor

Pro potenciální energii harmonického oscilátoru vychází energetické spektrum

► $$V(r) = \frac{1}{2} m\omega^2 r^2 \quad \Rightarrow \quad E_{\nu l} = (2\nu + l + 3/2)\,\hbar\omega = (n + 3/2)\,\hbar\omega\,. \qquad (2.166)$$

Nejmenší možná hodnota energie (nulové kmity) je $3/2\hbar\omega$. Radiální kvantové číslo ν čísluje pořadí radiálních stavů a zpravidla také počet průsečíků radiálního řešení s osou x. Většinou se zavádí tzv. hlavní kvantové číslo n, které skutečně čísluje stavy energie:

$$n \equiv 2\nu + l \;\; ; \quad n = 0, 1, 2, \ldots \;\; , \quad l = 0, 1 \;\ldots\; n \;. \qquad (2.167)$$

Spektrum oscilátoru je degenerované (ke každé hodnotě energie přísluší více stavů, každé n lze složit z více kombinací ν a l). Snadno určíme stupeň degenerace, uvědomíme-li si, že ke každému vedlejšímu kvantovému číslu existuje $2l + 1$ hodnot magnetických čísel m:

► $$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2(n - 2\nu) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n/2} 2n - 4\nu + 1 = \frac{(n+1)(n+2)}{2}\,. \qquad (2.168)$$

Řadu (2.168) jsme sečetli jako aritmetickou řadu. Každá energetická slupka n obsahuje $(n + 1)(n + 2)/2$ stavů.

Coulombický potenciál

Pro Coulombickou potenciální energii vychází energetické spektrum

► $$V(r) \;=\; \frac{qQ}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r} \;=\; -\frac{\gamma}{r} \qquad \Rightarrow$$
$$E_{\nu l} = -\frac{\gamma^2 m_\mathrm{e}}{2\hbar^2(\nu + l + 1)^2} = -\frac{\gamma^2 m_\mathrm{e}}{2\hbar^2 n^2}\,. \qquad (2.169)$$

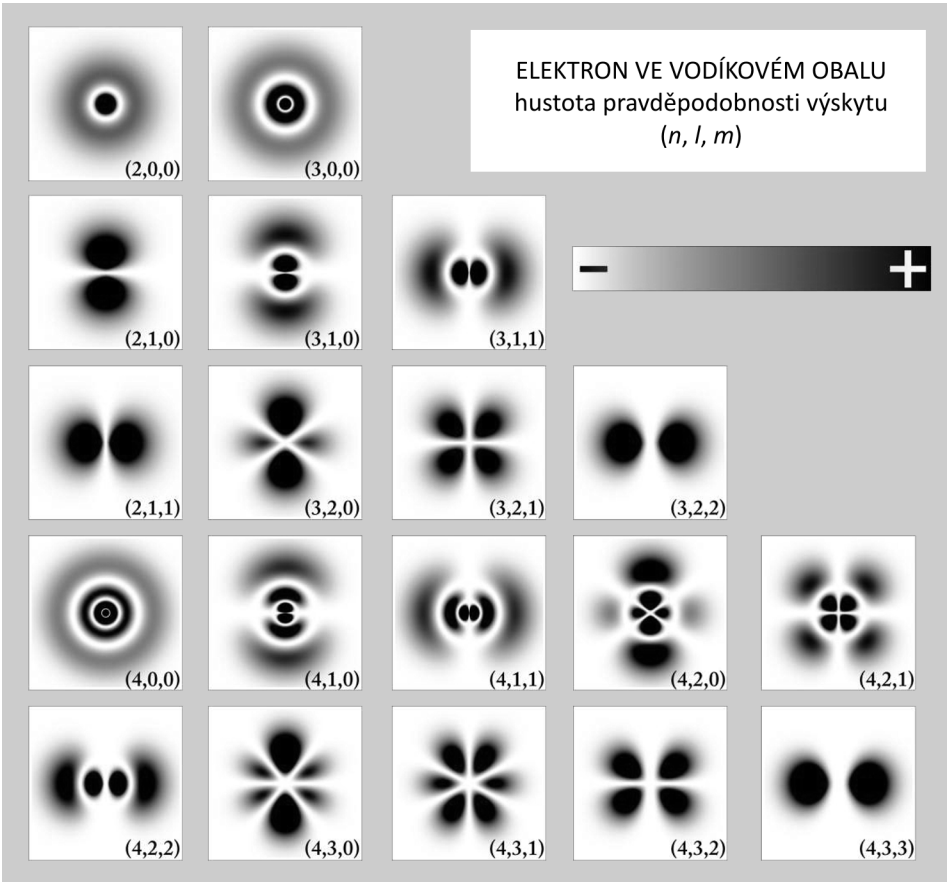
Hlavní kvantové číslo n číslující stavy energie jsme zavedli vztahem

$$n \equiv \nu + l + 1 \quad ; \qquad n = 1, 2, \ldots \quad , \quad l = 0, 1 \;\ldots\; n - 1 \;. \qquad (2.170)$$

Stupeň degenerace bude

► $$\#_n = \sum_l 2l + 1 = \sum_{\nu=0}^{n-1} 2(n - \nu - 1) + 1 = \sum_{\nu=0}^{n-1} 2n - 2\nu - 1 = n^2\,. \qquad (2.171)$$

Jde-li o atom vodíku, může mít každý elektron ještě dva spinové stupně volnosti $m_\mathrm{s} = \pm 1/2$ a celkový počet stavů v jedné energetické slupce je proto $2n^2$. Tyto stavy se liší hodnotou kvantových čísel l, m, m_s.



Obr. 2.35: Hustota pravděpodobnosti pro vodík. Kyle Forinash, Indiana University Southeast, 2008.

Sférická jáma

Na závěr kapitoly o sférických potenciálech zmiňme sférickou konečnou kvantovou jámu s potenciálem ve tvaru

$$V(r) = \begin{cases} 0 & r < a\,; \\ V_0 & r \geq a\,. \end{cases} \tag{2.172}$$

Ani pro takto jednoduchý průběh nemá úloha analytické řešení. Problém lze řešit jen numericky nebo graficky, viz například publikace [16].

2.6 Časový vývoj

Prozatím jsme se v kvantové teorii zabývali stacionárními stavy, tj. stavy systému, které se v čase nevyvíjejí. Skutečné kvantové stavy jsou lineárními kombinacemi stacionárních stavů (prvků báze) a koeficienty těchto kombinací se mění s časem. Přechod stavu z jednoho času do času pozdějšího provádí tzv. *evoluční operátor* (operátor časového vývoje), se kterým se nyní seznámíme.

2.6.1 Evoluční operátor

Evoluční operátor převádí známý stav čase t_0 na stav, do kterého se vyvine v čase t:

$$|\psi(t)\rangle = \hat{\mathbf{U}}(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle\,. \tag{2.173}$$

Evoluční operátor musí splňovat některé podmínky a požadavky:

1. POČÁTEČNÍ PODMÍNKA: vývoj z počátečního času do počátečního času nemění stav systému

$$\hat{\mathbf{U}}(t_0,t_0) = \hat{\mathbf{1}}\,. \tag{2.174}$$

2. SEMIGRUPOVÁ PODMÍNKA: vývoj ze stavu t_1 do t_2 dopadne stejně, je-li proveden naráz, nebo přes mezičas t. Porovnáním obou postupů získáme *semigrupovou podmínku*:

$$\begin{array}{ccc} t_1 \to t_2 & \Leftrightarrow & t_1 \to t \to t_2 \\ |\psi(t_2)\rangle = \hat{\mathbf{U}}(t_2,t_1)\,|\psi(t_1)\rangle & \Leftrightarrow & |\psi(t_2)\rangle = \hat{\mathbf{U}}(t_2,t)\;\hat{\mathbf{U}}(t,t_1)\;\;\psi(t_1)\rangle \end{array}$$

$$\hat{\mathbf{U}}(t_2,t_1) = \hat{\mathbf{U}}(t_2,t)\,\hat{\mathbf{U}}(t,t_1)\,. \tag{2.175}$$

3. UNITARITA: časový vývoj nemění normování stavu:

$$\langle\psi(t_0)|\psi(t_0)\rangle = \langle\psi(t)|\psi(t)\rangle\,,$$

$$\langle\psi_0|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}}|\psi_0\rangle\,,$$

$$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{1}}\,. \tag{2.176}$$

4. INVERZE: inverzní evoluční operátor má obrácené pořadí argumentů. Odvodíme ze semigrupové podmínky:

$$\hat{\mathbf{U}}(t,t) = \hat{\mathbf{U}}(t,t_0)\;\hat{\mathbf{U}}(t_0,t) \overset{!}{=} \hat{\mathbf{1}} \;\Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{U}}^{-1}(t_0,t) \;=\; \hat{\mathbf{U}}(t,t_0)\,. \tag{2.177}$$

5. SPOJITOST: samovolný vývoj stavu (bez aktu měření), který popisuje evoluční operátor, musí být spojitý:

$\langle\varphi|\,\hat{\mathbf{U}}(t,t_0)\,|\psi(t_0)\rangle$ je spojité pro $\forall\, t_0$ a $\forall\,|\varphi\rangle \in \mathcal{H}$.

Nyní odvodíme základní rovnici pro evoluční operátor. Vyjdeme z definice střední hodnoty dynamické proměnné (viz tabulka v kapitole 2.2.2 na straně 124) a tuto střední hodnotu budeme derivovat podle času:

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi_0|\hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}}|\psi_0\rangle =$$

$$= \langle\psi_0|\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}|\psi_0\rangle .$$

Jinou možností je přímo zavést operátor časové derivace dynamické proměnné vztahem

$$\frac{\mathrm{d}\overline{a}}{\mathrm{d}t} = \langle\psi|\dot{\hat{\mathbf{A}}}|\psi\rangle = \langle\psi_0|\hat{\mathbf{U}}^\dagger\dot{\hat{\mathbf{A}}}\hat{\mathbf{U}}|\psi_0\rangle .$$

Porovnáním obou postupů získáme rovnici

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathbf{U}}^\dagger\dot{\hat{\mathbf{A}}}\hat{\mathbf{U}}, \tag{2.178}$$

ve které za časovou derivaci operátoru dynamické proměnné dosadíme časový vývoj dynamické proměnné zapsaný v Poissonových závorkách převedený do kvantové podoby pomocí principu korespondence (2.21):

$$\frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} = \{A, H\} \qquad \Rightarrow \qquad \dot{\hat{\mathbf{A}}} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}\right]. \tag{2.179}$$

Získáme tak rovnici, ze které se budeme snažit odvodit vztah pro evoluční operátor:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}\right]\hat{\mathbf{U}}. \tag{2.180}$$

Ve všech následujících úpravách využíváme unitaritu $\hat{\mathbf{U}}\hat{\mathbf{U}}^\dagger = \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{U}} = \mathbf{1}$. Z poslední rovnice je třeba vyloučit operátor $\hat{\mathbf{U}}^\dagger$ a jeho derivaci podle času, kterou získáme derivováním definice unitarity podle času a násobením výsledku operátorem $\hat{\mathbf{U}}^\dagger$ zprava:

$$\hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^\dagger = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}^\dagger}{\mathrm{d}t} = -\hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^\dagger .$$

Výsledek dosadíme do rovnice (2.180) a vynásobíme ji operátorem $\hat{\mathbf{U}}$ zleva a operátorem $\hat{\mathbf{U}}^\dagger$ zprava. Postupnými úpravami získáme hledanou rovnici pro $\hat{\mathbf{U}}$:

$$-\hat{\mathbf{U}}^\dagger\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{U}} + \hat{\mathbf{U}}^\dagger\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{U}}^\dagger\left[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}\right]\hat{\mathbf{U}} \quad \Rightarrow$$

$$-\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}+\hat{\mathbf{A}}\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{H}}\right] \quad \Rightarrow$$

$$\left[\hat{\mathbf{A}},\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\right]=\left[\hat{\mathbf{A}},\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{H}}\right] \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{H}} \quad \Rightarrow$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t}=\hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}}. \tag{2.181}$$

Právě odvozená rovnice se nazývá *rovnice časového vývoje*. Zapůsobíme-li touto operátorovou rovnicí na počáteční stav $|\psi_0\rangle$, provede evoluční operátor vývoj stavu do času t a získaná rovnice pro $|\psi(t)\rangle$ se nazývá *časová Schrödingerova rovnice*:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}\left|\psi(t)\right\rangle}{\mathrm{d}t}=\hat{\mathbf{H}}\left|\psi(t)\right\rangle. \tag{2.182}$$

Schrödingerovy rovnice tedy máme dvě. Bezčasová Schrödingerova rovnice řeší vlastní hodnoty a vlastní stavy operátoru energie (Hamiltonova operátoru). Z ní můžeme určit hodnoty energie, které jsou naměřitelné v experimentu.

Časová Schrödingerova rovnice potom řeší časový vývoj libovolného počátečního stavu. Jak uvidíme v následujícím textu, je řešení časové Schrödingerovy rovnice v jistém smyslu triviální. Pokud Hamiltonův operátor nezávisí explicitně na čase a známe-li vlastní stavy a vlastní čísla operátoru energie, můžeme řešení časové Schrödingerovy rovnice okamžitě napsat. V praxi tedy postačí řešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici.

2.6.2 Časová Schrödingerova rovnice

Řešení časového vývoje lze najít relativně snadno, pokud není Hamiltonův operátor explicitní funkcí času, tj. závisí jen na operátorech zobecněných souřadnic a hybností. V takovém případě je výhodné volit v Hilbertově prostoru popisovaného systému bázi generovanou vlastními vektory Hamiltonova operátoru (2.41):

$$\hat{\mathbf{H}}|n\rangle=E_n|n\rangle \quad ; \quad \langle m|n\rangle=\delta_{nm} \quad ; \quad \sum_n|n\rangle\langle n|=\hat{\mathbf{1}}.$$

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 a získáme lineární rovnici pro koeficienty $a_n(t)$.

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}|n\rangle=\hat{\mathbf{H}}\sum_n a_n(t)|n\rangle;$$

$$\mathrm{i}\hbar\sum_n\frac{\mathrm{d}a_n}{\mathrm{d}t}|n\rangle=\sum_n a_n(t)E_n|n\rangle; \qquad / \langle k| \text{ zleva}$$

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}a_k}{\mathrm{d}t} = a_k(t)E_k \ ;$$

$$a_k(t) = c_k\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_k(t-t_0)} \ .$$

Řešení časového vývoje tedy je:

$$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n(t-t_0)}|n\rangle \ . \tag{2.183}$$

Pokud dosadíme $t = t_0$, získáme rozvoj počáteční podmínky:

$$|\psi(t_0)\rangle = \sum_n c_n |n\rangle \ . \tag{2.184}$$

Koeficienty c_n jsou tedy koeficienty rozvoje počáteční podmínky do báze z vlastních vektorů energie. Časový vývoj se od rozvoje počáteční podmínky liší jen kmitající exponenciálou. Pokud tedy známe řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice, můžeme okamžitě napsat i řešení časové Schrödingerovy rovnice. Časový vývoj nemá v kvantové teorii natolik zásadní charakter jako v newtonovské dynamice, lze ho vždy jednoduše zapsat, pokud známe vlastní stavy a vlastní čísla Hamiltonova operátoru.

Poněkud elegantnější je operátorové řešení rovnice pro evoluční operátor (2.181), které lze formálně zapsat jako

$$\mathrm{i}\,\hbar\,\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{U}}}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{U}} \quad \Rightarrow$$

$$\hat{\mathbf{U}}(t,t_0) = \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\hat{\mathbf{H}}(t-t_0)} \ .$$

Evoluční operátor je tedy funkcí Hamiltonova operátoru. Pokud známe vlastní vektory a vlastní čísla Hamiltonova operátoru (řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice), můžeme evoluční operátor vyjádřit z věty o spektrálním rozvoji:

$$\hat{\mathbf{U}}(t,t_0) = \sum_n \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E_n(t-t_0)}|n\rangle\langle n| \ .$$

Nyní zapůsobíme nalezeným evolučním operátorem na počáteční stav $|\psi_0>$:

► $$|\psi(t)\rangle = \sum_n \mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E_n(t-t_0)}|n\rangle\langle n|\psi_0\rangle \tag{2.185}$$

a získáme tak okamžitě řešení časové Schrödingerovy rovnice:

► $$|\psi(t)\rangle = \sum_n c_n\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}E_n(t-t_0)}|n\rangle \ ; \qquad c_n \equiv \langle n|\psi_0\rangle \ . \tag{2.186}$$

Oba postupy tedy vedou na shodná řešení.

◖ Příklad 2.3: Vývoj vlastního stavu

Předpokládejme, že je systém připraven v nějakém vlastním energetickém stavu (například třetím). Nalezněte průběh pravděpodobnosti nalezení systému.

Řešení: Počáteční stav je roven

$$\psi_0(x) = c_3\psi_3(x)\,,$$

kde c_3 je normovací koeficient. Časový vývoj stavu bude dán formulí

$$\psi(t,x) = c_3\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_3 t}\,\psi_3(x)$$

a výsledná hustota pravděpodobnosti vychází

$$w(t,x) \equiv \psi^*\psi = \left|c_3\psi_3\right|^2 .$$

Je patrné, že se časový vývoj neprojevil na hustotě pravděpodobnosti, v tomto smyslu se tedy systém připravený v jednom z vlastních stavů energie nevyvíjí.

◗

◖ Příklad 2.4: Kvantová interference

Nalezněte vývoj pravděpodobnosti systému, jehož počáteční stav je zadán jako lineární kombinace dvou vlastních funkcí Hamiltonova operátoru.

Řešení: Počáteční stav je kombinací dvou vlastních stavů 1 a 2 Hamiltonova operátoru (nemusí samozřejmě jít o první a druhý energetický stav, ale o libovolné dva stavy)

$$\psi_0(x) = c_1\psi_1(x) + c_2\psi_2(x)\,,$$

časový vývoj je

$$\psi(t,x) = c_1\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_1 t}\,\psi_1(x) + c_2\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_2 t}\,\psi_2(x)$$

a výsledná hustota pravděpodobnosti vychází

$$w(t,x) \equiv \psi^*\psi =$$

$$= \left|c_1\psi_1\right|^2 + \left|c_2\psi_2\right|^2 + \left[(c_1\psi_1)(c_2\psi_2)^*\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t} + (c_1\psi_1)^*(c_2\psi_2)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E_2-E_1)t}\right].$$

Celková pravděpodobnost je součtem pravděpodobnosti, že se systém nachází ve stavu 1, ve stavu 2 a interferenčního kmitavého členu, který je pro kvantové procesy typický. Výsledek lze jednoduše zapsat takto:

$$w(t,x) = w_1(x) + w_2(x) + A(x)\cos\omega t + B(x)\sin\omega t\,;$$
$$\omega \equiv \Delta E/\hbar\,. \tag{2.187}$$

Úhlová frekvence časových oscilací pravděpodobnosti odpovídá kvantování s energií rovnou Planckovu kvantu $\Delta E = \hbar\omega$.

◗

2.6.3 Oscilace neutrin

Neutrina (elektronové, mionové a tauonové) jsou ve skutečnosti lineární kombinací vlastních stavů hmoty

$$|\nu_\alpha\rangle = V_{\alpha k}\,|\nu_k\rangle\,, \quad \text{kde } \alpha = \text{e, } \mu, \tau\,; \qquad k = 1, 2, 3.$$

Index α popisuje generace neutrin a index k vlastní hmotnostní stavy. Transformační matice (říkáme jí *mixážní matice*) je unitární a poprvé ji zavedli Ziro Maki, Masami Nakagawa a Shoichi Sakata v roce 1962, aby vysvětlili oscilace neutrin předpovězené Brunem Pontecorvem. Pro pochopení principu oscilací předpokládejme jen existenci dvou generací neutrin a mixáž jejich stavů ve tvaru

$$|\nu_\mathrm{e}\rangle = +\cos\theta\,|\nu_1\rangle + \sin\theta\,|\nu_2\rangle\,,$$

$$|\nu_\mu\rangle = -\sin\theta\,|\nu_1\rangle + \cos\theta\,|\nu_2\rangle\,.$$

Unitární matici jsme zapsali jako běžnou rotační matici za pomoci úhlu θ. Za letu neutrin se budou hmotnostní stavy vyvíjet a mixážní poměry měnit. Spíše než časový vývoj nás ale bude zajímat vývoj stavu podél letící částice. Vzhledem k tomu, že pro rovinnou vlnoplochu platí

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{x}-E t)}\,,$$

budeme moci vývoj hmotnostních stavů podél letu neutrina zapsat takto:

$$|\nu_k(x)\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_k x}\,|\nu_k(0)\rangle\,.$$

Například stav elektronového neutrina se za letu bude měnit podle formule

$$|\nu_\mathrm{e}(x)\rangle = +\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1 x}\cos\theta\,|\nu_1(0)\rangle + \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_2 x}\sin\theta\,|\nu_2(0)\rangle\,.$$

Amplituda pravděpodobnosti, že se elektronové neutrino bude za letu jevit pozorovateli jako čistě mionové neutrino (dané svou počáteční kombinací), bude

$$\mathcal{A}_{\nu_\mathrm{e}\to\nu_\mu} = \langle\nu_\mu(0)|\nu_\mathrm{e}(x)\rangle\,.$$

Po provedení skalárního součinu (hmotnostní stavy tvoří ortonormální bázi) máme

$$\mathcal{A}_{\nu_\mathrm{e}\to\nu_\mu} = \cos\theta\sin\theta\left[\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_2 x\right) - \exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_1 x\right)\right].$$

Neutrina mají velmi malou hmotnost a relativistické energie, a proto lze využít rozvoj

$$p_k = \sqrt{(E/c)^2 - m_k^2 c^2} = \frac{E}{c}\sqrt{1-\left(m_k c^2/E\right)^2} \approx \frac{E}{c} - \frac{m_k^2 c^3}{2E}\,.$$

Amplitudu pravděpodobnosti nyní snadno upravíme

$$\mathcal{A}_{\nu_e\to\nu_\mu} = \cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{Ex}{\hbar c}}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{m_2^2c^3}{2\hbar E}x\right)-\exp\left(-\mathrm{i}\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}x\right)\right]=$$

$$=\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{E}{\hbar c}-\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}\right)x}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\Delta m^2c^3}{2\hbar E}x\right)-1\right]=$$

$$=\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{E}{\hbar c}-\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}-\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}\right)x}\left[\exp\left(-\mathrm{i}\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right)-\exp\left(+\mathrm{i}\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right)\right]=$$

$$=-2\mathrm{i}\cos\theta\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{E}{\hbar c}-\frac{m_1^2c^3}{2\hbar E}-\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}\right)x}\sin\left(\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right).$$

Pokud jsou vlastní hmotnosti různé (stačí jedna nenulová), dojde k *oscilacím neutrin*. Pravděpodobnost, že původní elektronové neutrino nalezneme jako mionové je periodickou funkcí vzdálenosti od zdroje

$$\mathcal{P}_{\nu_e\to\nu_\mu} = \left|\mathcal{A}\right|^2 = \mathcal{A}\mathcal{A}^* = \sin^2 2\theta\,\sin^2\left(\frac{\Delta m^2c^3}{4\hbar E}x\right);$$

$$\Delta m^2 \equiv m_2^2 - m_1^2\,.$$

Z různých experimentů je možné určit úhel mixáže a střední vzdálenost, na které proběhne přeměna neutrin

$$L = \frac{4\pi\hbar E}{\Delta m^2c^3},$$

ze které plyne pouze rozdíl kvadrátů hmotností neutrin. Skutečná neutrina mají tři generace a transformační matice je 3×3 a obsahuje tři úhly. Princip se ale nemění. Z měření plyne, že platí

$$\Delta m_{12}{}^2 = (7{,}59 \pm 0{,}21)\times10^{-5}\ \mathrm{eV}^2\ \text{(KamLAND, 2005)}$$

$$\Delta m_{23}{}^2 = (2{,}43 \pm 0{,}13)\times10^{-3}\ \mathrm{eV}^2\ \text{(MINOS, 2006)}.$$

$$\theta_{12} \sim 33°,\ \theta_{23} \sim 45°,\ \theta_{13} \le 9°.$$

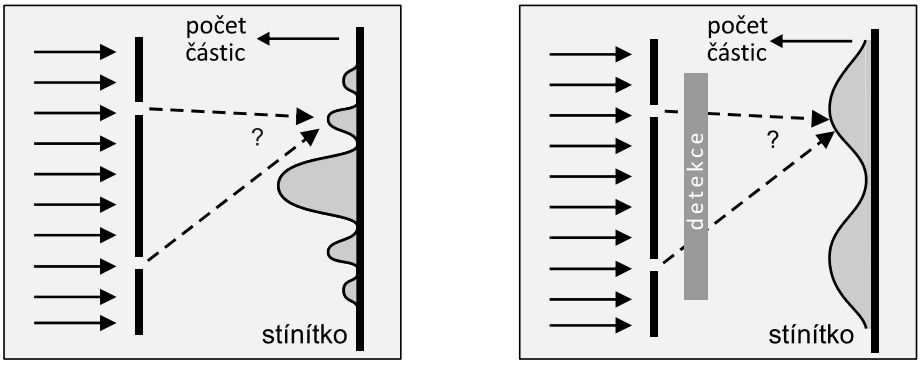
Mixážní matice se tak rozhodně nepodobá diagonální matici, jako je tomu v případě obdobné mixážní matice u kvarků.

Oscilace neutrin byly poprvé pozorovány v roce 1998 na detektoru Super-Kamiokande v Japonsku. Při pozorování atmosférických neutrin (vznikají interakcí kosmického záření s horní vrstvou atmosféry) přicházel jiný poměr elektronových a mionových neutrin zhora a zdola. Neutrina přicházející zhora nestačila oscilovat, naopak neutrina přicházející zdola prolétla celou Zemí a měla dost času na oscilaci. Obdobné oscilace pozorovaly ve stejné době také na Sudburské neutrionové observatoři v USA.

2.6.4 Dvouštěrbinový experiment, AB experiment, MZ interferometr

Představme si, že na dvě štěrbiny dopadá proud částic. Po průchodu štěrbinami se na stínítku zaznamenává, kam která dopadla. Výsledkem je klasický interferenční vlnový obrazec s maximem dopadů paradoxně mezi oběma štěrbinami. Podobně jako v předchozí kapitole se sčítají amplitudy pravděpodobností obou možností, nikoli samotné pravděpodobnosti.

Na výsledku nic nezmění ani počet přítomných částic: bude-li tok zleva velmi slabý a v průměru se bude vyskytovat v oblasti experimentu jediná částice, nikdy nezjistíme, kterým otvorem prošla. Po dosti dlouhé době získáme statistický obraz dopadu částic na stínítko podle obrázku. Můžeme si třeba myslet, že část částice prošla jedním otvorem a část druhým (což by odpovídalo tomu, že byla v superpozici dvou stavů), nebo že interferovala sama se sebou. Takové úvahy nemají reálný smysl. Pro posouzení statistického výsledku mnoha opakovaných dopadů je důležitý jen souhlas experimentálního výsledku s předpovědí danou teorií.



Obr. 2.36: Dvojštěrbinový experiment

Jiný obraz se nám naskytne, pokusíme-li se zjistit, kudy částice prolétla. Zakryjeme-li jeden z otvorů, bude maximum dopadajících částic proti otevřenému otvoru. Můžeme vymyslet rafinovanější postup. Budeme sledovat například pomocí částic světla – fotonů, kudy částice prolétla. Bude-li foton málo energetický, bude mít příliš dlouhou vlnovou délku a tím malou rozlišovací schopnost na to, aby určil, kudy částice letěla. Bude-li ale foton mít pro detekci dosti krátkou vlnovou délku, můžeme skutečně rozhodnout, kudy prolétla částice. Ale něco za něco: krátkovlnný foton má značnou energii a silně ovlivní stav prolétající částice. Dokonce natolik, že interferenční obrazec zcela vymizí. Obecně platí: nepokusíme-li se o detekci, sčítají se amplitudy pravděpodobnosti a statistika dopadů má charakter interferenčního jevu. Pokusíme-li se o detekci, interference zaniká a sčítají se klasicky samotné pravděpodobnosti. Věc je dokonce ještě zapeklitější. O detekci se ani nemusíme pokusit, postačí, že je principiálně možná, a kvantová interference zmizí. Těžko se nám tento fakt přijímá. Je to vlastnost mikrosvěta, která se nám zdá velmi podivná. Naše zkušenosti z makrosvěta jsou založeny na komutujících objektech. Právě nekomutativnost jevů v mikrosvětě vede ke skládání amplitud pravděpodobností a k interferenčnímu jevu.

Aharonův-Bohmův experiment

V klasické elektrodynamice je možné elektromagnetické pole popsat buď za pomoci elektrické intenzity a magnetické indukce nebo za pomoci čtyřpotenciálů (viz kapitola 1.6.3 nebo podrobněji v [1]). Každý z těchto popisů má své výhody a nevýhody:

1. Elektrické a magnetické pole je přímo měřitelné přístroji, potenciály nikoli. Tato situace vytváří dojem, že pole jsou reálné veličiny, zatímco potenciály jen pomocné matematické objekty.
2. Elektrická a magnetická pole jsou jednoznačná, potenciálů k danému problému existuje nekonečně mnoho. Toho lze využít ke konstrukci co nejjednodušších rovnic pro potenciály. Na druhou stranu nejednoznačnost potenciálů opět vzbuzuje dojem, že koncept potenciálů je jen pomocnou matematickou konstrukcí.
3. Maxwellovy rovnice v potenciálech jsou jednodušší, vedou na vlnovou rovnici s nenulovou pravou stranou, pro kterou existuje řada možností řešení. Po nalezení potenciálů musíme ale ještě určit pole z formulí $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$, $\mathbf{E} = -\nabla\phi - \partial\mathbf{A}/\partial t$.
4. Při transformaci polí do jiné souřadnicové soustavy jsou vhodnější potenciály. Tvoří čtyřvektor, který se transformuje Lorentzovou maticí. Samotná transformace polí je poněkud nepřehledná a je dána transformací tenzoru pole.
5. Do čtyřrozměrného světa relativity na první pohled lépe zapadá čtyřpotenciál pole $(\phi, \mathbf{A})$ než šestice hodnot **E** a **B**. Ty jsou ve skutečnosti součástí tenzoru pole $F_{\mu\nu}$, jak jsme viděli v kapitole 1.6.3.

V klasické fyzice může částice měnit svou rychlost pouze vlivem elektrických a magnetických polí. Pokud jsou pole nulová a potenciály nenulové (taková situace může nastat), na částici žádné síly nepůsobí. V kvantové mechanice je situace jiná. Ukážeme si, že přítomnost nenulového potenciálu mění fázi vlnové funkce i v případě, že samotná pole jsou nulová (například v prostoru vně dlouhé cívky je magnetické pole nulové a vektorový potenciál nenulový). Změna fáze vlnové funkce se projeví změnou interferenčního obrazce u dvouštěrbinového experimentu a jde tedy o měřitelný jev. V tomto smyslu je klasická Maxwellova elektrodynamika doplněná Lorentzovou pohybovou rovnicí neúplným popisem přírody, neboť nepostihuje všechny v přírodě probíhající a měřitelné děje. Potenciály pole navíc nejsou jen matematickou konstrukcí, ale mají na pohyb nabitých částic reálný fyzikální dopad daný kvantovými zákony.

Poprvé na tuto skutečnost upozornili angličtí teoretici Werner Ehrenberg a Raymond Siday v roce 1949, jejich práce se ale dostatečně nerozšířila. Obdobný jev o deset let později, tedy v roce 1959, znovu předpověděli izraelský fyzik Yakir Aharonov a americko-anglický teoretik David Bohm. Aharonův-Bohmův jev (AB jev) byl experimentálně potvrzen až v roce 1986 japonským fyzikem Akirou Tonomurou.

Změna dopadového obrazce způsobená přítomností magnetického pole

Uvažujme nejprve dvojštěrbinový experiment s uspořádáním podle obrázku 2.37 nalevo. Za štěrbinami je úzký pás nenulového magnetického pole (tloušťky Δl), které míří kolmo na pohyb elektronů. Toto pole na ně bude působit Lorentzovou silou

$$F = e v B \tag{2.188}$$

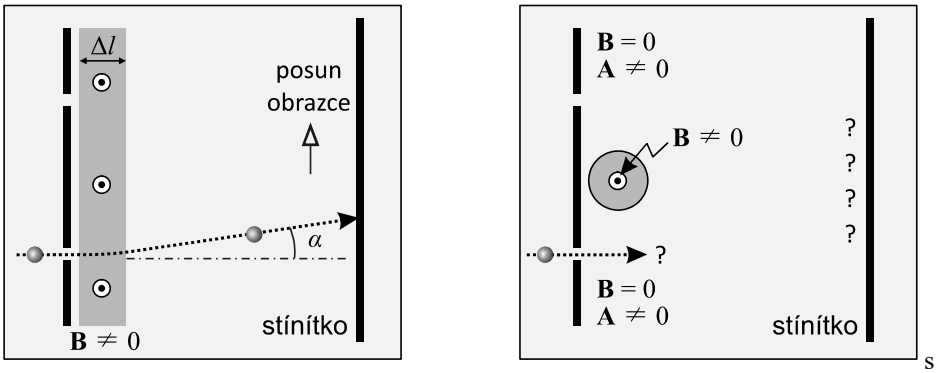
směrem vzhůru. Vzhledem k tomu, že je tloušťka vrstvy nenulového pole malá, budeme uvažovat, že se svazek elektronů pohne vzhůru vlivem působení konstantního zrychlení $a = F/m$ po dobu $\Delta t = \Delta l/v$. Ve svislém směru budou elektrony vychýleny o vzdálenost

$$\Delta y \cong \frac{1}{2} a (\Delta t)^2 = \frac{1}{2} \frac{evB}{m} \left(\frac{\Delta l}{v} \right)^2 = \frac{eB}{2mv} \Delta l^2. \tag{2.189}$$

Úhel vychýlení svazku bude podle klasického výpočtu

$$\operatorname{tg} \alpha \cong \frac{\Delta y}{\Delta l} = \frac{eB\,\Delta l}{2mv}. \tag{2.190}$$

Ať už bude obrazec dopadu elektronů na stínítku jakýkoli, měl by se působením magnetického pole úhlově posunout vzhůru o úhel α daný vztahem (2.190).



Obr. 2.37: K vysvětlení Aharonova-Bohmova jevu

Změna dopadového obrazce způsobená nenulovým potenciálem (AB jev)

Uvažujme nyní dvojštěrbinový experiment s uspořádáním podle obrázku 2.37 napravo. Za štěrbinami je dlouhý solenoid, v němž je nenulové magnetické pole. Vně solenoidu, tedy v oblasti, kterou se pohybují elektrony, je magnetické pole nulové a obrazec by neměl být posunut. Nenulový je zde pouze vektorový potenciál. Uvažujme vlnovou funkci ve tvaru

$$\psi(t, \mathbf{x}) = A\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(t,\mathbf{x})}. \tag{2.191}$$

Konstantnost amplitudy není pro výpočet podstatná. Budeme hledat rovnici pro fázi vlnové funkce, proto dosadíme (2.191) do časové Schrödingerovy rovnice (2.182) zapsané v *x* reprezentaci:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V \right) \psi. \tag{2.192}$$

Výsledkem je rovnice

$$-\hbar \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \left(-\mathrm{i} \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \varphi + \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial \varphi}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 + V \right). \tag{2.193}$$

Oddělíme-li pouze reálnou část, máme rovnici

$$-\frac{\partial \hbar \varphi}{\partial t} = \left(\frac{1}{2m} \left(\frac{\partial \hbar \varphi}{\partial \mathbf{x}} \right)^2 + V \right),$$

kterou převedeme na finální tvar

$$\frac{\partial S}{\partial t}+\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial S}{\partial \mathbf{x}}\right)^2+V=0\,;\qquad S=\hbar\varphi\,. \tag{2.194}$$

Jde o Hamiltonovu-Jacobiho rovnici (1.177), ve které má veličina S význam akce systému. Fáze vlnové rovnice je tedy dána akcí soustavy:

► $$\varphi=\frac{S}{\hbar}\,. \tag{2.195}$$

Pro případ interakce nabité částice s elektromagnetickým polem známe Lagrangeovu funkci (1.260)

$$L_{\mathrm{int}} == -Q\phi(t,\mathbf{x})+Q\mathbf{A}(t,\mathbf{x})\cdot\mathbf{v}\,.$$

Fáze vlnové funkce proto bude

$$\begin{aligned}\varphi=\frac{S}{\hbar}=\frac{1}{\hbar}\int_{t_0}^{t}L_{\mathrm{int}}\mathrm{d}t=\frac{Q}{\hbar}\int\left(-\phi+\mathbf{A}\cdot\mathbf{v}\right)\mathrm{d}t=\\ =\frac{Q}{\hbar}\int\left(-\phi\,\mathrm{d}t+\mathbf{A}_k\,\mathrm{d}x_k\right)=\frac{Q}{\hbar}\int A_\mu\,\mathrm{d}x^\mu\,.\end{aligned} \tag{2.196}$$

Ať zvolíme kterékoli vyjádření, je fáze vlnové funkce provázána s potenciály elektromagnetického pole, které zde hrají zcela primární úlohu. Celá vlnová funkce bude

► $$\psi=A\exp\left[\frac{\mathrm{i}Q}{\hbar}\int A_\mu\,\mathrm{d}x^\mu\right]. \tag{2.197}$$

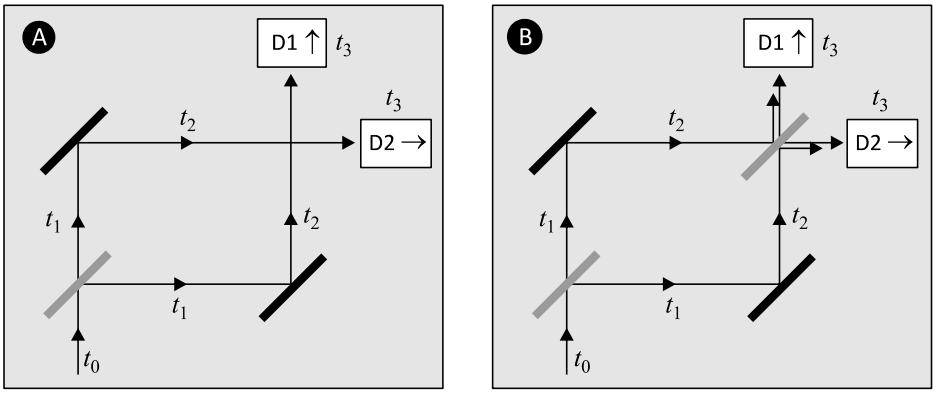
V oblasti, kterou prolétají v Aharonově-Bohmově myšlenkovém experimentu elektrony, je sice magnetické pole nulové, nenulový je ale vektorový potenciál, který způsobí změnu fáze vlnové funkce a tím posun interferenčního obrazce.

Poprvé se pokusil tento jev změřit japonský fyzik Akira Tonomura v roce 1982 za pomoci elektronového holografického mikroskopu, který dokáže kromě intenzity elektronového svazku také zaznamenat fázi elektronů (vyzařují koherentní elektromagnetické pole). Výsledky pro použitou cívku nebyly průkazné, neboť pole prosakovalo i vně cívku. Proto v roce 1986 použil Tonomura jako zdroj pole feromagnet ve tvaru toroidu o průměru 6 μm. Povrch byl pokryt supravodivým niobem, který dokonale odstínil magnetické pole. Teplota byla udržována na 5 K. Měřen byl posun interferenčních proužků mezi svazkem elektronů procházejících vnitřkem toroidu a svazkem elektronů procházejících vně magnetu. V těchto oblastech je nulové magnetické pole, ale různý vektorový potenciál. Proužky byly posunuty o hodnotu předpovězenou Aharonovým-Bohmovým jevem [29].

Poznámka: Feynman si představoval, že mezi počátečním a koncovým bodem pohybu částice je nekonečně mnoho desek s nekonečně mnoha štěrbinami. Každá trajektorie je možná a přináší amplitudu pravděpodobnosti $\psi = A\exp(\mathrm{i}S/\hbar)$. Sčítání všech amplitud pravděpodobnosti vedlo Feynmana k zavedení tzv. *integrálu po drahách*. Kvantovou interferencí se většina amplitud vyruší. Posílí se jen ty, které mají blízkou fázi, tj. pro které se příliš nemění akce S. Taková situace nastává v okolí minima nebo maxima akce. Největší pravděpodobnost tedy budou mít trajektorie, pro které je akce extremální, což je ale *Hamiltonův princip nejmenší akce*!

Machův-Zehnderův interferometr

Obdobnou variantou k dvojštěrbinovému experimentu je Machův-Zehnderův interferometr. Je pojmenovaný podle rakouského fyzika Ludwiga Macha (1868–1951), který byl synem slavného Ernsta Macha, a švýcarského fyzika Ludwiga Zehndera (1858–1949), považovaného za objevitele interferometru. Namísto elektronů je zde využíváno světlo, které má opět možnost se šířit k detektoru dvěma cestami. Tentokrát ale nejde o dvě štěrbiny, ale o dvě interferenční ramena tvořená dvěma úplnými a dvěma polopropustnými zrcadly. Budeme předpokládat, že při každém odrazu se fáze posune o 90°.



Obr. 2.38: Machův-Zehnderův interferometr

Povšimněme si nejprve situace na obrázku 2.38 vlevo. Světlo ze zdroje se na polopropustném zrcadle větví na dva svazky (↑ a →), které už spolu nikde neinteragují a vchází do detektorů D1 (detektor svislých paprsků) a D2 (detektor vodorovných paprsků):

$$\begin{aligned} |\psi(t_0)\rangle &= |\uparrow\rangle; \\ |\psi(t_1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle; \\ |\psi(t_2)\rangle = |\psi(t_3)\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle + \frac{\mathrm{i}\,\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle. \end{aligned} \tag{2.198}$$

V čase t_1 je paprsek (nebo jednotlivý foton) v superpozici dvou stavů (svislé a vodorovné dráhy). Koeficienty superpozice zajišťují normování (součet všech pravděpodobností je roven 1). Pravděpodobnosti jsou dány kvadráty koeficientů u jednotlivých stavů superpozice, tedy u obou svazků 0,5. V časech t_2 a t_3 je situace stejná – u každého svazku došlo k jednomu odrazu, který je reprezentován fázovým posunem o 90° (násobením stavu i). V detektorech D1 a D2 je stejná pravděpodobnost záchytu fotonů, budou registrovat stejnou intenzitu světla. V situaci napravo (B) přibude jedno polopropustné zrcadlo, na kterém se každý ze stavů v čase t_2 rozdělí do další superpozice:

$$|\psi(t_3)\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle\right] - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle\right] = -|\uparrow\rangle. \tag{2.199}$$

Vidíme, že dojde k destruktivní interferenci vodorovného paprsku na detektoru D2 (nezaznamená žádný signál, paprsky přicházejí v protifázi) a ke konstruktivní interfe-

renci na D1 (zaznamená všechny fotony ve fázi, tj. 100 % intenzity světla). Jde o další ukázku nelokálního chování kvantové teorie způsobeného principem superpozice stavů.

Pokud bychom chtěli výsledek popsat klasicky, můžeme sledovat jen fázová posunutí horní a dolní větve interferometru. Do detektoru D1 přichází paprsek z horní větve po dvou odrazech, tedy s fázovým posunutím 180°. Paprsek z dolní větve sem přichází také po dvou odrazech, tedy opět s fázovým posunutím 180°. Je zjevné, že oba paprsky přicházejí do D1 ve fázi a budou se interferenčně zesilovat.

V detektoru D2 je ale situace jiná. Paprsek z horní větve absolvoval jediný odraz a jeho fázový posun je tedy jen 90°. Paprsek z dolní větve absolvoval tři odrazy a má fázové posunutí 270°. Oba paprsky jsou tedy v protifázi a interferencí se vyruší. Taková klasická interpretace nám ale neodpoví na otázku, kam se poděla energie obou vln, které do detektoru přicházejí v protifázi. Odpověď je v nelokálnosti kvantové teorie: foton je v čase t_3 v superpozici více stavů a byl registrován detektorem D1. V detektoru D2 je nulová pravděpodobnost registrace tohoto fotonu. Dalšími detaily interference v Machově-Zehnderově interferometru se budeme zabývat v kapitolách 2.9.1 a 2.9.2.

2.6.5 Ehrenfestovy teorémy, viriálový teorém

V této kapitole si probereme tři základní teorémy týkající se časového vývoje.

První Ehrenfestův teorém

První teorém se týká časového vývoje operátoru souřadnice. Pro jednoduchost ho odvodíme v jednorozměrném případě, vyjdeme z principu korespondence a časového vývoje (1.40):

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{X}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}^2\right] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{X}}, V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left(\hat{\mathbf{P}}\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}\right] + \left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}\right]\hat{\mathbf{P}}\right) =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left(\mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{P}} + \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{P}}\right) = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m}.$$

První Ehrenfestův teorém je tak analogií definice hybnosti z klasické mechaniky:

► $$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{X}}}{\mathrm{d}t} = \frac{\hat{\mathbf{P}}}{m}. \tag{2.200}$$

Druhý Ehrenfestův teorém

Druhý Ehrenfestův teorém se týká časového vývoje operátoru hybnosti. Budeme postupovat podobně jako v předchozím případě:

$$\frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{P}}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\hat{\mathbf{P}}, \frac{\hat{\mathbf{P}}^2}{2m} + V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{2m\mathrm{i}\hbar}\left[\,\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{P}}^2\,\right] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\,\hat{\mathbf{P}},\ V(\hat{\mathbf{X}})\right] =$$

$$= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\,\hat{\mathbf{P}},\ V(\hat{\mathbf{X}})\right].$$

Hodnotu posledního komutátoru určíme takto: Nejprve nalezneme komutátor operátoru hybnosti s libovolnou mocninou operátoru souřadnice (indukcí) a výsledek budeme člen po členu aplikovat na operátor potenciálu rozvinutý do mocninného Taylorova rozvoje:

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right] = -\left[\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{P}}\right] = -\mathrm{i}\hbar\,\hat{\mathbf{1}},$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^2\right] = \hat{\mathbf{X}}\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right] + \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right]\hat{\mathbf{X}} = -\mathrm{i}\hbar 2\hat{\mathbf{X}}$$

$$\vdots$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n\right] = -\mathrm{i}\hbar n\hat{\mathbf{X}}^{n-1},$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^{n+1}\right] = \hat{\mathbf{X}}\left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}^n\right] + \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{X}}\right]\hat{\mathbf{X}}^n = -\mathrm{i}\hbar(n+1)\hat{\mathbf{X}}^n,$$

$$\left[\hat{\mathbf{P}}, V(\hat{\mathbf{X}})\right] = -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}}.$$

Základním předpokladem těchto úvah je samozřejmě rozvinutelnost potenciální energie do Taylorovy řady. Po dosazení za vypočtený komutátor druhý Ehrenfestův teorém vychází:

$$\blacktriangleright \qquad \frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{P}}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}}, \tag{2.201}$$

což je vlastně kvantovou analogií Newtonových pohybových rovnic (záporně vzatý gradient potenciální energie je působící sílou).

Viriálový teorém

Viriálový teorém je velmi užitečný nejen v kvantové teorii, ale i ve statistické fyzice. Určuje střední hodnotu kinetické energie obsažené v systému z tvaru energie potenciální. Určeme nejprve maticové elementy komutátoru dynamické proměnné A s Hamiltonovým operátorem v energetické reprezentaci:

$$\langle n\,|\,[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{H}}]\,|\,m\,\rangle =$$

$$= \langle n\,|\,\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{H}} - \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{A}}\,|\,m\,\rangle =$$

$$= (E_m - E_n)\langle n\,|\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,m\,\rangle =$$

$$= (E_m - E_n)\,A_{nm}\,.$$

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:

$$\langle n | [\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle = 0 ,$$

$$\langle n | [\hat{\mathbf{X}}, \hat{\mathbf{H}}]\hat{\mathbf{P}} | n \rangle + \langle n | \hat{\mathbf{X}}[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] | n \rangle = 0 ,$$

$$\langle n | \frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{X}}}{\mathrm{d}t} \hat{\mathbf{P}} | n \rangle + \langle n | \hat{\mathbf{X}} \frac{\mathrm{d}\hat{\mathbf{P}}}{\mathrm{d}t} | n \rangle = 0 .$$

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*:

► $$\langle n | \hat{\mathbf{T}} | n \rangle = \langle n | \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}} | n \rangle ; \qquad \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}} \equiv \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}}_k \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}_k} . \tag{2.202}$$

Pro jednorozměrný harmonický oscilátor má operátor viriálu snadnou interpretaci – je přímo roven potenciální energii:

$$V(\hat{\mathbf{X}}) = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2 \qquad \Rightarrow \qquad \hat{\boldsymbol{\mathcal{V}}} = \frac{1}{2} \hat{\mathbf{X}} \frac{\partial V}{\partial \hat{\mathbf{X}}} = \frac{1}{2} k \hat{\mathbf{X}}^2 .$$

Střední hodnoty kinetické a potenciální energie jsou si proto v každém stavu rovny.

Poznámka: Již v roce 1933 upozornil Fritz Zwicky, že v kupě galaxií ve Vlasech Bereniky je pohyb galaxií větší, než by odpovídalo viriálovému teorému pro gravitační potenciální energii. Řešením je existence další neviditelné (temné) hmoty v této kupě. V roce 1968 byl podobný problém zjištěn Verou Rubinovou i pro oběžné rychlosti hvězd v periferních oblastech samotných galaxií. Řešením je existence haló z temné hmoty v okolí galaxie. Viriálový teorém může být proto velmi užitečný i pro makroskopické nekvantové systémy. Svítící (registrované) hmoty v galaxiích je jen asi 1 %. V roce 2000 se pomocí Hubblova dalekohledu ukázalo, že až 50 procent hmoty Galaxie může být soustředěno ve velmi starých a málo svítících bílých trpaslících, kteří doposud nebyli pozorovatelní. Patřili pravděpodobně k první generaci hvězd před cca 12 miliardami let a vyplňují celé haló Galaxie. Obdobně tomu bude i u ostatních galaxií. K řešení problému temné hmoty bílí trpaslíci zdaleka nestačí. S největší pravděpodobností jde o neznámou formu hmoty nebaryonové povahy, která se hledá v mnoha podzemních laboratořích světa. Příkladem může být italská laboratoř pod horou Gran Sasso a její experiment DAMA/Libra, jiným experimentem je CoGeNT v dole Soudan ve Spojených státech. Z měření sondy Planck plyne, že ve vesmíru je 27 % temné hmoty (z celkového množství hmoty a energie). Údaj je z roku 2015.

2.7 Relativistická kvantová teorie, spin

2.7.1 Prostorová rotace a Lorentzova transformace

Lorentzova transformace popisuje přechod mezi dvěma inerciálními souřadnicovými soustavami, které se vůči sobě pohybují rovnoměrně přímočaře. Je základem speciální relativity Alberta Einsteina a detaily odvození čtenář nalezne v [1] nebo v překrásné učebnici [21]. Lorentzova transformace je unitární transformací a z matematického hlediska patří do skupiny rotací. Proto se nejprve seznámíme s obyčejnou rotací v třírozměrném prostoru.

Prostorová rotace

Pootočíme-li souřadnicovým systémem kolem osy z o úhel φ, lze transformaci jednoduše zapsat jako (viz kapitola 3.2.3 Rotace v rovině)

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= t\,, \\ \tilde{x} &= x\cos\varphi + y\sin\varphi\,, \\ \tilde{y} &= -x\sin\varphi + y\cos\varphi\,, \\ \tilde{z} &= z\,. \end{aligned} \tag{2.203}$$

Časovou souřadnici budeme dávat na nultou pozici, při prostorové rotaci se čas nemění. Celou transformaci popíšeme pomocí rotační matice $\mathbf{R}_z$, Podobně můžeme popsat rotace kolem ostatních souřadnicových os (stačí cyklicky zaměnit $x \to y \to z \to x$):

$$\mathbf{R}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos\varphi & \sin\varphi \\ 0 & 0 & -\sin\varphi & \cos\varphi \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{R}_y = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos\varphi & 0 & -\sin\varphi \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & \sin\varphi & 0 & \cos\varphi \end{pmatrix},$$

► (2.204)

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

Rotace patří mezi unitární transformace. Připomeňme si, že unitární operátory zachovávají skalární součin, proto platí

► $\mathbf{U}^\dagger\mathbf{U} = \mathbf{1} \;\Rightarrow\; \det\mathbf{U}^\dagger \det\mathbf{U} = 1 \;\Rightarrow\; \left(\det\mathbf{U}\right)^* \left(\det\mathbf{U}\right) \;\Rightarrow\; |\det\mathbf{U}|^2 = 1\,.$ (2.205)

Pro reálné matice je determinant všech unitárních transformací roven buď +1 (*rotace*), nebo –1 (*zrcadlení*). Snadno se přesvědčíme, že determinant všech tří rotačních matic je roven +1. S rotační symetrií se pojí zachování veličiny, kterou nazýváme *moment hybnosti*. Tato veličina je danou symetrií definována (viz teorém Noetherové, kap. 1.2.1).

Lorentzova transformace

Velmi příbuznou transformací k rotacím je Lorentzova transformace popisující přechod mezi dvěma vzájemně se rovnoměrně pohybujícími inerciálními souřadnicovými systémy, předpokládejme, že v ose x (odvození viz například [1], [21], [7]):

$$\begin{aligned} \tilde{t} &= \frac{t - vx/c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\ \tilde{x} &= \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \\ \tilde{y} &= y, \\ \tilde{z} &= z. \end{aligned} \tag{2.206}$$

Tuto známou transformaci lze zapsat podstatně elegantněji v maticové podobě. Zavedeme-li relativistické proměnné $x_0 \equiv ct$, $x_1 \equiv x$; $x_2 \equiv y$; $x_3 \equiv z$ a relativistické koeficienty

$$\beta \equiv \frac{v}{c}; \qquad \gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}}, \tag{2.207}$$

budou matice Lorentzovy transformace (v ostatních osách matice získáme cyklickou záměnou) mít tvar

$$\begin{aligned} \mathbf{\Lambda}_x &= \begin{pmatrix} \gamma & -\gamma\beta & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & \gamma & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{\Lambda}_y = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & -\gamma\beta & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ \mathbf{\Lambda}_z &= \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & -\gamma\beta \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\gamma\beta & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.208}$$

Determinant transformačních matic je roven

$$\det \mathbf{\Lambda} = \gamma^2 - \gamma^2\beta^2 = \gamma^2(1-\beta^2) = 1 \tag{2.209}$$

a jde tedy opět o rotace, tentokrát v rovině dané časovou a jednou prostorovou osou. Charakter rotací lépe vynikne, zapíšeme-li Lorentzovy matice pomocí substituce

$$\begin{aligned} \gamma &= \operatorname{ch} u \\ \gamma\beta &= \operatorname{sh} u \end{aligned} \tag{2.210}$$

kde veličina u se nazývá *rapidita* a je definována vztahem

$$u \equiv \operatorname{ath} \frac{v}{c}. \tag{2.211}$$

Lorentzova transformace získá za pomoci rapidity ještě přehlednější tvar

$$\mathbf{\Lambda}_x = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,u & -\mathrm{sh}\,u & 0 & 0 \\ -\mathrm{sh}\,u & \mathrm{ch}\,u & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \qquad \mathbf{\Lambda}_y = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,u & 0 & -\mathrm{sh}\,u & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -\mathrm{sh}\,u & 0 & \mathrm{ch}\,u & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix},$$

►

$$\mathbf{\Lambda}_z = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,u & 0 & 0 & -\mathrm{sh}\,u \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ -\mathrm{sh}\,u & 0 & 0 & \mathrm{ch}\,u \end{pmatrix}.$$

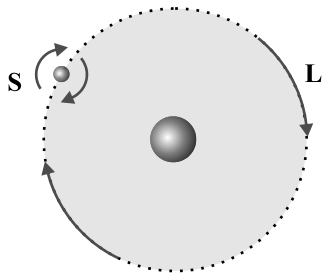
Povšimněte si, že jednotkový determinant všech tří matic je nyní patrný na první pohled ($\mathrm{ch}^2\,u - \mathrm{sh}^2\,u = 1$). S Lorentzovou symetrií (experiment dopadne stejně ve dvou inerciálních soustavách, které se navzájem pohybují rovnoměrně přímočaře) se pojí existence nové zachovávající se veličiny, která se nazývá *spin*.

2.7.2 Spin

V minulé kapitole jsme viděli, že podobnou úlohu, jakou má prostorová rotace, má i Lorentzova transformace. Jde také o rotaci, ale v rovině dané časovou a jednou prostorovou souřadnicí o imaginární úhel nazývaný rapidita. Rotační symetrie odpovídá symetrii systému vzhledem k pootočení, Lorentzova symetrie odpovídá stejnému chování systému v různých, navzájem se rovnoměrně pohybujících inerciálních souřadnicových soustavách. S oběma symetriemi se pojí odpovídající zákony zachování:

rotační symetrie	→	moment hybnosti **L**
Lorentzova symetrie	→	spin **S**

Spin má velmi podobné vlastnosti jako moment hybnosti, lze si ho však jen velmi těžko představit. Značně nepřesné, ale přesto ilustrativní, je představit si částici obíhající kolem centra a současně rotující kolem vlastní osy. V této klasické představě odpovídá momentu hybnosti orbitální rotace a spinu vlastní rotace.



Obr. 2.39: Nepřesná představa spinu jako rotace kolem osy a momentu hybnosti jako oběhu kolem centra

Skutečné částice ani neobíhají kolem centra, ani nerotují kolem vlastní osy. Jejich celkový rotační stav je dán dvěma veličinami – momentem hybnosti (orbitálním momen-

tem) a spinem (vnitřním momentem). Obě veličiny se mohou skládat, potom hovoříme o spinorbitální interakci, neboli *LS* interakci či *LS* vazbě. Operátor spinu má stejné komutační relace jako moment hybnosti (2.25), (2.27)

$$[\hat{\mathbf{S}}_1, \hat{\mathbf{S}}_2] = \mathrm{i}\hbar\hat{\mathbf{S}}_3 \quad + \quad \text{cyklické záměny}, \qquad [\hat{\mathbf{S}}^2, \hat{\mathbf{S}}_3] = 0\,. \tag{2.212}$$

Pro spin zavádíme dvě kvantová čísla (stejně jako u momentu hybnosti): 1) spinové číslo neboli spin s určující velikost a 2) magnetické spinové číslo m_s určující projekci spinu do třetí osy. Pro spin lze pomocí posuvných operátorů odvodit stejně jako pro moment hybnosti vztahy (2.149)

$$|S| = \sqrt{s(s+1)}\,\hbar\,, \qquad s = 0, 1/2, 1, 3/2, \ldots; \qquad S_3 = m_\mathrm{s}\hbar\,, \qquad m_\mathrm{s} = -s, -s+1, \ldots, s\,. \tag{2.213}$$

Tentokrát se ale realizují i poločíselné hodnoty, které jsme pro komutační strukturu (2.212) respektive (2.25) odvodili dříve. Hodnota spinu s je pro elementární částice neměnnou charakteristikou, stejně tak jako hodnota elektrického náboje Q nebo klidové hmotnosti m_0.

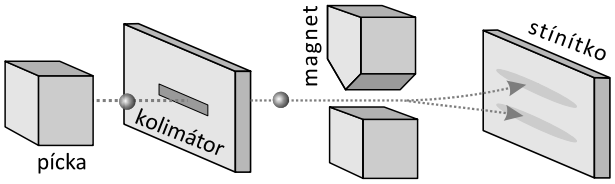
Spin některých částic	
leptony (elektron, tauon, mion, neutrina)	1/2
kvarky (d, u, s, c, b, t)	1/2
skalární mezony (piony π, kaony K)	0
vektorové mezony (róony ρ, kaony K)	1
hadrony (neutron, proton, Λ hyperon)	1/2
hadrony (Δ, Ω)	3/2
polní bosony (γ, $W^{\pm}$, Z^0, gluony)	1
gravitony	2

Přítomnost spinu zvyšuje stupeň degenerace energetických stavů. Například elektron v atomárním obalu, který má energetický stav určený hlavním kvantovým číslem, již nemá stupeň degenerace n^2, ale $2n^2$. Elektron má totiž spin 1/2 a jeho stavy jsou určeny čtveřicí čísel n, l, m, m_s. Projekce spinu m_s může nabývat dvou hodnot $\pm 1/2$ a počet stavů se zdvojnásobuje.

Částice s nenulovým spinem vykazují magnetický moment, aniž by měly orbitální moment hybnosti. Magnetické vlastnosti částic proto nemusejí souviset jen se skutečným rotačním pohybem částic, ale i s „vlastním momentem“ – spinem. V přítomnosti nehomogenního magnetického pole reagují částice na toto pole. Stavy, které původně odpovídaly jediné energii, se štěpí na multiplety blízkých energetických podhladin. Stupeň degenerace se snižuje, stavy s různým m a m_s mají různou energii. Hovoříme o tzv. sejmutí degenerace v přítomnosti magnetického pole.

Spin byl poprvé pozorován ve Sternově-Gerlachově experimentu v roce 1922. Atomy stříbra odpařující se z pícky byly kolimovány do svazku procházejícího nehomogenním magnetickým polem. Na tyto elementární magnetické momenty v nehomogen-

ním poli působí síla $\mathbf{F} = -\mu\nabla B$ (viz například odvození v navazující učebnici [2]). Magnetický moment jednotlivých stavů je různý, a proto je různá i výsledná působící síla a energie daného stavu. Kdyby neexistoval spin, nebude se stav $l = 0$ štěpit vůbec ($m = 0$), stav $l = 1$ se bude štěpit na tři různé podstavy ($m = 0, \pm 1$) a na stínítku se vytvoří jedna nebo tři stříbrné skvrny (i ve vyšších stavech l půjde vždy o lichý počet skvrn). Na stínítku však byly pozorovány dvě stříbrné skvrny, což svědčí o elektronu s orbitálním stavem $l = 0$ a spinovým stavem $s = 1/2$ (magnetické vlastnosti jsou určeny *dvěma* projekcemi $m_s = \pm 1/2$). Sudý počet projekcí znamená poločíselné řešení komutačních relací (2.212) respektive (2.25). Hypotézu o existenci vlastního momentu elektronu, který má podobné vlastnosti jako orbitální moment, podali ještě před teoretickým objasněním spinu Ralph Kronig, George Uhlenbeck a Samuel Goudsmit v roce 1925. Spin jako důsledek Lorentzovy symetrie teoreticky objasnil Paul Dirac v roce 1927.



Obr. 2.40: Schéma Sternova-Gerlachova experimentu

Izospin

V polovině 20. století bylo objevováno velké množství elementárních částic. Při výzkumu jejich vlastností se ukázalo, že některé částice se chovají při silné interakci téměř shodně a tvoří jakousi příbuzenskou skupinu neboli multiplet. Příkladem může být dublet (dvojice) neutron a proton nebo kvadruplet (čtveřice) Δ částic. Podobných vlastností neutronu a protonu při silné interakci si povšimnul Heisenberg již v roce 1932 a napadlo ho, že by bylo možné tyto částice chápat jako dva různé kvantové stavy jedné jediné částice, nukleonu. Pojmenování *izospin* navrhnul Eugene Wigner v roce 1937, šlo o zkratku ze slov izotopický spin. Věc fungovala jako u spinu. Neutron a proton jsou dvě částice, takže jejich izospin $I = ½$ a částice se liší třetí projekcí izospinu I_3, která může nabývat hodnot +½ (proton) nebo −½ (neutron).

Zavedení izospinu bylo předzvěstí objevu vnitřní struktury nejenom neutronu a protonu, ale i částic v ostatních multipletech. Ukázalo se, že jsou složeny z kvarků „d“ a „u“, jenž se při silné interakci chovají velmi podobně. Proto vznikají multiplety, jejichž částice mají obdobné vnitřní složení. Tak, jako je pro částici se spinem s počet možných projekcí $2s+1$, má multiplet s izospinem I celkem $2I+1$ členů, tj. multiplet s N členy má izospin

$$I = \frac{N-1}{2}. \tag{2.214}$$

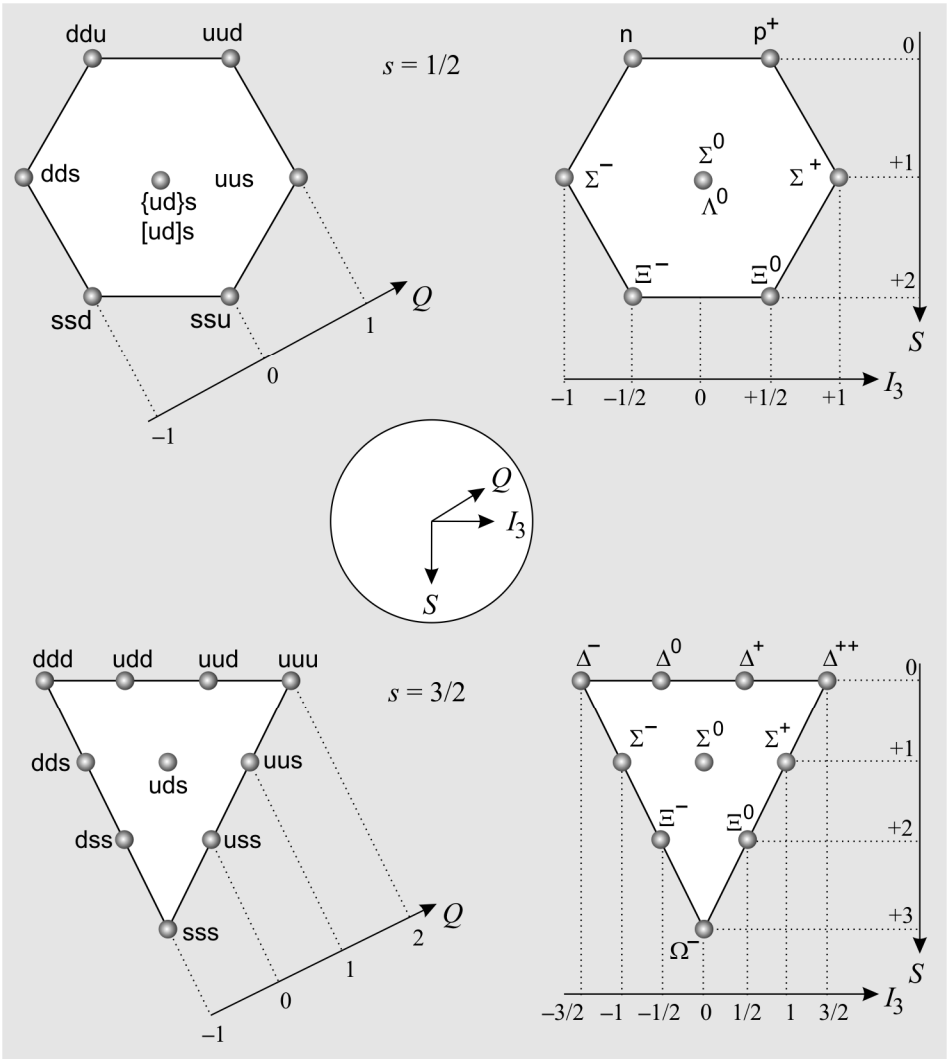
Třetí komponenta je potom dána vnitřní strukturou částice, konkrétně počtem kvarků „d“ a „u“. každý kvark „u“ přispěje k projekci izospinu hodnotou +½ a každý kvark „d“ hodnotou −½, antikvarky samozřejmě opačnou hodnotou:

► $$I_3 = ½N_u - ½N_d - ½N_{\bar{u}} + ½N_{\bar{d}} \tag{2.215}$$

Velmi užitečná je tzv. *Gell-Mannova–Nishijimova formule*, kterou lze snadno odvodit z posledního vztahu, pokud známe náboje jednotlivých kvarků:

► $$I_3 = Q - \tfrac{1}{2}Y\,, \tag{2.216}$$

kde Y je tzv. hypernáboj (průměrný elektrický náboj multipletu). Nejlépe je vše patrné z následujícího obrázku.



Obr. 2.41: Ukázka vzniku multipletů u baryonů (částic složených ze tří kvarků). V dolní části mají všechny tři kvarky stejně orientovaný spin, tedy výsledný spin částic je 3/2. V horní části jsou baryony s výsledným spinem 1/2 (jeden kvark má orientaci spinu opačnou než zbývající dva). Nalevo je kvarková struktura částic, napravo názvy jednotlivých částic. Na diagramech šikmo-vpravo vzhůru roste elektrický náboj, směrem dolů roste počet podivných kvarků (podivnost S) a doprava roste projekce izospinu v multipletu. Všechny částice multipletu jsou vždy na vodorovné příčce pomyslného žebříčku. Na schématech tak postupně shora jdou: dublet nukleonů (neutron a proton), triplet Σ (sigma) se spinem 1/2, dublet Ξ (ksí) se spinem 1/2, kvadruplet Δ (delta), triplet Σ se spinem 3/2, dublet Ξ se spinem 3/2 a singletní částice Ω (omega). Zkuste si najít projekce izospinu jednotlivých částic multipletu podle vztahů (2.215) nebo (2.216).

2.7.3 Kleinova-Gordonova rovnice

Schrödingerova rovnice není relativistická, a proto nemůže správně popsat spin. Při jejím odvození jsme používali nerelativistický tvar Hamiltonovy funkce. Výsledkem byla Schrödingerova časová rovnice (2.182), která má v x reprezentaci tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2+V\right)\psi=0\,.$$

V rovnici se nachází první časová derivace a druhé prostorové derivace, čas a prostor nejsou rovnoprávné, rovnice zjevně není relativistická. Relativistickou konstrukci lze vytvořit jak ve druhých (Kleinova-Gordonova rovnice), tak v prvních (Diracova rovnice) derivacích. V této kapitole se budeme zabývat konstrukcí správné rovnice ve druhých derivacích.

Kleinova-Gordonova rovnice

Rovnici pro vlnovou funkci částice ve druhých derivacích poprvé odvodili Oskar Klein a Walter Gordon. Předpokládejme, že hledáme lineární rovnici, která limitně při malých rychlostech přejde ve Schrödingerovu rovnici. U lineárních rovnic platí princip superpozice a obecné řešení lze vždy složit z rovinných vln

$$\psi_k(x)=a(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k\cdot x]}=a(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k^\alpha x_\alpha]}=a(\omega,\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t]}\,. \tag{2.217}$$

Třírozměrné vektory jsou označeny tučně. Složky vlnového vektoru k^α musí být nutně závislé, neboť i parciální vlny (2.217) musí splňovat hledanou rovnici. Taková závislost se nazývá disperzní relace a můžeme ji zapsat v implicitním tvaru

$$\phi(\omega,\mathbf{k})=0\,. \tag{2.218}$$

V některých případech je možné nalézt explicitní závislost $\omega=\omega(\mathbf{k})$. Obecná vlnová funkce bude superpozicí

$$\psi(x)=\int a(k)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[k\cdot x]}\,\delta(\phi)\,\mathrm{d}^4k=\int a(\omega,\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega(\mathbf{k})t]}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,. \tag{2.219}$$

Diracova distribuce zajišťuje automatické splnění disperzní relace (2.218). Parciální (rovinné) vlny lze snadno derivovat:

$$\partial^\alpha\psi_k(x)=\mathrm{i}\,k^\alpha\psi_k(x) \tag{2.220}$$

a parciálním derivacím odpovídají algebraické výrazy

$$\partial^\alpha\quad\leftrightarrow\quad\mathrm{i}\,k^\alpha \tag{2.221}$$

S využitím duality (2.4) máme

$$\hbar\partial^\alpha\quad\leftrightarrow\quad\mathrm{i}\,p^\alpha\,. \tag{2.222}$$

Nejpřirozenějším přechodem od komutujícího k nekomutujícímu popisu je tedy zavedení operátorů na $\mathcal{L}^2$ předpisem

$$\begin{aligned}\hat{p}^\alpha&\equiv-\mathrm{i}\hbar\partial^\alpha\,;\\ \hat{x}^\alpha&\equiv x^\alpha\,.\end{aligned}\qquad . \tag{2.223}$$

Snadno dopočteme, že takto zavedené operátory splňují komutační relace, které jsou ve shodě s principem korespondence mezi Poissonovými závorkami a komutátory

$$\begin{aligned}\left[\hat{p}^{\alpha},\hat{p}^{\alpha}\right]&=\left[\hat{x}^{\alpha},\hat{x}^{\alpha}\right]=0\,,\\ \left[\hat{x}^{\alpha},\hat{p}^{\beta}\right]&=\mathrm{i}\,\hbar\,g^{\alpha\beta}\,.\end{aligned}\tag{2.224}$$

V (3+1) dimenzionálním formalizmu lze první ze vztahů (2.223) zapsat jako

$$\begin{aligned}\hat{E}&\equiv+\mathrm{i}\,\hbar\,\partial/\partial t\,,\\ \hat{\mathbf{p}}&\equiv-\mathrm{i}\,\hbar\,\partial/\partial\mathbf{x}\,.\end{aligned}\tag{2.225}$$

Odlišné znaménko u časové proměnné souvisí s relativistickými transformačními vlastnostmi čtyřvektorů. Druhou relaci jsme již používali v *x* reprezentaci operátoru hybnosti, viz (2.48). Najděme nyní velikost čtyřhybnosti

$$p^{\alpha}\equiv\begin{pmatrix}E/c\\ \mathbf{p}\end{pmatrix}\qquad\Rightarrow\qquad p_{\alpha}p^{\alpha}=-\frac{E^2}{c^2}+\mathbf{p}^2.\tag{2.226}$$

Tato hodnota musí být ve všech souřadnicových soustavách stejná a můžeme ji určit v klidové soustavě částice, kde je $E = m_0c^2$, $\mathbf{p} = 0$:

$$p_{\alpha}p^{\alpha}=-m_0^2c^2\,.\tag{2.227}$$

V (3+1) formalizmu jde o známou Pythagorovu větu pro energii

$$E^2=\mathbf{p}^2c^2+m_0^2c^4.$$

Tento vztah je správným relativistickým vztahem pro energii volné částice, a proto se o něho musí opírat odvození relativistické varianty Schrödingerovy rovnice. Přepišme proto (2.227) do operátorové podoby:

$$\left(\hat{p}_{\alpha}\hat{p}^{\alpha}+m_0^2c^2\right)\psi=0\,;\qquad\hat{p}^{\alpha}\equiv-\mathrm{i}\,\hbar\partial^{\alpha}\,.\tag{2.228}$$

Rovnice (2.228) je Kleinova-Gordonova rovnice pro volnou částici. Po dosazení za operátory získáme jiný často používaný tvar Kleinovy-Gordonovy rovnice

► $$\left(\Box-\kappa^2\right)\psi=0\,;\qquad\kappa\equiv\frac{m_0c}{\hbar}\,.\tag{2.229}$$

Kleinova-Gordonova rovnice je relativistickou analogií Schrödingerovy rovnice pro volnou částici. Při malých rychlostech limitně přechází v nerelativistickou Schrödingerovu rovnici. Jde o lineární rovnici a každé její „rozumné“ řešení je možné zapsat pomocí Fourierovy transformace jako superpozici rovinných vln. Konstanta κ je v *normální soustavě* jednotek ($c = 1$, $\hbar = 1$) rovna klidové hmotnosti částice.

Nerelativistická limita

Kleinovu Gordonovu rovnici (2.228) můžeme v operátorovém tvaru zapsat jako

$$\hat{E}^2=\hat{\mathbf{p}}^2c^2+m_0^2c^4\hat{\mathbf{1}}\,.\tag{2.230}$$

Obě strany formálně odmocníme. Odmocninu chápeme jako funkci operátoru ve smyslu (3.263) nebo (3.296):

$$\hat{E} = \pm\sqrt{\hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m_0^2 c^4 \hat{\mathbf{1}}} = m_0 c^2 \sqrt{\hat{\mathbf{1}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{m_0^2 c^2}} \approx$$

$$\approx m_0 c^2 \left(\hat{\mathbf{1}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0^2 c^2} + \cdots \right) \quad \Rightarrow$$

$$\hat{E} \approx m_0 c^2 \hat{\mathbf{1}} + \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_0} .$$

Záporné znaménko před odmocninou jsme zatím vynechali jako nefyzikální a budeme se jím zabývat až v kapitole věnované Diracově rovnici. První člen můžeme chápat jako konstantní/nulovou potenciální energii (posunutím o konstantu se potenciální energie nezmění) a druhý je běžná kinetická energie částice. Po dosazení za operátory z (2.225) získáme časovou Schrödingerovu rovnici (2.182) s nulovou, resp. konstantní potenciální energií. Pro malé rychlosti (hybnosti) Kleinova-Gordonova rovnice přechází ve Schrödingerovu rovnici.

Pravděpodobnostní interpretace

Hustota ρ a tok pravděpodobnosti **j** výskytu částice by měly splňovat rovnici kontinuity (zákon zachování pravděpodobnosti výskytu částice) ve tvaru

$$\partial_\alpha j^\alpha = 0 ; \qquad j^\alpha \equiv \begin{pmatrix} \rho c \\ \mathbf{j} \end{pmatrix} . \tag{2.231}$$

Ukažme, že takový zákon zachování je v Kleinově-Gordonově rovnici obsažen. Nalezněme kombinaci ψ^*(2.229)–ψ(2.229)*:

$$\psi^* \left(\Box - \kappa^2 \right) \psi \; - \; \psi \left(\Box - \kappa^2 \right) \psi^* = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\psi^* \Box \psi \; - \; \psi \Box \psi^* = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\psi^* \partial_\alpha \partial^\alpha \psi - \psi \partial_\alpha \partial^\alpha \psi^* = 0 .$$

Nyní v obou výrazech využijeme identitu $f\partial_\alpha g = \partial_\alpha(fg) - (\partial_\alpha f)g$:

$$\partial_\alpha \left(\psi^* \partial^\alpha \psi \right) - \left(\partial_\alpha \psi^* \right) \left(\partial^\alpha \psi \right) - \partial_\alpha \left(\psi \partial^\alpha \psi^* \right) + \left(\partial_\alpha \psi \right) \left(\partial^\alpha \psi^* \right) = 0 .$$

Pokud v posledním členu výrazu zvýšíme první index a snížíme druhý, vyruší se s druhým členem a dostaneme:

$$\partial_\alpha \left(\psi^* \partial^\alpha \psi \right) - \partial_\alpha \left(\psi \partial^\alpha \psi^* \right) = 0 \quad \Rightarrow$$

► $$\partial_\alpha j^\alpha = 0 ; \qquad j^\alpha \equiv \psi^* \partial^\alpha \psi - \psi \partial^\alpha \psi^* . \tag{2.232}$$

Čtyřvektor j^α reprezentuje nenormovanou pravděpodobnost výskytu částice. Hustota pravděpodobnosti j^0 (v SI j^0/c) není bohužel pozitivně definitní a Kleinova-Gordonova rovnice připouští i záporné hustoty pravděpodobnosti. Řešením tohoto problému (vyústí v existenci antičástic) se budeme zabývat v kapitole věnované Diracově rovnici.

Disperzní relace

Po dosazení rovinné vlny (2.217) do Kleinovy-Gordonovy rovnice získáme disperzní relaci

$$\omega^2 = c^2k^2 + c^2\kappa^2 \qquad \Rightarrow \qquad \omega = \pm\sqrt{c^2k^2 + c^2\kappa^2}\,. \tag{2.233}$$

Záporné řešení (odpovídá záporné energii $\hbar\omega$) budeme opět považovat za nefyzikální. Standardním postupem určíme fázovou a grupovou rychlost:

$$v_\mathrm{f} = \frac{\omega}{k} = c\sqrt{1+\frac{\kappa^2}{k^2}} = c\sqrt{1+\frac{\kappa^2\lambda^2}{4\pi^2}}\,,$$

$$v_\mathrm{g} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{c}{\sqrt{1+\dfrac{\kappa^2}{k^2}}} = \frac{c}{\sqrt{1+\dfrac{\kappa^2\lambda^2}{4\pi^2}}}\,.$$

Na první pohled je zřejmé, že grupová rychlost je vždy podsvětelná. Z Hamiltonových rovnic mechaniky

$$v_\mathrm{g} = \frac{\partial\omega}{\partial k} = \frac{\partial\hbar\omega}{\partial\hbar k} = \frac{\partial H}{\partial p} = \dot{x}$$

plyne, že grupová rychlost vlnového balíku je analogem mechanické rychlosti pohybující se částice. Oproti tomu fázová rychlost je vždy nadsvětelná a nemá význam přenosu informace. Mezi oběma rychlostmi je jednoduchý vztah $v_\mathrm{f}v_\mathrm{g} = c^2$. Obě rychlosti závisí na vlnové délce parciální vlny, tj. dochází k disperzi.

Kleinova-Gordonova rovnice pro nabitou částici v elektromagnetickém poli

V přítomnosti elektromagnetického pole se v Hamiltonově funkci (1.50) vyskytovala kanonická (zobecněná) hybnost v kombinaci $\mathbf{p} - Q\mathbf{A}$. Obdobně tomu musí být i v Kleinově-Gordonově rovnici (2.228), která má pro nabitou částici v elektromagnetickém poli tvar

$$\left[\left(\hat{p}_\alpha - QA_\alpha\right)\left(\hat{p}^\alpha - QA^\alpha\right) + m_0^2c_0^2\right]\psi = 0\,; \qquad \hat{p}^\alpha \equiv -\mathrm{i}\hbar\partial^\alpha\,. \tag{2.234}$$

Po dosazení za operátor hybnosti a roznásobení všech členů máme

$$-\hbar^2\Box\psi + Q^2A_\alpha A^\alpha\psi + m_0^2c^2\psi + \mathrm{i}\hbar Q\partial_\alpha A^\alpha\psi + 2\mathrm{i}\hbar QA^\alpha\partial_\alpha\psi = 0\,. \tag{2.235}$$

Využijeme-li kalibrační podmínku (1.256), tj. položíme-li $\partial_\alpha A^\alpha = 0$, získáme výslednou rovnici

► $$\left[\Box - \kappa^2 - \frac{Q^2}{\hbar^2}A_\alpha A^\alpha - 2\mathrm{i}\frac{Q}{\hbar}A^\alpha\partial_\alpha\right]\psi = 0\,; \qquad \kappa \equiv \frac{m_0c}{\hbar} \tag{2.236}$$

pro popis nabité částice v elektromagnetickém poli.

Vodíkový atom

Naznačme nyní, jak by se postupovalo při hledání spektra vodíkového atomu z Kleinovy-Gordonovy rovnice. Elektron s nábojem $Q = -e$ je v poli jádra, které lze vyjádřit vztahy (pro vodík je $Z = 1$, vztah platí i pro jiné atomy)

$$A^0 = \frac{\phi}{c} = +\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 rc}, \qquad \mathbf{A} = 0. \tag{2.237}$$

Kleinova-Gordonova rovnice získá tvar

$$\left[\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \kappa^2 + \left(\frac{e\phi}{\hbar c}\right)^2 + 2\mathrm{i}\frac{e\phi}{\hbar c}\frac{\partial}{c\partial t}\right]\psi(t,r,\theta,\varphi) = 0.$$

Laplaceův operátor rozložíme na radiální a úhlovou část stejně jako v nerelativistickém případě (2.153). Budeme hledat stacionární řešení, tj. časovou část vlnové funkce budeme předpokládat ve tvaru $\exp(-\mathrm{i}\omega t) = \exp(-\mathrm{i}Et/\hbar)$, prostorovou část zapíšeme jako součin radiální a úhlové části, kterou již známe z dřívějška, viz (2.162):

$$\left[\nabla_r^2 - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \kappa^2 + \frac{Z^2\alpha^2}{r^2} + 2\mathrm{i}\frac{Z\alpha}{r}\frac{\partial}{c\partial t}\right]\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0,$$

kde jsme označili

$$\alpha \equiv \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0\hbar c} \tag{2.238}$$

tzv. konstantu jemné struktury. Po provedení časových derivací získáme rovnici

$$\left[\nabla_r^2 - \frac{\hat{\mathbf{L}}^2}{\hbar^2 r^2} + \frac{E^2 - m_0^2c^4}{\hbar^2c^2} + \left(\frac{Z\alpha}{r}\right)^2 + 2\frac{Z\alpha}{r}\frac{E}{\hbar c}\right]R(r)Y_{lm}(\theta,\varphi) = 0.$$

Nyní zapůsobíme operátorem $\hat{\mathbf{L}}^2$ na úhlovou část vlnové funkce podle vztahu (2.148) a vyjádříme radiální část Laplaceova operátoru

$$\left[\frac{1}{r^2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}r^2\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l(l+1) - Z^2\alpha^2}{r^2} + 2\frac{Z\alpha}{r}\frac{E}{\hbar c} + \frac{E^2 - m_0^2c^4}{\hbar^2c^2}\right]R(r) = 0.$$

Jde o obyčejnou diferenciální rovnici, která se řeší standardními postupy (asymptotické chování, rozvoj do řady, oříznutí). Výsledkem jsou tzv. Laguerrovy polynomy a energetické spektrum

► $$E_{nl} = m_0c^2 - m_0c^2\left[\frac{Z^2\alpha^2}{2n^2} + \frac{Z^4\alpha^4}{(2l+1)n^4}\left(n - \frac{3}{8}(2l+1)\right) + \mathcal{O}\left((Z\alpha)^6\right)\right]. \tag{2.239}$$

Hlavní kvantové číslo je definováno stejně jako v nerelativistickém případě, druhý člen v hranaté závorce reprezentuje první relativistickou korekci a současně sejmutí degenerace spektrálních čar.

Problémy

Kleinova-Gordonova rovnice má tři základní problémy:

1. Druhé časové derivace znamenají zadání počáteční podmínky nejen na vlnovou funkci (reprezentuje stav systému), ale i na první časovou derivaci vlnové funkce, což je fyzikálně jen obtížně interpretovatelné.
2. Hustota pravděpodobnosti není pozitivně definitní.
3. Kleinova-Gordonova rovnice poskytuje i záporné energetické stavy.

2.7.4 Diracova rovnice

Správnou relativistickou kvantovou rovnici pro nabitou částici, ve které jsou obsaženy jen první derivace, odvodil Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984) v roce 1928. Ukázalo se, že jde o mnohem vhodnější rovnici pro elektron, než je Kleinova-Gordonova rovnice. Tím, že rovnice je jen v prvních derivacích, postačí zadat počáteční hodnotu vlnové funkce a automaticky odpadá nutnost zadávat první derivaci vlnové funkce. U Diracovy rovnice je hustota pravděpodobnosti pozitivně definitní a tak odpadá i druhý základní problém Kleinovy-Gordonovy rovnice. Problém záporných energetických stavů nicméně přetrvává a Dirac tyto stavy interpretoval jako stavy příslušející antičástici k elektronu – pozitronu. Ten byl objeven až v roce 1932 Carlem Andersonem.

Diracova rovnice

Hledejme rovnici, která má stejný tvar jako Schrödingerova rovnice, ale Hamiltonův operátor je lineární funkcí prostorových derivací:

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \hat{H}\psi\,; \\ \hat{H} &\equiv a^1\partial_1 + a^2\partial_2 + a^3\partial_3 + b\,. \end{aligned} \tag{2.240}$$

Z rozměrových důvodů budeme namísto koeficientů a^k a b hledat koeficienty α^k a β, které jsou bezrozměrné:

$$\hat{H} \equiv -\mathrm{i}\hbar c\left(\alpha^1\partial_1 + \alpha^2\partial_2 + \alpha^3\partial_3\right) + \beta m_0 c^2\,. \tag{2.241}$$

Na koeficienty máme dvě základní podmínky:

1. Kvadrát Hamiltonovy funkce musí dát pravou stranu (2.230), tj.

$$\hat{H}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2c^2 + m_0^2c^4\hat{\mathbf{1}}\,; \tag{2.242}$$

   tím bude každé řešení Diracovy rovnice řešením Kleinovy-Gordonovy rovnice (nikoli naopak, druhé derivace některá řešení přidají).
2. Nová rovnice musí být relativisticky kovariantní (tj. její tvar se nesmí změnit po provedení Lorentzovy transformace souřadnic a polí).

Za chvíli uvidíme, že tyto podmínky nesplňují žádné číselné koeficienty a hledaná čísla α^k a β musí být matice. Vyjděme z podmínky (2.242), do které dosadíme hamiltonián (2.241) a za operátor hybnosti z (2.225):

$$\hat{H}^2 = \hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m_0^2 c^4 \hat{\mathbf{1}};$$

$$\left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^k \partial_k + \beta m_0 c^2\right)\left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^l \partial_l + \beta m_0 c^2\right) = \hat{\mathbf{p}}^2 c^2 + m_0^2 c^4 \hat{\mathbf{1}};$$

$$-\hbar^2 c^2 \alpha^k \alpha^l \partial_k \partial_l - \mathrm{i}\hbar c m_0 c^2 \left(\alpha^k \beta + \beta \alpha^k\right)\partial_k + \beta^2 m_0^2 c^4 = -\hbar^2 c^2 \nabla^2 + m_0^2 c^4 \hat{\mathbf{1}}$$

Porovnáním členů na levé a pravé straně máme koeficienty:

$$\begin{aligned} \alpha^k \alpha^l \partial_k \partial_l &= \nabla^2 , \\ \alpha^k \beta + \beta \alpha^k &= 0 , \\ \beta^2 &= \hat{\mathbf{1}} . \end{aligned} \tag{2.243}$$

První relaci upravíme snadno na tvar

$$\begin{aligned} &\frac{1}{2}\left(\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k\right)\partial_k \partial_l = \nabla^2 \quad \Rightarrow \\ &\alpha^k \alpha^l + \alpha^l \alpha^k = \begin{cases} 0 & \text{pro } k \neq l , \\ 2 & \text{pro } k = l . \end{cases} \end{aligned} \tag{2.244}$$

Požadavky (2.243), resp. (2.244) nesplňují žádná reálná ani komplexní čísla. Budeme proto hledat soustavu čtyř matic, jejichž zajímavé vlastnosti nejprve přehledně sepíšeme a vzápětí dokážeme

1. Matice α^k a β antikomutují (každá s každou):

$$\left\{\alpha^k, \alpha^l\right\} = \left\{\alpha^k, \beta\right\} = 0 ; \quad k \neq l . \tag{2.245}$$

2. Kvadráty matic α^k a β dají jednotkovou matici:

$$\left(\alpha^1\right)^2 = \left(\alpha^2\right)^2 = \left(\alpha^3\right)^2 = \left(\beta\right)^2 = \hat{\mathbf{1}} . \tag{2.246}$$

3. Matice α^k a β jsou hermitovské:

$$\left(\alpha^k\right)^\dagger = \alpha^k , \qquad \beta^\dagger = \beta . \tag{2.247}$$

4. Vlastní čísla matic α^k a β mohou nabývat jen hodnot +1 a –1.

5. Stopa matic α^k a β je nulová.

6. Matice α^k a β jsou nezávislé.

Dokažme nyní jednotlivá tvrzení

Ad 1. Antikomutační relace matic α^k a β plynou okamžitě z relací (2.243) a (2.244). Poznamenejme, že antikomutátor dvou objektů je definován jako $\{A, B\} \equiv AB+BA$.

Ad 2. Tvrzení opět plyne okamžitě z relací (2.243) a (2.244). Je zřejmé, že druhé mocniny všech Diracových matic dají jednotkovou matici.

Ad 3. Hermitovost matic α^k a β plyne z požadavku na hermitovost operátoru energie (2.241). Diracovy matice jsou tedy hermitovské.

Ad 4. Z podmínky (2.246) plyne, že vlastní čísla matic α^k a β leží na jednotkové kružnici v komplexní rovině, tj. $|\lambda| = 1$. Hermitovské matice ale mají reálná vlastní čísla, tedy připadají v úvahu pouze hodnoty $\lambda = \pm 1$.

Ad 5. Stopou matice nazýváme součet diagonálních členů

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}) = A^k{}_k \,. \tag{2.248}$$

Tr je zkratkou z anglického *trace*. Stopa matice se nezmění při cyklické záměně matic:

$$\mathrm{Tr}(\mathbf{A}_1\mathbf{A}_2\cdots\mathbf{A}_N) = \mathrm{Tr}(\mathbf{A}_2\cdots\mathbf{A}_N\mathbf{A}_1)\,, \tag{2.249}$$

tj. první matici můžeme odstěhovat na poslední místo v součinu (nebo poslední na první). Nyní již snadno dokážeme, že stopa hledaných matic je nulová:

$$\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = \mathrm{Tr}\left(\beta^2\alpha^k\right) = \mathrm{Tr}\left(\beta\beta\alpha^k\right) =$$
$$\mathrm{Tr}\left(\beta\alpha^k\beta\right) = -\mathrm{Tr}\left(\beta\beta\alpha^k\right) = -\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right).$$

Nejprve jsme přidali β^2, což je ale jednotková matice. Poté jsme jednu matici β odstěhovali na konec za pomoci cyklické záměny a vrátili ji zpět na původní pozici s využitím antikomutativnosti matic α^k a β. Přečteme-li si začátek a konec, máme

$$\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = -\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) \quad\Rightarrow\quad 2\,\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = 0 \quad\Rightarrow$$
$$\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\right) = 0\,.$$

Obdobně můžeme postupovat u matice β:

$$\mathrm{Tr}\left(\beta\right) = \mathrm{Tr}\left((\alpha^k)^2\beta\right) = \mathrm{Tr}\left(\alpha^k\beta\alpha^k\right) = -\mathrm{Tr}\left(\alpha^k\alpha^k\beta\right) = -\mathrm{Tr}\left(\beta\right) \quad\Rightarrow$$
$$\mathrm{Tr}\left(\beta\right) = 0\,.$$

Ad 6. Předpokládejme závislost matic, tj. například matici β bude možné vyjádřit jako lineární kombinaci ostatních:

$$\beta = \sum c_k \alpha^k \,.$$

Vynásobme relaci zleva maticí β:

$$\mathbf{1} = \sum c_k \beta\alpha^k \quad\Rightarrow$$
$$\mathrm{Tr}(\mathbf{1}) = \sum c_k\,\mathrm{Tr}(\beta\alpha^k) = \frac{1}{2}\sum c_k\,\mathrm{Tr}(\beta\alpha^k + \alpha^k\beta) = \frac{1}{2}\sum c_k\,\mathrm{Tr}(0) = 0\,.$$

Jde o spor, neboť stopa jednotkové matice nalevo je nenulová. Matice tedy musí být nezávislé. Tím jsou všechna tvrzení (1 až 6) dokázána.

■

Stopa matic je invariantem, tj. ve všech bázích/souřadnicových soustavách je stejná. Pokud u hermitovské matice za bázi zvolíme její vlastní vektory, bude matice diagonální a na diagonále budou její vlastní čísla. Stopa matice je proto součtem vlastních čísel matice. V našem případě jsou vlastní čísla +1 nebo −1, stopa matice je nulová, a proto musí mít hledané matice sudou dimenzi (aby součet čísel +1 a −1 mohl dát nulu).

Řešení pro $N = 2$

V kapitole věnované momentu hybnosti jsme odvodili tzv. spinorovou reprezentaci momentu hybnosti (2.150). Matice spinu bez příslušných koeficientů se nazývají Pauliho matice:

► $$\sigma^1 = \begin{pmatrix} 0 & +1 \\ +1 & 0 \end{pmatrix}; \qquad \sigma^2 = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}; \qquad \sigma^3 = \begin{pmatrix} +1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \tag{2.250}$$

Pauliho matice mají námi hledané vlastnosti. Jsou hermitovské, antikomutují mezi sebou, jejich kvadráty jsou jednotkové matice, vlastní čísla jsou +1 a −1, součet členů na diagonále je nulový. Jejich jedinou nevýhodou je, že jsou jen tři. My hledáme soustavu čtyř nezávislých antikomutujících matic. Ve dvou dimenzích taková soustava ale neexistuje. Další nezávislou maticí k Pauliho maticím je jednotková matice, ale ta s nimi komutuje, nikoli antikomutuje. Navíc u ní není součet diagonálních členů nulový.

Řešení pro $N = 4$

Ve čtyřech dimenzích existuje celkem 16 nezávislých matic a skutečně z nich lze vybrat 4 antikomutující matice požadovaných vlastností. Jde o nejmenší počet dimenzí, ve kterých lze vyřešit Diracovu úlohu. Existuje více způsobů, jak vybrat hledanou soustavu antikomutujících matic. Dirac je blokově skládal z Pauliho matic a nalezl řešení

► $$\beta = \sigma^3 \otimes \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{-1} \end{pmatrix}; \qquad \alpha^k = \sigma^1 \otimes \sigma^k = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma^k \\ \sigma^k & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{2.251}$$

Každý prvek matice znamená blok 2×2. Výsledné Diracovy matice tedy jsou:

► $$\begin{aligned} \beta &= \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \alpha^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & +1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \\ \alpha^2 &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & +\mathrm{i} & 0 \\ 0 & -\mathrm{i} & 0 & 0 \\ +\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \alpha^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{2.252}$$

Ověřte si, že všechny matice jsou hermitovské, mají vlastní čísla +1 a −1, součet prvků na diagonále je 0, v kvadrátu dají jednotkovou matici a každá matice antikomutuje s každou. Diracova rovnice pro volnou částici má nyní jednoduchý tvar:

► $$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\mathrm{i}\hbar c \alpha^k \partial_k + m_0 c^2 \beta \right) \psi; \qquad \psi = \begin{pmatrix} \psi_1(t, \mathbf{x}) \\ \psi_2(t, \mathbf{x}) \\ \psi_3(t, \mathbf{x}) \\ \psi_4(t, \mathbf{x}) \end{pmatrix}. \tag{2.253}$$

Koeficienty rovnice jsou matice 4×4, vlnovou funkci proto tvoří čtveřice funkcí (nejde o čtyřvektor!). Jiná volba čtveřice Diracových matic by vedla na tatáž fyzikální řešení.

Operátor rychlosti, záporné energie

Určeme operátor rychlosti částice jako operátor časového vývoje polohy podle principu korespondence (2.179):

$$\hat{v}^k = \frac{\mathrm{d}x^k}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x^k, \hat{H}\right] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x^k, -\mathrm{i}\hbar c\alpha^l\partial_l + m_0c^2\beta\right] =$$
$$= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x^k, -\mathrm{i}\hbar c\alpha^l\partial_l\right] = \frac{c}{\mathrm{i}\hbar}\alpha^l\left[x^k, -\mathrm{i}\hbar\partial_l\right] = \frac{c}{\mathrm{i}\hbar}\alpha^l\left[x^k, p_l\right] =$$
$$= \frac{c}{\mathrm{i}\hbar}\alpha^l\,\mathrm{i}\hbar\delta^k{}_l = c\alpha^k\ .$$

Matice α^k tak mají (až na konstantu c) význam operátoru rychlosti:

$$\hat{v}^k = c\alpha^k\ . \tag{2.254}$$

Formálně lze zapsat všechny tři relace dohromady

$$\hat{\mathbf{v}} = c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\ . \tag{2.255}$$

Za pomoci operátorů rychlosti a hybnosti získá Diracova rovnice (2.253) jednoduchý tvar:

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(\hat{\mathbf{v}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + m_0c^2\beta\right)\psi\ ;$$
$$\hat{\mathbf{v}} \equiv c\hat{\boldsymbol{\alpha}}\ , \qquad \hat{\mathbf{p}} \equiv -\mathrm{i}\hbar\vec{\nabla}\ . \tag{2.256}$$

Řešme nyní Diracovu rovnici pro částici v klidu, tj. s nulovým operátorem rychlosti

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\begin{pmatrix}\psi_1\\ \psi_2\\ \psi_3\\ \psi_4\end{pmatrix} = m_0c^2\begin{pmatrix}+\psi_1\\ +\psi_2\\ -\psi_3\\ -\psi_4\end{pmatrix}.$$

Řešení je:

$$\psi_1(t,\mathbf{x}) = A_1(\mathbf{x})\exp\left[-\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right],$$
$$\psi_2(t,\mathbf{x}) = A_2(\mathbf{x})\exp\left[-\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right],$$
$$\psi_3(t,\mathbf{x}) = A_3(\mathbf{x})\exp\left[+\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right],$$
$$\psi_4(t,\mathbf{x}) = A_4(\mathbf{x})\exp\left[+\mathrm{i}\frac{m_0c^2}{\hbar}t\right].$$

Porovnáme-li řešení s časovou částí rovinné vlny $\exp[-\mathrm{i}\omega t] = \exp[-\mathrm{i}(E/\hbar)t]$, je zřejmé, že první dvě řešení odpovídají kladné energii $E = m_0c^2$ a druhá dvě záporné energii $E = -m_0c^2$. Problém záporných energetických stavů tak Diracova rovnice nevyřešila.

Ukázalo se, že Diracova rovnice popisuje chování částic se spinem 1/2 (například elektron). Čtveřice ψ se nazývá *bispinor*. Má speciální transformační vlastnosti. Horní dvě komponenty bispinoru popisují stavy *částice* s projekcí spinu +1/2 a −1/2 a mají kladnou energii. Dolní dvě komponenty mají zápornou energii a Dirac je interpretoval jako stavy *antičástice* s projekcí spinu +1/2 a −1/2. Diracova rovnice je v jistém smyslu „odmocněním" Kleinovy-Gordonovy rovnice postavené na vztahu $E^2 = p^2c^2 + m_0^2c^4$. Proto stavy se zápornou energií nejsou překvapením. Elegantní však bylo Diracovo vysvětlení: Všechny záporné stavy jsou zaplněny (Diracovo „moře elektronů" se zápornou energií, viz kapitola 2.7.5) se chová jako „díra", kterou Dirac interpretoval jako antičástici s kladnou energií. Tuto analýzu provedl Dirac v roce 1928 a teoreticky z ní předpověděl existenci pozitronu ještě před jeho experimentálním objevem v roce 1932 (Carl Anderson).

Pravděpodobnostní interpretace

Při odvození rovnice kontinuity pro pravděpodobnost budeme postupovat stejně jako u Kleinovy-Gordonovy rovnice, jen namísto komplexního sdružení budeme využívat hermitovské sdružení jednotlivých matic i základního bispinoru, který tvoří vlnovou funkci. Hermitovsky sdružený bispinor má tvar

$$\psi^\dagger = \begin{pmatrix} \psi_1^* & \psi_2^* & \psi_3^* & \psi_4^* \end{pmatrix}. \tag{2.257}$$

Nalezněme nyní kombinaci $\psi^\dagger$(2.253) – ψ (2.253)†:

$$\psi^\dagger \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = \psi^\dagger\left(-\mathrm{i}\hbar c\alpha^k\partial_k + m_0c^2\beta\right)\psi - \left(\mathrm{i}\hbar c\left(\alpha^k\partial_k\psi\right)^\dagger + m_0c^2\left(\beta\psi\right)^\dagger\right)\psi,$$

$$\psi^\dagger \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} + \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = -\mathrm{i}\hbar c\psi^\dagger\alpha^k\partial_k\psi + m_0c^2\psi^\dagger\beta\psi - \mathrm{i}\hbar c\left(\partial_k\psi^\dagger\right)\alpha^k\psi - m_0c^2\psi^\dagger\beta\psi,$$

$$\psi^\dagger\frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi^\dagger}{\partial t}\psi = -c\psi^\dagger\alpha^k\partial_k\psi - c\left(\partial_k\psi^\dagger\right)\alpha^k\psi,$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\left(\psi^\dagger\psi\right) = -\partial_k\left(\psi^\dagger c\alpha^k\psi\right),$$

$$\frac{\partial}{\partial ct}\left(c\psi^\dagger\psi\right) + \partial_k\left(\psi^\dagger c\alpha^k\psi\right) = 0.$$

Získali jsme tak rovnici kontinuity ve tvaru

► $$\partial_\mu j^\mu = 0; \qquad j^0 = c\psi^\dagger\psi, \qquad \vec{\mathbf{j}} = \psi^\dagger\,\hat{\vec{\mathbf{v}}}\,\psi, \qquad \hat{\vec{\mathbf{v}}} = c\hat{\vec{\boldsymbol{\alpha}}}. \tag{2.258}$$

Hustota pravděpodobnosti je dána vztahem

$$\rho_\mathrm{P} = j^0/c = \psi^\dagger\psi = \psi_1^*\psi_1 + \psi_2^*\psi_2 + \psi_3^*\psi_3 + \psi_4^*\psi_4 \geq 0 \tag{2.259}$$

a je tedy pozitivně definitní. Tok pravděpodobnosti je zobecněním vztahu pro klasický tok (hustota × rychlost), rychlost nahrazuje operátor rychlosti. Výsledný tok pravděpodobnosti je ale obyčejným vektorem, neboť každá z jeho komponent je součinem řádkové, čtvercové a sloupcové matice, tj. dá obyčejné číslo.

Diracova rovnice pro nabitou částici v elektromagnetickém poli

Zobecnění z volné částice na částici v poli provedeme stejně jako u Kleinovy-Gordonovy rovnice, tj. nahradíme

$$\hat{p}^{\alpha} \to \hat{p}^{\alpha} - QA^{\alpha} . \tag{2.260}$$

V (3+1) symbolice máme

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct} &\to \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial ct} - Q\frac{\phi}{c}; \\ -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} &\to -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} - Q\mathbf{A} . \end{aligned} \tag{2.261}$$

Diracova rovnice (2.256) získá nyní tvar

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} - Q\phi\psi = \left[\hat{\vec{\mathbf{v}}}\cdot\left(\hat{\mathbf{p}} - Q\mathbf{A}\right) + m_0c^2\beta\right]\psi ,$$

neboli

► $$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[\hat{\vec{\mathbf{v}}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + m_0c^2\beta\right]\psi + \left[Q\phi - Q\mathbf{A}\cdot\hat{\vec{\mathbf{v}}}\right]\psi . \tag{2.262}$$

Oproti volné částici přibyl napravo interakční hamiltonián podle vztahu

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} &= \hat{H}_0\psi + \hat{H}_{\mathrm{I}}\psi ; \\ \hat{H}_0 \equiv \hat{\vec{\mathbf{v}}}\cdot\hat{\mathbf{p}} + m_0c^2\beta , &\qquad \hat{H}_{\mathrm{I}} \equiv Q\phi - Q\mathbf{A}\cdot\hat{\vec{\mathbf{v}}} . \end{aligned} \tag{2.263}$$

I v tomto případě jde jen o přímé zobecnění interakčního členu známého z Lagrangeovy funkce v klasické mechanice.

Kovariantní tvar Diracovy rovnice

Přenásobme Diracovu rovnici (2.253) zleva maticí β a poté převeďme všechny členy na levou stranu rovnosti:

$$\mathrm{i}\hbar\beta\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left(-\mathrm{i}\hbar c\beta\alpha^k\partial_k + m_0c^2\right)\psi \quad \Rightarrow$$

$$\left(\mathrm{i}\hbar\beta\frac{\partial\psi}{\partial ct} + \mathrm{i}\hbar\beta\alpha^k\partial_k - m_0c\right)\psi = 0 .$$

Získali jsme tak nejznámější tvar Diracovy rovnice

$$\left(\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m_0c\right)\psi = 0 ;$$

► $$\begin{aligned} \gamma^0 &\equiv \beta , \\ \gamma^k &\equiv \beta\alpha^k , \end{aligned} \tag{2.264}$$

ve které jsou koeficienty derivací tzv. gama matice

$$\gamma^0 = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}; \quad \gamma^1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

► (2.265)

$$\gamma^2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -\mathrm{i} \\ 0 & 0 & \mathrm{i} & 0 \\ 0 & \mathrm{i} & 0 & 0 \\ -\mathrm{i} & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix};$$

Mezi původními maticemi a maticemi gama existují jednoduché vztahy:

$$\begin{aligned} \gamma^0 &= \beta\,, \\ \gamma^k &= \beta\alpha^k\,, \\ \alpha^k &= \beta\gamma^k\,. \end{aligned} \tag{2.266}$$

První dva definují Diracovy matice, třetí vztah plyne z druhého po vynásobení maticí β zleva. Pro prostorovou část obou sad matic tak platí jednoduché pravidlo: násobením maticí β zleva dostaneme odpovídající matici z druhé sady. Matice gama opět antikomutují, nejsou již ale hermitovské a kvadráty prostorových matic nedají jednotkovou matici, ale minus jednotkovou matici:

$$\left(\gamma^1\right)^2 = \gamma^1\gamma^1 = \beta\alpha^1\beta\alpha^1 = -\alpha^1\beta\beta\alpha^1 = -\alpha^1\alpha^1 = -\mathbf{1}\,.$$

Obdobně bychom postupovali u ostatních matic, platí tedy

$$\left(\gamma^k\right)^2 = -\mathbf{1}\,; \qquad k = 1,2,3\,. \tag{2.267}$$

Zaveďme nyní dvě užitečné a často používané operace. První z nich je tzv. Diracovo sdružení:

► $$\overline{\mathbf{A}} \equiv \mathbf{A}^\dagger\gamma^0\,. \tag{2.268}$$

Jde o hermitovské sdružení doplněné násobením maticí γ^0 zprava. Druhou operací je Feynmanovo zúžení (*Feynman slash*):

► $$\not{K} \equiv \gamma^\alpha K_\alpha\,. \tag{2.269}$$

Za pomoci těchto operací lze elegantně zapsat všechny složky čtyřtoku pravděpodobnosti (2.258)

$$\begin{aligned} j^0 &= c\psi^\dagger\psi = c\psi^\dagger\gamma^0\gamma^0\psi = c\,\overline{\psi}\gamma^0\psi\,, \\ j^k &= \psi^\dagger\, c\alpha^k\psi = \psi^\dagger\, c\gamma^0\gamma^k\psi = c\,\overline{\psi}\gamma^k\psi\,. \end{aligned}$$

Jednotně tedy můžeme psát

► $$\partial_\mu j^\mu = 0\,; \qquad j^\mu \equiv c\,\overline{\psi}\gamma^\mu\psi\,. \tag{2.270}$$

Diracovu rovnici (2.264) lze přepsat do „úsporného“ tvaru

$$\left(\gamma^{\mu}\hat{p}_{\mu}+m_0c\right)\psi=0\,,\quad\text{neboli}\tag{2.271}$$

$$\left(\hat{\not{p}}+m_0c\right)\psi=0\,.\tag{2.272}$$

Pro nabitou částici v elektromagnetickém poli bude mít Diracova rovnice nyní velmi jednoduchý tvar

► $$\left(\hat{\not{p}}-Q\not{\mathbb{A}}+m_0c\right)\psi=0\,.\tag{2.273}$$

Spin se stal automatickou součástí relativistických rovnic kvantové teorie. Rovnice Kleinova-Gordonova se nakonec ukázala vhodnou rovnicí pro skalární částice (se spinem 0), rovnice Diracova pro částice se spinem ½ (elektrony, neutrina, kvarky). Právě na ní je postavena dnešní kvantová elektrodynamika.

◖ **Příklad 2.5:**

$$\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}=\begin{cases}0\,; & \alpha\neq\beta\\ +2; & \alpha=\beta=0\\ -2; & \alpha=\beta=1,2,3\end{cases}\quad\Rightarrow\quad\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}=-2g^{\alpha\beta}.\tag{2.274}$$

Kvadrát matic α a β je roven jednotkové matici. U matic γ tomu tak není, $(\gamma^0)^2 = 1$, ale $(\gamma^k)^2 = -1$ pro $k = 1, 2, 3$. Je to přirozené, v Minkowského metrice se prostorová část chová vždy jinak než časová část. Ve vtahu (2.274) je výsledek na pravé straně vždy násoben jednotkovou maticí, tu ale nebývá zvykem psát.

◗

◖ **Příklad 2.6:**

$$\not{K}\not{K}\equiv\gamma^{\alpha}K_{\alpha}\gamma^{\beta}K_{\beta}=\gamma^{\alpha}\gamma^{\beta}K_{\alpha}K_{\beta}=$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}K_{\alpha}K_{\beta}=-g^{\alpha\beta}K_{\alpha}K_{\beta}=K_0^2-\mathbf{K}^2.$$

◗

◖ **Příklad 2.7:**

$$\not{\partial}\not{\partial}\equiv\gamma^{\alpha}\partial_{\alpha}\gamma^{\beta}\partial_{\beta}=\gamma^{\alpha}\gamma^{\beta}\partial_{\alpha}\partial_{\beta}=$$

$$=\frac{1}{2}\left\{\gamma^{\alpha},\gamma^{\beta}\right\}\partial_{\alpha}\partial_{\beta}=-g^{\alpha\beta}\partial_{\alpha}\partial_{\beta}=-\Box.$$

◗

◖ **Příklad 2.8:**

$$\not{p}\equiv\gamma^{\alpha}p_{\alpha}=\gamma^0p_0+\gamma^kp_k=\begin{pmatrix}\mathbf{1}&\mathbf{0}\\ \mathbf{0}&-\mathbf{1}\end{pmatrix}\frac{E}{c}+\begin{pmatrix}\mathbf{0}&\sigma^k\\ -\sigma^k&\mathbf{0}\end{pmatrix}p_k=\begin{pmatrix}(E/c)\mathbf{1}&p_k\sigma^k\\ -p_k\sigma^k&-(E/c)\mathbf{1}\end{pmatrix}.$$

◗

◖ Příklad 2.9:

Dokažme, že platí relace (užitečná při výpočtu sdružených matic $\gamma^{\mu\dagger}$)

$$\gamma^{\mu\,\dagger} = \gamma^0 \gamma^\mu \gamma^0 . \tag{2.275}$$

Relaci (2.275) zleva a zprava vynásobíme γ^0 a dokážeme platnost vztahu $\gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^\mu$: Sdruženou matici $\gamma^{\mu\dagger}$ rozepíšeme z (2.266) za pomoci sady hermitovských matic α a β:

$$\gamma^0 \gamma^{0\,\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \beta\, \gamma^0 = \gamma^0 \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0 \; ;$$

$$\gamma^0 \gamma^{k\,\dagger} \gamma^0 = \gamma^0 \left(\gamma^0 \alpha^k \right)^\dagger \gamma^0 = \gamma^0 \alpha^k \gamma^0 \gamma^0 = \gamma^0 \alpha^k = \gamma^k .$$

◗

Matice C

Existuje řada dalších zajímavých matic, které lze odvodit ze základní sady matic γ^μ. Zaveďme nejprve **C** matici, která bude užitečná při nábojovém sdružení (přechodu od částic k antičásticím a také při výpočtu transponovaných matic $\gamma^{\mu\mathrm{T}}$:

$$\mathbf{C} \equiv \mathrm{i}\,\gamma^2 \gamma^0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ +1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \tag{2.276}$$

Matice má prvky jen na vedlejší diagonále, a to střídající se hodnoty +1 a –1. Stopa matice je nulová. Na první pohled je zřejmé, že pro **C** platí zajímavá vlastnost:

$$\mathbf{C}^{\mathrm{T}} = \mathbf{C}^\dagger = \mathbf{C}^{-1} = -\mathbf{C} . \tag{2.277}$$

Chceme-li tedy najít inverzní matici, transponovanou či hermitovsky sdruženou, stačí jen změnit znaménko matice (vyměnit pořadí +1 a −1 na vedlejší diagonále). Pokud potřebujeme nalézt transponovanou matici $\gamma^{\mu\mathrm{T}}$, lze k tomu využít matice **C**:

$$\gamma^{\mu\,\mathrm{T}} = \mathbf{C}\gamma^\mu\mathbf{C} ; \qquad \text{resp.} \qquad \gamma^{\mu\,\mathrm{T}} = -\mathbf{C}^{-1}\gamma^\mu\mathbf{C} . \tag{2.278}$$

Tvrzení se dokáže pouhým převedením matic γ^μ na sadu matic α a β, které se po transpozici nezmění.

Matice γ^5

Další důležitou maticí, která má využití při popisu levopravé symetrie, je matice

$$\gamma^5 \equiv \mathrm{i}\,\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \tag{2.279}$$

Tato matice je hermitovská, její kvadrát je roven jednotkové matici, je lineárně nezávislá na ostatních γ maticích a antikomutuje s nimi:

$$\gamma^{5\dagger} = \gamma^5 ,$$
$$\left(\gamma^5\right)^2 = \mathbf{1} , \tag{2.280}$$
$$\left\{\gamma^5, \gamma^\mu\right\} = 0 ; \quad \mu = 0,1,2,3 .$$

Matice Σ a báze Γ^k

Z matic γ^μ můžeme zkonstruovat ještě matice Σ, které jsou užitečné při definici báze na prostoru matic a při hledání transformačních vlastností antisymetrických tenzorů. Matice definujeme jako komutátory

$$\Sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}\left[\gamma^\mu, \gamma^\nu\right]. \tag{2.281}$$

Zřejmě platí

$$\Sigma^{\alpha\beta} = \begin{cases} 0 ; & \alpha = \beta , \\ -\Sigma^{\beta\alpha} ; & \alpha \neq \beta . \end{cases} \tag{2.282}$$

Je zjevné, že existuje celkem šest nezávislých matic $\Sigma^{\alpha\beta}$, například Σ^{01}, Σ^{02}, Σ^{03}, Σ^{12}, Σ^{13}, Σ^{23}. Ostatní prvky jsou buď nulové, nebo je lze dopočíst z antisymetrie. Zajímavou bází na prostoru matic 4×4 je následujících 16 matic:

$$\Gamma^k = \left\{\mathbf{1}, \gamma^5, \gamma^\mu, \gamma^5\gamma^\mu, \Sigma^{\mu\nu}\right\}. \tag{2.283}$$

Celkem snadno lze ukázat, že matice Γ^k jsou nezávislé. Protože jich je 16, tvoří bázi na prostoru matic 4×4. Jejich kvadrát je +1 nebo –1, vhodným vynásobením ±i by bylo možné docílit, aby kvadrát byl vždy roven jednotkové matici, je to však zbytečné. Stopa všech, s výjimkou jednotkové matice Γ^1, je nulová. Násobek libovolných dvou různých matic Γ^k je až na znaménko roven některé další matici Γ:

$$\begin{aligned} &1) \quad \Gamma^k \text{ jsou lineárně nezávislé,} \\ &2) \quad \left(\Gamma^k\right)^2 = \pm 1, \\ &3) \quad \mathrm{Tr}(\Gamma^k) = \begin{cases} 4 & k = 1; \\ 0 & k \neq 1, \end{cases} \\ &4) \quad \forall k,l;\ k \neq l\ \ \exists m \neq k,l: \qquad \Gamma^k\Gamma^l = \pm\Gamma^m . \end{aligned} \tag{2.284}$$

Z rovnice kontinuity (2.270) je zřejmé, že veličina $\bar\psi\gamma^\mu\psi$ je čtyřvektor. Obdobně lze pomocí členů báze Γ^k zkonstruovat i další charakteristicky se transformující veličiny:

$\bar\psi\psi$	skalár,
$\bar\psi\gamma^5\psi$	pseudoskalár,
$\bar\psi\gamma^\mu\psi$	vektor,
$\bar\psi\gamma^5\gamma^\mu\psi$	pseudovektor,
$\bar\psi\Sigma^{\mu\nu}\psi$	antisymetrický tenzor.

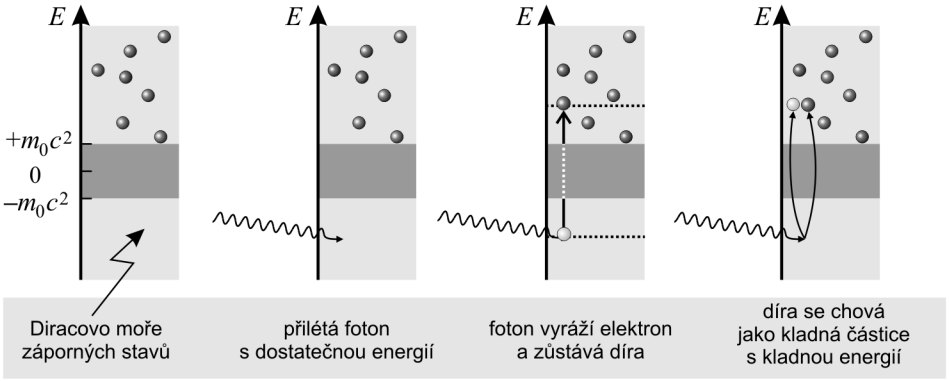
(2.285)

2.7.5 Pozitron, C symetrie

Nejprve popíšeme úvahy, které vedly Paula Diraca k předpovědi existence pozitronu, a poté matematickou transformaci (nábojové sdružení), která převede Diracovu rovnici pro elektron na rovnici pro pozitron. Dirac předpověděl existenci pozitronu v roce 1928, objeven byl Carlem Andersonem v kosmickém záření v roce 1932.

Diracovo moře

Jak jsme viděli, z Diracovy rovnice vycházejí záporné energetické stavy. Záporné energie se ale v přírodě nevyskytují a tak Diraca napadlo, že tyto stavy jsou všechny zaplněny elektrony a žádný z nich není volný, proto je nepozorujeme. Vakuum je podle této představy tvořeno mořem elektronů v záporných energetických stavech, tzv. Diracovým mořem.



Obr. 2.42: Diracovo moře

Představme si, že do tohoto moře vletí foton s energií větší než je dvojnásobek klidové energie elektronu.

$$E_\gamma > 2m_0c^2.$$

Potom může z Diracova moře vytrhnout elektron a převést ho do některého energetického stavu s kladnou energií. V záporném Diracově moři zůstane díra – prázdný energetický stav, který se vůči okolí jeví jako kladně nabitá oblast s kladnou energií (hmotností). Dirac tuto díru v roce 1928 interpretoval jako kladně nabitou částici, která má jinak shodné vlastnosti s elektronem, a nazval ji pozitron. Navenek se tedy zdá, jakoby se původní foton rozpadl na elektron-pozitronový pár. V roce 1929 Dirac tento koncept rozšířil na všechny částice a zavedl pojem antičástice – objektu, který má opačné hodnoty všech kvantových nábojů oproti původní částici. Bylo to v době, kdy ještě nebyl objeven ani neutron.

Pohyb volného elektronu by měl být Diracovým mořem ovlivněn. Elektron interaguje s blízkými elektrony v záporných stavech, odtlačuje je od sebe a z dálky vypadá, jako by měl menší náboj, než skutečně má. Z větší vzdálenosti proto nevidíme skutečný náboj elektronu, ale náboj odstíněný Diracovým mořem. Čím více se přibližujeme k letícímu elektronu, tím více vnímáme jeho skutečný, holý náboj.

Nábojové sdružení

Diracova rovnice pro elektron ve vnějším poli má tvar (2.273)

$$\left(\hat{p} - Q\,\mathbb{A} + m_0 c\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(-i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - Q\,\gamma^\mu A_\mu + m_0 c\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu + Q\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - e\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi = 0\,. \tag{2.286}$$

Rovnice pro pozitron by měla mít tvar

$$\left(i\hbar\gamma^\mu \partial_\mu + e\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi_{\mathrm{C}} = 0\,, \tag{2.287}$$

kde ψ_{C} je vlnová funkce pozitronového řešení. Diracovu rovnici nejprve hermitovsky sdružíme a poté ji transponujeme. Po těchto dvou operacích přejde rovnice pro elektron v rovnici pro pozitron. Operace hermitovského sdružení a transpozice splňují vlastnost (3.267), viz kapitola 3.4.2:

$$\left(\mathbf{AB}\right)^\dagger = \mathbf{B}^\dagger \mathbf{A}^\dagger\,; \qquad \left(\mathbf{AB}\right)^{\mathrm{T}} = \mathbf{B}^{\mathrm{T}} \mathbf{A}^{\mathrm{T}}. \tag{2.288}$$

Proveďme tedy Hermitovo sdružení Diracovy rovnice pro elektron (2.286):

$$\psi^\dagger \left(i\hbar\gamma^\mu \underset{\leftarrow}{\partial_\mu} - e\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c \right)^\dagger = 0\,.$$

Derivace nyní působí samozřejmě vlevo, tj. na vlnovou funkci (v zápise je to naznačeno šipkou pod derivací). Hermitovo sdružení nyní aplikujme na jednotlivé členy v závorce

$$\psi^\dagger \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^{\mu\dagger} - e\,A_\mu \gamma^{\mu\dagger} - m_0 c \right) = 0$$

a sdružené matice gama vyjádříme ze vztahu (2.275)

$$\psi^\dagger \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - e\,A_\mu \gamma^0\gamma^\mu\gamma^0 - m_0 c \right) = 0\,.$$

Rovnici vynásobíme zprava maticí γ^0:

$$\psi^\dagger \gamma^0 \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^\mu - e\,A_\mu \gamma^\mu - m_0 c \right) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\bar{\psi} \left(-\mathrm{i}\,\hbar \underset{\leftarrow}{\partial_\mu}\, \gamma^\mu - e\,A_\mu \gamma^\mu - m_0 c \right) = 0\,.$$

Po operaci hermitovského sdružení se změnilo znaménko prvého členu, vlnová funkce je nalevo a má tvar diracovsky sdruženého bispinoru. Nyní vrátíme vlnovou funkci doprava za pomoci operace transpozice

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\partial_\mu\gamma^\mu - e A_\mu\gamma^\mu - m_0 c\right)^{\mathrm{T}} (\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0\,.$$

Provedeme transpozice všech členů v závorce

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\gamma^{\mu\mathrm{T}}\partial_\mu - e\gamma^{\mu\mathrm{T}} A_\mu - m_0 c\right)(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0$$

a transponované matice gama vyjádříme ze vztahu (2.278)

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\mathbf{C}\gamma^\mu\mathbf{C}\partial_\mu - e\mathbf{C}\gamma^\mu\mathbf{C}A_\mu - m_0 c\mathbf{1}\right)(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0\,.$$

Celou rovnici vynásobíme maticí $\mathbf{C}^{-1}$ zleva

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\mathbf{C}\partial_\mu - e\gamma^\mu\mathbf{C}A_\mu - m_0 c\mathbf{C}^{-1}\right)(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0$$

a využijeme relace (2.277) pro inverzní matici $\mathbf{C}^{-1} = -\mathbf{C}$:

$$\left(-\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - e\gamma^\mu A_\mu + m_0 c\right)\mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}} = 0\,.$$

Transpozice tedy změnila znaménko posledního členu rovnice a výsledek je

$$\begin{gathered}\left(\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + e\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi_{\mathrm{C}} = 0\,;\\ \psi_{\mathrm{C}} \equiv \mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}}\,.\end{gathered} \tag{2.289}$$

Získali jsme hledanou rovnici pro pozitron, který má opačný náboj a nezměněnou hmotnost. Pokud známe v dané situaci řešení ψ pro elektron, bude ve stejné situaci odpovídajícím řešením pro pozitron vlnová funkce $\psi_{\mathrm{C}} = \mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}}$.

Řešení pro pozitron tedy není novým řešením, je obsaženo v řešení pro elektron. Provedeme-li nábojové sdružení neboli C transformaci

$$\begin{gathered}A_\mu \to -A_\mu\,;\\ \psi \to \mathbf{C}(\bar{\psi})^{\mathrm{T}}\,,\end{gathered} \tag{2.290}$$

Diracova rovnice nezmění svůj tvar (takovou vlastnost nazýváme kovariancí). V původní Diracově rovnici odpovídají dvě řešení s kladnou energií elektronu s projekcí spinu +½ a −½ (proto je řešení zdvojené) a řešení se zápornou energií pozitronu s projekcí spinu +½ a −½. Dvě dvojice spojené do čtveřice vlnových funkcí se nazývají *bispinor*, viz str. 210. Po provedení transformace (2.290) mají pozitronová řešení naopak kladnou energii a elektronová zápornou, takže se na situaci můžeme dívat obráceně a elektron interpretovat jako díru v moři pozitronů obsazujících záporné energetické stavy.

2.7.6 Elektron a jeho pole, U(1) symetrie

Nabité částice v přírodě generují elektromagnetická pole popsaná Maxwellovými rovnicemi (resp. kvantovou teorií elektromagnetického pole) a samy se v těchto polích pohybují ve shodě s Lorentzovou pohybovou rovnicí (resp. Diracovou rovnicí). V této kapitole se nejprve zaměříme na kompletní Lagrangeův popis soustavy pole + elektron a poté se budeme věnovat U(1) symetrii, ze které přímo plyne nutnost existence pole v okolí elektronu.

Lagrangeův popis

Celková hustota Lagrangeovy funkce pro interakci nabité částice a elektromagnetického pole má tvar

$$\mathscr{L} = \mathscr{L}_{\text{field}} + \mathscr{L}_{\text{int}} + \mathscr{L}_{\text{part}} . \tag{2.291}$$

Polní část známe z teoretické mechaniky, viz vztah (1.261)

$$\mathscr{L}_{\text{field}} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} ; \qquad F^{\mu\nu} \equiv \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu . \tag{2.292}$$

Také interakční část jsme poznali v teoretické mechanice. Pokud jsou částice popsány čtyřtokem j^μ a pole čtyřpotenciálem A^μ, je nejjednodušším skalárem kombinace $j^\mu A_\mu$:

$$\mathscr{L}_{\text{int}} = j^\mu A_\mu . \tag{2.293}$$

V klasické fyzice je tok náboje částic dán výrazem $j^\mu = (\rho_Q c, \mathbf{j})$, v kvantové teorii musí tok částic sledovat pravděpodobnost jejich výskytu a tak musí být úměrný toku pravděpodobnosti (2.270). V případě náboje bude koeficientem úměrnosti samotný náboj:

$$j^\mu = Q\, \bar{\psi} \gamma^\mu \psi . \tag{2.294}$$

Interakční člen tak získá tvar:

$$\mathscr{L}_{\text{int}} = j^\mu A_\mu = Q\, \bar{\psi} \gamma^\mu \psi A_\mu . \tag{2.295}$$

Zbývá nám tedy najít hustotu Lagrangeovy funkce pro samotné částice (elektrony), ze které plyne Diracova rovnice. Velmi jednoduchým skalárem sestaveným přímo za pomoci Diracovy rovnice je výraz

$$\mathscr{L}_{\text{part}} = \bar{\psi} \left(\mathrm{i}\hbar \gamma^\mu \partial_\mu - m_0 c \right) \psi . \tag{2.296}$$

Pokud budeme interpretovat pole $\bar{\psi}, \psi$ jako nezávislá, je hustota Lagrangeovy funkce

$$\mathscr{L}_{\text{part}} = \mathscr{L}_{\text{part}} (\psi, \partial_\alpha \psi, \bar{\psi})$$

a příslušné Lagrangeovy rovnice dají

$$\partial_\alpha \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial(\partial_\alpha \bar{\psi})} - \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial \bar{\psi}} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \left(\mathrm{i}\hbar \gamma^\mu \underset{\rightarrow}{\partial_\mu} - m_0 c \right) \psi = 0 ;$$

$$\partial_\alpha \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial(\partial_\alpha \psi)} - \frac{\partial \mathscr{L}_{\text{part}}}{\partial \psi} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad \bar{\psi} \left(\mathrm{i}\hbar \gamma^\mu \underset{\leftarrow}{\partial_\mu} + m_0 c \right) = 0 .$$

První rovnice je Diracova rovnice pro nabitou částici, druhá rovnice je v tuto chvíli jen pomocnou rovnicí pro diracovsky sdružené pole. Povšimněte si, že hmotový člen změnil znaménko. U Feynmanových diagramů to odpovídá přítoku hmoty (či odtoku hmoty) do (z) daného vrcholu. U derivací je v obou případech naznačen směr jejich působení. Nyní již můžeme zapsat kompletní hustotu Lagrangeovy funkce pro částici a elektromagnetické pole:

$$\mathscr{L} = -\frac{1}{4\mu_0} F_{\mu\nu} F^{\mu\nu} \; + \; j^\mu A_\mu \; + \; \bar{\psi}\left(\mathrm{i}\hbar\gamma^\mu \partial_\mu - m_0 c\right)\psi \; ;$$

► $$F^{\mu\nu} \equiv \partial^\mu A^\nu - \partial^\nu A^\mu \; ; \qquad (2.297)$$

$$j^\mu \equiv Q\,\bar{\psi}\gamma^\mu\psi \; .$$

Poznámka 1: První člen odpovídá volnému poli, druhý interakci pole s částicí a třetí volné částici.

Poznámka 2: Lagrangeova funkce je funkcí polí $A_\mu, \psi, \bar{\psi}$ a jejich derivací. Lagrangeovy rovnice pro pole A_μ dají Maxwellovy rovnice, Lagrangeovy rovnice pro pole $\bar{\psi}$ dají Diracovu rovnici.

Poznámka 3: Pokud ponecháme jen první člen, získáme z hustoty Lagrangeovy funkce Maxwellovy rovnice ve vakuu. Pokud ponecháme jen poslední člen, dostaneme Diracovu rovnici volné částice. První a druhý člen dají Maxwellovy rovnice se zdrojovými členy (pole interaguje s částicemi), druhý a třetí člen dají Diracovu rovnici pro částici v přítomnosti elektromagnetického pole (částice interaguje s polem).

Poznámka 4: Interakční člen (druhý) spolu s částicovým členem (třetím) lze sloučit do podoby, která vede na Diracovu rovnici s elektromagnetickým polem:

$$\mathscr{L}_{\mathrm{Dir}} = \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + Q\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi \qquad (2.298)$$

U(1) symetrie

Hustota Lagrangeovy funkce Diracovy rovnice a čtyřtok reprezentující tok náboje

► $$\mathscr{L}_{\mathrm{Dir}} = \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu + Q\,\gamma^\mu A_\mu - m_0 c\right)\psi \; ;$$

$$j^\mu = Q\bar{\psi}\gamma^\mu\psi$$

se nezmění při transformaci

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi' = \psi\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} \; , \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha} \; , \\ A^\mu &\rightarrow A'^\mu = A^\mu \; . \end{aligned} \qquad (2.299)$$

Touto transformací není změněn ani tenzor pole $F^{\mu\nu}$, a tím ani hustota Lagrangeovy funkce $\mathscr{L}_{\mathrm{field}}$ elektromagnetického pole. Celá teorie reprezentovaná lagranžiánem (2.297) je kovariantní vzhledem k transformaci (2.299). Transformace představuje otočení vlnové funkce v každém bodě časoprostoru o stejný úhel α. Jde o unitární operaci (nemění skalární součin) s jedním parametrem (úhlem α), proto se tato transformace označuje U(1). Představuje tzv. *vnitřní symetrii* teoretického popisu interakce pole-částice. Důsledkem této symetrie je existence elektrického náboje, který se zachovává. U(1) symetrie v jiných teoriích (lagranžiánech) vede na existenci obdobných kvantových nábojů, jako je elektrický, které se v daných procesech zachovávají.

$U(1)_{loc}$ symetrie

Prozkoumejme nyní, jak by se změnil lagranžián volné částice, pokud bychom připustili, aby úhel α potočení vlnové funkce byl v každém bodě časoprostoru jiný. Představte si nekonečnou prostorovou mříž, v jejíchž bodech budou stejné míčky. U(1) symetrie v našem modelu odpovídá tomu, že otočíme všechny míčky kolem jejich středu naráz o stejný úhel. Po této transformaci bude mříž vypadat stejně jako před ní. Nyní si představme, že budeme otáčet v různých časech různé míčky o různé úhly. Výsledek? Prostorová mříž bude vypadat stále stejně jako před začátkem otáčení. A právě takovou symetrii nazýváme $U(1)_{loc}$ symetrií:

►
$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi'(x) = \psi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}'(x) = \bar{\psi}(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\,. \end{aligned}$$

Proměnná x symbolizuje celou událost $x = (t, \mathbf{x})$, tedy čtyřvektor. Tato transformace opět nezmění čtyřtok (2.294). Jak se ale změní Lagrangeova funkce volné částice? Dosaďme čárkované veličiny do Lagrangeovy funkce (2.296) a proveďme derivace vlnové a exponenciální funkce:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}'_{\mathrm{part}} &= \bar{\psi}'\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m_0 c\right)\psi' = \bar{\psi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - m_0 c\right)\psi\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)} = \\ &= \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} - \hbar\gamma^{\mu}\alpha_{,\mu} - m_0 c\right)\psi \neq \mathscr{L}_{\mathrm{part}}\,. \end{aligned}$$

Hustota Lagrangeovy funkce po transformaci změnila svůj tvar. Přibyl člen $\hbar\gamma^{\mu}\alpha_{,\mu}$ s derivacemi úhlu pootočení, který kopíruje polní člen v hustotě Lagrangeovy funkce nabité částice v přítomnosti pole (2.298). Výsledek je velmi zajímavý. Pokud bychom trvali na tom, aby hustota Lagrangeovy funkce pro volnou částici splňovala symetrii $U(1)_{loc}$, musíme do teorie přidat elektromagnetické pole. Požadavek, aby byla Diracova rovnice kovariantní vzhledem k $U(1)_{loc}$ symetrii, vede na požadavek existence elektromagnetického pole v okolí částice! Samo elektromagnetické pole se při transformaci změní tak, aby kompenzovalo nově vzniklý člen $\hbar\gamma^{\mu}\alpha_{,\mu}$. Uvažujme tedy transformaci

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi' = \psi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ A^{\mu} &\rightarrow A'^{\mu} = A^{\mu}(x) + \delta A^{\mu}(x) \end{aligned}$$

a opět provedeme výpočet čárkovaného lagranžiánu, tentokráte s elektromagnetickým polem:

$$\begin{aligned} \mathscr{L}'_{\mathrm{part}} &= \bar{\psi}'\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + Q\gamma^{\mu}A'_{\mu} - m_0 c\right)\psi' = \\ &= \bar{\psi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + Q\gamma^{\mu}(A_{\mu} + \delta A_{\mu}) - m_0 c\right)\psi\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)} = \\ &= \bar{\psi}\left(i\hbar\gamma^{\mu}\partial_{\mu} + Q\gamma^{\mu}A_{\mu} + \gamma^{\mu}(-\hbar\alpha_{,\mu} + Q\,\delta A_{\mu}) - m_0 c\right)\psi\,. \end{aligned}$$

Hustota Lagrangeovy funkce se nezmění, pokud bude vnitřní kulatá závorka nulová, tj.

$$\delta A_{\mu} = \frac{\hbar}{Q}\alpha_{,\mu}\,.$$

Tím jsme získali návod pro správnou transformaci elektromagnetického pole. Celková transformace $U(1)_{loc}$ bude tedy mít tvar:

$$\begin{aligned} \psi &\rightarrow \psi' = \psi(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ \bar{\psi} &\rightarrow \bar{\psi}' = \bar{\psi}(x)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha(x)}\,, \\ A^{\mu} &\rightarrow A'^{\mu} = A^{\mu}(x) + \frac{\hbar}{Q}\partial^{\mu}\alpha\,. \end{aligned} \tag{2.300}$$

Jak jsme ukázali, nezmění se při této transformaci součet $\mathscr{L}_{int} + \mathscr{L}_{Dir}$. Snadno ověříme, že transformace $U(1)_{loc}$ nemá vliv ani na tenzor elektromagnetického pole a tím na polní část lagranžiánu $\mathscr{L}_{field}$. Tok pravděpodobnosti (2.270) transformace také neovlivní. Celá teorie je tak kovariantní vzhledem k $U(1)_{loc}$ transformaci. O kvantové teorii elektromagnetického pole se proto většinou hovoří jako o $U(1)_{loc}$ teorii. Symetrie $U(1)_{loc}$ zajišťuje provázanost nabité částice (elektronu) a elektromagnetického pole.

Pokud budeme aplikovat Kleinovu-Gordonovu, resp. Diracovu rovnici na soustavu částic, zjistíme, že statistické chování více částic je u každé z rovnic odlišné. Kleinova-Gordonova rovnice je vhodnou rovnicí pro částice se spinem 0, které nesplňují Pauliho vylučovací princip. Diracova rovnice je naopak vhodná pro částice se spinem ½, které Pauliho vylučovací princip splňují. Chováním soustavy stejných částic v kvantové teorii se budeme zabývat v následující kapitole.



2.8 Soustava stejných částic

Stejnými částicemi nazýváme dvě částice se shodnými parametry (hmotou, nábojem, spinem,…). Z hlediska teoretické mechaniky je trajektorie těchto částic dána Hamiltonovými rovnicemi a známe-li počáteční polohy a rychlosti částic, lze přesně predikovat budoucí polohy částic a v každém okamžiku říci, která částice je která.

V kvantové teorii můžeme předpovědět jen pravděpodobnost výskytu částice v nějakém místě a čase. Tato pravděpodobnost má maximum v místě klasické trajektorie, se vzdáleností od ní zpravidla exponenciálně ubývá a dosti daleko od klasické trajektorie je sice velmi malá, nikoli však nulová. Máme-li dvě stejné částice, nikdy si nemůžeme být jisti, která částice je která. Pravděpodobnost výskytu jedné částice v místě druhé je nenulová. Hovoříme o tom, že stejné částice jsou v kvantové teorii *nerozlišitelné*. Hamiltonův operátor se při záměně dvou stejných částic nezmění:

$$\hat{\mathbf{H}}_{12} = \hat{\mathbf{H}}_{21} . \tag{2.301}$$

2.8.1 Operátor výměny dvou částic

Pro jednoduchost budeme uvažovat jen dvě částice, u kterých sledujeme dynamickou proměnnou A (nejlépe celou úplnou množinu pozorovatelných). Stav, ve kterém má první částice hodnotu a_1 a druhá částice hodnotu a_2 označíme

$$|\psi\rangle = |a_1, a_2\rangle .$$

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

$$|a_2, a_1\rangle = \beta\,|a_1, a_2\rangle . \tag{2.302}$$

Zaveďme nyní operátor vzájemné výměny částic vztahem

► $$\hat{\mathbf{P}}_{12}\,|a_2, a_1\rangle \equiv |a_1, a_2\rangle \tag{2.303}$$

a prozkoumejme jeho vlastnosti:

$$\begin{aligned} &(1)\quad \hat{\mathbf{P}}^2 = \hat{\mathbf{1}}, \\ &(2)\quad \lambda_{1,2} = \pm 1, \\ &(3)\quad \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}\right] = 0 . \end{aligned} \tag{2.304}$$

Důkaz (1): Dvojnásobná záměna částic vede na původní konfiguraci.

Důkaz (2): Vlastními vektory jsou vektory $|\psi\rangle$ a $|\varphi\rangle$ definované výše:

$$\hat{\mathbf{P}}_{12}\,|a_1, a_2\rangle \equiv |a_2, a_1\rangle = \beta\,|a_1, a_2\rangle . \tag{2.305}$$

Číslo β je vlastním číslem operátoru výměny. Proveďme nyní dvojnásobnou výměnu jednak pomocí prvního vztahu (2.304) a jednak podle (2.305):

$$P^2 \mid a_1 , a_2 > = \begin{cases} \mid a_1 , a_2 > \\ \beta^2 \mid a_1 , a_2 > \end{cases} \qquad \Rightarrow \qquad \beta^2 = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \beta = \pm 1 .$$

Hodnota vlastních čísel operátoru výměny je zřejmá již z prvního vztahu (2.304). Jde o unitární a hermitovský operátor. Vlastní čísla musí ležet na jednotkové kružnici v komplexní rovině a současně být reálná. Jediné takové hodnoty jsou ± 1.

Důkaz (3): V důkazu využijeme časovou Schrödingerovu rovnici (2.182):

$$\hat{\mathbf{H}}_{12} \hat{\mathbf{P}}_{12} \mid a_1, a_2 \rangle = \hat{\mathbf{H}}_{12} \mid a_2, a_1 \rangle = \hat{\mathbf{H}}_{21} \mid a_2, a_1 \rangle =$$

$$= \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d} \mid a_2, a_1 \rangle}{\mathrm{d}t} = \mathrm{i}\hbar \hat{\mathbf{P}}_{12} \frac{\mathrm{d} \mid a_1, a_2 \rangle}{\mathrm{d}t} =$$

$$= \hat{\mathbf{P}}_{12} \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d} \mid a_1, a_2 \rangle}{\mathrm{d}t} = \hat{\mathbf{P}}_{12} \hat{\mathbf{H}}_{12} \mid a_1, a_2 \rangle .$$

2.8.2 Bosony a fermiony, Pauliho princip

Z předchozího rozboru je zřejmé, že

$$\mid a_2, a_1 \rangle = \hat{\mathbf{P}} \mid a_1, a_2 \rangle = \pm \mid a_1, a_2 \rangle . \tag{2.306}$$

Vlnová funkce dvou částic může být jen symetrická nebo antisymetrická. Neexistuje nic mezi tím. Částice mohou být vzhledem k záměně argumentů jen dvojího druhu: se symetrickými vlnovými funkcemi (*bosony*), nebo s antisymetrickými vlnovými funkcemi (*fermiony*). Tuto vlastnost nelze změnit ani časovým vývojem, protože operátor výměny částic podle třetího vztahu (2.304) komutuje s Hamiltonovým operátorem a jeho časový vývoj je proto nulový. Vznikne-li částice jako fermion či boson, zůstává takovou až do svého zániku.

Bosony

Bosony mají symetrickou vlnovou funkci

► $$\mid a_2, a_1 \rangle = \mid a_1, a_2 \rangle . \tag{2.307}$$

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 Boseho-Einsteinova statistika a zabýváme se jí v navazující učebnici [1]. 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 1 a graviton se spinem 2).

Fermiony

Fermiony mají antisymetrickou vlnovou funkci

► $$|a_2, a_1\rangle = -|a_1, a_2\rangle\,. \tag{2.308}$$

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 Fermiho-Diracova statistika a budeme se jí zabývat v navazující učebnici [1]. Fermiony jsou vždy částice s poločíselným spinem (1/2, 3/2,…) a pro tyto částice lze zavést kreační operátory splňující jednoduché antikomutační relace (viz následující kapitola). Nejtypičtějšími představiteli této rodiny částic jsou leptony (elektron, mion, tauon a neutrina se spinem 1/2), kvarky (d, u, s, c, b, t se spinem 1/2) a částice složené ze tří kvarků, neboli baryony (neutron, proton, Λ hyperon se spinem 1/2 a například Δ baryony se spinem 3/2).

	BOSONY	FERMIONY
spin	celočíselný	poločíselný
vlnová funkce	symetrická	antisymetrická
statistika	Boseho-Einsteinova	Fermiho-Diracova
Pauliho princip	nesplňují	splňují
kreační operátory	splňují komutační relace	splňují antikomutační relace

2.8.3 Druhé kvantování

Představme si, že máme N stejných částic, které obsazují stavy nějaké dynamické proměnné. N_1 částic je v prvním stavu (hodnota a_1), N_2 částic je ve druhém stavu (hodnota a_2), atd. Čísla N_k nazýváme obsazovací čísla stavu k. Součet všech obsazovacích čísel je roven počtu částic:

$$\sum_k N_k = N\,. \tag{2.309}$$

Pro bosony je $N_k = 0, 1, 2, 3, \ldots$ Pro fermiony je situace jednodušší. V daném stavu může být nejvýše jeden fermion, tj. $N_k = 0, 1$. Příslušný stav soustavy N stejných částic s danými obsazovacími čísly označíme

$$|\psi\rangle = |N_1, N_2, \ldots, N_k, \ldots\rangle\,. \tag{2.310}$$

Tomuto zápisu říkáme *reprezentace obsazovacích čísel* a příslušné stavy nazýváme *Fockovy stavy*. Dále se situace bude lišit pro bosony a pro fermiony.

Bosony

Zaveďme podobně jako u harmonického oscilátoru *kreační a anihilační operátory* do stavu k definičními vztahy (normovací konstanty ponecháme stejné jako u harmonického oscilátoru):

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^\dagger \mid N_1, N_2, \dots, N_k, \dots \rangle &\equiv \sqrt{N_k + 1} \mid N_1, N_2, \dots, N_k + 1, \dots \rangle , \\ \hat{a}_k \mid N_1, N_2, \dots, N_k, \dots \rangle &\equiv \sqrt{N_k} \mid N_1, N_2, \dots, N_k - 1, \dots \rangle . \end{aligned} \tag{2.311}$$

Přímo z těchto definičních relací (pouhým zapůsobením na stavový vektor (2.310) snadno spočteme komutační relace kreačních a anihilačních operátorů:

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k , \hat{a}_l] &= 0 , \\ [\hat{a}_k^\dagger , \hat{a}_l^\dagger] &= 0 , \\ [\hat{a}_k , \hat{a}_l^\dagger] &= \delta_{k\,l} . \end{aligned} \tag{2.312}$$

Zaveďme další operátor

$$\hat{N}_k \equiv \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k . \tag{2.313}$$

Operátor se nazývá (analogicky jako u harmonického oscilátoru) *operátor počtu částic* ve stavu k, protože zapůsobením na stavový vektor získáme počet částic ve stavu k:

$$\hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \mid N_1, N_2, \dots, N_k, \dots \rangle = \sqrt{N_k}\ \hat{a}_k^\dagger \mid N_1, N_2, \dots, N_k - 1, \dots \rangle =$$

$$\sqrt{N_k}\sqrt{N_k} \mid N_1, N_2, \dots, N_k\ , \dots \rangle = N_k \mid N_1, N_2, \dots, N_k\ , \dots \rangle .$$

Operátor celkového počtu částic potom je

$$\hat{N} \equiv \sum_k \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k\ . \tag{2.314}$$

Je-li úplná množina pozorovatelných spojitá, můžeme celý postup zopakovat pro spojité proměnné. Například v x reprezentaci lze zavést

$\hat{\psi}^\dagger(x)$	kreační operátor do polohy x,
$\hat{\psi}\,(x)$	anihilační operátor z polohy x.

Komutační relace budou obdobné, jen místo Kroneckerova symbolu vystupuje na pravé straně Diracova δ distribuce:

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}(y)] &= 0 , \\ [\hat{\psi}^\dagger(x), \hat{\psi}^\dagger(y)] &= 0 , \\ [\hat{\psi}(x), \hat{\psi}^\dagger(y)] &= \delta(x - y) . \end{aligned} \tag{2.315}$$

Operátor hustoty počtu částic se zavádí vztahem

$$\hat{\mathcal{N}}_k \equiv \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x) , \tag{2.316}$$

operátor počtu částic vyskytujících se v intervalu $\langle a, b \rangle$ je

$$\hat{N}(a,b) \equiv \int_a^b \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\,\mathrm{d}x \tag{2.317}$$

a operátor celkového počtu částic je

$$\hat{N} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} \hat{\psi}^\dagger(x)\hat{\psi}(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{2.318}$$

Obdobně by se postupovalo ve třech dimenzích. Celý přechod od fyziky jedné částice k fyzice mnoha stejných částic lze formálně provést nahrazením vlnové funkce kreačními a anihilačními operátory a nahrazením hustoty pravděpodobnosti operátorem hustoty počtu částic:

$$\begin{aligned} \psi(x) \quad &\rightarrow \quad \hat{\psi}(x)\,; \\ w(x) \equiv \psi^*(x)\,\psi(x) \quad &\rightarrow \quad \hat{\mathcal{N}}(x) \equiv \hat{\psi}^\dagger(x)\,\hat{\psi}(x)\,. \end{aligned} \tag{2.319}$$

Tomuto postupu se říká *druhé kvantování*, vlnové funkce popisující systém se stávají operátory a kvantová teorie přechází v *kvantovou teorii pole*, ve které jsou právě veličiny popisující klasická spojitá pole nahrazovány operátory. Druhý řádek přiřazení (2.319) má ještě jeden důležitý význam: u soustavy stejných částic vyjadřujeme pravděpodobnost děje operátorem hustoty počtu částic, tak jak to bývá u skutečných systémů (například svazku stejných částic v experimentu). U jedné částice můžeme hovořit o hustotě pravděpodobnosti jejího výskytu $\psi^*(x)\psi(x)$. Celková pravděpodobnost je rovna jedné, tak, jak to odpovídá normování stavového vektoru.

Fermiony

U fermionů probíhá druhé kvantování obdobně. Opět zavádíme kreační a anihilační operátory $\hat{b}_k^\dagger$, $\hat{b}_l$ do stavů k a l. Vzhledem k antisymetrii vlnových funkcí musí tyto operátory splňovat antikomutační relace:

$$\begin{aligned} |\,k,l\,\rangle = -\,|\,l,k\,\rangle \quad &\Rightarrow \\ |\,k,l\,\rangle + |\,l,k\,\rangle = 0 \quad &\Rightarrow \\ \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_l^\dagger + \hat{b}_l^\dagger \hat{b}_k^\dagger = 0\,. \end{aligned}$$

Antikomutátory značíme složenými závorkami a relace (2.312) platná pro bosony, získá pro fermiony tvar:

$$\begin{aligned} \{\hat{b}_k\,,\,\hat{b}_l\} &= 0\,, \\ \{\hat{b}_k^\dagger\,,\,\hat{b}_l^\dagger\} &= 0\,, \\ \{\hat{b}_k\,,\,\hat{b}_l^\dagger\} &= \delta_{k\,l}\,. \end{aligned} \tag{2.320}$$

►

Definice spojitých operátorů i operátoru hustoty počtu částic zůstávají shodné. U fermionů jsou všude nahrazeny relace komutační relacemi antikomutačními. V mnoha situacích se chování fermionů a bosonů liší pouze znaménkem (symetrie vlnové funkce; komutační a antikomutační relace; Boseho-Einsteinova a Fermiho-Diracova statistika).

2.8.4 Ukázka druhého kvantování pro Kleinovo-Gordonovo pole

Uvažujme nejjednodušší variantu reálného Kleinova-Gordonova pole pro volnou částici s Lagrangeovou funkcí

$$\mathscr{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\alpha \varphi\right)\left(\partial^\alpha \varphi\right) + \frac{1}{2}\kappa^2 \varphi^2 \tag{2.321}$$

a polní rovnicí

$$\left(\Box - \kappa^2\right)\varphi = 0\,. \tag{2.322}$$

Přejdeme-li k soustavě identických částic, změní se pole na operátor

$$\varphi \;\rightarrow\; \hat{\varphi} \tag{2.323}$$

s vlastnostmi

$$\begin{gathered}\left[\hat{\varphi}(x),\ \hat{\varphi}(y)\right] = \left[\hat{\varphi}^\dagger(x), \hat{\varphi}^\dagger(y)\right] = 0\,; \\ \left[\hat{\varphi}(x), \hat{\varphi}^\dagger(y)\right] = \delta(x-y)\,.\end{gathered} \tag{2.324}$$

Veličiny x a y reprezentují celou událost (čas a prostor). Rozviňme nyní polní operátor do rovinných vln (zvlášť označíme kladně frekvenční a zvlášť záporně frekvenční část):

$$\hat{\varphi}(x) = \int C(\mathbf{k})\left[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)} + \hat{a}(\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}-\omega t)}\right]\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,. \tag{2.325}$$

V uvedeném vztahu je časová část čtyřvektoru k^μ provázána s prostorovou částí přes disperzní relaci $\omega = \omega(\mathbf{k})$, takže integrace ve skutečnosti probíhá přes všechny čtyři složky. Konstanta $C(\mathbf{k})$ je normovací konstanta, která zajišťuje, aby koeficienty rozvoje (operátory $\hat{a}$, $\hat{a}^\dagger$) splňovaly relace kreačních a anihilačních operátorů. Dosadíme-li rozvoj polního operátoru (2.325) do komutačních relací (2.324), získáme ihned (správná volba C zajistí koeficient 1 u delta funkce v druhé relaci)

$$\begin{gathered}\left[\hat{a}(\mathbf{k}),\ \hat{a}(\mathbf{k}')\right] = \left[\hat{a}^\dagger(\mathbf{k}),\ \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')\right] = 0\,; \\ \left[\hat{a}(\mathbf{k}), \hat{a}^\dagger(\mathbf{k}')\right] = \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\,.\end{gathered} \tag{2.326}$$

Dosadíme-li rozvoj polního operátoru (2.325) do definice Hamiltonovy funkce (1.230) a hybnosti (1.229), máme po elementárních úpravách

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,; \\ \hat{\mathbf{P}} &= \frac{1}{2}\int \mathbf{p}(\mathbf{k})\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,,\end{aligned} \tag{2.327}$$

kde jsme označili

$$\begin{aligned}\mathbf{p}(\mathbf{k}) &= \hbar\mathbf{k}\,; \\ E(k) = \hbar\omega(k) &= \hbar\sqrt{c^2k^2 + c^2\kappa^2} = \sqrt{p^2c^2 + m_0^2c^4}\,.\end{aligned} \tag{2.328}$$

Vztah $\omega(k)$ je dán disperzní relací (2.233). S využitím komutačních relací (2.326) získáme přímo dosazením relace

$$\begin{aligned}\left[\hat{H}, \hat{a}(\mathbf{k})\right] &= -E(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k})\,;\\ \left[\hat{H}, \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})\right] &= +E(\mathbf{k})\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})\,;\\ \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}(\mathbf{k})\right] &= -\mathbf{p}(\mathbf{k})\hat{a}(\mathbf{k})\,;\\ \left[\hat{\mathbf{P}}, \hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})\right] &= +\mathbf{p}(\mathbf{k})\hat{a}^{\dagger}(\mathbf{k})\,.\end{aligned} \tag{2.329}$$

Z těchto relací je zjevný význam operátorů $\hat{a}$, $\hat{a}^{\dagger}$: pole φ je kvantováno a operátor $\hat{a}^{\dagger}$ kreuje kvantum pole s energií $E(k)$ a hybností $\mathbf{p}(\mathbf{k})$, operátor $\hat{a}$ stejné kvantum anihiluje. Toto kvantum můžeme interpretovat jako boson s nulovým spinem (pole má jedinou vlnovou funkci odpovídající jediné projekci spinu). Kleinova-Gordonova rovnice získává po druhém kvantování názornou interpretaci. Jde o pole, které můžeme chápat jako soustavu excitací – bosonů s nulovým spinem.

Komplexní pole

Pokud by Kleinovo–Gordonovo pole bylo komplexní, tj.

$$\hat{\varphi} = \hat{\varphi}_1 + \mathrm{i}\,\hat{\varphi}_2\,; \qquad \hat{\varphi}^{\dagger} = \hat{\varphi}_1 - \mathrm{i}\,\hat{\varphi}_2\,,$$

lze ukázat, že excitace takového pole odpovídají dvěma druhům skalárních bosonů (se spinem 0), které jsou sobě navzájem antičásticemi.

Normální uspořádání operátorů

Ve vztazích pro energii a hybnost (2.327) se skrývá jeden problém. Pokud bychom hledali střední hodnotu energie a hybnosti ve vakuovém stavu, dostaneme nekonečné hodnoty. Za to může první člen, ve kterém je kreační operátor napravo a na vakuový stav dá nenulovou hodnotu:

$$\langle 0|\hat{H}|0\rangle = \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left\{\langle 0|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|0\rangle + \langle 0|\hat{a}^{\dagger}\hat{a}|0\rangle\right\}\mathrm{d}^3\mathbf{k} =$$

$$= \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\langle 0|\hat{a}\hat{a}^{\dagger}|0\rangle\mathrm{d}^3\mathbf{k} \sim \int E(\mathbf{k})\langle 0|0\rangle\mathrm{d}^3\mathbf{k} \sim \int E(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3\mathbf{k} \;\to\; \infty\,.$$

Tento problém je důsledkem principu korespondence, který neřeší správné pořadí operátorů, které jsou v součinu. Máme-li dvě dynamické proměnné A a B, můžeme součinu AB v kvantové teorii přiřadit dvě možná pořadí operátorů:

$$AB \quad \to \quad \begin{cases}\hat{A}\hat{B}\,,\\ \hat{B}\hat{A}\,.\end{cases} \tag{2.330}$$

Jen jedno pořadí bude ovšem odpovídat dějům v přírodě. Toto pořadí není dáno principem korespondence, ale musíme ho vybrat tak, aby výsledky byly v souladu s pozorováním. Správné pořadí operátorů se nazývá *normální uspořádání* a označujeme ho dvojtečkou, tedy

► $$:\hat{A}\hat{B}:$$

Tento zápis znamená, že pořadí operátorů mezi dvojtečkami není určeno jednoznačně a musíme ho volit ve shodě s experimentem. Použít lze například následující postup:

1. Operátory vyjádříme za pomoci příslušných kreačních a anihilačních operátorů (bosonové splňují komutační relace a fermionové antikomutační relace).
2. V součinech budeme anihilační operátory přesouvat doprava podle následujících pravidel:
   - pokud vedle sebe jsou dva bosonové operátory, přesuneme anihilační operátor doprava,
   - pokud vedle sebe je jeden bosonový a jeden fermionový operátor, přesuneme anihilační operátor doprava,
   - pokud vedle sebe jsou dva fermionové operátory, přesuneme anihilační operátor doprava a *zaměníme znaménko* daného členu.

◖ Příklad 2.10:

Nalezněte správné pořadí operátorů v hamiltoniánu Kleinova-Gordonova pole:

$$\hat{H} = :\frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k}: = \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k}):\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right):\mathrm{d}^3\mathbf{k} =$$
$$= \frac{1}{2}\int E(\mathbf{k})\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a}\right)\mathrm{d}^3\mathbf{k} = \int E(\mathbf{k})\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k} =$$
$$= \int E(\mathbf{k})\,\hat{\mathcal{N}}(\mathbf{k})\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}.$$

Střední hodnota hamiltoniánu ve vakuovém stavu již nediverguje, navíc je struktura Hamiltonova operátoru zcela zřejmá, $\hat{\mathcal{N}}(\mathbf{k})$ je operátor hustoty počtu částic s vlnovým vektorem **k**. Obdobně upravíme i vztah (2.327) pro hybnost. Správné relace tedy jsou:

$$\hat{H} = \int E(\mathbf{k})\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,;$$
$$\hat{\mathbf{P}} = \int \mathbf{p}(\mathbf{k})\,\hat{a}^\dagger\hat{a}\,\mathrm{d}^3\mathbf{k}\,. \tag{2.331}$$

◗

◖ Příklad 2.11:

Určete správné pořadí operátorů ve výrazu (*a* jsou bosonové operátory, *b* fermionové)

$$\hat{A} = :\frac{1}{2}\left(\hat{a}\hat{a}^\dagger + \hat{a}^\dagger\hat{a} - \hat{b}\hat{b}^\dagger + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{a}\hat{b}^\dagger - \hat{b}^\dagger\hat{a}\right):$$

Aplikací výše uvedených pravidel získáme snadno výsledek

$$\hat{A} = \frac{1}{2}\left(\hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{b} + \hat{b}^\dagger\hat{a} - \hat{b}^\dagger\hat{a}\right) = \hat{a}^\dagger\hat{a} + \hat{b}^\dagger\hat{b} = \hat{N}_a + \hat{N}_b\,.$$

◗

2.9 Kvantová teorie a skryté parametry

Kvantová teorie s sebou přináší řadu nezvyklých a na první pohled nepochopitelných jevů. Člověk se intuitivně brání tomu, co si nedokáže představit, proto má kvantová teorie řadu odpůrců, kterým vadí především pravděpodobnostní výsledek měření, superpozice stavů a nelokálnost kvantové teorie. Už v dobách vzniku kvantové mechaniky se rozeběhla diskuze mezi dvěma skupinami. Vůdčí osobnostní první skupiny byl Niels Bohr, který zastával názor, že kvantová teorie je taková, jaká je. Musíme se smířit s tím, že ne všechny matematické objekty používané k popisu reality jsou představitelné a že součástí měření je i měřicí přístroj, který ze superpozice stavů vybere jeden jediný stav. Vlnová funkce, která byla před měřením superpozicí více stavů, popisuje po aktu měření jeden jediný stav. Této změně říkáme *kolaps vlnové funkce*. Další měření poskytnou už stále stejnou hodnotu (tedy pokud jsme objekt měřením zcela nezničili). Kolaps vlnové funkce je nelineárním jevem (lineární superpozice stavů byla měřením zjevně narušena) a tato nelinearita nějak souvisí se samotným aktem měření. Princip superpozice stavů nutně vede k nelokálnosti kvantové teorie, například v dvouštěrbinovém experimentu prochází elektron současně první i druhou štěrbinou, v Machově-Zehnderově interferometru se foton vyskytuje současně v obou jeho ramenech. Není lokalizovanou částicí, nicméně při aktu měření jde o nedělitelný objekt a měřicí přístroj ho zaznamená vždy jen na jednom jediném místě.

Druhou skupinu asi nejvíce reprezentoval Albert Einstein, který se s výše zmíněnými vlastnostmi kvantové teorie nesmířil a předpokládal, že kvantová teorie není úplná. Náhodnost výsledku při měření by mohla souviset s tím, že systém má nějaké další, tzv. *skryté parametry*, díky jejichž neznalosti dochází k zdánlivě náhodnému výsledku aktu měření. Jak uvidíme dále, existence skrytých parametrů by mohla vysvětlit i nelokální chování kvantové teorie.

Mezi oběma směry nakonec rozhodly experimenty, které v 80. letech dvacátého století jednoznačně vyvrátily teorii skrytých parametrů a ukázaly, že kvantovou teorii musíme přijmout i s jejími „podivnostmi“.

2.9.1 Akt měření a dekoherence

V kapitole 2.6.4 věnované dvouštěrbinovému experimentu jsme se zmínili o tom, že měření prováděná za účelem rozhodnout, kterou štěrbinou částice letěla, vždy naruší interferenční obrazec. Jde o zcela základní vlastnost kvantové teorie, měření není třeba ani provádět – postačí principiální možnost takového měření a interferenční obrazec vymizí. Pojďme si tuto vlastnost demonstrovat na Machově-Zehnderově interferometru. Je jasné, že pokud do jednoho z ramen dáme detekční přístroj, konstruktivní a destruktivní interference zodpovědná za to, že všechny fotony dopadají pouze do detektoru D1, vymizí.

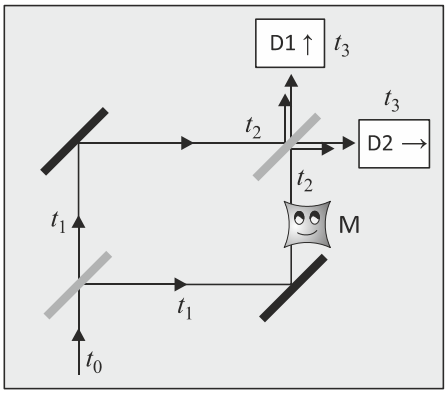
Představme si, že v jednom z ramen není celý detekční přístroj, ale pouze mikroskopický objekt M (například atom), jenž sice s fotonem interaguje, ale nezničí ho, a foton pokračuje dále v letu. Taková nedemoliční měření lze skutečně provést. Serge Haroche z francouzského ENS (*École Normale Supérieure*) za ně dostal Nobelovu cenu

za fyziku pro rok 2012 [36]. Z pohledu člověka nejde o skutečné měření, neboť se jako pozorovatelé nikdy nedozvíme výsledek interakce fotonu s objektem M.

Při interakci fotonu s objektem M dojde k provázání jejich stavů. Oba podsystémy (foton a objekt M) se stanou jediným systémem, jehož Hilbertův prostor bude direktním součinem $\mathcal{H} = \mathcal{H}_\gamma \otimes \mathcal{H}_\mathrm{M}$ Hilbertových prostorů obou podsystémů (jde o obdobu rozkladu dvourozměrného prostoru reálných dvojic na dvě kartézské osy). Stav obou objektů budeme v Diracově symbolice zapisovat jako

$$|\,\psi\,\rangle = |\,\gamma\,\rangle\,|\,\mathrm{M}\,\rangle\,, \tag{2.332}$$

kde první část popisuje foton γ a druhá mikroskopický objekt M. Hovoříme o *provázání* (*propletení) stavů*, anglicky *entanglement*.



Obr. 2.43: Machův-Zehnderův interferometr s kvantovým objektem M v jednom z ramen. Základní varianta experimentu je na obrázku 2.38 na straně 190.

Předpokládejme, že dokud objekt M s fotonem neinteraguje, je popsán stavem $|\,M_0\,\rangle = |\,0\,\rangle$ a po interakci se jeho stav změní na hodnotu $|\,M_1\,\rangle = |\,1\,\rangle$. Nyní budeme postupovat stejně jako při popisu stavů fotonu v jednotlivých časech v kapitole 2.6.4 na straně 190:

$$\begin{aligned}
|\psi(t_0)\rangle &= |\uparrow\rangle|\,0\,\rangle\,;\\
|\psi(t_1)\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle|\,0\,\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle|\,0\,\rangle\,;\\
|\psi(t_2)\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle|\,0\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle|\,1\,\rangle\,;\\
|\psi(t_3)\rangle &= \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle\right]|\,0\,\rangle - \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\frac{1}{\sqrt{2}}|\uparrow\rangle + \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}|\rightarrow\rangle\right]|\,1\,\rangle\,.
\end{aligned} \tag{2.333}$$

Výsledný stav tedy bude

$$|\psi(t_3)\rangle = \frac{\mathrm{i}}{2}|\rightarrow\rangle|\,0\,\rangle - \frac{\mathrm{i}}{2}|\rightarrow\rangle|\,1\,\rangle - \frac{1}{2}|\uparrow\rangle|\,0\,\rangle - \frac{1}{2}|\uparrow\rangle|\,1\,\rangle\,. \tag{2.334}$$

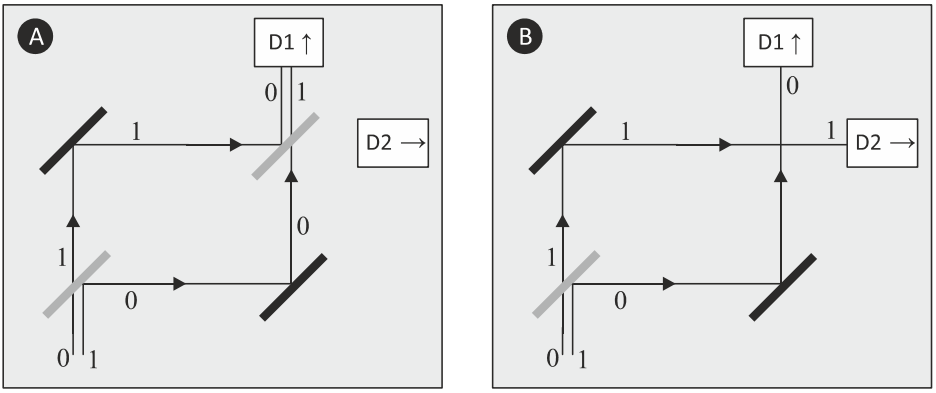
Z uvedeného výrazu je zřejmé, že se koeficienty u vodorovně se pohybujícího fotonu $|\rightarrow>$ nevyruší a fotony budou dopadat do obou detektorů. Došlo k tzv. *dekoherenci*, tj. vymizení interferenčního jevu díky přítomnosti objektu M v interferometru. Jakákoli možnost interakce popisovaného objektu s okolním prostředím vede k provázání stavů s okolím a ke kvantové dekoherenci.

2.9.2 Skryté parametry

Část fyziků kritizovala nelokálnost kvantové teorie a náhodnost výsledků. Po určitou dobu se zdálo, že by problémy bylo možné vyřešit zavedením tzv. skrytých parametrů, jejichž hodnoty neznáme, a proto dostáváme při měření zdánlivě náhodné výsledky. Ukažme si tuto konstrukci na Machově-Zehnderově interferometru. Předpokládejme, že fotony putující oběma rameny mají nějakou další neznámou vlastnost, která popisuje jejich chování při interakci se zrcadly. Popišme tuto vlastnost parametrem p, který zavedeme tak, aby platilo:

1. parametr p může nabývat pouze dvou hodnot 0 a 1;
2. při interakci s normálním zrcadlem se hodnota p nezmění;
3. při interakci s polopropustným zrcadlem (odrazu i průchodu) se hodnota p změní;
4. foton s $p = 0$ polopropustným zrcadlem prochází, foton s $p = 1$ se odrazí.

Takto zavedený parametr p snadno vysvětlí veškeré chování fotonů v Machově-Zehnderově interferometru, jak je patrné z následujícího obrázku. Nalevo je situace se dvěma polopropustnými zrcadly (interferometrické uspořádání), napravo druhé polopropustné zrcadlo chybí. Do interferometru vchází dva fotony, jeden se skrytým parametrem $p = 0$ a druhý se skrytým parametrem $p = 1$. V interferometrickém uspořádání skončí oba fotony v detektoru D1, v uspořádání s jediným polopropustným zrcadlem dorazí každý z fotonů do jiného detektoru. Pokud do přístroje bude dopadat proud fotonů, jejichž skrytý parametr bude mít zcela náhodnou hodnotu, získáme výsledky shodné s kvantovým popisem, a to aniž bychom použili superpozici stavů a nelokální chování fotonu v interferometru. Tato konstrukce vypadá velmi slibně a nadějně, ale jak ukážeme v kapitole 2.9.4, je představa skrytých parametrů v rozporu s jinými experimenty. Teorie skrytých parametrů byla definitivně vyvrácena v 80. letech 20. století.



Obr. 2.44: Machův-Zehnderův interferometr se skrytými parametry fotonů

2.9.3 EPR paradox

Odpor části fyziků k rodící se kvantové teorii vyústil v roce 1935 k formulaci myšlenkového experimentu [32], který měl demonstrovat neúplnost kvantové teorie a ukázat, že kvantová teorie je vnitřně sporná a bude muset být nahrazena lepší teorií mikrosvěta. U zrodu tohoto myšlenkového experimentu stáli Albert Einstein (1879–1955), rusko-americký fyzik Boris Podolsky (1896–1966) a americko-izraelský fyzik Nathan Rosen (1909–1995). Podle počátečních jmen autorů se hovoří o tzv. *EPR paradoxu*.

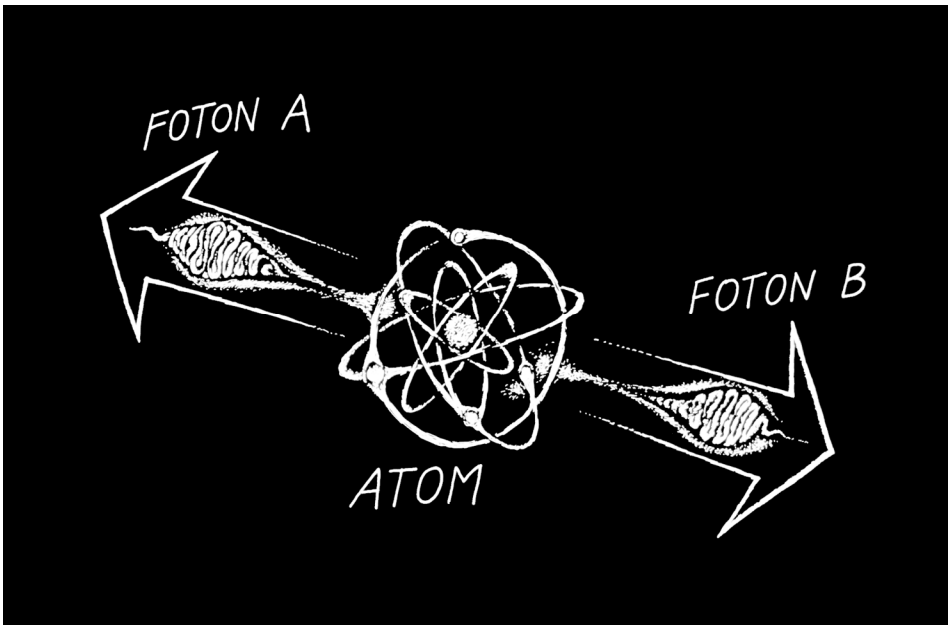
Dnes se nejčastěji používá formulace Davida Bohma, která pochází z roku 1951 [19], [20], [31]. Představme si částici s celkovým momentem hybnosti 0, která se rozpadne na dvě od sebe letící částice A a B, z nichž každá má spin ½. Orbitální moment obou částic je nulový (letí od sebe), a proto zákon zachování celkového momentu hybnosti vede na podmínku, že pokud naměříme u jedné z částic projekci spinu do libovolné osy ½, musí mít druhá částice projekci do téže osy −½ a naopak. Obě částice jsou popsány provázaným stavem

$$|\psi\rangle = \alpha\,|+½\rangle_A\,|-½\rangle_B + \beta\,|-½\rangle_A\,|+½\rangle_B\,, \tag{2.335}$$

který zohledňuje obě dvě možnosti: buď má částice A spin ½ a částice B má spin –½, nebo platí opačná varianta.

Zdánlivý paradox vznikne tím, že provedením měření projekce spinu na jedné částici se okamžitě dozvíme projekci spinu u druhé částice, ať je jakkoli daleko. Na první pohled to vypadá, jakoby se informace šířila okamžitě, což odporuje principu kauzality (příčinnosti) ze speciální relativity. Na vině je opět tolik diskutované nelokální chování částic. Při měření na jedné částici zkolabuje vlnová funkce v celém prostoru, a to se projeví při následujícím měření na druhé částici. Odpůrci kvantové teorie tvrdí, že obě částice mají nějaký skrytý parametr, který už dopředu, tedy při vzniku obou částic, rozhodl, jak dopadne měření projekce spinu kdykoli v budoucnosti. Zastánci kodaňské interpretace naopak tvrdí, že měření u libovolné z částic může dopadnout libovolným způsobem a teprve v okamžiku měření dojde k jedné ze dvou možných voleb. Přitom vlnová funkce zkolabuje v celém prostoru a následné měření u zbývající částice dá doplňkový výsledek. Ani v tomto případě nejde o porušení kauzality, provedením měření na jedné částici se ke druhé částici nepřenáší žádná hmota ani energie a oba pozorovatelé při kontrole svých výsledků musí tak jako tak použít podsvětelnou komunikaci, která zajistí kauzalitu obou měření. Abychom ukázali, že druhá interpretace je správná, bude výhodné problém přeformulovat za pomoci polarizace dvou fotonů.

Polarizací fotonu nazýváme rovinu kmitů elektrického pole. Ta se obecně může stáčet, nebo být fixní – pak hovoříme o rovinné polarizaci. Fotony, jakožto kvanta příčného elektromagnetického vlnění, mohou mít dvě nezávislé, navzájem kolmé rovinné polarizace. Skutečný stav fotonu je potom lineární kombinací obou polarizačních stavů v dané bázi. Měření polarizace fotonu lze uskutečnit například pomocí hranolu z islandského vápence, který je dvojlomný, a světelný paprsek se v něm proto dělí na řádný a mimořádný. Fotony putující ve směrech řádného a mimořádného paprsku mají navzájem kolmou polarizaci. Jinými slovy: islandský vápenec může fungovat jako registrační přístroj. Zvolme osy souřadnicové soustavy (bázi) tak, že se foton pohybuje ve směru osy *z*; pokud pokračuje po dráze řádného paprsku, má polarizaci ve směru osy *x*, pokud se vydá po dráze mimořádného paprsku, má polarizaci ve směru osy *y*.



Obr. 2.45: EPR paradox

Uvažujme nyní zjednodušený experiment: předpokládejme, že atom má celkový moment hybnosti nulový a po jeho excitaci ho opustí dva fotony, jejichž polarizace je korelována, v našem případě budeme dokonce předpokládat, že fotony mají přesně opačnou polarizaci. Pokud na jednom fotonu naměříme v nějaké bázi „vodorovnou“ polarizaci (ve směru osy x), bude polarizace druhého fotonu „svislá“ (ve směru osy y) a naopak. Je jasné, že jde o stejnou formulaci jako dříve, jen je projekce spinu nahrazena polarizací fotonu (ta ale nakonec stejně závisí na projekci spinu fotonu do směru jeho pohybu). Předpokládejme, že provázaný stav obou fotonů má tvar

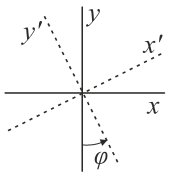
► $$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x\rangle_{\mathrm{A}}\,|y\rangle_{\mathrm{B}} - \frac{1}{\sqrt{2}}|y\rangle_{\mathrm{A}}\,|x\rangle_{\mathrm{B}}\,. \tag{2.336}$$

První člen vyjadřuje, že v naší bázi má foton A polarizaci $|x\rangle$ a foton B polarizaci $|y\rangle$, druhý člen popisuje situaci opačnou. Výsledkem měření tedy mohou být jen dvě možnosti:

1. A má polarizaci $|x\rangle$, B má polarizaci $|y\rangle$;
2. A má polarizaci $|y\rangle$, B má polarizaci $|x\rangle$.

Normovací koeficienty superpozice stavů jsou voleny tak, aby obě možnosti měly stejnou pravděpodobnost (ta je kvadrátem koeficientu, tj. 1/2 v obou případech) a aby součet obou pravděpodobností dal 1. Minus u druhého výrazu není pro naše úvahy podstatné, jen vyjadřuje okolnost, že kdybychom do obou argumentů dosadili stejnou polarizaci, dostaneme nulovou vlnovou funkci, tj. takový výsledek měření není možný. Výsledek měření není dopředu dán, je zcela náhodný. Jakmile ale provedeme měření na jednom fotonu, stav zkolabuje do jedné z obou možností a měření na druhém fotonu dá už jen doplňkový výsledek, ať je tento foton fyzicky lokalizován kdekoli. Je to důsled-

kem provázanosti obou stavů. Povšimněte si, že provázaný stav není možné žádným způsobem přepsat jako součin dvou výrazů tak, aby první výraz závisel jen na parametrech fotonu A a druhý jen na parametrech fotonu B. To je pro provázané stavy charakteristické.



Obr. 2.46: Měření polarizace fotonu v pootočené bázi

Jak by dopadl výsledek našeho měření, pokud bychom zvolili jinou bázi (pootočenou oproti původní o úhel φ), tedy měřicí hranol islandského vápence by byl jinak orientovaný? Předpokládejme klasickou rotační transformaci, tj.

$$\begin{aligned} |x\rangle &= \cos\varphi\,|x'\rangle - \sin\varphi\,|y'\rangle\,, \\ |y\rangle &= \sin\varphi\,|x'\rangle + \cos\varphi\,|y'\rangle\,, \end{aligned} \tag{2.337}$$

a dosaďme ji do provázaného stavu (2.336):

$$\begin{aligned} |\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\cos\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{A}} - \sin\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{A}}\big)\big(\sin\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{B}} + \cos\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{B}}\big) - \\ - \frac{1}{\sqrt{2}}\big(\sin\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{A}} + \cos\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{A}}\big)\big(\cos\varphi\,|x'\rangle_{\mathrm{B}} - \sin\varphi\,|y'\rangle_{\mathrm{B}}\big)\,. \end{aligned}$$

Po pronásobení všech výrazů dostaneme

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\,|x'\rangle_{\mathrm{A}}\,|y'\rangle_{\mathrm{B}} - \frac{1}{\sqrt{2}}\,|y'\rangle_{\mathrm{A}}\,|x'\rangle_{\mathrm{B}}\,. \tag{2.338}$$

Výsledek je nesmírně zajímavý. V čárkované bázi se tvar stavového vektoru vůbec nezměnil – výrazy (2.336) a (2.338) popisující stav v obou bázích jsou shodné. Je tedy jedno, jak budeme mít při měření pootočený měřicí hranol, výsledek měření polarizace bude mít při jakémkoli natočení hranolu padesátiprocentní pravděpodobnost, že naměříme foton A s „vodorovnou“ polarizací a foton B se „svislou“ polarizací, a padesátiprocentní pravděpodobnost, že měření dopadne opačně.

2.9.4 Bellovy nerovnosti

V roce 1964 irský fyzik *John Stewart Bell* (1928–1990) ukázal, že statistické vlastnosti měření polarizace fotonu budou v případě teorie se skrytými parametry jiné než při standardní kvantové interpretaci, o kterou se opíráme v tomto textu. Zaveďme veličinu P, která bude mít hodnotu +1, pokud byla naměřena v dané bázi „vodorovná“ polarizace (ve směru x) a –1, pokud byla naměřena „svislá“ polarizace (ve směru osy y):

$$P = \begin{cases} +1: & \text{„vodorovná“ polarizace,} \\ -1: & \text{„svislá“ polarizace.} \end{cases} \tag{2.339}$$

Předpokládejme, že měření na fotonu A a na fotonu B budou probíhat s různě natočenými hranoly. Jejich orientace vůči laboratorní soustavě bude dána úhly α a β. Pokud bude foton A polarizován ve směru úhlu α, bude výsledek měření polarizace $P_A = +1$, pokud bude polarizován kolmo na tento směr, bude $P_A = -1$. Stejně tak u fotonu B dopadne měření buď tak, že $P_B = +1$ (polarizace je ve směru úhlu β), nebo $P_B = -1$ (polarizace je kolmá na směr daný úhlem β). Situaci ještě zkomplikujme tak, že u každého z fotonů budeme mít k dispozici dva měřicí hranoly. U fotonu A budou hranoly orientované pod úhly α, α', u fotonu B pod úhly β, β'. Vždy provedeme měření oběma hranoly, které máme k dispozici – nejprve jedním, a poté druhým. Předpokládejme nyní, že budeme mnohokrát opakovat měření polarizace obou fotonů oběma hranoly (tedy vždy provedeme čtyři měření). Sestavme si z každé čtveřice měření veličinu

$$\Gamma \equiv P_A(\alpha)P_B(\beta) + P_A(\alpha)P_B(\beta') + P_A(\alpha')P_B(\beta) - P_A(\alpha')P_B(\beta') . \qquad (2.340)$$

Veličina Γ má z matematického hlediska jednu velmi zajímavou vlastnost: jde o funkci čtyř proměnných $P_A(\alpha)$, $P_A(\alpha')$, $P_B(\beta)$, $P_B(\beta')$, které mohou v principu nabývat jen hodnot +1 nebo −1. Funkce Γ je ale zkonstruována tak, aby po dosazení jakékoli kombinaci vstupů (i nefyzikální) vždy vyšla hodnota +2 nebo −2, jiná možnost není. Vyzkoušejte si to.

O měřeních si budeme vést podrobné záznamy a nakonec budeme počítat průměrné hodnoty naměřených veličin. Pokud platí teorie skrytých parametrů, je výsledek měření předem dán hodnotou skrytého parametru a zcela zde chybí prvek náhodnosti. Náhodnost je zdánlivá a není dána kvantovou teorií, ale neznalostí hodnoty skrytého parametru. Při mnoha opakovaných měřeních budeme dostávat jako výsledek výpočtu Γ posloupnost složenou z hodnot +2 a −2, například +2, +2, +2, −2, −2, +2… Střední hodnotu budeme počítat jako aritmetický průměr, což nutně povede na nerovnost

$$-2 \le \langle \Gamma \rangle \le 2 , \qquad (2.341)$$

kterou za pomoci definice Γ přepíšeme do tvaru

► $$-2 \le \langle P_A P_B \rangle + \langle P_A P'_B \rangle + \langle P'_A P_B \rangle - \langle P'_A P'_B \rangle \le 2 . \qquad (2.342)$$

Jde o Bellovu nerovnost, kterou musí splňovat střední hodnoty opakovaných měření, pokud existují skryté parametry a výsledky měření jsou předem dány.

Kvantová teorie dá ale jiný výsledek výpočtu střední hodnoty. Předpokládejme, že na provázaném stavu (2.336)

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}|x\rangle_A |y\rangle_B - \frac{1}{\sqrt{2}}|y\rangle_A |x\rangle_B$$

provedeme měření na fotonu A pomocí hranolu, který je orientovaný pod úhlem α a na fotonu B hranolem orientovaným pod úhlem β. Do stavu proto dosadíme příslušné transformace:

$$\begin{aligned} |x\rangle_A &= \cos\alpha\,|x'\rangle_A - \sin\alpha\,|y'\rangle_A , \\ |y\rangle_A &= \sin\alpha\,|x'\rangle_A + \cos\alpha\,|y'\rangle_A , \\ |x\rangle_B &= \cos\beta\,|x'\rangle_B - \sin\beta\,|y'\rangle_B , \\ |y\rangle_B &= \sin\beta\,|x'\rangle_B + \cos\beta\,|y'\rangle_B , \end{aligned} \qquad (2.343)$$

a dostaneme

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{bmatrix} -\sin(\alpha-\beta)\,|x'\rangle_A\,|x'\rangle_B + \cos(\alpha-\beta)\,|x'\rangle_A\,|y'\rangle_B - \\ -\cos(\alpha-\beta)\,|y'\rangle_A\,|x'\rangle_B - \sin(\alpha-\beta|\,y'\rangle_A\,|y'\rangle_B \end{bmatrix}. \quad (2.344)$$

Pravděpodobnosti jednotlivých výsledků jsou dány druhými mocninami koeficientů, tj.

polarizace fotonu P_A	polarizace fotonu P_B	pravděpodobnost w_{AB}
+	+	½ $\sin^2(\alpha-\beta)$
+	−	½ $\cos^2(\alpha-\beta)$
−	+	½ $\cos^2(\alpha-\beta)$
−	−	½ $\sin^2(\alpha-\beta)$

Symbol „+“ jsme použili pro „vodorovnou“ polarizaci a symbol „−“ pro „svislou“. Možná vás zarazí, že pravděpodobnost nalezení obou fotonů se stejnou polarizací je nenulová. To je ale dáno tím, že měřicí hranoly nejsou stejně orientované a ve skutečnosti jde o projekce do jiných bazí (os). Dosadíte-li $\alpha = \beta$, vyjdou pravděpodobnosti shodné polarizace obou fotonů nulové. Vypočtěme nyní střední hodnotu $\langle P_A P_B\rangle$. Za pomoci tabulky uděláme vážený průměr všech možných výsledků:

$$\langle P_A P_B\rangle = \sum P_A P_B w_{AB} = w_{++} - w_{+-} - w_{-+} + w_{--} \quad \Rightarrow$$

$$\langle P_A P_B\rangle = \sin^2(\alpha-\beta) - \cos^2(\alpha-\beta) \quad \Rightarrow$$

$$\langle P_A P_B\rangle = -\cos(2\alpha-2\beta)\,. \quad (2.345)$$

Při kvantovém výpočtu tedy pro střední hodnotu námi zavedené veličiny Γ bude platit

$$\langle \Gamma\rangle = \langle P_A P_B\rangle + \langle P_A P'_B\rangle + \langle P'_A P_B\rangle - \langle P'_A P'_B\rangle \quad \Rightarrow$$

► $$\langle \Gamma\rangle = -\cos(2\alpha-2\beta) - \cos(2\alpha-2\beta') - \cos(2\alpha'-2\beta) + \cos(2\alpha'-2\beta')\,. \quad (2.346)$$

Pro různé situace tento výsledek zjevně porušuje Bellovy nerovnosti, dosaďme například $\alpha = 0°$, $\alpha' = 45°$, $\beta = 112{,}5°$, $\beta' = 67{,}5°$. Pro tento případ je $\langle \Gamma\rangle = 2\sqrt{2}$, což je ve zjevném rozporu s Bellovýni nerovnostmi. Testováním Bellových nerovností je možné vyloučit existenci skrytých parametrů v kvantové teorii.

* * *

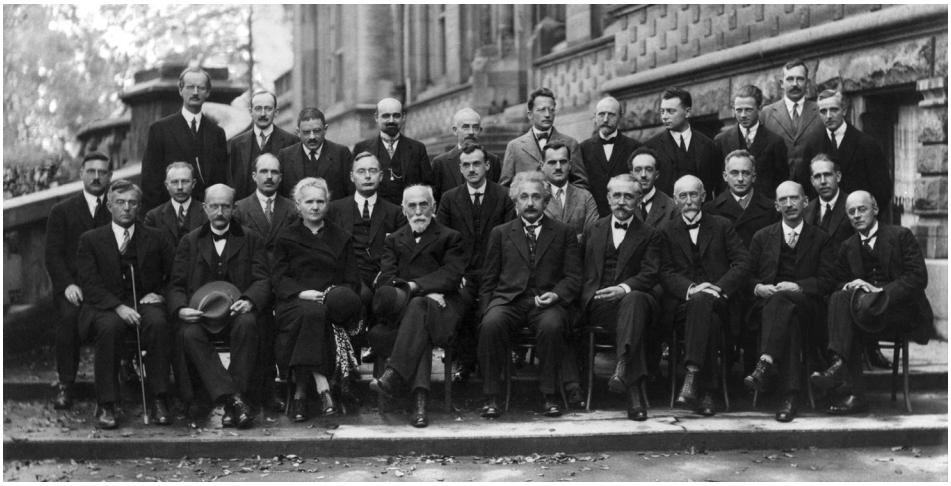
První experimenty, které vedly na porušení Bellových nerovností, byly uskutečněny už v roce 1972, nicméně fyzikální komunita je nepovažovala za průkazné. Přesvědčivý důkaz neplatnosti Bellových nerovností a tedy nemožnosti existence skrytých parametrů v kvantové teorii podala až skupina Alaina Aspecta ve francouzském Orsay v experimentech prováděných v letech 1976 až 1983. V těchto experimentech excitovali za pomoci laserových impulzů atomy vápníku. Excitovaný elektron se vracel na původní hladinu přes mezistav, při prvním přechodu vyzářil foton s vlnovou délkou 551,3 nm, při druhém foton s vlnovou délkou 422,7 nm. Jak excitovaný, tak původní stav měly celkový moment hybnosti nulový, zatímco mezistav měl celkový moment hybnosti nenulový, což vedlo k určité vazbě mezi polarizacemi obou vyslaných fotonů. Situace

nebyla tak jednoduchá jako v našem ukázkovém příkladu, kdy polarizace byly navzájem opačné, ale princip experimentů byl stejný. Ukázalo se, že Bellovy nerovnosti neplatí a náhodné výsledky experimentů nejsou důsledkem skrytých parametrů, ale základní vlastností přírody samotné.

2.9.5 A co dál?

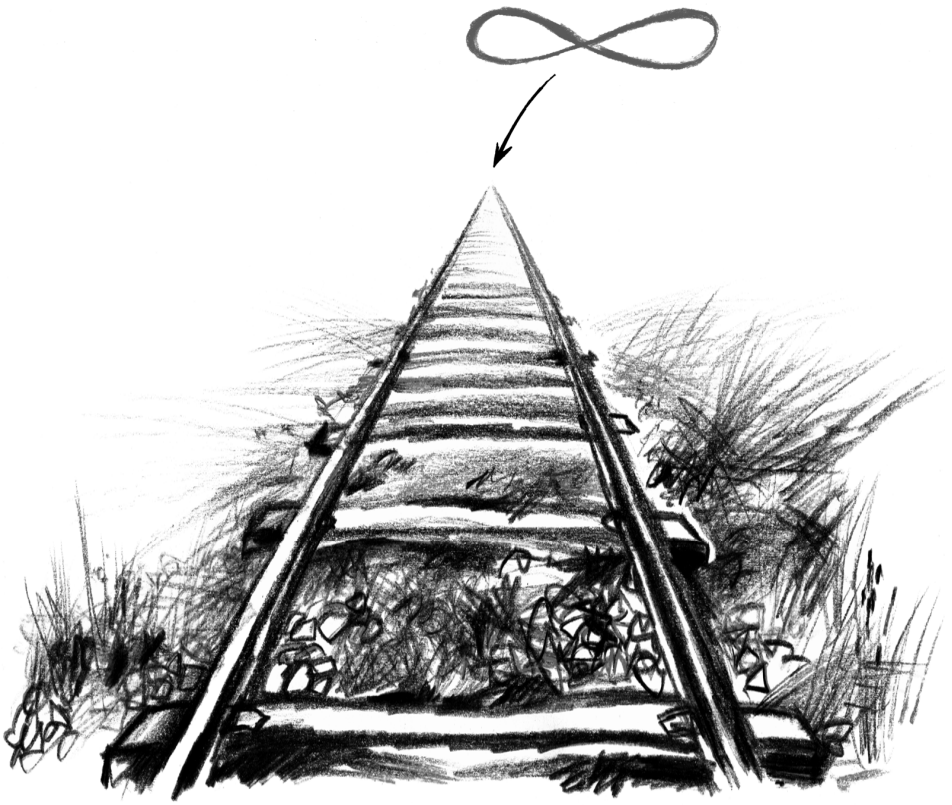
Náš přehled kvantové teorie na tomto místě končí. Šlo o výběr základních principů a jevů, na kterých může hloubavý čtenář dále stavět. Kvantová teorie je jednou z nejúspěšnějších teorií vybudovaných lidstvem. Standardní model elementárních částic a sil se stal přesným kvantovým popisem dějů podléhajících elektromagnetické, silné a slabé interakci. Kvantová elektrodynamika odstartovala elektronickou revoluci, s jejímiž výsledky se setkáváme na každém kroku. V posledních desetiletích zasahuje kvantová teorie čím dál tím častěji také do našich představ o ukládání a zpracování informací. Kvantové šifrování se stalo komerční záležitostí, kvantová teleportace je ve stádiu úspěšných experimentů a kvantové počítače jsou jasně formulovanou úlohou, která čeká na dostatečné technologické zázemí. Bez kvantové teorie se neobejde ani poznávání vesmíru. Látka v bílých trpaslících a v neutronových hvězdách se řídí kvantovými zákony, a v počátcích velkého třesku, za extrémních hustot a teplot byly kvantové vlastnosti mikrosvěta hlavním faktorem ovlivňujícím další vývoj vesmíru.

Základy kvantové teorie probrané v této kapitole a některé modelové výpočty by snad měly čtenáři umožnit další studium specializovaných odvětví, která jsou za hranicemi možností této učebnice. S kvantovými procesy ovlivňujícími chování velkého počtu částic se ještě setkáme ve statistické fyzice v navazující učebnici [1].



Obr. 2.47. Zakladatelé kvantové teorie na konferenci v Solvay (1927). První řada: I. Langmuir, M. Planck, M. Curie, H. Lorentz, A. Einstein, P. Lanagevin, C. Guye, C. Wilson, O. W. Richardson. Druhá řada: P. Debye, M. Knudsen, W. Bragg, H. Kramers, P. Dirac, A. Compton, L. Broglie, M. Born, N. Bohr. Třetí řada: A. Piccard, E. Henriot, P. Ehrenfest, E. Herzen, T. Donder, E. Schrödinger, E. Verschaffelt, W. Pauli, W. Heisenberg, R. H. Fowler, L. Brillouin.

3. Matematika pro fyziku



3.1 Einsteinova sumační konvence

3.1.1 Zavedení sumační konvence

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

$$a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_N b_N = \sum_{k=1}^{N} a_k b_k = a_k b_k \,. \tag{3.1}$$

Na označení sčítacího indexu nezáleží, můžeme ho libovolně měnit:

$$a_k b_k = a_l b_l = a_n b_n = a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_N b_N \,. \tag{3.2}$$

V následujících ukázkách si pečlivě prohlédněte používání sumační konvence. Současně si přitom zopakujete některé jednoduché pojmy z matematiky. Záměrně používáme v různých ukázkách různé označení sčítacích indexů, jedině tak si na tuto užitečnou symboliku zvyknete.

3.1.2 Jednoduché příklady

Skalární součin dvou vektorů

$$\begin{aligned} &\mathbf{a} = (a_1, a_2, \ldots, a_N)\,; \quad \mathbf{b} = (b_1, b_2, \ldots, b_N)\,; \\ &\mathbf{a} \cdot \mathbf{b} \equiv a_1 b_1 + a_2 b_2 + \cdots + a_N b_N = a_j b_j \,. \end{aligned} \tag{3.3}$$

Divergence

$$\begin{aligned} &\mathbf{T} \;\equiv\; (T_1\,,\, T_2\,,\, T_3)\;; \\ &\operatorname{div} \mathbf{T} = \frac{\partial T_1}{\partial x_1} + \frac{\partial T_2}{\partial x_2} + \frac{\partial T_3}{\partial x_3} = \frac{\partial T_i}{\partial x_i} \,. \end{aligned} \tag{3.4}$$

Maticové násobení

$$\begin{aligned} &\mathbf{A} \;=\; \left\{ a_{i\,j} \right\}\;; \qquad \mathbf{B} \;=\; \left\{ b_{i\,j} \right\}; \\ &\left\{ \mathbf{A} \cdot \mathbf{B} \right\}_{i\,j} \;=\; \sum_{k=1}^{N} a_{\,i\,k}\, b_{k\,j} \;=\; a_{\,i\,k}\, b_{k\,j} \,. \end{aligned} \tag{3.5}$$

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

Malý konečný přírůstek funkce jedné proměnné

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

► $$f(q): \quad q \to f\,; \qquad \text{potom } \Delta f \cong \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}q}\Delta q\,. \tag{3.6}$$

V matematice platnost této aproximace přesně definuje tzv. Lagrangeova věta o přírůstku. Ukažme si její použití na příkladu koule o poloměru r, jejíž objem je

$$V(r) = \frac{4}{3}\pi r^3\,. \tag{3.7}$$

Poloměr koule změníme o Δr. Její objem se pro malá Δr přibližně změní o hodnotu

$$\Delta V \cong \frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\Delta r = 4\pi r^2 \Delta r\,. \tag{3.8}$$

Interpretace je zřejmá: $4\pi r^2$ je plocha koule o poloměru r a Δr je tloušťka této plochy. Součin představuje změnu objemu koule.

Malý konečný přírůstek funkce více proměnných

Mějme funkci více reálných proměnných $f(q_1, q_2, \ldots q_N)$, která hodnotám **q** přiřadí hodnotu f:

$$f(q_1,\ldots,q_N): \qquad q_1,\ldots,q_N \to f\,. \tag{3.9}$$

Lagrangeovu větu o přírůstku této funkce můžeme jednoduše zapsat (bez členů vyššího řádu)

► $$\Delta f \cong \frac{\partial f}{\partial q_1}\Delta q_1 + \frac{\partial f}{\partial q_2}\Delta q_2 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial q_N}\Delta q_N = \frac{\partial f}{\partial q_k}\Delta q_k \tag{3.10}$$

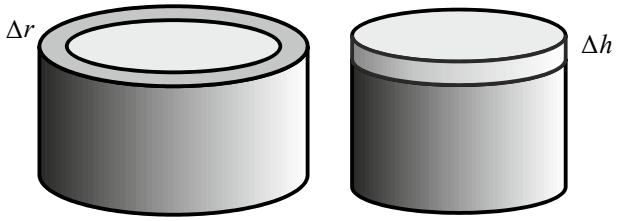
V zápisu jsme na závěr použili Einsteinovu sumační konvenci. Ukažme si, jak tato věta funguje na změně objemu válce. Samotný objem válce je funkcí dvou proměnných (poloměru podstavy a výšky):

$$V(r,h) = \pi r^2 h\,. \tag{3.11}$$

Pro přírůstek snadno spočítáme

$$\Delta V \cong \frac{\partial f}{\partial q_k}\Delta q_k = \frac{\partial V}{\partial r}\Delta r + \frac{\partial V}{\partial h}\Delta h = 2\pi r h \Delta r + \pi r^2 \Delta h\,. \tag{3.12}$$

První příspěvek je od změny poloměru podstavy, druhý od změny výšky válce.



Obr. 3.1: K větě o přírůstku

Infinitezimální (nekonečně malý) přírůstek funkce více proměnných

Zavedeme-li infinitezimální změny namísto malých přírůstků, dostaneme tzv. první diferenciál funkce

$$\mathrm{d}f = \frac{\partial f}{\partial q_1}\cdot \mathrm{d}q_1 + \cdots + \frac{\partial f}{\partial q_N}\cdot \mathrm{d}q_N = \frac{\partial f}{\partial q_j}\cdot \mathrm{d}q_j \,. \tag{3.13}$$

Poznámka: předchozí vztahy lze precizněji formulovat pomocí Lagrangeovy věty o přírůstku a věty o prvním diferenciálu. Pro naše účely však postačí si zapamatovat, že Lagrangeova věta se týká konečného přírůstku a jde o vztah přibližný, zatímco první diferenciál se týká nekonečně malého přírůstku a jde o vztah přesný.

Derivace složené funkce:

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

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

$$\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial q_1}\cdot\frac{\mathrm{d}q_1}{\mathrm{d}t} + \cdots + \frac{\partial f}{\partial q_N}\cdot\frac{\mathrm{d}q_N}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial q_k}\cdot\frac{\mathrm{d}q_k}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial f}{\partial q_k}\cdot\dot{q}_k \,. \tag{3.14}$$

Jak první diferenciál, tak derivaci složené funkce si ukážeme na transformačním vztahu mezi polárními a kartézskými souřadnicemi:

$$\begin{aligned} x(t) &= r(t)\cos\varphi(t)\,, \\ y(t) &= r(t)\sin\varphi(t)\,; \end{aligned} \tag{3.15}$$

$$\begin{aligned} \mathrm{d}x &= \frac{\partial x}{\partial r}\mathrm{d}r + \frac{\partial x}{\partial \varphi}\mathrm{d}\varphi = \cos\varphi\,\mathrm{d}r - r\,\sin\varphi\;\mathrm{d}\varphi\,, \\ \mathrm{d}y &= \frac{\partial y}{\partial r}\mathrm{d}r + \frac{\partial y}{\partial \varphi}\mathrm{d}\varphi = \sin\varphi\,\mathrm{d}r + r\;\cos\varphi\,\mathrm{d}\varphi\,; \end{aligned} \tag{3.16}$$

$$\begin{aligned} \dot{x} &= \dot{r}\cos\varphi - r\,\dot{\varphi}\sin\varphi, \\ \dot{y} &= \dot{r}\sin\varphi + r\,\dot{\varphi}\cos\varphi\,. \end{aligned} \tag{3.17}$$

K symbolice v kartézských souřadnicích

Věnujme se nyní různým způsobům zápisu jednoho a téhož výrazu. Není důležité váhat nad volbou způsobu zápisu, ale vědět, co zápisy znamenají. Například vektor se v tištěných publikacích značí tučným řezem písma, ale na tabuli, kde to není možné, se používá šipka nad symbolem:

$$\mathbf{x} \equiv \vec{x}\,; \qquad \mathbf{a}\cdot\mathbf{b} \equiv \vec{a}\cdot\vec{b}\,. \tag{3.18}$$

Pro $f = f(\mathbf{x}, \mathbf{v})$ zapisujeme gradienty (prostorový a rychlostní) také mnoha způsoby:

$$\nabla f \equiv \nabla_{\mathbf{x}} f \equiv \frac{\partial f}{\partial \vec{x}} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{x}} \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right);$$
$$\nabla_{\mathbf{v}} f \equiv \frac{\partial f}{\partial \vec{v}} \equiv \frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} \equiv \left(\frac{\partial f}{\partial v_x}, \frac{\partial f}{\partial v_y}, \frac{\partial f}{\partial v_z}\right). \tag{3.19}$$

Prostorový gradient se často zapisuje jen v komponentách:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} \equiv \partial_k f \equiv f_{,k} \,. \tag{3.20}$$

Druhou mocninu velikosti vektoru, například rychlosti lze také zapsat mnoha způsoby:

$$v^2 = \mathbf{v}^2 = \mathbf{v}\cdot\mathbf{v} = v_j v_j = v_1^2 + v_2^2 + v_3^2 \,. \tag{3.21}$$

Nalezněme nyní rychlostní gradient výrazu $f(\mathbf{v}) = \mathbf{v}^2$:

$$\frac{\partial f}{\partial v_i} = \frac{\partial}{\partial v_i} v_j v_j = \delta_{ji} v_j + v_j \delta_{ji} = v_i + v_i = 2 v_i \,. \tag{3.22}$$

Často se volí rychlejší, symbolický zápis (jako bychom derivovali podle symbolu $\mathbf{v}$):

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{v}} = \frac{\partial \mathbf{v}^2}{\partial \mathbf{v}} = 2\mathbf{v} \,. \tag{3.23}$$

Poznámka 1: Operace gradient míří ve směru největšího nárůstu dané funkce a je kolmá na izoplochy (plochy konstantní hodnoty funkce). To je patrné z rozpisu.

$$f(\mathbf{x}) = \text{const} \quad \Rightarrow \quad \frac{\partial f}{\partial x_k} \mathrm{d}x_k = 0 \quad \Rightarrow \quad \nabla f \cdot \mathrm{d}\mathbf{x} = 0 \,. \tag{3.24}$$

Vektor $\mathrm{d}\mathbf{x}$ míří v izoploše, ∇f je na něho kolmý, protože skalární součin je nulový.

Poznámka 2: Operace gradient se nemusí týkat jen prostorových proměnných, jak je vidět z posledních příkladů, může jít také o prostor rychlostí, případně dalších proměnných. S detailním použitím tohoto operátoru a s historií jeho zavedení v matematice a ve fyzice se seznámíme v kapitole 3.5 Od gradientu k helicitě.

Poznámka 3: Skalární součin operátoru nabla s vektorovým polem se nazývá divergence pole; div $\mathbf{K} \equiv \nabla\cdot\mathbf{K} = \partial K_k/\partial x_k$. Jde o jednoduchý test, zda má pole v daném bodě zdroj. Pro div $\mathbf{K} > 0$ pole v daném bodě vyvěrá, pro div $\mathbf{K} < 0$ pole v daném místě mizí a pro div $\mathbf{K} = 0$ pole daným bodem jen prochází.

Poznámka 4: Vektorový součin operátoru nabla s vektorovým polem se nazývá rotace pole; rot $\mathbf{K} \equiv \nabla\times\mathbf{K}$. Jde o jednoduchý test, zda je v daném místě střed víru. Musí jít o vektorový test – tedy tři testy, které souvisí s pohledem na vír ze směru souřadnicových os. Pokud je jediná složka rot $\mathbf{K}$ nenulová, je v daném místě střed víru a jeho osa rotace má směr vektoru rot $\mathbf{K}$

Poznámka 5: K detekci šroubovic poslouží skalární součin pole s jeho rotací, detaily všech těchto operací nalezne čtenář v kapitole 3.5 Od gradientu k helicitě.

3.1.3 Délkový element

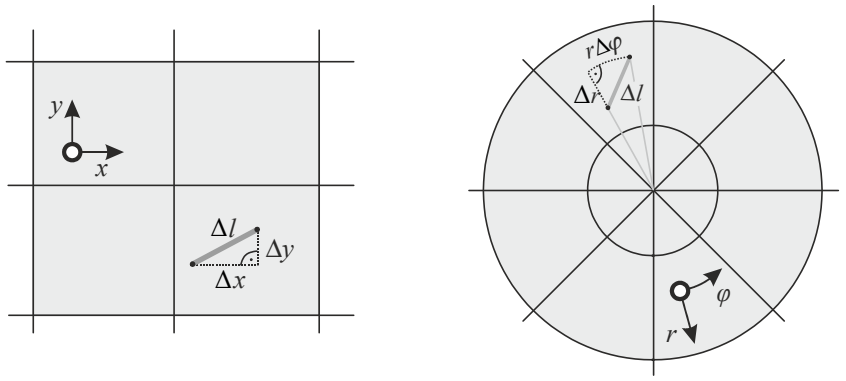
Délkovým elementem nazýváme kvadrát infinitezimální vzdálenosti dvou bodů. V kartézském souřadnicovém systému platí Pythagorova věta a je jedno, zda je vzdálenost konečná nebo infinitezimální, v obou případech platí přesný vztah:

$$\begin{aligned} \Delta l^2 &= \Delta x^2 + \Delta y^2 \ ; \\ \mathrm{d}l^2 &= \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 \ . \end{aligned} \tag{3.25}$$

V polární souřadnicové soustavě je situace jiná. Pro konečné přírůstky platí jen přibližný vztah, neboť jsme jednu odvěsnu pravoúhlého trojúhelníku nahradili obloukem (viz obr. 3.2):

$$\begin{aligned} \Delta l_{\mathrm{pol}}^2 &\doteq \Delta r^2 + r^2 \Delta\varphi^2 \ ; \\ \mathrm{d}l_{\mathrm{pol}}^2 &= \mathrm{d}r^2 + r^2 \mathrm{d}\varphi^2 \ ; \end{aligned} \tag{3.26}$$

Pro infinitezimálně malé vzdálenosti přejdou přibližné rovnosti opět v přesné rovnosti.



Obr. 3.2: Délkový element v kartézské a polární souřadnicové soustavě

V ortogonálních systémech (souřadnicové sítě jsou vzájemně kolmé) lze délkový element vyjádřit obecně vztahem

► $$\mathrm{d}l^2 = g_{11}\mathrm{d}q_1^2 + g_{22}\mathrm{d}q_2^2 + g_{33}\mathrm{d}q_3^2 \ , \tag{3.27}$$

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

► $$\mathrm{d}l^2 = g_{ij}\mathrm{d}q_i\mathrm{d}q_j \ . \tag{3.28}$$

Poznamenejme, že platí sumační konvence. Koeficienty g_{ij} se nazývají *metrika* nebo *metrický tenzor*. Při jejich určování lze postupovat buď geometricky (viz horní obrázek) nebo z diferenciálů transformačních vztahů pro souřadnice. Pro polární souřadnice jde o vztahy (3.16). Analogicky postupujeme i pro další souřadnicové systémy:

Polární souřadnice:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi \\ y &= r\sin\varphi \end{aligned} \quad ; \qquad \mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\varphi^2 \,. \tag{3.29}$$

Sférické souřadnice:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi\sin\theta \\ y &= r\sin\varphi\sin\theta \\ z &= r\cos\theta \end{aligned} \quad ; \qquad \mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\theta^2 + r^2\sin^2\theta\,\mathrm{d}\varphi^2 \,. \tag{3.30}$$

Válcové souřadnice:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi \\ y &= r\sin\varphi \\ z &= z \end{aligned} \quad ; \qquad \mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2\mathrm{d}\varphi^2 + \mathrm{d}z^2 \,. \tag{3.31}$$

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

$$T(\mathbf{q},\dot{\mathbf{q}}) = \frac{1}{2}\, m\frac{\mathrm{d}l^2}{\mathrm{d}t^2} = \frac{1}{2} m\, g_{ij}\, \frac{\mathrm{d}q_i\,\mathrm{d}q_j}{d\,t^2} = \frac{1}{2}\, m\, g_{ij}\ \dot{q}_i\,\dot{q}_j \,. \tag{3.32}$$

Speciálně pro předchozí souřadnice tedy platí:

► (3.33)

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

Polární $\quad T(r,\dot{r},\dot{\varphi}) = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2)$

Sférické $\quad T(r,\theta,\dot{r},\dot{\varphi},\dot{\theta}) = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\theta}^2 + r^2\sin^2\theta\,\dot{\varphi}^2)$

Válcové $\quad T(r,\dot{r},\dot{\varphi},\dot{z}) = \frac{1}{2} m(\dot{r}^2 + r^2\dot{\varphi}^2 + \dot{z}^2)$

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

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

3.2 Komplexní čísla a funkce

Komplexní čísla začali poprvé používat italští matematikové v 17. století při řešení algebraických rovnic. Zlatou érou komplexních čísel bylo století osmnácté, kdy se stala nedílnou součástí matematických a fyzikálních postupů. K jejich slávě nejvíce přispěli francouzský matematik Abraham de Moivre (1667–1754), švýcarský matematik Johann Bernoulli (1667–1748) a jeho žák Leonhard Euler (1707–1803), který zavedl známý symbol „i“ pro $\sqrt{(-1)}$ a začal komplexní čísla interpretovat jako body roviny, a samozřejmě německý matematik Karl Fridrich Gauss (1777–1855), který toto pojetí dovedl k dokonalosti. K zobecnění komplexních čísel na *kvaterniony* (využívající čtyři osy) nejvíce přispěl irský matematik William Rowan Hamilton (1805–1865).

3.2.1 Reprezentace komplexního čísla

Algebraický, kartézský a polární tvar

Komplexní čísla nejčastěji chápeme jako rozšíření reálné osy o násobky imaginární jednotky i, jejíž základní vlastnost je

$$\mathrm{i}^2 = -1\,, \tag{3.34}$$

Algebraickým tvarem komplexního čísla proto je

$$f = x + \mathrm{i}\,y\,. \tag{3.35}$$

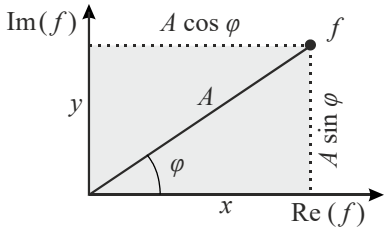
Násobení dvou komplexních čísel v algebraickém tvaru vede na poněkud nepřehledný výraz

$$f_1 f_2 = (x_1 + \mathrm{i}\,y_1)(x_2 + \mathrm{i}\,y_2) = (x_1 x_2 - y_1 y_2) + \mathrm{i}\,(x_1 y_2 + y_1 x_2)\,. \tag{3.36}$$

Komplexní číslo vždy reprezentuje dvojici reálních čísel, kterou lze interpretovat jako body roviny. Z nich můžeme komplexní číslo kdykoli složit nebo naopak z komplexního čísla obě souřadnice oddělit. Můžeme proto psát

$$f = x + \mathrm{i}\,y = (x, y)\,. \tag{3.37}$$

Pokud v rovině použijeme polární souřadnice, můžeme komplexní číslo reprezentovat jinou dvojicí – vzdáleností od počátku A (amplitudou) a azimutem φ (fází):



Obr. 3.3: Kartézská reprezentace komplexního čísla

V tuto chvíli už tedy máme tři reprezentace komplexního čísla: algebraickou, kartézskou a polární:

$$f = x + \mathrm{i}\, y = (x, y) = [A, \varphi]\,. \tag{3.38}$$

V každém případě komplexní číslo znamená vždy dvojici čísel reálných. Pokud známe polární souřadnice (amplitudu a fázi), snadno určíme kartézské souřadnice (reálnou a imaginární část):

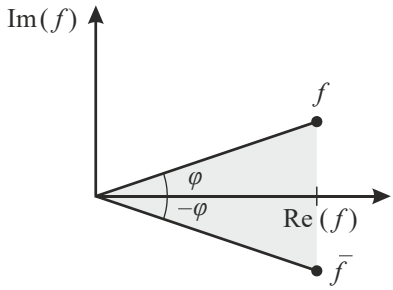
► $$\begin{aligned} x &= A\cos\varphi, \\ y &= A\sin\varphi. \end{aligned} \tag{3.39}$$

Opačná transformace je odvoditelná z Pythagorovy věty a definice tangenty úhlu:

► $$\begin{aligned} A &= \sqrt{x^2 + y^2}\,, \\ \varphi &= \operatorname{atg}(y/x). \end{aligned} \tag{3.40}$$

Komplexní sdružení

Zrcadlením nazýváme transformaci, při níž komplexní číslo symetricky zrcadlíme kolem reálné (vodorovné) osy:



Obr. 3.4: Zrcadlení aneb komplexní sdružení

Při této transformaci se změní imaginární část čísla Im f na −Im f. Výsledek zrcadlení nazýváme *komplexně sdružené číslo*, označujeme ho pruhem nebo hvězdičkou:

► $$\overline{f} = f^* = x - \mathrm{i}\, y\,. \tag{3.41}$$

Komplexní sdružení je užitečná transformace, můžeme pomocí ní snadno nalézt amplitudu komplexního čísla, neboť platí

► $$\overline{f}\, f = (x - \mathrm{i}\, y)(x + \mathrm{i}\, y) = x^2 + y^2 = A^2\,. \tag{3.42}$$

Za pomoci komplexního sdružení snadno také vyjádříme reálnou a imaginární část:

► $$\operatorname{Re} f = \frac{1}{2}\left(f + \overline{f}\right), \tag{3.43}$$

► $$\operatorname{Im} f = \frac{1}{2\mathrm{i}}\left(f - \overline{f}\right), \tag{3.44}$$

3.2.2 Goniometrický tvar

Komplexní číslo lze zapsat za pomoci exponenciální funkce. Pojďme nejprve tuto funkci definovat jako nekonečnou řadu. Hledejme funkci, jejíž derivace je rovna funkci samotné:

$$F'(x) = F(x) \tag{3.45}$$

Pak i druhá, třetí a libovolná derivace bude rovna původní funkci. Zkrátka tato funkce bude imunní vzhledem k derivování. Hledejme takovou zvláštní funkci jako nekonečnou řadu

$$F(x) = c_0 + c_1 x + c_2 x^2 + c_3 x^3 + c_4 x^4 + c_5 x^5 + \cdots . \tag{3.46}$$

Její derivaci provedeme člen po členu:

$$F'(x) = c_1 + 2c_2 x + 3c_3 x^2 + 4c_4 x^3 + 5c_5 x^4 + \cdots . \tag{3.47}$$

Pokud mají být obě poslední funkce stejné (funkce je rovna své první derivaci), musí platit:

$$c_1 = c_0 , \qquad 2c_2 = c_1 , \qquad 3c_3 = c_2 , \qquad 4c_4 = c_3 , \qquad 5c_5 = c_4 , \quad \cdots \tag{3.48}$$

Pokud zvolíme konstantu c_0, můžeme dopočítat všechny koeficienty rozvoje. Volba $c_0 = 0$ povede na nulovou funkci, jakékoli nenulové číslo nám vygeneruje námi hledanou funkci. Hodnota c_0 je nepodstatná a bude jen násobícím faktorem této funkce. Proto zvolíme $c_0 = 1$:

$$c_0 = 1 , \quad c_1 = 1 , \quad c_2 = \frac{1}{2} , \quad c_3 = \frac{1}{3 \cdot 2} , \quad c_4 = \frac{1}{4 \cdot 3 \cdot 2} , \quad c_5 = \frac{1}{5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2} \cdots \tag{3.49}$$

Celkem snadno odhadneme obecnou formulku:

$$c_n = \frac{1}{n!} . \tag{3.50}$$

Nalezená funkce se nazývá exponenciála a její rozvoj tedy je

$$\exp(x) = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots . \tag{3.51}$$

V nulovém argumentu má námi nalezená funkce hodnotu 1. V argumentu 1 je výsledkem tzv. Eulerovo číslo:

$$\exp(0) = 1 , \tag{3.52}$$

$$\exp(1) = 1 + 1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{3!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{5!} + \cdots = 2,71828183\ldots = \mathrm{e} . \tag{3.53}$$

Jiný postup nalezení exponenciály

Funkci „imunní“ vůči derivování můžeme také nalézt z diferenciální rovnice

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}x} = F \quad \Rightarrow \quad \frac{\mathrm{d}F}{F} = \mathrm{d}x \quad \Rightarrow \quad \ln F = x + C \quad \Rightarrow \quad F(x) = K\,\mathrm{e}^x . \tag{3.54}$$

Vzhledem k tomu, že má platit $F(0) = 1$, musí být $K = 1$. Vidíme tedy, že námi nalezená řada je exponenciální funkcí se základem rovným Eulerově číslu:

$$\exp(x) = \mathrm{e}^x = 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots . \tag{3.55}$$

V matematice je velmi časté, že funkce jsou definovány za pomoci nekonečných řad a většinou se z obdobných řad počítají i jejich funkční hodnoty (například ve vaší kalkulačce). Pokud z rozvoje exponenciály vybereme jen sudé mocniny, dostaneme hyperbolický kosinus (vzpomeňte si, že v nule má hodnotu 1 a je otočen vzhůru, podobně jako parabola). Pokud vybereme jen sudé mocniny a budeme u nich střídat znaménka, dostaneme obyčejný kosinus. Střídající se znaménka budou polynomy tvořící řadu otáčet střídavě dolů a nahoru, tím získáme periodickou funkci. Pokud vybereme liché mocniny, funkce se nazývá sinus hyperbolický a pokud vybereme liché mocniny a budeme u nich střídat znaménka, získáme normální sinus:

$$\begin{aligned}
\exp x &\equiv 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots , \\
\operatorname{ch} x &\equiv 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} + \cdots , \\
\cos x &\equiv 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} \pm \cdots , \\
\operatorname{sh} x &\equiv x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} \pm \cdots , \\
\sin x &\equiv x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} - \frac{x^9}{9!} \pm \cdots
\end{aligned} \tag{3.56}$$

To, že takto definované funkce splývají s jejich klasickou definicí z trigonometrie, lze dokázat Taylorovým rozvojem funkcí. Mezi funkcemi z tabulky existuje řada zajímavých vztahů, k nejznámějším patří Eulerův vztah. Zkusme nalézt exponenciálu s ryze imaginárním argumentem (za pomoci její řady):

$$\begin{aligned}
\exp(\mathrm{i}\varphi) &= 1 + (\mathrm{i}\varphi) + \frac{(\mathrm{i}\varphi)^2}{2!} + \frac{(\mathrm{i}\varphi)^3}{3!} + \frac{(\mathrm{i}\varphi)^4}{4!} + \frac{(\mathrm{i}\varphi)^5}{5!} + \cdots = \\
&= 1 + \mathrm{i}x - \frac{\varphi^2}{2!} - \mathrm{i}\frac{\varphi^3}{3!} + \frac{\varphi^4}{4!} + \mathrm{i}\frac{\varphi^5}{5!} + \cdots = \\
&= \left(1 - \frac{\varphi^2}{2!} + \frac{\varphi^4}{4!} \pm \cdots\right) + \mathrm{i}\left(x - \frac{\varphi^3}{3!} + \frac{\varphi^5}{5!} \mp \cdots\right).
\end{aligned}$$

V první závorce je řada pro kosinus, ve druhé řada pro sinus. Celkově tedy platí:

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = \cos\varphi + \mathrm{i}\sin\varphi . \tag{3.57}$$

Eulerův vztah je nesmírně užitečný při vyjadřování komplexních čísel:

$$f = x + \mathrm{i}y = A\cos\varphi + \mathrm{i}\,A\sin\varphi = A\left(\cos\varphi + \mathrm{i}\sin\varphi\right) = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}. \tag{3.58}$$

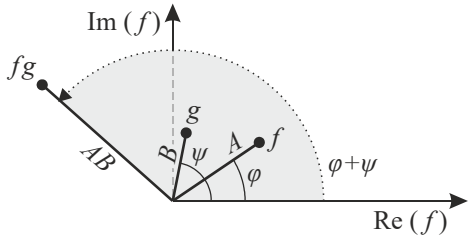
Jde o tzv. goniometrickou interpretaci komplexního čísla. Komplexní číslo už tedy umíme zapsat čtyřmi způsoby:

► $$f = x + \mathrm{i}\,y = (x, y) = [A, \varphi] = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}. \tag{3.59}$$

V goniometrickém tvaru můžeme snadno interpretovat násobení dvou komplexních čísel:

$$f\,g = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,B\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi} = AB\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi+\psi)}. \tag{3.60}$$

Součin dvou komplexních čísel má amplitudu rovnou součinu amplitud a fázi rovnou součtu fází původních čísel:



Obr. 3.5: Grafická reprezentace násobení dvou komplexních čísel

Velmi zvláštní pozici má číslo ve tvaru

$$g = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}. \tag{3.61}$$

Amplituda tohoto čísla je rovná jedné, tedy číslo leží na jednotkové kružnici v Gaussově rovině. Tak se nazývá rovina, v níž na kartézské souřadnice vynášíme reálnou a imaginární část komplexního čísla. Pokud tímto číslem (tzv. komplexní jednotkou) vynásobíme jakékoli jiné komplexní číslo, je výsledkem jeho otočení o úhel α v kladném matematickém směru (proti směru hodinových ručiček):

$$f\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} = A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi+\alpha)}. \tag{3.62}$$

V goniometrickém tvaru lze komplexní čísla snadno násobit i otáčet kolem počátku souřadnicové soustavy. Také lze velmi elegantně odvozovat různé vztahy, jako příklad uveďme jeden ze součtových vzorců:

$$\cos(\alpha+\beta) = \mathrm{Re}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\alpha+\beta)}\right) = \mathrm{Re}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta}\right) =$$

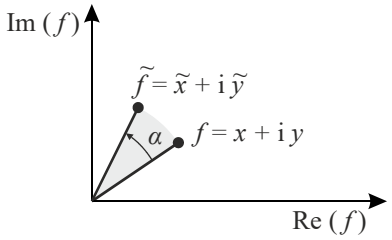
$$= \mathrm{Re}\left[\left(\cos\alpha + \mathrm{i}\sin\alpha\right)\left(\cos\beta + \mathrm{i}\sin\beta\right)\right] =$$

$$= \cos\alpha\cos\beta - \sin\alpha\sin\beta$$

Analogicky odvodíme různé další vztahy, postačí jen aplikovat Eulerův vztah (3.57). Přehled užitečných výrazů naleznete v následujícím rámečku:

$$
\begin{aligned}
&\mathrm{e}^{\mathrm{i}x} = \cos x + \mathrm{i}\sin x\,,\\
&\cos(x+y) = \cos x\cos y - \sin x\sin y\,,\\
&\sin(x+y) = \sin x\cos y + \sin y\cos x\,,\\
&\operatorname{ch} x = \frac{\mathrm{e}^{x}+\mathrm{e}^{-x}}{2}, \qquad \operatorname{sh} x = \frac{\mathrm{e}^{x}-\mathrm{e}^{-x}}{2},\\
&\cos x = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}}{2}, \quad \sin x = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}}{2\mathrm{i}},\\
&\cos(-x) = \cos x\,, \qquad \sin(-x) = -\sin x\,.
\end{aligned}
\tag{3.63}
$$

3.2.3 Rotace v rovině



Obr. 3.6: Otočení bodu v komplexní rovině

Otočení bodu v rovině můžeme za pomoci komplexních čísel zapsat velmi jednoduše

$$\tilde{f} = \tilde{x} + \mathrm{i}\,\tilde{y} = f\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha} = (x+\mathrm{i}\,y)(\cos\alpha + \mathrm{i}\sin\alpha) = (x\cos\alpha - y\sin\alpha) + \mathrm{i}(x\sin\alpha + y\cos\alpha)\,.$$

Porovnáním začátku a konce je jasné, že souřadnice pootočeného bodu jsou (oddělíme reálnou a imaginární část)

$$
\begin{aligned}
\tilde{x} &= x\cos\alpha - y\sin\alpha\,,\\
\tilde{y} &= x\sin\alpha + y\cos\alpha\,.
\end{aligned}
\tag{3.64}
$$

Pokud se nebude otáčet bod, ale souřadnicová soustava, postačí změnit úhel α na $-\alpha$. Výsledný vztah bude v maticovém tvaru

$$\begin{pmatrix}\tilde{x}\\ \tilde{y}\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha\\ -\sin\alpha & \cos\alpha\end{pmatrix}\begin{pmatrix}x\\ y\end{pmatrix}. \tag{3.65}$$

Což je typická rotační matice. Povšimněte si, že je její determinant roven jedné – to je pro rotační transformace charakteristické. Nyní tuto transformaci zapíšeme pro velmi malý úhel (nejlépe infinitezimální) Z rozvoje trigonometrických funkcí postačí ponechat jen první nenulový člen:

$$\begin{pmatrix} \tilde{x} \\ \tilde{y} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ -\alpha & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix}. \tag{3.66}$$

Infinitezimální rotační matici můžeme nyní rozdělit na jednotkovou matici a zbytek:

$$\mathbb{R}_{\text{inf}} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ -\alpha & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \alpha \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.67}$$

První matice je jednotková a se souřadnicemi nedělá nic, druhá matice zamění souřadnice (x, y) a u druhé z nich ještě otočí znaménko. Často bývá zvykem z druhé matice vytknout imaginární jednotku a celou transformaci převést do tvaru

$$\mathbb{R}_{\text{inf}} = \begin{pmatrix} 1 & \alpha \\ -\alpha & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \mathrm{i}\alpha \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.68}$$

Důvody pro tuto úpravu jsou hned dva: 1) koeficienty u matic korespondují s prvními dvěma členy rozvoje exponenciály $\exp[\mathrm{i}\alpha] = 1 + \mathrm{i}\alpha$, což bude výhodné; 2) nová matice má reálná vlastní čísla a navzájem kolmé vlastní vektory. Nazýváme ji *generátor rotace.*

► $$\mathbb{M} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.69}$$

Pro rotační transformaci v rovině tedy platí

► $$\mathbb{R}_{\text{inf}} = \mathbb{I} + \mathrm{i}\alpha\mathbb{M}\,. \tag{3.70}$$

Pojďme nyní otočení o konečný úhel sestavit z mnoha malých pootočení. Celkový úhel rozdělíme na n stejných malých úhlů ($n \to \infty$)

$$\alpha = n\frac{\alpha}{n} \tag{3.71}$$

a rotační transformaci (3.70) o úhel α/n zopakujeme $n\times$:

$$\mathbb{R} = \lim_{n\to\infty} \mathbb{R}_{\text{inf}}^{n} = \lim_{n\to\infty} \left(\mathbb{I} + \mathrm{i}\frac{\alpha}{n}\mathbb{M} \right)^{n}. \tag{3.72}$$

Vzhledem k tomu, že $(1+x/n)^n \to \mathrm{e}^x$, platí

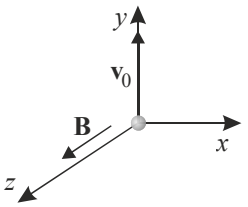
$$\mathbb{R} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\mathbb{M}}\,. \tag{3.73}$$

Takto elegantně lze vyjádřit rotační transformaci o konečný úhel α za pomoci generátoru rotace. Exponenciální funkce z matice je samozřejmě definována rozvojem (3.55), tj.

► $$\mathbb{R} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha\mathbb{M}} = \mathbb{I} + \mathrm{i}\alpha\mathbb{M} + \frac{(\mathrm{i}\alpha\mathbb{M})^2}{2!} + \frac{(\mathrm{i}\alpha\mathbb{M})^3}{3!} + \cdots. \tag{3.74}$$

Vyjádření rotace přes generátory je výhodné zejména tehdy, pokud budeme potřebovat kombinovat více rotací kolem různých os a s různými úhly. Podobný postup je také užitečný u Lorentzovy transformace (viz [1]). Pomocí generátorů této transformace lze totiž zapsat obecnou Lorentzovu transformaci.

◖ Příklad 3.1: Pohyb nabité částice v magnetickém poli



Obr. 3.7: Volba souřadnicové soustavy

V tomto příkladu si ukážeme využití komplexních čísel při řešení diferenciálních rovnic popisujících pohyb nabité částice v homogenním magnetickém poli. Předpokládejme, že jsme zvolili souřadnicový systém tak, aby homogenní magnetické pole mířilo v ose z a nabitou částici jsme vypustili rychlostí v_0 napříč magnetickým indukčním čarám (pokud by neměla nenulovou rychlost, magnetické pole by na ni nepůsobilo). Magnetické pole, počáteční podmínky a Lorentzova pohybová rovnice budou:

$$\mathbf{B} = (0, 0, B)\,, \tag{3.75}$$

$$\mathbf{r}(0) = (0, 0, 0)\,, \tag{3.76}$$

$$\mathbf{v}(0) = (0, v_0, 0)\,, \tag{3.77}$$

$$m\ddot{\mathbf{r}} = Q\dot{\mathbf{r}} \times \mathbf{B}\,. \tag{3.78}$$

Pohybovou rovnici rozepíšeme do složek. Pohyb se bude konat v rovině (x, y), proto se omezíme jen na tyto dvě složky:

$$\ddot{x} = \frac{QB}{m}\dot{y}\,, \tag{3.79}$$

$$\ddot{y} = -\frac{QB}{m}\dot{x}\,. \tag{3.80}$$

Jde o dvě obyčejné diferenciální rovnice druhého řádu, v nichž jsou hledané proměnné $x(t)$, $y(t)$ promixovány. Obě rovnice je možné řešit různými způsoby. Asi nejrychleji k cíli vede Landauův postup využívající triku s komplexními čísly: druhou rovnici vynásobíme komplexní jednotkou a sečteme s první. Kombinaci QB/m označíme ω_c. Uvidíme, že jde o frekvenci oběhu částice, která se nazývá cyklotronní frekvence.

$$\ddot{x} + \mathrm{i}\,\ddot{y} = -\mathrm{i}\,\omega_c(\dot{x} + \mathrm{i}\,\dot{y}) \tag{3.81}$$

Sečtením rovnic jsme žádnou informaci neztratili. Kdykoli můžeme oddělit reálnou a imaginární část a vrátit se k původním rovnicím. Nyní stačí zavést komplexní proměnnou $f = x + \mathrm{i}\,y$ a řešit jednoduchou rovnici

$$\ddot{f} = -\mathrm{i}\,\omega_c\,\dot{f} \tag{3.82}$$

v komplexním oboru. Po první integraci máme:

$$\dot{f} + \mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c}\, f = C_1 . \tag{3.83}$$

Nyní najdeme homogenní a partikulární řešení:

$$f(t) = C_2\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c} t} - \frac{\mathrm{i}}{\omega_\mathrm{c}} C_1 . \tag{3.84}$$

Integrační konstanty určíme z počátečních podmínek, tj. z relací

$$\begin{aligned} f(0) &= x(0) + \mathrm{i}\, y(0) = 0 , \\ \dot{f}(0) &= \dot{x}(0) + \mathrm{i}\, \dot{y}(0) = \mathrm{i}\, v_0 . \end{aligned} \tag{3.85}$$

Pouhým dosazením do nalezeného řešení zjistíme, že:

$$C_1 = \mathrm{i}\, v_0 , \qquad C_2 = -v_0 / \omega_c . \tag{3.86}$$

Celkové řešení má tedy tvar

$$f(t) \equiv x(t) + \mathrm{i} y(t) = -\frac{v_0}{\omega_\mathrm{c}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,\omega_\mathrm{c} t} + \frac{v_0}{\omega_\mathrm{c}} . \tag{3.87}$$

K řešení jsme využili komplexní čísla. Nyní je načase oddělit reálnou a imaginární část, a získat tak souřadnice pohybující se nabité částice:

$$\begin{aligned} x(t) &= R_\mathrm{L} - R_\mathrm{L} \cos \omega_\mathrm{c} t , \\ y(t) &= R_\mathrm{L} \sin \omega_\mathrm{c}\, t , \end{aligned} \tag{3.88}$$

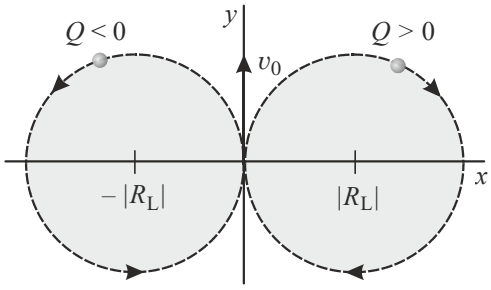
kde jsme označili

$$R_\mathrm{L} \equiv \frac{m v_0}{QB} ; \qquad \omega_\mathrm{c} \equiv \frac{QB}{m} \tag{3.89}$$

tzv. Larmorův poloměr R_L a cyklotronní frekvenci ω_c. Trajektorii získáme vyloučením času (napravo ponecháme sinus a kosinus, obě rovnice umocníme na druhou a sečteme):

$$\left(x - R_\mathrm{L}\right)^2 + y^2 = R_\mathrm{L}^2 . \tag{3.90}$$

Vidíme, že pohyb se děje po kružnici s poloměrem R_L a se středem $S = [\, R_\mathrm{L}, 0\,]$. Poloha středu závisí na znaménku náboje částice, stejně tak jako cyklotronní frekvence oběhu.



Obr. 3.8: Pohyb nabité částice v magnetickém poli

3.2.4 Kvaterniony

Vše, co o komplexních číslech víme, lze soustředit do jednoduché definiční tabulky, v níž jsou všechny možné kombinace násobení reálné části (reprezentované jednotkou 1) a imaginární části (reprezentované imaginární jednotkou i):

	1	i
1	1	i
i	i	−1

► (3.91)

Už víme, že komplexní čísla reprezentují uspořádanou dvojici reálných čísel, kterou lze ztotožnit s kartézskými souřadnicemi bodu v rovině. V polovině 19. století bylo jasné, že by se hodilo nějaké rozšíření komplexních čísel na čtyři osy, neboť většina dějů v přírodě je popisována čtveřicemi (čas a prostor, energie a hybnost, skalární a vektorový potenciál atd.). Postupně krystalizovala představa takového rozšíření. Mělo by jít o „svět" s jednou reálnou osou (odpovídající času) a třemi imaginárními osami (odpovídajícími prostoru). Takové „komplexní" číslo (*kvaternion*) by mělo tvar

$$f = s + \mathrm{i}\,x + \mathrm{j}\,y + \mathrm{k}\,z\,, \tag{3.92}$$

kde s je reálná neboli skalární část, (x, y, z) je imaginární neboli vektorová část a i, j, k jsou tři imaginární jednotky, které splňují relaci

$$\mathrm{i}^2 = \mathrm{j}^2 = \mathrm{k}^2 = -1. \tag{3.93}$$

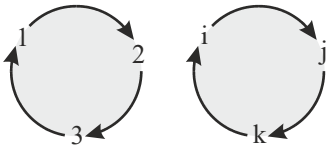
Obdobně jako u komplexních čísel by mělo být možné ze čtveřice reálných čísel kdykoli kvaternion sestavit a naopak z kvaternionu kdykoli opětovně oddělit všechny čtyři části a sestavit uspořádanou čtveřici neboli čtyřvektor, tj. přecházet mezi oběma reprezentacemi

► $$f = \begin{pmatrix} s \\ x \\ y \\ z \end{pmatrix} = s + \mathrm{i}\,x + \mathrm{j}\,y + \mathrm{k}\,z\,. \tag{3.94}$$

Za tím účelem bylo ale třeba vhodně definovat násobení mezi jednotlivými imaginárními jednotkami. Tomuto úkolu se usilovně věnoval irský matematik Willard Rowan Hamilton (1805–1865), kterého budou čtenáři znát z Hamiltonova principu, Hamiltonových rovnic a Hamiltonova operátoru. Hamilton je považován za otce kvaternionů, ale k jejich teorii přispěli i další matematici, například německý matematik Adolf Hurwitz (1859–1919), který dokázal, že smysluplné rozšíření komplexních čísel na tzv. *hyperkomplexní čísla* lze udělat jen ve čtyřech (kvaterniony) a osmi (oktoniony) dimenzích, dále britští matematici Arthur Cayley (1821–1895) a Augustus de Morgan (1806–1871), bratři Gravesovi a další. Hamilton zavedl nekomutativní násobení imaginárních jednotek, které kopíruje vektorové součiny jednotkových vektorů ve směru imaginárních os:

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\,\mathrm{j} &= \mathrm{k}, & \mathrm{j}\,\mathrm{i} &= -\mathrm{k}\,, \\ \mathrm{j}\,\mathrm{k} &= \mathrm{i}, & \mathrm{k}\,\mathrm{j} &= -\mathrm{i}\,, \\ \mathrm{k}\,\mathrm{i} &= \mathrm{j}, & \mathrm{i}\,\mathrm{k} &= -\mathrm{j}\,. \end{aligned} \tag{3.95}$$

Vztahy lze jeden z druhého získat cyklickou záměnou:



Obr. 3.9: Otočení bodu v komplexní rovině

Základní tabulka operací mezi reálnou a imaginárními jednotkami tedy je

► (3.96)

	1	i	j	k
1	1	i	j	k
i	i	−1	k	−j
j	j	−k	−1	i
k	k	j	−i	−1

Vypráví se, že Hamiltona tyto operace napadly dne 16. října 1843, když spěchal na zasedání Akademie věd a přecházel Broughamský most v Dublinu. Prý kapesním nožíkem do mostu vyryl nápis $\mathrm{i}^2 = \mathrm{j}^2 = \mathrm{k}^2 = \mathrm{ijk} = -1$. Na mostě je dnes pamětní cedulka s tímto vztahem. Jak vidíme, vandalských činů se mohou dopouštět nejen bezejmenní chuligáni, ale i ctihodní matematikové se šlechetnými pohnutkami. Pronásobíme-li dle těchto pravidel dva kvaterniony

$$f = \begin{pmatrix} \phi \\ A_x \\ A_y \\ A_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \phi \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}; \qquad g = \begin{pmatrix} \psi \\ B_x \\ B_y \\ B_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \psi \\ \mathbf{B} \end{pmatrix}, \tag{3.97}$$

dostaneme

$$\begin{aligned} fg &= (\phi + \mathrm{i}\,A_x + \mathrm{j}\,A_y + \mathrm{k}\,A_z)(\psi + \mathrm{i}\,B_x + \mathrm{j}\,B_y + \mathrm{k}\,B_z) = \cdots \\ &= \left(\phi\psi - A_x B_x - A_y B_y - A_z B_z\right) + \\ &+ \mathrm{i}\left(\phi B_x + \psi A_x + A_y B_z - A_z B_y\right) + \\ &+ \mathrm{j}\left(\phi B_y + \psi A_y + A_z B_x - A_x B_z\right) + \\ &+ \mathrm{k}\left(\phi B_z + \psi A_z + A_x B_y - A_y B_x\right). \end{aligned} \tag{3.98}$$

Výsledek můžeme zapsat v kompaktnějším tvaru

$$f\,g = \begin{pmatrix} \phi\psi - \mathbf{A}\cdot\mathbf{B} \\ \phi\mathbf{B} + \psi\mathbf{A} + \mathbf{A}\times\mathbf{B} \end{pmatrix} \tag{3.99}$$

Pro ryze reálné kvaterniony (chybí u nich imaginární, tj. vektorová část) platí

$$f\,g = \phi\psi \tag{3.100}$$

a násobení kvaternionů se redukuje na násobení dvou reálných čísel. Pro ryze imaginární kvaterniony (mají nulovou skalární část) pak máme

$$fg = \begin{pmatrix} -\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} \\ \mathbf{A}\times\mathbf{B} \end{pmatrix}, \tag{3.101}$$

tedy ve skalární části se objeví záporně vzatý skalární součin a ve vektorové části vektorový součin. Představte si, že vektor **A** je naznačenou operací gradientu, tj. $\mathbf{A} = \boldsymbol{\nabla}$, potom se ve vztahu (3.101) objeví ve skalární části přirozeným způsobem divergence a ve vektorové rotace pole **B**. Vlastnosti kvaternionů dobře korespondují se skalárními a vektorovými součiny při popisu elektromagnetického pole, proto je James Clerk Maxwell v roce 1873 použil při závěrečné formulaci svých rovnic. Vektory chápal jako ryze imaginární kvaterniony (jen s vektorovou částí) a skaláry jako ryze reálné kvateriony (jen se skalární částí). Například vektor **A** a gradient můžeme chápat jako ryze imaginární kvaterniony

$$\mathcal{A} = \mathrm{i}A_x + \mathrm{j}A_y + \mathrm{k}A_z = \begin{pmatrix} 0 \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}; \qquad \nabla = \mathrm{i}\partial_x + \mathrm{j}\partial_y + \mathrm{k}\partial_z = \begin{pmatrix} 0 \\ \partial/\partial\mathbf{x} \end{pmatrix} \tag{3.102}$$

Podobně jako u komplexního čísla zavádíme reálnou a imaginární část, můžeme u kvaternionu zavést skalární a vektorovou část:

► $$f = \begin{pmatrix} \phi \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}; \qquad \mathrm{S}.f = \phi; \qquad \mathrm{V}.f = \mathbf{A}. \tag{3.103}$$

Nyní můžeme divergenci a rotaci pole zapsat jako příslušné části součinu dvou kvaternionů:

$$\operatorname{div}\mathbf{A} = -\mathrm{S}.\nabla\mathcal{A}; \qquad \operatorname{rot}\mathbf{A} = \mathrm{V}.\nabla\mathcal{A} \tag{3.104}$$

V závěrečné tabulce je nalevo historický kvaternionový zápis některých Maxwellových rovnic z jeho díla „*A Treatise on Electricity and Magnetism*“ z roku 1873 (II. díl, strana 257 a dále) a napravo je dnešní notace:

$\mathcal{B} = \mathrm{V}.\nabla\mathcal{A}$	$\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{A}$
$\mathcal{E} = -\dot{\mathcal{A}} - \nabla\psi$	$\mathbf{E} = -\partial\mathbf{A}/\partial t - \nabla\phi$
$e = \mathcal{S}.\nabla\mathcal{D}$	$\operatorname{div}\mathbf{D} = \rho_Q$
$0 = \mathcal{S}.\nabla\mathcal{B}$	$\operatorname{div}\mathbf{B} = 0$
$\mathcal{F} = \mathcal{V}.\mathcal{G}\mathcal{B} - \dot{\mathcal{A}} - \nabla\psi$	$\mathbf{F} = Q\,\mathbf{v}\times\mathbf{B} + Q\,\mathbf{E}$
$\mathcal{C} = \mathcal{K} + \dot{\mathcal{D}}$	$\mathbf{j}_{\mathrm{tot}} = \mathbf{j} + \partial\mathbf{D}/\partial t$
$4\pi\mathcal{C} = \mathrm{V}.\nabla\mathcal{H}$	$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j} + \partial\mathbf{D}/\partial t$

3.2.5 Holomorfní funkce

V následujícím textu uvedeme základní pojmy a postupy z komplexní analýzy. Předpokládejme, že funkce $f(z)$ je funkcí komplexní proměnné, tj.

$$f(z):\mathbb{C}\to\mathbb{C}\,. \tag{3.105}$$

Řekneme, že komplexní funkce $f(x, y) = u(x, y) + \mathrm{i}v(x, y)$ je *holomorfní* na otevřené množině, pokud má derivaci v každém bodě množiny. Otevřená množina je v definici podstatná, protože ke každému bodu množiny musí existovat okolí, na kterém je možné derivaci zavést. Existence komplexní derivace je velmi silný požadavek, a pokud je funkce holomorfní, má zajímavé vlastnosti:

CR podmínky. Platí tzv. Cauchyho-Riemannovy (CR) podmínky:

► $$\frac{\partial u}{\partial x}=\frac{\partial v}{\partial y}\,;\qquad \frac{\partial u}{\partial y}=-\frac{\partial v}{\partial x}\,. \tag{3.106}$$

Platnost CR podmínek je zřejmá z toho, že derivace musí dát stejný výsledek, ať se k danému bodu blížíme po reálné nebo po imaginární ose, tedy musí platit rovnost $\partial f/\partial x = \partial f/\partial \mathrm{i}y$. Oddělením reálné a imaginární části získáme CR podmínky.

Harmoničnost. Z CR podmínek je okamžitě vidět, že reálná i imaginární část holomorfní funkce je harmonická, tj. splňuje Laplaceovu rovnici:

► $$\nabla^2 u=0\,;\qquad \nabla^2 v=0\,. \tag{3.107}$$

Situaci lze i obrátit. Pokud vezmeme za reálnou část komplexní funkce nějakou harmonickou funkci, můžeme z CR podmínek dopočítat její imaginární část, tedy každou harmonickou funkcí je určena nějaká komplexní funkce.

Taylorův rozvoj. K holomorfní funkci lze v každém bodě množiny vždy nalézt Taylorův rozvoj. Později této kapitole si ukážeme, jak lze elegantně nalézt jeho koeficienty, viz vztah (3.146).

Integrál po křivce. Nechť γ je uzavřená prostá (oběhne právě jednou) křivka. Je-li f holomorfní na křivce i uvnitř křivky, platí *Cauchyho fundamentální věta*:

► $$\oint_{\gamma} f(z)\,\mathrm{d}z=0\,. \tag{3.108}$$

Vzhledem k tomu, že výsledek integrace se nezmění při jakékoli spojité deformaci křivky (toto tvrzení zde nebudeme dokazovat), ukážeme si platnost Cauchyho věty pro kružnici v komplexní rovině parametrizovanou vztahem

$$z=z_0+R\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,;\qquad \varphi\in<0,2\pi)\,. \tag{3.109}$$

Pro výpočet využijeme Taylorova rozvoje funkce:

$$\oint_{z=z_0+R\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}} f(z)\,\mathrm{d}z=\oint_{z=z_0+R\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}}\sum_{k=0}^{\infty}c_k(z-z_0)^k\;\mathrm{d}z=\sum_{k=0}^{\infty}\int_0^{2\pi}c_k R^k\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}\,R\,\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{d}\varphi=$$

$$\sum_{k=0}^{\infty} \mathrm{i}\, c_k R^{k+1} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+1)\varphi}\, \mathrm{d}\varphi = 0\,,$$

neboť pro jakékoli k jde o periodickou funkci, z níž je integrál nulový (plochy nad osou a pod osou jsou stejné).

3.2.6 Laurentův rozvoj a reziduová věta

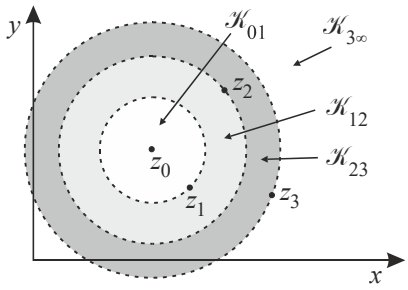
Laurentův rozvoj

Laurentovým rozvojem komplexní funkce $f(z)$ v okolí bodu z_0 nazýváme řadu

$$f(z) = \sum_{k=-\infty}^{+\infty} c_k (z - z_0)^k \quad . \tag{3.110}$$

Touto řadou se zabýval francouzský matematik Pierre Alphonse Laurent (1813–1854). Součet záporných členů řady ($k < 0$) nazýváme *hlavní část* Laurentovy řady, součet nezáporných členů ($k \geq 0$) nazýváme *regulární část* Laurentovy řady.

Pokud má funkce v komplexní rovině póly (osamocené body, ve kterých hodnota funkce diverguje, ale v jejichž prstencovém okolí je funkce holomorfní, viz dále), lze vždy nalézt k danému bodu z_0 nějaká mezikruží $\mathcal{K}$, na kterých bude funkce holomorfní. Pro tato mezikruží je možné jednoznačně určit koeficienty c_k řady tak, aby Laurentova řada byla na těchto mezikružích konvergentní. Pro různá mezikruží bude mít řada různé koeficienty. Na následujícím obrázku jsou póly v bodech z_1, z_2 a z_3 a existují čtyři mezikruží, ve kterých lze nalézt koeficienty c_k tak, aby Laurentova řada konvergovala k původní funkci:



Obr. 3.10: Konvergence v mezikružích

Reziduová věta

Hledejme křivkový integrál z komplexní funkce po prosté, kladně orientované uzavřené křivce γ (oblast oběhne právě jednou). Funkce musí být holomorfní v každém bodě křivky, ale v oblasti ohraničené křivkou mohou být póly, a proto nebude integrál po křivce nulový, neboť neplatí předpoklad Cauchyho fundamentální věty o holomorfnosti funkce v celé oblasti. Uvažujme nejprve jednoduchou situaci s jediným pólem v z_0, kolem něhož existuje prstencové okolí (bod z_0 do něho nepatří), na kterém je f holomorfní. Najděme integrál po kružnici vedené kolem bodu z_0:

$$\oint_{z=z_0+R\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}} f(z)\,\mathrm{d}z = \oint_{z=z_0+R\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}} \sum_k c_k (z-z_0)^k \,\mathrm{d}z = \sum_k \int_0^{2\pi} c_k R^k\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\varphi}\, R\,\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{d}\varphi =$$

$$= \sum_k \mathrm{i}\,c_k R^{k+1} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k+1)\varphi}\,\mathrm{d}\varphi = \sum_k \mathrm{i}\,c_k R^{k+1} 2\pi\delta_{k,-1} = 2\pi\,\mathrm{i}\,c_{-1}\,.$$

Je zřejmé, že jediným nenulovým členem je člen s $k = -1$. Koeficientu c_{-1} proto říkáme *reziduum* (zbytek) funkce f v bodě z_0, značíme Rez(f; z_0). Pro obecnou křivku můžeme postupovat obdobně, výsledkem je *reziduová věta*

► $$\oint_\gamma f(z)\,\mathrm{d}z = 2\pi\,\mathrm{i} \sum_{z_k \in \,\mathrm{Int}\,\gamma} \mathrm{Rez}\left(f, z_k\right)\,. \tag{3.111}$$

Integrál z prosté, kladně orientované uzavřené křivky je roven 2πi-násobku součtu všech reziduí funkce ležících uvnitř křivky (Int γ). Věta umožňuje efektivní výpočty mnoha křivkových integrálů v komplexní rovině, ale i integrálů po reálné ose, kterou chápeme jako část křivky v komplexní rovině. Pokud by křivka byla orientovaná opačně (ve směru hodinových ručiček) objeví se na pravé straně minus.

Póly

Řekneme, že funkce $f(z)$ má pól v bodě z_0, pokud splňuje

1. $\lim_{z \to z_0} f(z) = \infty$,
2. v prstencovém okolí z_0 je funkce holomorfní.

Násobnost pólu

Řekneme, že pól z_0 funkce $f(z)$ má násobnost k, pokud koeficienty Laurentova rozvoje na prstencovém okolí bodu z_0 splňují

1. $c_{-k} \neq 0$,
2. $c_l = 0\,; \quad l < -k$.

K výpočtu reziduí pro póly nízké násobnosti lze využít jednoduché vztahy uvedené v následujícím textu.

Reziduum v pólu první násobnosti

Reziduum v pólu první násobnosti lze určit ze vztahu (plyne okamžitě z Laurentova rozvoje)

$$\mathrm{Rez}\left(f, z_0\right) = \lim_{z \to z_0} \left[(z - z_0) f(z)\right]\,. \tag{3.112}$$

Ze vztahu je zřejmé, že pro holomorfní funkci g platí

► $$\mathrm{Rez}\left(\frac{g(z)}{(z-z_0)}, z_0\right) = g(z_0)\,. \tag{3.113}$$

Například

$$\mathrm{Rez}\left(\frac{\sin(z)}{(z+\mathrm{i})(z-\mathrm{i})},\mathrm{i}\right)=\lim_{z\to\mathrm{i}}\left[(z-\mathrm{i})\frac{\sin(z)}{(z+\mathrm{i})(z-\mathrm{i})}\right]=$$

$$=\lim_{z\to\mathrm{i}}\left[\frac{\sin(z)}{(z+\mathrm{i})}\right]=\frac{\sin(\mathrm{i})}{2\mathrm{i}}$$

Reziduum v pólu k-té násobnosti

$$\mathrm{Rez}\left(f,z_0\right)=\frac{1}{(k-1)!}\lim_{z\to z_0}\left[(z-z_0)^k f(z)\right]^{(k-1)}. \tag{3.114}$$

Reziduum v nekonečnu

Pro holomorfní funkci můžeme v prstencovém okolí nekonečna zavést Laurentův rozvoj

$$f(z)=\sum_{-\infty}^{+\infty}\frac{b_k}{z^k}. \tag{3.115}$$

Reziduum v nekonečnu potom definujeme vztahem

$$\mathrm{Rez}(f,\infty)=-b_1. \tag{3.116}$$

Znaménko se definuje záporné proto, aby pro funkci, která je holomorfní až na konečný počet pólů z_k, platilo, že součet všech reziduí je nulový:

$$\mathrm{Rez}(f,\infty)\ +\ \sum_{z_k}\mathrm{Rez}(f,z_k)=0\ . \tag{3.117}$$

Tento vztah umožňuje vypočítat reziduum v nekonečnu bez použití definičního vztahu (3.114).

3.2.7 Příklady na výpočty integrálů

◖ Příklad 3.2

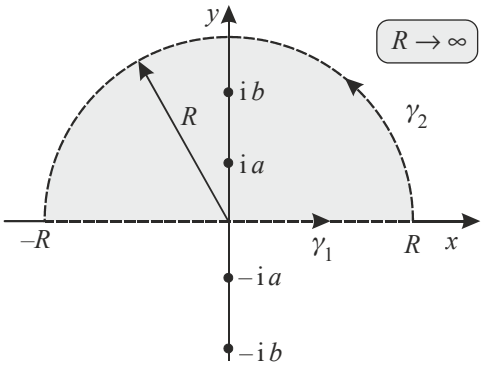
Spočtěte integrál

$$I=\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{x^2}{\left(x^2+a^2\right)\left(x^2+b^2\right)}\,\mathrm{d}x\,. \tag{3.118}$$

Namísto reálného integrálu (3.118) budeme počítat integrál z komplexní funkce (x nahradíme z)

$$f(z)=\frac{z^2}{\left(z^2+a^2\right)\left(z^2+b^2\right)}=\frac{z^2}{(z+\mathrm{i}a)(z-\mathrm{i}a)(z+\mathrm{i}b)(z-\mathrm{i}b)}, \tag{3.119}$$

která má čtyři póly, žádný z nich ale neleží na vodorovné (reálné) ose. Integrál povedeme po křivce na následujícím obrázku, póly jsou vyznačeny černými kroužky:



Pro výpočet využijeme reziduovou větu, uvnitř čárkované integrační křivky jsou jen dva póly:

$$\oint_{\gamma} f(z)\,\mathrm{d}z = \int_{\gamma_1} f(z)\,\mathrm{d}z + \int_{\gamma_2} f(z)\,\mathrm{d}z = 2\pi i\left[\mathrm{Res}\big(f(z),\mathrm{i}a\big) + \mathrm{Res}\big(f(z),\mathrm{i}b\big)\right]. \quad (3.120)$$

Pro $R \to \infty$ konverguje integrál přes křivku γ_1 k námi hledanému integrálu I, zatímco integrál přes křivku γ_2 se limitně blíží nule, neboť integrovaná funkce jde v nekonečnu na křivce γ_2 (v kterémkoli směru) k nule. Proto máme

$$I = 2\pi i\left[\mathrm{Res}\big(f(z),\mathrm{i}a\big) + \mathrm{Res}\big(f(z),\mathrm{i}b\big)\right] = \frac{\pi}{a+b}. \quad (3.121)$$

◗

◖ Příklad 3.3

Spočtěte integrál

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos mx}{1+x^2}\,\mathrm{d}x\,; \qquad m > 0\,. \quad (3.122)$$

Integrál určitě existuje, neboť čitatel je omezená funkce a jmenovatel se v $\pm\infty$ chová jako $1/x^2$. Integrál určíme jako reálnou část integrálu, v němž funkci kosinus nahradíme kmitavou exponenciálou

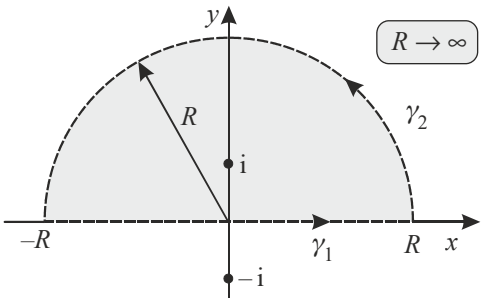
$$I = \mathrm{Re}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx}}{1+x^2}\,\mathrm{d}x\,; \qquad m > 0\,. \quad (3.123)$$

Další postup bude obdobný jako v minulém příkladě. Budeme počítat integrál z komplexní funkce

$$f(z) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}mz}}{1+z^2} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}mz}}{(z+\mathrm{i})(z-\mathrm{i})}, \quad (3.124)$$

která má póly v bodech +i a −i. Jako integrační křivkou zvolíme černou čárkovanou křivku z následujícího obrázku. Z reziduové věty potom máme

$$\int_{\gamma} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}mz}}{1+z^2}\,\mathrm{d}z = \int_{\gamma_1} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}mz}}{1+z^2}\,\mathrm{d}z + \int_{\gamma_2} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}mz}}{1+z^2}\,\mathrm{d}z = 2\pi i\,\mathrm{Res}\big(f(z),\mathrm{i}\big)\,. \quad (3.125)$$



V limitě $R \to \infty$ bude probíhat integrace v prvním integrálu po celé reálné ose, v druhém z integrálů bude pro $m > 0$ integrovaná funkce konvergovat k nule. Pokud by $m < 0$, museli bychom integraci uzavřít přes dolní polorovinu. Výsledek tedy je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}mx}}{1+x^2}\,\mathrm{d}x = 2\pi i\,\mathrm{Res}\big(f(z),\mathrm{i}\big) = 2\pi i\,\frac{\mathrm{e}^{-m}}{2\mathrm{i}} = \pi\,\mathrm{e}^{-m}. \tag{3.126}$$

Po oddělení reálné a imaginární části dostaneme výsledek

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos mx}{1+x^2}\,\mathrm{d}x = \pi\,\mathrm{e}^{-m}\ ; \tag{3.127}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin mx}{1+x^2}\,\mathrm{d}x = 0\,. \tag{3.128}$$

◗

◖ Příklad 3.4

Určete integrál

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^3}\,\mathrm{d}x. \tag{3.129}$$

S výpočtem tohoto integrálu budou problémy v okolí nuly, kde integrovaná funkce z obou stran diverguje (viz obrázek) a integraci přes takový bod nelze provést. Přesto lze integraci v určitém smyslu udělat. Integraci rozdělíme na dvě části, v nichž „nepohodlný“ bod vynecháme a limitně se k němu budeme blížit zleva a zprava. Takovýto postup nazýváme integrací ve smyslu *hlavní Cauchyho hodnoty* a označujeme

$$V.P.\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^3}\,\mathrm{d}x \equiv \lim_{\varepsilon\to 0}\left[\int_{-\infty}^{-\varepsilon} \frac{1}{x^3}\,\mathrm{d}x + \int_{\varepsilon}^{+\infty} \frac{1}{x^3}\,\mathrm{d}x\right]. \tag{3.130}$$

Označení V. P. je zkratkou z *Value Principal*. V našem případě je první z integrálů záporný a druhý kladný a oba se přesně vyruší, takže výsledkem je nulová hodnota. V jiných případech nesymetrických funkcí může být výsledek nenulový. Výsledek tedy je

$$V.P.\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{x^3}\,\mathrm{d}x = 0\,. \tag{3.131}$$

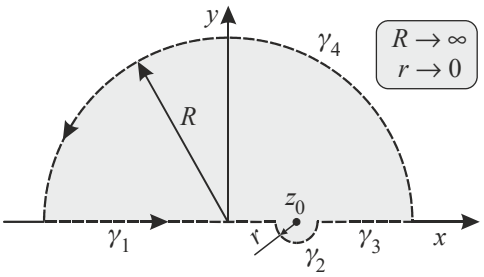
◗

◖ Příklad 3.5

Ve fyzice je dosti častý je výpočet integrálu s jednoduchým pólem na reálné ose

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(x)}{x-x_0}\,\mathrm{d}x\,. \tag{3.132}$$

Na takový integrál vedou různé úlohy na rezonanci. Je-li funkce $g(z)$ holomorfní v komplexní rovině a v reálném (∞) i imaginárním (i∞) nekonečnu se blíží k nule tak rychle, aby integrál konvergoval, využijeme k výpočtu reziduovou větu pro čárkovanou křivku na obrázku:



Integrál (3.132) přepíšeme do komplexní proměnné a provedeme integraci po jednotlivých křivkách v matematicky kladném směru, tj. proti směru hodinových ručiček:

$$\int_{\gamma_1} \frac{g(z)}{z-z_0}\,\mathrm{d}z \;+\; \int_{\gamma_2} \frac{g(z)}{z-z_0}\,\mathrm{d}z \;+\; \int_{\gamma_3} \frac{g(z)}{z-z_0}\,\mathrm{d}z \;+\; \int_{\gamma_4} \frac{g(z)}{z-z_0}\,\mathrm{d}z = 2\pi\mathrm{i}g(x_0)\,.$$

V integrálech provedeme obě limity $R \to \infty$ a $r \to 0$. Poslední integrál půjde vzhledem k předpokladům pro $R \to \infty$ k nule. Jednotlivé integrály postupně dají

$$\lim_{\substack{R\to\infty\\ r\to 0}} \left(\int_{-R}^{x_0-r} \frac{g(x)}{x-x_0}\,\mathrm{d}x + \int_{\pi}^{2\pi} \frac{g(z_0+r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi})}{r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}}\mathrm{i}r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{d}\varphi + \int_{x_0+r}^{R} \frac{g(x)}{x-x_0}\,\mathrm{d}x \right) + 0 \;= 2\pi\mathrm{i}g(x_0)$$

$$\lim_{\substack{R\to\infty\\ r\to 0}} \left(\int_{-R}^{x_0-r} \frac{g(x)}{x-x_0}\,\mathrm{d}x + \int_{x_0+r}^{R} \frac{g(x)}{x-x_0}\,\mathrm{d}x \right) + \lim_{r\to 0} \int_{\pi}^{2\pi} \frac{g(z_0+r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi})}{r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}}\mathrm{i}r\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\,\mathrm{d}\varphi \;= 2\pi\mathrm{i}g(x_0)$$

$$\mathrm{V.P.}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(x)}{x-x_0}\,\mathrm{d}x \;+\; \mathrm{i}\int_{\pi}^{2\pi} g(x_0)\,\mathrm{d}\varphi \;= 2\pi\mathrm{i}g(x_0)\,.$$

► $$\mathrm{V.P.}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{g(x)}{x-x_0}\,\mathrm{d}x \;=\; \pi\mathrm{i}g(x_0)\,. \tag{3.133}$$

Pokud integrál v imaginárním nekonečnu nekonverguje, využijeme jiné integrační cesty, například obdélníky či jiné vhodné útvary. ◗

◖ Příklad 3.6

Určete integrály

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin x}{x}\,\mathrm{d}x. \tag{3.134}$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos x}{x}\,\mathrm{d}x. \tag{3.135}$$

První z integrálů bude klíčový pro teorii distribucí a v dalším se s ním ještě setkáme. Integrand se v počátku chová „ normálně“, neboť

$$\lim_{x\to 0} \frac{\sin x}{x} = 1. \tag{3.136}$$

To bohužel nelze říci o druhém integrandu, zde platí

$$\lim_{x\to 0^{\pm}} \frac{\cos x}{x} = \pm\infty \tag{3.137}$$

a integrál bude možné počítat jen ve smyslu Cauchyho hlavní hodnoty. Oba integrály budeme počítat naráz za pomoci exponenciální notace, tj. určíme integrál

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}}{x}\,\mathrm{d}x \tag{3.138}$$

a posléze oddělíme reálnou a imaginární část. Při výpočtu budeme postupovat dle obecného návodu z předchozího příkladu. Integrand nahradíme komplexní funkcí

$$f(z) = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}z}}{z}, \tag{3.139}$$

která má jediný pól na reálné ose v bodě $z = 0$. V horní polorovině konverguje integrand v nekonečnu k nule, proto můžeme přímo použít vztah (3.133) z minulého příkladu:

$$\mathrm{V.P.}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}}{x}\mathrm{d}x \;=\; \pi\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{0} = \mathrm{i}\pi. \tag{3.140}$$

Oddělíme-li nyní reálnou a imaginární část, máme

$$\mathrm{V.P.}\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\cos x}{x}\mathrm{d}x \;=\; 0. \tag{3.141}$$

► $$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\sin x}{x}\mathrm{d}x = \pi. \tag{3.142}$$

U druhého integrálu jsme vynechali symbol V.P., neboť je integrand v $x = 0$ konečný a hlavní hodnota splývá s běžným významem integrace. Odvozený vztah budeme ještě potřebovat. ◗

3.2.8 Cauchyho integrální formule a holografický princip

Hodnoty holomorfní funkce uvnitř libovolné uzavřené prosté křivky lze dopočítat z hodnot na této křivce (funkce musí být holomorfní v celé oblasti) podle *Cauchyho integrální formule*:

$$f(z_0) = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_\gamma \frac{f(z)}{z - z_0}\, \mathrm{d}z \,. \tag{3.143}$$

Samotný integrand není holomorfní v bodě $z = z_0$. Důkaz tohoto tvrzení můžeme okamžitě dostat z reziduové věty. Nalezněme ale výsledek integrací po kružnici: Křivku nahradíme bez újmy na obecnosti kružnicí se středem v bodě z_0 (spojitá deformace křivky na holomorfní oblasti nezmění hodnotu křivkového integrálu, nesmíme tedy křivku jen deformovat přes centrální bod z_0, kde integrand není holomorfní).

Střed kružnice je v bodě, kde počítáme hodnotu funkce, na poloměru kružnice nezáleží (kružnice s různým poloměrem lze spojitě deformovat jednu na druhou). Holomorfní funkci rozvineme do Laurentovy řady v okolí bodu z_0, která bude mít díky holomorfnosti jen nezáporné členy (tedy Taylorův rozvoj):

$$f(z) = \sum_{k=0}^{\infty} c_k \left(z - z_0\right)^k \,. \tag{3.144}$$

Integrujme nyní na pravé straně vztahu (3.143) libovolný z členů řady:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_\gamma \frac{c_k \left(z - z_0\right)^k}{z - z_0}\, \mathrm{d}z &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_\gamma c_k \left(z - z_0\right)^{k-1}\, \mathrm{d}z = \\ &= \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \int_0^{2\pi} c_k R^{k-1}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k-1)\varphi}\, \mathrm{i} R\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\, \mathrm{d}\varphi \;= \\ &= \frac{\mathrm{i} c_k R^k}{2\pi \mathrm{i}} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i} k\varphi}\, \mathrm{d}\varphi = \frac{\mathrm{i} c_k R^k}{2\pi \mathrm{i}} 2\pi \delta_{k0} = c_0 \delta_{k0} = f(z_0)\delta_{k0} \,. \end{aligned} \tag{3.145}$$

Jediný nenulový příspěvek má tedy nultý člen rozvoje a ten je přímo roven hledané hodnotě. Vztah (3.144) lze snadno zobecnit na koeficienty Laurantovy řady. Pro $z_0 \neq \infty$ lze koeficienty řady určit ze vztahu

► $$c_k = \frac{1}{2\pi \mathrm{i}} \oint_\gamma \frac{f(z)}{(z - z_0)^{k+1}}\, \mathrm{d}z \,; \qquad \gamma \subset \mathcal{K} \,. \tag{3.146}$$

Křivka γ je uzavřená prostá a celá leží v daném mezikruží. Může jít například o kružnici se středem v z_0 a vhodným poloměrem. Důkaz vztahu (3.146) je zcela analogický důkazu (3.145), tj. jen dosadíme parametrizaci kružnice (3.109) a za funkci hledaný rozvoj. Nenulový bude jediný člen, a ten dá právě koeficient c_k. Pro regulární část řady přejdou koeficienty c_k v běžné koeficienty Taylorovy řady

► $$c_k = \frac{f^{(k)}(z_0)}{k!}; \qquad k = 1, 2, \ldots \tag{3.147}$$

K rozvoji funkce do Laurentovy řady existuje řada triků, při kterých není nutné provádět výpočet koeficientů podle vztahu (3.146).

* * *

U holomorfních funkcí je velmi zajímavou vlastností vztah (3.143), pomocí něhož je možné dopočítat hodnoty holomorfní funkce ze znalosti funkce na hranici množiny. S obdobným principem se setkáváme i ve fyzice, kde ho nazýváme *holografický princip*. V podstatě jde o tvrzení, že N rozměrnou realitu lze zakódovat do informací na množině s dimenzí $N-1$. Zatím se s holografickým principem setkáváme ve třech oblastech fyziky. První z nich je holografie, tj. pořízení 3D fotografie (hologramu) na 2D médiu. Na hologramu se za pomoci interference zaznamenává informace nejen o intenzitě světla odraženého od objektu, jak je tomu u běžné fotografie, ale i o jeho fázi, která se zapíše jako obrazec vzniklý interferencí odraženého paprsku s referenčním paprskem. Z hologramu lze pak za pomoci laserových paprsků zrekonstruovat třírozměrnou „fotografii" původního objektu. Holografii objevil anglický fyzik maďarského původu Denis Gabor (1900–1979) v roce 1947.

Druhou oblastí je termodynamika černých děr. Z prací izraelsko-amerického fyzika Jakoba Bekensteina (1947–2015) a britského teoretika Stephena Hawkinga (*1942) vyplývá, že na horizontu černé díry jsou zakódovány informace o jejím nitru. Povrchu černé díry lze přiřadit nejen teplotu, ale i entropii, která je za normálních okolností veličinou vázanou na objem.

Do třetice využil holografický princip holandský teoretik Erik Verlinde (*1962) ve své alternativní teorii gravitace, v níž gravitaci nepovažuje za samostatnou interakci, ale za makroskopický výsledek kvantového chování mikrosvěta (tzv. entropickou sílu patřící do stejné kategorie jako difúze či elasticita). Verlindeho teorie využívá blíže nespecifikovanou projekční plochu, na které je zakódována veškerá informace o objektech uzavřených uvnitř plochy. Takovou plochou by mohla být například světočára struny korespondující s nějakou elementární částicí. Z uvedeného je patrné, že holografický princip – tedy tvrzení, že informace o N dimenzích může být zakódována na $N-1$ rozměrné množině – má pravděpodobně v přírodě hlubší smysl, jehož význam zatím ne zcela chápeme.

3.3 Vektory a tenzory

3.3.1 Lineární vektorový prostor

Vektor si můžeme představit jako orientovanou tyčku (rozlišujeme počátek a konec). Rovnoběžně posunuté tyčky považujeme za stále stejný vektor. Pokud vektor posuneme do počátku, můžeme z polohy koncového bodu „odečíst“ tzv. souřadnice neboli složky vektoru. Souřadnice vektoru vždy závisí na volbě souřadnicové soustavy. Nestačí tedy zadat vektor jako uspořádanou trojici, ale musíme jeho definici doplnit o transformační pravidla, tj., jak se změní složky vektoru při přechodu k jiné souřadnicové soustavě:

$$\mathbf{f} = (f_1, f_2, f_3)\,, \tag{3.148}$$

$$\tilde{f}_k = \sum_{l=1}^{3} A_{kl} f_l, \tag{3.149}$$

kde **A** je transformační matice od nevlnkované soustavy k vlnkované. Strukturované objekty, jako jsou vektory či matice, většinou značíme tučným řezem písma. Někdy je výhodné psát složky vektoru do řádku (většinou pro úsporu místa), jindy jako sloupcové vektory. Pokud transformujeme složky obdobně jako ve vztahu (3.149), je nutný sloupcový zápis:

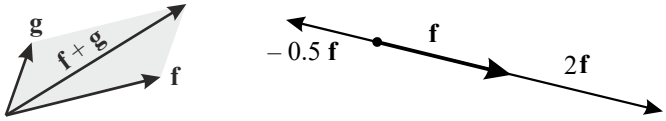
$$\begin{pmatrix} \tilde{f}_1 \\ \tilde{f}_2 \\ \tilde{f}_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_{11} & A_{12} & A_{13} \\ A_{21} & A_{22} & A_{23} \\ A_{31} & A_{32} & A_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \\ f_3 \end{pmatrix}. \tag{3.150}$$

S vektory umíme provádět dvě operace – *natahování* reálným koeficientem a *skládání*:

► $$\alpha\mathbf{f} \equiv (\alpha f_1, \alpha f_2, \alpha f_3)\,, \tag{3.151}$$

► $$\mathbf{f} + \mathbf{g} \equiv (f_1 + g_1, f_2 + g_2, f_3 + g_3)\,. \tag{3.152}$$

Natahování i skládání provádíme se všemi složkami. Výsledkem natahování je vektor stejného ($\alpha > 0$) nebo opačného ($\alpha < 0$) směru, který je alfakrát delší. Výsledkem skládání dvou vektorů je vektor, který vznikne jako úhlopříčka rovnoběžníku nataženého na oba vektory (operaci, kterou známe z kurzů fyziky jako tzv. rovnoběžník sil).



Obr. 3.14: Skládání a natahování dvou vektorů.

Tyto dvě operace splňují pravidla, která nemusí platit jen pro naše vzorové „tyče“, ale i pro jiné objekty. Pojem vektoru budeme proto abstrahovat a na první místo postavíme vlastnosti operací natahování a skládání. Zaveďme proto lineární vektorový prostor.

Řekneme, že $\mathcal{V}$ je lineární vektorový prostor nad množinou reálných (komplexních) čísel, jsou-li pro prvky tohoto prostoru definovány operace

označení	odkud kam	název	zápis
$+$	$\mathcal{V}\times\mathcal{V}\to\mathcal{V}$	sčítání (skládání) vektorů	$\mathbf{h}=\mathbf{f}+\mathbf{g}$
$\cdot$	$\mathcal{V}\times\mathcal{R}(C)\to\mathcal{V}$	násobení vektoru skalárem	$\mathbf{g}=\alpha\cdot\mathbf{f}$

které mají následující vlastnosti:

$$\begin{aligned}
&1)\quad \mathbf{f}+\mathbf{g}=\mathbf{g}+\mathbf{f}, && \mathbf{f}+(\mathbf{g}+\mathbf{h})=(\mathbf{f}+\mathbf{g})+\mathbf{h},\\
&2)\quad \alpha(\mathbf{f}+\mathbf{g})=\alpha\mathbf{f}+\alpha\mathbf{g}, && (\alpha+\beta)\mathbf{f}=\alpha\mathbf{f}+\beta\mathbf{f},\\
&3)\quad \alpha(\beta\mathbf{f})=(\alpha\beta)\mathbf{f}, && 1\mathbf{f}=\mathbf{f},\\
&4)\quad \mathbf{f}+\mathbf{g}=\mathbf{f}+\mathbf{h} \;\Rightarrow\; \mathbf{g}=\mathbf{h}.
\end{aligned} \qquad (3.153)$$

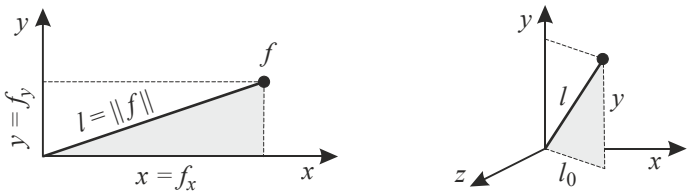
První operace říká, že platí komutativnost (záměnnost) a asociativnost (sdružování), druhá operace definuje linearitu. Na první pohled je jasné, že tyto vlastnosti mají fyzikální vektory (například síla), které umíme natahovat a skládat a umíme si je představit jako orientované úsečky nebo špičaté tyče. Na druhou stranu mohou mít podobné vlastnosti i zcela jiné objekty (matice, řešení rovnic), pokud pro ně tyto operace vhodně zavedeme. Důležité jsou vlastnosti objektů (3.153), nikoli objekty samotné.

3.3.2 Skalární součin

Norma vektoru

Pro tuto chvíli se ještě zabývejme uspořádanými dvojicemi či trojicemi čísel, které představují souřadnice vektoru. Později naše úvahy rozšíříme na obecnější objekty. Velikost (normu) vektoru můžeme snadno určit z Pythagorovy věty. Podle obrázku pro dvojdimenzionální a třídimenzionální případ platí:

$$\begin{aligned}
\|\mathbf{f}\|_{2\mathrm{D}} &= |\mathbf{f}| = \sqrt{f_x^2+f_y^2} = \sqrt{x^2+y^2}\,,\\
\|\mathbf{f}\|_{3\mathrm{D}} &= |\mathbf{f}| = \sqrt{l_0^2+y^2} = \sqrt{x^2+z^2+y^2}\,.
\end{aligned} \qquad (3.154)$$



Obr. 3.15: Velikost vektoru pro uspořádané dvojice a trojice.

Je zřejmé, že pro více dimenzí bude možné Eukleidovskou normu definovat vztahem

$$\|\mathbf{f}\| = \sqrt{x_1^2+x_2^2+\cdots+x_N^2}\,. \qquad (3.155)$$

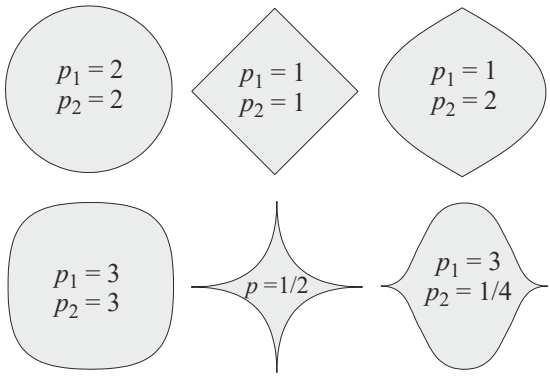
Norma se označuje jednoduchou (jako absolutní hodnota) nebo dvojitou svislou čárou. Pojem normy lze rozšířit i na tzv. *p-q* normu definovanou vztahem

$$\|\mathbf{f}\| = \left(|x_1|^{p_1} + |x_2|^{p_2} + \cdots + |x_N|^{p_N} \right)^{1/q} . \tag{3.156}$$

Pro $p_k = q = 2$ tato norma splývá s Eukleidovskou vzdáleností. Samozřejmě by bylo třeba se detailně zabývat tím, zda takto definovaná norma splňuje naše představy o velikosti vektoru, například trojúhelníkovou nerovnost atd. Takový rozbor nalezne čtenář v učebnicích matematiky. Ukažme, jak vypadá jednotková kružnice, tj. množina bodů, které mají vzdálenost od počátku rovnou jedné, v různých *p-q* normách:

$$|x|^{p_1} + |y|^{p_2} = 1 \tag{3.157}$$

Na následujícím obrázku jsou zakresleny tyto „kružnice“ pro různé hodnoty exponentů.



Obr. 3.16: Jednotková kružnice v různých normách

Skalární součin

S vektory můžeme provádět nejen natahování a skládání, ale i další operace. Máme-li k dispozici dva vektory **f** a **g**, můžeme jejich indexy ponechat různé a vytvořit tak dvojrozměrnou tabulku čísel, která splňuje určitá transformační pravidla, a říkáme jí tenzor druhého řádu

► $$T_{kl} \equiv f_k g_l \; ; \qquad \mathbf{T} \equiv \mathbf{f} \otimes \mathbf{g} \, . \tag{3.158}$$

Tuto operaci s dvěma vektory nazýváme ***tenzorový součin.*** Je důležitý při popisu elektromagnetického pole, gravitace, setrvačníků, permitivity, permeability atd. První zápis je složkový, druhý je symbolický. Tenzorový součin značíme křížkem v kolečku.

◖ **Příklad 3.7:**

$$\mathbf{f} = (1,2,3) \; ; \qquad \mathbf{g} = (-7,-1,2) \; ;$$

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} f_1 g_1 & f_1 g_2 & f_1 g_3 \\ f_2 g_1 & f_2 g_2 & f_2 g_3 \\ f_3 g_1 & f_3 g_2 & f_3 g_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -7 & -1 & 2 \\ -14 & -2 & 4 \\ -21 & -3 & 6 \end{pmatrix} .$$

◗

Druhou možností je oba indexy sečíst, takové operaci říkáme ***skalární součin:***

$$\mathbf{f}\cdot\mathbf{g} \equiv (\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}) \equiv \langle \mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\rangle = \sum_{k=1}^{3} f_k g_k = f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 \,. \tag{3.159}$$

Skalární součin značíme buď centrovanou tečkou, nebo kulatou závorkou nebo braketovou závorkou. Přes oba indexy se vysčítá a výsledkem je jedno jediné reálné číslo, které může být kladné, nulové či záporné. Pro běžné transformace, jako je otočení souřadnicové soustavy či inverze, nezávisí skalární součin na volbě soustavy. Takovým číslům říkáme skaláry.

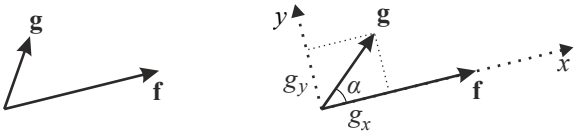
◖ Příklad 3.8

$$\mathbf{f} = (1,2,3)\,; \qquad \mathbf{g} = (-7,-1,2)\,;$$

$$\mathbf{f}\cdot\mathbf{g} = f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 = -7 - 2 + 6 = -3\,.$$

◗

Vezměme si dva libovolné vektory **f**, **g** a zvolme souřadnicovou soustavu co nejjednodušeji. Osu x necháme mířit ve směru prvního vektoru, osu y v rovině obou vektorů a osu z kolmo na ně (volba soustavy vždy závisí na nás):



Obr. 3.17: Volba souřadnicové soustavy při interpretaci skalárního součinu

Označíme-li velikosti vektorů f, g a úhel mezi nimi α, budou jejich souřadnice

$$\begin{aligned} \mathbf{f} &= (f_1, f_2, f_3) = (f, 0, 0)\,; \\ \mathbf{g} &= (g_1, g_2, g_3) = (g\cos\alpha,\, g\sin\alpha,\, 0)\,. \end{aligned} \tag{3.160}$$

Snadno nyní nalezneme skalární součin obou vektorů podle definice:

$$\mathbf{f}\cdot\mathbf{g} \equiv f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3 = f\,g\cos\alpha = \|\,\mathbf{f}\,\|\;\|\,\mathbf{g}\,\|\cos\alpha\,. \tag{3.161}$$

Skalární součin dvou vektorů je tedy roven součinu jejich velikostí a kosinu sevřeného úhlu. To je velmi důležité. Zopakujme si ještě, že tento výsledek bude vždy stejný, bez ohledu na volbu souřadnicové soustavy. A k čemu je tedy skalární součin dobrý? Za jeho pomoci můžeme určit úhel mezi dvěma vektory:

$$\cos\alpha = \frac{\mathbf{f}\cdot\mathbf{g}}{\|\,\mathbf{f}\,\|\;\|\,\mathbf{g}\,\|}\,. \tag{3.162}$$

Snadné je také určit velikost vektoru. Postačí oba vektory ve vztahu (3.161) položit stejné a dostaneme $\mathbf{f}\cdot\mathbf{f} = \|\,\mathbf{f}\,\|^2$. Odsud snadno určíme velikost (je dána odmocninou ze skalárního součinu vektoru se sebou samým)

$$\|\,\mathbf{f}\,\| = \sqrt{\mathbf{f}\cdot\mathbf{f}}\,. \tag{3.163}$$

Skalární součin také umožní výpočet mechanické práce po zadané dráze γ, působí-li na objekt síla **F**:

► $$\Delta A = \int_{\gamma} \mathbf{F} \cdot \mathrm{d}\mathbf{s} \,. \tag{3.164}$$

◖ Příklad 3.9

Zadání: Nalezněte velikost a vzájemný úhel vektorů **f** = (1, 3, 0), **g** = (2, 2, 0).

Řešení: Nejprve nalezneme velikosti obou vektorů:

$$\| \mathbf{f} \| = \sqrt{\mathbf{f} \cdot \mathbf{f}} = \sqrt{f_x^2 + f_y^2 + f_z^2} = \sqrt{10} \,;$$
$$\| \mathbf{g} \| = \sqrt{\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}} = \sqrt{g_x^2 + g_y^2 + g_z^2} = \sqrt{8} \,.$$

Nyní již snadno nalezneme úhel mezi oběma vektory:

$$\cos\alpha = \frac{\mathbf{f} \cdot \mathbf{g}}{\| \mathbf{f} \| \, \| \mathbf{g} \|} = \frac{f_x g_x + f_y g_y + f_z g_z}{\sqrt{10}\sqrt{8}} = \frac{8}{\sqrt{80}} \doteq 0{,}89 \,.$$

Odpovídající úhel je cca 27°. Nakreslete si oba vektory a zkontrolujte výpočet graficky.

◗

Pro skalární součin platí Schwarzovo lemma, které je užitečné při různých odhadech a plyne okamžitě ze vztahu (3.161):

► $$\left| \mathbf{f} \cdot \mathbf{g} \right| \leq \| \mathbf{f} \| \, \| \mathbf{g} \| \,. \tag{3.165}$$

- Skalární součin je dán vztahem $\mathbf{f} \cdot \mathbf{g} \equiv f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3$.
- Skalární součin lze také zapsat jako $\mathbf{f} \cdot \mathbf{g} = \| \mathbf{f} \| \, \| \mathbf{g} \| \cos\alpha$.
- Pro skalární součin platí Schwarzovo lemma $\left| \mathbf{f} \cdot \mathbf{g} \right| \leq \| \mathbf{f} \| \, \| \mathbf{g} \|$.
- Skalární součin je číslo, které nezávisí na volbě souřadnicové soustavy.
- Skalárního součinu umožňuje určit úhel mezi vektory $\cos\alpha = \mathbf{f} \cdot \mathbf{g} \,/\, (\| \mathbf{f} \| \, \| \mathbf{g} \|)$.
- Velikost vektoru je vždy rovna $\| \mathbf{f} \| = \sqrt{\mathbf{f} \cdot \mathbf{f}}$.

* * *

Za pomoci vztahů (3.153) jsme rozšířili pojem vektoru na obecnější objekty, než jsou uspořádané trojice a zavedli lineární vektorový prostor. Nyní analogicky rozšíříme pojem skalárního součinu pro různé lineární vektorové prostory.

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

Přechod od uspořádaných trojic k většímu počtu dimenzí je přímočarý. Veškeré odvozené vlastnosti zůstávají zachovány, ať už jde o velikost vektoru chápanou jako odmocninu ze skalárního součinu prvku se sebou samým, definici úhlu mezi dvěma prvky,

Schwarzovo lemma i další vztahy. Ve skalárním součinu bude součet probíhat namísto do tří do N:

$$\mathbf{f} = (f_1, \ldots, f_N) \quad , \qquad \mathbf{g} = (g_1, \ldots, g_N) \quad ; \qquad f_l, g_l \in \mathcal{R}, \tag{3.166}$$

► $$\mathbf{f} \cdot \mathbf{g} \equiv f_1 g_1 + \cdots + f_N g_N = \sum_{k=1}^{N} f_k g_k \, . \tag{3.167}$$

C^N prostor komplexních N-tic

Připusťme nyní, že složky vektoru jsou komplexní čísla. Takový předpoklad s sebou přinese problém při definici velikosti vektoru, neboť definice skalárního součinu (3.167) nezajišťuje, že velikost vektoru bude nezáporné reálné číslo. Z vlastností komplexních čísel ale víme, že pro velikost komplexního čísla platí

$$\| f \| = \sqrt{\overline{f} f} = \sqrt{(x - \mathrm{i}y)(x + \mathrm{i}y)} = \sqrt{x^2 + y^2} \, . \tag{3.168}$$

U komplexní N-tice by proto bylo přirozené, aby platilo

$$\| \mathbf{f} \| = \sqrt{\overline{f}_1 f_1 + \cdots + \overline{f}_N f_N} = \sqrt{| f_1 |^2 + \cdots + | f_N |^2} \, . \tag{3.169}$$

Tomu musíme přizpůsobit definici skalárního součinu a jeden z argumentů skalárního součinu brát komplexně sdružený (dohodou levý):

$$\mathbf{f} = (f_1, \ldots, f_N) \quad , \qquad \mathbf{g} = (g_1, \ldots, g_N) \quad ; \qquad f_l, g_l \in C, \tag{3.170}$$

► $$\mathbf{f} \cdot \mathbf{g} \equiv \overline{f}_1 g_1 + \cdots + \overline{f}_N g_N = \sum_{k=1}^{N} \overline{f}_k g_k . \tag{3.171}$$

Takto definovaný skalární součin je obecně komplexní číslo. Skalární součin prvku se sebou samým je ale vždy reálné nezáporné číslo, takže lze zachovat definici normy jako odmocniny

► $$\| \mathbf{f} \| \equiv \sqrt{\mathbf{f} \cdot \mathbf{f}} = \sqrt{\overline{f}_1 f_1 + \cdots + \overline{f}_N f_N} = \sqrt{| f_1 |^2 + \cdots + | f_N |^2} \tag{3.172}$$

Pro reálné N-tice splyne naše nová definice s původním vztahem (3.167), takže jde o přímé rozšíření této definice. Opět platí Schwarzovo lemma, stejným způsobem lze zavést definici úhlu mezi dvěma prvky (v tomto případě komplexního) atd. Vše, co umíme z prvotních „tyčí“, zůstane v platnosti.

◖ Příklad 3.10

Nalezněte velikost a skalární součin vektorů **f** = (i, 3), **g** = (1, 2i). Postup je přímočarý:

$$\begin{aligned} \| \mathbf{f} \| &\equiv \sqrt{\mathbf{f} \cdot \mathbf{f}} = \sqrt{\overline{f}_1 f_1 + \overline{f}_2 f_2} = \sqrt{-\mathrm{i}\,\mathrm{i} + 3^2} = \sqrt{10} \, ; \\ \| \mathbf{g} \| &\equiv \sqrt{\mathbf{g} \cdot \mathbf{g}} = \sqrt{\overline{g}_1 g_1 + \overline{g}_2 g_2} = \sqrt{1^2 + (-2\mathrm{i})(2\mathrm{i})} = \sqrt{5} \, ; \\ \mathbf{f} \cdot \mathbf{g} &\equiv \overline{f}_1 g_1 + \overline{f}_2 g_2 = (\mathrm{i})(1) + (3)(2\mathrm{i}) = 7\mathrm{i} \, . \end{aligned} \tag{3.173}$$

◗

ℓ^2 Prostory posloupností

Dalším zobecněním bude přechod od komplexních *N*-tic ke komplexním posloupnostem, které mají nekonečný počet prvků. Takové prostory označujeme ℓ^2 („el dva“). Skalární součin rozšíříme přímočaře:

$$\mathbf{f} = \{f_1, \ldots, f_n, \ldots\} = \{f_l\}_{l=1}^{\infty}, |\mathbf{g}> = \{g_l\}_{l=1}^{\infty}; \; f_l, g_l \in C, \tag{3.174}$$

► $$\mathbf{f}\cdot\mathbf{g} \equiv f_1^* g_1 + \cdots + f_n^* g_n + \cdots = \sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k = f_k^* g_k \; . \tag{3.175}$$

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

$$\sum_{k=1}^{\infty} \overline{f}_k f_k < \infty \qquad \text{pro} \quad \forall \quad \mathbf{f} \in l^2 . \tag{3.176}$$

Potom je

$$|\mathbf{f}\cdot\mathbf{g}| = |\sum_{k=1}^{\infty} \overline{f}_k g_k| \le \|\mathbf{f}\|\cdot\|\mathbf{g}\| < \infty \qquad \text{pro} \quad \forall \quad |\mathbf{f}>, |\mathbf{g}> \in l^2, \tag{3.177}$$

neboť Schwarzovo lemma platí i v případě nekonečných posloupností. Do prostoru ℓ^2 tedy patří jen posloupnosti sčítatelné s kvadrátem, proto symbol „2“ v názvu prostoru. Například posloupnost **f** = {1, 2, 3, 4...} nepatří do prostoru ℓ^2, protože

$$\|\mathbf{f}\| \equiv \sqrt{\mathbf{f}\cdot\mathbf{f}} = \sqrt{1+2^2+3^2\cdots} = \infty ,$$

naopak posloupnost **f** = {1, 1/2, 1/4, 1/8...} patří do prostoru ℓ^2, protože

$$\|\mathbf{f}\| \equiv \sqrt{\mathbf{f}\cdot\mathbf{f}} = \sqrt{1^2+(1/2)^2+(1/4)^2\cdots} < \infty .$$

$\mathcal{L}^2$ 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.

$$\mathbf{f} \equiv f_x \equiv f(x), \qquad \mathbf{g} \equiv g_x \equiv g(x), \quad ; \qquad x \in \mathcal{R}, \quad f, g \in C, \tag{3.178}$$

► $$\mathbf{f}\cdot\mathbf{g} \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x. \tag{3.179}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \overline{f}(x) f(x)\, \mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} |f(x)|^2\, \mathrm{d}x < \infty \qquad \text{pro} \quad \forall \quad f(x) \in \mathcal{L}^2. \tag{3.180}$$

Vzhledem ke Schwarzově lemmatu, které platí i pro integrály, je

$$|\mathbf{f}\cdot\mathbf{g}| \leq \|\mathbf{f}\|\cdot\|\mathbf{g}\| < \infty \qquad \text{pro} \quad \forall \quad \mathbf{f},\mathbf{g}\in \mathcal{L}^2 \tag{3.181}$$

a skalární součin má smysl. $\mathcal{L}^2$ 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 (tzv. unitárních prostorů).

◖ Příklad 3.11

Zadání: Určete na prostoru $\mathcal{L}^2$ (0,1) funkcí integrovatelných s kvadrátem na intervalu <0, 1> velikosti a vzájemný úhel funkcí $f(x) = 1$, $g(x) = x^2$.

Řešení: Postup je zcela přímočarý:

$$\|f\|^2 = \mathbf{f}\cdot\mathbf{f} = (f\,|\,f) = \int_0^1 1\,\mathrm{d}x = 1; \qquad \Rightarrow \qquad \|f\| = 1;$$

$$\|g\|^2 = \mathbf{g}\cdot\mathbf{g} = (g\,|\,g) = \int_0^1 x^2x^2\,\mathrm{d}x = \frac{1}{5}; \qquad \Rightarrow \qquad \|g\| = 1/\sqrt{5};$$

$$\mathbf{f}\cdot\mathbf{g} = (f\,|\,g) = \int_0^1 \overline{f}\,g\,\mathrm{d}x = \int_0^1 1\cdot x^2\,\mathrm{d}x = 1/3;$$

$$\cos\alpha = \frac{(f\,|\,g)}{\|f\|\|g\|} = \frac{1/3}{1\cdot 1/\sqrt{5}} = \sqrt{5}/3 \qquad \Rightarrow \qquad \alpha \approx 42°. \qquad ◗$$

◖ Příklad 3.12

Zadání: Určete na prostoru $\mathcal{L}^2$ $(0,2\pi)$ skalární součin funkcí $f(x) = \sin x$, $g(x) = \sin 2x$.

Řešení: Postup je opět přímočarý:

$$(f\,|\,g) = \int_0^{2\pi} \overline{f}\,g\,\mathrm{d}x = \int_0^{2\pi} \sin x \sin 2x\,\mathrm{d}x = \int_0^{2\pi} \sin x\, 2\sin x\cos x\,\mathrm{d}x =$$

$$= 2\int_0^{2\pi} \sin^2 x\cos x\,\mathrm{d}x = \left|\begin{array}{c}\text{substituce}\\ \sin x \equiv \xi\end{array}\right| = \left[2\frac{\xi^3}{3}\right]_{\ldots}^{\ldots} = \left[2\frac{\sin^3(x)}{3}\right]_0^{2\pi} = 0.$$

Výsledek znamená, že funkce f a g jsou na sebe kolmé. Dokonce platí, že funkce $\{1, \sin x, \cos x, \sin 2x, \cos 2x\ldots\}$ jsou kolmé každá na každou a tvoří ortogonální bázi na prostoru funkcí $\mathcal{L}^2$ $(0,2\pi)$. Zkuste si sami dokázat, že platí $\|\sin x\| = \sqrt{\pi}$. ◗

Unitární prostor (prostor se skalárním součinem)

Unitárním prostorem $\mathcal{U}$ nazveme lineární vektorový prostor $\mathcal{V}$ s operacemi

označení	odkud kam	název	zápis
$+$	$\mathcal{V}\times\mathcal{V}\to\mathcal{V}$	sčítání (skládání) vektorů	$\mathbf{h} = \mathbf{f} + \mathbf{g}$
$\cdot$	$\mathcal{V}\times\mathcal{R}(C)\to\mathcal{V}$	násobení vektoru skalárem	$\mathbf{g} = \alpha\cdot\mathbf{f}$
$(\ \vert\ )$	$\mathcal{V}\times\mathcal{V}\to\mathcal{R}(C)$	skalární součin	$\alpha = (\mathbf{f}\,\vert\,\mathbf{g})$

které splňují základní vlastnosti skalárního součinu odvozené v předchozím textu:

$$\begin{aligned}
&1)\quad (\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}+\mathbf{h}) \;=\; (\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}) + \mathbf{f}\,|\,\mathbf{h}),\\
&2)\quad (\mathbf{f}\,|\,\alpha\,\mathbf{g}) \;=\; \alpha\,(\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}),\\
&3)\quad (\mathbf{g}\,|\,\mathbf{f}) \;=\overline{(\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g})} \qquad\qquad \Rightarrow (\alpha\,\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}) = \overline{\alpha}\,(\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}),\\
&4)\quad (\mathbf{f}\,|\,\mathbf{f}) \;\geq\; 0 \quad ; \qquad (\mathbf{f}\,|\,\mathbf{f}) \;=\; 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \mathbf{f} = 0.
\end{aligned} \tag{3.182}$$

První dvě podmínky v definici znamenají linearitu v pravém argumentu. Z třetí operace plyne antilinearita v levém argumentu (aditivnost + vytknutí komplexně sdružené konstanty). Pokud je prostor se skalárním součinem úplný, tj. každá konvergentní posloupnost konverguje k prvku prostoru, nazýváme ho *Hilbertův prostor*.

Konvoluce

Zkusme nyní lineární maticovou transformaci

$$g_k = \sum_l A_{kl} f_l \tag{3.183}$$

přepsat do prostoru funkcí. Diskrétní indexy k, l nahradíme spojitými indexy x, y a sumaci změníme na integraci. Výsledek bude:

$$g(x) = \int A(x,y) f(y)\,\mathrm{d}y\,. \tag{3.184}$$

Uvedené zobrazení se nazývá *konvoluce*, funkce dvou proměnných $A(x, y)$ je tzv. konvoluční jádro. Mezi konvoluce patří většina integrálních transformací. Podle volby funkce A můžeme mít Fourierovu transformaci, Laplaceovu transformaci, Abellovu transformaci a mnohé další. Konvoluce není nic jiného než maticové násobení se spojitými indexy, proto ji symbolicky zapisujeme jako

$$g = A * f\,. \tag{3.185}$$

Konvoluce přiřadí funkci f novou funkci g za pomoci „předpisu“ A. Je-li funkce A funkcí jen jedné jediné proměnné, u konvoluce automaticky předpokládáme integraci

$$g(x) = \int A(x-y) f(y)\,\mathrm{d}y\,. \tag{3.186}$$

Za pomoci konvoluce s tzv. Greenovou funkcí lze snadno nalézt řešení některých parciálních diferenciálních rovnic. K této úloze se vrátíme v kapitole 3.8.4.

◖ Příklad 3.13

Zadání: Nalezněte konvoluci $A(x, y) = (x-y)^2$ s funkcí $f(x) = x$. na prostoru $\mathcal{L}^2(0,1)$

Řešení:

$$g(x) = A * f = \int_0^1 A(x,y) f(y)\,\mathrm{d}y =$$

$$= \int_0^1 (x-y)^2\, y\,\mathrm{d}y = \int_0^1 (x^2 y - 2xy^2 + y^3)\,\mathrm{d}y =$$

$$= \left[x^2\frac{y^2}{2} - 2x\frac{y^3}{3} + \frac{y^4}{4} \right]_0^1 = \frac{1}{4} - \frac{2}{3}x + \frac{1}{2}x^2.$$

◗

3.3.3 Vektorový součin

Prvky lineárního vektorového prostoru už umíme natahovat, skládat a můžeme s nimi dělat skalární součin. Ve fyzice je ale důležitá i další operace, tzv. vektorový součin, který dvěma vektorům přiřadí uspořádanou trojici, jejíž vlastnosti v některých ohledech připomínají vektory. Budeme postupovat obdobně jako u skalárního součinu. Danou operaci zavedeme, ukážeme si, kde může být užitečná a pak se budeme zabývat jejími vlastnostmi a operaci nakonec zobecníme na jakékoli objekty splňující tyto vlastnosti.

Symetrické a antisymetrické matice

V teorii matic jsou velmi důležité symetrické a antisymetrické matice. Symetrické matice splňují relaci

► $$S_{kl} = S_{lk}, \tag{3.187}$$

tj. záměna indexů nemá na matici vliv. Prvky vzniklé překlopením matice kolem diagonály jsou stejné pod diagonálou i nad diagonálou. Příkladem může být matice

$$\mathbb{S} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 4\mathrm{i} \\ 2 & \mathrm{i} & -1 \\ 4\mathrm{i} & -1 & 5 \end{pmatrix}. \tag{3.188}$$

U symetrických matic postačí zadat prvky na diagonále a prvky nad diagonálou (jsou označeny plnými kolečky). Ostatní prvky snadno dopočteme:

$$(\bullet); \qquad \begin{pmatrix} \bullet & \bullet \\ \circ & \bullet \end{pmatrix}; \qquad \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet \\ \circ & \bullet & \bullet \\ \circ & \circ & \bullet \end{pmatrix}; \qquad \begin{pmatrix} \bullet & \bullet & \bullet & \bullet \\ \circ & \bullet & \bullet & \bullet \\ \circ & \circ & \bullet & \bullet \\ \circ & \circ & \circ & \bullet \end{pmatrix}. \tag{3.189}$$

V jedné dimenzi existuje u symetrických matic jediný nezávislý prvek, ve dvou dimenzích tři prvky, ve třech šest prvků a ve čtyřech deset. Gravitační pole je v obecné relativitě popsáno symetrickou maticí 4×4 (tzv. metrickými koeficienty, které popisují zakřivení časoprostoru), proto je obecná relativita založena na deseti parciálních diferenciálních rovnicích pro tyto koeficienty. Druhou skupinou jsou antisymetrické matice, jejichž prvky splňují relaci

► $$A_{kl} = -A_{lk}. \tag{3.190}$$

Antisymetrická matice má na diagonále nuly, například pro prvek A_{22} při výměně indexů platí

$$A_{22} = -A_{22} \qquad \Rightarrow \qquad 2A_{22} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad A_{22} = 0. \tag{3.191}$$

Příkladem antisymetrické matice může být

$$\mathbb{A} = \begin{pmatrix} 0 & \mathrm{i} & 5 \\ -\mathrm{i} & 0 & -1 \\ -5 & +1 & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.192}$$

U antisymetrické matice postačí zadat jen prvky nad diagonálou a celá matice je určena:

$$(0);\qquad \begin{pmatrix} 0 & \bullet \\ \circ & 0 \end{pmatrix};\qquad \begin{pmatrix} 0 & \bullet & \bullet \\ \circ & 0 & \bullet \\ \circ & \circ & 0 \end{pmatrix};\qquad \begin{pmatrix} 0 & \bullet & \bullet & \bullet \\ \circ & 0 & \bullet & \bullet \\ \circ & \circ & 0 & \bullet \\ \circ & \circ & \circ & 0 \end{pmatrix}. \tag{3.193}$$

V jedné dimenzi nemá antisymetrická matice žádný nezávislý prvek, ve dvou dimenzích jeden jediný, ve třech dimenzích tři a ve čtyřech dimenzích existuje 6 nezávislých prvků. Elektromagnetické pole je v časoprostoru popsáno tenzorem elektromagnetického pole (1.246), antisymetrickou maticí 4×4, proto při popisu elektromagnetického pole potřebujeme šest veličin – tři složky elektrického pole a tři složky magnetického pole.

Pokud sečteme součiny všech odpovídajících si prvků antisymetrické a symetrické matice (stejného tvaru), vždy dostaneme nulu:

► $$A_{kl}S_{kl} = 0. \tag{3.194}$$

V zápise je použita sumační konvence, tj. sčítá se přes obě dvojice indexů *k*, *l*. Pokud rozepíšeme všechny sčítance, bude vždy jeden kladný a jeden záporný a navzájem se vyruší. V součtu bude například člen $A_{25}S_{25}$, ale i $A_{52}S_{52}$, který má díky antisymetrii matice $\mathbb{A}$ opačné znaménko. Obecný důkaz lze provést přejmenováním indexů, využitím symetrie a dalším přejmenováním indexů:

$$A_{kl}S_{kl} = A_{op}S_{op} = -A_{po}S_{po} = -A_{kl}S_{kl}. \tag{3.195}$$

Přečteme-li si začátek a konec, vidíme, že

$$A_{kl}S_{kl} = -A_{kl}S_{kl} \qquad \Rightarrow \qquad 2A_{kl}S_{kl} = 0 \qquad \Rightarrow \qquad A_{kl}S_{kl} = 0. \tag{3.196}$$

Pokud máme obecnou matici, která nejeví ani symetrii, ani antisymetrii, vždy ji můžeme rozložit na symetrickou a antisymetrickou část takto:

► $$M_{kl} = \frac{1}{2}\left(M_{kl} + M_{lk}\right) + \frac{1}{2}\left(M_{kl} - M_{lk}\right). \tag{3.197}$$

První část výrazu je zjevně symetrickou maticí, druhá antisymetrickou maticí. Každou matici lze proto rozložit na symetrickou a antisymetrickou část. Předpokládejme nyní, že matice vznikla jako tenzorový součin dvou vektorů:

$$M_{kl} = f_k g_l. \tag{3.198}$$

Rozklad na symetrickou a antisymetrickou část nyní bude

$$M_{kl} = \frac{1}{2}\left(f_k g_l + f_l g_k\right) + \frac{1}{2}\left(f_k g_l - f_l g_k\right). \tag{3.199}$$

Antisymetrické výrazy v druhé kulaté závorce, například $f_2 g_3 - f_3 g_2$ jsou ve skutečnosti složkami vektorového součinu. K velmi užitečným symetrickým maticím patří Kroneckerovo delta a k antisymetrickým maticím Leviho-Civitův symbol:

► $$\delta_{kl} = \begin{cases} 0; & k \neq l, \\ 1; & k = l. \end{cases} \tag{3.200}$$

$$\begin{aligned} &\varepsilon_{klm} = -\varepsilon_{lkm}\,, \\ &\varepsilon_{klm} = -\varepsilon_{mlk}\,, \qquad \varepsilon_{123} = 1\,; \\ &\varepsilon_{klm} = -\varepsilon_{kml}\,. \end{aligned} \tag{3.201}$$

Kroneckerovo delta jsou prvky jednotkové matice. Má na diagonále jedničky a mimo diagonálu nuly. Leviho-Civitův symbol vypadá složitěji, ale není tomu tak. Jde o totálně antisymetrický tenzor ve všech dvojicích indexů. Tedy záměna libovolných dvou indexů vede na změnu znaménka. Takový symbol má jeden jediný nezávislý prvek a všechny ostatní lze dopočíst. Za tento nezávislý prvek se volí $\varepsilon_{123} = 1$. Jakékoli prvky Leviho-Civitova symbolu s dvěma stejnými indexy jsou nulové (to je dáno antisymetrií), například

$$\varepsilon_{112} = \varepsilon_{322} = \varepsilon_{222} = \varepsilon_{313} = \cdots = 0\,. \tag{3.202}$$

Nenulové prvky musí mít všechny tři indexy různé a lze je dopočíst z ε_{123}, například:

$$\begin{gathered} \varepsilon_{123} = 1\,, \\ \varepsilon_{213} = -\varepsilon_{123} = -1\,, \\ \varepsilon_{312} = -\varepsilon_{132} = +\varepsilon_{123} = +1 \\ \text{atd.} \end{gathered} \tag{3.203}$$

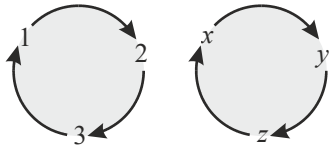
Hodnoty Leviho-Civitova symbolu tedy jsou pouze 0, +1, nebo −1.

Vektorový součin

Vektorový součin dvou vektorů **f**, **g** budeme značit $\mathbf{h} = \mathbf{f}\times\mathbf{g}$ nebo $\mathbf{h} = [\mathbf{f}, \mathbf{g}]$ nebo $\mathbf{h} = [\mathbf{f} \mid \mathbf{g}]$. Jeho složky jsou definovány vztahy:

$$\begin{aligned} h_1 &= f_2 g_3 - f_3 g_2\,, \\ h_2 &= f_3 g_1 - f_1 g_3\,, \\ h_3 &= f_1 g_2 - f_2 g_1\,. \end{aligned} \tag{3.204}$$

Na první pohled vypadá tato definice možná poněkud děsivě, ale ve skutečnosti je jednoduchá. Stačí si zapamatovat vztah pro první složku. Po jedničce na levé straně jdou indexy dva a tři na pravé straně (minus obráceně). Pokud si zapamatujete tento vztah, máte vyhráno. Vše ostatní dostanete cyklickou záměnou: po jedničce jde dvojka, po dvojce trojka a po trojce zase jednička. Nebo po indexu *x* jde *y*, poté *z* a po něm *x*:



Obr. 3.18: Cyklická záměna

Výsledkem je trojice čísel, která má podobné vlastnosti vektorům. Někdy tomuto útvaru říkáme *pseudovektor*.

◖ **Příklad 3.14**

Zadání: Nalezněte vektorový součin vektorů **f** = (1, 2, 3), **g** = (4, 5, 6).

Řešení: Vyjdeme přímo z definice:

$$\mathbf{f}\times\mathbf{g} \equiv (f_2 g_3 - f_3 g_2,\ f_3 g_1 - f_1 g_3,\ f_1 g_2 - f_2 g_1) =$$

$$= (2\cdot 6 - 3\cdot 5, 3\cdot 4 - 1\cdot 6, 1\cdot 5 - 2\cdot 4) = (-3, 6, -3).$$

◗

Počítání vektorového součinu přes determinant

Vektorový součin je možné počítat za pomoci rozvoje následujícího determinantu podle prvního řádku:

$$\mathbf{f}\times\mathbf{g} = \det\begin{pmatrix} \mathbf{e}_1 & \mathbf{e}_2 & \mathbf{e}_3 \\ f_1 & f_2 & f_3 \\ g_1 & g_2 & g_3 \end{pmatrix} =$$

$$= \mathbf{e}_1(f_2 g_3 - f_3 g_2) + \mathbf{e}_2(\cdots) + \mathbf{e}_3(\cdots) = \tag{3.205}$$

$$= (f_2 g_3 - f_3 g_2,\ f_3 g_1 - f_1 g_3,\ f_1 g_2 - f_2 g_1).$$

Definice vektorového součinu přes Leviho-Civitův symbol

V teoretické fyzice se většinou používá definice vektorového součinu za pomoci Leviho-Civitova symbolu (s touto definicí se snadno odvozují různé vektorové identity):

► $$h_k = \varepsilon_{klm} f_l g_m \tag{3.206}$$

První index (k) je volný a vyskytuje se na obou stranách rovnosti. Indexy l a m jsou sčítací. Spočtěme například první složku:

$$h_1 = \varepsilon_{1lm} f_l g_m .$$

Vzhledem k vlastnostem Leviho-Civitova symbolu budou z celého součtu nenulové jen ty sčítance, v nichž se žádné indexy neopakují, tedy

$$h_1 = \varepsilon_{123} f_2 g_3 + \varepsilon_{132} f_3 g_2 = f_2 g_3 - f_3 g_2 .$$

Obdobně bychom počítali další složky.

Transformační vlastnosti vektorového součinu

Už z definice (3.204) je patrné, že se výsledek vektorového součinu netransformuje jako vektory, ale jako součiny složek dvou vektorů. Jednotlivé části vektorového součinu **h** = **f**×**g** jsou prvky matice

$$h_{kl} \equiv f_k g_l - f_l g_k = \begin{pmatrix} 0 & f_1 g_2 - f_2 g_1 & f_1 g_3 - f_3 g_1 \\ f_2 g_1 - f_1 g_2 & 0 & f_2 g_3 - f_3 g_2 \\ f_3 g_1 - f_1 g_3 & f_3 g_2 - f_2 g_3 & 0 \end{pmatrix}, \tag{3.207}$$

$$h_{kl} = \begin{pmatrix} 0 & +h_3 & -h_2 \\ -h_3 & 0 & +h_1 \\ +h_2 & -h_1 & 0 \end{pmatrix} . \tag{3.208}$$

Vektorový součin se nebude transformovat jako vektory, ale jeho složky se budou transformovat jakou součiny složek vektorů, tedy jako tenzor druhého řádu:

$$\begin{aligned} \tilde{f}_k &= A_{kl} f_l \; ; \\ \tilde{g}_k &= A_{kl} f_l \; ; \\ \tilde{h}_{kl} &= A_{ko} A_{lp} f_o g_p \; . \end{aligned} \tag{3.209}$$

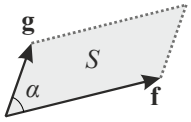
Vektorový součin je tedy antisymetrický tenzor (3.207) druhého řádu. Jeho matice má tři nezávislé složky, které lze poskládat jako uspořádanou trojici, které říkáme *pseudovektor*. To, že nejde o vektor, snadno uvidíme na prostorové inverzi souřadnicové soustavy (nová soustava bude mít osy $-x$, $-y$, $-z$). Při této transformaci přejde $\mathbf{f} \to -\mathbf{f}$, $\mathbf{g} \to -\mathbf{g}$, ale výsledek vektorového součinu $\mathbf{h} = \mathbf{f}\times\mathbf{g}$ se nezmění, tedy má zcela jiné transformační vlastnosti než vektory.

Význam vektorového součinu

Nalezněme nyní význam v součinu. K tomu použijeme stejnou souřadnicovou soustavu, jako tomu bylo u skalárního součinu, tj. vektory budou mít složky (3.160). Pro vektorový součin potom podle definice vyjde

$$\mathbf{f}\times\mathbf{g} = (0,\, 0,\, f\, g \sin\alpha) \tag{3.210}$$

Vektorový součin má složku jen v ose z, tedy míří kolmo na oba původní vektory. Jeho velikost je rovna $fg \sin\alpha$, tj. ploše rovnoběžníku „nataženého“ na oba vektory.



$S = f\, g \sin\alpha$

Obr. 3.19: Vektorový součin a plocha rovnoběžníku

Pravidlo vývrtky: *Přiložíme-li vývrtku na víno hrotem do průsečíku vektorů a otočíme s ní od prvního k druhému, bude se vývrtka pohybovat ve směru vektorového součinu. Pomocí tohoto pravidla můžeme snadno určit, který ze dvou možných kolmých směrů je ten správný.*

A k čemu je vektorový součin dobrý? Pomocí vektorového součinu snadno nalezneme kolmici ke dvěma vektorům. Vektorový součin je také užitečný k výpočtu plochy rovnoběžníku. Ve fyzice použijeme vektorový součin k popisu momentu hybnosti tělesa, momentu síly nebo při pohybu elektricky nabité částice v magnetickém poli.

◖ Příklad 3.15

Zadání: Nalezněte plochu rovnoběžníku nataženého na vektory $\mathbf{f} = (1, 2, 3)$, $\mathbf{g} = (4, 5, 6)$.

Řešení: Z předchozího příkladu víme, že vektorový součin těchto vektorů je $(-3, 6, -3)$. Velikost tohoto vektoru (hledaná plocha) je $(9+36+9)^{1/2}$, tj. přibližně 7,35. ◗

- Vektorový součin je dán vztahem $\mathbf{f}\times\mathbf{g} \equiv (f_2 g_3 - f_3 g_2,\ f_3 g_1 - f_1 g_3, f_1 g_2 - f_2 g_1)$.
- Vektorový součin můžeme zapsat také jako $(\mathbf{f}\times\mathbf{g})_k = \varepsilon_{klm} f_l g_m$.
- Vektorový součin můžete počítat s pomocí determinantů.
- Vektorový součin je kolmý na oba vektory **f**, **g**.
- Velikost vektorového součinu je plocha čtyřúhelníku nataženého na vektory **f**, **g**.
- Pomocí vektorového součinu můžeme snadno vytvářet kolmice.
- Vektorový součin je antisymetrický tenzor druhého řádu.
- Výsledek vektorového součinu nazýváme pseudovektor.

3.3.4 Vektorové identity

Při popisu fyzikálních zákonitostí se často používají nejrůznější vektorové identity. Snadno je odvodíme, pokud budeme vědět, že mezi složkami Leviho-Civitova tenzoru a Kroneckerova symbolu platí jednoduchý vztah:

► $$\varepsilon_{klm}\varepsilon_{kop} = \delta_{lo}\delta_{mp} - \delta_{lp}\delta_{mo}\ . \tag{3.211}$$

Tento klíčový vztah lze nejsnadněji odvodit přímým ověřením (nalevo i napravo jsou součty složené z nul, jedniček a minus jedniček. Existují ale i sofistikovanější odvození, například přes symetrie nebo z vlastností ortogonálních transformací. Pokud má čtenář zájem, může si pročíst odvození této identity na základě ortonormálních transformací. Uvažujme ortonormální transformaci (řádky matice jsou tvořeny jednotkovými navzájem kolmými vektory)

$$\tilde{f}_k = a_{kl} f_l\ . \tag{3.212}$$

Leviho-Civitův symbol můžeme nyní napsat za pomoci koeficientů této transformace

$$\varepsilon_{klm} = \det\begin{pmatrix} a_{1k} & a_{1l} & a_{1m} \\ a_{2k} & a_{2l} & a_{2m} \\ a_{3k} & a_{3l} & a_{3m} \end{pmatrix}. \tag{3.213}$$

Zkontrolujte si, že takto zapsaný Leviho-Civitův tenzor má všechny své vlastnosti. Pokud jsou libovolné dva indexy stejné, má determinant dva sloupce shodné a je nulový. Pokud dva sloupce přehodíme, změní se znaménko determinantu (odpovídá to záměně dvou indexů), tj. Leviho-Civitův tenzor je totálně antisymetrický. Nyní využijeme postupně: 1) determinant transponované matice se nezmění; 2) součin dvou determinantů je roven determinantu ze součinu matic; 3) transformace je ortogonální:

$$\varepsilon_{klm}\varepsilon_{opq} = \det\begin{pmatrix} a_{1k} & a_{1l} & a_{1m} \\ a_{2k} & a_{2l} & a_{2m} \\ a_{3k} & a_{3l} & a_{3m} \end{pmatrix} \det\begin{pmatrix} a_{1o} & a_{1p} & a_{1q} \\ a_{2o} & a_{2p} & a_{2q} \\ a_{3o} & a_{3p} & a_{3q} \end{pmatrix} =$$

$$= \det\begin{pmatrix} a_{1k} & a_{2k} & a_{3k} \\ a_{1l} & a_{2l} & a_{3l} \\ a_{1m} & a_{2m} & a_{3m} \end{pmatrix} \det\begin{pmatrix} a_{1o} & a_{1p} & a_{1q} \\ a_{2o} & a_{2p} & a_{2q} \\ a_{3o} & a_{3p} & a_{3q} \end{pmatrix} =$$

$$= \det \begin{pmatrix} \delta_{ko} & \delta_{kp} & \delta_{kq} \\ \delta_{lo} & \delta_{lp} & \delta_{lq} \\ \delta_{mo} & \delta_{mp} & \delta_{mq} \end{pmatrix}.$$

Nyní je odvození už přímočaré determinant rozvineme například podle prvního řádku a ve výsledku ztotožníme první dva indexy:

$$\varepsilon_{klm}\varepsilon_{opq} = \delta_{ko}\left(\delta_{lp}\delta_{mq} - \delta_{lq}\delta_{mp}\right) - \delta_{kp}\left(\delta_{lo}\delta_{mq} - \delta_{lq}\delta_{mo}\right) + \delta_{kq}\left(\delta_{lo}\delta_{mp} - \delta_{lp}\delta_{mo}\right) \Rightarrow$$

$$\varepsilon_{klm}\varepsilon_{kpq} = \delta_{kk}\left(\delta_{lp}\delta_{mq} - \delta_{lq}\delta_{mp}\right) - \delta_{kp}\left(\delta_{lk}\delta_{mq} - \delta_{lq}\delta_{mk}\right) + \delta_{kq}\left(\delta_{lk}\delta_{mp} - \delta_{lp}\delta_{mk}\right) =$$

$$= 3\delta_{lp}\delta_{mq} - 3\delta_{lq}\delta_{mp} - \delta_{kp}\delta_{lk}\delta_{mq} + \delta_{kp}\delta_{lq}\delta_{mk} + \delta_{kq}\delta_{lk}\delta_{mp} - \delta_{kq}\delta_{lp}\delta_{mk} =$$

$$= 3\delta_{lp}\delta_{mq} - 3\delta_{lq}\delta_{mp} - \delta_{lp}\delta_{mq} + \delta_{mp}\delta_{lq} + \delta_{ql}\delta_{mp} - \delta_{mq}\delta_{lp} =$$

$$= \delta_{lp}\delta_{mq} - \delta_{lq}\delta_{mp}\,.$$

Tím je odvození hledaného vztahu ukončeno.

Příklady vektorových identit

Některé důležité vektorové identity nyní odvodíme jako jednoduché příklady, v závěru je shrneme do přehledné tabulky (3D vektory zde budeme značit standardně **A**, **B**, **C**...)

◖ **Příklad 3.16:** div grad f

$$\operatorname{div}\operatorname{grad} f = \nabla\cdot(\nabla f) = \partial_k(\partial_k) f = \frac{\partial^2 f}{\partial x_k\,\partial x_k} = \Delta f\,.$$

Při výpočtu vyšel součet druhých derivací, což je Laplaceův operátor.

◗

◖ **Příklad 3.17:** rot grad f

$$\left[\operatorname{rot}\operatorname{grad} f\right]_k = \left[\nabla\times(\nabla f)\right]_k = \varepsilon_{klm}\partial_l\left(\partial_m f\right) = \varepsilon_{klm}\partial^2{}_{lm} f = 0.$$

Předposlední výraz je zúžením antisymetrické a symetrické matice v indexech l, m. Podle vztahu (3.194) musí vyjít nula.

◗

◖ **Příklad 3.18:** **A**×(**B**×**C**)

$$\left[\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C})\right]_k = \varepsilon_{klm}A_l(\mathbf{B}\times\mathbf{C})_m = \varepsilon_{klm}A_l\varepsilon_{mop}B_oC_p = \varepsilon_{mkl}\varepsilon_{mop}A_lB_oC_p\,.$$

V posledním výrazu jsme index m v prvním Leviho-Civitově tenzoru nadvakrát přesunuli dopředu (pokaždé se změnilo znaménko), abychom mohli využít větu (3.211):

$$\left[\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C})\right]_k = \left(\delta_{ko}\delta_{lp} - \delta_{kp}\delta_{lo}\right)A_lB_oC_p = A_lB_kC_l - A_lB_lC_k = B_k(\mathbf{A}\cdot\mathbf{C}) - C_k(\mathbf{A}\cdot\mathbf{B})\,.$$

Při aplikaci Kroneckerova symbolu musíme důsledně dbát na to, aby ve výrazech vždy zůstal index k, který je na levé straně rovnosti (tzv. volný index). Vektorově můžeme nyní napsat velmi známé „bác cáb“ pravidlo:

$$\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{B})\,.$$

◗

◖ **Příklad 3.19:** div (**A**×**B**)

$$\begin{aligned}
&\operatorname{div}(\mathbf{A}\times\mathbf{B}) = \nabla\cdot(\mathbf{A}\times\mathbf{B}) = \partial_k(\mathbf{A}\times\mathbf{B})_k = \\
&= \partial_k\varepsilon_{klm}(A_l B_m) = \varepsilon_{klm}(\partial_k A_l)B_m + \varepsilon_{klm}A_l(\partial_k B_m) = \\
&= B_m\varepsilon_{mkl}(\partial_k A_l) - A_l\varepsilon_{lkm}(\partial_k B_m) = \\
&= B_m\left(\operatorname{rot}\mathbf{A}\right)_m - A_l\left(\operatorname{rot}\mathbf{B}\right)_l = \mathbf{B}\cdot\operatorname{rot}\mathbf{A} - \mathbf{A}\cdot\operatorname{rot}\mathbf{B}.
\end{aligned}$$

Ve výrazu jsme provedli derivaci součinu a poté vhodně přestěhovali index *m* tak, aby bylo možné napsat skalární součiny vektoru s rotací. Odvozený výraz je užitečný například při získávání zákona zachování energie z Maxwellových rovnic.

◗

◖ **Příklad 3.20:** rot rot **A**

$$\begin{aligned}
&\left[\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A}\right]_k = \left[\nabla\times(\nabla\times\mathbf{A})\right]_k = \varepsilon_{klm}\partial_l(\nabla\times\mathbf{A})_m = \\
&= \varepsilon_{klm}\partial_l\varepsilon_{mop}\partial_o A_p = \varepsilon_{mkl}\varepsilon_{mop}\partial_l\partial_o A_p = \\
&= \left(\delta_{ko}\delta_{lp} - \delta_{kp}\delta_{lo}\right)\partial_l\partial_o A_p = \partial_l\partial_k A_l - \partial_l\partial_l A_k = \partial_k\partial_l A_l - \partial_l\partial_l A_k = \\
&= \partial_k \operatorname{div}\mathbf{A} - \Delta A_k \qquad \Rightarrow \\
&\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A} = \operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{A} - \Delta\mathbf{A}.
\end{aligned}$$

◗

Obdobně můžeme odvozovat i další užitečné identity, odvození jsou si podobná jako vejce vejci. U této epsilon-delta gymnastiky musíme dodržovat některá základní pravidla a úpravy jsou pak už automatické: nikdy nesmíme na jedné straně rovnosti přejmenovat volný index, naopak vázané (sčítací) indexy můžeme přejmenovávat jakkoli se nám to hodí. Kroneckerův výraz znamená, že následující indexy, které obsahuje, jsou si rovny (jinak je nulový). Uveďme si odvozené identity v přehledné tabulce:

►	$\mathbf{A}\times(\mathbf{B}\times\mathbf{C}) = \mathbf{B}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{C}) - \mathbf{C}(\mathbf{A}\cdot\mathbf{B})$,	(3.214)
►	$(\mathbf{A}\times\mathbf{B})\cdot(\mathbf{C}\times\mathbf{D}) = (\mathbf{A}\cdot\mathbf{C})(\mathbf{B}\cdot\mathbf{D}) - (\mathbf{A}\cdot\mathbf{D})(\mathbf{B}\cdot\mathbf{C})$,	(3.215)
►	$\operatorname{div}\operatorname{rot}\mathbf{A} = 0$,	(3.216)
►	$\operatorname{rot}\operatorname{grad} f = 0$,	(3.217)
►	$\operatorname{rot}\operatorname{rot}\mathbf{A} = \operatorname{grad}\operatorname{div}\mathbf{A} - \Delta\mathbf{A}$,	(3.218)
►	$\operatorname{rot}(\mathbf{A}\times\mathbf{B}) = (\mathbf{B}\cdot\nabla)\mathbf{A} - (\mathbf{A}\cdot\nabla)\mathbf{B} + \mathbf{A}\cdot\operatorname{div}\mathbf{B} - \mathbf{B}\cdot\operatorname{div}\mathbf{A}$,	(3.219)
►	$\operatorname{div}(\mathbf{A}\times\mathbf{B}) = \mathbf{B}\cdot\operatorname{rot}\mathbf{A} - \mathbf{A}\cdot\operatorname{rot}\mathbf{B}$,	(3.220)
►	$\operatorname{div}\operatorname{grad} f = \Delta f$,	(3.221)
►	$\mathbf{A}\times\operatorname{rot}\mathbf{A} = \nabla\left(A^2/2\right) - (\mathbf{A}\cdot\nabla)\mathbf{A}$,	(3.222)
►	$\partial r/\partial x_k = x_k/r$,	(3.223)
►	$\varepsilon_{klm}\varepsilon_{kop} = \delta_{lo}\delta_{mp} - \delta_{lp}\delta_{mo}$.	(3.224)

3.3.5 Lieova algebra

Lineární vektorový prostor s operacemi skládání a natahování vektorů nazveme Lieovou algebrou, je-li v něm navíc definována ještě jedna operace [,]:

označení	odkud kam	název	zápis
+	$\mathcal{V}\times\mathcal{V}\to\mathcal{V}$	sčítání (skládání) vektorů	$\mathbf{h}=\mathbf{f}+\mathbf{g}$
·	$\mathcal{V}\times\mathcal{R}(C)\to\mathcal{V}$	násobení vektoru skalárem	$\mathbf{g}=\alpha\cdot\mathbf{f}$
[,]	$\mathcal{V}\times\mathcal{V}\to\mathcal{V}$	Lieova operace	$\mathbf{h}=[\mathbf{f},\mathbf{g}]$

s vlastnostmi:

1) $[\mathbf{f},\mathbf{g}]=-[\mathbf{g},\mathbf{f}]$ antisymetrie (3.225)

2) $[\mathbf{f}+\mathbf{g},\mathbf{h}]=[\mathbf{f},\mathbf{h}]+[\mathbf{g},\mathbf{h}]$ linearita (3.226)

3) $[\alpha\mathbf{f},\mathbf{g}]=\alpha[\mathbf{f},\mathbf{g}]$ linearita (3.227)

4) $\big[\mathbf{f},[\mathbf{g},\mathbf{h}]\big]+\big[\mathbf{g},[\mathbf{h},\mathbf{f}]\big]+\big[\mathbf{h},[\mathbf{f},\mathbf{g}]\big]=0$ Bianciho identita (3.228)

Jde o další zobrazení, při kterém dvojici vektorů přiřadíme vektor. V případě vektorového součinu má ale tento „vektor“ poněkud jiné transformační vlastnosti než běžné vektory. Z linearity v prvním argumentu a antisymetrie plyne okamžitě linearita ve druhém argumentu. Poslední relace vznikne cyklickou záměnou z prvního členu. Tři typické příklady Lieových algeber jsou:

◖ Příklad 3.21: Vektorový součin uspořádaných trojic

$$\mathbf{f}\equiv(f_1,f_2,f_3),\quad \mathbf{g}=(g_1,g_2,g_3);\qquad f_i,g_i\in C(R)\qquad \alpha\in C(R)$$

$$+\ :\quad \mathbf{f}+\mathbf{g}\equiv(f_1+g_1,f_2+g_2,f_3+g_3),$$

$$\cdot\ :\quad \alpha\cdot\mathbf{f}\equiv(\alpha f_1,\alpha f_2,\alpha f_3),$$

$$[\,,\,]\ :\quad [\mathbf{f}\,,\mathbf{g}]\equiv\mathbf{f}\times\mathbf{g}\,.$$

Za Lieovu algebru na uspořádaných trojicích poslouží vektorový součin. Ověřte, že vektorový součin splňuje všechny vlastnosti Lieovy algebry (3.225) až (3.228). Ukažme zde jen, že platí poslední relace:

$$\big[\mathbf{f},[\mathbf{g},\mathbf{h}]\big]+\big[\mathbf{g},[\mathbf{h},\mathbf{f}]\big]+\big[\mathbf{h},[\mathbf{f},\mathbf{g}]\big]=$$

$$=\mathbf{f}\times(\mathbf{g}\times\mathbf{h})+\mathbf{g}\times(\mathbf{h}\times\mathbf{f})+\mathbf{h}\times(\mathbf{f}\times\mathbf{g})=$$

$$=\mathbf{g}(\mathbf{f}\cdot\mathbf{h})-\mathbf{h}(\mathbf{f}\cdot\mathbf{g})+\mathbf{h}(\mathbf{g}\cdot\mathbf{f})-\mathbf{f}(\mathbf{g}\cdot\mathbf{h})+\mathbf{f}(\mathbf{h}\cdot\mathbf{g})-\mathbf{g}(\mathbf{h}\cdot\mathbf{f})=0\,.$$

Z tohoto příkladu je patrné, že Lieova algebra je v jistém smyslu zobecněním vektorového součinu. Podobné vlastnosti, jako má vektorový součin, mají i další struktury.

◗

◖ Příklad 3.22: Komutátor čtvercových matic

Pro konkrétnost budeme uvažovat matice 2×2 a operace skládání, natahování a Lieovu operaci budeme definovat podle předpisů

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

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

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

Lieova algebra je definována za pomoci maticového násobení jako tzv. *komutátor*. Je-li $\mathbb{AB} = \mathbb{BA}$ matice komutují a komutátor $[\,\mathbb{A}\,,\mathbb{B}\,]$ je roven nule. Ověřte, že komutátor splňuje všechny vlastnosti Lieovy algebry (3.225) až (3.228). Opět ukážeme, že platí poslední z vlastností:

$$[\mathbb{A},[\mathbb{B},\mathbb{C}]]+[\mathbb{B},[\mathbb{C},\mathbb{A}]]+[\mathbb{C},[\mathbb{A},\mathbb{B}]] =$$
$$= \mathbb{A}(\mathbb{BC}-\mathbb{CB})-(\mathbb{BC}-\mathbb{CB})\mathbb{A}+\cdots = \mathbb{ABC}-\mathbb{ACB}-\mathbb{BCA}\pm\cdots = 0 .$$

◗

◖ Příklad 3.23: Poissonovy závorky

Na prostoru reálných funkcí reálných proměnných $f(q,p)$ lze definovat operace

$$+ \quad : \quad f+g \equiv f(q,p)+g(q,p) \quad ,$$

$$\cdot \quad : \quad \alpha \cdot f \equiv \alpha f(\,q,p) \quad ,$$

$$[\,,\,] \quad : \quad [f\,,g\,] \equiv \frac{\partial f}{\partial q}\frac{\partial g}{\partial p} - \frac{\partial f}{\partial p}\frac{\partial g}{\partial q} .$$

Opět můžeme snadno ukázat, že Poissonovy závorky splňují vlastnosti Lieovy algebry (3.225) až (3.228).

* * *

Opět jsme narazili na to, že nezáleží na volbě objektů, ale na vlastnostech operací, které s nimi vykonáváme. To je ve fyzice i v matematice velmi časté. Vektorový součin, komutátor matic a Poissonovy závorky jsou velmi odlišné operace, přesto mají společné vlastnosti a analogické chování. Pokud lineární vektorový prostor doplníme o skalární součin, dostaneme *unitární prostor* a v případě úplnosti, kdy každá konvergentní posloupnost konverguje k nějakému prvku prostoru, dostaneme *Hilbertův prostor*. Pokud lineární vektorový prostor doplníme o Lieovu operaci, dostaneme *Lieovu algebru*. Obě struktury mají skvělé uplatnění ve fyzice i v matematice. Bez Hilbertových prostorů si dnes sotva dokážeme představit kvantovou teorii. A Lieova algebra vektorového součinu je základem pro popis veškerých rotačních pohybů, komutátory matic či operátorů mají široké uplatnění v kvantové teorii a Poissonovy závorky umožňují hledat časový vývoj proměnných v klasické mechanice.

* * *

Strukturní koeficienty Lieovy algebry

V lineárním vektorovém prostoru můžeme jednotlivé prvky psát jako lineární kombinace jiných prvků. Ideální je zvolit tzv. bázi – maximální množinu nezávislých prvků. Prvků báze musí být „akorát". Je-li prvků málo, nejde o maximální počet nezávislých vektorů, je-li jich moc, jsou prvky už nutně závislé (jeden z nich lze zapsat jako kombinaci ostatních). Ideální báze je ortonormální, tj. prvky jsou navzájem kolmé a mají jednotkovou velikost. Rozvineme-li prvky prostoru do příslušné báze, můžeme psát:

$$[\mathbf{f},\mathbf{g}] = [f_k\,\mathbf{e}_k\,, g_l\,\mathbf{e}_l] = f_k g_l\,[\mathbf{e}_k,\mathbf{e}_l]\,. \tag{3.229}$$

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

$$[\mathbf{e}_k,\mathbf{e}_l] = c_{kl}^m\,\mathbf{e}_m\,. \tag{3.230}$$

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

$$[\mathbf{f},\mathbf{g}] = c_{kl}^m\,x_k y_l\,\mathbf{e}_m\,. \tag{3.231}$$

Zadáním strukturních koeficientů je určena celá Lieova algebra. Z antisymetrie Lieovy operace (3.225) plyne antisymetrie strukturních koeficientů

$$c_{kl}^m = -c_{lk}^m\,. \tag{3.232}$$

◖ Příklad 3.24: Uspořádané trojice

Na uspořádaných trojicích lze zvolit bázi

$$\mathbf{e}_1 = (1,0,0)\,; \qquad \mathbf{e}_2 = (0,1,0)\,; \qquad \mathbf{e}_3 = (0,0,1)\,.$$

Nyní určíme strukturní koeficienty z vektorového součinu (Lieovy operace), který musíme provést pro všechny kombinace prvků báze:

$$[\mathbf{e}_1,\mathbf{e}_2] = \mathbf{e}_1\times\mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_3\,, \qquad [\mathbf{e}_2,\mathbf{e}_3] = \mathbf{e}_2\times\mathbf{e}_3 = \mathbf{e}_1\,, \qquad [\mathbf{e}_3,\mathbf{e}_1] = \mathbf{e}_3\times\mathbf{e}_1 = \mathbf{e}_2\,.$$

Ostatní kombinace jsou nulové. Nenulové strukturní koeficienty tedy jsou

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

◖ Příklad 3.25: Čtvercové matice

Na komplexních maticích 2×2 lze zvolit bázi

$$\boldsymbol{\sigma}_0 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix};\quad \boldsymbol{\sigma}_1 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & 1\\ 1 & 0\end{pmatrix};\quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}0 & -\mathrm{i}\\ \mathrm{i} & 0\end{pmatrix};\quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \frac{1}{2}\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}.$$

Matice $\boldsymbol{\sigma}_0$ je jednotková matice (až na normovací konstantu 1/2); $\boldsymbol{\sigma}_k$ $k = 1,2,3$ jsou tzv. Pauliho matice, v kvantové teorii mají význam operátoru spinu. Snadno vypočteme (ověřte!)

$$[\boldsymbol{\sigma}_1,\boldsymbol{\sigma}_2] = \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_2 - \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_1 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_3\,,$$
$$[\boldsymbol{\sigma}_2,\boldsymbol{\sigma}_3] = \boldsymbol{\sigma}_2\boldsymbol{\sigma}_3 - \boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_2 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_1\,,$$
$$[\boldsymbol{\sigma}_3,\boldsymbol{\sigma}_1] = \boldsymbol{\sigma}_3\boldsymbol{\sigma}_1 - \boldsymbol{\sigma}_1\boldsymbol{\sigma}_3 = \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}_2\,,$$
$$[\boldsymbol{\sigma}_0,\boldsymbol{\sigma}_1] = [\boldsymbol{\sigma}_0,\boldsymbol{\sigma}_2] = [\boldsymbol{\sigma}_0,\boldsymbol{\sigma}_3] = 0\,.$$

Jednotková matice komutuje s každou maticí. Nenulové strukturní koeficienty jsou

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

* * *

Další vlastnosti některých Lieových algeber

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

$$[\mathbb{AB},\mathbb{C}] = \mathbb{A}[\mathbb{B},\mathbb{C}] + [\mathbb{A},\mathbb{C}]\mathbb{B}\,, \tag{3.233}$$

$$[\mathbb{A},\mathbb{BC}] = \mathbb{B}[\mathbb{A},\mathbb{C}] + [\mathbb{A},\mathbb{B}]\mathbb{C}\,. \tag{3.234}$$

Důkaz:

$$\mathbb{A}[\mathbb{B},\mathbb{C}] + [\mathbb{A},\mathbb{C}]\mathbb{B} = \mathbb{A}(\mathbb{BC}-\mathbb{CB}) + (\mathbb{AC}-\mathbb{CA})\mathbb{B} =$$
$$= \mathbb{ABC}-\mathbb{ACB}+\mathbb{ACB}-\mathbb{CAB} = \mathbb{ABC}-\mathbb{CAB} = [\mathbb{AB},\mathbb{C}]\,.$$

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

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

Podobně lze ze znalosti základní operace $[\mathbb{A},\mathbb{B}]$ a vztahů (3.233), (3.234) určit postupně výsledek komutační relace libovolných mocnin matic $[\mathbb{A}^k,\mathbb{B}^l]$.

3.3.6 Tenzory a metrika

Předpokládejme, že máme lineární vektorový prostor opatřený bází $\{\mathbf{e}_k\}$. Vektor $\mathbf{A}$ můžeme v této bázi rozvinout do výrazu

$$\mathbf{A} = \sum_{k=1}^{N} A^k \mathbf{e}_k = A^k \mathbf{e}_k \tag{3.235}$$

Čísla A^k nazýváme složky (souřadnice, koeficienty rozvoje) vektoru, objekty $\mathbf{e}_k$ prvky báze. Různá poloha indexů naznačuje, že se složky vektorů transformují jinak než prvky báze. Nadále budeme využívat *sumační konvenci*, ale sčítání bude vždy probíhat přes jeden index dolní (transformuje se jako prvky báze) a jeden index horní (transformuje se jako složky vektorů). Přes dvojici stejného horního a dolního indexu se automaticky sčítá, jde o tzv. němé indexy. Poloha volných indexů (přes které se nesčítá) musí zůstat na obou stranách rovnosti vždy stejná. Přejděme od jedné báze k nějaké jiné, vlnkované bázi:

$$\{\mathbf{e}_k\} \quad \rightarrow \quad \{\tilde{\mathbf{e}}_k\}\,. \tag{3.236}$$

Vektor **A** je objekt, jehož vyjádření nemůže záviset na volbě báze, tj. musí platit

$$\mathbf{A} = \tilde{A}^k \tilde{\mathbf{e}}_k = A^k \mathbf{e}_k \,. \tag{3.237}$$

Složky vektorů se mezi dvěma bázemi budou transformovat za pomoci nějaké matice **S**:

$$\tilde{A}^k = S^k{}_l A^l \,. \tag{3.238}$$

Všimněte si, že se sčítá přes němý index l (jeden je nahoře a druhý dole). Volný index k je na obou stranách rovnosti nahoře. I u matic tak musíme rozlišovat horní a dolní indexy. Transformační matici prvků báze označme **U**:

$$\tilde{\mathbf{e}}_k = U^l{}_k \mathbf{e}_l \,. \tag{3.239}$$

Vyzkoušejte si, že jde o jedinou možnost, při které se sčítá přes jeden horní a jeden dolní index, volný index k má stejnou polohu na obou stranách rovnosti a transformační matice U má stejně jako matice S první index nahoře a druhý dole. Zjistěme nyní, jaký je vztah mezi oběma transformačními maticemi **S** a **U**. Vyjděme z vyjádření vektoru **A** v nové bázi (3.239):

$$\mathbf{A} = \tilde{A}^k \tilde{\mathbf{e}}_k = S^k{}_l A^l \; U^n{}_k \mathbf{e}_n = U^n{}_k S^k{}_l A^l \mathbf{e}_n \,.$$

Je zřejmé, že v nové bázi musí být výsledek $A^l\mathbf{e}_l$ nebo $A^n\mathbf{e}_n$, chcete-li. Toho lze ale dosáhnout jediným způsobem: v posledním výrazu musí platit

$$U^n{}_k S^k{}_l = \delta^n{}_l \,, \tag{3.240}$$

kde jsme označili $\delta^n{}_l$ Kroneckerovo delta. V maticovém zápise tato podmínka říká, že

$$\mathbf{U} \cdot \mathbf{S} = \mathbf{1} \,. \tag{3.241}$$

Je zřejmé, že matice **U** a **S** jsou navzájem inverzní. To je patrné již přímo z rozkladu vektoru **A** (3.237) do obou bází. Má-li být výsledek stejný, musí se složky vektorů (horní indexy) transformovat „opačně“ než prvky báze (dolní indexy). Jedině tak dají kombinace (3.237) výsledek nezávislý na volbě báze (vektor **A**). Horní indexy budeme nazývat *kontravariantní*. Tyto indexy se transformují stejně jako složky vektoru, tj. pomocí transformační matice **S**. Dolní indexy budeme nazývat *kovariantní*. Tyto indexy se transformují stejně jako prvky báze, tj. pomocí transformační matice **U**. Indexů může být i více, například ze složek dvou vektorů můžeme sestavit výraz

$$T^{kl} \equiv A^k B^l \;; \qquad \tilde{T}^{kl} \equiv S^k{}_o S^l{}_p T^{op} \,, \tag{3.242}$$

který se musí transformovat jako součin složek vektorů. Za pomoci T^{kl} ,můžeme vytvořit opět objekt nezávislý na souřadnicové soustavě, tzv. tenzor druhého řádu:

$$\tilde{\mathbf{T}} \equiv T^{kl} \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \,. \tag{3.243}$$

Dvojšipkou někdy značíme objekt, jehož složky mají dva indexy. Symbol $\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l$ nazýváme tenzorový (diadický) součin, jde o uspořádanou dvojici prvků báze. Výraz $\mathbf{A} \otimes \mathbf{B}$ tak chápeme jako objekt se složkami, které tvoří matici A^kB^l:

► $$\mathbf{A} \otimes \mathbf{B} = A^k B^l \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \,. \tag{3.244}$$

Skalární součin, zvyšování a snižování indexů

Předpokládejme, že je na našem lineárním vektorovém prostoru definován skalární součin dvou vektorů $\mathbf{A}\cdot\mathbf{B}$, který splňuje základní vlastnosti skalárního součinu. Rozvineme-li oba vektory do báze, získáme

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = A^k B^l \, \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_l = g_{kl} A^k B^l , \tag{3.245}$$

kde jsme označili

$$g_{kl} \equiv \mathbf{e}_k \cdot \mathbf{e}_l \tag{3.246}$$

tzv. metrické koeficienty (metriku). Vidíme, že výsledek skalárního součinu dvou libovolných vektorů můžeme určit, pokud známe metrické koeficienty, tj. výsledek skalárních součinů všech prvků báze mezi sebou.

Označme inverzní matici k metrice

$$g^{kl} \equiv \left(g_{kl}\right)^{-1} ; \qquad g^{kl} g_{lm} = \delta^k{}_m . \tag{3.247}$$

Zaveďme nyní pomocné (duální) objekty

$$\mathbf{e}^k \equiv g^{kl} \mathbf{e}_l ; \qquad A_k \equiv g_{kl} A^l . \tag{3.248}$$

Nejde o skutečné prvky báze ani o skutečné komponenty vektoru, ale o formální lineární kombinace dané metrikou. Vždy platí, že index nahoře znamená transformaci pomocí stejné matice, jakou se transformují složky vektorů, a index dole znamená transformaci pomocí stejné matice, jakou se transformují prvky báze. Za pomoci metriky tak můžeme indexy libovolně snižovat nebo zvyšovat, stačí jen dodržet pravidlo, že sčítáme přes jeden horní a jeden dolní index (to zajistí invarianci součtu vzhledem k transformaci báze). Volné indexy zachovávají vždy svou polohu. Uveďme příklad:

$$g_{lo} T^{klm} = T^k{}_o{}^m .$$

Prostřední index jsme snížili za pomoci metriky. Skalární součin nyní můžeme zapsat několika způsoby:

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = g_{kl} A^k B^l = A^k B_k ,$$

kde jsme druhý index snížili za pomocí metriky. Mohli jsme ale také snížit první index:

$$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = g_{kl} A^k B^l = A_l B^l = A_k B^k .$$

Platí tedy

► $$\mathbf{A}\cdot\mathbf{B} = g_{kl} A^k B^l = A^k B_k = A_k B^k . \tag{3.249}$$

Kontravariantní (horní) složka je skutečnou složkou vektoru, kovariantní (dolní) v sobě obsahuje metriku. Definici inverzní metriky (3.247) můžeme chápat také jako snižování či zvyšování indexů:

$$\left.\begin{aligned} g^{kl} g_{lm} &= \delta^k{}_m ; \\ g^{kl} g_{lm} &= g^k{}_m ; \end{aligned}\right\} \quad \Rightarrow \quad g^k{}_m = \delta^k{}_m . \tag{3.250}$$

Metrika a Kroneckerovo delta jsou tak jediným objektem. Pokud jsou oba indexy dole, jde o metrické koeficienty. Pokud jsou oba indexy nahoře, jde o inverzní matici

k metrickým koeficientům a pokud jsou indexy smíšené, jde o Kroneckerovo delta, tedy prvky jednotkové matice. Metrika tak není nic jiného než jednotková matice s patřičně posunutými indexy. Za pomoci tenzorového zápisu můžeme psát

$$\mathbf{1} = \delta^k{}_l \mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}^l = g_{kl}\mathbf{e}^k \otimes \mathbf{e}^l = g^{kl}\mathbf{e}_k \otimes \mathbf{e}_l \,. \tag{3.251}$$

Čtyřvektory, Minkowského metrika

Ve speciální relativitě nazýváme každou čtveřici veličin, jež se transformuje Lorentzovou transformací, čtyřvektor. K základním čtveřicím patří *událost* (časová a prostorová souřadnice události), *čtyřhybnost* (energie a hybnost), *vlnový čtyřvektor* (úhlová frekvence a vlnový vektor), *čtyřpotenciál elektromagnetického pole* (skalární a vektorový potenciál), *čtyřtok* (zdrojové členy Maxwellových rovnic – hustota a tok náboje) nebo čtyřgradient. V soustavě SI musíme zajistit, aby všechny 4 složky měly stejný rozměr. To můžeme učinit nejjednodušeji vynásobením nebo vydělením časové složky univerzální konstantou c (rychlostí světla ve vakuu):

► $$\begin{aligned} x^\mu &\equiv \begin{pmatrix} ct \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}; \qquad p^\mu \equiv \begin{pmatrix} E/c \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}; \qquad k^\mu \equiv \begin{pmatrix} \omega/c \\ \mathbf{k} \end{pmatrix}; \\ A^\mu &\equiv \begin{pmatrix} \phi/c \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}; \qquad j^\mu \equiv \begin{pmatrix} \rho c \\ \mathbf{j} \end{pmatrix}; \qquad \partial_\mu \equiv \begin{pmatrix} \partial/\partial ct \\ \partial/\partial \mathbf{x} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.252}$$

Poznámka 1: Řeckými indexy budeme značit zásadně jen čtyřvektory (index 0 odpovídá časové části, indexy 1, 2, 3 prostorové části).

Poznámka 2: U čtyřgradientu jde o kovariantní (dolní) index, protože

$$\partial_\mu \equiv \frac{\partial}{\partial x^\mu},$$

tedy skutečné složky vektorů jsou ve jmenovateli, pokud zapisujeme index v čitateli, musí mít opačnou polohu, neboť se transformační matice změní na inverzní!

Poznámka 3: Metrika ve speciální relativitě se nazývá Minkowského metrika. Je diagonální a v časové části má minus. Totéž platí i pro inverzní matici (metriku s horními indexy). Metrika se smíšenými indexy je jednotková matice, tj. její prvky jsou Kroneckerovo delta:

► $$\begin{aligned} g_{\mu\nu} &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}; \qquad g^{\mu\nu} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}; \\ g^\mu{}_\nu &= \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}; \qquad g_\mu{}^\nu = \begin{pmatrix} +1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & +1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & +1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & +1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.253}$$

Zjednodušeně se často Minkowského metrika píše jako $g_{\mu\nu} = \mathrm{diag}(-1, 1, 1, 1)$, někdy se označuje symbolem $\eta^{\mu\nu}$. Za pomoci metriky nyní snadno určíme kovariantní složky běžných čtyřvektorů a kontravariantní složku čtyřgradientu:

$$\blacktriangleright \quad \begin{aligned} x_\mu &\equiv \begin{pmatrix} -ct \\ \mathbf{x} \end{pmatrix}; \qquad p_\mu \equiv \begin{pmatrix} -E/c \\ \mathbf{p} \end{pmatrix}; \qquad k_\mu \equiv \begin{pmatrix} -\omega/c \\ \mathbf{k} \end{pmatrix}; \\ A_\mu &\equiv \begin{pmatrix} -\phi/c \\ \mathbf{A} \end{pmatrix}; \qquad j_\mu \equiv \begin{pmatrix} -\rho c \\ \mathbf{j} \end{pmatrix}; \qquad \partial^\mu \equiv \begin{pmatrix} -\partial/\partial ct \\ \partial/\partial \mathbf{x} \end{pmatrix}. \end{aligned} \tag{3.254}$$

Jako ukázku práce s indexy nalezněme některé typické skalární součiny, začněme s vlnovým vektorem a událostí:

$$k \cdot x = k^\mu x_\mu = k^0(-x_0) + k^1 x_1 + k^2 x_2 + k^3 x_3 = -\omega t + \mathbf{k} \cdot \mathbf{x} \,,$$

nalevo je součin čtyřvektorů, poslední člen napravo je běžný součin v R^3. Obdobně určíme výsledky dalších ukázek

$$\mathrm{d}s^2 \equiv \mathrm{d}x_\mu \mathrm{d}x^\mu = -c^2 \mathrm{d}t^2 + \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2 \,;$$

$$j \cdot A \equiv j_\mu A^\mu = -\rho\phi + \mathbf{j} \cdot \mathbf{A} \,;$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \mathrm{div}\, \mathbf{j} = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \partial_\mu j^\mu = 0 \,;$$

$$\Box f = 0 \qquad \Leftrightarrow \qquad \partial_\mu \partial^\mu f = 0 \,.$$

Často se používá zkrácený zápis, při kterém se derivace píše za čárku. Indexy před čárkou jsou skutečnými indexy, indexy za čárkou jsou derivacemi:

$$\frac{\partial A^\mu}{\partial x^\nu} \equiv \partial_\nu A^\mu \equiv A^\mu{}_{,\nu} \,.$$

Jde vlastně o nejúspornější zápis derivace vůbec, ze kterého je zřejmé na první pohled, jak se derivace transformuje. Uveďme další příklady:

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x_\mu} \equiv \partial^\mu \varphi \equiv \varphi^{,\mu} \,;$$

$$\frac{\partial \varphi}{\partial x^\mu} \equiv \partial_\mu \varphi \equiv \varphi_{,\mu} \,;$$

$$\frac{\partial^2 T^\alpha{}_\beta}{\partial x^\mu \partial x_\nu} \equiv \partial_\mu \partial^\nu T^\alpha{}_\beta \equiv T^\alpha{}_{\beta,\mu}{}^\nu \,;$$

$$\Box f \equiv \partial_\mu \partial^\mu f \equiv f_{,\mu}{}^\mu \,.$$

3.4 Diracova symbolika a operátory v kvantové teorii

V této kapitole se budeme zabývat nejdůležitější matematikou potřebnou v kvantové teorii. Veškeré úvahy jsou z důvodu jednoduchosti provedeny pro případ, kdy vlastní čísla operátorů jsou navzájem různá a tvoří spočetnou množinu. Obecnější případy vícenásobných vlastních čísel a spojitého spektra jsou v tomto textu diskutovány jen okrajově. V kapitole 3.3.1 jsme rozšířili pojem vektoru na obecnější objekty, než jsou uspořádané trojice a zavedli lineární vektorový prostor. V kapitole 3.3.2 jsme k operaci natahování a skládání vektorů přidali skalární součin a zavedli unitární prostor jako prototyp prostorů se skalárním součinem. V této kapitole budeme důsledně používat Diracovu symboliku, kterou zavedl Paul Adrien Maurice Dirac pro kvantovou teorii. Prvky lineárních vektorových prostorů jsou 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.

3.4.1 Hilbertovy prostory

Připomeňme si konstrukce některých prostorů se skalárním součinem, které jsme zavedli v kapitole 3.3.2:

$$\mathcal{R}^3 \qquad \langle\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\rangle \equiv f_1 g_1 + f_2 g_2 + f_3 g_3; \qquad f_k, g_k \in \mathcal{R},\ k = 1, 2, 3 \tag{3.255}$$

$$C^N \qquad \langle\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\rangle = \sum_{k=1}^{N} f_k^* g_k; \qquad f_k, g_k \in C,\ k = 1, \ldots N \tag{3.256}$$

$$\ell^2 \qquad \langle\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\rangle = \sum_{k=1}^{\infty} f_k^* g_k; \qquad \{f_k, g_k\}_{k=1}^{\infty} \in C \tag{3.257}$$

$$\mathcal{L}^2 \qquad \langle\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\rangle \equiv \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\, g(x)\, \mathrm{d}x; \qquad f(x),\ g(x) : \mathcal{R} \to C \tag{3.258}$$

V prostorech v ℓ^2, respektive $\mathcal{L}^2$ je třeba zahrnout jen prvky s $\| \mathbf{f} \| < \infty$, tj. požadujeme, aby posloupnosti byly sčítatelné s kvadrátem a funkce integrovatelné s kvadrátem. Unitární prostory umožňují zjistit velikost prvku, najít úhly mezi prvky, provést projekci prvku do nějakého směru, rozvíjet prvky do různých bází atd. Pokud ale nalezneme posloupnost prvků, která v unitárním prostoru v nějakém smyslu konverguje, může se stát, že limita této posloupnosti nebude součástí unitárního prostoru. Nejjednodušším příkladem je otevřený interval (0, 1), pro jehož prvky (čísla z tohoto intervalu) můžeme opatřit operacemi natahování, skládání a skalárního součinu v prostoru $\mathcal{R}^N$ pro $N = 1$. Posloupnost prvků $|\,f_k\,\rangle = 1/k$ evidentně pro $k \to \infty$ konverguje k nule, která ale není

součástí námi zavedeného unitárního prostoru. Pokud bychom vzali uzavřený interval, této potíži se vyhneme. Proto se namísto unitárních prostorů spíše používají Hilbertovy prostory.

Hilbertův prostor je úplný unitární prostor. Úplnost znamená, že jakákoli posloupnost konvergující v nějakém smyslu vždy konverguje k prvku, který je součástí tohoto prostoru. Zjednodušeně řečeno jde o prostory, které obsahují svou hranici, tj. hranice je jejich součástí. *Separabilním Hilbertovým prostorem* nazýváme Hilbertův prostor se spočetnou bází.

Poznámka 1: Přidáním operace [,] z lineárního vektorového prostoru získáme Lieovu algebru, přidáním operace $\langle\ |\ \rangle$ získáme unitární prostor.

Poznámka 2: Symbolika zápisu pochází od P. A. M. Diraca. Nazývá se také braketová symbolika nebo brakety (z anglického bracket = závorka).

$\langle\ |\ \rangle$ „braket“;

$\langle\ |$ „bra“ (lze přesně definovat, naznačená operace skalárního součinu);

$|\ \rangle$ „ket“ (vektor z $\mathcal{V}$).

Poznámka 3: Pro komplexní N-tice lze interpretovat $|\,\mathbf{f}\,\rangle$ jako sloupcovou matici, $\langle\,\mathbf{f}\,|$ jako transponovanou komplexně sdruženou matici:

$$|\,\mathbf{f}\,\rangle = \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{pmatrix}; \qquad \langle\,\mathbf{f}\,| = \begin{pmatrix} f_1^* & \cdots & f_N^* \end{pmatrix}.$$

Potom je skalární součin

$$\langle\,\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\,\rangle = \begin{pmatrix} f_1^* & \cdots & f_N^* \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_N \end{pmatrix} = f_k^* g_k$$

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

Poznámka 4: Pro $\mathcal{L}^2$ lze chápat

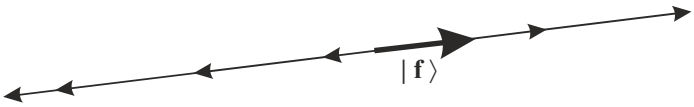
$$\langle\,\mathbf{f}\,| = \int_{-\infty}^{+\infty} f^*(x)\ \cdots\ \mathrm{d}x$$

jako naznačenou operaci skalárního součinu. Je jen třeba doplnit patřičnou funkci, na kterou operace působí. Podobná situace je u derivování, napíšeme-li jen $\mathrm{d}/\mathrm{d}x$.

Poznámka 5: Diracova symbolika mimořádně zjednodušila většinu zápisů v kvantové teorii. Matematikové k ní z počátku byli nedůvěřiví, nicméně ji po určité době akceptovali. Dnes si nedokážeme zápis dějů probíhajících v mikrosvětě bez této symboliky představit. Zejména zápisy projekčních operátorů, věty o úplnosti nebo věty o spektrálním rozvoji by bez této symboliky byly mimořádně nepřehledné a kostrbaté.

Paprsek

Nechť $\mathcal{H}$ je Hilbertův prostor a $|\mathbf{f}\rangle$ jeho nenulový prvek. Paprskem nataženým na $|\mathbf{f}\rangle$ nazveme množinu prvků $\{|\mathbf{g}\rangle;\ |\mathbf{g}\rangle = \alpha|\mathbf{f}\rangle;\quad \alpha \in C\setminus\{0\},\quad |\mathbf{f}\rangle, |\mathbf{g}\rangle \in \mathcal{H}\}$.



Obr. 3.20: Paprsek

3.4.2 Operátory

Operátorem rozumíme zobrazení $\hat{\mathbf{A}}:\ \mathcal{H} \to \mathcal{H}$, 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 (*vzor, obraz, definiční obor, obor hodnot*…).

◖ Příklad 3.26: Prostor $\mathcal{R}^3$

Operátorem na $\mathcal{R}^3$ může být libovolná matice 3×3, například

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

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

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

◗

◖ Příklad 3.27: Prostor $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$

Za typický operátor na prostoru funkcí můžeme považovat derivaci funkce. Vždy musíme ale vybírat funkce integrovatelné s kvadrátem a zkontrolovat, zda si i po derivování tuto vlastnost ponechaly:

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

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

◗

Jednotkový operátor

Jednotkový operátor je definován předpisem

► $$\hat{\mathbf{1}}|\,\mathbf{f}\,\rangle \;\equiv\; |\,\mathbf{f}\,\rangle\,. \tag{3.259}$$

Pro N-tice je jednotkovým operátorem diagonální matice s jednotkami na diagonále (jednotková matice) – ověřte!

Kvadrát operátoru

Druhou mocninu operátoru můžeme definovat, je-li obor funkčních hodnot operátoru podmnožinou jeho definičního oboru, potom lze psát

$$\hat{\mathbf{A}}^2\,|\,\mathbf{f}\,\rangle \;\equiv\; \hat{\mathbf{A}}\Big(\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}\,\rangle\Big)\,. \tag{3.260}$$

◖ **Příklad 3.28: Druhá mocnina derivace**

Druhá mocnina derivace je podle předchozí definice druhou derivací dané funkce:

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

$$\hat{\mathbf{D}}^2\,|\,\mathbf{f}\,\rangle \;\equiv\; \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{e}^{-x^2}\Big) \;=\; \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\Big(\,-2x\,\mathrm{e}^{-x^2}\Big) \;=\; (-2+4x^2)\,\mathrm{e}^{-x^2}\,.$$

◗

Mocnina operátoru

Mocninu operátoru definujeme indukcí (předpokládáme znalost druhé mocniny a to, že obor funkčních hodnot je podmnožinou definičního oboru operátoru):

► $$\hat{\mathbf{A}}^n\,|\,\mathbf{f}\,\rangle \;\equiv\; \hat{\mathbf{A}}\Big(\,\hat{\mathbf{A}}^{n-1}\,|\,\mathbf{f}\,\rangle\Big)\,. \tag{3.261}$$

Funkce operátoru

Nechť $f(x)$ je analytická funkce s Taylorovým rozvojem

► $$f(x) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} c_k x^k\,. \tag{3.262}$$

Potom můžeme definovat funkci operátoru předpisem

$$f(\hat{\mathbf{A}}) \;=\; \sum_{k=0}^{\infty} c_k \hat{\mathbf{A}}^k\,. \tag{3.263}$$

Rozvoje některých důležitých funkcí naleznete v závěru kapitoly 3.10.5:

◖ **Příklad 3.29: Exponenciála z matice**

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

Řešení: Nejprve si určíme jednotlivé mocniny zadané matice (jde o jednu z Pauliho matic, které se využívají v kvantové teorii jako operátory spinu):

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

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

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

$$\vdots$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{2n-1} = \hat{\mathbf{A}}, \qquad \hat{\mathbf{A}}^{2n} = \hat{\mathbf{1}}, \qquad n = 1, 2, \ldots .$$

Nyní již snadno nalezneme hledanou funkci matice:

$$\exp(\hat{\mathbf{A}}) = 1 + \hat{\mathbf{A}} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^2}{2!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^3}{3!} + \frac{\hat{\mathbf{A}}^4}{4!} + \cdots =$$

$$= \left(1 + \frac{1}{2!} + \frac{1}{4!} + \frac{1}{6!} + \cdots\right) \hat{\mathbf{1}} + \left(1 + \frac{1}{3!} + \frac{1}{5!} + \frac{1}{7!} + \cdots\right) \hat{\mathbf{A}} =$$

$$= \mathrm{ch}(1)\, \hat{\mathbf{1}} + \mathrm{sh}(1)\, \hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,1 & -\mathrm{i}\,\mathrm{sh}\,1 \\ \mathrm{i}\,\mathrm{sh}\,1 & \mathrm{ch}\,1 \end{pmatrix}.$$

Takto získají smysl například i výrazy typu sin (d/dx) a podobně. Později se naučíme funkci operátoru nalézt pomocí spektrálního rozvoje operátoru, viz vztah (3.296). Jde o efektivnější způsob než je Taylorův rozvoj. ◗

Inverzní operátor

Inverzním operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^{-1}$, že pro něho platí

► $$\hat{\mathbf{A}} \cdot \hat{\mathbf{A}}^{-1} = \hat{\mathbf{A}}^{-1} \cdot \hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{1}}. \tag{3.264}$$

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

Sdružený operátor

Sdruženým operátorem k $\hat{\mathbf{A}}$ nazveme takový operátor $\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}$, že pro něho platí

► $$\langle\, \mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{A}}\mathbf{g} \,\rangle = \langle\, \hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \,\rangle. \tag{3.265}$$

Působení původního operátoru v pravé straně skalárního součinu dopadne stejně jako působení k němu sdruženého operátoru v levé části skalárního součinu. Sdružený operátor nemusí vždy existovat.

◖ **Příklad 3.30: Inverzní a sdružený operátor k matici 2×2**

Dokažte, že k zadané matici mají inverzní a sdružený operátor tvar daný vztahy:

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

Stačí dosadit do definičních vztahů (3.264) a (3.265):

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

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

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{g}\,\rangle=\begin{pmatrix}1 & 2\mathrm{i}\\ 0 & \mathrm{i}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}g_1\\ g_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}g_1+2\mathrm{i}\,g_2\\ \mathrm{i}\,g_2\end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\,|\,\mathbf{f}\,\rangle=\begin{pmatrix}1 & 0\\ -2\mathrm{i} & -\mathrm{i}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}f_1\\ f_2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}f_1\\ -2\mathrm{i}\,f_1-\mathrm{i}\,f_2\end{pmatrix}\;\Rightarrow$$

$$\langle\,\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\mathbf{g}\,\rangle=\begin{pmatrix}f_1^{*} & f_2^{*}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}g_1+2\mathrm{i}\,g_2\\ \mathrm{i}\,g_2\end{pmatrix}=f_1^{*}g_1+2\mathrm{i}\,f_1^{*}g_2+\mathrm{i}\,f_2^{*}g_2\,,$$

$$\langle\,\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\,\rangle=\begin{pmatrix}f_1^{*} & 2\mathrm{i}\,f_1^{*}+\mathrm{i}\,f_2^{*}\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}g_1\\ g_2\end{pmatrix}=f_1^{*}g_1+2\mathrm{i}\,f_1^{*}g_2+\mathrm{i}\,f_2^{*}g_2\,.$$

◗

Poznámka: Nalézt sdružený operátor pro matice je velmi snadné, původní matici stačí komplexně sdružit a poté transponovat (překlopit kolem diagonály), tj.

$$\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}=(\hat{\mathbf{A}}^{*})^{T}.$$

Uveďme nyní velmi užitečné vztahy pro výpočet inverzního a sdruženého operátoru pro součin dvou operátorů:

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1}=\hat{\mathbf{B}}^{-1}\hat{\mathbf{A}}^{-1}\,, \tag{3.266}$$

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{\dagger}=\hat{\mathbf{B}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\,. \tag{3.267}$$

Jejich důkaz je triviální přímo z definice inverzního a sdruženého operátoru:

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1}\cdot\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}=\hat{\mathbf{1}}\qquad/\;\;\hat{\mathbf{B}}^{-1}\quad\text{zprava}\,,$$

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1}\cdot\hat{\mathbf{A}}=\hat{\mathbf{B}}^{-1}\qquad/\;\;\hat{\mathbf{A}}^{-1}\quad\text{zprava}\,,$$

$$(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{-1}=\hat{\mathbf{B}}^{-1}\hat{\mathbf{A}}^{-1}\,.$$

Analogicky postupujeme i pro sdružený operátor:

$$\langle\,(\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}})^{\dagger}\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\,\rangle=\langle\,\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}\mathbf{g}\,\rangle=\langle\,\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\mathbf{f}\,|\hat{\mathbf{B}}\mathbf{g}\,\rangle=\langle\,\hat{\mathbf{B}}^{\dagger}\hat{\mathbf{A}}^{\dagger}\,\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\,\rangle\,.$$

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*

► $$[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}]\equiv\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{B}}-\hat{\mathbf{B}}\hat{\mathbf{A}}\,. \tag{3.268}$$

Je-li komutátor operátorů $\hat{\mathbf{A}}$, $\hat{\mathbf{B}}$ nulový, operátory komutují, je-li různý od nuly nekomutují. Výsledkem komutátoru je opět operátor. Uveďme nejdůležitější vlastnosti komutátorů (zkuste je dokázat)

$$1)\quad [\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] = -[\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{A}}],$$
$$2)\quad [\hat{\mathbf{A}}+\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{C}}] = [\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{C}}]+[\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{C}}],$$
$$3)\quad [\alpha\cdot\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}] = \alpha\cdot[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}],$$
$$4)\quad [\hat{\mathbf{A}},[\hat{\mathbf{B}},\hat{\mathbf{C}}]]+[\hat{\mathbf{B}},[\hat{\mathbf{C}},\hat{\mathbf{A}}]]+[\hat{\mathbf{C}},[\hat{\mathbf{A}},\hat{\mathbf{B}}]] = 0.$$

To jsou ale právě definiční vlastnosti Lieovy algebry (3.225) až (3.228). Komutátory tvoří Lieovu algebru na prostoru operátorů.

◖ Příklad 3.31: Komutační relace [d/dx, x]

Mějme na $\mathcal{L}^2$ dva operátory: $\hat{\mathbf{D}} = \mathrm{d}/\mathrm{d}x$ a $\hat{\mathbf{X}} = x$, například na prvek $|x^5\rangle$ působí takto

$$\hat{\mathbf{D}}\,|x^5\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x^5 = 5x^4, \qquad \hat{\mathbf{X}}\,|x^5\rangle = x\cdot x^5 = x^6.$$

Určeme jejich komutátor

$$[\hat{\mathbf{D}},\hat{\mathbf{X}}]\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = (\hat{\mathbf{D}}\hat{\mathbf{X}}-\hat{\mathbf{X}}\hat{\mathbf{D}})\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}x - x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)f(x) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\big(x\,f(x)\big) - x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x) =$$
$$= f(x) + x\,f'(x) - x\,f'(x) = f(x) = |\,\mathbf{f}\,\rangle \quad \Rightarrow$$
$$[\hat{\mathbf{D}},\hat{\mathbf{X}}]\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = |\,\mathbf{f}\,\rangle = \quad \text{pro } \forall\ |\,\mathbf{f}\,\rangle \in \mathcal{L}^2 \qquad \Rightarrow$$
$$[\hat{\mathbf{D}},\hat{\mathbf{X}}] = \hat{\mathbf{1}}.$$

Podobně můžeme určovat i další komutační relace.

◗

V celém tomto textu se budeme zabývat ***lineárními operátory***, tj. operátory s lineární odezvou:

$$\hat{\mathbf{A}}(\alpha|\,\mathbf{f}\,\rangle + \beta|\,\mathbf{g}\,\rangle) = \alpha\,\hat{\mathbf{A}}|\,\mathbf{f}\,\rangle + \beta\,\hat{\mathbf{A}}|\,\mathbf{g}\,\rangle.$$

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.

► $$\langle\,\mathbf{f}\,|\,\mathbf{g}\,\rangle = \langle\,\hat{\mathbf{U}}\,\mathbf{f}\,|\,\hat{\mathbf{U}}\mathbf{g}\,\rangle. \tag{3.269}$$

Skalární součin se před a po působení unitárního operátoru nezmění.

Věta: Pro unitární operátory je sdružený a inverzní operátor totožný, tj.

► $$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{U}}^{-1}. \tag{3.270}$$

Důkaz: Z definice sdruženého operátoru víme, že

$$\langle \hat{\mathbf{U}}\mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{U}}\mathbf{g} \rangle = \langle \hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}}\mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle .$$

Pro zachování skalárního součinu (definice unitárního operátoru) je nutné, aby

$$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger}\hat{\mathbf{U}} = \hat{\mathbf{1}},$$

to ale podle definice inverzního operátoru právě znamená, že

$$\hat{\mathbf{U}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{U}}^{-1} .$$

◖ **Příklad 3.32: Operátor $\hat{\mathbf{U}} \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}x}$**

Ukážeme, že operátor $\hat{\mathbf{U}} \equiv \mathrm{e}^{\mathrm{i}x}$ na prostoru $\mathcal{L}^2$ je unitární:

$$|\mathbf{f}\rangle = f(x), \qquad \hat{\mathbf{U}}|\mathbf{f}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}x} f(x),$$

$$|\mathbf{g}\rangle = g(x), \qquad \hat{\mathbf{U}}|\mathbf{g}\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}x} g(x),$$

$$\langle \hat{\mathbf{U}}\mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{U}}\mathbf{g} \rangle = \int \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}x} f(x)\right)^{*} \mathrm{e}^{\mathrm{i}x} g(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x} f^{*}(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}x} g(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= \int f^{*}(x)\, g(x)\,\mathrm{d}x = \langle \mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle .$$

◗

Hermitovy operátory

Definice: Hermitův operátor působí v obou částech skalárního součinu stejně, tj.

► $$\langle \hat{\mathbf{A}}\mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle = \langle \mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{A}}\mathbf{g} \rangle . \tag{3.271}$$

Věta: Pro Hermitův operátor je sdružený operátor roven původnímu, je *samosdružený*:

► $$\hat{\mathbf{A}}^{\dagger} = \hat{\mathbf{A}} . \tag{3.272}$$

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

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

Centrální pozice $\hat{\mathbf{A}}$ naznačuje, že podle vlastního uvážení můžeme operátorem zapůsobit vlevo či vpravo. Tato struktura se někdy nazývá *Diracův sendvič*.

◖ **Příklad 3.33: Operátor $\hat{\mathbf{B}} \equiv \mathrm{i}\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$**

Ukážeme, že operátor $\hat{\mathbf{B}} = \mathrm{i}\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ na prostoru $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$ je hermitovský:

$$\langle \hat{\mathbf{B}}\mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f(x) \right)^* g(x)\,\mathrm{d}x =$$

$$= -\mathrm{i} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}f^*(x)}{\mathrm{d}x} g(x)\,\mathrm{d}x \overset{\text{p.partes}}{=}$$

$$= -\mathrm{i}\left[f^*(x)\, g(x) \right]_{-\infty}^{\infty} + \mathrm{i} \int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x}\,\mathrm{d}x =$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f^*(x) \left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}g(x)}{\mathrm{d}x} \right) \mathrm{d}x = \langle \mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{B}}\mathbf{g} \rangle .$$

Výraz v hranaté závorce je nulový, neboť funkce z $\mathcal{L}^2(-\infty, \infty)$ jsou integrovatelné s kvadrátem na $(-\infty, \infty)$, a proto musí platit

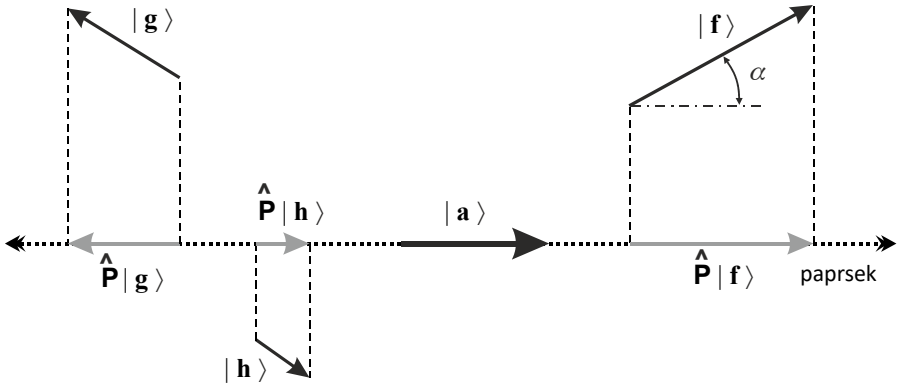
$$\lim_{x \to \pm\infty} f(x) = \lim_{x \to \pm\infty} g(x) = 0 \quad \text{pro } \forall\, f, g \in \mathcal{L}^2 .$$

Samotný operátor derivace $\hat{\mathbf{D}} = \mathrm{d}/\mathrm{d}x$ hermitovský není, při provedení integrace per partes by se zaměnilo znaménko a platilo by

$$\langle \hat{\mathbf{D}}\mathbf{f} \,|\, \mathbf{g} \rangle = -\langle \mathbf{f} \,|\, \hat{\mathbf{D}}\mathbf{g} \rangle .$$ ◗

3.4.3 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.



Obr. 3.21: Projekce vektorů do zadaného směru

Z celého paprsku stačí vzít jediný vektor, který paprsek zcela popíše. Vybereme tento „reprezentativní“ vektor jednotkový, tj. tak, aby $\langle \mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle = 1$, tj. $\|\mathbf{a}\| = 1$. Snadno představitelná je situace v $\mathcal{R}^2$. Na obrázku vidíme jednotkový vektor $|\mathbf{a}\rangle$ reprezentující paprsek a vektory $|\mathbf{f}\rangle$, $|\mathbf{g}\rangle$, $|\mathbf{h}\rangle$, které do tohoto paprsku budeme promítat.

Projekce libovolného vektoru $|\mathbf{f}\rangle$ má velikost $\|\mathbf{f}\|\cdot\cos\alpha$ a směr $|\mathbf{a}\rangle / \|\mathbf{a}\|$. Znaménko funkce cos ve velikosti projekce určuje, zda promítaný vektor míří ve směru $|\mathbf{a}\rangle$ nebo ve směru opačném. Projekci lze napsat jako součin její velikosti a směru:

$$\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{f}\rangle = \|\mathbf{f}\|\cdot\cos\alpha\,\frac{|\mathbf{a}\rangle}{\|\mathbf{a}\|} = \|\mathbf{f}\|\cdot\frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\|\mathbf{a}\|\cdot\|\mathbf{f}\|}\cdot\frac{|\mathbf{a}\rangle}{\|\mathbf{a}\|} = \frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\|\mathbf{a}\|\cdot\|\mathbf{a}\|}|\mathbf{a}\rangle = \frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle}|\mathbf{a}\rangle .$$

Povšimněte si, že při úpravách výrazů v Diracově symbolice můžeme libovolně stěhovat čísla (normy vektorů a skalární součiny). Výraz pro projekci se skládá z koeficientu, který určuje velikost projekce a vektoru $|\mathbf{a}\rangle$. Zapíšeme-li formálně koeficient až za vektor, získáme operátorový tvar:

$$\hat{\mathbf{P}}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{a}\rangle\frac{\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle}.$$

Označme

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle}. \tag{3.273}$$

Tento výraz se nazývá projekčním operátorem. Sám o sobě význam nemá, jde o naznačenou operaci skalárního součinu, která musí být vykonána. Teprve zapůsobením projekčního operátoru na nějaký vektor $|\mathbf{f}\rangle$ dostaneme smysluplný výraz – projekci vektoru danou koeficientem $\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle / \langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle$ a směrem vektoru $|\mathbf{a}\rangle$. Situace je podobná operátoru d/dx, také jde jen o naznačenou derivaci, která musí být vykonána na konkrétní funkci. Bude-li vektor $|\mathbf{a}\rangle$ jednotkový, výrazy se ještě zjednoduší:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}} &\equiv |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|,\\ \hat{\mathbf{P}}|\mathbf{f}\rangle &\equiv |\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle .\end{aligned} \tag{3.274}$$

Koeficient projekce je $\langle\mathbf{a}|\mathbf{f}\rangle$ a směr je $|\mathbf{a}\rangle$.

◖ Příklad 3.34: Projekce v rovině

Nalezněte projekci vektoru $|\mathbf{f}\rangle$ do vektorů $|\mathbf{a}\rangle$ a $|\mathbf{b}\rangle$. Vektory jsou dány takto:

$$|\mathbf{f}\rangle = \begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix}; \qquad |\mathbf{a}\rangle = \begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}; \qquad |\mathbf{b}\rangle = \begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}.$$

Řešení: Nejprve nalezneme projekční operátory:

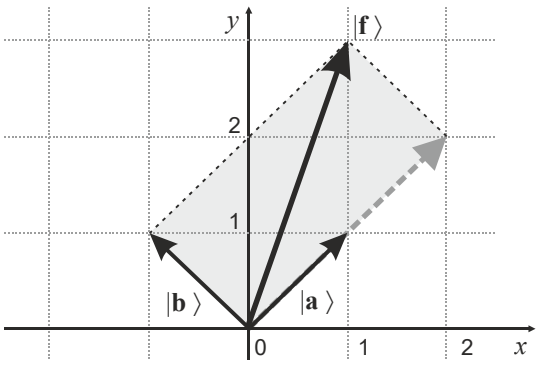
$$\hat{\mathbf{P}}_a \equiv \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix}1 & 1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix}1 & 1\\1 & 1\end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix}1/2 & 1/2\\1/2 & 1/2\end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{P}}_b \equiv \frac{|\,\mathbf{b}\,\rangle\langle\,\mathbf{b}\,|}{\langle\,\mathbf{b}\,|\,\mathbf{b}\,\rangle} = \frac{\begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}-1 & +1\end{pmatrix}}{\begin{pmatrix}-1 & +1\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}} = \frac{\begin{pmatrix}+1 & -1\\-1 & +1\end{pmatrix}}{2} = \begin{pmatrix}1/2 & -1/2\\-1/2 & 1/2\end{pmatrix}.$$

Nyní snadno nalezneme hledané projekce:

$$\hat{\mathbf{P}}_a\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = \begin{pmatrix}1/2 & 1/2\\1/2 & 1/2\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}2\\2\end{pmatrix},$$

$$\hat{\mathbf{P}}_b\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = \begin{pmatrix}1/2 & -1/2\\-1/2 & 1/2\end{pmatrix}\cdot\begin{pmatrix}1\\3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}-1\\+1\end{pmatrix}.$$



Obr. 3.22: Projekce vektoru $|\,\mathbf{f}\,\rangle$ do dvou kolmých směrů.

Využijme nyní tohoto příkladu a vyzkoušejte si, že platí jednoduché a užitečné relace. Výpočty jsou natolik snadné, že zde uvedeme jen výsledky:

$$\begin{aligned}
&1.\quad \hat{\mathbf{P}}_a^{\dagger} = \hat{\mathbf{P}}_a\,; \qquad \hat{\mathbf{P}}_b^{\dagger} = \hat{\mathbf{P}}_b\,.\\
&2.\quad \hat{\mathbf{P}}_a^{2} = \hat{\mathbf{P}}_a\,; \qquad \hat{\mathbf{P}}_b^{2} = \hat{\mathbf{P}}_b\,.\\
&3.\quad \hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}}.
\end{aligned} \tag{3.275}$$

První relace znamená, že projekční operátory jsou hermitovské. Pro matice je význam jednoduchý: Matice se po překlopení kolem hlavní diagonály a následném komplexním sdružení nezmění. Druhá relace má také velmi jednoduchý význam: Projekce dvakrát provedená po sobě (kvadrát operátoru) je shodná s projekcí provedenou jednou. Obě vlastnosti jsou pro projekční operátory charakteristické a většinou se považují za definici projekčního operátoru:

Projekční operátor

Projekčním operátorem nazveme takový lineární operátor, který splňuje

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{P}}^2 &= \hat{\mathbf{P}}\,;\\
\hat{\mathbf{P}}^{\dagger} &= \hat{\mathbf{P}}\,.
\end{aligned} \tag{3.276}$$

Snadno lze ukázat, že obě vlastnosti jsou splněny pro definici (3.273), například pro první vlastnost máme:

$$\hat{\mathbf{P}}^2 = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle}\cdot\frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \frac{|\mathbf{a}\rangle\langle\mathbf{a}|}{\langle\mathbf{a}|\mathbf{a}\rangle} = \hat{\mathbf{P}}.$$

V prostředním výrazu jsme zkrátili skalární součin v čitateli (uprostřed) s jedním ze skalárních součinů ve jmenovateli. Jde o prostá komplexní čísla, která lze vytknout před výrazy a krátit.

Význam třetí relace (3.275) je také snadno pochopitelný: Vektory $|\mathbf{a}\rangle$, $|\mathbf{b}\rangle$ jsou navzájem kolmé a v rovině tvoří ortogonální bázi (bázi složenou z kolmých vektorů). Projekce do těchto vektorů nejsou ničím jiným než rozkladem původního vektoru do této báze. Zkuste si obě projekce sečíst. Dostanete původní vektor. Právě matematickým vyjádřením faktu, že součet všech projekcí dá původní vektor je třetí relace:

$$\hat{\mathbf{P}}_a + \hat{\mathbf{P}}_b = \hat{\mathbf{1}} \quad \Rightarrow \quad \hat{\mathbf{P}}_a|\mathbf{f}\rangle + \hat{\mathbf{P}}_b|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{f}\rangle. \tag{3.277}$$

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.

3.4.4 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 měly jednotkovou velikost. Takové prvky budeme označovat jen pořadovým číslem: $|k\rangle$. Báze složená z vektorů $|k\rangle$ má dvě základní vlastnosti:

► $$\langle k|l\rangle = \delta_{kl}, \tag{3.278}$$

► $$\sum_k |k\rangle\langle k| = \hat{\mathbf{1}}. \tag{3.279}$$

Vlastnost (3.278) 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 (3.279) je relací úplnosti báze. Součet všech projekčních operátorů dá jednotkový operátor, tj. součet všech projekcí libovolného vektoru dá původní vektor. V relaci úplnosti je možné vynechat sumaci a využít Einsteinovu sumační konvenci. V případě neseparabilních prostorů s nespočetnou bází mají obě relace tvar:

$$\langle x|y\rangle = \delta(y-x), \tag{3.280}$$

$$\int |x\rangle\langle x|\mathrm{d}x = \hat{\mathbf{1}}. \tag{3.281}$$

Na pravé straně relace ortonormality je místo Kroneckerova symbolu Diracova δ distribuce a v relaci úplnosti je místo sumace projekčních operátorů integrace.

Rozvoj prvku do báze je v Diracově symbolice mimořádně jednoduchý. Stačí před prvek vsunout relaci úplnosti v podobě jednotkového operátoru:

$$|\mathbf{f}\rangle = \hat{\mathbf{1}}|\mathbf{f}\rangle = \sum_k |k\rangle\langle k|\mathbf{f}\rangle = \sum_k c_k |k\rangle \quad , \qquad c_k \equiv \langle k|\mathbf{f}\rangle . \tag{3.282}$$

Koeficienty rozvoje jsou dány skalárním součinem rozvíjeného vektoru s prvkem báze.

◖ Příklad 3.35: Fourierova řada

Uvažujme prostor $\mathcal{L}^2(0, 2\pi)$ periodických funkcí integrovatelných s kvadrátem. Díky požadavku $f(0) = f(2\pi)$ tvoří v tomto prostoru úplnou bázi soustava funkcí (důkaz naleznete v základních učebnicích matematiky):

$$|f_k\rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \quad , \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots . \tag{3.283}$$

Tyto funkce jsou sice navzájem kolmé, ale nejsou jednotkové:

$$\langle f_k | f_l \rangle = \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} \mathrm{e}^{\mathrm{i}lx}\, \mathrm{d}x = \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(l-k)x}\, \mathrm{d}x = \begin{cases} 0 & \text{pro } l \neq k \\ 2\pi & \text{pro } l = k \end{cases} = 2\pi\delta_{kl} .$$

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

$$|k\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} \quad , \qquad k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots \quad , \tag{3.284}$$

pro kterou platí relace ortonormality (3.278) a relace úplnosti (3.279). Rozvoj libovolné funkce z našeho prostoru je potom

$$|\mathbf{f}\rangle = \sum_k c_k |k\rangle , \qquad c_k \equiv \langle k|\mathbf{f}\rangle \tag{3.285}$$

neboli zapsáno v běžné symbolice

$$f(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \sum_k c_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} , \qquad c_k = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx} f(x)\, \mathrm{d}x , \tag{3.286}$$

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.

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{1}}|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{g}\rangle \qquad \Rightarrow$$

$$\sum_l \hat{\mathbf{A}}|l\rangle\langle l|\mathbf{f}\rangle = |\mathbf{g}\rangle \qquad /\langle k| \quad \text{zleva} \quad \Rightarrow$$

$$\sum_l \langle k|\hat{\mathbf{A}}|l\rangle\langle l|\mathbf{f}\rangle = \langle k|\mathbf{g}\rangle . \tag{3.287}$$

Získaný výraz není ale nic jiného než maticové násobení

$$\begin{pmatrix} A_{11} & \cdots & A_{1n} & \cdots \\ \vdots & \ddots & & \\ A_{n1} & & A_{nn} & \\ \vdots & & & \ddots \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_n \\ \vdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} g_1 \\ \vdots \\ g_n \\ \vdots \end{pmatrix}, \qquad \begin{aligned} \hat{\mathbf{A}} &\to A_{kl} \equiv \langle\, k \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, l \,\rangle\,, \\ |\,\mathbf{f}\,\rangle &\to f_n \equiv \langle\, n \,|\, \mathbf{f} \,\rangle\,, \\ |\,\mathbf{g}\,\rangle &\to g_n \equiv \langle\, n \,|\, \mathbf{g} \,\rangle\,, \end{aligned}$$

neboli

$$\sum_l A_{kl} f_l = g_k \,. \tag{3.288}$$

Jestliže operátoru přiřadíme čtvercovou matici

$$\hat{\mathbf{A}} \to A_{kl} \equiv \langle\, k \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, l \,\rangle \tag{3.289}$$

a vektoru sloupcovou matici

$$|\,\mathbf{f}\,\rangle \to f_l \equiv \langle\, l \,|\, \mathbf{f} \,\rangle\,, \tag{3.290}$$

můžeme s operátorovými výrazy zacházet jako s obyčejným násobením matic. Hovoříme o tom, že jsme zvolili *reprezentaci* daného prostoru. Ve skutečnosti nejde o nic jiného než o volbu konkrétní báze. Má-li báze nekonečný, ale spočetný počet členů, budou vektorům odpovídat posloupnosti a operátorům nekonečné matice. Vidíme, že v libovolném separabilním Hilbertově prostoru existuje jednoznačné zobrazení prvků na prostor posloupností ℓ^2 (izomorfismus). V případě neseparabilních prostorů s nespočetnou bází získáme obdobnou relaci:

$$\int \langle\, x \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, y \,\rangle \langle\, y \,|\, \mathbf{f} \,\rangle \,\mathrm{d}y = \langle\, x \,|\, \mathbf{g} \,\rangle\,, \tag{3.291}$$

což není nic jiného než integrální transformace

$$\begin{gathered} \int A(x,y) f(y) \,\mathrm{d}y = g(x)\,; \\ A(x,y) \equiv \langle\, x \,|\, \hat{\mathbf{A}} \,|\, y \,\rangle\,, \\ f(y) \equiv \langle\, y \,|\, \mathbf{f} \,\rangle\,, \\ g(x) \equiv \langle\, x \,|\, \mathbf{g} \,\rangle \end{gathered} \tag{3.292}$$

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 rozvojů platit jednoduchý vztah, který opět odvodíme jen vložením relace úplnosti:

$$\begin{gathered} f'_k \equiv \langle\, k' \,|\, \mathbf{f} \,\rangle = \sum_k \langle\, k' \,|\, k \,\rangle \langle\, k \,|\, \mathbf{f} \,\rangle = \sum_k S_{k'k} f_k \,, \\ \uparrow \\ S_{k'k} \equiv \langle\, k' \,|\, k \,\rangle\,. \end{gathered} \tag{3.293}$$

Matice **S** se nazývá matice přechodu.

3.4.5 Spektrální teorie

V teorii operátorů patří k základním úlohám nalézt směry, ve kterých se působení daného operátoru projevuje jako komplexní natahování:

$$\hat{\mathbf{A}} \,|\, \mathbf{f} \,\rangle = \lambda |\mathbf{f}\,\rangle\,; \qquad \lambda \in C\,. \tag{3.294}$$

Vektor $|\,\mathbf{f}\,\rangle$ se nazývá *vlastním vektorem* (charakteristickým vektorem) operátoru $\hat{\mathbf{A}}$ a koeficient natahování λ *vlastním číslem* (charakteristickým číslem). Například u tenzoru setrvačnosti leží vlastní vektory ve směru os, ve kterých těleso při rotaci „nehází". U lineárních operátorů je i každý násobek vlastního vektoru vlastním vektorem se stejným vlastním číslem. Jde tedy o celý paprsek v Hilbertově prostoru, neboli *vlastní směr*. Takových vlastních směrů a čísel může existovat u lineárních operátorů celá řada, jejich maximální počet je roven *dimenzi prostoru* (počtu prvků báze). U separabilních prostorů můžeme tedy úlohu nalezení vlastních čísel a vektorů formulovat rovnicemi:

$$\hat{\mathbf{A}} \,|\, \mathbf{f}_k \,\rangle = \lambda_k |\mathbf{f}_k\,\rangle\,; \qquad k = 1, 2, \ldots; \quad \lambda_k \in C\,. \tag{3.295}$$

Množina všech vlastních čísel $\{\lambda_1, \ldots, \lambda_n, \ldots\}$ se nazývá *spektrum operátoru* $\hat{\mathbf{A}}$ Nalezneme-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme relativně snadno řešit rovnice obsahující tento operátor. Pomocí vlastních čísel a vektorů lze například řešit soustavy obyčejných lineárních diferenciálních rovnic (viz kapitola 1.5).

Vlastní čísla a vektory hermitovského operátoru

Věta: Hermitovský operátor má reálná vlastní čísla a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

Důkaz: Při výpočtu skalárního součinu využijeme hermitovosti a působíme operátorem v pravé i v levé části skalárního součinu. Výsledek musí být stejný:

$$\langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \hat{\mathbf{A}}\, \mathbf{f}_k \,\rangle \;=\; \begin{cases} \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \lambda_k\, \mathbf{f}_k \,\rangle = \lambda_k \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_k \,\rangle \\ \langle\, \hat{\mathbf{A}}\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_k \,\rangle = \lambda_k^{*} \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_k \,\rangle \end{cases} \quad \Rightarrow \quad \lambda_k = \lambda_k^{*} \quad \Rightarrow \quad \lambda_k \in \mathcal{R}\,.$$

Vlastní čísla jsou tedy reálná. V druhé části budeme postupovat obdobně. Pro vlastní číslo z levé části skalárního součinu využijeme první části důkazu:

$$\langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \hat{\mathbf{A}}\, \mathbf{f}_l \,\rangle \;=\; \begin{cases} \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \lambda_l\, \mathbf{f}_l \,\rangle = \lambda_l \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle \\ \langle\, \hat{\mathbf{A}}\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle = \lambda_k^{*} \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle = \lambda_k \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda_l \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle = \lambda_k \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle\,,$$

$$\Downarrow$$

$$(\lambda_l - \lambda_k) \langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle = 0\,,$$

$$\Downarrow$$

$$\langle\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \,\rangle = 0 \text{ pro } \lambda_k \neq \lambda_l.$$

Vlastní čísla a vektory unitárního operátoru

Věta: Vlastní čísla unitárního operátoru leží na komplexní jednotkové kružnici a vlastní vektory dvou různých vlastních čísel jsou navzájem kolmé.

Důkaz: Při důkazu vyjdeme z definice unitárního operátoru:

$$\langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_k \rangle = \langle \hat{\mathbf{U}}\,\mathbf{f}_k \,|\, \hat{\mathbf{U}}\,\mathbf{f}_k \rangle = \lambda_k^* \lambda_k \langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_k \rangle .$$

Porovnáním prvního a posledního výrazu je zřejmé, že

$$\lambda_k \lambda_k^* = 1 \qquad \Rightarrow \qquad |\lambda_k| = 1.$$

Zbývá dokázat kolmost vektorů. K tomu budeme potřebovat pomocnou větu: (lemma),

Lemma: pokud existuje inverzní operátor k $\hat{\mathbf{A}}$, má vlastní čísla $1/\lambda_k$.:
Nechť platí

$$\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \lambda|\psi\rangle \qquad \Rightarrow \qquad \hat{\mathbf{A}}^{-1}\hat{\mathbf{A}}|\psi\rangle = \lambda\lambda^{(-1)}|\psi\rangle \qquad \Rightarrow$$
$$|\psi\rangle = \lambda\lambda^{(-1)}|\psi\rangle \qquad \Rightarrow$$
$$\lambda^{(-1)} = \frac{1}{\lambda}.$$

■

Nyní již budeme postupovat analogicky jako v případě hermitovského operátoru. V levé části skalárního součinu využijeme opět první části důkazu:

$$\langle \mathbf{f}_k \,|\, \hat{\mathbf{U}}\,\mathbf{f}_l \rangle = \begin{cases} \langle \mathbf{f}_k \,|\, \lambda_l\, \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_l \langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle \\ \langle \hat{\mathbf{U}}^{-1}\, \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle = \dfrac{1}{\lambda_k^*} \langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle \end{cases}$$

$$\Downarrow$$

$$\lambda_l \langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle = \lambda_k \langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle ,$$

$$\Downarrow$$

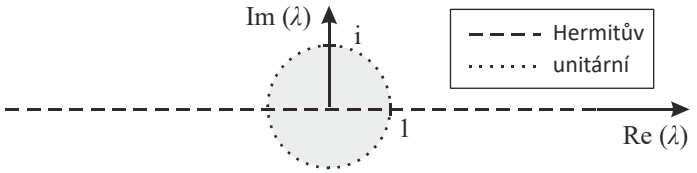
$$(\lambda_l - \lambda_k) \langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle = 0 ,$$

$$\Downarrow$$

$$\langle \mathbf{f}_k \,|\, \mathbf{f}_l \rangle = 0 \quad \text{pro } \lambda_k \neq \lambda_l .$$

Poznámka 1: Reálné vlastní hodnoty hermitovských operátorů budou v kvantové teorii využity jako možné výsledky měření dynamické proměnné, které odpovídá operátor $\hat{\mathbf{A}}$. Ani kolmost vlastních vektorů není bez užitku. Vhodný hermitovský operátor nám může v podobě svých vlastních vektorů „porodit“ výhodnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru.

Poznámka 2: Unitární operátory se v kvantové teorii využívají k popisu časového vývoje stavu objektu. Z jejich vlastností plynou například Ehrenfestovy teorémy o vztahu mezi klasickou a kvantovou fyzikou nebo teorém o viriálu, díky jehož klasické analogii byla objevena temná hmota ve vesmíru.



Obr. 3.23: Polohy vlastních čísel hermitovského a unitárního operátoru

◖ Příklad 3.36: Vlastní čísla a vektory

Určeme vlastní čísla a vektory matice $\hat{\mathbf{A}}$ z příkladu 3.29 (viz str.: 298)

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}.$$

Pro tuto matici sestavíme problém vlastních čísel a vlastních hodnot:

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = \lambda\,|\,\mathbf{f}\,\rangle$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \lambda \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix}$$

$$\Downarrow$$

$$\begin{pmatrix} -\lambda & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & -\lambda \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} f_1 \\ f_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

Rovnice má netriviální řešení jen pokud je determinant roven nule. Z této podmínky plynou dvě možné hodnoty vlastního čísla λ. Pro každou z nich potom již snadno určíme příslušný vlastní vektor. Pozor! Podmínka na determinant činí rovnice pro složky vlastního vektoru závislé. To je ale v pořádku, řešení rovnic musí mít jeden volný parametr, tak aby představovalo celý paprsek v prostoru. K vlastním vektorům můžeme najít normované vlastní vektory a příslušné projekční operátory. Výsledek je:

$$\lambda_1 = -1\,, \qquad |\,\mathbf{f}_1\,\rangle = c\begin{pmatrix} +\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad |\,1\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} +\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\mathbf{P}}_1 = |\,1\,\rangle\langle\,1\,| \;=\; \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & +\mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix},$$

$$\lambda_2 = +1\,, \qquad |\,\mathbf{f}_2\,\rangle = c\begin{pmatrix} -\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad |\,2\,\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix} -\mathrm{i} \\ +1 \end{pmatrix}, \qquad \hat{\mathbf{P}}_2 = |\,2\,\rangle\langle\,2\,| = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix}.$$

Povšimněte si, že matice $\mathbf{A}$ byla hermitovská (matice překlopená kolem diagonály a komplexně sdružená je shodná s původní maticí). Proto má reálná vlastní čísla a vlastní vektory tvoří ortonormální soustavu:

$$\langle\,1\,|\,1\,\rangle = \langle\,2|2\,\rangle = 1\,, \qquad \langle\,1\,|\,2\,\rangle = \langle\,2|1\,\rangle = 0\,.$$

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

Věta: Nechť $\hat{\mathbf{A}}$ je lineární operátor s množinou vlastních vektorů, která tvoří úplnou ortonormální bázi v Hilbertově prostoru. Potom můžeme pro analytickou funkci operátoru definovanou Taylorovým rozvojem (3.263) psát

► $$f(\hat{\mathbf{A}}) = \sum_k f(\lambda_k)|\, k\,\rangle\langle\, k\,| = \sum_k f(\lambda_k)\hat{\mathbf{P}}_k \,. \tag{3.296}$$

Důkaz: Nejprve si povšimněme působení mocnin operátoru na vlastní vektory:

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\,\mathbf{f}_k\,\rangle = \lambda_k|\mathbf{f}_k\,\rangle \quad ,$$

$$\hat{\mathbf{A}}^2\,|\,\mathbf{f}_k\,\rangle = \lambda_k\hat{\mathbf{A}}|\mathbf{f}_k\,\rangle = \lambda_k^2|\mathbf{f}_k\,\rangle \,,$$

$$\vdots$$

$$\hat{\mathbf{A}}^n\,|\,\mathbf{f}_k\,\rangle = \lambda_k^n|\mathbf{f}_k\,\rangle \,,$$

$$\Downarrow$$

$$f(\hat{\mathbf{A}})\,|\,\mathbf{f}_k\,\rangle = \sum_n c_n\hat{\mathbf{A}}^n\,|\,\mathbf{f}_k\,\rangle = \sum_n c_n\lambda_k^n\,|\,\mathbf{f}_k\,\rangle = f(\lambda_k)\,|\,\mathbf{f}_k\,\rangle \,.$$

V další fázi důkazu budeme funkcí operátoru působit již na obecný vektor. Provedeme ale jeho rozklad do báze složené z vlastních vektorů, kde působení známe z poslední rovnosti (v místě šipky vložíme součet všech projektorů):

$$f(\hat{\mathbf{A}})\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = \sum_k f(\hat{\mathbf{A}})|\, k\,\rangle\langle\, k\,|\,\mathbf{f}\,\rangle = \sum_k f(\lambda_k)|\, k\,\rangle\langle\, k\,|\,\mathbf{f}\,\rangle \,.$$
$$\uparrow$$

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.

Poznámka 1: Má-li operátor vícenásobné vlastní číslo stupně N, není to na závadu. Vlastní vektory k vícenásobnému vlastnímu číslu tvoří celý podprostor $\mathcal{P}$ dimenze N a lze zvolit N nezávislých kolmých vlastních vektorů odpovídajících tomuto vícenásobnému číslu.

Poznámka 2: Je-li prostor neseparabilní, bude za některých dalších předpokladů možné větu o spektrálním rozvoji modifikovat do tvaru:

$$f(\hat{\mathbf{A}}) = \int f(\lambda_x)\,|\, x\,\rangle\langle\, x\,|\,\mathrm{d}x \,.$$

Poznámka 3: Pro vyjádření funkce operátoru je často mnohem jednodušší použít místo Taylorova rozvoje větu o spektrálním rozvoji. Příslušná řada probíhá jen přes vlastní čísla operátoru.

Poznámka 4: Známe-li spektrum operátoru a jeho vlastní vektory, můžeme snadno napsat jeho libovolnou funkci a řešit tak rovnice, ve kterých se tato funkce operátoru vyskytuje. Speciálně inverzní operátor je dán formulí

$$\hat{\mathbf{A}}^{-1} = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} |\, k \,\rangle\langle\, k \,| = \sum_k \frac{1}{\lambda_k} \hat{\mathbf{P}}_k \,.$$

Vidíme, že pro jeho existenci je kromě předpokladů věty nutná nenulovost všech vlastních čísel.

◖ Příklad 3.37: Nalezení exponenciály matice

Na prostoru $\mathcal{C}^2$ je zadán maticový operátor

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix}.$$

Máme nalézt matici exp ($\hat{\mathbf{A}}$) Tento příklad jsme již řešili pomocí Taylorova rozvoje jako příklad 3.29. Z příkladu 3.36 známe vlastní čísla, vektory i projekční operátory tohoto maticového operátoru. Z věty o spektrálním rozvoji můžeme proto napsat:

$$\mathrm{e}^{\hat{\mathbf{A}}} = \mathrm{e}^{\lambda_1}\hat{\mathbf{P}}_1 + \mathrm{e}^{\lambda_2}\hat{\mathbf{P}}_2 = \mathrm{e}^{-1}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & +\mathrm{i} \\ -\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix} + \mathrm{e}^{+1}\frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & -\mathrm{i} \\ +\mathrm{i} & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{ch}\,1 & -\mathrm{i}\,\mathrm{sh}\,1 \\ \mathrm{i}\,\mathrm{sh}\,1 & \mathrm{ch}\,1 \end{pmatrix}.$$

Na rozdíl od Taylorova rozvoje má řada nyní jen dva členy.

◗

◖ Příklad 3.38: Řešení rovnice teplotní difúze

Nalezněme časový vývoj průběhu teploty tyče délky L, jejíž oba konce jsou udržovány na nulové teplotě. Počáteční teplota tyče je dána funkcí $T_0(x)$. Úkolem je tedy najít řešení rovnice teplotní difúze

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \kappa \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad , \qquad T = T(t,x)$$

s počátečními a okrajovými podmínkami

$$T(t_0,x) = T_0(x)\,, \qquad T(t,0) = T(t,L) = 0\,.$$

Přeformulujme nyní úlohu do Diracovy symboliky. Zaveďme nejprve Hilbertův prostor

$$\mathcal{H} = \left\{ f(x): \quad f \in L^2(0,L) \quad \wedge \quad f(0) = f(L) = 0 \right\}.$$

Jde o prostor funkcí definovaných na intervalu <0, L>, periodických a integrovatelných s kvadrátem. Okrajová podmínka původní rovnice je přesunuta do definice prostoru. Jestliže by hodnota teploty tyče na obou koncích byla nenulová, můžeme posunout počátek teplotní stupnice. Vzhledem k derivacím v rovnici teplotní difúze to na tvar rovnice nemá vliv. Požadavek nulové teploty na obou koncích tyče tedy není na újmu obecnosti řešení. Úloha má nyní tvar:

$$\frac{\mathrm{d}\,|\,T\,\rangle}{\mathrm{d}\,t} = -\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,T\,\rangle\,, \qquad |\,T\,\rangle \in \mathcal{H}\,, \qquad \hat{\mathbf{A}} \equiv -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}. \tag{3.297}$$

Z příkladu 3.33 víme, že operátor $\hat{\mathbf{B}} = \mathrm{i}\,\mathrm{d}/\mathrm{d}x$ je hermitovský (má reálná vlastní čísla a kolmou soustavu vlastních vektorů). Proto i kvadrát tohoto operátoru $\hat{\mathbf{A}} = \hat{\mathbf{B}}^2$ je hermitovský. Znaménko minus zde není podstatné, jen zajistí nezáporná vlastní čísla operátoru $\hat{\mathbf{A}}$. Řešení úlohy můžeme formálně napsat okamžitě (!):

$$|\,T(t)\,\rangle = \mathrm{e}^{-\kappa\hat{\mathbf{A}}(t-t_0)}\,|\,T(t_0)\,\rangle\,. \tag{3.298}$$

Skutečně: dosadíme-li počáteční čas, dá řešení počáteční podmínku. Derivujeme-li řešení podle času, zjistíme, že řešení (3.298) splňuje výchozí rovnici (3.297):

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\,|\,T(t)\,\rangle = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{-\kappa\hat{\mathbf{A}}(t-t_0)}\,|\,T(t_0)\,\rangle = -\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,\mathrm{e}^{-\kappa\hat{\mathbf{A}}(t-t_0)}\,|\,T(t_0)\,\rangle = -\kappa\,\hat{\mathbf{A}}\,|\,T(t)\,\rangle\,.$$

Jediný problém je, že v nalezeném řešení (3.298) 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

$$\hat{\mathbf{A}}\,|\,f\,\rangle = \lambda|\,f\,\rangle\,, \qquad |\,f\,\rangle \in \mathcal{H} \qquad \Rightarrow$$

$$f'' + \lambda\,f = 0\,, \qquad f(0) = f(L) = 0\,.$$

Řešení této obyčejné lineární diferenciální rovnice s okrajovými podmínkami je:

$$\lambda_k = \frac{\pi^2 k^2}{L^2}\,,$$

$$|\,f_k\,\rangle = c\sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right),$$

$$|\,k\,\rangle = \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \qquad k = 1,2,\ldots.$$

Vlastní čísla jsou reálná ($\hat{\mathbf{A}}$ je hermitovský operátor), vlastní vektory jsou navzájem kolmé a tvoří přirozenou bázi v $\mathcal{H}$. Napsat řešení (3.298) je nyní již jen jednoduchou aplikací věty o spektrálním rozvoji:

$$|\,T(t)\,\rangle = \mathrm{e}^{-\kappa\hat{\mathbf{A}}(t-t_0)}\,|\,T(t_0)\,\rangle =$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty}\mathrm{e}^{-\lambda_k\,\kappa\,(t-t_0)}\,|\,k\,\rangle\langle\,k\,|\,T(t_0)\,\rangle =$$

$$= \sum_{k=1}^{\infty} c_k\,\mathrm{e}^{-\frac{\pi^2k^2\,\kappa}{L^2}(t-t_0)}\,|\,k\,\rangle\,;$$

$$|\,k\,\rangle \equiv \sqrt{\frac{2}{L}}\sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right), \qquad c_k \equiv <\,k\,|\,T(t_0)\,\rangle\,. \tag{3.299}$$

Řešení můžeme samozřejmě zapsat i standardně, bez použití Diracovy symboliky:

$$T(t,x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sum_{k=1}^{\infty} c_k \, \mathrm{e}^{-\frac{\pi^2 k^2 \kappa}{L^2}(t-t_0)} \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right);$$
$$c_k \equiv \sqrt{\frac{2}{L}} \int_0^L \sin\left(\frac{k\pi}{L}x\right) T_0(x)\,\mathrm{d}x\,. \tag{3.300}$$

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.

◗



3.5 Od gradientu k helicitě

Derivace je velmi účinným nástrojem ke zjišťování vlastností funkcí. Ve fyzice nejčastěji derivujeme skalární nebo vektorová pole. Skalární pole přiřazuje poloze jednu hodnotu, například hustotu, teplotu nebo tlak, vektorové pole přiřazuje trojici hodnot, například jde o rychlostní pole, elektrické pole nebo magnetické pole:

$$\begin{aligned} f(\mathbf{x}):&\quad R^3 \to R\,, \\ \mathbf{K}(\mathbf{x}):&\quad R^3 \to R^3\,. \end{aligned} \tag{3.301}$$

Pokud se pole mění s časem, přibude ještě časová souřadnice a jde o zobrazení z R^4. V relativitě používáme čtyřvektory, takže nakonec může jít o zobrazení $R^4 \to R^4$. V teorii vlnění se používají většinou komplexní funkce, pak jde o zobrazení $R^4 \to C^4$. Jako zástupný symbol pro jakákoli pole, ať už skalární, vektorová či jiná často používáme symbol ψ. Při derivování podle prostorových souřadnic lze často využít naznačenou operaci

► $$\nabla \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right). \tag{3.302}$$

Existuje velké množství nejrůznějších zápisů této operace, nejčastěji používáme symbol ∇, ale jsou i jiné možnosti:

$$\nabla \equiv \text{grad} \equiv \frac{\partial}{\partial \mathbf{x}} \equiv \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z}\right) \equiv \left(\partial_x, \partial_y, \partial_z\right) \equiv \left(\partial_1, \partial_2, \partial_3\right) \equiv \partial_k\,. \tag{3.303}$$

Všechny zápisy jsou jen zkratkou pro tutéž operaci, která se nazývá gradient. Značíme ji symbolem obráceného písmene delta ∇ a říkáme „*nabla*“. Název zavedl skotský matematický fyzik Peter Guthrie Tait (1831–1901) podle trojúhelníkového tvaru asyrské harfy ze 7. století př. n. l. Asýrie byla v severní Mezopotámii. Slovo *nabla* (Nbl) je z aramejštiny, která ho upravila z hebrejského *Nev(b)el*. Stejný nástroj už ale znali Sumerové v období 3 100 před naším letopočtem. James Clerk Maxwell razil pro tento operátor název „*slope*“ z anglického slova znamenajícího spád či sklon. Návrh Taita ale zvítězil. Na skalární funkci je možné působit jediným způsobem, pro vektorová pole je více možností:

► (3.304)

∇f:	$\partial_k f$	gradient
$\nabla \cdot \mathbf{K}$:	$\partial_k K_k$	divergence
$\nabla \times \mathbf{K}$:	$\varepsilon_{klm}\partial_l K_m$	rotace
$\nabla \otimes \mathbf{K}$:	$\partial_k K_l$	tenzorový gradient

V následujícím textu se s jednotlivými diferenciálními operacemi (gradient, divergence, rotace, helicita) seznámíme podrobněji. Ukážeme si nejen jejich matematickou podstatu, ale i jejich praktické využití ve fyzice.

3.5.1 Gradient

Zabývejme se nyní gradientem skalární funkce. Ukážeme si, při kterých úkonech může být gradient užitečný. Půjde o derivaci ve směru, Taylorův rozvoj, konvektivní derivaci, kolmici k izoploše a vztah mezi silou a potenciální energií. Samozřejmě, že jsou i další oblasti, v nichž má gradient nezastupitelné místo.

Derivace ve směru

Při výpočtu parciálních derivací se k dané funkci blížíme vždy ve směru os. Připusťme nyní, že se k ní budeme blížit v obecném směru a zaveďme derivaci ve směru **s** vztahem

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{s}} \equiv \lim_{h\to 0} \frac{f(\mathbf{x}+h\mathbf{s})-f(\mathbf{x})}{h\,\|\,\mathbf{s}\,\|}. \tag{3.305}$$

Tuto limitu nyní snadno spočteme za pomoci Taylorova rozvoje:

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{s}} \equiv \lim_{h\to 0} \frac{f(\mathbf{x})+\dfrac{\partial f}{\partial x_k}hs_k+\dfrac{1}{2!}\dfrac{\partial^2 f}{\partial x_k \partial x_l}hs_k hs_l+\cdots-f(\mathbf{x})}{h\,\|\,\mathbf{s}\,\|} = \frac{\partial f}{\partial x_k}\frac{s_k}{\|\,\mathbf{s}\,\|}.$$

První a poslední výraz se odečte. Ve všech ostatních členech, s výjimkou druhého, zůstane veličina *h*, která se limitně blíží k nule. Zavedeme-li jednotkový vektor $\boldsymbol{\sigma} = \mathbf{s}/\|\mathbf{s}\|$, máme pro derivaci ve směru užitečný vztah

► $$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{s}} = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla) f; \qquad \boldsymbol{\sigma} \equiv \frac{\mathbf{s}}{\|\,\mathbf{s}\,\|}. \tag{3.306}$$

◖ **Příklad 3.39: Derivujte skalární funkci ve směru s = (1, 2)**. Postup řešení je přímočarý, postačí využít vztah (3.306):

$$\mathbf{s} = (1,2);$$

$$\boldsymbol{\sigma} = \left(\frac{1}{\sqrt{5}}, \frac{2}{\sqrt{5}}\right);$$

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla = \left(\frac{1}{\sqrt{5}}, \frac{2}{\sqrt{5}}\right)\cdot\left(\partial_x, \partial_y\right) = \frac{\partial_x}{\sqrt{5}} + 2\frac{\partial_y}{\sqrt{5}};$$

$$\frac{\partial f}{\partial \mathbf{s}} = (\boldsymbol{\sigma}\cdot\nabla) f = \frac{1}{\sqrt{5}}\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{2}{\sqrt{5}}\frac{\partial f}{\partial y}.$$

◗

Taylorův rozvoj

Za pomoci gradientu lze velmi snadno zapsat první netriviální člen Taylorova rozvoje skalárního či vektorového pole ve třech dimenzích:

$$\psi(\mathbf{x}+\mathbf{h}) = \psi(\mathbf{x}) + \frac{\partial \psi}{\partial x_k}h_k + \cdots = \psi(\mathbf{x}) + h_k\frac{\partial \psi}{\partial x_k} + \cdots$$

Vztah nyní snadno zapíšeme s pomocí operace gradientu do finálního tvaru:

► $$\psi(\mathbf{x}+\mathbf{h}) = \psi(\mathbf{x}) + (\mathbf{h}\cdot\nabla)\psi + \cdots \tag{3.307}$$

Uvedený vztah je elegantní a ve fyzice se velmi často používá.

Konvektivní derivace

Předpokládejme, že máme nějaké pole, které se mění v čase i v prostoru a naším úkolem je nalézt jeho úplnou časovou derivaci:

$$\frac{\mathrm{d}\psi(t,\mathbf{x})}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi}{\partial x_k}\frac{\mathrm{d}x_k}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + \frac{\partial\psi}{\partial x_k}u_k\,,$$

kde jsme jako označili rychlostní pole proudění $\mathbf{u}(t, \mathbf{x})$. Využijeme-li gradient, máme:

► $$\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial\psi}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\psi\,;\ \text{resp.}\qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial}{\partial t} + (\mathbf{u}\cdot\nabla)\,. \tag{3.308}$$

První část derivace je parciální derivace v čase, vyjadřuje lokální změny funkce. Druhá část se nazývá *konvektivní* derivace a popisuje změny funkce způsobené prouděním. Typickým využitím je například pohybová rovnice elementu tekutiny:

$$\Delta m\frac{\mathrm{d}\mathbf{u}}{\mathrm{d}t} = \Delta\mathbf{F}\,.$$

Rovnici vztáhneme na jednotku objemu a rozepíšeme úplnou časovou derivaci podle vztahu (3.308):

► $$\rho\frac{\partial\mathbf{u}}{\partial t} + \rho(\mathbf{u}\cdot\nabla)\mathbf{u} = \mathbf{f}\,, \tag{3.309}$$

kde $\mathbf{f}$ je objemová hustota sil působících na tekutinu.

Kolmice k izoploše

Obecnou nadplochu v N dimenzích můžeme implicitně zapsat jako

$$\phi(x_1,\cdots,x_N) = \text{const}\,. \tag{3.310}$$

Příkladem může být rovnice povrchu koule ve třech dimenzích $x^2 + y^2 + z^2 = R^2$. Obecně v N dimenzích představuje rovnice (3.310) N–1 rozměrnou množinu. Ve dvou dimenzích jde o křivku, ve třech dimenzích o plochu. Stejným způsobem můžeme zapsat rovnici konstantních ploch nějaké veličiny, tzv. izoploch – například izoterm pro teplotu, izobar pro tlak nebo izofot pro intenzitu světla. Za ϕ jen dosadíme příslušnou veličinu. Diferencujme nyní vztah (3.310):

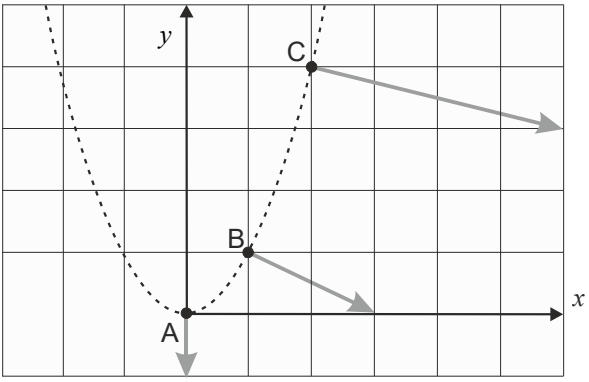
$$\frac{\partial\phi}{\partial x_k}\mathrm{d}x_k = 0\,;\qquad \Rightarrow\qquad (\nabla\phi\,|\,\mathrm{d}\mathbf{l}) = 0\qquad \Rightarrow\qquad \nabla\phi\perp\mathrm{d}\mathbf{l}\,. \tag{3.311}$$

Gradient funkce ϕ je tedy kolmý na libovolný vektor plochy vedený z daného bodu. Tedy gradient je kolmý na izoplochu definovanou rovnicí (3.310). Derivace je směrnicí funkce, proto gradient míří kolmo z dané izoplochy k dalším izoplochám s vyšší hodnotou. Kolmici k izoploše lze tedy nalézt velmi snadno:

► $$\mathbf{n} = \nabla\phi\,; \qquad \mathbf{v} = \frac{\nabla\phi}{\|\nabla\phi\|}. \tag{3.312}$$

První varianta je obecná normála, druhá je normála normovaná k jedné, tj. normálový vektor **v** má velikost rovnou jedné. U uzavřené plochy vždy volíme normálový vektor tak, aby z ní mířil směrem ven.

◖ **Příklad 3.40: Nalezněte kolmice k parabole $y = x^2$ v různých bodech**



Obr. 3.24: Normálové vektory k parabole

Rovnici nejprve přepíšeme do implicitního tvaru

$$\phi(x, y) = x^2 - y = 0 \tag{3.313}$$

Nyní už snadno nalezneme gradient, který je kolmý na nadplochu (v tomto případě parabolu):

$$\mathbf{n} = \nabla\phi = (2x, -1)\,. \tag{3.314}$$

Pokud dosadíme různé body z obrázku, dostaneme

$$\begin{aligned} \mathbf{n}_A &= (0, -1)\,; \\ \mathbf{n}_B &= (2, -1)\,; \\ \mathbf{n}_C &= (4, -1)\,. \end{aligned} \tag{3.315}$$

◗

Síla a energie

Předpokládejme, že máme potenciální pole, v němž se práce koná na úkor potenciální energie

$$\mathrm{d}A = -\mathrm{d}W_\mathrm{p}\,. \tag{3.316}$$

Vykonanou práci nyní vyjádříme jako sílu násobenou drahou a kosinem sevřeného úhlu a poté rozepíšeme diferenciál na pravé straně:

$$F\,\mathrm{d}s\,\cos\alpha = -\frac{\partial W_\mathrm{p}}{\partial x}\,\mathrm{d}x_k\,,$$

$$\mathbf{F}\cdot\mathrm{d}\mathbf{s} = -\nabla W_\mathrm{p}\cdot\mathrm{d}\mathbf{s}\,,$$
$$\left(\mathbf{F}\,|\,\mathrm{d}\mathbf{s}\right) = \left(-\nabla W_\mathrm{p}\,|\,\mathrm{d}\mathbf{s}\right).$$

Vzhledem k tomu, že uvedený vztah platí pro jakýkoli element dráhy d**s**, musí platit

► $$\mathbf{F} = -\nabla W_\mathrm{p}\,. \tag{3.317}$$

Uvedený vztah říká, že síla míří vždy k minimu potenciální energie. U konzervativního pole tedy postačí k jeho popisu jediná skalární veličina – potenciální energie. Odpovídající sílu už vždy dostaneme ze vztahu (3.317). Například pro gravitační pole tělesa o hmotnosti M, které se nachází v počátku souřadnic a působí na těleso o hmotnosti $m << M$ máme:

$$W_\mathrm{p} = -G\frac{mM}{r}\,. \tag{3.318}$$

Jednotlivé složky síly už snadno nalezneme:

$$\begin{aligned} F_k &= -\frac{\partial W_\mathrm{p}}{x_k} = \frac{\partial}{x_k}\left[G\frac{mM}{r}\right] = GmM\frac{\partial}{r}\left(\frac{1}{r}\right)\frac{\partial r}{\partial x_k} = \\ &= GmM\left(-\frac{1}{r^2}\right)\frac{\partial\sqrt{x_1^2+x_2^2+x_3^2}}{\partial x_k} = -G\frac{mM}{r^2}\frac{x_k}{r}\,. \end{aligned} \tag{3.319}$$

Skutečně jsme dostali správnou hodnotu složek sil včetně směrového vektoru:

$$\mathbf{F} = -G\frac{mM}{r^2}\frac{\mathbf{r}}{r}\,. \tag{3.320}$$

Snadno nalezneme velikost síly:

$$F = \sqrt{\mathbf{F}\cdot\mathbf{F}} = \sqrt{F_x^2+F_y^2+F_z^2} = \sqrt{\frac{G^2m^2M^2}{r^6}\left(x^2+y^2+z^2\right)} = G\frac{mM}{r^2}\,. \tag{3.321}$$

3.5.2 Divergence

Velmi důležitou úlohou je zjištění, zda v nějakém bodě prostoru vektorové pole vyvěrá (příkladem může být elektrické pole vyvěrající z kladného náboje), nebo zda daným bodem prochází, či v něm zaniká (například elektrické pole v záporném náboji). K úvahám nad touto úlohou bude užitečné zavést element toku vektorového pole:

► $$\mathrm{d}\phi \equiv \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S}\,; \qquad \mathrm{d}\mathbf{S} = \boldsymbol{\nu}\,\mathrm{d}S\,. \tag{3.322}$$

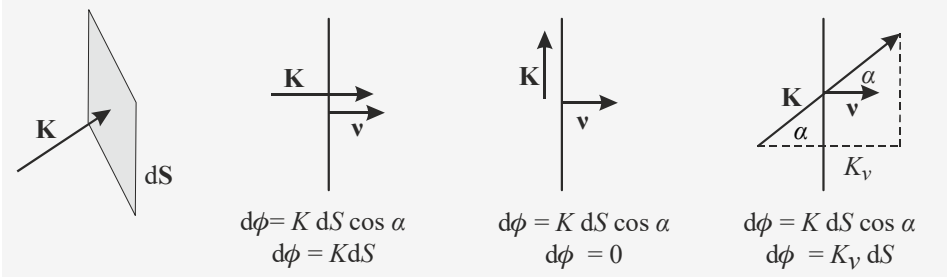
Elementární ploška je charakterizována vektorem, který má velikost této plošky a směr normály k této plošce (kolmý vektor o velikosti rovné 1). Rozměr takto zavedené veličiny je roven rozměru vektorového pole násobeného metrem na druhou:

$$\left[\mathrm{d}\phi\right] = \left[\mathbf{K}\right]\mathrm{m}^2. \tag{3.323}$$

Rozměr elementu toku magnetického pole bude Tm^2, rozměr toku elektrického pole $\mathrm{Vm}^{-1}\mathrm{m}^2 = \mathrm{Vm}$, toku rychlostního pole $\mathrm{ms}^{-1}\mathrm{m}^2 = \mathrm{m}^3\mathrm{s}^{-1}$ atd.

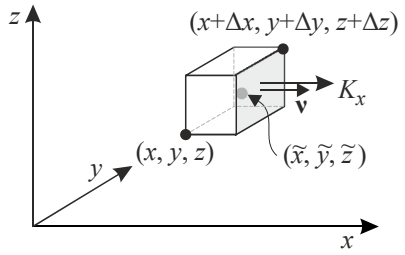
Poznámka: Tok vektorového pole se týká intenzivních vektorových veličin (nezávisí na množství látky), například elektrického, magnetického či rychlostního pole. Nezaměňujte tento tok s tokem aditivní (je úměrná množství látky) veličiny A, který je definován jako množství veličiny proteklé jednotkovou plochou za jednotku času (tok hmoty, tok energie, tok náboje, tok hybnosti, tok entropie atd.), tj. $[\mathbf{j}] = [A]/(\mathrm{m}^2\mathrm{s})$. Například tok náboje má jednotku $\mathrm{Cm}^{-2}\mathrm{s}^{-1}$.

Z definice (3.322) je jasné, že tok pole ve směru normály je maximální, kolmo na normálu nulový a při šikmém toku se z vektoru pole uplatní jen jeho průmět do směru normály:



Obr. 3.25: Zavedení toku vektorového pole plochou

Nyní určíme celkový tok pole v plochou kvádru, který vytvoříme kolem zvoleného bodu. Později pak limitním přechodem kvádr stáhneme až do daného bodu. Tok pole bude mít celkem šest členů (přes šest plošek kvádru). Nejbližší bod kvádru k počátku souřadnic označíme (x, y, z), nejvzdálenější $(x+\Delta x, y+\Delta y, z+\Delta z)$, a náš bod, tedy střed kvádru $(\tilde{x}, \tilde{y}, \tilde{z})$. Celkový tok pole **K** plochou kvádru bude (vektor pole lokalizujeme vždy uprostřed právě počítané stěny, vektor normály míří směrem ven):



Obr. 3.26: Tok vektorového pole plochou

$$\Delta\phi = \sum_{a=1}^{6} \Delta\phi_a \,.$$

Toky zapíšeme v pořadí stěn: pravá, levá, zadní, přední, horní a dolní. Stěny kvádru mají hrany o velikosti Δx, Δy, Δz, z toho snadno určíme jejich velikosti:

$$\begin{aligned}\Delta\phi = {} & K_x(x+\Delta x, \tilde{y}, \tilde{z})\,\Delta y\,\Delta z - K_x(x, \tilde{y}, \tilde{z})\,\Delta y\,\Delta z + \\ & + K_y(\tilde{x}, y+\Delta y, \tilde{z})\,\Delta z\,\Delta x - K_y(\tilde{x}, y, \tilde{z})\,\Delta z\,\Delta x + \\ & + K_z(\tilde{x}, \tilde{y}, z+\Delta z)\,\Delta x\,\Delta y - K_z(\tilde{x}, \tilde{y}, z)\,\Delta x\,\Delta y .\end{aligned}$$

Nyní vytkneme ze všech členů objem elementárního kvádru:

$$\Delta\phi = \left[\begin{array}{l} \dfrac{K_x(x+\Delta x,\tilde{y},\tilde{z}) - K_x(x,\tilde{y},\tilde{z})}{\Delta x} + \\ + \dfrac{K_y(\tilde{x},y+\Delta y,\tilde{z}) - K_y(\tilde{x},y,\tilde{z})}{\Delta y} + \\ + \dfrac{K_z(\tilde{x},\tilde{y},z+\Delta z) - K_z(\tilde{x},\tilde{y},z)}{\Delta z} \end{array} \right] \Delta x\,\Delta y\,\Delta z .$$

Provedeme-li nyní limitní přechod Δx, Δy, $\Delta z \to 0$, objeví se v hranaté závorce součet parciálních derivací

$$\mathrm{d}\phi = \left(\frac{\partial K_x}{\partial x} + \frac{\partial K_y}{\partial y} + \frac{\partial K_z}{\partial z} \right) \mathrm{d}V. \tag{3.324}$$

Výraz v kulaté závorce nazýváme divergencí pole. Jde o jedno jediné číslo, které značíme

► $$\operatorname{div}\mathbf{K} \equiv \nabla\cdot\mathbf{K} = \partial_l K_l = \frac{\partial K_x}{\partial x} + \frac{\partial K_y}{\partial y} + \frac{\partial K_z}{\partial z}. \tag{3.325}$$

Tok pole infinitezimálním kvádrem, vedeným kolem našeho zvoleného bodu, tedy je

► $$\mathrm{d}\phi \equiv \sum_a \mathbf{K}_a \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}_a = \operatorname{div}\mathbf{K}\ \mathrm{d}V. \tag{3.326}$$

Je jasné, že hledaným testem je právě operace divergence. Pokud je kladná, z bodu pole vyvěrá, pokud je záporná, do bodu se pole noří a pokud je nulová bodem pole prochází:

► $$\operatorname{div}\mathbf{K} \begin{cases} > 0: & \text{pole vyvěrá,} \\ = 0: & \text{pole prochází,} \\ < 0: & \text{pole zaniká.} \end{cases} \tag{3.327}$$

Pokud bychom měli v prostoru konečnou množinu Ω, můžeme tok pole přes její hranici $\partial\Omega$ snadno spočítat. Oblast Ω vyplníme beze zbytku mnoha kvádry. Na jejich sousedících stěnách se tok vždy vyruší, protože vnější normály sousedních kvádrů budou mířit na opačnou stranu. Jediný nenulový tok bude na hranici oblasti, kde už žádné sousedící kvádry či jiné útvary nejsou. Proto bude platit

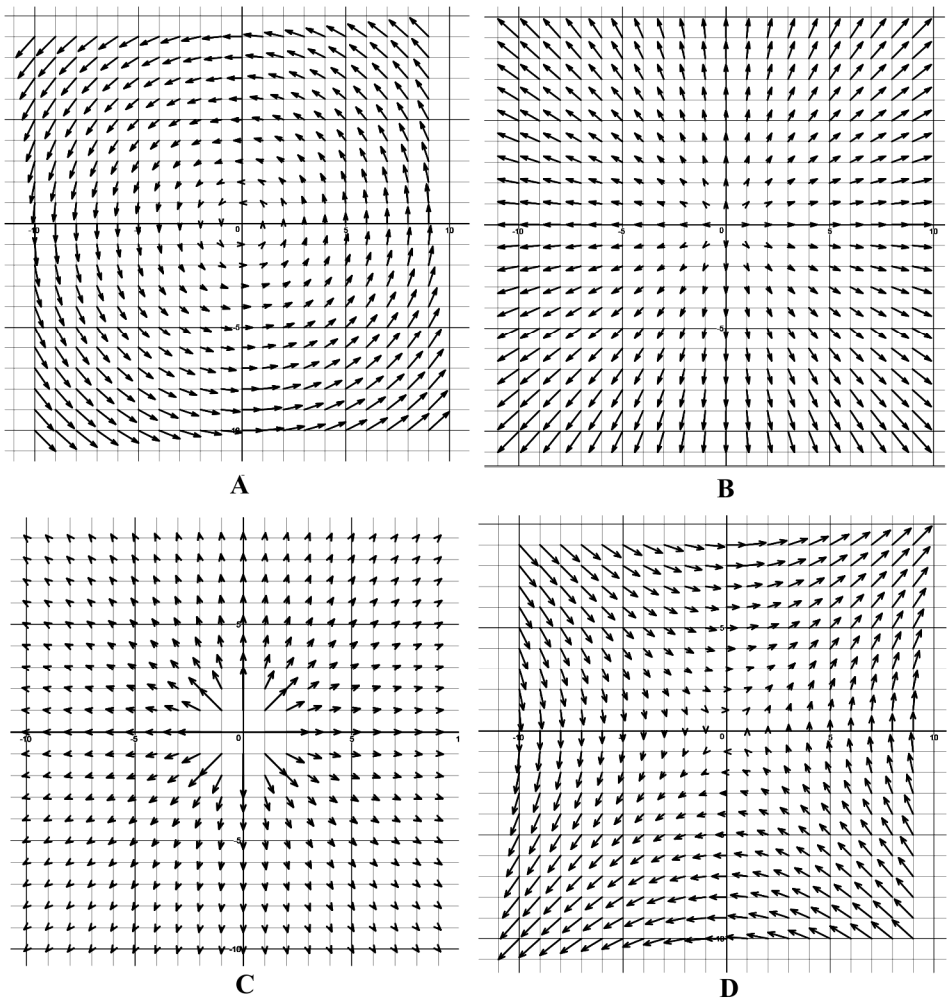
$$\phi \equiv \oiint_{S=\partial\Omega} \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S} = \iiint_{V=\Omega} \operatorname{div}\mathbf{K}\ \mathrm{d}V. \tag{3.328}$$

Levá integrace je naše sčítání toku přes jednotlivé plošky, napravo je výsledek (3.326). Odvozený vztah se nazývá *Gaussova věta* a je užitečný ve fyzice při hledání různých vztahů a při převodu plošných a objemových integrálů. Gaussovu větu nejčastěji píšeme ve tvaru

► $$\oiint_{\partial\Omega} \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S} = \iiint_{\Omega} \operatorname{div}\mathbf{K}\ \mathrm{d}V. \tag{3.329}$$

Ukažme si nyní výpočet divergence na čtyřech dvojrozměrných polích

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &= (-y,+x,0)\,;\\ \mathbf{B} &= (+x,+y,0)\,;\\ \mathbf{C} &= \alpha\left(\frac{x}{r^3},\frac{y}{r^3},\frac{z}{r^3}\right);\\ \mathbf{D} &= (+y,+x,0)\end{aligned} \tag{3.330}$$



Obr. 3.27: Ukázky čtyř polí **A**, **B**, **C**, **D**

Zakreslíme-li složky prvního pole v rovině (x, y) do obrázku, dostaneme typický vír kolem počátku, zakreslíme-li druhé pole, vzniknou radiální, stále se zvětšující vektory (úměrně vzdálenosti od počátku). Takové pole je nefyzikální a s rostoucí vzdáleností musí stále vznikat. Každý bod prostoru je jeho zdrojem. Třetí pole je intenzita elektrického pole bodového náboje, od počátku souřadnic pole klesá, jeho zdroj je pouze

v počátku. Čtvrté pole nemá zjevně ani zdroje, ani netvoří víry. Spočtěme nyní divergence těchto polí:

$$\operatorname{div}\mathbf{A}=\frac{\partial A_x}{\partial x}+\frac{\partial A_y}{\partial y}=0+0=0\,. \tag{3.331}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{B}=\frac{\partial B_x}{\partial x}+\frac{\partial B_y}{\partial y}=1+1=2\,. \tag{3.332}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{D}=\frac{\partial D_x}{\partial x}+\frac{\partial D_y}{\partial y}=0+0=0\,. \tag{3.333}$$

První pole vytváří vír, ale nemá nikde zdroj, u druhého pole se v každém bodě prostoru vytváří radiální složka pole. Čtvrté pole nemá ani zdroje, ani víry. U třetího pole je výpočet divergence složitější, ale přímočarý:

$$\begin{aligned}\operatorname{div}\mathbf{C}=\partial_k C_k=\alpha\,\partial_k\left(\frac{x_k}{r^3}\right)=\alpha\,\frac{\left(\partial_k x_k\right)r^3-x_k\partial_k\left(r^3\right)}{r^6}=\\ =\alpha\,\frac{3r^3-x_k\dfrac{\partial r^3}{\partial r}\dfrac{\partial r}{\partial x_k}}{r^6}=\alpha\,\frac{3r^3-x_k 3r^2\dfrac{x_k}{r}}{r^6}=\alpha\,\frac{3r^3-3r^3}{r^6}=\begin{cases}0\,; & r\neq 0\,,\\ \infty\,; & r=0\,.\end{cases}\end{aligned} \tag{3.334}$$

Derivaci $\partial r/\partial x_k$ jsme již počítali ve vztahu (3.319), výsledek je x_k/r. Hodnota divergence je pochopitelná v tom smyslu, že zdroj pole je pouze v počátku (bodový náboj), všude jinde je divergence nulová a pole těmito body pouze prochází. Nekonečná hodnota divergence pole souvisí s tím, že náboj považujeme za bodový, tudíž je hustota náboje $\rho_Q = \Delta Q/\Delta V$ v počátku nekonečná. Je to analogické jako u pojmu hmotného bodu. Má-li být nekonečně malý bod nositelem konečné hmotnosti, musí v něm být hustota hmoty $\rho_M = \Delta M/\Delta V$ nekonečná. S těmito problémy se formálně vypořádá až teorie distribucí (zobecněných funkcí), se kterou se seznámíme v kapitole 3.8.

Coulombův zákon

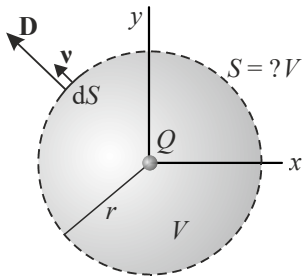
Maxwellovy rovnice obsahují dvě položky s divergencemi:

$$\operatorname{div}\mathbf{B}=0\,, \tag{3.335}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{D}=\rho_Q\,. \tag{3.336}$$

První rovnice říká, že magnetické pole každým bodem prostoru jen prochází, nikde nejsou jeho zdroje. Magnetické monopóly neexistují. Podle některých teorií bylo ve vesmíru magnetických monopólů hodně, ale v průběhu inflační fáze se vesmír natolik nafouknul, že v námi pozorovatelné oblasti (nevidíme celý vesmír) zůstalo jen několik magnetických monopólů, a proto je nevidíme. Druhá rovnice popisuje, že elektrická pole vyvěrají v oblastech s kladným nábojem a mizí v oblastech se záporným nábojem. Představme si, že máme jen jeden jediný izolovaný náboj. Zvolíme souřadnice s počátkem v náboji a kolem náboje opíšeme kulovou plochu. Rovnici (3.336) přeintegrujeme přes objem takto vzniklé koule:

$$\iiint_V \operatorname{div}\mathbf{D}\,\mathrm{d}V=\iiint_V \rho_Q\,\mathrm{d}V\,. \tag{3.337}$$



Obr. 3.28: Integrační objem a plocha

Integrál nalevo za pomoci Gaussovy věty převedeme na ohraničující plochu. Integrál napravo dá celkový náboj uzavřený v ploše, v tomto případě náboj naší částice:

$$\oiint_{S=\partial V} \mathbf{D}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S} = Q. \tag{3.338}$$

Vektor elektrické indukce i vektor elementu plochy mají stejný směr, úhel mezi nimi je nulový a kosinus ve skalárním součinu roven jedné:

$$\oiint_{S=\partial V} D\,\mathrm{d}S = Q. \tag{3.339}$$

Na celém povrchu koule je velikost D stejná, můžeme ji tedy z integrace vytknout. Zbývající integrál dá celkovou plochu ohraničující koule:

$$D\,4\pi r^2 = Q. \tag{3.340}$$

Převedeme-li elektrickou indukci na intenzitu elektrického pole, máme výsledný integrální vztah, který není nic jiného než Coulombův zákon:

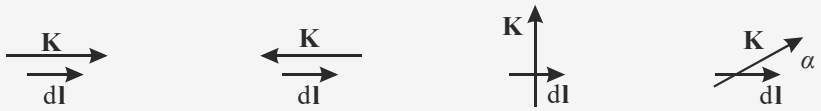
$$E = \frac{Q}{4\pi\varepsilon_0 r^2}. \tag{3.341}$$

3.5.3 Rotace

Přejděme nyní k jiné úloze. Budeme testovat, zda naše vektorové pole vytváří v okolí zvoleného bodu vír. Pokud si představíte vír nakreslený na papíru, tak ho uvidíte pouze ze směru kolmého na papír. Butele-li se dívat v rovině papíru, vír neodhalíte. K detekci víru jsou zapotřebí tři nezávislé pohledy ze tří různých směrů. Proto bude mít test na víry vektorový charakter. Užitečným nástrojem pro naše testování bude element *cirkulace* pole:

$$\mathrm{d}C \equiv \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{l}\,, \tag{3.342}$$

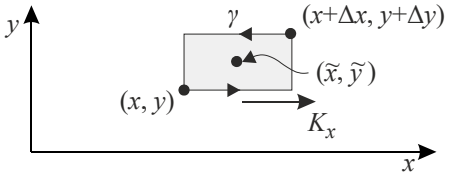
kde **K** je sledované pole a d**l** element křivky. Teče-li pole ve směru křivky, bude cirkulace maximální, a to $K\,\mathrm{d}l$, teče-li pole proti směru křivky, bude cirkulace minimální, a to $-K\,\mathrm{d}l$. Teče-li pole kolmo na křivku, bude cirkulace nulová.



$\mathrm{d}C = K\,\mathrm{d}l\cos\alpha$ $\mathrm{d}C = K\,\mathrm{d}l$ | $\mathrm{d}C = K\,\mathrm{d}l\cos\alpha$ $\mathrm{d}C = -K\,\mathrm{d}l$ | $\mathrm{d}C = 0$ | $\mathrm{d}C = K\,\mathrm{d}l\cos\alpha$

Obr. 3.29: Element cirkulace pole

Představme si nyní bod v prostoru, kolem něhož nakreslíme obecně orientovaný obdélník a provedeme projekce bodu i s obdélníkem do všech tří souřadnicových rovin. V rovině (x, y) bude situace vypadat takto:



Obr. 3.30: Výpočet cirkulace vektorového pole kolem obdélníku

Nyní nalezneme cirkulaci pole kolem tohoto obdélníku po matematicky kladně orientované křivce γ tvořené hranami obdélníku (značení bodů je stejné jako při odvození divergence). Příspěvky zapíšeme v pořadí: dolní, pravá, horní a levá hrana, hodnotu pole vezmeme vždy uprostřed hrany. Hrany mají velikosti Δx, Δy:

$$\Delta C = \sum_{a=1}^{4} \Delta C_a = K_x(\tilde{x}, y)\,\Delta x + K_y(x+\Delta x, \tilde{y})\,\Delta y - K_x(\tilde{x}, y+\Delta y)\,\Delta x - K_y(x, \tilde{y})\,\Delta y =$$
$$= \left[\frac{K_y(x+\Delta x, \tilde{y}) - K_y(x, \tilde{y})}{\Delta x} - \frac{K_x(\tilde{x}, y+\Delta y) - K_x(\tilde{x}, y}{\Delta y}\right]\Delta x\,\Delta y.$$

Nyní provedeme limitní přechod $\Delta x, \Delta y \to 0$ a dostaneme (element plochy s normálou ve směru osy z označíme jako $\mathrm{d}S_z \equiv \mathrm{d}x\,\mathrm{d}y$):

$$\mathrm{d}C = \left[\frac{\partial K_y}{\partial x} - \frac{\partial K_x}{\partial y}\right]\mathrm{d}S_z\,. \tag{3.343}$$

Provedeme-li superpozici všech tří projekcí, vznikne obecný obdélník a cirkulace kolem něho bude mít hodnotu (ostatní členy získáme cyklickou záměnou)

$$\mathrm{d}C = \left[\frac{\partial K_z}{\partial y} - \frac{\partial K_y}{\partial z}\right]\mathrm{d}S_x + \left[\frac{\partial K_x}{\partial z} - \frac{\partial K_z}{\partial x}\right]\mathrm{d}S_y + \left[\frac{\partial K_y}{\partial x} - \frac{\partial K_x}{\partial y}\right]\mathrm{d}S_z\,. \tag{3.344}$$

Je jasné, že v hranatých závorkách jsou složky vektorového součinu gradientu a naším vektorovým polem, proto můžeme pro element cirkulace pole psát:

► $$\mathrm{d}C \equiv \sum_a \mathbf{K}_a \cdot \mathrm{d}\mathbf{l}_a = (\nabla \times \mathbf{K}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}. \tag{3.345}$$

O tom, zda je cirkulace pole kolem obdélníku nenulová (a pole tvoří vír) rozhoduje vektorový součin gradientu s polem, kterému říkáme rotace pole:

► $$\operatorname{rot}\mathbf{K} \equiv \nabla \times \mathbf{K}\,. \tag{3.346}$$

Jednotlivé složky rotace korespondují s naším pohledem na vír ve směru odpovídajících si souřadnicových os. Pokud jsou všechny složky rotace nulové, pole netvoří kolem bodu vír. Pokud je libovolná složka nenulová, pole kolem daného body vytváří vír:

► $$\operatorname{rot}\mathbf{K}\begin{cases} = (0,0,0): & \text{pole netvoří vír,} \\ \neq (0,0,0): & \text{pole tvoří vír.} \end{cases} \tag{3.347}$$

Určeme nyní rotaci polí **A**, **B**, **C**, **D** ze vztahu (3.330):

$$\operatorname{rot}\mathbf{A} = (0,0,2)\,; \quad \operatorname{rot}\mathbf{B} = \operatorname{rot}\mathbf{C} = \operatorname{rot}\mathbf{D} = (0,0,0)\,. \tag{3.348}$$

Jedině první pole má nenulovou rotaci, vír je patrný pouze při pohledu ve směru osy *z*. Jde o nefyzikální vír, jehož intenzita roste se vzdáleností od středu (v každém bodě prostoru je jakési dmychadlo, které vír zesiluje). Proto je rotace nenulová ve všech bodech prostoru.

Uvažujme nyní konečnou plochu *S* ohraničenou uzavřenou křivkou γ. Naším úkolem bude spočítat cirkulaci pole podél této křivky. Plochu ohraničenou křivkou vyplníme mnoha malými obdélníčky, které spolu sousedí. Každý obdélník představuje matematicky kladně orientovanou uzavřenou křivku. Na společních hranách bude cirkulace pole vždy nulová, neboť jsou hrany opačně orientované. Jediná nenulová cirkulace bude na hranách přiléhajících k hranici našeho útvaru. Limitním přechodem z (3.345) máme

► $$\oint\limits_{\gamma=\partial S} \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{l} = \iint\limits_{S} (\operatorname{rot}\mathbf{K})\cdot\mathrm{d}\mathbf{S}, \tag{3.349}$$

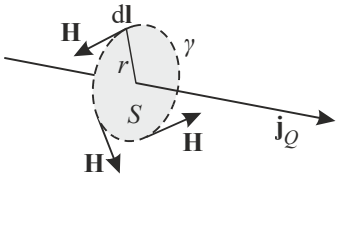
což je *Stokesova věta* integrálního počtu, která převádí plošný integrál na křivkový.

Ampérův zákon

Jedna z Maxwellových rovnic má pro případ polí nezávisících na čase tvar

$$\operatorname{rot}\mathbf{H} = \mathbf{j}_Q\,, \tag{3.350}$$

kde $\mathbf{j}_Q$ je proudová hustota (tok náboje, tj. množství náboje proteklého jednotkovou plochou za jednotku času, rozměr je ampér na metr čtvereční). Význam rovnice je jasný: kolem vodičů s tekoucím proudem vzniká vír magnetického pole. Vytvořme kolem některého místa vodiče kružnici, plochu, kterou uzavírá, označíme *S*:



$$\int_a^b f'\,g\,\mathrm{d}x + \int_a^b f\,g'\,\mathrm{d}x = [f\,g]_a^b$$

Obr. 3.31: Integrační plocha a křivka

Přes tuto plochu budeme integrovat rovnici (3.350):

$$\iint_S (\mathrm{rot}\,\mathbf{H})\cdot \mathrm{d}\mathbf{S} = \iint_S \mathbf{j}_Q \cdot \mathrm{d}\mathbf{S}\,. \tag{3.351}$$

Integrál napravo dá celkový proud protékaný plochou, tj. proud tekoucí vodičem. Integrál nalevo převedeme na integrál přes hranici za pomoci Stokesovy věty:

$$\oint_{\gamma=\partial S} \mathbf{H}\cdot \mathrm{d}\mathbf{l} = I\,. \tag{3.352}$$

Pole i element křivky mají souhlasný směr, proto je skalární součin roven součinu velikostí obou vektorů, tj.

$$\oint_{\gamma=\partial S} H\,\mathrm{d}l = I\,. \tag{3.353}$$

Pole H má na celém obvodu kruhu stejnou velikost, proto ho vytkneme z integrálu. Ten dá obvod kružnice:

$$H\,2\pi r = I\,. \tag{3.354}$$

Po převedení na magnetickou indukci získáme Ampérův zákon v dobře známém tvaru

$$B = \frac{\mu_0 I}{2\pi r}\,. \tag{3.355}$$

Pole buzené lineárním útvarem ubývá ze vzdáleností jako $1/r$. Pole buzená bodovými útvary (například Coulombův zákon) ubývají se vzdáleností jako $1/r^2$. Maxwellova rovnice (3.350) je diferenciálním tvarem Ampérova zákona.

3.5.4 Helicita

V přírodě často pozorujeme útvary stočené do šroubovic. Ať už jde o molekuly DNA nebo jen plazmový výboj, který měl dostatek času a po nějaké době se stočil do šroubovice. V teorii plazmatu se ukazuje (viz [2]), že helikální šroubovitá) struktura magnetického pole má minimální energii. Proto například v tokamaku nepostačí jen poloidální pole vznikající tekoucím proudem, ale musí být přítomno i toroidální pole generované pomocnými cívkami. Vzniklé pole má šroubovicový tvar, je ve stavu s minimální energií, a proto je relativně stabilní. V matematice se pro podobně strukturovaná pole zavádí pojem helicity. Hustota helicity vektorového pole $\mathbf{K}$ se definuje jako

► $$\mathcal{H}(t,\mathbf{x}) \equiv \mathbf{K}\cdot \mathrm{rot}\,\mathbf{K}\ , \tag{3.356}$$

celkovou helicitou potom rozumíme integrál

$$G(t) = \iiint_V \mathcal{H}(t,\mathbf{x})\,\mathrm{d}V\,. \tag{3.357}$$

Helicita je skalární veličina charakterizující helikálnost (šroubovitost) vektorového pole. Je nulová pro všechna pole splňující podmínku nevířivosti ($\mathrm{rot}\,\mathbf{K} = 0$) a také pro všechny rovinné víry s kruhovými či spirálovitými proudnicemi. Pole s nenulovou heli-

citou musí tvořit prostorové šroubovice s nenulovým stoupáním α, helicita je úměrná sin α. Příkladem zavedení hustoty helicity může být rychlostní pole

$$\mathcal{H}_u = \mathbf{u} \cdot \mathrm{rot}\,\mathbf{u} = \mathbf{u} \cdot \boldsymbol{\omega}\,. \tag{3.358}$$

Veličinu $\boldsymbol{\omega} \equiv \mathrm{rot}\,\mathbf{u}$ nazýváme vířivost rychlostního pole. Při popisu helikálnosti magnetického pole se využívá magnetický potenciál **A**, který se samotným polem souvisí rovnicí $\mathbf{B} = \mathrm{rot}\,\mathbf{A}$:

$$\mathcal{H}_A = \mathbf{A} \cdot \mathrm{rot}\,\mathbf{A} = \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}\,. \tag{3.359}$$

Detailně se budeme helicitou magnetického pole zabývat až ve třetím díle této učebnice, viz [2], věnovaném fyzice plazmatu, kde hraje koncept helicity významnou roli.

3.6 Vícerozměrné integrály

V mnoha situacích je třeba nějakou veličinu, zpravidla skalární či vektorové pole, integrovat podél křivky, přes plochu či přes objem nějakého útvaru. Za tím účelem zavádíme element (infinitezimálně malou část) dané množiny. Křivkový element může být jak skalární tak vektorový, plošný také, ale objemový element existuje jen skalární, objem, jak ho chápeme ve třech dimenzích, nemá žádný směr.

3.6.1 Křivkový integrál

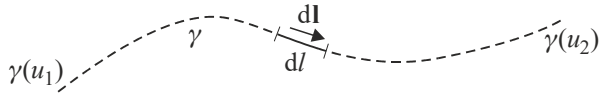
Nejprve se zabývejme křivkou, kterou označíme symbolem γ. Křivku budeme nejprve parametrizovat, k tomu postačí jediný parametr u:

$$\gamma : \begin{cases} x = x(u)\,; \\ y = y(u)\,; \\ z = z(u)\,. \end{cases} \tag{3.360}$$

Zkráceně můžeme psát

► $$\gamma : \ \mathbf{r} = \mathbf{r}(u)\,. \tag{3.361}$$

Parametr u probíhá interval u_1 až u_2. Bod $\mathbf{r}(u_1)$ je počátečním bodem křivky, $\mathbf{r}(u_2)$ je koncovým bodem křivky. Křivku nyní rozdělíme na velké množství dílků (elementů). Toto dělení budeme zjemňovat tak, až dospějeme k infinitezimálnímu elementu křivky



Obr. 3.32: Integrační křivka

► $$\mathrm{d}\mathbf{l} = (\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \mathrm{d}z) = (x'\mathrm{d}u, y'\mathrm{d}u, z'\mathrm{d}u)\,. \tag{3.362}$$

Element křivky má vektorový charakter, míří ve směru křivky, proto hovoříme o *vektorovém elementu*. Můžeme zavést i pouhou velikost elementu, tzv. skalární element:

► $$\mathrm{d}l \equiv \sqrt{\mathrm{d}\mathbf{l}\cdot\mathrm{d}\mathbf{l}} = \sqrt{\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2} = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}\,\mathrm{d}u\,, \tag{3.363}$$

kde čárka znamená derivaci podle parametru u. Za pomoci těchto elementů můžeme zavést dva druhy křivkových integrálů – křivkový integrál prvního druhu nasčítává skalární pole přes skalární element podél křivky, křivkový integrál druhého druhu nasčítává projekci vektorového pole do směru křivky (prezentovanou skalárním součinem) podél křivky:

► $$I_1 = \int_\gamma f(\mathbf{r})\,\mathrm{d}l, \tag{3.364}$$

► $$I_2 = \int_\gamma \mathbf{K}(\mathbf{r})\cdot\mathrm{d}\mathbf{l}\,. \tag{3.365}$$

Integrály prvního druhu můžeme použít například ke zjištění hmotnosti vlákna s měnícím se průřezem nebo k určení délky křivky (v tomto případě bude $f = 1$). Integrály druhého druhu se využívají k výpočtu mechanické práce (polem bude působící síla), elektrického napětí (polem bude intenzita elektrického pole) a dalších veličin. Integrály obou druhů se snadno převedou na běžný Riemannův integrál: Do obou polí (skalárního či vektorového) dosadíme parametrické vyjádření křivky a příslušný element vyjádříme z diferenciálů parametrického vyjádření křivky. Tím se veškerá integrace převede na integrál přes parametr křivky, tedy standardní jednorozměrný Riemannův integrál:

$$I_1 = \int_\gamma f(\mathbf{r})\,\mathrm{d}l = \int_\gamma f(\mathbf{r})\sqrt{\mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2} = \int_{u_1}^{u_2} f\left(\mathbf{r}(u)\right)\sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}\,\mathrm{d}u\,. \quad (3.366)$$

V případě, že za parametr zvolíme přímo x, máme

$$I_1 = \int_\gamma f(\mathbf{r})\,\mathrm{d}l == \int_{x_1}^{x_2} f\left(\mathbf{r}(x)\right)\sqrt{1 + y'^2 + z'^2}\,\mathrm{d}x\,. \quad (3.367)$$

Pro délku rovinné křivky $y(x)$ se vztah zjednoduší na známý vzorec

$$l = \int_{x_1}^{x_2} \sqrt{1 + y'^2}\,\mathrm{d}x\,. \quad (3.368)$$

U křivkového integrálu druhého druhu postupujeme obdobně

$$\begin{aligned} I_2 &= \int_\gamma \mathbf{K}(\mathbf{r}) \cdot \mathrm{d}\mathbf{l} = \int_\gamma K_x \mathrm{d}x + K_y \mathrm{d}y + K_z \mathrm{d}z = \\ &= \int_{u_1}^{u_2} \left[K_x\left(\mathbf{r}(u)\right) x' + K_y\left(\mathbf{r}(u)\right) y' + K_z\left(\mathbf{r}(u)\right) z' \right] \mathrm{d}u = \\ &= \int_{u_1}^{u_2} \mathbf{K}\left(\mathbf{r}(u)\right) \cdot \mathbf{r}'\,\mathrm{d}u\,. \end{aligned} \quad (3.369)$$

◖ Příklad 3.41: Délka sinusovky od 0 do 2π

Křivku $y = \sin(x)$ budeme parametrizovat přímo proměnnou x, tj. x ztotožníme s parametrem křivky u. Pro integraci vztah (3.368):

$$y(x) = \sin(x)\,;$$

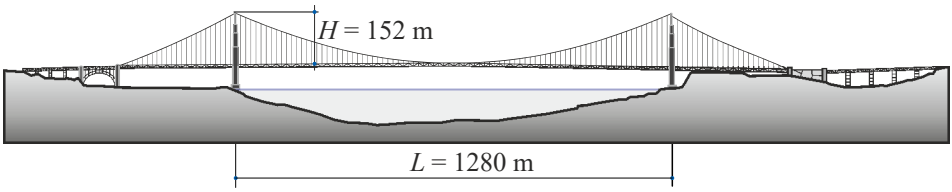
$$l = \int_0^{2\pi} \sqrt{1 + y'^2}\,\mathrm{d}x = \int_0^{2\pi} \sqrt{1 + \cos^2(x)}\,\mathrm{d}x\,. \quad (3.370)$$

Integrace tohoto typu jsou málokdy uskutečnitelné analyticky, většinou je třeba využít numerické metody, kterých existuje velké množství. Konkrétně tento případ vede na tzv. eliptický integrál. Existuje ale jednoduchá možnost, jak výsledek integrace rychle zjistit. Na stránce Wolfram Alpha zadejte integraci odpovídajícími příkazy softwaru Mathematica, nebo jen napište řetězec „integrate sqrt(1+cos(x)^2) dx from 0 to 2pi“.

Program se pokusí spočítat integrál analyticky, pokud to nepůjde, tak numericky. Výsledek je 7,6404.

◗

◖ Příklad 3.42: Délka lana mostu Golden Gate v San Franciscu



Obr. 3.33: Řetězový most v San Franciscu

Budeme počítat délku lana mezi podpěrami. Předpokládejme, že lano má tvar přibližně řetězovky ch(x). Za jednotku délky vezmeme rozpětí sloupů L = 1280 metrů a řetězovku posuneme tak, aby byl počátek souřadnic v nejnižší části, tj. hrubý tvar bude dán funkcí ch(x/L) − 1. Nyní řetězovku roztáhneme na parametry mostu:

$$y(x) = A\left[\mathrm{ch}(x/L) - 1\right] \tag{3.371}$$

Z požadavku $y(\pm L/2) = H$ plyne

$$A = \frac{H}{\mathrm{ch}(1/2) - 1} = 1190{,}98\ \mathrm{m}\,. \tag{3.372}$$

Nyní snadno určíme délku lana:

$$l = \int_{-L/2}^{L/2} \sqrt{1 + y'^2}\ \mathrm{d}x = \int_{-L/2}^{L/2} \sqrt{1 + (A/L)^2\,\mathrm{sh}^2(x/L)}\ \mathrm{d}x\,. \tag{3.373}$$

Proveďme substituci $\xi = x/L$:

$$l = L \int_{-1/2}^{1/2} \sqrt{1 + (A/L)^2\,\mathrm{sh}^2(\xi)}\ \mathrm{d}\xi\,. \tag{3.374}$$

Řetězec pro integraci je „1280*integrate sqrt(1+0.8672 sinh(x)^2) dx from -0.5 to 0.5“, vyjde 1327 metrů. Jde jen o úsek lan mezi pilíři.

◗

◖ Příklad 3.43: Práce vykonaná polem prostorového oscilátoru

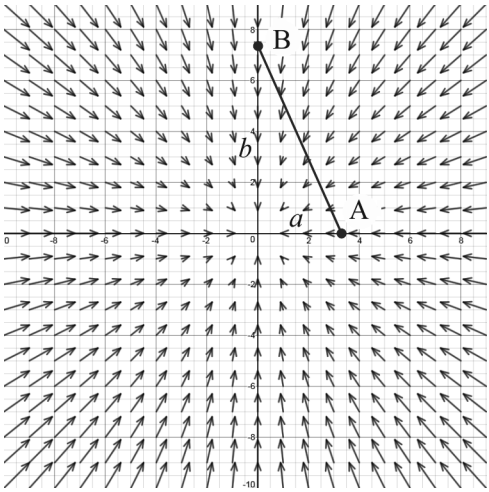
Předpokládejme průběh potenciální energie

$$W_P = \frac{1}{2}kr^2 = \frac{1}{2}k\left(x^2 + y^2\right). \tag{3.375}$$

Snadno určíme působící sílu $\mathbf{F} = -\mathbf{F} = -\nabla W_\mathrm{P}$:

$$\begin{aligned} F_x &= -kx\,, \\ F_y &= -ky\,. \end{aligned} \tag{3.376}$$

V jakémkoli směru se systém chová jako harmonický oscilátor. Ať vychýlíme těleso kamkoli, bude na něho působit vratná síla směrem do počátku, která bude tím větší, čím větší bude jeho vzdálenost od počátku. Naším úkolem bude spočítat práci vykonanou při přesunutí tělesa mezi body $A = (a, 0)$ a $B = (0, b)$:



Obr. 3.34: Prostorový oscilátor

Nejprve nalezneme parametrické zadání křivky a její vektorový element:

$$X = A + (B - A)\,t\,; \qquad t \in \langle 0, 1 \rangle\,; \quad A = (a, 0); \quad B = (0, b)\,. \tag{3.377}$$

$$\begin{aligned} x &= a - at\,, \\ y &= b\,t\,, \\ \mathrm{d}x &= a\,\mathrm{d}t, \\ \mathrm{d}y &= b\,\mathrm{d}t. \end{aligned} \tag{3.378}$$

Roli parametru křivky zde hraje t, tj. $u = t$. Nyní je výpočet vykonané práce už přímočarý, jen musíme za všechna pole a diferenciály dosadit ze vztahů (3.378):

$$\begin{aligned} \Delta A &= \int_\gamma \mathbf{F} \cdot \mathrm{d}\mathbf{l} = \int_\gamma F_x \mathrm{d}x + F_y \mathrm{d}y = \int_\gamma -kx\,\mathrm{d}x - ky\,\mathrm{d}y = \\ &= \int_0^1 -k(a - at)(-a\,\mathrm{d}t) - (kbt)(b\,\mathrm{d}t) = \int_0^1 \left[+ka^2 - ka^2 t + kb^2 t \right] \mathrm{d}t = \\ &= \frac{1}{2} k a^2 - \frac{1}{2} k b^2\,. \end{aligned} \tag{3.379}$$

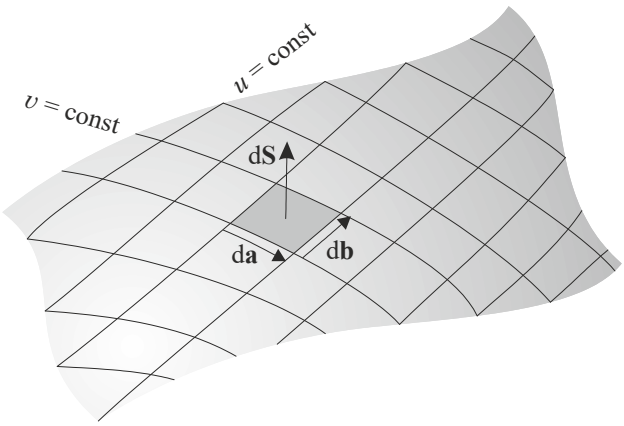
Jiné řešení. Tím, že v zadání figurovala potenciální energie, víme, že pole je konzervativní. Vykonanou práci pak můžeme určit z rozdílu potenciální energie“

$$\Delta A = -\Delta W_\mathrm{P} = W_\mathrm{P}(A) - W_\mathrm{P}(B) = \frac{1}{2} k a^2 - \frac{1}{2} k b^2. \tag{3.380}$$

◗

3.6.2 Plošný a objemový integrál

Plošné integrály



Obr. 3.34: Element plochy pro výpočet plošného integrálu

Plochu popíšeme dvěma parametry u, v, které na ní tvoří souřadnicovou síť:

$$\sigma : \begin{cases} x = x(u,v)\,; \\ y = y(u,v)\,; \\ z = z(u,v)\,. \end{cases} \tag{3.381}$$

Zkráceně můžeme psát

► $$\sigma : \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}(u,v). \tag{3.382}$$

Element plošky vyobrazený na obrázku bude mít hrany

$$\mathrm{d}\mathbf{a} \cong \mathbf{r}(u+\mathrm{d}u,v) - \mathbf{r}(u,v) \cong \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u}\mathrm{d}u\,; \qquad \mathrm{d}\mathbf{b} \cong \mathbf{r}(u,v+\mathrm{d}v) - \mathbf{r}(u,v) \cong \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}\mathrm{d}v\,. \tag{3.383}$$

Vektorový element plochy je dán vektorovým součinem, skalární element je jeho velikostí:

► $$\mathrm{d}\,\mathbf{S} = \left(\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}\right)\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,; \tag{3.384}$$

► $$\mathrm{d}S = \left\|\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial u} \times \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial v}\right\|\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,; \tag{3.385}$$

Nyní, obdobně jako u křivkových integrálů, zavedeme plošný integrál prvního druhu (nasčítání skalárního pole přes skalární element) a plošný integrál druhého druhu (tok vektorového pole plochou):

► $$I_1 \equiv \iint_\sigma f \,\mathrm{d}S\,, \tag{3.386}$$

► $$I_2 \equiv \iint_\sigma \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S} \tag{3.387}$$

První druh využijeme k výpočtu náboje, hmotnosti či velikosti plochy, integrál druhého druhu k výpočtu toku pole plochou.

◖ **Příklad 3.44: Kruh a plošný integrál**. Parametrizujme kruh $x^2+y^2 \le R^2$ polárními souřadnicemi:

$$\begin{aligned} x &= r\cos\varphi\,,\\ y &= r\sin\varphi\,,\\ z &= 0\,. \end{aligned} \tag{3.388}$$

Parametry probíhají hodnoty

$$\begin{aligned} u &= r \in <0, R>\,;\\ v &= \varphi \in <0, 2\pi).\end{aligned} \tag{3.389}$$

Určeme nyní vektorový plošný element:

$$\mathrm{d}\mathbf{S} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial r}\times\frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \varphi}\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = (\cos\varphi,\sin\varphi,0)\times(-r\sin\varphi, r\cos\varphi,0)\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi \qquad \Rightarrow$$

$$\mathrm{d}\mathbf{S} = (0,0,r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi) \tag{3.390}$$

Vektorový element míří pouze v ose z, je tedy dle očekávání kolmý na rovinu (x, y), v níž leží kruh. Skalární element bude jeho velikostí, tj.

$$\mathrm{d}S = r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi \tag{3.391}$$

Nyní již snadno určíme plochu kruhu

$$S = \iint_\sigma \mathrm{d}S = \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}\int_{r=0}^{r=R} r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi = \frac{R^2}{2}2\pi = \pi R^2\,. \tag{3.392}$$

Nalezněme nyní ještě tok pole

$$\mathbf{K} = \left(\alpha y, \beta z, \gamma x^2\right) \tag{3.393}$$

tímto kruhem. Výpočet je přímočarý:

$$\begin{aligned} I_2 &= \iint_\sigma \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S} = \iint_\sigma K_x\mathrm{d}S_x + K_y\mathrm{d}S_y + K_z\mathrm{d}S_z = \\ &= \iint_\sigma \left(0+0+\gamma x^2\mathrm{d}S_z\right) = \int_{\varphi=0}^{\varphi=2\pi}\int_{r=0}^{r=R}\left(\gamma r^2\cos^2\varphi\right)\left(r\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi\right) = \\ &= \gamma\frac{R^4}{4}\frac{2\pi}{2} = \gamma\pi\frac{R^4}{4}. \end{aligned} \tag{3.394}$$

◗

Objemový integrál

Zbývá zavést objemový integrál, který má jediný element, a to skalární. Objemovou množinu Ω popíšeme třemi parametry:

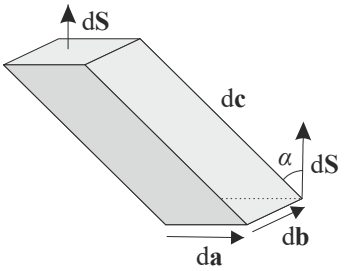
$$\Omega : \begin{cases} x = x(u,v,w)\,; \\ y = y(u,v,w)\,; \\ z = z(u,v,w)\,. \end{cases} \tag{3.395}$$

Zkráceně můžeme psát

► $$\Omega : \quad \mathbf{r} = \mathbf{r}(u,v,w)\,. \tag{3.396}$$

Objemový element určíme analogicky dle obrázku

$\mathrm{d}V = \mathrm{d}S\ \mathrm{d}c \cos\alpha$
$\mathrm{d}V = |\mathrm{d}\mathbf{S}\cdot\mathrm{d}\mathbf{c}|$
$\mathrm{d}V = |(\mathrm{d}\mathbf{a}\times\mathrm{d}\mathbf{b})\cdot\mathrm{d}\mathbf{c}|$



Obr. 3.35: Objemový element

► $$\mathrm{d}V = \left|\left(\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial u}\times\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial v}\right)\cdot\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial w}\right|\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,\mathrm{d}w; \tag{3.397}$$

A objemový integrál budeme chápat jako

► $$I = \iiint_V f(\mathbf{r})\,\mathrm{d}V. \tag{3.398}$$

Základní typy integrálů:

► $\int_\gamma f\,\mathrm{d}l\,;$ $\quad \gamma : \mathbf{r} = \mathbf{r}(u)\,;$ $\quad \mathrm{d}l = \sqrt{x'^2 + y'^2 + z'^2}\,\mathrm{d}u\,;$ (3.399)

► $\int_\gamma \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{l}\,;$ $\quad \gamma : \mathbf{r} = \mathbf{r}(u)\,;$ $\quad \mathrm{d}\mathbf{l} = (x'\mathrm{d}u, y'\mathrm{d}u, z'\mathrm{d}u);$ (3.400)

► $\iint_\sigma f\,\mathrm{d}S$ $\quad \sigma : \mathbf{r} = \mathbf{r}(u,v)\,;$ $\quad \mathrm{d}S = \left\|\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial u}\times\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial v}\right\|\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,;$ (3.401)

► $\iint_\sigma \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S}$ $\quad \sigma : \mathbf{r} = \mathbf{r}(u,v)\,;$ $\quad \mathrm{d}\mathbf{S} = \left(\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial u}\times\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial v}\right)\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,;$ (3.402)

► $\iiint_\Omega f\,\mathrm{d}V$ $\quad \Omega : \mathbf{r} = \mathbf{r}(u,v,w)\,;$ $\quad \mathrm{d}V = \left|\left(\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial u}\times\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial v}\right)\cdot\frac{\partial\mathbf{r}}{\partial w}\right|\mathrm{d}u\,\mathrm{d}v\,\mathrm{d}w;$ (3.403)

3.6.3 Integrace per partes v *N* dimenzích

Zopakujme si nejprve situaci v jedné dimenzi. Pro derivaci součinu dvou funkcí platí

$$f'g + fg' = (fg)'. \tag{3.404}$$

Integrací tohoto vztahu okamžitě máme

$$\int_a^b f'g\,\mathrm{d}x + \int_a^b fg'\,\mathrm{d}x = [fg]_a^b \tag{3.405}$$

neboli

$$\int_a^b f'g\,\mathrm{d}x + \int_a^b fg'\,\mathrm{d}x = +f(b)g(b) - f(a)g(a) \tag{3.406}$$

Znaménka na pravé straně můžeme chápat jako jednorozměrné vnější normály k intervalu $\langle a, b\rangle$, tedy

$$\int_a^b f'g\,\mathrm{d}x + \int_a^b fg'\,\mathrm{d}x = \nu_b f(b)g(b) + \nu_a f(a)g(a). \tag{3.407}$$

Oba výrazy napravo jsou vlastně integrací přes hranici množiny $\Omega = \langle a, b\rangle$, tu u intervalu tvoří pouhé dva body. Integraci můžeme tedy formálně přepsat do tvaru

$$\int_\Omega f'g\,\mathrm{d}^1x + \int_\Omega fg'\,\mathrm{d}^1x = \int_{\partial\Omega} \nu fg\,\mathrm{d}^0x. \tag{3.408}$$

Index nad diferenciálem určuje rozměr integrace. Integrace napravo je formální, probíhá jen přes dva body, tedy jde o sumaci. V *N* dimenzích platí obdobné vztahy:

$$\frac{\partial f}{\partial x_k}g + f\frac{\partial g}{\partial x_k} = \frac{\partial}{\partial x_k}(fg), \tag{3.409}$$

► $$\int_\Omega \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}g + f\frac{\partial g}{\partial x_k}\right)\mathrm{d}^Nx = \int_{\partial\Omega} fg\nu_k\,\mathrm{d}^{N-1}x. \tag{3.410}$$

Poslední výraz je větou o integraci per partes v *N* dimenzích. Tato věta umožňuje přesouvat derivaci z jedné funkce na druhou. Pro $g = 1$ dá vztah důležitou relaci

► $$\int_\Omega \left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right)\mathrm{d}^Nx = \int_{\partial\Omega} f\nu_k\,\mathrm{d}^{N-1}x. \tag{3.411}$$

Odvoďme nyní z tohoto vztahu Gaussovu větu jako speciální případ integrace per partes ve třech dimenzích:

$$\iiint_V \frac{\partial f}{\partial x_k}\,\mathrm{d}V = \oiint_{S=\partial V} f\nu_k\,\mathrm{d}S. \tag{3.412}$$

Nyní za funkci f vezmeme složku vektorového pole, tj. $f = K_k$ a přesčítáme přes index k:

$$\iiint_V \frac{\partial K_k}{\partial x_k}\,\mathrm{d}V = \oiint_{S=\partial V} K_k \nu_k\,\mathrm{d}S. \tag{3.413}$$

Uvedený vztah lze snadno přepsat do tvaru

$$\iiint_V (\operatorname{div}\mathbf{K})\,\mathrm{d}V = \oiint_{S=\partial V} (\mathbf{K}\cdot\boldsymbol{\nu})\,\mathrm{d}S. \tag{3.414}$$

Zavedeme-li vektorový element plochy $\mathrm{d}\mathbf{S} = \boldsymbol{\nu}\,\mathrm{d}S$, máme Gaussovu větu v běžném tvaru

$$\iiint_V (\operatorname{div}\mathbf{K})\,\mathrm{d}V = \oiint_{S=\partial V} \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S}. \tag{3.415}$$

3.6.4 Vnější algebra

Jednotný přístup k různým druhům integrálů lze získat zavedením tzv. vnější algebry, jejímž základem je antisymetrické násobení diferenciálů, například

$$\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}y = -\mathrm{d}y \wedge \mathrm{d}x\,. \tag{3.416}$$

Tato operace kopíruje vlastnosti vektorového součinu bázových vektorů, samotné diferenciály chápeme jako prvky lineárního vektorového prostoru, tj. můžeme je „natahovat“ a „skládat“. Je zřejmé, že nově zavedený součin dvou stejných diferenciálů musí dát nulu, například

$$\mathrm{d}x \wedge \mathrm{d}x = 0\,. \tag{3.417}$$

◖ Příklad 3.45: Ukázka dvouprvkové vnější algebry

Na dvou prvcích $\mathbf{e}_1$ a $\mathbf{e}_2$ můžeme zavést vnější algebru tak, že k těmto prvkům přidáme jednotkový prvek $\mathbf{e}_0$ (při násobení prvek nezmění) a výsledek vnějšího součinu $\mathbf{e}_{12}$. Násobení všech prvků můžeme odvodit z antikomutativnosti a asociativnosti, například

$$\begin{gathered}\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1 = -\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2 = \mathbf{e}_{12}\,;\\ \mathbf{e}_{12} \wedge \mathbf{e}_1 = (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_2) \wedge \mathbf{e}_1 = -(\mathbf{e}_2 \wedge \mathbf{e}_1) \wedge \mathbf{e}_1 = -\mathbf{e}_2 \wedge (\mathbf{e}_1 \wedge \mathbf{e}_1) = 0\end{gathered} \tag{3.418}$$

a tak dále. Celkově lze výsledek násobení jednotlivých prvků zapsat do tabulky

$\wedge$	$\mathbf{e}_0$	$\mathbf{e}_1$	$\mathbf{e}_2$	$\mathbf{e}_{12}$
$\mathbf{e}_0$	$\mathbf{e}_0$	$\mathbf{e}_1$	$\mathbf{e}_2$	$\mathbf{e}_{12}$
$\mathbf{e}_1$	$\mathbf{e}_1$	0	$\mathbf{e}_{12}$	0
$\mathbf{e}_2$	$\mathbf{e}_2$	$-\mathbf{e}_{12}$	0	0
$\mathbf{e}_{12}$	$\mathbf{e}_{12}$	0	0	0

Zaváděná algebra bude lineárním obalem těchto prvků.

◗

◖ Příklad 3.46: Ukázka použití vnější algebry v integrálech

Obecnou podobu vztahu (3.411) lze chápat jako

$$\int_{\Omega} \mathrm{d}F = \int_{\partial\Omega} F\,; \qquad \text{spec. pro jednu dimenzi} \int_{<a,b>} \mathrm{d}F = \left[F\right]_a^b . \tag{3.419}$$

Integrál napravo znamená hodnoty na hranici oblasti, proto zde nezapisujeme znak diferenciálu, obdobně jako v jedné dimenzi, kde hranicí jsou dva body. Samotný výraz F ale může diferenciály obsahovat. Pro Stokesovu větu je F na pravé straně dáno vztahem (počítáme cirkulaci vektoru **K** podél γ)

$$F = \mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{l} = K_x\mathrm{d}x + K_y\mathrm{d}y + K_z\mathrm{d}z\,. \tag{3.420}$$

Definujeme-li diferenciál pomocí vnějšího součinu, máme pro levou stranu:

$$\mathrm{d}F = \mathrm{d}K_x\wedge\mathrm{d}x + \mathrm{d}K_y\wedge\mathrm{d}y + \mathrm{d}K_z\wedge\mathrm{d}z = \left(\frac{\partial K_x}{\partial x}\mathrm{d}x + \frac{\partial K_x}{\partial y}\mathrm{d}y + \frac{\partial K_x}{\partial z}\mathrm{d}z\right)\wedge\mathrm{d}x + \cdots =$$

$$= \left(\frac{\partial K_z}{\partial y} - \frac{\partial K_y}{\partial z}\right)\mathrm{d}y\wedge\mathrm{d}z + \left(\frac{\partial K_x}{\partial z} - \frac{\partial K_z}{\partial x}\right)\mathrm{d}z\wedge\mathrm{d}x + \left(\frac{\partial K_y}{\partial x} - \frac{\partial K_x}{\partial y}\right)\mathrm{d}x\wedge\mathrm{d}y =$$

$$= (\mathrm{rot}\,\mathbf{K})_x\,\mathrm{d}S_x + (\mathrm{rot}\,\mathbf{K})_y\,\mathrm{d}S_y + (\mathrm{rot}\,\mathbf{K})_z\,\mathrm{d}S_z = \mathrm{rot}\,\mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S}\,.$$

Je zřejmé, že jsme ze vztahu (3.419) dostali jako speciální případ Stokesovu větu

$$\int_S \mathrm{rot}\,\mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{S} = \int_{\partial S}\mathbf{K}\cdot\mathrm{d}\mathbf{l}\,. \tag{3.421}$$

Obdobně lze postupovat u ostatních integrálů.

◗

3.6.5 Míra a metrika

Předpokládejme, že na zadané N-rozměrné oblasti máme metriku g_{kl}, tj. vzdálenost je v zobecněných souřadnicích q_k dána vztahem

► $$\mathrm{d}l^2 = g_{kl}\,\mathrm{d}q_k\,\mathrm{d}q_l\,. \tag{3.422}$$

Potom lze míru dané množiny (délkový element, plošný element, objemový element, atd.) obecně zapsat jako (důkaz nalezne čtenář ve specializované literatuře)

► $$\mathrm{d}\mu = \sqrt{|\det g|}\,\mathrm{d}q_1\ldots\mathrm{d}q_N\,. \tag{3.423}$$

Všechny integrály prvního druhu lze potom zapsat jednotně ve formě

► $$\int_{\Omega} f\,\mathrm{d}\mu = \int_{\Omega} f\sqrt{|\det g|}\,\mathrm{d}q_1\ldots\mathrm{d}q_N\,. \tag{3.424}$$

◖ **Příklad 3.47: Určete objem koule ve třech dimenzích**. Pro sférickou metriku platí:

$$\mathrm{d}l^2 = \mathrm{d}r^2 + r^2 \sin^2\theta\,\mathrm{d}\varphi^2 + r^2\mathrm{d}\theta^2 \tag{3.425}$$

takže metrický tenzor je

$$g_{kl} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2\sin^2\theta & 0 \\ 0 & 0 & r^2 \end{pmatrix}. \tag{3.426}$$

pro objem koule máme

$$V = \int \mathrm{d}\mu = \int \sqrt{\det(g)}\;\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta = \int r^2 \sin\theta\,\mathrm{d}r\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}\theta\,. \tag{3.427}$$

Po dosazení mezí dostaneme

$$V = \left(\int_0^R r^2\,\mathrm{d}r\right)\cdot\left(\int_0^{2\pi}\mathrm{d}\varphi\right)\cdot\left(\int_0^{\pi}\sin\theta\,\mathrm{d}\theta\right) = \frac{4}{3}\pi R^3\,, \tag{3.428}$$

což je známý vztah pro objem koule.

◗

3.7 Některé speciální funkce

Kmity a vlny jsou tím nejpřirozenějším projevem, který v přírodě pozorujeme. Kmity popisuje potenciální energie parabolického tvaru, která vede na pohybovou rovnici

$$\ddot{\psi} + \omega^2 \psi = 0\,. \tag{3.429}$$

Proměnná ψ je zástupným symbolem pro jakoukoli kmitající veličinu. Tečka označuje derivaci podle času. Řešením této rovnice kmitů je lineární kombinace sinů a kosinů $A \cos \omega t + B \sin \omega t$. Pokud by před druhým členem bylo záporné znaménko, řešením by byla kombinace hyperbolických sinů a kosinů. I taková řešení mají při popisu přírody svůj smysl. Obdobnou rovnici můžeme napsat také pro okamžitý snímek jednorozměrných prostorových vln (bez časové závislosti):

$$\psi'' + k^2 \psi = 0\,. \tag{3.430}$$

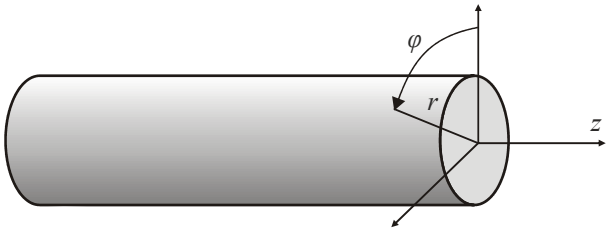
Čárka označuje prostorovou derivaci. Řešením rovnice je opět lineární kombinace sinů a kosinů $A \cos kx + B \sin kx$. Pokud je znaménko druhého členu rovnice záporné, řešení vede opět na hyperbolické siny a kosiny. Ve třech prostorových dimenzích je přirozeným zobecněním rovnice

$$\Delta \psi + k^2 \psi = 0\,. \tag{3.431}$$

Řešení této rovnice závisí na oblasti, v níž se vlny rozvinou. Vlnění ve válcové oblasti povede na Besselovy funkce, vlnění kuličky na kulové funkce. Obě třídy funkcí jsou ve fyzice mimořádně důležité, a proto se s nimi alespoň rámcově seznámíme. Samotná rovnice (3.431) se nazývá Helmholtzova rovnice – jde o rovnici pro vlastní funkce Laplaceova operátoru.

3.7.1 Besselovy funkce

Nalezněme nyní přirozené vlnění obyčejného válečku. Za tím účelem přepíšeme Helmholtzovu rovnici (3.431) do válcových souřadnic (r, φ, z).



Obr. 3.36: Válcové souřadnice

V ose z je řešení neomezené a povede na běžné siny a kosiny, proto nás nebude zajímat a pokusíme se rovnici (3.431) řešit v řezu, tj. pro proměnné (r, φ), kde je řešení deformováno válcovou geometrií z tradičních sinů a kosinů do jiných funkcí:

$$\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}r\frac{\partial \psi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}+k^2\psi=0\,; \qquad \psi=\psi(r,\varphi). \tag{3.432}$$

V azimutálním směru musí být řešení periodické, tj. po 2π se opakovat. Periodické funkce umíme přes Fourierovy řady rozvinout do sinů a kosinů. Pro jeden mód řešení tedy budeme mít

$$\psi=\psi(r,\varphi)=f(r)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}. \tag{3.433}$$

Z požadavku periodičnosti plyne

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}=\mathrm{e}^{\mathrm{i}m(\varphi+2\pi)} \quad \Rightarrow \quad \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}m}=1 \quad \Rightarrow \quad m=0,\pm1,\pm2,\ldots \tag{3.434}$$

Číslo m nazýváme mód vlnění. Po dosazení předpokládaného tvaru řešení (3.433) do Helmholtzovy rovnice (3.432) a provedení derivace podle azimutálního úhlu získáme rovnici pro hledané radiální řešení $f(r)$, které popisuje rozvlnění v radiálním směru:

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}+k^2 f-\frac{m^2}{r^2}f=0\,. \tag{3.435}$$

Druhý a čtvrtý člen je důsledkem válcové geometrie. Pokud bychom je smazali, dostali bychom rovnici vln typu (3.430). Rovnici vynásobíme druhou mocninou r

$$r^2\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}r^2}+r\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}r}+\left(k^2r^2-m^2\right)f=0\,. \tag{3.436}$$

a provedeme substituci

$$x=kr \tag{3.437}$$

► $$x^2\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}+x\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}+\left(x^2-m^2\right)f=0\,. \tag{3.438}$$

Nezapomeňme, že proměnná x nemá nic společného s kartézskou proměnnou x, jde o přeškálovanou radiální vzdálenost od osy válcových souřadnic. Uvedená rovnice se nazývá Besselova rovnice a její řešení je analogií kosinů a sinů v kartézské geometrii. Rovnici je třeba řešit za pomoci rozvoje do nekonečných řad. Obecné řešení má tvar:

► $$f(x)=c_1J_m(x)+c_2Y_m(x)\,. \tag{3.439}$$

Funkce J_m nazýváme Besselovy funkce prvního druhu a mají v počátku konečné hodnoty. Funkce Y_m nazýváme Besselovy funkce druhého druhu a v počátku jsou singulární (v limitě se blíží k minus nekonečnu), což je důsledkem singulárních členů v (3.435). Funkce $J_0(x)$ koresponduje ve válcových souřadnicích s funkcí kosinus z kartézských souřadnic a funkce J_1(x) koresponduje se sinem. Platí mezi nimi i obdobný vztah:

$$\frac{\mathrm{d}J_0(x)}{\mathrm{d}x}=-J_1(x)\,. \tag{3.440}$$

Funkce prvního druhu lze jednoduše zapsat pomocí řady, pro druhý druh je přehlednější integrální vyjádření:

$$J_m(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{(-1)^k}{k!(k+m)!}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k+m}, \tag{3.441}$$

$$Y_m(x)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\pi}\sin\left(x\sin\theta-n\theta\right)\mathrm{d}\theta-\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\left[\mathrm{e}^{mt}+(-1)^m\,\mathrm{e}^{-mt}\right]\mathrm{e}^{-x\,\mathrm{sh}\,t}\,\mathrm{d}t\,. \qquad (3.442)$$

Analogie hyperbolického řešení

Besselovy funkce lze bez problémů definovat i pro neceločíselný index m (faktoriály v definiční řadě nahradí Γ funkce) nebo pro komplexní argument. Z komplexních argumentů je nejdůležitější ryze imaginární argument ($x \to \mathrm{i}x$). V tomto případě rovnice (3.438) přejde v

► $$x^2\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}x^2}+x\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}-(x^2+m^2)\,f=0\,, \qquad (3.443)$$

jejímž řešením je analogie hyperbolických funkcí

► $$f(x)=c_1 I_m(x)+c_2 K_m(x)\,, \qquad (3.444)$$

kde I_m, K_m nazýváme hyperbolické neboli modifikované Besselovy funkce. Funkce I_m mají konečné hodnoty v počátku a v nekonečnu divergují (analogicky jako exp[x]), snadno se definují pomocí řady. Naopak funkce K_m divergují v počátku a v nekonečnu se blíží nule (analogicky jako exp[–x]) a jednodušší je jejich integrální vyjádření:

$$I_m(x)=\sum_{k=0}^{\infty}\frac{1}{k!(k+m)!}\left(\frac{x}{2}\right)^{2k+m}\,; \qquad (3.445)$$

$$K_m(x)=\frac{\sqrt{\pi}}{(m-1/2)!}\left(\frac{x}{2}\right)^m\int_1^{\infty}\mathrm{e}^{-tx}\left(t^2-1\right)^{m-1/2}\mathrm{d}t\,. \qquad (3.446)$$

Asymptotické vztahy

Užitečné mohou být asymptotické vztahy v okolí počátku ($x \ll 1$):

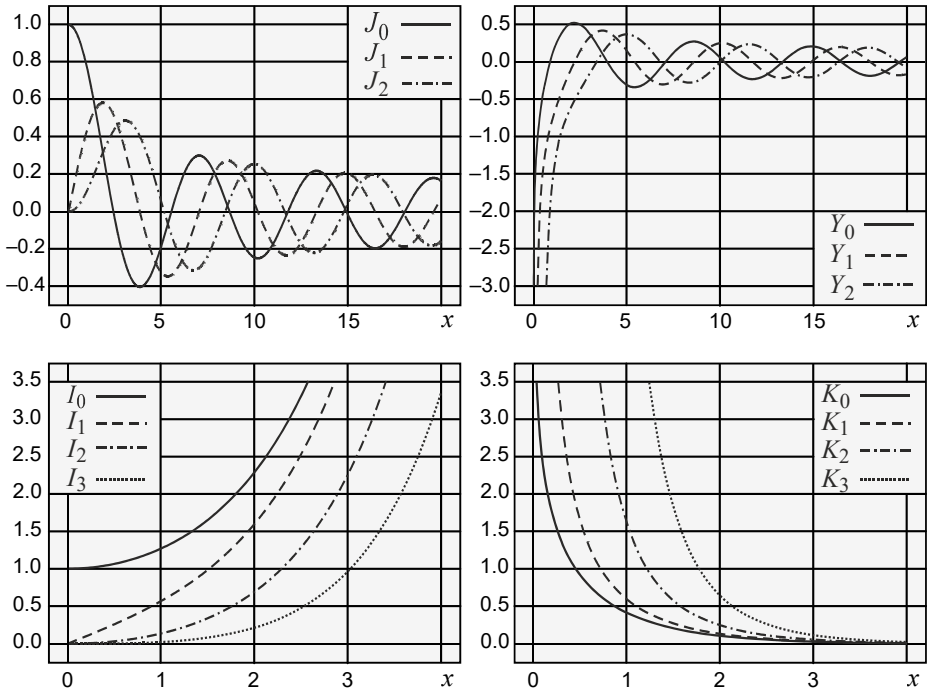
$$\begin{aligned} J_m(x)&\approx\frac{1}{m!}\left(\frac{x}{2}\right)^m, \qquad Y_m(x)\approx\frac{(m-1)!}{\pi}\left(\frac{x}{2}\right)^{-m}\,; \quad m>0\,,\\ I_m(x)&\approx\frac{1}{m!}\left(\frac{x}{2}\right)^m, \qquad K_m(x)\approx\frac{(m-1)!}{\pi}\left(\frac{x}{2}\right)^{-m}\,; \quad m>0\,. \end{aligned} \qquad (3.447)$$

Někdy se také hodí asymptotické vztahy v nekonečnu ($x \gg 1$):

$$\begin{aligned} J_m(x)&\approx\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\cos\left(x-\frac{m\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right), \qquad Y_m(x)\approx\sqrt{\frac{2}{\pi x}}\sin\left(x-\frac{m\pi}{2}-\frac{\pi}{4}\right),\\ I_m(x)&\approx\frac{1}{\sqrt{2\pi x}}\mathrm{e}^{x}\,, \qquad K_m(x)\approx\sqrt{\frac{\pi}{2x}}\;\mathrm{e}^{-x}\,. \end{aligned} \qquad (3.448)$$

Pro vykreslení Besselových funkcí můžeme použít stránku www.wolframalpha.com, příkazy jsou samonaváděcí, například besselj[0,x] from x=0 to x=10 vykreslí funkci J_0.

První argument v závorce (nezáleží na tom, o jaký druh závorky jde) je číslo m. Jednotlivé Besselovy funkce se nazývají besselj, bessely, besseli a besselk.



Obr. 3.36: Průběhy jednotlivých Besselových funkcí

3.7.2 Kulové funkce

Kulové funkce dostaneme řešením Helmholtzovy rovnice (úlohy vlastních čísel Laplaceova operátoru) ve sférické symetrii pro řez $r = \text{const}$, tedy na obecné sféře. Kulové funkce tvoří bázi pro sféricky symetrický potenciál v kvantové teorii, viz kapitola 2.5. Jsou vhodné pro rozvoje úhlových částí funkcí ve sférických souřadnicích. Do kulových funkcí se provádí rozvoj jakýchkoli dat na sféře, například je využívá helioseismologie (popis vln ve Slunci) nebo frekvenční analýza reliktního záření. Výchozí rovnice má opět tvar (3.431), tj. ve sférických souřadnicích

$$\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial \psi}{\partial r}+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}+k^2\psi=0\,, \qquad (3.449)$$

kde r je vzdálenost od středu, θ je odklon od polární osy a φ je azimutální úhel. Pro fixní r zůstane jen úhlová část Laplaceova operátoru, vlastní číslo označíme obvyklým symbolem λ:

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\psi}{\partial\theta}\right)+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2}=\lambda\psi\,; \qquad \lambda\equiv -r^2k^2\,. \qquad (3.450)$$

Řešením této rovnice pro vlastní čísla Laplaceova operátoru jsou kulové funkce

$$Y_{lm}(\varphi,\theta) \equiv \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi}\,P_{lm}(\cos\theta)\,; \tag{3.451}$$

$$P_{lm}(x) \equiv \frac{(1-x^2)^{m/2}}{2^l\,l!}\,\frac{\mathrm{d}^{l+m}}{\mathrm{d}x^{l+m}}(x^2-1)^l\,; \quad l=0,1,2,\ldots; \quad |m|\le l\,; \quad m=0,\pm1,\ldots \tag{3.452}$$

Vlastní čísla jsou indexována dvěma diskrétními čísly l, m (na sféře máme dva stupně volnosti). V kvantové teorii tato čísla odpovídají vedlejšímu a magnetickému číslu. Polynomy P_{lm} se nazývají *přidružené Legendreovy polynomy*. Pro $m = 0$ se nazývají *Legendreovy polynomy*:

$$P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l\,l!}\,\frac{\mathrm{d}^l}{\mathrm{d}x^l}\,(x^2-1)^l\,; \quad l=0,1,2,\ \ldots \tag{3.453}$$

Jiný způsob, jak zapsat Legendreův polynom je v komplexní rovině za pomoci křivkového integrálu po křivce, která proti směru hodinových ručiček oběhne počátek souřadnic $z, t \in \mathbb{C}$:

$$P_l(z) = \frac{1}{2\pi\,\mathrm{i}}\oint_\gamma \left(1-2tz+t^2\right)^{-1/2} t^{-l-1}\,\mathrm{d}t\,. \tag{3.454}$$

Pro Legendreovy polynomy platí některé užitečné vztahy, například

$$\int_{-1}^{+1} P_l(x)\,\mathrm{d}x = 2\delta_{0l}\,; \qquad \int_{-1}^{+1} x\,P_l(x)\,\mathrm{d}x = \frac{2}{3}\delta_{1l}\,. \tag{3.455}$$

V prvním případě je tedy nenulový jen integrál z $P_0(x)$, v druhém případě z $P_1(x)$. Je to zjevné ze vztahu (3.453). Legendreovy polynomy lze použít při multipólovém rozvoji, kdy se při rozvoji potenciálu pro převrácenou hodnotu vzdálenosti využívá vztah

$$\frac{1}{|\,\mathbf{r}-\mathbf{r}'\,|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\min^l(r,r')}{\max^{l+1}(r,r')}\,P_l(\cos\theta)\,, \tag{3.456}$$

kde θ je úhel mezi polohovými vektory pozorovatele **r** a zdroje **r′**.

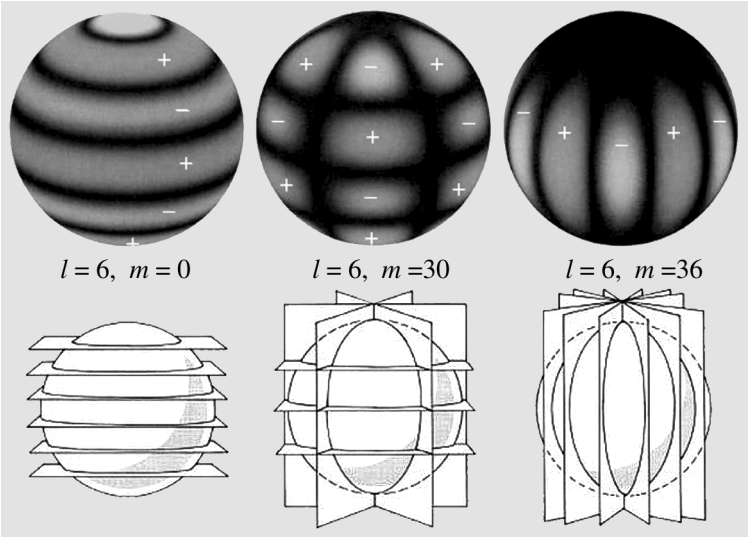
* * *

V případě, že je vlna rozvinuta i v radiálním směru, potřebujeme k popisu vlnění tři čísla: m popisuje mody v azimutálním směru, l v polárním směru a n v radiálním směru. Pro $l = 0$ je řešení na sféře konstantní a žádné vlny se v úhlových stupních volnosti nerozvinou. Pro $l > 1$ je typický rozměr vln

$$\Delta\theta = \frac{\pi}{l}\,; \qquad l>1\,. \tag{3.457}$$

Cílem této kapitoly bylo jen zevrubné seznámení s existencí Besselových a kulových funkcí, nikoli detaily jejich výpočtu. Ve wolphramalpha.com je označení pro sférické funkce sphericalharmonicy(l,m), kde za l a m dosadíte konkrétní čísla. Na závěr si pro-

hlédněte vlny na sféře pro některá l a m. Oblasti (+) znamenají vyboulení sféry směrem ven a oblasti (–) její prohnutí dovnitř.



Obr. 3.37: Kulové funkce. Robert Noyes, Sky Publishing Corporation.

3.7.3 Chybová funkce a Chandrasekharova funkce

Chybová funkce

Ve statistické fyzice mnoho dějů podléhá Gaussově hustotě pravděpodobnosti

$$f(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \mathrm{e}^{-x^2} \; ; \qquad x \geq 0. \tag{3.458}$$

Součet hustot pravděpodobnosti od nuly až do určité hodnoty se nazývá distribuční funkce. V případě Gaussova rozdlení jde o tzv. chybovou funkci

$$\phi(x) \equiv \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \mathrm{e}^{-\xi^2} \, \mathrm{d}\xi \, . \tag{3.459}$$

Její hodnotu je možné definovat i pro záporná x. Pomocí chybové funkce lze vyjádřit první Rosenbluthův potenciál H pro Maxwellovo rozdělení (viz třetí díl této učebnice).

Chandrasekharova funkce

Velmi příbuznou funkcí k chybové funkci je Chandrasekharova funkce. Je užitečná při popisu srážek nabitých částic a vystupuje v třecím členu Fokkerovy-Planckovy rovnice pro Maxwellovo rozdělení. Pomocí této funkce se také popisuje vstup nabité částice do tzv. ubíhajícího režimu, kdy jsou srážky zanedbatelné a částice je urychlována elektrickým polem na velmi značné energie. Tato funkce je dána vztahem

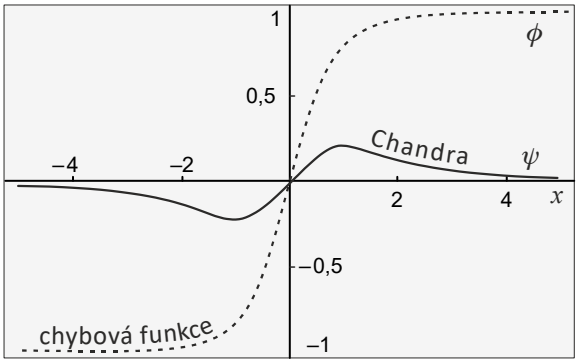
$$\psi(x) \equiv \frac{\frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \xi^2 \, \mathrm{e}^{-\xi^2} \, \mathrm{d}\xi}{x^2} . \tag{3.460}$$

Mezi Chandrasekharovou funkcí a chybovou funkcí platí jednoduchý vztah:

$$\psi(x) = \frac{\phi - x\phi'}{2x^2} . \tag{3.461}$$

Využijeme-li, že $\phi' = 2 \exp[-x^2]/\pi^{1/2}$, můžeme snadno vztah obrátit:

$$\phi = 2x^2\psi + \frac{2x}{\sqrt{\pi}} \mathrm{e}^{-x^2} . \tag{3.462}$$



Obr. 3.38: Chandrasekharova funkce (ψ) a chybová funkce (ϕ).

Extrém Chandrasekharovy funkce lze nalézt numericky:

$$x_0 \approx 0{,}968 ; \qquad \psi(x_0) \approx 0{,}214 . \tag{3.463}$$

Limitní chování Chandrasekharovy funkce je

$$\psi(x) = \frac{2}{3\sqrt{\pi}} x ; \qquad x \ll 1 , \tag{3.464}$$

$$\psi(x) = \frac{1}{2x^2} ; \qquad x \gg 1 . \tag{3.465}$$

Chandrasekharovu funkci lze nahradit jednodušší racionální lomenou funkcí

$$G(x) = \frac{2x}{3\pi^{1/2} + 4x^3} , \tag{3.466}$$

která má stejné limitní chování jako Chandrasekharova funkce a v celém průběhu se její hodnoty neliší o více než deset procent.

3.8 Zobecněné funkce

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 $x = 0$:

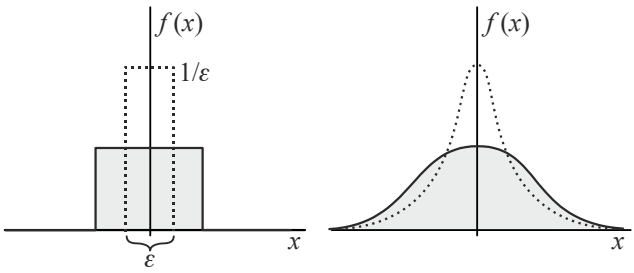
$$\tau(x) = \begin{cases} 0\,; & x \neq 0 \\ \neq 0 & x = 0. \end{cases} \tag{3.467}$$

Integrál z hustoty ale musí dát celkový náboj Q:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \tau(x)\,\mathrm{d}x = Q. \tag{3.468}$$

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.

3.8.1 Diracova distribuce



Obr. 3.39: Posloupnost obdélníků a kopečků

Posloupnost obdélníků

Zaveďme si obdélníkové funkce

$$f_\varepsilon(x) \equiv \begin{cases} 1/\varepsilon, & x \in <-\varepsilon/2, \varepsilon/2>\,; \\ 0, & x \notin <-\varepsilon/2, \varepsilon/2>\,. \end{cases} \tag{3.469}$$

Všechny obdélníky mají stejnou plochu rovnou jedné a funkce f_ε mají docela zajímavé vlastnosti:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_\varepsilon(x)\,\mathrm{d}x = 1\,; \qquad f_\varepsilon(0) = \frac{1}{\varepsilon}\,; \qquad \lim_{\varepsilon \to 0} f_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & \text{pro } x = 0 \\ 0 & \text{pro } x \neq 0 \end{cases}. \tag{3.470}$$

Diracovu distribuci můžeme formálně zavést jako limitu těchto obdélníkových funkcí

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} f_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & \text{pro } x = 0 \\ 0 & \text{pro } x \neq 0 \end{cases}; \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = 1. \tag{3.471}$$

Je jasné, že nemůže jít o skutečnou funkci, protože integrál z funkce nemůže ovlivnit hodnota v jediném bodě. Hovoříme o tzv. zobecněné funkci a skutečný význam si vysvětlíme později.

Posloupnost kopečků (Cauchyho-Lorentzových rozdělení)

Obdélníky z předchozí ukázky nejsou hladké funkce. To ale není nepřekonatelný problém, místo obdélníků můžeme použít funkce spojité se všemi svými derivacemi podle vztahu

$$f_\varepsilon(x) \equiv \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2}. \tag{3.472}$$

Plocha pod těmito funkcemi je rovna jedné pro každé ε, protože

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_\varepsilon(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\varepsilon}{\varepsilon^2 + x^2}\,\mathrm{d}x = \frac{1}{\pi}\left[\operatorname{atg}\frac{x}{\varepsilon}\right]_{-\infty}^{+\infty} = \frac{1}{\pi}\left(\frac{\pi}{2} + \frac{\pi}{2}\right) = 1. \tag{3.473}$$

Pro malá ε se „kopce“ zužují a přitom se zvětšuje jejich výška:

$$\begin{gathered} \int_{-\infty}^{+\infty} f_\varepsilon(x)\,\mathrm{d}x = 1; \qquad f_\varepsilon(0) = \frac{1}{\pi\varepsilon}; \\ \lim_{\varepsilon \to 0} f_\varepsilon(x) = \begin{cases} \infty & \text{pro } x = 0 \\ 0 & \text{pro } x \neq 0 \end{cases}. \end{gathered} \tag{3.474}$$

Opět můžeme zavést Diracovu distribuci jako limitu těchto spojitých funkcí:

$$\delta(x) = \lim_{\varepsilon \to 0} f_\varepsilon(x). \tag{3.475}$$

Cauchyho-Lorentzovo rozdělení, ze kterého jsme nyní zkonstruovali Diracovu distribuci, popisuje ve spektroskopii tvar spektrálních čar a nebo v teorii vynucených kmitů rezonanční křivku. Je pojmenováno podle francouzského matematika Augustina Cauchyho (1759–1857) a holandského fyzika Hendrika Lorentze (1853–1928).

Diracova distribuce (neboli *zobecněná funkce*) 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:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(x)\,\mathrm{d}x = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x) f(0)\,\mathrm{d}x = f(0) \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x)\,\mathrm{d}x = f(0). \tag{3.476}$$

Důvod je snad zřejmý. Distribuce δ je všude nulová kromě jediného bodu $x = 0$. Proto výsledek integrálu může ovlivnit jedině hodnota funkce f v počátku. Tu však můžeme vytknout před integrál a dostaneme jako výsledek hodnotu funkce v počátku.

3.8.2 Temperované distribuce

Diracovu distribuci lze také chápat jako velmi jednoduché zobrazení, které přiřadí funkci její hodnotu v počátku (zobrazení, které přiřadí funkci číslo, se nazývá *funkcionál*).

$$\hat{T}_\delta f(x) \equiv f(0)\,; \qquad \text{resp. } f(x) \overset{T_\delta}{\to} f(0)\,. \tag{3.477}$$

Taková definice nemá žádné problémy s nekonečny v počátku ani s integrálem, v němž má „funkce“ jedinou hodnotu, a je zcela korektní. Obecně lze distribuci chápat jako funkcionál daný skalárním součinem

$$\hat{T}_g f(x) \equiv \langle g \,|\, f \rangle\,; \tag{3.478}$$

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 *Schwartzův* (*Sobolevův*) prostor $\mathscr{S}$ funkcí, které splňují:

1) funkce jsou nekonečně diferencovatelné, tj. třídy C^∞;
2) funkce klesají v $\pm\infty$ rychleji než libovolná mocnina $1/|x|^k$.

Testovací funkce budeme nadále označovat ψ, tj.

► $$\hat{T}_g \psi(x) \equiv \langle g \,|\, \psi \rangle\,; \qquad \psi \in \mathscr{S}\,. \tag{3.479}$$

Často se hledají řešení celých rovnic „ve smyslu skalárního součinu“. Například místo Laplaceovy Poissonovy rovnice

$$\Delta\phi = f\,,$$

řešíme rovnici

$$\langle \Delta\phi \,|\, \psi \rangle = \langle f \,|\, \psi \rangle\,,$$

kde ϕ je hledané řešení a ψ je libovolná funkce z prostoru testovacích funkcí. Tato řešení se nazývají *řešení ve smyslu distribucí* neboli *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 jako jedna z prvních zabývala vynikající sovětská a ruská matematička Olga Alexandrovna Ladyženská (1922–2004).

Posloupnost Dirichletových jader

Diracovu distribuci můžeme zavést také pomocí jednoduché funkce

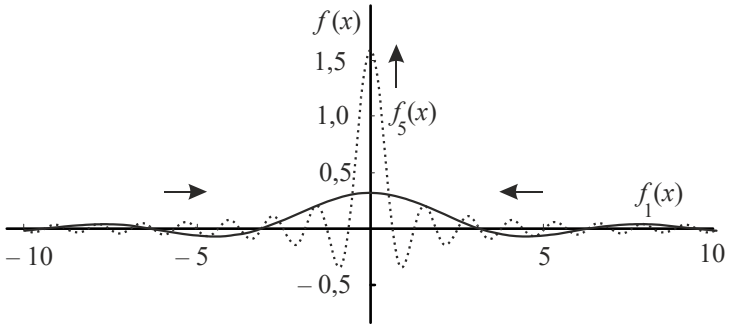
$$f(x) \equiv \frac{\sin x}{x}\,; \qquad f(0) \to 1\,; \qquad \int_{-\infty}^{+\infty} f(x)\,\mathrm{d}x = \pi\,. \tag{3.480}$$

Zaveďme posloupnost

$$f_k(x) = \frac{k}{\pi}\,\frac{\sin kx}{kx}, \tag{3.481}$$

která má jednoduché vlastnosti

$$\int_{-\infty}^{+\infty} f_k(x)\,\mathrm{d}x = 1; \qquad f_k(0) = \frac{k}{\pi}; \qquad \lim_{k\to\infty} f_k(0) = \infty. \tag{3.482}$$



Obr. 3.40: Posloupnost Dirichletových jader

Bohužel už neplatí, že by se pro $k \to \infty$ funkční hodnoty pro $x \neq 0$ blížily k nule, jako tomu bylo u posloupnosti obdélníků nebo u posloupnosti „kopečků“ pro malá epsilon. Například pro $x = \pi/2$ je $f_k(x) \sim \sin(k\pi/2) = \{0, 1, 0, –1, 0, 1, \ldots\}$ a limita vůbec neexistuje. Nicméně na každém intervalu, který neobsahuje nulu, bude integrál z této rychle kmitající funkce pro $k \to \infty$ nulový, a tato posloupnost funkcí je opět vhodná pro realizaci Diracovy distribuce (integrál každé z nich je roven jedné a v nule pro $k \to \infty$ posloupnost diverguje k nekonečnu. Diracovu tedy distribuci můžeme zavést jako limitu

► $$\delta(x) = \lim_{k\to\infty} \frac{k}{\pi}\,\frac{\sin kx}{kx}. \tag{3.483}$$

Tuto limitu ale chápeme jako limitu posloupnosti distribucí (při integraci přes testovací funkci nebude neexistence některých limit podstatná). Poznamenejme, že funkce $f_k(x)$ jsou známé z důkazu věty o Fourierově rozvoji do řady a nazývají se *Dirichletovo jádro*. Je pojmenováno podle známého německého matematika Johanna Petera Gustava Lejeunea Dirichleta (1805–1859).

Diracova distribuce jako Fourierův obraz jednotkové funkce

Spočtěme nejprve následující integrál:

$$\int_{-k}^{+k} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k = \left[\frac{1}{\mathrm{i}x}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\right]_{-k}^{+k} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kx} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}kx}}{\mathrm{i}x} = 2k\,\frac{\sin kx}{kx}. \tag{3.484}$$

Integrál, až na koeficient $\pi/2$, dává Dirichletovo jádro. Pro Diracovu distribuci lze tedy také psát

$$\delta(x) = \lim_{k\to\infty} \frac{1}{2\pi} \int_{-k}^{+k} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k\ .$$

Integrál v nevlastních mezích chápeme právě ve smyslu uvedené limity. Diracova distribuce je tak úměrná Fourierovu obrazu jednotkové funkce:

► $$\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}\,\mathrm{d}k\ . \tag{3.485}$$

3.8.3 Konvoluce a Fourierova transformace

Konvoluce

Již dříve jsme si ukázali, že přímým zobecněním maticového násobení je na prostoru funkcí konvoluce. Obě operace se liší jen tím, zda je index diskrétní či spojitý a zda použijeme sumaci či integraci. Pro zobrazení dané maticovým násobením platí (prvku f přiřadíme prvek g)

$$\begin{aligned} &\mathbf{g} = \mathbf{A}\cdot\mathbf{f}\ ; \\ &g_k = \sum_l A_{kl} f_l\ . \end{aligned} \tag{3.486}$$

Jednotkové zobrazení je dáno jednotkovou maticí, jejíž prvky tvoří Kroneckerův symbol (má jednotky na diagonále a nuly mimo diagonálu):

$$\begin{aligned} &\mathbf{1}\cdot\mathbf{f} = \mathbf{f}\ ; \\ &\sum_l \delta_{kl} f_l = f_k\ . \end{aligned} \tag{3.487}$$

V případě prostoru funkcí namísto matice v zpobrazení vystupuje funkce dvou proměnných $A(x, y)$, kterou nazýváme konvoluční jádro:

$$\begin{aligned} &A * f = g\ ; \\ &\int_\Omega A(x,y) f(y)\,\mathrm{d}y = g(x)\ . \end{aligned} \tag{3.488}$$

Integrál (3.488) se nazývá *konvoluce.* Konvoluce je analogií maticového násobení na prostorech funkcí. Roli indexů přebírají spojité proměnné x a y. Roli matice přebírá *jádro konvoluce*. Speciálním případem konvolucí jsou různé integrální transformace (Laplaceova, Fourierova, Abelova atd.). Jádrem jednotkového operátoru je Diracova distribuce (je nenulová jen pro $x = y$):

$$\int \delta(x-y)\, f(y)\,\mathrm{d}y = f(x)\ .$$

Diracova distribuce přebírá úlohu Kroneckerova symbolu a na prostoru funkcí reprezentuje jednotkový operátor. Diracovu distribuci pro konvoluci můžeme vyjádřit ze vztahu (3.485):

$$\delta(x-y)=\frac{1}{2\pi}\int_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(x-y)}\,\mathrm{d}k\,. \tag{3.489}$$

V N dimenzích je vztah obdobný:

$$\delta(\mathbf{x}-\mathbf{y})=\frac{1}{(2\pi)^N}\int_k \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{y})}\,\mathrm{d}^N\mathbf{k}\,. \tag{3.490}$$

Fourierova transformace

Fourierovu transformaci můžeme chápat jako konvoluci s jádrem exp[i**k**·**x**] nebo jako rozvoj funkce do rovinných vln:

► $$F(\mathbf{x})\equiv\int A(\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\,\mathrm{d}^N\mathbf{k}\,; \tag{3.491}$$

Koeficienty rozvoje neboli amplitudy $A(\mathbf{k})$ určují, jak moc je která vlna ve spektru zastoupena. V některých situacích se hodí vztah, který nám říká, jak určit koeficienty Fourierova rozvoje funkce $F(\mathbf{x})$:

► $$A(\mathbf{k})=\frac{1}{(2\pi)^N}\int F(\mathbf{x})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\,\mathrm{d}^N\mathbf{x}\,. \tag{3.492}$$

Dokažme nyní, že takto určené amplitudy vedou na správný rozvoj funkce $F(\mathbf{x})$. Za tím účelem dosadíme (3.492) do pravé strany (3.491):

$$\int A(\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\,\mathrm{d}^N\mathbf{k}=\int\left(\frac{1}{(2\pi)^N}\int F(\mathbf{x}')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}'}\,\mathrm{d}^N\mathbf{x}'\right)\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\,\mathrm{d}^N\mathbf{k}=$$

$$=\int F(\mathbf{x})\left(\frac{1}{(2\pi)^N}\int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{x}-\mathbf{x}')}\mathrm{d}^N\mathbf{k}\right)\mathrm{d}^N\mathbf{x}'=$$

$$\int F(\mathbf{x}')\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\,\mathrm{d}^N\mathbf{x}'=F(\mathbf{x})\,,$$

což jsme chtěli dokázat – po dosazení amplitudy (3.492) do pravé strany (3.491) dostaneme původní funkci. Rozvoj (3.491) zpravidla interpretujeme jako přímou transformaci z **k** prostoru do **x** prostoru, vztah (3.492) pro koeficienty $A(\mathbf{k})$ jako inverzní transformaci z **x** prostoru do **k** prostoru, jde ale o věc pouhé dohody:

$$F(\mathbf{x})\equiv\mathscr{F}\big(A(\mathbf{k})\big)\,;\qquad A(\mathbf{k})\equiv\mathscr{F}^{-1}\big(F(\mathbf{x})\big). \tag{3.493}$$

Věta: Pro Fourierovou transformaci konvoluce existuje jednoduchý vztah:

► $$\mathscr{F}(f*g)=\mathscr{F}(f)\cdot\mathscr{F}(g)\,. \tag{3.494}$$

Důkaz:

$$\mathscr{F}(f*g)=\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\left(\int f(\mathbf{x}-\mathbf{y})g(\mathbf{y})\,\mathrm{d}^N\mathbf{y}\right)\mathrm{d}^N\mathbf{x}=$$

$$=\int\left(\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\,f(\mathbf{x}-\mathbf{y})g(\mathbf{y})\,\mathrm{d}^N\mathbf{x}\right)\mathrm{d}^N\mathbf{y}=\quad\big|\,\text{subst.: }\mathbf{x}-\mathbf{y}\equiv\mathbf{z}$$

$$=\int\left(\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot(\mathbf{y}+\mathbf{z})}\,f(\mathbf{z})g(\mathbf{y})\,\mathrm{d}^N\mathbf{x}\right)\mathrm{d}^N\mathbf{y}=$$

$$= \left(\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{z}} \, f(\mathbf{z}) \, \mathrm{d}^N\mathbf{z} \right) \cdot \left(\int \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{y}} \, g(\mathbf{y}) \, \mathrm{d}^N\mathbf{y} \right) =$$

$$= \mathscr{F}(f) \cdot \mathscr{F}(g).$$

■

Poznámka: Součin koeficientů u přímé a inverzní transformace musí dát $1/(2\pi)^N$. Někdy bývá zvykem koeficienty u přímé a inverzní transformace volit symetricky:

$$F(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int A(\mathbf{k}) \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \, \mathrm{d}^N\mathbf{k} \, ; \tag{3.495}$$

$$A(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^{N/2}} \int F(\mathbf{x}) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} \, \mathrm{d}^N\mathbf{x} \, . \tag{3.496}$$

V takovém případě ale nebude platit jednoduchý vztah (3.494) o konvoluci.

3.8.4 Greenova funkce

Zabývejme se nyní speciálním případem – rovnicí s lineárním operátorem a nenulovou pravou stranou na prostoru $\mathcal{L}^2$

$$\hat{L}\phi = f. \tag{3.497}$$

Hledejme nejprve řešení pro jednotkový impuls na pravé straně (bude reprezentovaný Diracovou distribucí):

$$\hat{L} \, G(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) \tag{3.498}$$

Toto řešení se nazývá *Greenova funkce*. Obecné řešení rovnice (3.497) je konvolucí Greenovy funkce a pravé strany rovnice

► $$\phi(\mathbf{x}) = G * f = \int G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) f(\mathbf{y}) \, \mathrm{d}^N\mathbf{y} \, . \tag{3.499}$$

Důkaz je velmi jednoduchý. Ukážeme, že působením operátoru $\hat{L}$ na nalezené řešení dostaneme pravou stranu původní rovnice:

$$\hat{L}\phi(\mathbf{x}) = \int \hat{L} \, G(\mathbf{x}-\mathbf{y}) f(\mathbf{y}) \, \mathrm{d}^N\mathbf{y} \; = \int \delta(\mathbf{x}-\mathbf{y}) f(\mathbf{y}) \, \mathrm{d}^N\mathbf{y} \; = \; f(\mathbf{x}) \, .$$

Greenova funkce je velmi výhodná při řešení parciálních diferenciálních rovnic. Do Greenovy funkce jsou zahrnuty případné okrajové podmínky, ty musí Greenova funkce samozřejmě automaticky splňovat. Pokud má parciální diferenciální rovnice i časovou proměnnou, tj. $\phi = \phi(t, \mathbf{x})$, musíme zadat počáteční podmínku $\phi_0(\mathbf{x}) = \phi(t = 0, \mathbf{x})$, okrajové podmínky a případnou pravou stranu $f(t, \mathbf{x})$. Obecné řešení je pak součtem dvou členů: prostorové konvoluce Greenovy funkce s počáteční podmínkou a časoprostorové konvoluce Greenovy funkce s pravou stranou:

► $$\phi(t,\mathbf{x}) = \underset{(\mathbf{x})}{G * \phi_0} + \underset{(t,\mathbf{x})}{G * f} \, , \tag{3.500}$$

$$\phi(t,\mathbf{x}) = \int G(t,\mathbf{x}-\mathbf{y})\,\phi_0(\mathbf{y})\,\mathrm{d}^N\mathbf{y} + \int G(t-\tau,\mathbf{x}-\mathbf{y})\,f(\tau,\mathbf{y})\,\mathrm{d}\tau\,\mathrm{d}^N\mathbf{y}\,. \qquad (3.501)$$

V poslední části této kapitoly si ukážeme využití Greenovy funkce při výpočtu obecného řešení rovnice difúze v neomezeném třírozměrném prostoru.

Obecné řešení rovnice difúze

Rovnice difúze je jednou z nejdůležitějších fyzikálních rovnic vůbec. Vede na ni řada problémů: difúze molekul (například voňavky) ze zdroje do okolního prostředí (proměnnou je zde koncentrace), vedení tepla, difúze magnetického pole, obdobný tvar má i Schrödingerova časová rovnice v kvantové teorii. Vyjděme z tvaru:

► $$\frac{\partial\phi}{\partial t} - D\,\Delta\phi = f(t,\mathbf{x})\,, \qquad (3.502)$$

kde $\phi(t, \mathbf{x})$ je hledaná veličina (může být skalární i vektorová), D je koeficient difúze, $f(t, \mathbf{x})$ je pravá strana popisující zdroje veličiny (například rozprašovače voňavky) a počáteční rozložení veličiny ϕ je

$$\phi(0, \mathbf{x}) = \phi_0(\mathbf{x})\,. \qquad (3.503)$$

Uvažujme tuto rovnici difúze v neomezeném prostředí.

Věta: Obecné řešení rovnice difúze v N dimenzích lze napsat jako prostorovou konvoluci Greenovy funkce s počáteční podmínkou a časoprostorovou konvoluci s pravou stranou:

$$\phi = G \underset{(\mathbf{x})}{*} \phi_0 \quad + \quad G \underset{(t,\mathbf{x})}{*} \mathbf{f}\,, \qquad (3.504)$$

neboli

$$\phi(t,\mathbf{x}) = \int G(t,\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi})\,\phi_0(\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}^N\boldsymbol{\xi} \;+\; \int G(t-\tau,\mathbf{x}-\boldsymbol{\xi})\,\mathbf{f}(\tau,\boldsymbol{\xi})\,\mathrm{d}\tau\,\mathrm{d}^N\boldsymbol{\xi}\,, \qquad (3.505)$$

kde Greenova funkce G je dána vztahem

$$G(t,\mathbf{x}) = \frac{1}{(4\pi D t)^{N/2}} \exp\left[-\frac{|\mathbf{x}|^2}{4Dt}\right]. \qquad (3.506)$$

Důkaz: V rovnici (3.502) provedeme Fourierovu transformaci v prostorové části:

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\phi}}{\mathrm{d}t} + D\,k^2\tilde{\phi} = \tilde{f}\,.$$

Všechny členy přenásobíme exponenciálou $\exp[Dk^2t]$ a upravíme:

$$\frac{\mathrm{d}\tilde{\phi}}{\mathrm{d}t}\mathrm{e}^{Dk^2t} + Dk^2\,\mathrm{e}^{Dk^2t}\,\tilde{\phi} = \tilde{f}\,\mathrm{e}^{Dk^2t} \qquad \Rightarrow$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathrm{e}^{Dk^2t}\,\tilde{\phi}\right) = \tilde{f}\,\mathrm{e}^{Dk^2t}\,.$$

Obě strany integrujeme v čase a opět upravíme

$$\tilde{\phi}\,\mathrm{e}^{Dk^2t} - \tilde{\phi}_0 = \int_0^t \tilde{f}\,\mathrm{e}^{Dk^2\tau}\,\mathrm{d}\tau \qquad \Rightarrow$$

$$\tilde{\phi} = \tilde{\phi}_0\,\mathrm{e}^{-Dk^2t} + \int_0^t \tilde{f}(\tau,\mathbf{k})\,\mathrm{e}^{-Dk^2(t-\tau)}\,\mathrm{d}t'\,.$$

Označíme-li

$$\exp[-Dk^2t] \equiv \tilde{G}\,, \tag{3.507}$$

máme s využitím relace (3.494) vztah

$$\tilde{\phi} = \tilde{\phi}_0\tilde{G} + \int_0^t \tilde{f}(t',\mathbf{k})\tilde{G}(t-\tau,\mathbf{k})\,\mathrm{d}\tau \quad \Rightarrow$$

$$\mathscr{F}(\phi) = \mathscr{F}(\phi_0 \underset{(\mathbf{x})}{*} G) + \mathscr{F}(\phi \underset{(t,\mathbf{x})}{*} G) \quad \Rightarrow$$

$$\phi = \phi_0 \underset{(\mathbf{x})}{*} G \quad + \quad \phi \underset{(t,\mathbf{x})}{*} G \quad \Rightarrow$$

$$\phi = G \underset{(\mathbf{x})}{*} \phi_0 \quad + \quad G \underset{(t,\mathbf{x})}{*} \phi\,.$$

Nyní již zbývá jen určit ze vztahu (3.507) Greenovu funkci G:

$$\tilde{G} \equiv \exp[-Dk^2t] \quad \Rightarrow$$

$$G(t,\mathbf{x}) = \mathscr{F}^{-1}(\tilde{G}) = \frac{1}{(2\pi)^N}\int \mathrm{e}^{-Dk^2t}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}\,\mathrm{d}^N\mathbf{k} \quad \Rightarrow$$

$$G(t,\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^N}\mathrm{e}^{-|\mathbf{x}|^2/4Dt}\int \mathrm{e}^{-Dt(\mathbf{k}+\mathrm{i}\mathbf{x}/2Dt)^2}\,\mathrm{d}^N\mathbf{k} \quad \Rightarrow$$

$$G(t,\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^N}\mathrm{e}^{-|\mathbf{x}|^2/4Dt}\left(\int_{-\infty}^{+\infty}\mathrm{e}^{-Dt\xi^2}\,\mathrm{d}\xi\right)^N \quad \Rightarrow$$

$$G(t,\mathbf{x}) = \frac{1}{(2\pi)^N}\mathrm{e}^{-|\mathbf{x}|^2/4Dt}\left(\frac{\pi}{Dt}\right)^{N/2} \quad \Rightarrow$$

$$G(t,\mathbf{x}) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{N/2}}\exp\left[-\frac{|\mathbf{x}|^2}{4Dt}\right].$$

■

V navazující učebnici [2] se budeme podrobněji zabývat difúzí magnetického pole. Obecné vztahy (3.504) a (3.506) získáme přímým výpočtem. Greenova funkce popisuje časový vývoj počátečního Diracova impulzu. V tomto případě vede na postupně se rozplývající Gaussův balík.

3.9 Pfaffovy diferenciální formy

Určitě si vzpomínáte na pojem malého přírůstku funkce více proměnných, neboli diferenciálu (viz kapitola 3.1). Například k funkci

$$f(x,y) = x^2 + y^2 \tag{3.508}$$

je prvním diferenciálem výraz

$$\mathrm{d}f = 2x\,\mathrm{d}x + 2y\,\mathrm{d}y\,. \tag{3.509}$$

Zkusme nyní úlohu obrátit. Představme si, že napíšeme podobný výraz jako je na pravé straně rovnice (3.509) a budeme se ptát, zda existuje funkce, ke které by výraz byl prvním diferenciálem. Například

$$\mathrm{d}\omega_1 = 2x\,\mathrm{d}x + 2y\,\mathrm{d}y\,, \tag{3.510}$$

$$\mathrm{d}\omega_2 = 2y\,\mathrm{d}x + xy\,\mathrm{d}y\,. \tag{3.511}$$

K prvnímu výrazu taková funkce existuje, jde o funkci (3.508), zatímco k druhému výrazu takovou funkci nikdy nenajdeme. Obecně výrazy tohoto typu nazýváme Pfaffovy diferenciální formy a zapisujeme je ve tvaru

$$\mathrm{d}\omega = a_1(x_1,\ldots,x_N)\,\mathrm{d}x_1 + \cdots + a_N(x_1,\ldots,x_N)\,\mathrm{d}x_N \tag{3.512}$$

nebo, použijeme-li úspornější sumační konvenci, má zápis jednodušší tvar

► $$\mathrm{d}\omega = a_k(\mathbf{x})\,\mathrm{d}x_k\,. \tag{3.513}$$

Položená otázka tedy je: kdy je Pfaffova forma ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce? Odpověď je velmi zajímavá. Všechny diferenciální formy se dělí na dvě veliké skupiny. První z nich není ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce a tento typ nemá žádné „hezké“ vlastnosti. Druhý typ je ve tvaru úplného diferenciálu nějaké funkce, má mnoho velmi elegantních vlastností a velmi snadno se s ním pracuje. Proto matematici i fyzici vždy dávají přednost diferenciálním formám, které jsou ve tvaru úplného diferenciálu. Zformulujme nyní tzv. *větu o pěti ekvivalencích*:

3.9.1 Věta o pěti ekvivalencích

Nechť má diferenciální forma $\mathrm{d}\omega = a_k\mathrm{d}x_k$ koeficienty, které mají spojité derivace do druhého řádu včetně. Potom jsou následující tvrzení ekvivalentní:

1) Existuje funkce $f(x_1,\ldots,x_N)$ taková, že forma je jejím prvním diferenciálem, tj. koeficienty formy jsou parciálními derivacemi této funkce:

$$a_k = \frac{\partial f}{\partial x_k}\,. \tag{3.514}$$

2) Existuje funkce ϕ taková, že křivkový integrál mezi dvěma body je jen rozdílem koncové a počáteční hodnoty této funkce (nazýváme ji potenciálem diferenciální formy):

$$\int_A^B a_k \mathrm{d}x_k = \phi(B) - \phi(A)\,. \tag{3.515}$$

3) Křivkový integrál mezi dvěma body nezávisí na křivce (cestě integrace):

$$\int_\gamma a_k \mathrm{d}x_k \qquad \text{nezávisí na křivce } \gamma\,. \tag{3.516}$$

4) Křivkový integrál po jakékoli uzavřené křivce z diferenciální formy je nulový:

$$\oint a_k \mathrm{d}x_k = 0\,. \tag{3.517}$$

5) Koeficienty formy splňují relace:

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} = \frac{\partial a_l}{\partial x_k} \qquad \text{pro } \forall\, k,l. \tag{3.518}$$

Poznámka 1: Máme-li diferenciální formu, buď pro ni platí všechny vlastnosti vyjmenované ve větě o pěti ekvivalencích, nebo žádná z nich. Neexistuje nic mezitím. Proto se diferenciální formy dělí na dvě disjunktní skupiny.

Poznámka 2: V důkazu věty by stačilo dokázat jen jednotlivé implikace „kruhem“ $1 \Rightarrow 2 \Rightarrow \cdots \Rightarrow 5$. Tím je možné se od každého tvrzení dobrat ke kterémukoli dalšímu. Celý důkaz zde provádět nebudeme, omezíme se jen na některé části.

Poznámka 3: Páté tvrzení je vlastně návodem jak poznat „správné“ diferenciální formy, tj. formy ve tvaru úplného diferenciálu. Ověříme-li, že platí vlastnost 5), platí už i všechny vlastnosti ostatní.

Poznámka 4: Ve fyzice bychom řekli, že koeficienty a_k diferenciální formy tvoří konzervativní pole, například pole gravitační. Křivkový integrál z gravitační síly má význam vykonané mechanické práce. Ta nezávisí na cestě mezi dvěma body, po uzavřené křivce je nulová, existuje potenciální energie a vykonaná práce je rozdílem potenciální energie v koncovém a počátečním bodě. I poslední podmínka je snadno interpretovatelná. Převedeme-li oba členy na levou stranu, dostaneme

► $$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} - \frac{\partial a_l}{\partial x_k} = 0 \qquad \text{pro } \forall\, k,l\,.$$

Nejde o nic jiného, než o podmínku, že rotace pole je nulová a jde tedy z hlediska matematiky o nevírové pole.

Naznačme nyní důkaz některých implikací věty o pěti ekvivalencích:

Implikace $1 \Rightarrow 2$

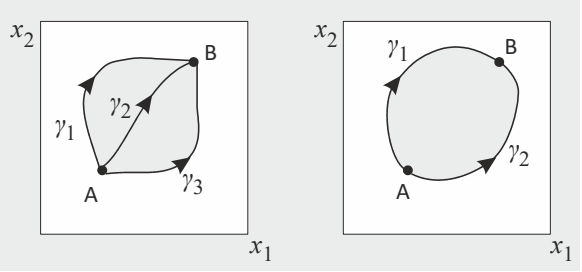
Zkusme najít ve fázovém prostoru $(x_1, \ldots, x_N)$ integrál z diferenciální formy ve tvaru úplného diferenciálu mezi dvěma body A a B:

$$\int_A^B \mathrm{d}\,\omega = \int_A^B a_k\,\mathrm{d}x_k \overset{(1)}{=} \int_A^B \frac{\partial f}{\partial x_k}\mathrm{d}x_k = \int_A^B \mathrm{d}f = f(B) - f(A)\,.$$

Je-li diferenciální forma ve tvaru úplného diferenciálu, potom jsou koeficienty dány parciálními derivacemi funkce *f* a výsledný integrál je pouze rozdílem hodnot funkce *f* v počátečním a koncovém bodě. Hledaným potenciálem diferenciální formy je tak sama funkce *f*.

Implikace 2 ⇒ 3

Záleží-li hodnota integrálu jen na koncové a počáteční hodnotě funkce *f*, nezávisí potom na integrační křivce. Je zcela lhostejné, zda integrujeme po křivce γ_1, γ_2 nebo γ_3 na obrázku 3.41.



Obr. 3.41: Integrační cesty

Implikace 3 ⇒ 4

Uzavřenou křivku v pravé části obrázku si představíme jako součet dvou jednotlivých křivek. Musíme ale dávat pozor na orientaci křivky, která mění znaménko křivkového integrálu:

$$\oint \mathrm{d}\omega = \int_{\gamma_1} \mathrm{d}\omega + \int_{-\gamma_2} \mathrm{d}\omega = \int_{\gamma_1} \mathrm{d}\omega - \int_{\gamma_2} \mathrm{d}\omega \overset{(3)}{=} 0 .$$

Implikace 1 ⇒ 5:

Důkaz je velmi jednoduchý a je založen na záměnnosti druhých derivací funkce *f*:

$$\frac{\partial a_k}{\partial x_l} \overset{(1)}{=} \frac{\partial}{\partial x_l}\left(\frac{\partial f}{\partial x_k}\right) = \frac{\partial}{\partial x_k}\left(\frac{\partial f}{\partial x_l}\right) = \frac{\partial a_l}{\partial x_k} .$$

◖ Příklad 3.48: Diferenciální forma 1

Zjistěte, zda je forma $\mathrm{d}\omega$ ve tvaru úplného diferenciálu:

$$\mathrm{d}\omega = 2xy\,\mathrm{d}x + x^2\mathrm{d}y .$$

Z vlastnosti (3.518) věty o pěti ekvivalencích nalezneme „křížové“ derivace

$$a_x = 2xy ; \qquad a_y = x^2 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial a_x}{\partial y} = 2x ; \qquad \frac{\partial a_y}{\partial x} = 2x .$$

Obě derivace jsou si rovné a diferenciální forma je proto ve tvaru úplného diferenciálu. Snadno ověříte, že jde o úplný diferenciál funkce

$$f(x,y) = x^2 y\,.$$

◗

◖ **Příklad 3.49: Diferenciální forma 2**

Zjistěte, zda je forma $\mathrm{d}\omega$ ve tvaru úplného diferenciálu:

$$\mathrm{d}\omega = \frac{x}{y}\mathrm{d}x + \mathrm{d}y\,.$$

Pro „křížové“ derivace máme:

$$a_x = \frac{x}{y}; \qquad a_y = 1 \qquad \Rightarrow \qquad \frac{\partial a_x}{\partial y} = -\frac{x}{y^2}; \qquad \frac{\partial a_y}{\partial x} = 0\,.$$

Derivace si rovny nejsou, a proto diferenciální forma není ve tvaru úplného diferenciálu a neexistuje funkce *f* taková, že by forma byla jejím prvním diferenciálem.

◗

Ne všechny diferenciální formy, které nejsou ve „správném“ tvaru je však třeba zatratit. Některé z nich lze snadno „napravit“. Formu z příkladu 3.49 lze upravit tak, že ji vynásobíme funkcí *y*:

$$\mathrm{d}\sigma = y\,\mathrm{d}\omega = y\left(\frac{x}{y}\mathrm{d}x + \mathrm{d}y\right) = x\,\mathrm{d}x + y\,\mathrm{d}y\,.$$

Nová diferenciální forma zjevně má potenciál a je diferenciálem funkce $(x^2 + y^2)/2$. Zjistíme-li, že diferenciální forma není ve tvaru úplného diferenciálu, můžeme se pokusit najít tzv. integrační faktor μ, aby nová forma

$$\mathrm{d}\sigma = \mu(x_1,\ldots,x_N)\,\mathrm{d}\omega \tag{3.519}$$

již byla ve tvaru úplného diferenciálu. To se ale bohužel ne vždy musí podařit, zejména u diferenciálních forem mnoha proměnných je hledání integračního faktoru mimořádně obtížné. Pro diferenciální formy s počtem proměnných do tří ale existuje integrační faktor vždy, jak plyne z následující věty.

3.9.2 Věta o existenci integračního faktoru

Věta: Pro $n \le 3$ existuje vždy integrační faktor Pfaffovy diferenciální formy.

Důkaz: Zkoumejme, zda je nová forma $\mathrm{d}\sigma = \mu(x_1, \ldots, x_N)\,a_k(x_1, \ldots, x_N)\,\mathrm{d}x_k$ ve tvaru úplného diferenciálu. Hledáme tedy funkci *f*, jíž je nová forma úplným diferenciálem, tj.

$$\frac{\partial f}{\partial x_k} = \mu\, a_k\,.$$

To bude možné tehdy, když si budou rovné křížové derivace koeficientů:

$$\frac{\partial \mu a_k}{\partial x_l} = \frac{\partial \mu a_l}{\partial x_k} \quad \text{pro } \forall\, k,l.$$

Z těchto rovnic je třeba určit integrační faktor. Aby byla úloha řešitelná, musí být jejich celkový počet menší než dimenze fázového prostoru N:

$$\binom{N}{2} < N \quad \Rightarrow \quad \frac{N(N-1)}{2} < N \quad \Rightarrow \quad N \le 2\,.$$

Integrační faktor pro jednu a dvě dimenze tedy existuje vždy. Ve třech dimenzích můžeme psát

$$\frac{\partial \mu a_k}{\partial x_l} = \frac{\partial \mu a_l}{\partial x_k}; \qquad k,l,m = 1,2,3 \quad \Rightarrow$$

$$\frac{\partial \mu a_k}{\partial x_l} - \frac{\partial \mu a_l}{\partial x_k} = 0 \quad \Rightarrow \quad \varepsilon_{mkl}\left(\frac{\partial \mu a_k}{\partial x_l}\right) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$a_m \varepsilon_{mkl}\left(\frac{\partial \mu a_k}{\partial x_l}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad a_m a_k \varepsilon_{mkl}\left(\frac{\partial \mu}{\partial x_l}\right) + \mu a_m \varepsilon_{mkl}\left(\frac{\partial a_k}{\partial x_l}\right) = 0\,.$$

První čeln je automaticky nulový (zúžení symetrického a antisymetrického výrazu v indexech m, k. Druhý člen dá podmínku

$$a_m \varepsilon_{mkl}\left(\frac{\partial a_k}{\partial x_l}\right) = 0 \quad \Rightarrow \quad \mathbf{a} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{a} = 0\,.$$

Pro diferenciální formy ve třech dimenzích je nutnou podmínkou existence integračního faktoru relace $\mathbf{a}\cdot\operatorname{rot}\mathbf{a} = 0$ (helicita pole tvořeného koeficienty diferenciální formy je nulová, tj. pole nemá strukturu šroubovice). U více než tří proměnných nemáme obecně existenci integračního faktoru žádným způsobem zaručenu. Existují i sofistikovanější věty, které za určitých podmínek umožňují existenci integračního faktoru ve více dimenzích (například Caratheodóryho princip), ale ty jdou nad rámec této učebnice.

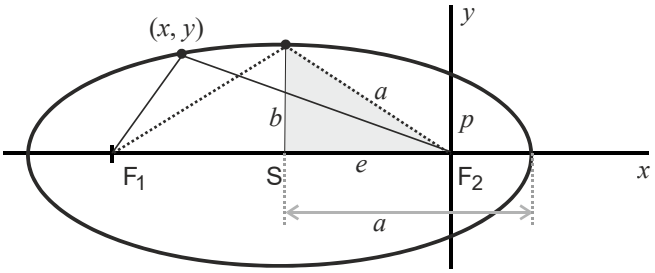
■

3.10 Důležité vztahy

3.10.1 Kuželosečky

Elipsa

Elipsa je množina bodů v rovině, které mají stejný součet vzdáleností od dvou pevně zvolených bodů, tzv. ohnisek.



Obr. 3.42: Elipsa

V kartézské souřadnicové soustavě má rovnice elipsy tvar (osa y vede jedním z ohnisek)

► $$\left(\frac{x+e}{a}\right)^2+\left(\frac{y}{b}\right)^2=1\,. \tag{3.520}$$

Veličina e se nazývá excentricita, a je velká poloosa, b je malá poloosa. Mezi těmito parametry existuje jednoduchý vztah (viz obrázek)

► $$a^2=e^2+b^2\,. \tag{3.521}$$

Přepišme tuto rovnici do polárních souřadnic

$$x=r\cos\varphi\,;\qquad y=r\sin\varphi\,. \tag{3.522}$$

Po dosazení (3.522) do (3.520) získáme kvadratickou rovnici pro r, která má řešení

$$r=\frac{-b^2e\cos\varphi\pm b^2\sqrt{e^2\cos^2\varphi+b^2\cos^2\varphi+a^2\sin^2\varphi}}{b^2\cos^2\varphi+a^2\sin^2\varphi}\,.$$

Řešení s minus je nepřijatelné, neboť by vedlo na zápornou hodnotu radiální vzdálenosti. Ze vztahu vyloučíme malou poloosu b za pomoci vztahu (3.521):

$$r=\frac{-(a^2-e^2)e\cos\varphi+(a^2-e^2)a}{a^2-e^2\cos^2\varphi}=\frac{(a^2-e^2)(a-e\cos\varphi)}{(a-e\cos\varphi)(a+e\cos\varphi)}=$$

$$=\frac{a^2-e^2}{a+e\cos\varphi}=\frac{a[1-(e/a)^2]}{1+(e/a)\cos\varphi}\,.$$

Výsledná rovnice elipsy tedy je

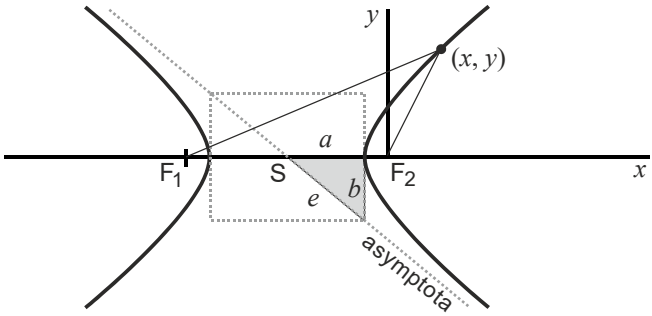
$$r = \frac{p}{1+\varepsilon\cos\varphi}; \qquad \varepsilon \equiv e/a = \sqrt{1-(b/a)^2}\,; \qquad p \equiv a\left(1-\varepsilon^2\right). \tag{3.523}$$

Pro elipsu je $\varepsilon < 1$, $p > 0$. Veličina ε se nazývá numerická excentricita a jde o bezrozměrný parametr charakterizující protáhlost elipsy. Obsah elipsy získáme přeškálováním souřadnicových os tak, aby poloosy byly stejně veliké a elipsa se stala kružnicí:

$$S = \pi ab\,. \tag{3.524}$$

Hyperbola

Hyperbola je množina bodů v rovině, které mají stejný rozdíl vzdáleností od dvou pevně zvolených bodů, tzv. ohnisek.



Obr. 3.43: Hyperbola

V kartézské souřadnicové soustavě má rovnice hyperboly tvar (osa y vede jedním z ohnisek hyperboly)

$$\left(\frac{x+e}{a}\right)^2 - \left(\frac{y}{b}\right)^2 = 1\,. \tag{3.525}$$

Veličina e se nazývá excentricita, a je velká poloosa, b je malá poloosa. Mezi těmito parametry existuje jednoduchý vztah (viz obrázek)

$$a^2 + b^2 = e^2\,. \tag{3.526}$$

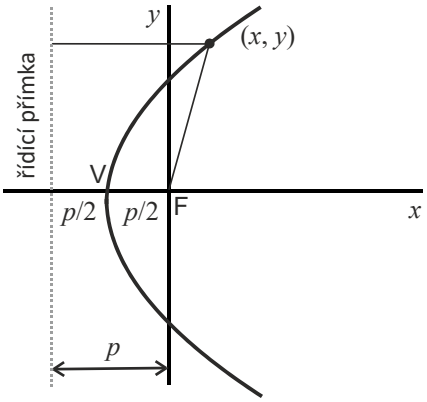
Postupem zcela analogickým jako u elipsy odvodíme rovnici hyperboly v polárních souřadnicích. Výsledná rovnice hyperboly je

$$r = \frac{p}{1+\varepsilon\cos\varphi}; \qquad \varepsilon \equiv e/a = \sqrt{1+(b/a)^2}\,; \qquad p \equiv a\left(1-\varepsilon^2\right). \tag{3.527}$$

Pro hyperbolu je $\varepsilon > 1$, $p < 0$. Veličina ε se nazývá numerická excentricita a jde o bezrozměrný parametr charakterizující tvar hyperboly. Pokud budeme požadovat, aby platilo $p > 0$, tj. zavedeme $p = |a(1–\varepsilon^2)|$, bude ve jmenovateli namísto +1 hodnota –1.

Parabola

Parabola je množina všech bodů v rovině, které mají stejnou vzdálenost od ohniska a od řídící přímky.



Obr. 3.44: Parabola

V kartézské souřadnicové soustavě má rovnice paraboly tvar (osa y vede ohniskem)

► $$y^2 = 2p\left(x + \frac{p}{2}\right). \tag{3.528}$$

Postupem analogickým jako u elipsy a hyperboly odvodíme rovnici paraboly v polárních souřadnicích. Výsledná rovnice paraboly je

► $$r = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos\varphi}; \qquad \varepsilon = \pm 1. \tag{3.529}$$

Znaménko „+“ platí pro parabolu symetrickou kolem svislé osy y, znaménko „–„ pro parabolu symetrickou kolem vodorovné osy x. Rovnice všech kuželoseček mají tedy stejný tvar:

► $$r = \frac{p}{1 + \varepsilon \cos\varphi}; \qquad \begin{cases} |\varepsilon| < 1 & \text{elipsa,} \\ |\varepsilon| > 1 & \text{hyperbola,} \\ |\varepsilon| = 1 & \text{parabola.} \end{cases} \tag{3.530}$$

3.10.2 Trigonometrie

Jednoduché definice

$$\operatorname{tg} x = \frac{\sin x}{\cos x}, \tag{3.531}$$

$$\operatorname{ctg} x = \frac{\cos x}{\sin x}, \tag{3.532}$$

$$\operatorname{cosec} x = \frac{1}{\sin x}, \tag{3.533}$$

$$\sec x = \frac{1}{\cos x}, \tag{3.534}$$

$$\operatorname{ch} x = \frac{\exp(x) + \exp(-x)}{2}, \tag{3.535}$$

$$\operatorname{sh} x = \frac{\exp(x) - \exp(-x)}{2}. \tag{3.536}$$

$$\cos x = \frac{\exp(\mathrm{i}\,x) + \exp(-\mathrm{i}\,x)}{2}, \tag{3.537}$$

$$\sin x = \frac{\exp(\mathrm{i}\,x) - \exp(-\mathrm{i}\,x)}{2\,\mathrm{i}}. \tag{3.538}$$

Součtové vzorce

$$\sin(x \pm y) = \sin x \cos y \pm \cos x \sin y, \tag{3.539}$$

$$\cos(x \pm y) = \cos x \cos y \mp \sin x \sin y, \tag{3.540}$$

$$\operatorname{tg}(x \pm y) = \frac{\operatorname{tg} x \pm \operatorname{tg} y}{1 \mp \operatorname{tg} x \operatorname{tg} y}, \tag{3.541}$$

$$\operatorname{ctg}(x \pm y) = \frac{\pm \operatorname{ctg} x \operatorname{ctg} y - 1}{\operatorname{ctg} x \mp \operatorname{ctg} y}, \tag{3.542}$$

$$\sin x + \sin y = 2 \sin \tfrac{x+y}{2} \cos \tfrac{x-y}{2}, \tag{3.543}$$

$$\sin x - \sin y = 2 \cos \tfrac{x+y}{2} \sin \tfrac{x-y}{2}, \tag{3.544}$$

$$\cos x + \cos y = 2 \cos \tfrac{x+y}{2} \cos \tfrac{x-y}{2}, \tag{3.545}$$

$$\cos x - \cos y = -2 \sin \tfrac{x+y}{2} \sin \tfrac{x-y}{2}. \tag{3.546}$$

Dvojnásobný úhel

$$\sin 2x = 2 \sin x \cos x, \tag{3.547}$$

$$\cos 2x = \cos^2 x - \sin^2 x, \tag{3.548}$$

$$\operatorname{tg} 2x = \frac{2 \operatorname{tg} x}{1 - \operatorname{tg}^2 x}, \tag{3.549}$$

$$\operatorname{ctg} 2x = \frac{\operatorname{ctg}^2 x - 1}{2 \operatorname{ctg} x}. \tag{3.550}$$

Poloviční úhel

$$\sin\frac{x}{2}=\pm\sqrt{\frac{1-\cos x}{2}}\,, \tag{3.551}$$

$$\cos\frac{x}{2}=\pm\sqrt{\frac{1+\cos x}{2}}\,, \tag{3.552}$$

(znaménko se určí dle kvadrantu)

$$\operatorname{tg}\frac{x}{2}=\frac{1-\cos x}{\sin x}=\frac{\sin x}{1+\cos x}\,, \tag{3.553}$$

$$\operatorname{ctg}\frac{x}{2}=\frac{\sin x}{1-\cos x}=\frac{1+\cos x}{\sin x}\,, \tag{3.554}$$

Druhé mocniny

$$\cos^2 x+\sin^2 x=1\,, \tag{3.555}$$

$$\cos^2 x-\sin^2 x=\cos 2x\,, \tag{3.556}$$

$$\operatorname{ch}^2 x-\operatorname{sh}^2 x=1\,, \tag{3.557}$$

$$\cos^2 x=\frac{1}{1+\operatorname{tg}^2 x}\,, \tag{3.558}$$

$$\sin^2 x=\frac{1}{1+\operatorname{ctg}^2 x}\,, \tag{3.559}$$

$$\cos^2 x=\frac{1+\cos 2x}{2}\,, \tag{3.560}$$

$$\sin^2 x=\frac{1-\cos 2x}{2}\,. \tag{3.561}$$

Převod na tg(x/2) a cotg(x/2)

$$\sin x=\frac{2\operatorname{tg}(x/2)}{1+\operatorname{tg}^2(x/2)}=\frac{2\operatorname{ctg}(x/2)}{1+\operatorname{ctg}^2(x/2)}\,, \tag{3.562}$$

$$\cos x=\frac{1-\operatorname{tg}^2(x/2)}{1+\operatorname{tg}^2(x/2)}=\frac{\operatorname{ctg}^2(x/2)-1}{\operatorname{ctg}^2(x/2)+1}\,. \tag{3.563}$$

Posuny o $\pi/2$

$$\sin\left(x-\tfrac{\pi}{2}\right)=-\cos x\,, \tag{3.564}$$

$$\cos\left(x-\tfrac{\pi}{2}\right)=\sin x\,, \tag{3.565}$$

$$\operatorname{tg}\left(x-\tfrac{\pi}{2}\right)=-\operatorname{ctg}x\,, \tag{3.566}$$

$$\operatorname{ctg}\left(x-\tfrac{\pi}{2}\right)=-\operatorname{tg}x\,. \tag{3.567}$$

3.10.3 Operátory v křivočarých souřadnicích

V následujících tabulkách je k daným souřadnicím vždy uveden gradient, divergence, rotace a skalární a vektorový Laplaceův operátor. Působení Laplaceova operátoru na vektorové pole lze také určit z vektorové identity $\nabla^2\mathbf{K}=\nabla(\nabla\cdot\mathbf{K})-\nabla\times(\nabla\times\mathbf{K})$.

Kartézské souřadnice

$$\nabla f=\frac{\partial f}{\partial x}\mathbf{e}_x+\frac{\partial f}{\partial y}\mathbf{e}_y+\frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{e}_z\,, \tag{3.568}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{K}=\frac{\partial K_x}{\partial x}+\frac{\partial K_y}{\partial y}+\frac{\partial K_z}{\partial z}\,, \tag{3.569}$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{K}=\left(\frac{\partial K_z}{\partial y}-\frac{\partial K_y}{\partial z}\right)\mathbf{e}_x+\left(\frac{\partial K_x}{\partial z}-\frac{\partial K_z}{\partial x}\right)\mathbf{e}_y+\left(\frac{\partial K_y}{\partial x}-\frac{\partial K_x}{\partial y}\right)\mathbf{e}_z\,, \tag{3.560}$$

$$\nabla^2 f=\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\,, \tag{3.561}$$

$$\begin{aligned}\nabla^2\mathbf{K}=&\left(\frac{\partial^2 K_x}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 K_x}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 K_x}{\partial z^2}\right)\mathbf{e}_x+\left(\frac{\partial^2 K_y}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 K_y}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 K_y}{\partial z^2}\right)\mathbf{e}_y+\\&+\left(\frac{\partial^2 K_z}{\partial x^2}+\frac{\partial^2 K_z}{\partial y^2}+\frac{\partial^2 K_z}{\partial z^2}\right)\mathbf{e}_z\,.\end{aligned} \tag{3.562}$$

Válcové souřadnice

$$\nabla f=\frac{\partial f}{\partial r}\mathbf{e}_r+\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial\varphi}\mathbf{e}_\varphi+\frac{\partial f}{\partial z}\mathbf{e}_z\,, \tag{3.563}$$

$$\operatorname{div}\mathbf{K}=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rK_r)+\frac{1}{r}\frac{\partial K_\varphi}{\partial\varphi}+\frac{\partial K_z}{\partial z}\,, \tag{3.564}$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{K}=\left(\frac{1}{r}\frac{\partial K_z}{\partial\varphi}-\frac{\partial K_\varphi}{\partial z}\right)\mathbf{e}_r+\left(\frac{\partial K_r}{\partial z}-\frac{\partial K_z}{\partial r}\right)\mathbf{e}_\varphi+\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rK_\varphi)-\frac{1}{r}\frac{\partial K_r}{\partial\varphi}\right)\mathbf{e}_z\,, \tag{3.565}$$

$$\nabla^2 f=\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}\left(r\frac{\partial f}{\partial r}\right)+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}\,, \tag{3.566}$$

$$\nabla^2\mathbf{K}=\left(\frac{\partial^2 K_r}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 K_r}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 K_r}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial K_r}{\partial r}-\frac{2}{r^2}\frac{\partial K_\varphi}{\partial\varphi}-\frac{K_r}{r^2}\right)\mathbf{e}_r+$$
$$+\left(\frac{\partial^2 K_\varphi}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 K_\varphi}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 K_\varphi}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial K_\varphi}{\partial r}+\frac{2}{r^2}\frac{\partial K_r}{\partial\varphi}-\frac{K_\varphi}{r^2}\right)\mathbf{e}_\varphi+ \qquad (3.567)$$
$$+\left(\frac{\partial^2 K_z}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 K_z}{\partial\varphi^2}+\frac{\partial^2 K_z}{\partial z^2}+\frac{1}{r}\frac{\partial K_z}{\partial r}\right)\mathbf{e}_z\,.$$

Sférické souřadnice

$$\nabla f=\frac{\partial f}{\partial r}\mathbf{e}_r\;+\;\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial f}{\partial\varphi}\mathbf{e}_\varphi\;+\;\frac{1}{r}\frac{\partial f}{\partial\theta}\mathbf{e}_\theta\,, \qquad (3.568)$$

$$\operatorname{div}\mathbf{K}=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2K_r\right)\;+\;\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial K_\varphi}{\partial\varphi}\;+\;\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\,K_\theta\right), \qquad (3.569)$$

$$\operatorname{rot}\mathbf{K}=\left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}(\sin\theta\,K_\varphi)-\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial K_\theta}{\partial\varphi}\right)\mathbf{e}_r+$$
$$+\left(\frac{1}{r\sin\theta}\frac{\partial K_r}{\partial\varphi}-\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rK_\varphi)\right)\mathbf{e}_\theta+\left(\frac{1}{r}\frac{\partial}{\partial r}(rK_\theta)-\frac{1}{r}\frac{\partial K_r}{\partial\theta}\right)\mathbf{e}_\varphi\,, \qquad (3.570)$$

$$\nabla^2 f=\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial f}{\partial r}\right)\;+\;\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}\;+\;\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right), \qquad (3.571)$$

$$\nabla^2 f=\frac{1}{r}\frac{\partial^2}{\partial r^2}(rf)\;+\;\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}\;+\;\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial f}{\partial\theta}\right), \qquad (3.571')$$

$$\nabla^2\mathbf{K}=\left(\begin{array}{c}\frac{1}{r}\frac{\partial^2(rK_r)}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 K_r}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 K_r}{\partial\varphi^2}+\frac{\cot\theta}{r^2}\frac{\partial K_r}{\partial\theta}-\\ -\frac{2}{r^2}\frac{\partial K_\theta}{\partial\theta}-\frac{2}{r^2\sin\theta}\frac{\partial K_\varphi}{\partial\varphi}-\frac{2K_r}{r^2}-\frac{2\cot\theta}{r^2}K_\theta\end{array}\right)\mathbf{e}_r+$$
$$+\left(\begin{array}{c}\frac{1}{r}\frac{\partial^2(rK_\theta)}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 K_\theta}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 K_\theta}{\partial\varphi^2}+\frac{\cot\theta}{r^2}\frac{\partial K_\theta}{\partial\theta}-\\ -\frac{2}{r^2}\frac{\cot\theta}{\sin\theta}\frac{\partial K_\varphi}{\partial\varphi}+\frac{2}{r^2}\frac{\partial K_r}{\partial\theta}-\frac{K_\theta}{r^2\sin^2\theta}\end{array}\right)\mathbf{e}_\theta+ \qquad (3.572)$$
$$+\left(\begin{array}{c}\frac{1}{r}\frac{\partial^2(rK_\varphi)}{\partial r^2}+\frac{1}{r^2}\frac{\partial^2 K_\varphi}{\partial\theta^2}+\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2 K_\varphi}{\partial\varphi^2}+\frac{\cot\theta}{r^2}\frac{\partial K_\varphi}{\partial\theta}-\\ +\frac{2}{r^2\sin\theta}\frac{\partial K_r}{\partial\varphi}+\frac{2}{r^2}\frac{\cot\theta}{\sin\theta}\frac{\partial K_\theta}{\partial\varphi}-\frac{K_\varphi}{r^2\sin^2\theta}\end{array}\right)\mathbf{e}_\varphi\,.$$

3.10.4 Některé integrály a řady

Ve vztazích je označeno $n!=n(n-1)\ldots1$; $n!!=n(n-2)(n-4)\ldots1$.

$$\int_0^\infty x^n\,\mathrm{e}^{-ax}\,\mathrm{d}x=\frac{n!}{a^{n+1}};\quad a>0;\quad n=1,2,\ldots \tag{3.573}$$

$$\int_0^\infty x^{2n}\,\mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\frac{(2n-1)!!\sqrt{\pi}}{2^{n+1}a^{(2n+1)/2}};\quad a>0;\quad n=1,2,\ldots \tag{3.574}$$

$$\int_0^\infty x^{2n+1}\,\mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\frac{n!}{2a^{n+1}};\quad a>0;\quad n=0,1,2,\ldots \tag{3.575}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi}{a}};\qquad a>0\qquad\text{(Gaussův integrál)} \tag{3.576}$$

$$\int_0^\infty \mathrm{e}^{-ax^2}\,\mathrm{d}x=\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\pi}{a}};\qquad a>0 \tag{3.577}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-ax^2+bx}\,\mathrm{d}x=\sqrt{\frac{\pi}{a}}\;\mathrm{e}^{-b^2/4a};\qquad a>0 \tag{3.578}$$

$$\int\frac{1}{\sqrt{a^2-x^2}}\,\mathrm{d}x=-\arccos\left(\frac{x}{a}\right) \tag{3.579}$$

$$\int\frac{1}{\sqrt{a^2+x^2}}\,\mathrm{d}x=\operatorname{ash}\left(\frac{x}{a}\right) \tag{3.580}$$

$$\int\frac{x}{\sqrt{a^2+x^2}}\,\mathrm{d}x=\sqrt{a^2+x^2} \tag{3.581}$$

$$\int_0^\infty\frac{x^3}{\mathrm{e}^x+1}\,\mathrm{d}x\cong5,6822; \tag{3.582}$$

$$\int_0^\infty\frac{x^3}{\mathrm{e}^x-1}\,\mathrm{d}x\cong\frac{\pi^4}{15}; \tag{3.583}$$

$$\sum_{n=0}^{\infty}q^n=\frac{1}{1-q};\quad|q|<1\quad\text{(součet geometrické řady)} \tag{3.584}$$

$$V_{2N}=\pi^N R^{2N}/N!\qquad\text{(objem koule v sudém počtu dimenzí)} \tag{3.585}$$

Výpočet Gaussova integrálu

Gaussův integrál lze snadno určit za pomoci jednoduchého triku, při kterém tento integrál převedeme na integrál přes nekonečnou rovinu v polárních souřadnicích. Jednotlivé kroky jsou přímočaré, proto je nebudeme komentovat:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x\right)} =$$

$$= \sqrt{\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x\right)\left(\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha y^2}\,\mathrm{d}y\right)} = \sqrt{\iint_{\mathcal{R}\times\mathcal{R}} \mathrm{e}^{-\alpha(x^2+y^2)}\,\mathrm{d}x\,\mathrm{d}y} =$$

$$= \sqrt{\int_0^{\infty}\int_0^{2\pi} \mathrm{e}^{-\alpha r^2}\, r\,\mathrm{d}\varphi\,\mathrm{d}r} = \sqrt{2\pi\int_0^{\infty} \mathrm{e}^{-\alpha r^2}\, r\,\mathrm{d}r}$$

Poslední integrál snadno vypočteme za pomoci substituce $\xi = \alpha r^2$, výsledek je

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{e}^{-\alpha x^2}\,\mathrm{d}x = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}}\,. \tag{3.586}$$

Výsledek snadno upravíme na integraci (3.577) pouze od nuly do nekonečna. Opakovaným derivováním vztahu (3.577) podle parametru a získáme vztahy (3.574) pro sudé mocniny. U lichých mocnin je postup stejný. Snadno vypočteme integrál (3.575) pro $n = 0$. Vyšší mocniny získáme opět derivováním podle parametru a.

Výpočet integrálu ve Stefanově-Boltzmannově zákoně

Hledaný integrál nejprve upravíme do tvaru:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \int_0^{\infty} x^3\,\mathrm{e}^{-x}\left(\frac{1}{1-\mathrm{e}^{-x}}\right)\mathrm{d}x\,.$$

Výraz v kulaté závorce lze interpretovat jako součet geometrické řady s kvocientem $q = \mathrm{e}^{-x}$, tj.

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \int_0^{\infty}\left(x^3\,\mathrm{e}^{-x}\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-nx}\right)\mathrm{d}x = \int_0^{\infty}\left(x^3\sum_{n=0}^{\infty}\mathrm{e}^{-(n+1)x}\right)\mathrm{d}x =$$

$$= \int_0^{\infty}\left(x^3\sum_{n=1}^{\infty}\mathrm{e}^{-nx}\right)\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty}\int_0^{\infty} x^3\,\mathrm{e}^{-nx}\,\mathrm{d}x\,.$$

Poslední integrál je snadno řešitelný. Třikrát po sobě provedeme integraci per partes, čímž budeme postupně snižovat mocninu x, a nakonec provedeme jednoduchou integraci exponenciály. Výsledek je

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1}\,\mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty}\frac{6}{n^4}\,. \tag{3.587}$$

Zbývá určit součet Riemannovy řady na pravé straně rovnosti. Nejprve určíme součet jednodušší řady s druhými mocninami, teprve poté řady se čtvrtými mocninami. Nalezneme tedy postupně součty

$$S_2 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2}; \qquad S_4 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^4}. \tag{3.588}$$

Oba součty snadno určíme z Fourierových řad funkcí x^2 a x^4 na intervalu $<-\pi, +\pi>$:

$$\begin{aligned} x^2 &= \frac{\pi^2}{3} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \frac{4}{n^2} \cos(nx); \\ x^4 &= \frac{\pi^4}{5} + \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{8\pi^2}{n^2} - \frac{48}{n^4} \right) \cos(nx). \end{aligned} \tag{3.589}$$

Po dosazení za $x = \pi$ dostaneme z prvního rozvoje hodnotu S_2 a z druhého hodnotu S_4 (při výpočtu budeme potřebovat hodnotu S_2):

$$S_2 = \frac{\pi^2}{6}; \qquad S_4 = \frac{\pi^4}{90}. \tag{3.590}$$

Pro hledaný integrál tedy platí:

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1} \, \mathrm{d}x = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{6}{n^4} = 6 S_4 = 6 \frac{\pi^4}{90} = \frac{\pi^4}{15}.$$

Výsledkem integrace je

$$\int_0^{\infty} \frac{x^3}{\mathrm{e}^x - 1} \, \mathrm{d}x = \frac{\pi^4}{15}. \tag{3.591}$$

3.10.5 Rozvoje některých funkcí

$$\exp x \equiv 1 + x + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^5}{5!} + \cdots \tag{3.592}$$

$$\mathrm{ch}\, x \equiv 1 + \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} + \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} + \cdots \tag{3.593}$$

$$\cos x \equiv 1 - \frac{x^2}{2!} + \frac{x^4}{4!} - \frac{x^6}{6!} + \frac{x^8}{8!} \pm \cdots \tag{3.594}$$

$$\mathrm{sh}\, x \equiv x + \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} + \frac{x^7}{7!} + \frac{x^9}{9!} \pm \cdots \tag{3.595}$$

$$\sin x \equiv x - \frac{x^3}{3!} + \frac{x^5}{5!} - \frac{x^7}{7!} - \frac{x^9}{9!} \pm \cdots \tag{3.596}$$

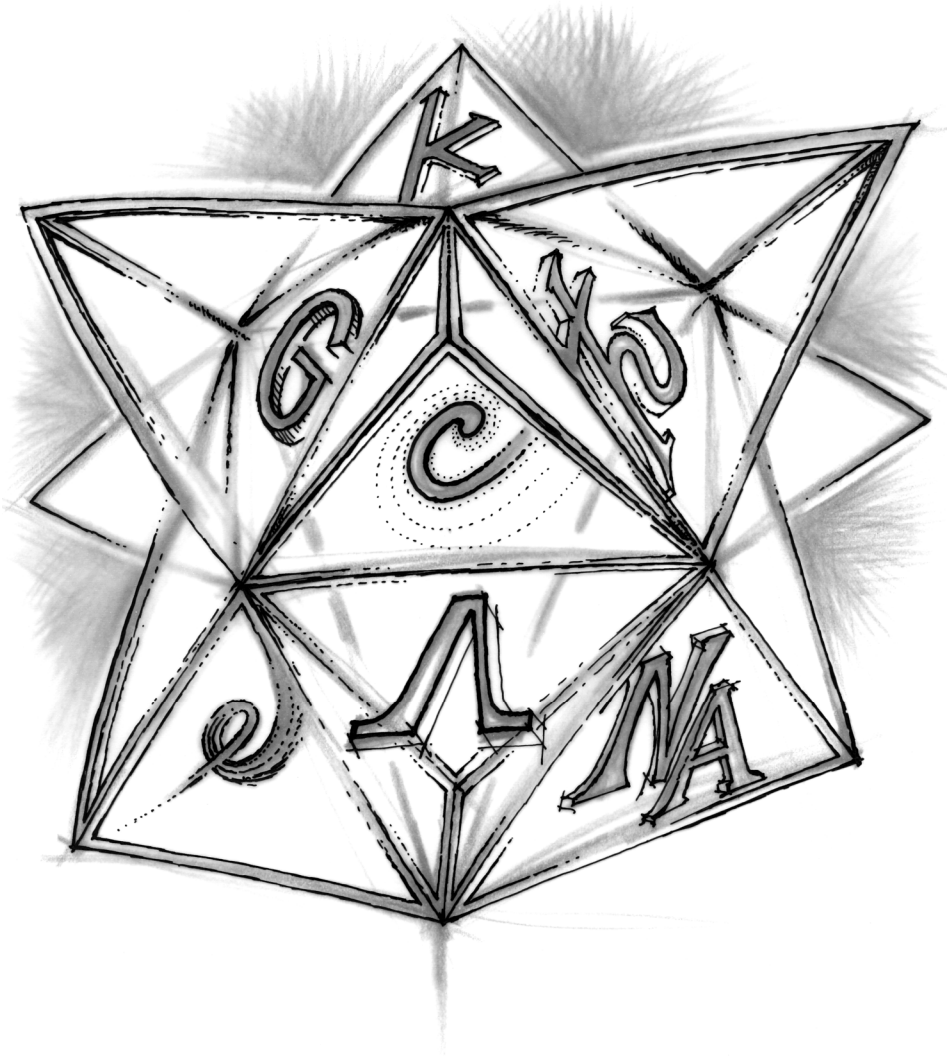
$$\frac{1}{1-x} = 1 + x + x^2 + x^3 + \cdots \quad \text{(geometrická řada, } x < 1\text{)} \tag{3.597}$$

$$\ln(1+x) = x - \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{3} \mp \cdots \tag{3.598}$$

$$\sqrt{1+x} = 1 + \frac{x}{2} - \frac{x^2}{8} + \frac{x^3}{16} - \frac{5x^4}{128} + \frac{7x^5}{256} - \cdots \tag{3.599}$$

$$\frac{1}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{\min^l(r,r')}{\max^{l+1}(r,r')} P_l(\cos\theta)\,; \quad P_l \text{ je Legendreův polynom} \tag{3.560}$$

Seznam symbolů



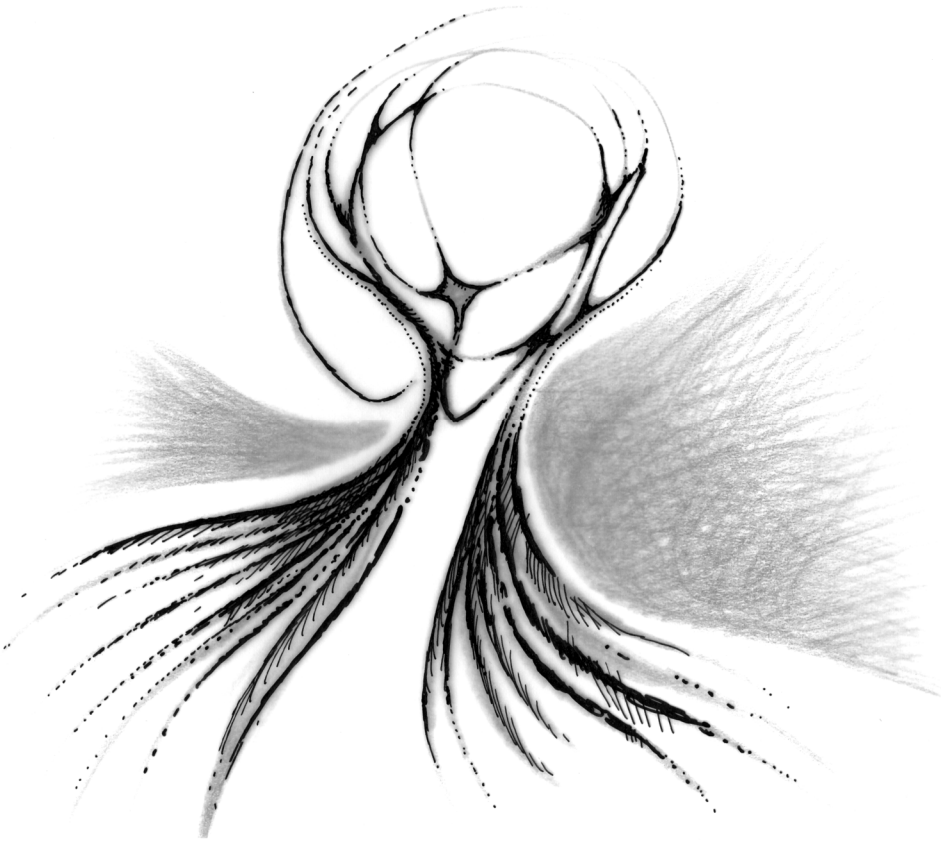
$\hat{\mathbf{1}}$	jednotková matice
a	velká poloosa elipsy
ash	argument sinu hyperbolického
atg	arkustangenta
ath	argument tangenty hyperbolické
$\mathbf{a}_k$	vektory krystalové mříže
$\hat{\mathbf{a}}$	anihilační operátor
$\hat{\mathbf{a}}^\dagger$	kreační operátor
A	amplituda, dynamická proměnná, mechanická práce
A^μ	čtyřpotenciál pole
$\mathbf{A}$	vektorový potenciál, vektor posunutí
$\mathbf{A}$	matice koeficientů, matice stability
$\hat{\mathbf{A}}$	operátor k dyn. prom. A
$\mathcal{A}$	atraktor
$\mathscr{A}$	amplituda pravděpodobnosti
Ai	Airiho funkce Ai
$\mathbf{b}$	vektor momentu hybnosti
$\mathbf{b}_k$	vektory reciproké mříže
b	malá poloosa elipsy, moment hybnosti,
$\hat{\mathbf{b}}$	anihilační operátor
$\hat{\mathbf{b}}^\dagger$	kreační operátor
$\mathbf{B}$	magnetická indukce
Bi	Airiho funkce Bi
c	rychlost, rychlost světla
ch	kosinus hyperbolický
cos	kosinus
cosec	kosekans
ctg	kotangenta
c_{kl}^m	strukturní koeficienty Lieovy algebry
$\hat{\mathbf{c}}$	projekce anihil. operátoru
$\hat{\mathbf{c}}^\dagger$	projekce kreač. operátoru
$\mathscr{C}$	kapacita
C	cirkulace pole, limitní cyklus, komplexní čísla
C^3	prostor komplexních trojic
C^N	prostor komplexních N-tic
det	determinant
div	divergence
$\mathrm{d}\mu$	element míry
$\mathrm{d}\omega$	diferenciální forma
D	koeficient difúze
$\mathbf{D}$	indukce elektrického pole
$\hat{\mathbf{D}}$	operátor derivace
$\mathcal{D}$	hustě pokrytá množina
e	Eulerovo číslo
e	elementární náboj, excentricita
$\mathbf{e}_k$	jednotkový vektor
exp	exponenciála
E, $\mathscr{E}$	energie
$\mathbf{E}$	elektrická intenzita
f	frekvence, funkce, počet stupňů volnosti
F, $\mathbf{F}$	síla
F_k	složky síly
$\mathscr{F}$	Fourieriva transformace
$F^{\mu\nu}$	tenzor elektromagnetického pole
$\boldsymbol{g}$	tíhové zrychlení
g	velikost tíhového zrychlení, stupeň degenerace
$g^{\mu\nu}$	metrický tenzor
G	aproximace Chandrasekharovy funkce, gravitační konstanta, Greenova funkce, integrální helicita
$\mathbf{G}$	vektor posunutí v k-prostoru
h	Planckova konstanta, přírůstek, útlum v bariéře
$\hbar$	redukovaná Planckova konstanta
$\mathbf{H}$	intenzita magnetického pole
H	Hamiltonova funkce, výška
H_n	Hermitův polynom
$\mathscr{H}$	hustota energie
$\mathcal{H}$	Hilbertův prostor
$\mathcal{H}$	hustota helicity
$\hat{\mathbf{H}}$	Hamiltonův operátor

I elektrický proud, intenzita, izospin, moment setrvačnosti
$\mathbb{I}$ jednotková matice
I_m modifikovaná Besselova funkce prvního druhu
Im imaginární část
I_3 projekce izospinu
$\mathbf{j}_Q$ proudová hustota, tok náboje
j^μ čtyřtok
J adiabatický invariant, vazbová konstanta
J_m Besselova funkce prvního druhu
$\mathcal{J}$ invariantní množina
k rychlost reakce, tuhost oscilací, velikost vlnového vektoru
$\mathbf{k}$ vlnový vektor
k^μ vlnový čtyřvektor
K integrační konstanta
$\mathcal{K}$ mezikruží
K_m modifikovaná Besselova funkce druhého druhu
l vedlejší kvantové číslo, vzdálenost
ln přirozený logaritmus
ℓ^2 prostor posloupností
L Lagrangeova funkce, moment hybnosti, šířka bariéry, vzdálenost
$\mathbf{L}$ vektor momentu hybnosti
$\hat{\mathbf{L}}$ operátor momentu hybnosti
$\mathcal{L}^2$ prostor funkcí
L_k Lagrangeovy body
$\mathscr{L}$ hustota Lagrangeovy funkce, indukčnost, Laplaceův obraz
m hmotnost, magnetické kvantové číslo
m_S magnetické spinové číslo
$\mathbf{M}$ vektor magnetizace
M hmotnost, magnetizace
$\mathbb{M}$ generátor rotací
$\mathcal{M}_O$ otevřená množina
$\mathcal{M}_U$ uzavřená množina
n koncentrace, hlavní kvantové číslo
$\mathbf{n}$ normálový vektor
N počet částic, počet parametrů
$\hat{N}$ operátor počtu částic
$\hat{\mathcal{N}}$ operátor hustoty částic
$\mathbf{p}$ vektor hybnosti
p hybnost, parametr kuželosečky, tlak
$\mathbf{p}_E$ elektrický dipólový moment
$\mathbf{p}_M$ magnetický dipólový moment
p^μ čtyřhybnost
$\mathbf{P}$ vektor polarizace
P hybnost, polarizace, polarizace fotonu, pravděpodobnost
P_l Legendreův polynom
P_{lm} Legendreův přidružený polynom
$\mathscr{P}$ hustota hybnosti pole
$\hat{\mathbf{P}}$ projekční operátor, operátor výměny částic
$\mathbf{q}$, q_k zobecněné souřadnice
Q náboj, teplo, zobecněná souřadnice
r radiální vzdálenost, poloměr
$\mathbf{r}$ polohový vektor
rot rotace
R koeficient odrazu, počet vazeb, Rayleighova funkce
$\mathscr{R}$ elektrický odpor
$\mathcal{R}$ reálná čísla
$\mathcal{R}^3$ prostor reálných trojic
$\mathcal{R}^N$ prostor reálných N-tic
R_L Larmorův poloměr
$\mathbb{R}$ rotační matice
$\mathbb{R}_{inf}$ matice infinitezimální rotace

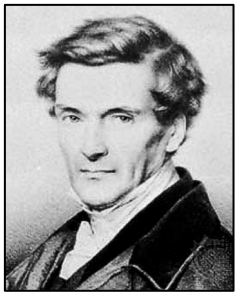
Re reálná část
Rez reziduum funkce
s spin, vzdálenost
$\mathbf{s}$ směrový vektor
sec sekans
sh sinus hyperbolický
sin sinus
S akce, matice rozptylu, podivnost, transformační matice
S. skalární část kvaternionu
$\hat{\mathbf{S}}$ operátor spinu
$\mathbf{S}$, S plocha
S podivný atraktor
$\mathscr{S}$ Schwartzův (Sobolevův) prostor
S_{kl} matice přechodu
t čas
T absolutní teplota, kinetická energie, koeficient propustnosti, perioda, teplota
$\hat{\mathbf{T}}$ operátor kinetické energie
$\hat{T}_g$ temperovaná distribuce
$T^{\mu\nu}$ tenzor energie a hybnosti
u rapidita, hustota vnitřní energie
$\mathbf{u}$ rychlostní pole
U transformační matice, vnitřní energie
U_ε okolí bodu
$\hat{\mathbf{U}}$ operátor časového vývoje
$\mathbf{v}$, v rychlost
V mixážní matice, objem, potenciální energie
V. vektorová část kvaternionu
V.P. Value Principal (hlavní hodnota integrálu)
$\mathscr{V}$ hustota potenciální energie, vytvořující funkce
$\mathcal{V}$ lineární vektorový prostor
$\hat{\mathbf{V}}$ operátor potenciální energie
$\hat{\mathscr{V}}$ operátor viriálu
w pravděpodobnost
W energie
x_k souřadnice
$\mathbf{x}$ polohový vektor
x^μ událost
$\mathcal{X}$ chaotická množina
y souřadnice
Y hypernáboj
Y_m Besselova funkce druhého druhu
Y_{lm} kulová funkce
z komplexní proměnná, souřadnice
Z stupeň ionizace
α koeficient, konstanta, úhel
α^k Diracovy matice
β konstanta, relativistický koeficient v/c, Diracova matice
γ integrační cesta, Lorentzův faktor
γ^k, γ^5 Diracovy matice
Γ^k bázové matice
δ Diracova distribuce, Kroneckerův symbol, parametr rovnice, úhel (fáze vlny)
Δ konečný přírůstek, Laplaceův operátor
ε energie jednoho stavu, levá strana rovnic, Leviho-Civitův tenzor, numerická excentricita, permitivita, řídící parametr
$\boldsymbol{\eta}$ vlastní vektor
θ odklon od osy z
κ elektrická susceptibilita, konstanta v KG rovnici, součinitel tepelné vodivosti
λ charakteristické (vlastní) číslo, Ljapunovův exponent, parametr,

	vlnová délka,
	zeměpisná šířka
$\mathbf{\Lambda}$	Lorentzova matice
μ	bezrozměrná hmotnost,
	integrační faktor,
	permeabilita,
	redukovaná hmotnost
ν	frekvence, kmitočet,
	radiální kvantové číslo,
	vlnová funkce neutrina
$\mathbf{\nu}$	normálový vektor
$\mathbf{\xi}$, ξ	fázová proměnná,
	bezrozměrný parametr,
	pomocná proměnná
π	kanonicky sdružené pole
ρ	hustota,
	vzdálenost
ρ_Q	hustota náboje
σ	spin,
	Pauliho matice
$\mathbf{\sigma}$	jednotkový směrový vektor
τ	délková hustota
$\Sigma^{\alpha\beta}$	bázové matice
φ	fáze,
	obecné pole,
	úhel,
	stav systému
$\hat{\varphi}$	operátor pole
ϕ	fáze,
	fázový prostor,
	chybová funkce,
	skalární potenciál,
	tok pole
χ	magnetická susceptibilita
ψ	Chandrasekharova funkce,
	stav systému,
	vlnová funkce
ω	úhlová frekvence
ω_c	cyklotronní frekvence
Ω	časoprostorová oblast
$\mathbf{\nabla}$	gradient
$\Box$	D'Alembertův operátor

Rejstřík osobností



Teoretická mechanika



Coriolis, Gustave Gaspard (1792–1843), francouzský matematik a fyzik, zabýval se matematickou analýzou, mechanikou a hydraulikou. Proslavil se výpočtem sil působících v rotujících soustavách. Jedna z těchto sil nese jeho jméno – Coriolisova síla. Podrobně také studoval tření. Jako první použil termín mechanická práce v souvislosti s působením sil na tělesa a používal správný vztah pro kinetickou energii. V jedné ze svých prací se zabýval také teorií srážek kulečníkových koulí. V roce 1829 se stal profesorem mechaniky na École Centrale Paris. Jeho jméno je jedním ze 72 jmen vyrytých na Eiffelově věži.



Euler, Leonhard (1707–1783), švýcarský matematik a astronom, žák Johanna Bernoulliho. Pracoval na Akademii v Petrohradu a na Akademii věd v Berlíně. Měl fenomenální paměť a jednou rozhodl při mezi dvěma studenty, jejichž výsledky náročného výpočtu se lišily na padesátém desetinném místě tím, že výsledek spočítal jen tak v hlavě. V roce 1735 Euler oslepl na pravé oko a v roce 1766 i na levé. Přesto pokračoval v publikaci svých výsledků, které diktoval. Euler byl nejplodnějším matematikem všech dob (ačkoli měl 13 dětí). Za svůj život publikoval přes 800 prací. Dvanáctkrát byl odměněn cenou Pařížské akademie. Když se ho ptali na vysvětlení jeho úžasné plodnosti, odvětil: „*Zdá se, že mé pero je inteligentnější než já.*“ Francouzský matematik a astronom François Arago o něm řekl: „*Počítá stejně lehce, jako člověk dýchá nebo orel plachtí vzduchem*“.

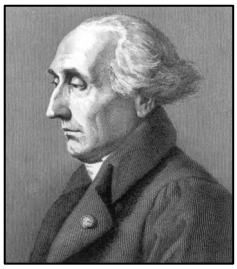
Nezávisle na Lagrangeovi nalezl nutné podmínky pro minimalizaci funkcionálu ve variačním počtu. Ve fyzice jsou tyto rovnice známy jako Lagrangeovy pohybové rovnice. Jejich výhodou je, že nezávisí na volbě souřadnicového systému. Zabýval se také teoretickou astronomií. Zkoumal problém pohybu tří a více těles a dokázal, že neexistuje analytické řešení. Teoreticky řešil pohyb Měsíce (problém nakonec vyřešil až Laplace) a poruchy drah Jupiteru a Saturnu. Euler teoreticky odvodil možnost odstranění barevné vady u čočkových dalekohledů (prakticky to dokázal anglický právník a matematik Chester Moor Hall v roce 1733).



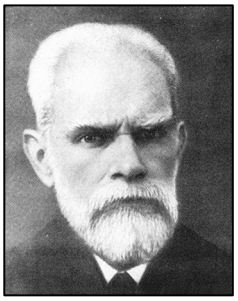
Hamilton, William Rowan (1805–1865), významný irský matematik. Pod vedením svého strýce lingvisty se naučil mluvit čtrnácti jazyky. V sedmnácti letech odhalil chybu v Laplaceově traktátu *Celestial Mechanics*. Předpověděl kónickou refrakci ve dvouosých krystalech, která byla zanedlouho experimentálně potvrzena Hunphrey Lloydem. Hamilton také rozšířil princip minima energie, který popsal Maupertuis, na Hamiltonův princip, základní variační princip v teoretické mechanice, který vede na Lagrangeovy rovnice. V diferenciálním počtu je po něm pojmenován Hamiltonův operátor, ve fyzice Hamiltonovy pohybové rovnice, Hamiltonova funkce a Hamiltonova-Jacobiho rovnice. Poslední třetinu svého života strávil pod vlivem alkoholu a již nijak nepřispěl k lidskému poznání.



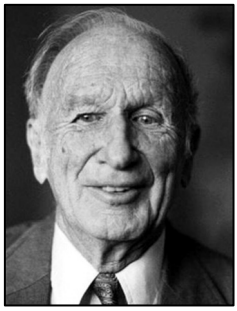
Hopf, Eberhard Frederich Ferdinand (1902–1983), německý matematik a astronom, který se narodil ještě v Rakousko-Uhersku (v Salzburgu). Je zakladatelem ergodické teorie a teorie bifurkací (větvení řešení diferenciálních rovnic). Zabýval se parciálními diferenciálními rovnicemi, integrálními rovnicemi, mechanikou tekutin a diferenciální geometrií. Objevil princip maxima v teorii eliptických diferenciálních rovnic. Vystudoval na Univerzitě v Berlíně, kde habilitoval v roce 1929. Od roku 1931 pracoval na MIT ve Spojených státech. V roce 1936 se vrátil do Německa, pracoval na univerzitách v Lipsku a Mnichově. Od roku 1949 až do smrti pracoval na Indiana University v Bloomingtonu. V teorii diferenciálních rovnic je po něm pojmenována Hopfova bifurkace.



Lagrange, Joseph (1736–1813), francouzský matematik a teoretický fyzik, byl jednou z nejvýznamnějších vědeckých osobností osmnáctého století. Lagrange vystřídal Eulera na místě ředitele Berlínské akademie. Jeho dílo *Mécanique Analytique* z roku 1788 bylo komplexním pojetím mechaniky z matematického hlediska. Lagrange se stal spoluzakladatelem variačního počtu (v matematice řešil obdobné úlohy Euler). Mechanické úlohy chápal jako hledání optimální trajektorie na základě jednoduchého integrálního principu. Nalezl nutné podmínky pro existenci řešení, které představují pohybové rovnice sledovaného objektu. Dnes se tyto rovnice nazývají Lagrangeovy rovnice a jsou základem teoretické mechaniky. Také jsou po něm pojmenovány Lagrangeovy body – pětice rovnovážných bodů v okolí dvou vzájemně se obíhajících těles. Jeden z jeho výroků zní: „*U lidí jsem vždy pozoroval, že jejich nároky jsou v opačném poměru k tomu, co si opravdu zaslouží. To je jeden ze základů morálky.*“

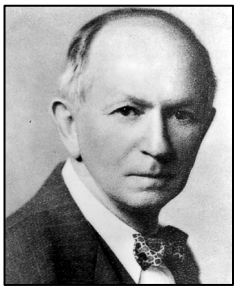


Ljapunov, Alexandr Michailovič, (1857–1918), ruský matematik, jehož základní práce se týkaly diferenciálních rovnic, teorie potenciálu, stability řešení a teorie pravděpodobnosti. Na jeho počest je pojmenována Ljapunova stabilita – stabilita řešení diferenciálních rovnic vzhledem k perturbaci počáteční podmínky. Z fyzikálních problémů řešil podmínky stability rotující kapaliny. Studoval na Univerzitě v Petrohradu. K jeho učitelům patřil například Čebyšev. Studium zakončil v roce 1880. V roce 1880 obdržel zlatou medaili za práci o hydrostatice. V roce 1895 se stal soukromým docentem a v témže roce vedoucím katedry mechaniky na Univerzitě v Charkově. V roce 1902 se vrátil do Petrohradu. V roce 1917 se s těžce nemocnou manželkou stěhuje do Oděsy. V roce 1918 zemřela jeho žena na tuberkulózu. Ljapunov chtěl skoncovat se životem a střelil se do hlavy. Na následky zranění zemřel o tři dny později.



Lorenz, Edward Norton (1917–2008), americký matematik a meteorolog, průkopník a spoluzakladatel teorie deterministického chaosu. Objevil podivný atraktor a poprvé pro nestabilitu použil termín „motýlí jev“. Vystudoval matematiku na koleji Dartmouth v New Hampshire a na Harvardu. V průběhu druhé

světové války předpovídal pro armádu počasí. Po válce vystudoval meteorologii na MIT, kde se později stal profesorem. Vybudoval matematický model pohybu vzdušných mas v atmosféře. Je nositelem mnoha cen a medailí. Je po něm pojmenován Lorenzův podivný atraktor.



Lotka, Alfred James (1880–1949), americký matematik, fyzikální chemik a statistik. Je především znám aplikací fyzikálních postupů v biologii, zejména v pracích o dynamice populace a energetice. Navrhnul známou rovnici popisující vývoj počtu jedinců v systému, který je složen z dravců a kořisti. Nezávisle tuto rovnici odvodil italský matematik Vitto Volterra. Proto se dnes evolučním rovnicím tohoto typu říká Volterrovy-Lotkovy rovnice. Rovnice se využívají i v jiných systémech, kde spolu soupeří dvě skupiny jedinců. Lotka se narodil ve Lvovu na území dnešní Ukrajiny (tehdy Rakousko-Uhersko). Jeho rodiče byli Američané. Studoval v Birminghamu, Lipsku a v USA na Cornellově univerzitě.



Newton Isaac (1642–1727), je považován za jednoho z nejvýznamnějších vědců v dějinách lidstva. Byl anglickým fyzikem, matematikem, astronomem, filozofem a teologem. Newton položil základy klasické mechaniky ve třech pohybových zákonech (zákon setrvačnosti, zákon síly, zákon akce a reakce). Zákon síly se stal vůbec prvním matematickým nástrojem pro předpověď trajektorie těles. K řešení pohybové rovnice (zákona síly) Newton vyvinul základy diferenciálního a integrálního počtu, nezávisle na něm objevil diferenciální počet Gottfried Leibniz. Pro gravitační interakci navrhl Newton silový předpis, který je dnes znám jako Newtonův gravitační zákon. Platí jak pro pohyby těles na Zemi, tak ve vesmíru. Dále se Newton v mechanice zabýval zákonem zachování hybnosti a momentu hybnosti. Newtonovo pojetí mechaniky používá absolutní prostor a čas. Oba pojmy stojí mimo tělesa a nejsou jimi nijak ovlivňovány. Kompletní základy mechaniky publikoval Newton v roce 1687 v *Principiích* (*Philosophiæ Naturalis Principia Mathematica*), jejichž vydání sponzoroval Edmond Halley, který proslul předpovědí návratu Halleyovy komety na základě Newtonova gravitačního zákona.

Newtonův zájem nebyl ale soustředěn jen na mechaniku. Zabýval se i optikou. Zkonstruoval zrcadlový dalekohled s okulárem umístěným kolmo na optickou osu přístroje. Pomocí hranolu rozložil světlo na jednotlivé barvy a zabýval se teorií barev. Světlo si představoval, na rozdíl od Huygense, jako proud částic. Dnes víme, že pravdu měli oba, světlo se někdy chová jako vlnění a někdy má částicovou povahu. Tomuto jevu, který byl objasněn až na základě kvantové mechaniky, říkáme částicově-vlnová dualita.

V matematice Newton zavedl integrální a diferenciální počet, zobecnil binomickou větu a zabýval se numerickým řešením transcendentních a diferenciálních rovnic (objevil tzv. Newtonovo schéma). Newton věnoval mnoho času i alchymii, měl vlastní laboratoř. Většina jeho textů je ovšem věnována náboženským otázkám. Po Newtonovi jsou pojmenovány: Newtonovy pohybové zákony, Newtonovo schéma, Newtonův dalekohled, jednotka síly newton a krátery na Marsu a Měsíci.



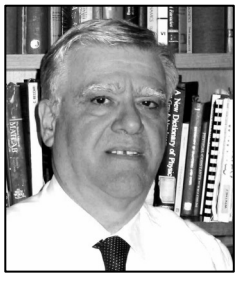
Noether, Emmy (1882–1935), vynikající německo-americká matematička, která ukázala, že každá symetrie v přírodě je úzce spojena se zákonem zachování. Zachovávající se veličina je přímo definována danou symetrií. Pracovala v Erlangenu a v Göttingen s lidmi, jako byli Felix Klein a David Hilbert. Její práce v oblasti teorie invariantů přispěly k výsledné podobě obecné teorie relativity formulované Albertem Einsteinem v roce 1916. Emmy Noetherová byla pravděpodobně první žena s akademickým titulem vůbec, neboť habilitace byla až do této doby umožněna pouze mužům.



Pol, Balthasar (1889–1959), celým jménem Balthasar van der Pol, holandský fyzik. Van der Pol vystudoval fyziku na Univerzitě v Utrechtu, kde získal v roce 1920 titul PhD. Zabýval se experimenty, zejména šířením elektromagnetických vln. V teoretické oblasti řešil problematiku teorie elektrických obvodů a zabýval se matematickou fyzikou a teorií diferenciálních rovnic. V roce 1935 byl oceněn za své práce medailí IEEE. Jsou po něm pojmenovány van der Polův oscilátor a planetka 10443.



Rayleigh, John William Strutt (1842–1919), anglický baron, který se zabýval fyzikou, akustikou a optikou, zejména šířením vln v tekutinách. Jeho špatný zdravotní stav mu znemožnil dokončit studia na dvou školách (Eton, Harrow). V roce 1857 započal soukromé čtyřleté studium pod vedením vlastního učitele. V roce 1861 vstoupil na Kolej Trinity v Cambridgi. Studia ukončil v roce 1865. Intenzivně se zabýval Maxwellovou teorií elektromagnetismu, a to jak experimentálně, tak teoreticky. V roce 1878 vydal dvoudílný spis *The Theory of Sound*, který se stal základem akustické literatury. Odvodil rovnici popisující závislost rozptylu světla v atmosféře na vlnové délce a vysvětlil tak jako první modrou barvu oblohy. Pokoušel se také, jako mnozí, odvodit zákon záření absolutně černého tělesa. Jeho vztah (Rayleighův zákon) popisuje správně závislost intenzity záření na vlnové délce pro dlouhé vlnové délky. Pro krátké vlnové délky intenzita diverguje (tzv. ultrafialová katastrofa) a zákon neplatí. Pro celé spektrum se podařilo zákon odvodit až Maxu Planckovi. Nobelovu cenu získal v roce 1904 za izolování inertního atmosférického argonu. O prvenství tohoto objevu soupeřil s Williamem Ramsayem, který ale započal své práce prokazatelně až po publikování Rayleighových výsledků. Ramsay získal Nobelovu cenu za chemii za dlouholetý výzkum vlastností argonu v témže roce. V teoretické mechanice zavedl Rayleigh disipační funkci, která se používá pro popis ztrát způsobených přeměnou energie na teplo. Tato funkce se nazývá Rayleighova disipační funkce.



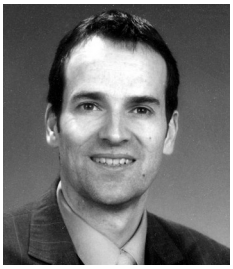
Tonti, Enzo (1935), italský teoretický fyzik, narodil se v Miláně, kde v roce 1961 dokončil studia matematiky a fyziky. Poté pracoval na Milánské polytechnice. V roce 1975 se stal profesorem na Milánské státní univerzitě. Od roku 1976 pracuje na Fakultě inženýrství v Terstu. Celý život se zabývá matematickou strukturou fyzikálních teorií. Už jako student byl fascinován analogiemi mezi různými fyzikálními teoriemi. Nejvíce se ale

proslavil pracemi z oblasti variační formulace fyzikálních teorií. Nalezl podmínky, které musí splňovat soustava diferenciálních rovnic, aby ji bylo možné formulovat variačně. Tyto podmínky se nazývají *Tontiho podmínky*.

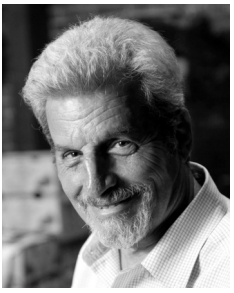


Volterra, Vito (1860–1940), italský matematik a fyzik, který přispěl k aplikaci matematiky do biologických a společenských věd. Nezávisle na Alfredu Lotkovi zformuloval evoluční rovnice pro dvě soupeřící skupiny (například dravci a kořist). Zabýval se také integrálními rovnicemi. Studoval na Univerzitě v Pise, v roce 1892 se stal profesorem na Univerzitě v Turíně. V období před druhou světovou válkou se odmítl podílet na praktikách nacistického vůdce Benita Mussoliniho. Jsou po něm pojmenovány Volterrovy-Lotkovy evoluční rovnice.

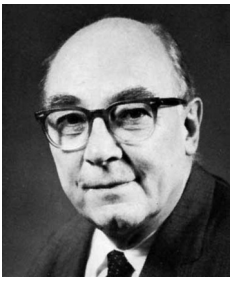
Kvantová teorie



Abele, Hartmut, německo-rakouský kvantový fyzik. Vystudoval na Univerzitě v Heidelbergu. S kvantovou fyzikou a neutrony se blíže seznámil na studijním pobytu v Ústavu Laue-Langevina ve francouzském Grenoblu. Doktorskou práci na téma oscilace neutrin obhájil v Heidelbergu a poté pracoval na americké Univerzitě v Yale. Po návratu se stal profesorem na univerzitách v Heidelbergu a Mnichově. Od roku 2008 pracuje na Univerzitě ve Vídni. Jeho tým připravil experiment s chladnými neutrony, ve kterém byly v roce 2011 za pomoci spektroskopické metody pozorovány kvantové stavy neutronu v tíhovém poli. Je to vůbec poprvé, kdy byly projevy gravitace detekovány u elementární částice. Abele tak otevřel cestu ke zkoumání gravitace na mikroskopické úrovni.



Aharonov, Yakir (1932), izraelský kvantový fyzik. Zabývá se nelokálními jevy v kvantové teorii, kvantovou teorií pole a interpretací kvantové mechaniky. V roce 1959 spolu s Davidem Bohmem navrhli myšlenkový experiment, při kterém je elektronový svazek ovlivněn oblastí nulového magnetického pole, ve které je nenulový vektorový potenciál. Experimentálně byl Aharonův-Bohmův jev prokázán v roce 1986 japonským fyzikem Akira Tomonurou. Klasická elektrodynamika je při popisu elektromagnetické interakce neúplná, teprve kvantová teorie popíše jevy, při kterých elektromagnetické potenciály mění fázi vlnové funkce. Potenciály tak nejsou pomocným matematickým aparátem, ale reálnou fyzikální entitou. V roce 1988 publikoval Aharonov koncept tzv. slabého měření, které neovlivní kvantový stav měřeného objektu. Aharonov vystudoval v izraelské Haifě, poté působil na univerzitě v anglickém Bristolu, kde získal Ph.D. pod vedením Davida Bohma. V roce 1998 získal Wolfovu cenu.



Anderson, Carl David (1905–1991), americký fyzik, který spolu s Victorem Francisem Hessem z Rakouska obdržel v roce 1936 Nobelovu cenu za objev pozitronu (kladného elektronu),

první známé částice antihmoty. Anderson získal titul Ph.D. v roce 1930 na Kalifornském technologickém institutu v Pasadeně, kde pracoval s fyzikem Robertem Andrewsem Millicanem. Od roku 1927 studovali rentgenové fotoelektrony (uvolňují se při srážkách atomů s vysoce energetickými fotony), v roce 1930 začali zkoumat kosmické a gama záření. Anderson v mlžné komoře vyfotografoval stopy sekundárních sprškek kosmického záření a při studiu fotografií objevil množství stop, z jejichž polohy vyplývalo, že by mohly vzniknout působením kladně nabitých částic – ovšem částic mnohem menších než protony. V roce 1932 uvedl, že stopy jsou způsobeny pozitrony, kladně nabitými částicemi se stejnou hmotností jako elektrony. Toto tvrzení bylo v roce 1933 ověřeno britským fyzikem P. Blackettem a jeho italským kolegou G. Occhialinim. Existenci pozitronu jakožto antičástice k elektronu předpověděl v roce 1928 P. Dirac.

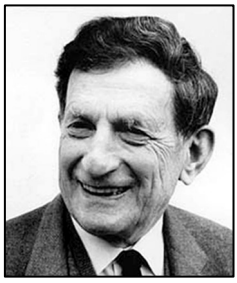
V roce 1936 Anderson objevil mion (těžký elektron), částici 207krát těžší než elektron. Nejdříve myslel, že nalezl mezon předpovězený japonským fyzikem Hideki Yukawou, ale zjistilo se, že mion s těmito částicemi interaguje jen slabě a jde o těžší verzi elektronu. Skutečný mezon byl pak objeven v roce 1947 britským fyzikem Cecilem Powellem a pojmenován pí-mezon nebo pion.



Bell, John Stewart (1928–1990), irský fyzik, který je autorem Bellových nerovností, podle kterých bylo možné vyloučit klasickou interpretaci kvantové mechaniky (interpretaci se skrytými parametry). V roce 1948 se stal bakalářem experimentální fyziky na Univerzitě v Belfastu, Ph.D. získal v roce 1956 na Univerzitě v Birminghamu. Poté pracoval v Harwellově laboratoři a po několika letech přesídlil do evropského střediska jaderného výzkumu CERN. Zde se začal intenzivně zabývat teoretickou fyzikou, teorií elementárních částic a kvantovou teorií. Na základě nerovností, jež navrhl, byla v roce 1983 definitivně vyloučena klasická interpretace kvantové teorie, podle které je pravděpodobnostní charakter měření způsoben neznalostí všech parametrů systému.

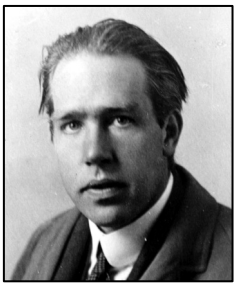


Binning, Gerd Karl (1947), německý fyzik a spoludržitel Nobelovy ceny pro rok 1986 za vynález rastrovacího tunelového mikroskopu. Binnig se narodil ve Frankfurtu a studoval zde na Goetheho universitě, kde získal v roce 1978 titul PhD. V témže roce se stal zaměstnancem výzkumné laboratoře IBM poblíž Curychu ve Švýcarsku a společně s Heinrichem Rohrerem začali pracovat na problému, jak zobrazit jemné detaily struktury látek. Přišli na myšlenku, že by se sonda emitující elektrony pohybovala kolem povrchu zkoumaného objektu a mapovala tak jeho povrch. Malá sonda s ostrým hrotem se pohybuje a elektrony tunelují mezi vzorkem a hrotem. Nepatrné změny (i atomových rozměrů) vzdálenosti sondy od povrchu se zaznamenají. Vhodným vzorkováním povrchu se pořídí třírozměrný obraz. Nový mikroskop je schopen zaznamenat jednotlivé atomy a za pomoci hrotu s nimi i manipulovat.



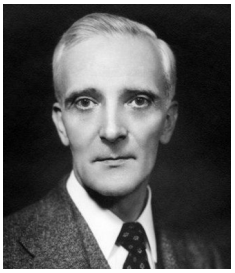
Bohm, David (1917–1992), americko-britský teoretický fyzik. Zabýval se fyzikou plazmatu, jadernou fyzikou a kvantovou teorií. V průběhu druhé světové války pracoval na projektu Manhattan. Jsou po něm pojmenovány: anomální Bohmova difúze

v plazmatu a Aharonův-Bohmův jev, při kterém svazek elektronů změní svou fázi vlivem nenulového vektorového potenciálu i v oblasti, kde je magnetické pole nulové. Studoval na Pensylvánské státní univerzitě, poté na Caltechu a Kalifornské univerzitě v Berkeley. Pracoval na nejrůznějších místech na světě, včetně Izraele, Brazílie a Anglie. Aharonův-Bohmův jev objevil spolu se svým studentem Aharonem při pobytu v anglickém Bristolu, kde byl Aharonov jeho studentem.



Bohr, Niels (1885–1962), dánský fyzik, který v roce 1913 navrhl první úspěšný model atomu. Pokud se elektron nachází na vybraných drahách (takových, na jejichž obvod připadne celistvý násobek vlnové délky elektronu), nezáří. Při přeskoku elektronu mezi dvěma hladinami dojde k vyzáření odpovídajícího energetického kvanta. Moment hybnosti elektronu je kvantován, základním kvantem je Planckova konstanta. Tento model funguje pro vodík a nevysvětluje zákonitosti mikrosvěta. Později byly stejné výsledky získány z kvantové teorie. Bohr je autorem principu korespondence – tvrzení, že při velkých kvantových číslech musí kvantové formule přecházet v klasické. Je také zastáncem pravděpodobnostní (tzv. kodaňské) interpretace kvantové teorie. V roce 1922 obdržel Nobelovu cenu za fyziku.

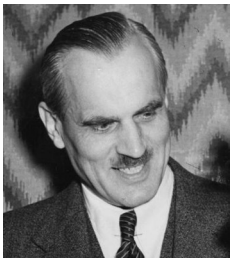
Bose, Satyendra Nath (1854–1948), viz [1], Statistická fyzika.



Brillouin, Léon (1889–1969), francouzsko-americký fyzik. V roce 1926 se podílel na vyvinutí WKB aproximace v kvantové teorii. Šlo o přibližnou metodu výpočtů ze Schrödingerovy rovnice. Ve fyzice pevných látek objevil Brillouinovy zóny, které odrážejí periodicitu krystalické mříže v k-prostoru. Většinu života se věnoval kvantové teorii. Brillouin vystudoval ve Francii École Normale Supérieure, v roce 1928 se stal profesorem na Sorboně, později profesorem na College de France. Za druhé světové války emigroval do Spojených států, stal se profesorem na univerzitě ve Wisconsinu (1941) a později na Harvardu (1946). V závěru života byl profesorem na Kolumbijské univerzitě. Je autorem více než 200 vědeckých prací.



Broglie, Louis de (1892–1987), Francouzský fyzik, který v roce 1923 navrhl princip duality částic a vln. Základem bylo tvrzení, že se objekty mikrosvěta mohou v některých situacích chovat jako částice a v jiných jako vlnění. Vlnové vlastnosti částic vyjádřil Broglie rovnicí: $\lambda = h/mv$, kde λ je vlnová délka, h je Planckova konstanta, m je hmotnost částice a v je její rychlost. Broglie pocházel z francouzské šlechtické rodiny a byl vévodou. Jeho pradědeček byl popraven na gilotině během Velké francouzské revoluce. De Broglie vystudoval historii, ale během první světové války řešil problémy spojené s rádiovou komunikací a začal se zajímat o vědu. Sloužil na vrcholku Eifellovy věže. Hypotézu o vlnových vlastnostech částic předložil v rámci své doktorské práce v roce 1923. Šlo o natolik progresivní myšlenku, že komise váhala, zda mu má doktorát udělit. O pouhých 6 let později, v roce 1929, získal za tuto práci Nobelovu cenu za fyziku.

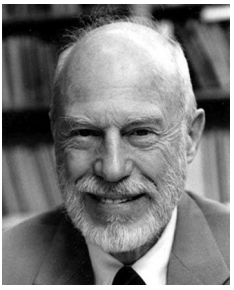


Compton, Arthur (1892–1962), americký fyzik, nositel Nobelovy ceny pro rok 1927 za výzkum rozptylu fotonu na volných elektronech. Compton se zabýval rentgenovým zářením. V roce 1922 zjistil úhlovou závislost změny vlnové délky vysoce energetického fotonu při rozptylu na elektronech. Comptonův objev potvrdil, že elektromagnetické záření má jak vlnovou, tak částicovou povahu, a stal se klíčovým experimentem rodící se kvantové mechaniky. Dnes se tento rozptyl nazývá Comptonův jev. V případě, že foton získá od elektronu energii, hovoříme o tzv. inverzním Comptonově jevu. Ten je jedním ze základních mechanizmů, kterým mohou fotony ve vesmíru získat velkou energii. Compton se také zabýval výzkumem kosmického záření, odrazem, polarizací a spektrálními vlastnostmi rentgenového záření.

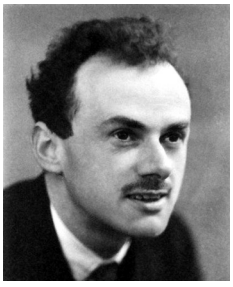
Compton se narodil ve Woosteru ve státě Ohio. Vystudoval Wooster College a Princeton. V roce 1923 se stal profesorem fyziky na Chicagské univerzitě. Stal se ředitelem laboratoře, ve které v roce 1942 Enrico Fermi uvedl do provozu první jaderný reaktor na světě. Compton se zúčastnil konstrukce první atomové bomby. Od roku 1945 do roku 1953 byl rektorem Washingtonské univerzity, po roce 1954 zde působil jako profesor filozofie.



Davisson, Clinton (1881–1958), americký experimentální fyzik, který v roce 1937 získal Nobelovu cenu za fyziku spolu s Georgem Thomsonem. Oba dva vědci nezávisle na sobě zjistili, že elektrony se mohou ohýbat stejně jako světelné vlny, čímž ověřili hypotézu Louise de Broglieho, podle které by se elektrony měly chovat jako vlny i jako částice. V roce 1927 Davisson a Lester Germer zkoumali proud elektronů odražený na kovovém krystalu. Zjistili, že vykazuje ohybové obrazce podobné obrazcům rentgenového záření a ostatních elektromagnetických vln. Tento objev ověřil kvantově mechanické chápání duality vlna-částice a umožnil studium jaderné, atomární a molekulární struktury látek. Davisson získal doktorát na Princetonské univerzitě a většinu své kariéry strávil v Bellových telefonních laboratořích. Nejprve zkoumal emisi elektronů na kovech za zvýšené teploty a později pomáhal vyvinout elektronový mikroskop.



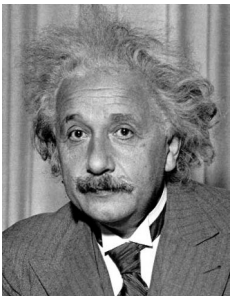
DeWitt, Bryce (1923–2004), americký teoretický fyzik, který se zabýval kvantovou gravitací a numerickými simulacemi v relativitě. Stal se zastáncem Everettovy mnohosvětové interpretace kvantové teorie. Je po něm pojmenována Wheelerova-DeWittova vlnová funkce popisující vesmír jako celek. Je nositelem Diracovy a Einsteinovy ceny. Teoretickou fyziku vystudoval na Harvardu, kde získal v roce 1950 Ph.D. pod vedením Juliana Schwingera, spolunositele Nobelovy ceny za vybudování kvantové elektrodynamiky. Pracoval v Institutu pokročilých studií v Princetonu, na Severokarolínské univerzitě v Chapel Hill a na Texaské univerzitě v Austinu.



Dirac, Paul Adrien Maurice (1902–1984), anglický fyzik, jeden z hlavních tvůrců kvantové teorie 20. století. Položil základy kvantové elektrodynamiky a kvantové teorie pole. V roce 1928 odvodil slavnou Diracovu rovnici – relativistickou rovnici pro

elektron. Stavy se zápornými energiemi správně interpretoval jako antičástice a předpověděl existenci pozitronu. Pozitron byl objeven Carlem Andersonem až v roce 1932. Nezávisle na Fermim odvodil statistické rozdělení pro částice s poločíselným spinem (Fermi-Diracovo rozdělení). Je autorem Diracovy symboliky v kvantové teorii. Ukázal ekvivalenci Schrödingerova a Heisenbergova přístupu ke kvantové mechanice. Je autorem metody druhého kvantování, které umožňuje přechod od kvantové teorie částic ke kvantové teorii pole. Předpověděl polarizaci vakua a netriviální dynamické vlastnosti vakua způsobené kvantovými jevy. Předpověděl existenci magnetického monopólu. Je autorem mnohačásticového formalizmu v kvantové teorii. Za jeho práci na antičásticích a kvantové teorii pole byl v roce 1933 odměněn Nobelovou cenou za fyziku. V pozdějších letech se zabýval důsledky, které by plynuly z hypotetické proměnnosti základních konstant (gravitační, rychlosti světla a Planckovy konstanty). Po celý život byl zastáncem principu jednoduchosti fyzikálních rovnic. Jako jeden z prvních si uvědomil, že symetrie v přírodě jsou primárním principem při sestavování fyzikálních rovnic.

Ehrenfest, Paul (1880–1933), viz [1], Statistická fyzika.



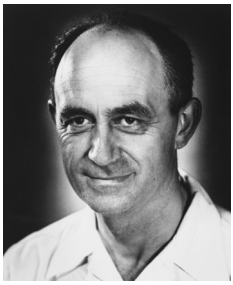
Einstein, Albert (1879–1955), německo-americký fyzik, autor speciální a obecné teorie relativity, vědec, který objasnil fotoelektrický jev a Brownův pohyb a odvodil společně s Bosem statistické rozdělení částic s celočíselným spinem. Speciální relativitu publikoval v roce 1905. Dal v ní do souladu klasickou mechaniku s Maxwellovou elektrodynamikou, ze které plynula nezávislost rychlosti světla na pohybu zdroje. Speciální relativita s sebou přinesla kontrakci délek, dilataci času a poznání, že čas a prostor nejsou absolutní.

V roce 1905 Einstein také vysvětlil fotoelektrický jev. Předpokládal, že se světlo skládá z částic (fotonů), jejichž energie je rovna $\hbar\omega$. Možnost vytržení elektronu z kovu za pomoci světla je dána frekvencí jednotlivých fotonů, nikoli jejich počtem. Téhož roku také Einstein podal vysvětlení Brownova pohybu.

V roce 1916 Einstein publikoval novou teorii gravitace – obecnou relativitu. Gravitaci popisuje jako zakřivený časoprostor. Sama tělesa přispívají k zakřivení časoprostoru a pohybují se v něm po nejrovnějších možných drahách – geodetikách. Albert Einstein získal Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1921, paradoxně však za vysvětlení fotoelektrického jevu a nikoli za obecnou relativitu, která byla jeho hlavním přínosem k poznání zákonitostí přírody.



Everett, Hugh (1930–1982), americký fyzik, který navrhl mnohosvětovou interpretaci kvantové teorie, podle níž se při aktu měření realizuje v našem vesmíru jedna z možných hodnot a ve vesmírech jiných, paralelních, se realizují ostatní možné hodnoty. Tato interpretace kvantové teorie nebyla mnohými fyziky přijata a způsobila Everettemu nemalé potíže. Studoval na Katolické americké univerzitě a v Princetonu. Kromě kvantové teorie se také zabýval matematickými optimalizacemi různých problémů, matematickým modelováním, statistickou analýzou a matematickou teorií her.



Fermi, Enrico (1901–1954), italsko-americký fyzik, který se věnoval především kvantové teorii a teorii elementárních částic. Malou neutrální částici, která vzniká při beta rozpadu pojmenoval neutrino (v italštině „neutronek“). Na jeho počest jsou pojmenovány částice s poločíselným spinem jako fermiony. Jde o částice, které splňují Pauliho vylučovací princip. Tyto částice splňují statistické rozdělení pojmenované Fermiho-Diracovo rozdělení. Enrico Fermi zkonstruoval a spustil v roce 1942 pod stadionem Chicagské univerzity první jaderný reaktor na světě. Byl postaven z grafitových cihliček, které sloužily současně jako moderátor. V roce 1943 založil Aragonskou národní laboratoř. Enrico Fermi se také zabýval způsobem urychlování kosmického záření a navrhl statistické urychlení nabitých částic při jejich odrazech od magnetických zrcadel. Dnes tento mechanizmus nazýváme Fermiho mechanizmus. V roce 1938 získal Nobelovu cenou za fyziku za objev umělých radioaktivních prvků, které vznikají z jader při ostřelování neutrony. Podle Fermiho je pojmenována rentgenová observatoř vypuštěná do vesmíru v roce 2008.

Fock, Vladimir Alexandrivič (1898–1974), sovětský fyzik, který se zabýval především kvantovou mechanikou a kvantovou elektrodynamikou. Vystudoval Petrohradskou univerzitu.



Gerlach, Walter (1889–1979), německý fyzik, spoluobjevitel spinu ve slavném Sternově-Gerlachově experimentu. Gerlach vystudoval Univerzitu Eberharda Karlse ve Frankfurktu nad Mohanem. Za první světové války sloužil v německé armádě. Podílel se na vývoji bezdrátové telegrafie. V roce 1922 uskutečnil se Sternem experiment vedoucí k objevu spinu. Svazek atomů stříbra procházel nehomogenním magnetickým polem a dopadal na skleněný disk. Došlo k jeho rozdělení na dva svazky, které bylo záhy vysvětleno jako důsledek existence spinu – vlastního rotačního a magnetického momentu částic. V roce 1925 se Gerlach stal profesorem na Univerzitě v Tübingenu. Toto místo převzal po Paschenovi. V roce 1929 se stal profesorem na Mnichovské univerzitě, kde místo převzal po Wienovi. Na této pozici zůstal až do května 1945, kdy byl uvězněn spojeneckými armádami. Byl vězněn ve Francii a později v Anglii. Údajně se podílel na vývoji německých zbraní. V roce 1946 se vrátil do Německa, pracoval na Univerzitě v Bonnu jako hostující profesor a od roku 1948 byl profesorem na Mnichovské univerzitě. Současně zde byl vedoucím katedry fyziky a rektorem univerzity (1948–1951). Poté zastával mnoho významných pozic v německé vědě.



Germer Lester (1896–1971), americký experimentální fyzik, který s Clintonem Davissonem prokázal vlnové vlastnosti elektronu, a tím potvrdil vlnově-částicový dualizmus navržený Louis de Brogliem. Germerův-Davissonův experiment byl klíčový pro vývoj elektronového mikroskopu. Germer vystudoval Kolumbijskou univerzitu. Za první světové války byl bojovým pilotem americké armády. Poté se stal zaměstnancem Bellových telefonních laboratoří. Vedle fyziky bylo jeho druhou vášní horolezectví, kterému se intenzivně věnoval od svých 45 let až do smrti.

Gordon, Walter (1893–1939), německý teoretický fyzik. Dětství prožil ve Švýcarsku, pozdní léta ve Švédsku (z důvodu politické situace v Německu). Vystudoval na Berlínské univerzitě, doktorský titul získal v roce 1921 pod vedením Maxe Plancka. V roce 1922 se stal asistentem Maxe von Laueho. Od roku 1926 působil v Hamburgu, kde se stal v roce 1930 profesorem. Od roku 1933 žil ve švédském Stockholmu. Zabýval se teoretickou fyzikou. V roce 1927 spolu s Oskarem Kleinem navrhli relativistickou variantu Schrödingerovy rovnice, tzv. Kleinovu-Gordonovu rovnici. Původně předpokládali, že jde o správnou rovnici pro elektron. Nakonec se ukázalo, že jejich rovnice popisuje kvantově relativisticky částice se spinem 0, zatímco Diracova rovnice z roku 1928 je vhodná pro částice se spinem 1/2 (tedy právě pro elektron).



Goudsmit, Samuel Abraham (1902–1978), holandsko-americký fyzik, který spolu s Uhlenbeckem interpretoval výsledek Sternova-Gerlachova experimentu jako důsledek existence spinu. Zabýval se také čárovými spektry. Fyziku vystudoval na Univerzitě v Leydenu (byl žákem Paula Ehrenfesta), kde také v roce 1927 získal Ph.D. V letech 1927 až 1946 působil jako profesor na Michiganské univerzitě. V průběhu druhé světové války působil na MIT. Pracoval na vývoji atomové bomby v projektu Manhattan. Úzce spolupracoval s Wernerem Heisenbergem a Otto Hahnem. Zabýval se i archeologií a egyptologií.



Heisenberg, Werner (1901–1976), německý teoretik, který se zabýval základními rysy kvantové teorie. Je autorem maticové kvantové mechaniky, kterou odvodil v roce 1925. Jde o jiný postup výpočtu kvantových stavů, než je Schrödingerova vlnová mechanika. Heisenberg odvodil také slavné relace neurčitosti, podle kterých nelze současně přesně změřit polohu a hybnost objektu. Měření jedné veličiny narušuje výsledek měření druhé veličiny. Za vybudování základů kvantové teorie získal v roce 1932 Nobelovu cenu za fyziku. Heisenberg vystudoval teoretickou fyziku na Univerzitě v Mnichově. Titul PhD získal pod vedením Sommerfelda v roce 1923 a stal se asistentem Maxe Borna v Göttingen. Tři roky pracoval v Kodani s Nielsem Bohrem, kde se spolu podíleli na tzv. kodaňské interpretaci kvantové teorie. Navrhl také úspěšný model feromagnetik se dvěma fázovými přechody. Od roku 1927 do roku 1941 byl profesorem teoretické fyziky v Lipsku, od roku 1942 do roku 1945 byl ředitelem Institutu Maxe Plancka v Berlíně a od roku 1946 byl ředitelem Institutu Maxe Plancka v Kodani.

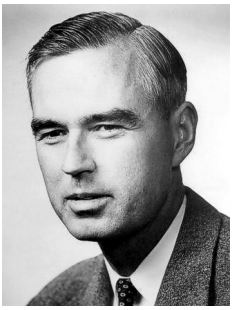


Klein, Oskar Benjamin (1894–1977), švédský teoretický fyzik. Ph.D. získal v roce 1921 na Stoskholmské univerzitě. Pracoval na Michiganské univerzitě (USA), v Leidenu a na Lundské univerzitě. Spolupracoval s Nielsem Bohrem a Paulem Ehrenfestem. Je spoluautorem Kaluzova-Kleinova modelu, který se poprvé pokusil sjednotit elektřinu a magnetizmus s gravitací pomocí přidání další, páté dimenze. Dnes se obdobný postup i používá v teorii strun (v tzv. M teorii). Je také spolutvůrcem Kleinovy-Gordonovy rovnice z roku 1927. Původně tuto rovnici odvodili Klein a Gordon jako relativistickou kvantovou rovnici pro elektron, ukázalo se ale, že správnou rovnicí je Diracova rovnice a rovnice Kleinova-Gordonova je správnou

kvantovou relativistickou rovnicí pro částice s nulovým spinem. Spolu s Alfvénem zastával názor, že děje ve vesmíru dominantně ovlivňuje elektromagnetická interakce. Podle Kleina je také pojmenován Kleinův paradox: z řešení Diracovy rovnice plyne, že relativistická nehmotná částice není při průchodu potenciálovou bariérou exponenciálně tlumená. Jev byl skutečně experimentálně ověřen (například pohyb elektronu s nulovou efektivní hmotností v grafenu). Spolu s Yoshio Nishinou odvodil v roce 1929 formuli pro účinný průřez Thomsonova rozptylu fotonu na elektronu v nejnižším řádu kvantové elektrodynamiky (Kleinova-Nishinova formule). V roce 1959 získal Planckovu medaili.



Kronig, Ralph (1904–1995), německo-americký fyzik, který výrazně zasáhl do vývoje kvantové mechaniky. Je spoluobjevitelem spinu částic, zabýval se rentgenovou absorpční spektroskopií a kvantovým chováním periodických struktur. Je po něm pojmenován Kronigův-Penneyův model, který na jednoduchém periodickém potenciálu do nekonečna se opakujících bariér popisuje vznik povolených a zakázaných pásů ve spektru částice. Dále je po něm pojmenován Costerův-Kronigův přechod, při němž je při přeskoku elektronu na jinou hladinu emitován elektron. Kronig studoval v německých Drážďanech a později na Kolumbijské univerzitě v USA, kde získal v roce 1925 doktorát. Z evropských vědců ho nejvíce ovlivnil Paul Ehrenfest.



Lamb, Willis Eugene (1913–2008), americký fyzik a spoludržitel Nobelovy ceny za fyziku pro rok 1955, kterou dostal spolu s Polykarpem Kuschem za experimentální práce vedoucí ke zpřesnění kvantové elektrodynamiky. Lamb se v roce 1938 stal zaměstnancem Kolumbijské university v New Yorku a během druhé světové války pracoval ve slavné Laboratoři záření (Radiation Laboratory) na MIT. V roce 1947 detekoval Lamb odchylky od hyperjemné struktury spektrálních čar předpovězené kvantovou elektrodynamikou. Tyto odchylky byly způsobeny netriviálními dynamickými vlastnostmi vakua, zejména přítomností virtuálních elektronových-pozitronových párů ve vakuu. Během let 1951–1956 byl profesorem fyziky na Stanfordské univerzitě v Kalifornii a navrhl zde mikrovlnné techniky pro měření hyperjemných struktur spektrálních čar helia. Do roku 1962 byl profesorem teoretické fyziky na universitě v Oxfordu. V témže roce byl jmenován profesorem na universitě v Yale. V roce 1974 se stal profesorem fyziky a optických věd na universitě v Arizoně.

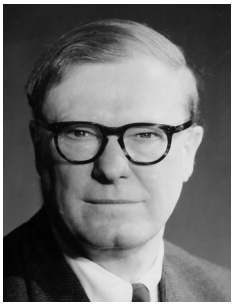


Neumann, John von (1903–1957), maďarsko-americký matematik, jenž nezávisle na Diracovi ukázal v roce 1944, že Schrödingerova vlnová mechanika a Heisenbergova maticová mechanika jsou matematicky ekvivalentní. V roce 1932 navrhl velmi kontroverzní interpretaci kvantové mechaniky, podle které je výsledek aktu měření ovlivněn vědomím pozorovatele. V roce 1944 vyvinul teorii her. Stal se průkopníkem digitálních počítačů, navrhl základní architekturu počítače (procesor, řadič, operační paměť, vstupní a výstupní zařízení). Hluboce se zabýval numerickou matematikou, na konci druhé světové války se podílel numerickými výpočty na konstrukci první atomové bomby. Je po něm pojmenována

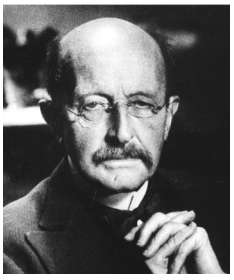
von Neumannova architektura počítače, von Neumannova algebra v kvantové teorii a von Neumannovy buněčné automaty, jejichž koncept vyvinul. Von Neumann studoval chemii na Univerzitě v Berlíně do roku 1923, kdy odešel do Curychu. V Curychu dokončil v roce 1926 studium na Technické vysoké škole a stal se chemickým inženýrem. Doktorát získal na Budapešťské univerzitě, a to již v matematice, z teorie množin. Ve dvaceti letech publikoval definici přirozených čísel, tak, jak ji používáme dodnes.



Pauli, Wolfgang (1900–1958), rakousko-německo-americký fyzik, v roce 1925 zformuloval Pauliho vylučovací princip, který říká, že dva fermiony se nemohou nacházet ve stejném kvantovém stavu. Tento princip je zodpovědný za rozdílné vlastnosti různých atomů a za chemické vlastnosti látek. Významně se podílel na vzniku kvantové mechaniky. Je po něm pojmenována Pauliho rovnice, první kvantová rovnice, která obsahovala spin. Ve 30. letech předpověděl existenci neutrina. Za své práce, zejména za objev vylučovacího principu, získal v roce 1945 Nobelovu cenu za fyziku. Pauli se narodil ve Vídni, jeho kmotrem byl Ernst Mach. Prarodiče Pauliho z otcovy strany pocházeli z pražské židovské rodiny. První vědecký článek o obecné relativitě publikoval v 18 letech. Studoval v Mnichově pod vedením Sommerfelda, zde získal v roce 1921 Ph.D. na základě práce o kvantových vlastnostech molekuly vodíku. Pauli byl rok na Univerzitě v Göttingen, kde pracoval pod vedením Maxe Borna. Také pracoval na Ústavu teoretické fyziky v Kodani (dnes Ústav Nielse Bohra), na Univerzitě v Hamburku a ve švýcarském Curychu. V roce 1931 byl hostujícím profesorem na Michiganské univerzitě a v roce 1935 v Princetonu. V roce 1939 se politické poměry v Evropě zhoršily natolik, že se Pauli odstěhoval do Spojených států, kde pracoval jako profesor teoretické fyziky v Princetonu. Po druhé světové válce se stal americkým občanem.



Penney, William (1909–1991), anglický matematik a teoretický fyzik, jeden ze zakladatelů anglického jaderného výzkumu. Studoval na Imperial College, magisterský titul získal na americké Univerzitě ve Wisconsinu a doktorát na Trinity College v Cambridgi. V letech 1967 až 1973 byl rektorem prestižní univerzity Imperial College. Byl jeden z 20 anglických fyziků, kteří pracovali na americkém projektu Manhattan, jehož cílem bylo vyvinout atomovou bombu. Penney počítal destrukční účinky rázové vlny vzniklé po explozi. V roce 1945 byl členem komise, která zvolila města Hirošima a Nagasaki pro americký útok. Po válce stál u návrhu a testů britské atomové bomby a dohlížel na vývoj britské vodíkové bomby. Byl ředitelem a předsedou různých spolků zabývajících se atomovou energií. V roce 1967 získal šlechtický titul a stal se baronem. Na Imperial College je po něm pojmenována laboratoř. Je spoluautorem Kronigova-Penneyova modelu interakce částice s periodickým potenciálem.

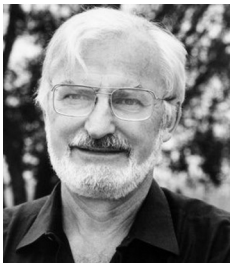


Planck, Max (1858–1947), německý fyzik, který formuloval rovnici popisující vyzařování absolutně černého tělesa za předpokladu, že energie je kvantována a elementární kvantum je úměrné frekvenci. Tento předpoklad zavedl ryze matematicky, aby rovnice byly řešitelné. Fyzikální interpretaci příliš nedůvě-

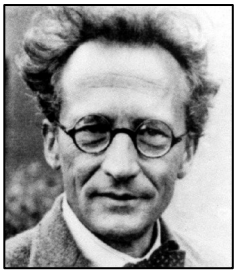
řoval. V roce 1918 získal Nobelovu cenu za svou kvantovou teorii, úspěšně vyzkoušenou Einsteinem na fotoelektrickém jevu a Bohrem na prvním modelu atomu. Planck se hluboce zabýval termodynamikou, je po něm pojmenována jedna z možných formulací druhé věty termodynamické. Planck byl kritikem pravděpodobnostní interpretace entropie. V roce 1900 poprvé použil univerzální plynovou konstantu a Avogadrovo číslo. Po Planckovi jsou pojmenovány tzv. Planckovy škály – typická hmotnost, délka, čas a energie získané kombinací základních konstant. Planckovo jméno také nesou: největší síť vědeckých ústavů v Německu (Max Planck Institute), kráter na Měsíci a evropská sonda zkoumající reliktní záření.



Pontecorvo, Bruno (1913–1993), italsko-ruský jaderný fyzik. V první polovině života pracoval v Itálii, stal se asistentem Enrica Fermiho, účastnil se experimentů s pomalými neutrony, které vedly k objevu řetězové štěpné reakce. Předpověděl oscilace neutrin a je po něm pojmenována mixážní matice hmotnostních neutrinových stavů. V roce 1948 získal britské občanství a zajímavé pracovní nabídky se jen hrnuly. Přesto v roce 1950 za podivných okolností emigroval do Sovětského Svazu, kde pracoval v Dubně až do své smrti. Podle jeho přání je polovina popela uložena v Římě a polovina v Dubně. Od roku 1995 je udílena prestižní Pontecorvova cena za úspěchy v jaderném a částicovém výzkumu.



Rohrer, Heinrich (1933), švýcarský fyzik a spoludržitel Nobelovy ceny za fyziku pro rok 1986, která mu byla udělena za vynález rastrovacího tunelového mikroskopu. Rohrer studoval Švýcarský federální ústav technický, kde v roce 1960 získal titul Ph.D. V roce 1963 se stal zaměstnancem výzkumné laboratoře IBM poblíže Curychu. Tady se spolu s Gerdem Binnigem dali do konstrukce zařízení, které jim později umožnilo odhalit mikroskopickou strukturu povrchů zkoumaných materiálů a pozorovat jednotlivé atomy. Nový mikroskop využívá tunelování elektronů mezi hrotem sondy a povrchem zkoumaného vzorku. Vzorkovací tunelový mikroskop se používá k manipulaci s jednotlivými atomy, při studiu biologických vzorků, k analýze průmyslových materiálů (jakými jsou třeba supravodiče) nebo k testování miniaturních elektrických obvodů.

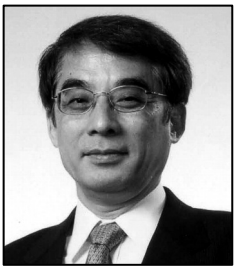


Schrödinger, Erwin (1887–1961), rakouský fyzik, který v roce 1926 rozpracoval vlnovou mechaniku jako jednu z možných formulací kvantové mechaniky. Z tzv. Schrödingerovy rovnice je možné určit vlnovou funkci, která má význam amplitudy pravděpodobnosti výskytu částice a její kvadrát představuje hustotu pravděpodobnosti. Za své práce získal v roce 1933 Nobelovu cenu za fyziku. Schrödinger studoval na Univerzitě ve Vídni. Po první světové válce začal pracovat na Univerzitě v Curychu. Od roku 1927 pracoval na pozvání Maxe Plancka na Univerzitě v Berlíně. Kvůli persekuci židů opustil univerzitu v roce 1933 a sedm následujících let putoval po Rakousku, Velké Británii, Belgii a Itálii a mnohokrát měnil zaměstnání. Teprve v roce 1940 se usadil pro následujících 15 let v Irsku na Dublinském institutu pro pokročilá studia. V roce 1956 odešel Schrödinger do důchodu a vrátil se do rakouské Vídně.



Stern, Otto (1888–1969), původem německý vědec a nositel Nobelovy ceny za fyziku pro rok 1943 za výzkum molekulárních svazků jako nástroje pro studium charakteristiky molekul a za změření magnetického momentu protonu. Sternovou ranou vědeckou prací byly teoretické studie věnované statistické fyzice. Roku 1914 se stal přednášejícím teoretické fyziky na Frankfurtské univerzitě a v roce 1923 profesorem fyzikální chemie na Hamburské univerzitě. Zde také počátkem 20. let dvacátého století spolu s Walterem Gerlachem představili svůj historický experiment s molekulárními svazky. Kolimovaný svazek atomů stříbra procházel nehomogenním magnetickým polem a dopadal na skleněný disk. Došlo k jeho rozdělení na dva svazky, které bylo záhy vysvětleno jako důsledek existence spinu – vlastního rotačního a magnetického momentu částic.

V roce 1933 Stern změřil magnetický moment protonu a poukázal na jeho nesoulad se stávající teorií. V roce 1933, když se k moci dostali nacisté, byl Stern donucen opustit Německo. Odjel do USA, kde se stal profesorem fyziky na Carnegieho institutu technologií v Pittsburghu. Zde zůstal až do svého penzionování v roce 1945.



Tonomura, Akira (1942), vynikající japonský kvantový fyzik, vynálezce elektronové holografie a elektronového holografického mikroskopu, který dokáže zaznamenat nejenom intenzitu elektronového svazku, ale i jeho fázi. Tonomura je dlouholetým pracovníkem vývojových laboratoří společnosti Hitachi. Studoval na Tokijské univerzitě, Ph.D. získal na Gakushuinově univerzitě. První elektronový hologram nahrál již v roce 1968. Spolu s kolegy za pomoci elektronové holografie pozoroval Aharonův-Bohmův jev – posun fáze elektronů, které procházejí oblastí s nulovým magnetickým polem, ale nenulovým potenciálem. V 90. letech 20. století vyvinul metodu pro pozorování magnetických trubic a vírů v supravodičích. V roce 2000 zkonstruoval holografický mikroskop s rozlišením 49,5 pm. Je držitelem mnoha mezinárodních cen a medailí.

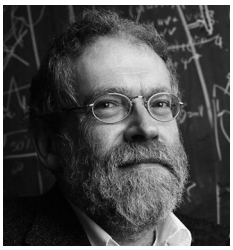


Uhlenbeck, George Eugene (1900–1988), holandsko-americký fyzik, který společně s Goudsmithem ukázal, že štěpení svazku atomů stříbra ve vnějším magnetickém poli (Sternův-Gerlachův experiment) je způsobeno existencí dalšího kvantového čísla, spinu. První rovnici pro částici se spinem potom nalezl Pauli. Uhlenbeck studoval chemické inženýrství v Delftu a poté fyziku a matematiku v Leidenu, kde získal bakalářský titul v roce 1920 a magisterský v roce 1923. Od roku 1925 pracoval v Leidenu jako asistent Ehrenfesta. Tam poznal Goudsmitha, se kterým spoluobjevil spin. Uhlenbeck byl dlouholetým přítelem Enrica Fermiho. V roce 1938 byl hostujícím profesorem na Kolumbijské univerzitě. V roce 1939 se stal profesorem teoretické fyziky na Univerzitě v Ann Arbor.

Za druhé světové války vedl teoretickou skupinu v radiační laboratoři v Cambridgi (USA). Po válce se vrátil do Ann Arbor. Od roku 1960 až do důchodu pracoval v Rockefellerově ústavu pro výzkum medicíny v New Yorku.

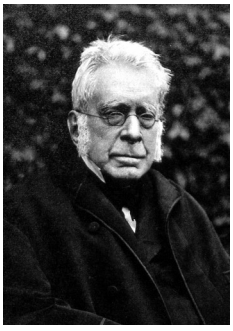


Wigner, Eugene (1902–1995), v Maďarsku narozený americký fyzik, který spolu s Hansem Jensenem a s Mariou Mayerovou získal Nobelovu cenu pro rok 1963 za přínos k atomové fyzice. Wigner získal Ph. D. na Technické univerzitě v Berlíně v roce 1925. Působil v Berlíně, v Göttingen, poté odjel do USA, kde v Princetonu strávil většinu akademického života. Zformuloval zákon zachování parity při platnosti levopravé symetrie. Ukázal, že jaderná síla, která drží protony a neutrony pospolu, má krátký dosah a nezávisí na náboji. V roce 1936 pracoval na teorii absorpce neutronů, která byla užitečná při stavbě jaderných reaktorů. Po druhé světvé válce pomáhal Enrico Fermimu zkonstruovat první jaderný reaktor. Po Wignerovi jsou pojmenovány: Wignerovo pravděpodobnostní rozdělení, Wignerův teorém, Wignerův jev, Wignerův-Eckartův teorém a další.

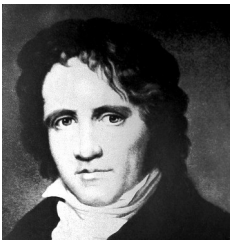


Zeilinger, Anthon (1945), rakouský kvantový fyzik, který je průkopníkem kvantové teorie informace. Jako první realizoval kvantovou teleportaci fotonů. Známý je i svými experimenty s hledáním hranice mezi kvantovým světem a makrosvětem. Zabývá se interferenčními jevy u neutronů, atomů a velkých molekul, propletenými kvantovými stavy, kvantovou kryptografií a teleportací. Na vzdálenosti 144 kilometrů mezi dvěma Kanárskými ostrovy demonstroval, že kvantová komunikace bude možná i přes satelity. Byl zaměstnancem mnoha světových univerzit, například pracoval v Oxfordu, na MIT, na Humboldtově univerzitě a dalších. V současnosti je ředitelem vídeňské pobočky Ústavu kvantové optiky a kvantové informace Rakouské Akademie věd a profesorem na Vídeňské univerzitě.

Matematika



Airy, George Biddell (1801–1892), anglický matematik a královský astronom. Modernizoval observatoř v Greenwichi. Kdyby neignoroval výpočty Johna Couche Adamse, mohl se stát objevitelem Neptunu. Zlepšil dráhové elementy Venuše a Měsíce, studoval interferenční proužky, matematicky popsal duhu a vypočetl hustotu Země z kyvů kyvadla umístěného v hlubinném dole. V matematice jsou po něm pojmenovány Airiho funkce. Studoval v Cambridgi, kde se po třech letech stal profesorem, později ředitelem observatoře v Cambridgi. V roce 1834 byl předsedou mezinárodní komise pro míry a váhy. Funkci královského astronoma zastával v letech 1835–1881.



Bessel, Friedrich Wilhelm (1784–1846), německý matematik a astronom, ředitel observatoře v Königsbergu. Změřil polohy 50 000 hvězd. Jako první změřil paralaxu (zdánlivou změnu polohy hvězdy na pozadí způsobenou pohybem Země kolem Slunce), šlo o hvězdu 61 Cygni. Paralaxu využíval pro výpočet vzdálenosti blízkých hvězd. V roce 1844 předpověděl na základě změn polohy Síria existenci jeho malého průvodce, Síria B. Bylo to první použití gravitačního zákona mimo Sluneční soustavu.

Tento průvodce byl objeven v optické dílně bratří Clarků roku 1862 při testu objektivu o průměru 45 cm. Bessel systematicky studoval matematické funkce, které zavedl Daniel Bernoulli, dnes se jim říká Besselovy funkce. Je po něm pojmenována planetka Bessel.



Cauchy, Augustin Louis (1789–1857), francouzský matematik, který napsal 789 prací. Množstvím ho předčili pouze Leonhard Euler a Arthur Cayley. Do matematiky přinesl preciznost a důkladnost. Vymyslel jméno pro determinant. Systematizoval své studie a brzy na to definoval limitu, spojitost a konvergenci. Cauchy nezávisle na Jean-le-Rondu d'Alembertovi založil komplexní analýzu a spolu s Bernhardem Riemannem odvodili důležité Cauchyho-Riemannovy podmínky pro existenci derivace v komplexní analýze.



Dirichlet, Johann Peter Gustav Lejeune (1805–1859), belgický matematik, který žil a pracoval především ve Francii a později v Německu. Po smrti Gausse mu byl nabídnut jeho post v Göttingen. Zabýval se řešením Fermatova teorému (neexistence řešení rovnice $x^n + y^n = z^n$ v celočíselném oboru) pro $n = 5$ a 14. Studoval polynomiální rovnice a intenzivně se zabýval teorií čísel. V mechanice studoval potenciály rovnovážných systémů. Hledal řešení Laplaceovy rovnice s pevně danými okrajovými podmínkami (dnes nazývanými Dirichletovy podmínky). Dále se zabýval konvergencí trigonometrických řad, které se používaly k řešení parciálních diferenciálních rovnic. Při důkazu konvergence je klíčová funkce nazývaná Dirichletovo jádro.

Euler, Leonhard (1707–1803), viz sekce Teoretická mechanika



Fourier, Jean-Baptiste Joseph de (1768–1830), francouzský fyzik a matematik. Spolu s dánským fyzikem H. Oerstedem sestavili z bismutových a antimonových destiček zdroj napětí podobný Voltovu sloupu a zkoumali termoelektřinu. Ve spisu *Theorie analytique de la chaleur* z roku 1822 matematicky zpracoval teorii vedení tepla, a tím přispěl k rozvoji parních strojů. V uvedené práci položil základ tzv. Fourierovy metody řešení parciálních diferenciálních rovnic s danými okrajovými podmínkami. Ukázal, jak silným matematickým nástrojem v matematické fyzice a matematické analýze jsou Fourierovy řady, kterými lze nahradit periodické funkce na konečném intervalu. Pro neperiodické funkce zavedl Fourierovu trasformaci. Zabýval se statistikou a teorií pravděpodobnosti. Fourierovo dílo je příkladem toho, jak vyvolaly požadavky fyziky významný pokrok matematiky.



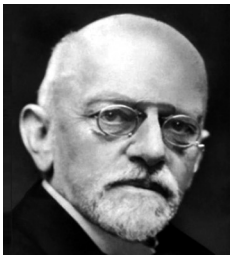
Gauss, Karl Fridrich (1777–1855), německý matematik, který je občas nazýván princem mezi matematiky. Byl fenomenálním dítětem, ve třech letech upozornil otce na chybu při výpočtu mzdy a řekl mu správný výsledek. Když byl ve škole a vyučující jim zadal sečíst čísla od 1 do 100, odvodil formuli pro součet aritmetické řady. Podle Gausse se ve statistice nazývá Gaussovo rozdělení. V integrálním počtu je na jeho počest pojmenována Gaussova věta pro převod plošného a objemového integrálu.

Gauss dovedl k dokonalosti zobrazování komplexních čísel v rovině, kterou dnes nazýváme Gaussova rovina. Podle Gausse je také pojmenována jednotka indukce magnetického pole gauss. Zabýval se teorií čísel, integrálním a diferenciálním počtem, teorií čísel, geometrií, matematickou analýzou, elektrostatikou, astronomií, optikou, geodézií a mnoha dalšími obory přírodních věd. Stěžejní dílo z teorie čísel (*Disquisitiones Arithmeticae*) napsal již v 21 letech.



Green, George (1793–1841), britský matematik a fyzik, který se zabýval pevnými látkami. V matematice se zabýval využitím vícerozměrných integrálů k popisu elektromagnetického pole. Odvodil Gaussovu větu ve dvou dimenzích nezávisle na Michailu Vasiljoviči Ostrogradském. Po Greenovi je pojmenována Greenova funkce – řešení parciální diferenciální rovnice s jednotkovým impulsem na pravé straně. Žil v Sneintonu, který je dnes součástí Nottinghanu. Pracoval zde jako mlynář, nicméně našel zalíbení v matematice, které se jako samouk věnoval stále více a více. Nakonec se rozhodl matematiku studovat a v roce 1832 byl přijat téměř ve svých 40 letech do Cambridge.

Hamilton, William Rowan (1805–1865), viz sekce Teoretická mechanika



Hilbert, David (1862–1943), německý matematik, který se zabýval problémy geometrie (jsou po něm pojmenovány Hilbertovy prostory používané v kvantové teorii), teorií čísel, matematickou logikou, diferenciálními rovnicemi. Jeho záběr byl skutečně enormní. Je spoluzakladatelem variačního počtu. Ve fyzice se pokoušel řešit problém tří těles. V roce 1900 zformuloval 23 zásadních matematických problémů jako výzvu k řešení ve 20. století. Některé z nich zůstaly dodnes nevyřešeny. Hilbert studoval na Königsbergzské univerzitě.



Kronecker, Leopold (1823–1891), německý matematik, zabýval se teorií čísel, grup a kvadratických forem, diferenciálními rovnicemi, teorií pravděpodobnosti, determinanty a eliptickými funkcemi. Zejména se snažil nacházet souvislosti mezi jednotlivými matematickými disciplinami. Stal se slavný výrokem „Bůh stvořil celá čísla, vše ostatní je výsledkem lidské práce“. Studoval také astronomii, chemii, meteorologii. V roce 1860 se stal členem Berlínské akademie a začal přednášet na univerzitě. Jeho přednášky ale prý byly jen obtížně sledovatelné. Po Kroneckerovi je pojmenováno Kroneckerův symbol δ_{kn}, který je roven 1, pokud je $k = n$, a 0, pokud je $k \neq n$.



Ladyženská, Olga Alexandrovna (1922–2004), ruská matematička, která se zabývala parciálními diferenciálními rovnicemi, zejména v oblasti proudění tekutin. Zkoumala diferenční schémata pro numerické simulace proudění na počítači za pomoci Navierovy-Stokesovy rovnice. Dále se zabývala regularitou parabolických a eliptických parciálních diferenciálních rovnic. Zkoumala řešení parciálních rovnic ve smyslu distribucí a jako jedna z prvních formulovala problematiku tzv. slabých řešení

těchto rovnic. Za své práce získala v roce 2002 Lomonosovovu zlatou medaili. Je autorkou více než dvouset vědeckých prací, z toho šesti monografií.



Laplace, Pierre Simon de (1749–1827), francouzský matematik a fyzik, který shrnul matematické poznatky všech svých předchůdců v astronomii v pěti svazcích díla *Mécanique Céleste* (Nebeská mechanika) z let 1799–1825. Laplace systematizoval a dále rozvíjel teorii pravděpodobnosti ve svém dalším díle *Essai Philosophique sur les Probabilités* (1814). Jako první vypočetl Gaussův integrál jako odmocninu z π. Také studoval integrální transformaci, dnes nazývanou Laplaceova transformace. K dokonalosti ji dovedl Oliver Heaviside. Laplace se také podepsal na Lavoisierově kalorimetrické teorii. Navrhl kalorimetr pro měření měrných tepel mnoha látek. Objevil a zavedl gravitační potenciál a ukázal, že ve vakuu ho je možné spočítat pomocí Laplaceovy rovnice. Poté, co byl Napoleonem jmenován ministrem vnitra, byl zanedlouho propuštěn se slovy: „*Přinášíte nekonečně malou naději k vyřešení velkých problémů.*“



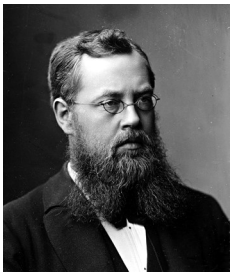
Laurent, Pierre Alphonse (1813–1854), francouzský matematik, který zobecnil Taylorův rozvoj funkcí i na záporné mocniny, což umožnilo popsat funkce komplexní proměnné v mezikruží mezi póly. Dále se zabýval polarizací světelných vln. Otec byl Francouz, matka Angličanka. Laurent vystudoval pařížskou polytechniku École Polytechnique a stal se vojenským inženýrem. Z počátku působil na univerzitě v Métách, později byl odvelen do Alžíru, kde se účastnil alžírské války. Vrátil se roku 1840, šest let dohlížel jako inženýr na rozšiřování přístavu Le Havre. V roce 1846 navrhl Cauchy Laurenta za člena akademie věd, ale návrh neprošel. Laurentovy práce byly publikovány až po jeho smrti.



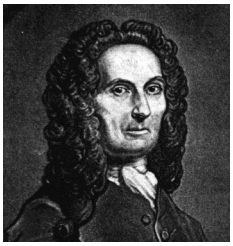
Legendre Adrien-Marie (1752–1833), všestranný francouzský matematik, zabýval se například teorií čísel, řešením diferenciálních rovnic a eliptickými integrály. Na jeho práce navazovali Niels Henrik Abel a Fridrich Gauss. Zobecnil pojem faktoriálu na gama funkci. Nalezl Legendreovu duální trasformaci, která převede Lagrangeovy rovnice na Hamiltonovy. Jsou po něm pojmenovány Legendreovy polynomy, které jsou důležité při řešení vlastních čísel Laplaceova operátoru na sféře. Vydal rozsáhlé třídílné pojednání *Exercices de Calcul Intégral*, kde je zformulována většina jeho důležitých výsledků.



Levi-Civita, Tullio (1873–1941), italský matematik a fyzik. Zpřesnil Riemannův vztah pro počet prvočísel v daném intervalu. Zabýval se také aplikací diferenciálního a tenzorového počtu v obecné relativitě. Na jeho počest je pojmenován Levi-Civitův tenzor (totálně antisymetrický tenzor třetího řádu). Spolu s Weylem se pokoušel o vytvoření jednotné teorie elektromagnetického pole a gravitace. Jeho záběr byl nesmírně široký, zabýval se i nebeskou mechanikou, zejména problémem tří těles, kvantovou teorií (Diracovou rovnicí), hydrodynamikou a dalšími tématy.



Lie, Marius Sophus (1842–1899), norský matematik zabývající se teorií grup a jejímu významu pro geometrii a geometrické transformace. Spolupracoval s Oskarem Kleinem a Peterem Sylowem. Připravil publikaci dosud neznámých prací Nielse Abela (také norský matematik) o grupách. Dále se věnoval vlastnostem parciálních diferenciálních rovnic z hlediska symetrií. Zavedl Lieovy grupy a Lieovu algebru. Studoval v Berlíně, kde získal stipendium. Doktorát obdržel na Univerzitě v Christianě (dnešní Oslo) v roce 1871. V roce 1878 se stal čestným členem Londýnské matematické společnosti, v roce 1892 členem Francouzské akademie věd a v roce 1895 zahraničním členem britské Královské společnosti v Londýně. Téhož roku se stal také členem americké Národní akademie věd.



Moivre, Abraham de (1667–1754), francouzský matematik, který položil základy teorie pravděpodobnosti. Jeho dílo, které vydal v roce 1711, neslo název *Philosophical Transactions*. Později bylo rozšířeno na *Doctrine of Chances* (vyšlo v roce 1718). Obsahovalo důležité poznatky, Stirlingovu formuli a Gaussův integrál. Také publikoval Moivreovu větu, podle které lze vypočítat mocniny a odmocniny komplexních čísel. Byl přítelem Isaaca Newtona, Edmonda Halleye a Jamese Stirlinga.

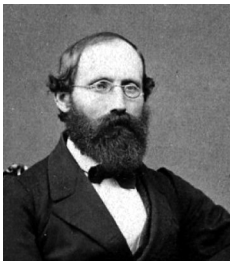


Morgan, Augustus de (1806–1871), britský matematik, který se zabýval především teorií množin a matematickou logikou. Z této oblasti pocházejí jeho známé de Morganovy vzorce. Zformuloval také korektní postup, jak provádět důkaz matematickou indukcí. Přispěl výraznou měrou i k teorii kvaternionů (zobecnění komplexních čísel na čtveřice), jimiž se zabýval od samotného počátku. Narodil se v Indii rodině britských kolonizátorů. Vystudoval v Cambridgi. Většinu své kariéry strávil na Londýnské univerzitě, kde se stal profesorem matematiky.

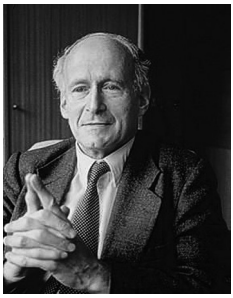


Pfaff, Johann Friedrich (1765–1825), německý matematik, který byl předchůdcem Friedricha Gausse. Pfaff vystudoval Göttingenskou univerzitu, později studoval v Berlíně astronomii pod vedením Johanna Bodeho. Počítal údaje o poloze astronomických objektů. V roce 1788 se stal profesorem matematiky na Univerzitě v Helmstedtu. Pracoval zde až do zrušení univerzity v roce 1810. Útočiště poté nalezl na Univerzitě v Halle, kde pracoval do konce života. Zabýval se matematickými řadami a integrálním počtem. Nejvýraznější úspěchy dosáhl při studiu parciálních diferenciálních rovnic prvního řádu. Systematicky analyzoval diferenciální formy, které dnes nesou jeho jméno.

Riemann, Bernhard George Fridrich (1826–1866), německý matematik (zemřel v Itálii). Vytvořil významné práce v diferenciální geometrii, komplexní analýze a matematické fyzice. Jeho práce umožnila vznik obecné relativity. Zabýval se také abelovskými funkcemi, eliptickými integrály a byl vynikajícím pedagogem. Jeho vliv na matematiku byl obrovský. Riemann studoval zpočátku teologii. V roce 1846 sehnal jeho otec dostatek prostředků, aby mohl začít studia na Univerzitě v Göttingen, kde navštěvoval



přednášky Gausse. V roce 1847 odešel studovat na dva roky do Berlína. V roce 1849 vrátil do Göttingen. Zde se v roce 1857 stal mimořádně jmenovaným profesorem. Je po něm pojmenováno několik desítek matematických pojmů, které objevil nebo vyvinul: především jde o neeuklidovskou Riemannovu geometrii, kterou začal budovat v roce 1854 a která umožnila pozdější vznik obecné relativity a Riemannův tenzor křivosti popisující vlastnosti této geometrie. Dále jsou po Riemannovy pojmenovány: Cauchy-Riemannovy podmínky pro existenci derivace komplexní funkce, zobecněný Riemannův integrál, Riemannův-Stiltiesův integrál, Riemannova zeta funkce, Riemannova theta funkce, Riemannova sféra, Riemannův povrch a mnohé další. Riemannovo jméno nese také kráter na Měsíci a planetka 4167 Riemann.



Schwartz, Laurent (1915–2002), francouzský matematik, průkopník teorie distribucí na západní straně železné opony. Distribuce jsou fnkce, které mají smysl jen ve skalárním součinu s tzv. testovací funkcí. Čím lepší vlastnosti mají testovací funkce, tím „divočejší“ vlastnosti může mít původní funkce. Prostor testovacích funkcí se dnes zazývá Schwartzův (Sobolevův) prostor. Schwartz vystudoval prestižní francouzskou univerzitu ENS (École Normale Supérieure). Několik let vyučoval na Pařížské polytechnice. Věnoval se také popularizaci fyziky a matematiky. Vystupoval proti totalitnímu Stalinovu režimu v Sovětském svazu.



Schwarz Hermann Amandus (1843–1921), německý matematik zabývající se komplexní analýzou, variačním počtem a diferenciální geometrií. Schwarz studoval původně chemii v Berlíně, ale nakonec se pod vlivem významného matematika Karla Weierstrasse rozhodl studium chemie ukončit a začal studovat matematiku. Pracoval na Univerzitě v Halle, poté na Spolkové vysoké technické škole v Curychu (ETH). V matematice je po něm pojmenováno Schwarzovo mapování a také Schwartzovo lemma někdy též nazývané Cauchyho-Schwarzova nerovnost.

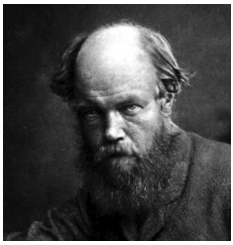


Sobolev, Sergej (1908–1989), sovětský matematik zabývající se matematickou analýzou a diferenciálními rovnicemi. K jeho nejvýznamějším příspěvkům patřila formulace teorie distribucí, kterou rozvinul na východní straně železné opony nezávisle na francouzském matematikovi Lauarentu Schwartzovi. Jako první zformuloval, co je to slabé řešení parciální diferenciální rovnice (řešení ve smyslu skalárního součinu). Tento koncept později detailně rozvedl Schwartz. Sobolev vystudoval Leningradskou univerzitu a poté působil na řadě sovětských univerzit. Byl oceněn zlatou Lomonosovovou medailí. Samozřejmostí bylo také ocenění Hrdina socialistické práce.

Stokes, George Gabriel, sir (1819–1903), irský matematik a fyzik. Studoval mechaniku kontinua, vlny v pružných tělesech, akustiku, optiku, ohyb vlnění, polarizaci atd. Na jeho počest je základní rovnice mechaniky kontinua nazvána Navierova-Stokesova. Kromě hydrodynamiky se zabýval měřením změn gravitačního pole na povrchu Země. Jeho zájem překročil práh fyziky, zabýval se také chemií a botanikou. Vystudoval



Pembrokeovu kolej v anglické Cambridgi, kde v roce 1849 získal profesuru. Jsou po něm pojmenovány: Navere-Stokesova rovnice (pohybová rovnice tekutiny), Stokesova věta (převod mezi plošným a křivkovým integrálem), jednotka viskozity stokes, Stokesův vektor (popisuje polarizaci), Stokesův posuv (mezi absorpční a emisní čárou), Stokesova linie (separatrisa v komplexní rovině) a Stokesův zákon (viskózní síla na těleso pohybující se v tekutině).



Tait, Peter Guthrie (1831–1901), skotský matematik a fyzik, průkopník termodynamiky. Spolu s Kelvinem sepsal pojednání *Treatise on Natural Philosophy*. V matematice se zabýval topologií, teorií grafů, teorií uzlů a kvaterniony. Ve známost vešel jeho spor s Maxwellem ohledně pojmenování a označení vektoru tvořeného parciálními derivacemi funkce. Nakonec zvítězil Taitův návrh říkat příslušnému operátoru nabla podle asyrské harfy. Tait vystudoval Edinburghskou univerzitu, poté pokračoval ve studiích v Cambridgi.



Taylor, Brook, sir (1685–1731), anglický matematik, zformuloval metodu polynomiálního rozvoje funkcí, známou jako Taylorova řada. Taylorovy řady byly zobecněny Pierrem Alphonsem Laurentem. Taylor se také zabýval konečnými diferencemi, které jsou dnes základem mnoha numerických metod. Za pomoci diferencí zjišťoval pohyb kmitající struny. Kromě matematiky se věnoval i fyzice (magnetizmu a kapilárním jevům), filosofii a náboženství. Taylor vystudoval matematiku v Cambridgi. V roce 1712 byl zvolen členem Královské společnosti.

Rejstřík pojmů

absolutní nula 125, 136, 141
adiabatické přiblížení 68–70
adiabatický invariant 67
algebra
  Lieova 287
  vnější 338
antičástice 13, 126, 202, 205, 210, 214, 216, 229, 385, 388
atraktor 86, 89
  bruselátor (2D, 4D) 90, 91
  Lorenzův 92
  podivný 90, 92
bariéra a jáma 131, 155
  Coulombova 131
  pravoúhlá 155–157
  trojúhelníková 164
bifurkace 83, 381
  Hopfova 85
bispinor 210, 217–218
Bellovy nerovnosti 236–239
Benoixonovo kritérium 90
Bohrův model 115
bosony 197, 224, 226, 291–306
bra 296
brachystochrona 19, 31
Brillouinova zóna 162–163
bruselátor 90, 91
Cauchyho
  fundamentální věta 260–261
  hlavní hodnota 265, 267
  integrální formule 268
  -Lorentzovo rozdělení 349
  -Riemannovy podmínky 260
Curieova teplota 84
časový vývoj 93, 102, 179–183
číslo
  vlastní, charakteristické 74–75, 77–79, 118, 121, 138, 142, 145, 149, 159, 164, 168, 171, 176, 181, 206, 224, 254, 295, 309–314, 344, 345
čtyřvektor 42, 99, 104, 201, 293–294
dekoherence 231–233
délkový element 246
derivace
  konvektivní 318
  složené funkce 244
  ve směru 317
dipólový moment (dipól)
  elektrický 103
  magnetický 48, 103
diferenciální forma 357–361
Diracova symbolika 295–315
Diracovo moře 216
disperze 200, 203, 228–229
distribuce
  Diracova 348
  temperovaná 350
divergence (operátor) 320
druhé kvantování 225–230
dynamická proměnná 117–125
elektron 176, 205, 218
element míry 339
elipsa 37, 53, 55, 69, 362
energie
  disipace 61
  kinetická 23, 247
  potenciální 23, 28
  tepelná 22, 61
  záporná 53
  zobecněná 30, 35
entropie 83, 269, 321, 393
entropická síla 269
EPR paradox 234–236
excentricita
  normání 362
  numerická 53, 363
experiment (y)
  Aharonův-Bohmův 187
  DAMA/Libra 193
  dvojštěrbinový 186
  Galileo Galileie 11
  KamLAND 185
  Machův-Zehnderův 190
  MINOS 185
  se symetrií 27
  Sternův-Gerlachův 197–198
fázový portrét 76
fázový přechod
  Curieův 84
  prvního druhu 83
  druhého druhu 83–84
fermiony 224, 225, 227
Feynmanovo zúžení (slash) 212
foton 112, 113, 125, 190, 231–239

Fourierova
  řada 303, 307, 315, 342, 351
  transformace 351–354
frekvence
  cyklotronní 45
  úhlová 37, 114, 1832
funkce
  Airiho 165
  Besselova 164, 341–344
  Greenova 354
  Hamiltonova 34, 71–73
  holomorfní 260
  Chandrasekharova 346
  chybová 346
  kulová 176, 344
  Lagrangeova 20–23, 108, 219–222
  Rayleighova disipační 61, 64
  speciální 341
  zobecněná 348
funkcionál 20, 22, 31
gradient 317
gravitace 34, 50, 56, 164
gyrace 45
Heisenbergovy relace neurčitosti 111, 115, 124–126, 128, 151
helicita
  hustota 328–329
  integrální 328–329
homogenita prostoru 31
hranice kvantového světa 135
hustota pravděpodobnosti 38, 143, 155
hybnost 28
hyperbola, viz kuželosečky
hypernáboj 199
chemická reakce 90–91, 94–95
index
  kovariantní 291
  kontravariantní 291
  zvyšování a snižování 292
integrace per partes 337
integrační faktor 81, 82, 360
integrál
  objemový 336
  křivkový 340
  plošný 334
  po drahách 189
interpretace
  holografická 135
  klasická 134
  kodaňská 132–133
  mnohosvětová 134
  související s vědomím 135
  statistická 120
inverzní úloha 63–66
izoplocha 245, 317, 318
izospin 27, 28, 198–199
izotropie prostoru 31
jáma
  konečná 152–155
  nesymetrická 131
  nekonečná 150–152
  pravoúhlá 131, 150, 152
  sférická 131
  symetrická 131
jev
  Aharonův-Bohmův 187–189
  Comptonův 113
  Comptonův inverzní 113
  dualizmus vln a částic 13, 110
  fotoelektrický 13, 110, 112, 142
  ohyb elektronů 113
  tunelový 132, 155, 157
  záření černého tělesa 111, 121, 370
Ljapunova stabilita 86
Ljapunovův koeficient (exponent) 86
Keplerova úloha 50–55
ket 296
koeficient
  odrazu 157
  propustnosti 157
kompatibilita 117, 122–124
komplexní čísla
  goniometrický tvar 250
  kartézský tvar 248
  reprezentace 248
komplexní sdružení 249
komutátor 120, 122, 168, 192, 201, 206, 215, 288, 290, 300–301
konfigurace 18–18
konfigurační prostor 17
konstanta
  Planckova 121
konvoluce 278, 352
kovariance 102
kvantový
  ping-pong 164
  stav 117
kuželosečky 362
  elipsa 362
  hyperbola 363
  parabola 364
  parametr 363
kvantová interference 135, 183, 186
kvantové číslo
  hlavní 176–178
  izospin 27, 28, 198–199
  magnetické 171
  magnetické spinové 197

radiální 177
spin 197
vedlejší 171–172
kyvadlo 17, 24, 26, 31, 48, 67, 126
kvaterniony 257
Lagrangeovy body 56–60
Larmorův poloměr 45, 70, 256
Laueho-Langevinův ústav 165
Lieova algebra 287
obecně 287
strukturní koeficienty 289
limitní cyklus 86, 87, 90
LS vazba 197
Machův-Zehnderův interferometr 190, 231–233
makrosvět 110, 118, 133, 135, 186
matice
antisymetrická 279
C 214
Diracovy 208, 212–214
rozptylu 159
stability 76–80
symetrická 279
γ^5 214–215
Σ 215
maticová mechanika 118, 147
mechanický systém 16
metoda potenciálu 81
metrika
metrický tenzor 339
Minkowského metrika 213, 293
mikroskop
elektronový 110, 113, 114
elektronový holografický 189
rastrovací tunelový (STM) 157–158
mikrosvět 110, 111, 117, 132
míra 339
množina
hustě pokrytá 89
chaotická 89
invariantní 89
otevřená 88
uzavřená 88
model (y)
Bohrův planetární 114
Kronigův-Penneyův 160
moment hybnosti 28, 169
násobnost pólu 262
nedeterminizmus 111
nekomutativnost 111, 118, 157, 186
nelineární dynamický systém 74–97
nerozlišitelné částice 223
nestabilní
ohnisko 77, 85, 96
sedlo 77, 95
uzel 77
normální uspořádání 229
nulové kmity 141
numerické řešení 40, 165, 178, 331, 332, 347, 382, 387, 391, 397, 401
odchylka
střední kvadratická 124
ohyb elektronů, viz jev
okolí bodu 88
oktoniony 257
operátor
anihilační 198, 144–146, 169, 226, 230
derivace 303
evoluční (čas. vývoje) 179
funkce 298, 312
Hermitův 302
hybnosti 129, 203, 205
inverzní 299
komutátor 122, 288, 290, 300
kreační 144, 224–226, 326
křivočaré souřadnice 367
kvadrát 298
Laplaceův 174, 175, 204,
mocniny 298
odchylky 124
počtu částic 226
polohy, souřadnice 129, 148
posuvný 169
projekční 303
rychlosti 209
sdružený 299
spektrum 129–130, 138, 309–313
unitární 301
výměny 223
viriálu 193
oscilace neutrin 184–185
oscilátor
harmonický 36, 40, 69, 75, 125, 138
klasický 270
kvantový 138, 272
nelineární 78
sférický harmonický 132, 167, 177
van der Polův 87
oscilující rovnováha 95
paprsek 118, 145, 297
parabola, viz kuželosečky
parametr
kuželosečky 363
uspořádání 84
skrytý 134, 231–239
Pfaffovy diferenciální formy 357–361
Poissonovy závorky 39, 102, 110, 121, 248
polarizace 103, 126, 234, 298

pole
  cirkulace 325–327
  elektromagnetické 103, 218
  kanonicky sdružené 102
  Kleinovo-Gordonovo 200
  potenciál 103–104
  skalární 98
  tok 320–323
poloosa 69, 345
póly 262
polynom
  Hermitův 142, 276
  Laguerrův 204
  Legendreův 175
potenciál
  Coulombův 132, 167, 177
  definice 81
  dna koňakové láhve 82–84, 101
  efektivní 53, 57
  harmonický 36, 138
  periodický 160
  sféricky symetrický 243
  skalární 98, 103
  vektorový 103, 187
pozitron 216
pravidlo vývrtky 283
princip
  Caratheodoryho 361
  Hamiltonův 20, 70, 189
  holografický 268
  integrální 16
  korespondence 120, 180, 191, 201, 209, 229
  nejmenší akce 20, 189
  Pauliho vylučovací 224–225
  superpozice 118, 200, 231
problém
  dvou těles 50, 55
prostor
  fázový 35
  Hilbertův 118, 129, 138, 149, 232, 295
  k-prostor 163
  komplexních N-tic 275
  komplexních funkcí L^2 276
  komplexních posloupností l^2 276
  konfigurační 17, 35
  lineární vektorový 270
  reálných N-tic 274
  reálných trojic 273
  Schwartzův 350
  Sobolevův 350
  unitární 277
první diferenciál 244
rapidita 195
reciproká mříž 163
relace
  disperzní 200, 203, 228
  komutační 121–123, 125, 129, 144
  neurčitosti 111, 115, 123, 126, 151
reprezentace
  obsazovacích čísel 225
  skalární 173
  spinorová 173
  vektorová 173
  x-reprezentace 174
reziduum 262–263
  v nekonečnu 263
rotace 194, 253
  generátor 254
  operátor rotace 254
  v rovině 253
rovnice
  Airiho 164
  autonomní 74
  difúze 313, 355
  Diracova 205–215
  evoluční 93–97
  Hamiltonova-Jacobiho 71–73
  Hamiltonovy kanonické 33–40, 248
  Helmholtzova 341–344
Kleinova-Gordonova 200–205
  Lagrangeovy 20
  Lagrangeovy polní 98
  logistická 96
  Maxwellovy 23, 103–108
  pohybová 16, 48, 55, 57, 61
  pohybová Lorentzova 43, 107
  Poissonovy 39
  Schrödingerova 129, 139, 141, 150
  Schrödingerova časová 181, 200, 205
  sin-Gordonova 101
  teplotní difúze 313
  vlnová 99
  Volterrova-Lotkova 96
rozdělení
  Cauchyho-Lorentzovo 349
  Maxwellovo 346
rozptyl 159
rozvoj
  Lauarentův 261
  Legendreův 345, 372
  prvku do báze 306
  Taylorův 36, 76, 260, 268, 299, 317–318, 371, 398
rychlost
  fázová 203
  grupová 203
  plošná 17, 55

úhlová 17, 57
zobecněná 17, 34, 35, 61
sdružení
Diracovo 212
Hermitovo 217, 299
nábojové 216–218
semigrupová podmínka 179
separatrisa 81
síla
Coriolisova 48–50, 57, 60
odstředivá 26, 48, 56–58, 114
tření 61, 65
součin
diadický 291
skalární 271, 292
tenzorový 272, 280, 291
vektorový279
souřadnice
kartézské 16
zobecněné 16, 23, 28, 67, 70, 102
spektrální teorie 309–315
spektrum
degenerované 169, 172, 177, 197, 204
diskrétní 110, 118, 131
ekvidistantní 142, 151
operátoru 129, 309–315
pásové 160
spojité 131
spin 196–199
spinor 173, 208
spojitost 153, 156, 161, 179
stabilita
řešení 76
Ljapunova 86
stabilní
ohnisko 77, 85
uzel 77
střed 77
stacionární bod 76, 85, 90
stav systému
v kvantové teorii 117–118
v mechanice 18
Fockův 225
stopa matice 206–207, 214
střední odchylka 124
stupeň
degenerace 172, 177, 197
volnosti 17, 21–26, 34, 168, 177, 247, 345
sumační konvence 242, 290
susceptibilita 84
symetrie
C 216
levopravá 27, 214
Lorentzova 27, 196
nábojové sdružení 217
rotační 27, 194, 196
translační 28
U(1) 218
$U(1)_{loc}$ 221
systém
dravec a kořist 94
kvantový 117
temná hmota 193, 310
tendence 18
tenzor 290
elektromagnetického pole 104
energie a hybnosti 102
Leviho-Civitův 43, 46
metrický 246, 339
tenzorový gradient 316
teorém
Ehrenfestův první 191
Ehrenfestův druhý 191–192
Emmy Noetherové 27
Fermatův 396
o viriálu 191–193
Wignerův 395
Wignerův-Eckartův 395
tok pravděpodobnosti 202, 210, 222
Tontiho podmínky 64–65
trajektorie
fázová 35, 67, 69, 89, 90
reálná 18
virtuální 18
transformace
Fourierova 127, 163, 201, 352
kanonická 70–73
Laplaceova 262
Legendreova duální 34
Lorentzova 195
rotační 194
zrcadlení 194
trigonometrie 364
úplná množina pozorovatelných 117, 226
vakuum 126, 216
variace (isochronní) 20–21, 71, 98
variance 124
vazba 17, 21
chemická 158
vektorové identity 284
věta
Cauchyho fundamentální 260–261
Lagrangeova o přírůstku 244
o existenci integračního faktoru 360
o pěti ekvivalencích 357
o spektrálním rozvoji 261
reziduová 261

vlastní
  číslo 74, 118, 121, 142, 309
  vektor 309
vodíkový atom 167, 177, 204
volný pád 49, 73
vzdálenost
  dvou bodů 88
  bodu a množiny 88
zákon(y)
  akce a reakce 50, 382
  Ampérův 327
  Coulombův 324
  gravitační 382
  Keplerovy 55
  Rayleighův 383
  setrvačnosti 382
  síly 382
  Stefanův-Boltzmannův 370
  Stokesův 401
zachování energie 19, 29, 38, 126
zachování hybnosti 28, 382
zachování momentu hybnosti 26, 28, 382
zachování parity 395
zachování pravděpodobnosti 202
záření absolutně černého tělesa 13, 111, 113, 121, 383, 392



Literatura

Nahrávky přednášek

server www.aldebaran.cz, sekce studium; portál www.vsprednasky.cz

Navazující učebnice

[1] P. Kulhánek: *Vybrané kapitoly z teoretické fyziky II (Statistická fyzika, Elektromagnetické pole, Relativita)*; AGA 2020, ISBN: 978-80-906638-3-1
online verze: http://www.aldebaran.cz/studium/tf2.pdf

[2] P. Kulhánek: *Vybrané kapitoly z teoretické fyziky III* (*Teorie plazmatu, Numerické simulace)*; AGA 2020, ISBN: 978-80-906638-4-8,
online verze: http://www.aldebaran.cz/studium/tf3.pdf

Teoretická mechanika

[3] M. Brdička, A. Hladík: *Teoretická mechanika*; Academia, Praha 1987

[4] J. Kvasnica a kol.: *Mechanika*; Academia, Praha 1988

[5] L. D. Landau, J. M. Lifšic: *Úvod do teoretickej fyziky 1* (mechanika, elektrodynamika); ALFA, Bratislava 1980

[6] D. Halliday, R. Resnick, J. Walker: *Fyzika; Část 1: Mechanika*; VUTIUM/Prometheus, Brno 2000

[7] W. Greiner: *Classical Mechanics – Systems of Particles and Hamiltonian Dynamics*; Second edition, Springer, 2010

[8] E. Tonti: *Variational Formulations of Nonlinear Differential Equations*; Bull. Sciences Acad. R. de Belgique (1969) pp 137–165, 262–278

[9] N. J. Cornish: *The Lagrange Points*; Montana State University/NASA, 1999; online: http://www.physics.montana.edu/faculty/cornish/lagrange.pdf

[10] T. Münch: *The Three-Body Problem and the Lagrangian Points*; Umeå Universitet Institutionen för Fysik, 2008;
online: http://www.tp.umu.se/space/Proj_08/T_Munch.pdf.

[11] M. Robnik: *Theory of Adiabatic Invariants*; Socrates Lecture Course at the Physics Department, University of Marburg, Germany, 2004;
online: http://www.camtp.uni-mb.si/socrates/marburg2004/robnik.pdf

[12] S. D. Mathur: *The Hamilton-Jacobi Equation*; Ohio State University, 2007.
online: http://www.physics.ohio-state.edu/~mathur/821hj.pdf

[13] P. Kulhánek, J. Maloch: *Inverse Variational Problem for the Rail Plasma Accelerator*; Czech. J. Phys. B37 (1987) 561

[14] E. W. Weisstein: *Lorenz Attractor*; MathWorld – A Wolfram Web Resource; online: http://mathworld.wolfram.com/LorenzAttractor.html

[15] J. Horák, L. Krlín, A. Raidl: *Deterministický chaos a podivná kinetika*; Academia, Praha 2007

Kvantová fyzika

[16] J. Formánek: *Úvod do kvantové teorie I.,II.*; Academia, Praha 2004

[17] J. Formánek: *Úvod do relativistické kvantové mechaniky a kvantové teorie pole*; Karolinum, Praha 2000

[18] R. P. Feynman, R. B. Leighton, M. Sands: *Feynmanovy přednášky z fyziky*, díl 3/3, Fragment, 2006

[19] M. Dušek: *Koncepční otázky kvantové teorie*; Vydavatelství Univerzity Palackého, Olomouc 2002, 238 stran

[20] T. Hey, P. Walters: *Nový kvantový vesmír*; Argo/Dokořán 2003

[21] J. Novotný a kol.: *Základy teorie relativity*; Masarykova Univerzita 2006, online: http://is.muni.cz/elportal/estud/prif/ps06/f5010/zaklady_TR.pdf

[22] P. Cejnar, M. Dušek: *Kvantové hlavolamy I až V*; Vesmír 77/3–7 (1998), online: http://muj.optol.cz/dusek/clanky/popular.htm

[23] B. Simons: *Advanced Quantum Mechanics*; University of Cambridge Course, Cavendish Lab. 2009; online: http://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~bds10/aqp.html

[24] Ch. Kittel: *Introduction to Solid State Physics*; Willey, New York 1996

[25] J. Singleton: *Band theory and electronic properties of solids*; Oxford University Press, 2001

[26] E. W. Weisstein: *Airy Functions*; MathWorld – A Wolfram Web Resource, online: http://mathworld.wolfram.com/AiryFunctions.html

[27] M. V. Fedoryuk: *Airy equation; Encyclopedia of Mathematics*; online: http://www.encyclopediaofmath.org/index.php/Airy_equation

[28] T. Jenke et al.: *Realization of a gravity-resonance-spectroscopy technique*; Nature Physics 7, 468–472 (2011)

[29] H. Batelaan, A. Tonomura: *The Aharonov–Bohm effects: Variations on a subtle theme*; Physics Today **62**/9 38 (2009)

[30] J. S. Bell: *Speakable and unspeakable in quantum mechanics*, Cambridge University Press, 1987

[31] J. A. Wheeler, W. H. Zurek: *Quantum Theory and Measurement*; Princeton University Press, 1983

[32] A. Einstein, B. Podolsky, N. Rosen: *Can Quantum-Mechanical Description of Physical Reality be Considered Complete?*; Physical Review **47** (1935) 777–780

[33] Vojtěch Hála: *Kvantová kryptografie*; Aldebaran bulletin 14/2005; online: https://aldebaran.cz/bulletin/2005_14_kry.php

[34] Petr Kulhánek: *Kvantové počítače*; Aldebaran bulletin 21/2003; online: https://www.aldebaran.cz/bulletin/2003_21_qua.php

[35] Petr Kulhánek: Teleportace; Aldebaran bulletin 33/2017 online: https://www.aldebaran.cz/bulletin/2017_33_tel.php

[36] Serge Haroche: *Manipulace s fotony v dutině a zkoumání hranice mezi klasickým a kvantovým světem*; Čs. čas. fyz. **64** (2014)

[37] Miroslav Havránek: *Strašidelné interakce ve kvantovém světě*; Aldebaran bulletin 19/2020; online: https://www.aldebaran.cz/bulletin/2020_19_kva.php

[38] Jennifer Chu: *Light from ancient quasars helps confirm quantum entanglement*; MIT News 19 Aug 2018; online: http://news.mit.edu/2018/light-ancient-quasars-helps-confirm-quantum-entanglement-0820/

[39] D. Rauch et al.: *Cosmic Bell Test Using Random Measurement Settings from High-Redshift Quasars*; arXiv:1808.05966, 2018; online: https://arxiv.org/abs/1808.05966

Matematika

[40] Jozef Kvasnica: *Matematický aparát fyziky*; Academia 1997

[41] Jiří Kopáček: *Matematická analýza nejen pro fyziky (I až IV)*; Matfyzpress 2010

[42] Pavel Čihák: *Matematická analýza nejen pro fyziky V*; Matfyzpress 2016

[43] Jiří Kopáček: *Příklady z matematiky nejen pro fyziky (I až V)*; Matfyzpress 2017

[44] Karel Rektorys a spol. *Přehled užité matematiky I, II*; Prometheus 2009

[45] Isaac Newton: *Matematické principy přírodní filozofie*; Togga 2020

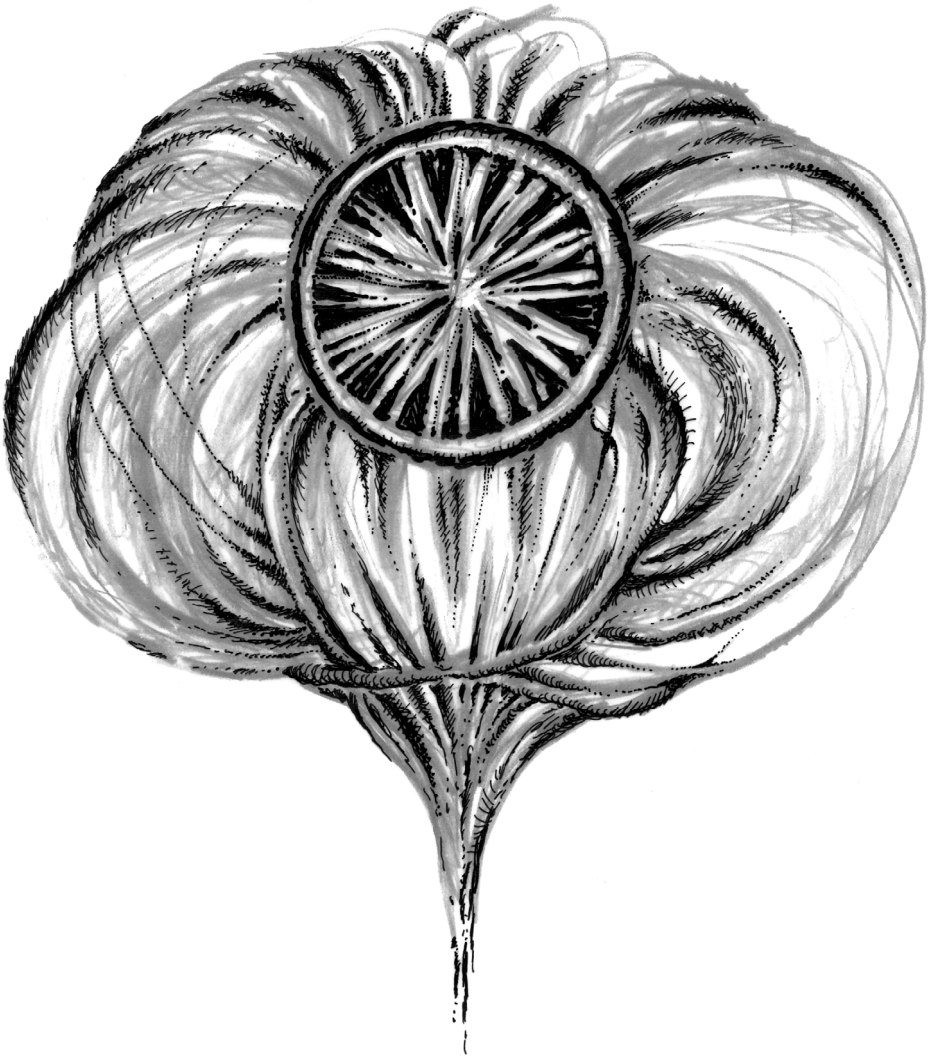
[46] Ján Čižmár: *Dejiny matematiky od najstaršých čias po súčasnosť*; Perfekt 2017

[47] Michael Woolfson, Malcolm Woolfson: *Mathematics for Physics*; Oxford University Press 2006

[48] Alexander Atlant, Jan von Delft: Mathematics for Physicists; Cambridge University Press 2019

[49] Michael Stone: *Mathematics for Physics – A Guided Tour for Graduate Students*; Cambridge University Press 2009

Co najdete v dalších dílech?





Vybrané kapitoly z teoretické fyziky II

Další díl „Vybraných kapitol“ navazuje na úvodní učebnici, kterou právě držíte v rukou. Potřebné matematické základy pro druhý i třetí díl jsou součástí prvního dílu trilogie. Druhý díl je věnován statistické fyzice, elektromagnetickému poli a relativitě. K pochopení statistické fyziky je třeba znát alespoň základy teoretické mechaniky a kvantové teorie. Teorie elektromagnetického pole ukazuje eleganci Maxwellových rovnic a odvozuje z nich jednotlivé fyzikální jevy až po nejrůznější druhy elektromagnetického záření. Poslední část druhého dílu je věnována relativitě, která zcela změnila naše chápání, jak funguje svět kolem nás. Začíná speciální relativitou a pokračuje základy obecné relativity, současné teorie gravitační interakce.

STATISTICKÁ FYZIKA

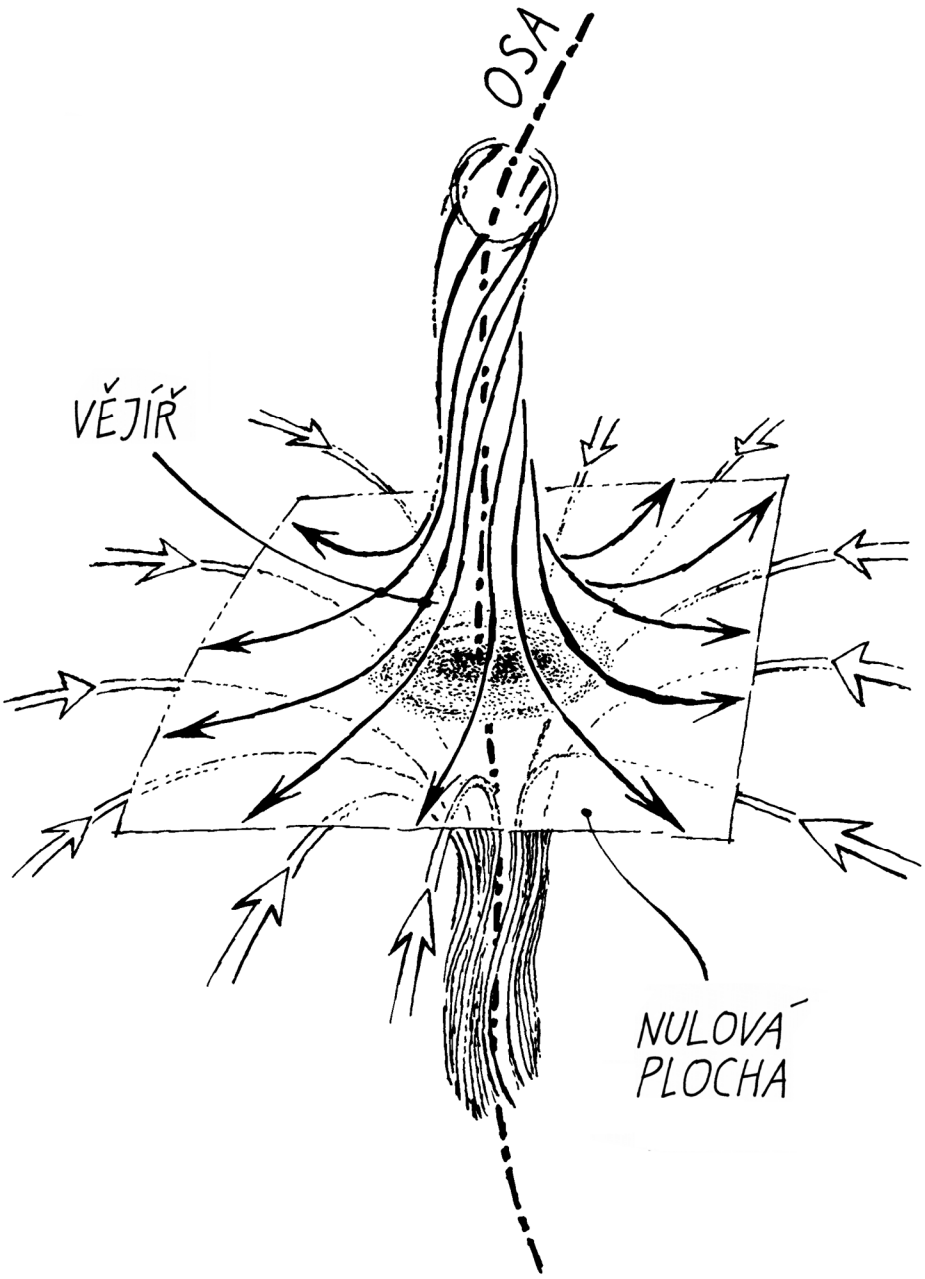
- Vybrané partie z termodynamiky
- Základní pojmy statistické fyziky
- Gibbsův kanonický soubor
- Jednoduché příklady
- Další příklady
- Grandkanonický soubor
- Fermiony a bosony
- Fluktuace a entropie
- Magneticky aktivní systémy

ELEKTROMAGNETICKÉ POLE

- Maxwellovy rovnice
- Elektrostatika
- Magnetostatika
- Zákony zachování
- Elektromagnetické vlny
- Elektromagnetické potenciály
- Elektromagnetické záření
- Pole v rezonanční dutině

RELATIVITA

- Od speciální relativity k principu ekvivalence
- Metrika, kovariantní derivace
- Rovnice geodetiky
- Dilatace času a červený gravitační posuv
- Riemannův tenzor křivosti a Einsteinův gravitační zákon
- Gravitační vlny
- Schwarzschildovo řešení a pohyby ve Schwarzschildově geometrii
- Strhávání časoprostoru rotujícím tělesem
- Úvod do kosmologie


OSA
VĚJÍŘ
NULOVÁ
PLOCHA

Vybrané kapitoly z teoretické fyziky III

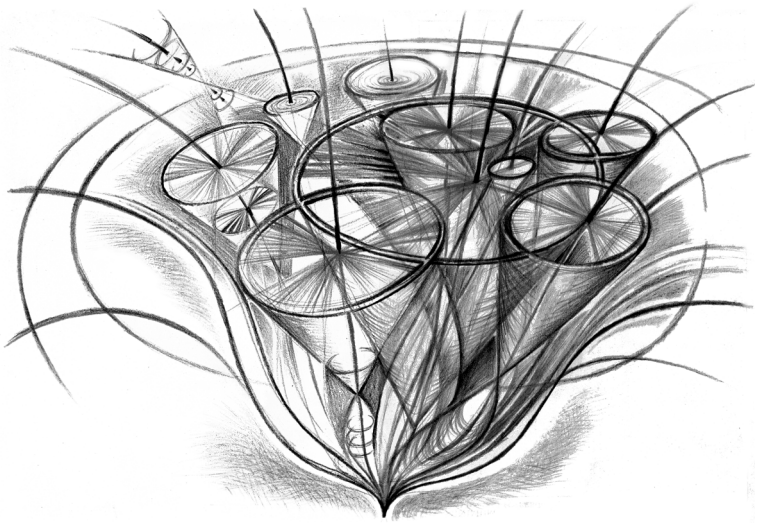
Třetí a poslední díl „Vybraných kapitol“ je věnován fyzice plazmatu a numerickým metodám řešení fyzikálních úloh. Fyzika plazmatu je bouřlivě se rozvíjejícímu odvětvím vědy, které umožňuje chápat nejen procesy ve vesmíru. Lidstvu také přináší převratné technologie, které se stávají součástí našeho běžného života. Fyzika plazmatu umožňuje nové metody léčby pacientů v medicíně. Za základ této části knihy posloužila dřívější učebnice „Úvod do teorie plazmatu“, která byla rozšířena o nelineární partie, zejména solitony, turbulenci a fyziku ubíhajících elektronů, jež mohou snadno poškodit naše drahá zařízení. Druhá část posledního dílu „Vybraných kapitol“ je věnována naprostým základům numerických simulací fyzikální procesů. Razantní nástup výpočetní techniky umožňuje fascinující simulace procesů probíhajících i za extrémních podmínek, které jsou často experimentálně nedosažitelné.

TEORIE PLAZMATU

- Pohyby nabitých částic
- Adiabatické přiblížení
- Drifty
- Pohyby ve speciálních konfiguracích
- Magnetohydrodynamika
- Helicita
- Tekutinové dynamo
- Přepojení siločar
- Rovnováha plazmatu
- Rázové vlny
- Lineární vlny v plazmatu
- Elektromagnetický komplex
- CMA diagram
- Faradayova rotace
- Magnetoakustické vlny
- Nestability v plazmatu
- Statistický popis plazmatu
- Fokkerova-Planckova rovnice
- Nelineární jevy: turbulence, solitony, ubíhající elektrony

NUMERICKÉ SIMULACE

- Pohyby částic
- Schémata pro řešení obyčejných diferenciálních rovnic
- Tvorba diferenčních schémat pro parciální diferenciální rovnice
- Particle in Cell (PIC) simulace
- Řešení polynomiálních rovnic
- Monte Carlo simulace
- Realizace pravděpodobnostního rozdělení
- Simulované ochlazování
- Metropolisova metoda



Petr Kulhánek
Vybrané kapitoly z teoretické fyziky I

(1. Teoretická mechanika, 2. Kvantová fyzika, 3. Matematika pro fyziku)

Žádná část této publikace nesmí být publikována a šířena žádným způsobem
a v žádné podobě bez výslovného svolení autora a nakladatelství AGA.

Autor: prof. RNDr. Petr Kulhánek, CSc.
Grafika a obálka: Ing. arch. Ivan Havlíček
Formát: 165×235 mm, 416 stran, 216 obrázků
Nakladatelství: AGA (Aldebaran Group for Astrophysics)
Nahrávky přednášek: aldebaran.cz (Daniel Handl, FEL ČVUT)
Vydání: druhé, aktualizované a změněné, dotisk 2023, Praha
Aktualizace elektronické verze: 31. října 2024
Tisk: TISK CENTRUM s.r.o.

ISBN 978-80-906638-2-4