OSTRAVSKÁ UNIVERZITA V OSTRAVĚ

VYBRANÉ KAPITOLY Z TEORETICKÉ FYZIKY

DALIBOR DVOŘÁK

OSTRAVA 2003

Tento projekt byl spolufinancován Evropskou unií a českým státním rozpočtem

Recenzenti:

Doc. Ing. Petr Martinec, CSc.
Prof. RNDr. Vilém Mádr, CSc.

Název:	Vybrané kapitoly z teoretické fyziky
Autoři:	Doc. RNDr. Dalibor Dvořák, CSc.
Vydání:	první, 2003
Počet stran:	68
Náklad:	50
Tisk:	Ediční středisko CIT OU

Studijní materiály pro distanční kurz: Vybrané kapitoly z teoretické fyziky
Jazyková korektura nebyla provedena, za jazykovou stránku odpovídá autor.
Určeno výhradně pro kurzy Celoživotního vzdělávání Moravskoslezska

Vydavatel a tisk: Ostravská univerzita v Ostravě,
Systém celoživotního vzdělávání Moravskoslezska

© Doc. RNDr. Dalibor Dvořák, CSc.
© Ostravská univerzita v Ostravě

ISBN 80 – 7042 – 877 – 5

Obsah předmětu

1 ÚVOD 1-5
2 TERMODYNAMIKA A STATISTICKÁ FYZIKA 2-6
2.1 ZÁKLADNÍ POJMY A PRINCIPY 2-6
2.1.1 Termodynamika a statistická fyzika 2-6
2.1.2 Základní pojmy, představy a modely 2-8
2.1.3 Stav termodynamické rovnováhy 2-12
2.2 STATISTIKA A POČET PRAVDĚPODOBNOSTI 2-13
2.2.1 Základní definice a pojmy 2-14
2.2.2 Definice pravděpodobnosti 2-15
2.2.3 Rozdělovací funkce a hustota rozdělení pravděpodobnosti 2-17
2.2.4 Střední hodnota a střední kvadratická odchylka náhodné veličiny 2-18
2.2.5 Gaussovo normální rozdělení 2-19
2.3 ZÁKLADNÍ POJMY A IDEJE STATISTICKÉ FYZIKY 2-20
2.3.1 Výchozí předpoklady a ideje 2-20
2.3.2 Hustota pravděpodobnosti stavu soustavy 2-21
2.4 VYBRANÉ APLIKACE STATISTICKÝCH ZÁKONŮ 2-23
2.4.1 Klasický ideální plyn 2-23
2.4.2 Vnitřní energie ideálního plynu 2-24
2.4.3 Tlak plynu 2-25
2.4.4 Termoemise elektronů – kvantověmechanický ideální plyn 2-26
3 KVANTOVÁ FYZIKA 3-29
3.1 HISTORICKÉ POZNÁMKY 3-29
3.2 VYBRANÉ EXPERIMENTÁLNÍ DŮVODY VZNIKU KVANTOVÉ FYZIKY 3-30
3.2.1 Měrné teplo krystalů 3-30
3.2.2 Fotoelektrický jev 3-31
3.2.3 Comptonův jev 3-31
3.2.4 Stabilita atomu 3-32
3.2.5 Záření absolutně černého tělesa 3-33
3.3 VLNOVĚ KORPUSKULÁRNÍ DUALIZMUS MIKROSVĚTA 3-34
3.3.1 Historický úvod 3-34
3.3.2 Vlnová funkce 3-36
3.3.3 Schrödingerova rovnice 3-38

3.4 MATEMATICKÝ A FORMÁLNÍ APARÁT KVANTOVÉ MECHANIKY 3-39
3.4.1 Operátory, základní pojmy a klasifikace 3-39
3.4.2 Operátorová algebra 3-40
3.4.3 Operátory základních fyzikálních veličin 3-40
3.4.4 Časová změna operátoru. Zákony zachování 3-42
3.4.5 Formální schéma kvantové mechaniky 3-42
3.5 VYBRANÉ APLIKACE KVANTOVÉ MECHANIKY 3-43
3.5.1 Heisenbergovy relace neurčitosti 3-43
3.5.2 Lineární harmonický oscilátor 3-44
3.5.3 Atom vodíku 3-45
3.6 ZÁKLADY RELATIVISTICKÉ KVANTOVÉ FYZIKY 3-47
3.7 SOUSTAVY IDENTICKÝCH ČÁSTIC 3-48
3.7.1 Princip nerozlišitelnosti kvantivěmechanických částic 3-48
3.7.2 Bosony a fermiony 3-48
4 SPECIÁLNÍ A OBECNÁ TEORIE RELATIVITY 4-49
4.1 HISTORICKÉ POZNÁMKY 4-50
4.2 VÝVOJ FYZIKY V 19. STOLETÍ 4-50
4.3 MICHELSON – MORLEYŮV POKUS 4-51
4.4 EINSTEINOVY POSTULÁTY 4-53
4.5 LORENTZOVA TRANSFORMACE 4-53
4.5.1 Odvození Lorentzovy transformace ze základních postulátů 4-53
4.5.2 Vztah mezi Einsteinovým a Galileiho principem relativity 4-55
4.5.3 Minkowského čtyřrozměrný prostoročas 4-56
4.6 PROSTOR A ČAS VE SPECIÁLNÍ TEORII RELATIVITY 4-57
4.6.1 Relativnost současnosti událostí 4-57
4.6.3 Skládání rychlostí 4-58
4.6.4 Dilatace času 4-59
4.6.5 Kontrakce délek 4-60
4.7 ENERGIE A HYBNOST VE SPECIÁLNÍ TEORII RELATIVITY 4-60
4.7.1 Relativistická hmotnost 4-60
4.7.2 Relativistická dynamika a energie 4-62
4.7.3 Ekvivalence hmotnosti a energie 4-62
4.8 ZÁKLADY OBECNÉ TEORIE RELATIVITY 4-63
4.8.1 Princip ekvivalence 4-63
5 DALŠÍ ZDROJE: 5-67

1 ÚVOD

Cíle předmětu

Tento předmět má za cíl seznámit i učitele na ZŠ s těmi partiemi fyziky, které tvoří základ moderní fyziky. Tyto partie se zabývají buď ději a procesy na atomární úrovni – statistická a kvantová fyzika, nebo naopak velmi rozsáhlými soustavami – specielní a obecná relativita. Oba uvedené typy soustav se vymykají naší každodenní zkušenosti, a proto použití obvyklých představ a modelů při popisu dějů a procesů, které v těchto systémech probíhají naprosto selhalo. Byly proto zformulovány nové ideje a vypracovány nové teorie, které se vymykají všem dosavadním představám a zkušenostem. Tyto teorie přinášejí nejen naprosto nezvyklý obraz o přírodě, ale používají i jiný a složitější matematický aparát. Protože současný vědecký a technologický pokrok je založen na výsledcích uvedených teorií, pokládáme za nutné Vás seznámit alespoň s hlavními idejemi těchto teorií.

Po prostudování textu budete znát:

- důvody vzniku uvedených teorií,
- hlavní ideje, ze kterých uvedené teorie vycházejí a základní pojmy, které používají,
- nejdůležitější matematické nástroje při formulaci základních rovnic,
- nejdůležitější výsledky a závěry,
- některé jednoduché aplikace

Budete schopni:

- uvést důvody vzniku uvedených teorií,
- vysvětlit hlavní ideje, ze kterých uvedené teorie vycházejí a základní pojmy, které používají a čím se liší od klasické fyziky,
- demonstrovat na základě jednoduchých aplikací nejdůležitější výsledky a závěry uvedených teorií.

Průvodce studiem.

Při sepisování předkládaného textu se mi vybavily vzpomínky na moje první setkání s moderní fyzikou. Byla to kvantová fyzika a já jsem byl zpočátku zmaten mně nepochopitelnou pojmovou a formální složitostí této teorie. Vždyť atom, polovodič, Mendělejevova soustava prvků – to byly pojmy, které jsem běžně suverénně používal! Ale teprve s postupným porozuměním základních idejí a představ kvantové fyziky jsem pochopil kolik intelektuálního úsilí bylo třeba k pochopení a vytvoření pro mě tak „banálních" pojmů. A já jsem byl překvapen krásou myšlenek a logikou myšlenkových úvah, které byly spojeny se vznikem a vypracováním této teorie. Přál bych Vám, abyste zažili, stejně jako já, ten vzrušující pocit, když náhle porozumíte tomu, co se jevilo zpočátku tajemně a naprosto nepřístupně Vašemu chápání.

Při studiu předkládaného textu doporučuji při prvním čtení přeskočit zpočátku nejasná místa výkladu a vrátit se k nim po přečtení celé kapitoly, kdy získáte představu o její celkové struktuře. Osobně mi pomáhalo pro pochopení tématu pečlivé přečtení řešených příkladů.

2 TERMODYNAMIKA A STATISTICKÁ FYZIKA

V této kapitole se dozvíte:

- základní ideje a modely statistické fyziky
- základy statistiky a počtu pravděpodobnosti
- základní vztahy statistické fyziky
- o postupech při aplikacích metod statistické fyziky na vybraných problémech

Klíčová slova této kapitoly:

Statistická fyzika, pravděpodobnost, částicová struktura, hustota pravděpodobnosti,

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly: 35 hod

2.1 ZÁKLADNÍ POJMY A PRINCIPY

2.1.1 Termodynamika a statistická fyzika

Termodynamika a ***statistická fyzika*** jsou uváděny jako dva samostatné fyzikální obory, mají však mnoho společného a navzájem se ovlivňují a prolínají. Společný je především předmět jejich zkoumání - oba se zabývají vlastnostmi a chováním ***fyzikálních soustav***. Fyzikální soustavou přitom může být šálek kávy, kosmická loď nebo planetární systém. To, co tyto dva obory odlišuje, je ***způsob popisu*** dané fyzikální soustavy.

Termodynamika využívá fenomenologický postup, který bezděčně použije každý, dostane-li např. za úkol popsat svůj pracovní stůl. Řekne asi jak je stůl velký, z čeho je zhotoven, jakou má barvu atd. Při fenomenologickém popisu volíme tedy jisté všeobecně známé pojmy a veličiny - fenomény, jako je velikost, barva, materiál, které upřesňujeme tak, aby co nejlépe popsaly předmět našeho zájmu. Stejně postupuje i termodynamika. Při fenomenologickém popisu používáme ***fyzikální veličiny*** (parametry), jako je např. délka, hmotnost, hustota, elektrická vodivost apod., jejichž pomocí se snažíme co nejlépe popsat předmět našeho zájmu, označovaný jako ***fyzikální soustava***. Aby popis byl co nejobjektivnější a přesný, charakterizujeme zvolené parametry číselnou hodnotou, kterou získáme prostřednictvím ***měření***.

Termodynamika tedy popisuje fyzikální soustavu pomocí ***naměřených hodnot*** zvolených veličin (***parametrů***). Jejich počet a přesnost měření záleží na tom, jak přesný popis dané soustavy vyžadujeme. Přitom musíme vzít v úvahu, že čím větší máme nároky na přesnost popisu, tím více musíme vynaložit úsilí i nákladů. Je tedy rozumné si předem ujasnit, jak přesný popis je pro daný účel dostatečný a podle toho volit rozsah i přesnost měření.

Možné souvislosti a vztahy mezi veličinami použitými k popisu - např. mezi objemem a hmotností, mezi elektrickým proudem a napětím apod. - zjišťujeme v termodynamice tak, že dáváme do souvislostí jejich sobě si odpovídající naměřené hodnoty. Zjistíme-li na základě rozboru naměřených hodnot mezi sledovanými veličinami závislost, označujeme ji jako ***empirickou závislost***.

Postup statistické fyziky se od termodynamiky odlišuje tím, že od samého počátku všech úvah vychází z faktu, že ***všechny látky mají částicovou strukturu*** a skládají se z atomů a molekul.

Část pro zájemce.

Myšlenka o částicové struktuře hmoty se poprvé objevila už v antice. Podle učení řeckého filosofa DEMOKRITA Z ABDÉR (460-370 př.n.l.) a jeho pokračovatele EPIKURA ZE SAMU (341-270 př.n.l.) jsou základem světa dva principy - atomy a prázdno a z nich je vytvořen svět kolem nás. I když je toto tvrzení v souladu s výsledky moderní fyziky, bylo ve své době pouze hypotézou a spekulací.

Myšlenka o atomové struktuře hmoty se objevuje znovu až koncem 17.století v pracích R. BOYLA (1627-1691) a byla dále rozvíjena zejména M. V. LOMONOSOVEM (1711-1765) a J. DALTONEM (1766-1844). Objev elektronu a rozvoj statistické fyziky ve druhé polovině 19.stol. plně potvrdil správnost představ o částicové struktuře hmoty.

Objev částicové struktury hmoty je jedním z nejpozoruhodnějších poznatků, ke kterým dospěla moderní fyzika. Na jeho základě je současná věda schopna vysvětlit a pochopit většinu jevů, které kolem sebe pozorujeme a odpovědět na otázky - proč je sklo průhledné a křehké, jak to, že kovy vedou elektrický proud a izolanty jej nevedou. Proč má uhlík někdy formu měkkých a kluzkých sazí a jindy tvrdého diamantu. Co se děje, když voda vře a když dochází k jejímu mrznutí. Objev částicové struktury látek umožnil na jedné straně výrobu integrovaných obvodů, tvořících základ počítačů a na druhé straně otevřel cestu k pochopení přenosu dědičných informací.

Nepřímo lze na částicovou strukturu látek usuzovat z některých fyzikálních jevů. Takovým jevem je např. ***difúze***. Kápneme-li několik kapek tekuté barvy do sklenice čisté vody, dojde i bez míchání po nějakém čase ke stejnoměrnému zbarvení vody v celém jejím objemu. Stejně tak cítíme vůni oběda i mimo místnost, v níž je oběd připravován.

Vysvětlení obou jevů je z hlediska částicové struktury hmoty prosté. V obou případech dochází ke vzájemným srážkám molekul látek tvořících danou směs. V prvém případě jde o molekuly vody a barvy, ve druhém případě o molekuly vzduchu a molekuly „vůně," které se uvolní při vaření z připravovaného pokrmu. Následkem srážek mezi molekulami dojde k jejich postupnému samovolnému promísení, přičemž v případě plynů probíhá tento proces, vzhledem k mnohem menšímu vzájemnému působení molekul, rychleji.

Dalším jevem, který svědčí o částicové struktuře látek, je ***Brownův pohyb***. Francouzský lékař ***CH. E. BROWN-SÉQUARD*** (1817-1894) pozoroval při mikroskopickém zkoumání pylových zrnek ve vodě jejich nepravidelný pohyb. Vysvětlení tohoto jevu je opět prosté. Pohyb pylových zrnek je pasivní a je vyvolán náhodnými srážkami pylových zrnek s molekulami vody při jejich chaotickém tepelném pohybu. Teoretické vysvětlení tohoto jevu podal A. Einstein. Je zajímavé, že při experimentálním výzkumu Brownova pohybu byla poprvé určena hodnota Avogadrovy konstanty N_A.

Úkol k textu.

Pokuste se nalézt další příklady jevů kolem Vás, při jejichž výkladu lze použít představu o částicové struktuře látek**.**

2.1.2 Základní pojmy, představy a modely

Základní otázka, na kterou musíme ve statistické fyzice odpovědět, se týká částic, z nichž se daná látka skládá. Obklopuje nás tisíce věcí nejrůznější povahy – kvetoucí tulipán nebo obrazovka počítače. Jsou částice, z nichž se tyto systémy skládají různé nebo jsou si podobné? Ukazuje se, že odpověď na tuto otázku záleží na podrobnosti našeho popisu. Chceme-li zachovat chemickou odlišnost jednotlivých látek, musíme jednotlivé látky popisovat pomocí molekul – částic, které si ještě zachovávají charakter dané látky. Protože každá chemicky čistá látka má "svoji" molekulu, existují tisíce a milióny molekul a díky chemikům vznikají stále molekuly nové.

Půjdeme-li v našem popisu hlouběji, zjistíme, že molekuly se skládají z menších částic – atomů. Počet různých atomů je však podstatně menší. Je jich tolik, kolik je prvků v periodické tabulce prvků; v současné době je to asi 110 prvků a zásluhou jaderných fyziků se tento počet stále zvětšuje. Pomocí stále výkonnějších urychlovačů elementárních částic vznikají prvky nové, tak trochu "umělé", neboť se v přírodě volně nevyskytují, dávno se již rozpadly.

Je udivující, že všechny ty nejrůznější látky kolem nás se skládají z molekul, které lze složit pouze z několika desítek různých atomů. Ve skutečnosti je většina látek, s nimiž přicházíme do styku, vytvořena z daleko menšího počtu atomů, viz tab.2.1. Fascinující je přitom skutečnost, že ze stejných atomů jako Země jsou složeny i nejvzdálenější galaxie.

Prvek	Zastoupení [%]	Prvek	Zastoupení [%]
O	**46,60**	**Na**	**2,83**
Si	**27,72**	**K**	**2,59**
Al	**8,13**	**Mg**	**2,09**
Fe	**5,00**	**Ti**	**0,44**
Ca	**3,63**	**H**	**0,14**

Tab.2.1 Zastoupení prvků na Zemi (zbytek do 100% tvoří prvky se zastoupením menším než 0,14 %)

Půjdeme-li v našem popisu ještě hlouběji, zjistíme, že i atomy jsou složeny z částic – ***protonů, neutronů*** a ***elektronů.*** Při výzkumu vzájemných interakcí těchto částic byly objeveny další částice – ***mezony, hyperony*** atd.. Ukázalo se, že i tyto částice lze "složit" z ještě elementárnějších částic – ***kvarků***. Tvoří-li kvarky základní hmotu, z níž je vytvořen vesmír, není ještě v současné době jasné.

Shrnutí

Všechny dosavadní poznatky nás utvrzují v přesvědčení, že svět kolem nás a celý vesmír má jednotný materiální základ a tvoří systém, který se řídí stejnými přírodními zákony.

Jak jsou molekuly a atomy veliké? Z výsledků kvantové fyziky a krystalografických měření vyplývá, že velikost atomů a molekul je řádově 10^{-9} až 10^{-10} m. Je třeba si

přitom uvědomit, že molekulu může tvořit i jediný atom v případě vzácných plynů, nebo i stovky a tisíce atomů, jak je tomu v případě makromolekulárních organických látek. Úvaha, která umožňuje provést přibližný odhad velikosti atomu nebo molekuly, je uvedena v závěru této kapitoly.

Pokusme se odhadnout, kolik atomů vytváří předměty, které nás obklopují – šálek, kniha, mikrovlnná trouba apod. Velikost těchto předmětů je řádově v decimetrech. Přibližný počet atomů, které je tvoří, dostaneme tak, že objem těchto předmětů $V \approx 10^{-3}\ m^3$ vydělíme přibližným objemem jednoho atomu $V_0 \approx 10^{-27}$ m^3. Výsledkem je přibližně 10^{24} atomů – číslo, k jehož zapsání potřebujeme 25 číslic!

Základní představy o částicové struktuře hmoty jsou shrnuty v ***kinetické teorii látek***. Podle této teorie, jsou částice, z kterých je látka složena, v neustálém pohybu a vzájemně na sebe vzájemně působí. Celková energie částic E je tedy určena součtem jejich energie kinetické E_k a energie vzájemného působení - energie potenciální E_p.

$$E = E_k + E_p .$$

Určení hodnot E_k a E_p není pro soubor velkého počtu molekul nebo atomů jednoduché. Přesný popis chování jednotlivých částic není prakticky možné. Energie každé částice má totiž zcela náhodnou hodnotu. Ukazuje se však, že je možné určit ***pravděpodobnost***, s níž může mít částice danou hodnotu energie. Pro popis chování a vlastností velkého souboru (***makrosouboru***) atomů a molekul, není dokonce vůbec nutné znát hodnoty potřebných parametrů pro každou částici zvlášť. Zkušenost ukazuje, že pro popis makrosouboru zcela postačí znalost ***střední (průměrné)*** hodnoty těchto parametrů.

Známe-li ***rozdělení pravděpodobnosti*** hodnot energie v soustavě částic, můžeme střední hodnoty potřebných parametrů soustavy určit metodami matematické statistiky a počtu pravděpodobnosti. Fyzikální disciplína, která se těmito postupy a výpočty zabývá se nazývá ***statistická fyzika***.

Je zřejmé, že v případech, kdy potřebujeme znát a pracovat s počty atomů a molekul, je nepraktické tento počet znovu zjišťovat a pracovat s tak velkými čísly. Proto byla zavedena fyzikální veličina ***látkové množství***, jejíž jednotkou je ***mol.*** Určujeme-li látkové množství, zjišťujeme počet molekul nebo atomů nepřímo prostřednictvím jejich hmotnosti. Využíváme přitom skutečnosti, že všechny atomy jsou složeny ze stejných částic - elektronů, protonů a neutronů. Hmotnost protonů a neutronů je přibližně stejná, hmotnost elektronů je asi 1800-krát menší. Proto o hmotnosti atomu rozhoduje počet jeho ***jaderných částic*** – protonů a neutronů.

Dohodou bylo stanoveno, že ***atomová hmotnostní jednotka*** m_u má hmotnost *1/12* hmotnosti atomu ***uhlíku*** ${}^{12}_{6}C$, jehož jádro je tvořeno 6 protony a 6 neutrony. Měřením byla zjištěna její hodnota $m_u = 1{,}6605655.10^{-27}$ *kg*. Tento izotop uhlíku byl využit i při definici jednotky látkového množství:

1 mol je látkové množství, obsahující počet částic (atomů, molekul nebo iontů), který je shodný s počtem atomů ve 12 g uhlíku, izotopu ${}^{12}_{6}C$***. Mol je základní jednotkou látkového množství v soustavě SI.***

Dělíme-li hmotnost atomu m_a daného prvku nebo molekuly m_m dané látky atomovou hmotnostní jednotkou m_u, dostaneme jejich ***relativní atomovou*** A_r nebo ***relativní molekulovou*** M_r ***hmotnost***

$$A_r = \frac{m_a}{m_u} \quad ; \quad M_r = \frac{m_m}{m_u}.$$

Výhodnost relativní atomové nebo molekulové hmotnosti je v tom, že umožňuje pracovat s číselnými hodnotami, na které jsme zvyklí. Hmotnost atomu uhlíku ${}^{12}_{6}C$ je $m_C = 12\ m_u = 19{,}9268.10^{-27}\ kg$, jeho relativní atomová hmotnost je však "jen" $A_r = 12$. Relativní hmotnost je určena poměrem stejných veličin a je proto bezrozměrná – $[A_r] = [M_r] = 1$.

Počet částic v jednom molu jakékoliv chemicky čisté látky je roven Avogadrově konstantě, jejíž hodnota byla experimentálně stanovena na $N_A = 6{,}022.10^{23}\ mol^{-1}$.

Látkové množství n soustavy částic (atomů, molekul nebo iontů) je rovno podílu počtu N částic této soustavy a Avogadrovy konstanty

$$n = \frac{N}{N_A} \quad ; \quad [n] = mol.$$

Molární hmotnost M_m je definovaná jako podíl hmotnosti m látky a jejího látkového množství n

$$M_m = \frac{m}{n} \quad ; \quad [M_m] = kg.mol^{-1} \quad \left(M_m = M_r.10^{-3}\ kg.mol^{-1}\right).$$

Chceme-li znát počet atomů nebo molekul v soustavě známé hmotnosti, zjistíme pomocí molární hmotnosti počet molů, z nichž se soustava skládá a vynásobíme jej Avogadrovou konstantou.

Molární objem V_m je definován jako podíl objemu V dané látky za daných podmínek a odpovídajícího látkového množství n

$$V_m = \frac{V}{n} \; ; \; [V_m] = m^3.mol^{-1}.$$

Řešená úloha č. 1:

Kolik molekul přestavuje objem 2 dcl chemicky čisté vody?

Řešení úlohy

Dané veličiny:

$H_2O\ ;\ V = 2\ dcl = 2.10\ m^{-3}\ ;\ \rho = 10^3\ kg.m^{-3}$.

Hmotnost daného objemu vody je $m = \rho V \Rightarrow m = 0{,}2\ kg$. Látkové množství vody určíme pomocí její relativní molekulové hmotnosti:

$H_2O \Rightarrow M_r = 2A_{H,r} + A_{O,r}\ ;\ A_{H,r} = 1,\ A_{O,r} = 16 \Rightarrow M_r = 2 + 16 = 18;$

$M_m = 18.10^{-3}\ kg.mol^{-1}$.

$n = m / M_m \Rightarrow n = 0{,}2 / 0{,}018 = 11{,}1\ mol$. Počet molekul vody je $N = nN_A$ a tedy

$N = 11{,}1.6{,}022.10^{23} = 6{,}7.10^{24}$.

2 dcl čisté vody obsahuje $6,7.10^{24}$ molekul H_2O.

Řešená úloha č. 2:

Odhadněte rozměry molekuly vody pomocí Avogadrovy konstanty.

Řešení úlohy:

Dané veličiny:
H_2O ; $N_A = 6,022.10^{23}\ mol^{-1}$; $\rho = 10^3\ kg.m^{-3}$;

Protože nám jde pouze o přibližný odhad velikosti molekuly, budeme ji modelovat co nejjednodušším geometrickým tělesem - např. krychličkou o délce hrany a. Objem jedné molekuly je a^3; n molekul vody zaujímá objem $V = n\,a^3$ a její celková hmotnost je

$$m = \rho V = \rho\, n\, a^3 = n\, m_m ,$$

kde ρ je hustota vody a m_m hmotnost jedné její molekuly. Pro hledanou velikost dostáváme

$$a = \sqrt[3]{\frac{m_m}{\rho}} .$$

Hmotnost m_m určíme pomocí molární hmotnosti vody (H_2O) $M_m = M_r.10^{-3}\ kg.mol^{-1} = 18.10^{-3}\ kg.mol^{-1}$ a Avogadrovy konstanty $N_A = 6,02.10^{23}\ mol^{-1}$ pomocí vztahu

$$m_m = \frac{M_m}{N_A} = \frac{18.10^{-3}}{6,02.10^{23}} = 2,99.10^{-26}\,kg\cdot$$

Dosadíme-li tuto hmotnost do vztahu pro délku hrany krychle, dostaneme $a = 3,1.10^{-9}\ m$.

Přibližná velikost molekuly vody je $3,1.10^{-9}$ m.

Úkol k zamyšlení.

Uvedená úvaha je příkladem, ukazujícím důležitost Avogadrovy konstanty N_A. Tato konstanta umožňuje přechod od termodynamického popisu k popisu pomocí statistické fyziky nebo jinak - od popisu, při němž předpokládáme spojité rozložení látky k popisu, při němž respektujeme její nespojité rozložení v podobě atomů, molekul nebo iontů. Ukazuje se však, že i když je struktura látky částicová, je možné v případě, kdy je daná soustava dostatečně velká (početná), popisovat změny této soustavy spojitě. Je to výhodné zejména proto, že v tomto případě lze využít metody integrálního a diferenciálního počtu.

Za kritérium, pomocí něhož můžeme rozhodnout o možnosti spojitého popisu, slouží např. podíl celkové hmotnosti m dané soustavy k hmotnosti m_0 částic, z nichž se soustava skládá. Termodynamický, tj. spojitý popis dané soustavy je možný tehdy, platí-li:

$$\frac{m}{m_0} >> 1 .$$

Úloha č. 1:

1. Určete molární hmotnost molekuly sacharózy (cukru), má-li chemický vzorec $C_{12}H_{22}O_{11}$.
2. Určete molární hmotnost vzduchu. Pro jednoduchost předpokládejte, že vzduch tvoří směs složená ze 79% dusíku a 21% kyslíku. Molekuly obou plynů jsou dvouatomové.
3. Předpokládejme, že vaše polévková lžíce o hmotnosti 22 g je z nerezové oceli, která je slitinou 84,9 % železa, 15 % chrómu *a 0,1%* uhlíku. Určete počet molekul, které tuto lžíci tvoří.

ŘEŠENÍ :

1. 342,3 $g.mol^{-1}$
2. 28,84 $g.mol^{-1}$
3. $2{,}41.10^{23}$

Shrnutí

Při použití částicové struktury hmoty jsou důležitými pojmy:
Látkové množství, mol, relativní atomová a molekulová hmotnost, Avogadrova konstanta.

2.1.3 Stav termodynamické rovnováhy

Uvažujme libovolnou fyzikální soustavu a pokusme se popsat změnu stavu této soustavy, vyvolanou např. jejím zahříváním nebo ochlazením. Jistě bude záležet na tom, bude-li zahřívání probíhat pozvolna – např. na elektrickém vařiči, nebo velmi rychle – např. pomocí výbuchu. Popis procesů, které probíhají během výbuchu, bude rozhodně obtížnější. Zásadní rozdíl obou uvedených procesů je v ***rychlosti změn veličin (parametrů)*** popisujících ***okamžitý stav*** dané soustavy. Při výbuchu se tyto parametry – např. teplota, tlak, objem apod., mění podstatně rychleji než při ohřevu na elektrickém vařiči.

Nejjednodušší případ nastává tehdy, jsou-li změny všech parametrů dané soustavy nulové.

Jsou-li všechny veličiny popisující stav soustavy v čase konstantní, označujeme tento stav jako stav termodynamické rovnováhy.

Zkušenost ukazuje, že ponecháme-li libovolnou fyzikální soustavu dostatečně dlouhou dobu v daných podmínkách v klidu, ***přejde samovolně*** do stavu ***termodynamické rovnováhy***, při níž ***všechny pozorovatelné procesy*** v dané soustavě ustanou a střední hodnoty změřených hodnot parametrů, popisujících její stav, se ustálí na jistých, dále se již neměnících hodnotách. Provedeme-li nyní "nepatrnou" a dostatečně pomalou změnu těchto parametrů, změní se i stav soustavy jen "nepatrně" a soustava bude velmi blízko stavu termodynamické rovnováhy. Tento stav označujeme jako ***kvazirovnovážný*** (téměř rovnovážný).

Výhoda kvazirovnovážných, tzn***. velmi malých a pomalých*** změn, spočívá v tom, že ač měníme stav soustavy, můžeme soustavu popisovat jako termodynamicky rovnovážnou a chyba, které se přitom dopouštíme, je zanedbatelná.

Popis soustavy ve stavu termodynamické rovnováhy je jednoduchý, neboť hodnoty všech parametrů jsou stálé. Rozpoznat, kdy jsou změny soustavy kvazirovnovážné, umožňuje vlastnost, která tyto změny odlišuje od všech ostatních. Zkušenost totiž ukazuje, že ***kvazirovnovážné změny jsou vratné - mohou samovolně probíhat i v opačném směru. Vyvolá-li vratná změna např. vzrůst teploty, lze tuto změnu "obrátit", tj. provést i tak, že vyvolá teplotní pokles.***

Představa vratných změn v termodynamice je přibližná a zjednodušuje skutečnost, samovolně probíhající přírodní děje jsou však vždy více nebo méně nevratné. Její výhodou je značné zjednodušení úvah a matematických postupů, souvisejících s popisem a výkladem termodynamických dějů, přičemž nepřesnost, které se dopouštíme je prakticky zanedbatelná.

Při všech našich dalších úvahách budeme vždy předpokládat, že daná soustava je buď v rovnovážném stavu, nebo že probíhající změny probíhají kvazirovnovážně.

Korespondenční úkol.

Popište jak zjistíte, že šálek horkého čaje, který jste osladili dvěma lžičkami cukru je ve stavu termodynamické rovnováhy.

2.2 STATISTIKA A POČET PRAVDĚPODOBNOSTI

PRŮVODCE STUDIEM

Jistě se setkali s jevem, o kterém jste nemohli s jistotou dopředu říci, zda nastane nebo ne, např. prostrčím nit uchem jehly nebo ne, vyhraji ve sportce nebo ne atd. Tyto jevy běžně označujeme jako náhodné. I když se na první pohled zdá, že tyto jevy jsou mimo možnosti racionálního poznání, není tomu tak. Po zvládnutí této kapitoly budete schopni náhodné jevy klasifikovat, charakterizovat a tak je i racionálně zapojit do svých úvah. S jistou nadsázkou budete schopni výsledky těchto jevu i předpovídat.

Všechna, tvrzení, která jste si právě přečetli jsou pravdivá, ale s jednou podmínkou – totiž, že všechny výroky o náhodných procesech ověřujete na souboru dat, tzv. statistickém souboru. Prakticky to znamená, že z jedno zjištění nelze nic podstatného o náhodném jevu říci. Těchto zjištění musí být vždy více, prakticky deset a více, čím více tím lépe. S tímto omezením budete moci „zvládnout" i náhodu.

Z předchozích kapitol je zřejmé, že počet částic, které tvoří předměty, které nás obklopují v běžném životě představují ***makrosystémy*** a počet částic, které je tvoří je obrovský, v řádech hodnoty Avogadrovy konstanty $\approx 6{,}02.10^{23}$. Tak velké soubory lze efektivně popsat pomocí dvou matematických disciplín – ***statistiky*** a ***počtu pravděpodobnosti***.

Předtím, než pokročíme k dalšímu výkladu o popisu makrosystémů pomocí statistické fyziky, provedeme krátký exkurs do teorie statistiky a počtu pravděpodobnosti.

Část pro zájemce.

Pojem pravděpodobnosti a s ním spojené matematické disciplíny – počtu pravděpodobnosti, vznikl v polovině XVII. století při úvahách o zákonitostech hazardních her a tzv. náhodných jevů. Mezi zakladatele počtu pravděpodobnosti

patří ***PIERRE FERMAT*** (1601 – 1665), ***CHRISTIAN HUYGENS*** *(1629 – 1695) a* ***BLAIS PASCAL*** *(1623 – 1662). Metody matematické kombinatoriky vypracované k řešení úloh teorie pravděpodobnosti našly uplatnění i v přírodních a technických vědách, k dalšímu rozvoji počtu pravděpodobnosti pak vedly kvantitativní teorie pozorovacích chyb. Potřebný analytický aparát vypracoval* ***KARL FRIEDRICH GAUSS*** *(1777 – 1855) a* ***SIMEON DENIS POISSON*** *(1781 – 1840).*

2.2.1 Základní definice a pojmy

Počet pravděpodobnosti se zabývá jevy, které nastávají při hromadných dějích náhodné povahy.

Nechť předmětem našeho zkoumání jsou jevy, označíme je $A,B,C,...$, které jejichž výskyt studujeme za podmínek **S**. Jev, který nastane vždy označujeme jako ***jev jistý*** a označujeme I. Jev, který zaručeně nikdy nenastane nazýváme ***jev nemožný*** a označujeme ho O. Jev A, který za podmínek **S** může nastat nebo nenastat označujeme jako ***jev náhodný***.

Náhodnost daného jevu má omezený význam. Znamená pouze, že soubor podmínek **S** realizace jevu A nepředstavuje úplnou množinu příčin, jejichž znalost je nutná a postačující k tomu abychom mohli jednoznačně určit zda jev A nastane nebo ne. Náhodnost je tedy důsledkem neúplné informace o příčinách realizace daného jevu a je v principu odstranitelná.

Existují však jevy, v oblasti mikrosvěta, v níž platí zákony kvantové fyziky, kdy ani úplná informace neumožňuje jednoznačnou predikci realizace daného jevu. Pravděpodobnostní (stochastický) charakter těchto jevů je principielní. Při dané realizaci podmínek **S** nelze tedy určit zda daný jev nastane či nenastane, můžeme ale určit pravděpodobnost výskytu daného jevu.

K ověření naší predikce je tedy nutné provést soubor měření a získané výsledky statisticky zpracovat.

Jestliže při každé realizaci souboru podmínek **S** jevy A a B buď oba nastanou, nebo oba nenastanou, budeme takové jevy označovat za rovnoprávné, což zapisujeme $A = B$.

Jev P kdy se uskuteční oba jevy A a B budeme nazývat ***součinem (průnikem)*** $P = AB$ jevů A a B. Součin

$$P = AB....N$$

označuje jev, v němž nastanou současně všechny jevy $A,B,...N$.

Jev S, kdy se uskuteční alespoň jeden z jevů $A,B,...N$ nazýváme ***součtem (spojením)*** jevů $A,B,...N$ a označujeme

$$S = A + B + ... + N .$$

Dva jevy A a $\overline{A}$ se označují jako ***opačné***, platí-li pro ně současně vztahy

$$A + \overline{A} = I \ , \ A\overline{A} = O .$$

Dva jevy A, B nazýváme ***vzájemně neslučitelné (nekompatibilní)***, platí-li

$$AB = O .$$

Platí-li

$$A = B_1 + B_2 + B_3 + ... + B_n ,$$

a jevy B_i, B_j jsou po dvou vzájemně neslučitelné $B_i B_j = O$, $i \neq j$, potom říkáme, že jev A je složen z částečných jevů $B_1, B_2, B_3, ..., B_n$.

Úkol k textu.

Uveďte dva příklady náhodného a dva příklady determinovaného jevu z běžného života. Je toto Vaše označení neměnné nebo se jedná o podmíněný pojem? Svůj názor krátce zdůvodněte.

2.2.2 Definice pravděpodobnosti

Každému jevu A z pole jevů charakterizovaného souborem podmínek **S** lze přiřadit jistou kvantitativní charakteristiku $P(A)$ zvanou ***pravděpodobnost*** následujícím způsobem: Nechť při n_A-násobném provedení pokusu nastane jev A m_A-krát. Pravděpodobnost $P(A)$ je potom dána limitou ***relativní četnosti*** výskytu jevu A

$$P(A) = \lim_{n_A \to \infty} \frac{m_A}{n_A} . \qquad (2.1)$$

Uvedená ***klasická definice pravděpodobnosti*** vystihuje statistickou podstatu pojmu pravděpodobnosti a je vhodná především pro empirické stanovení pravděpodobnosti jevů.

Moderní teorie pravděpodobnosti je založena na soustavě axiomů, zformulovaných ruským matematikem **A. N. KOLGOMOROVEM** (1933):

1. Každému náhodnému jevu A z pole jevů určeného souborem podmínek **S** je přiřazeno nezáporné číslo $P(A)$, zvané pravděpodobnost, přičemž

   $$0 \leq P(A) \leq 1 .$$

2. Pravděpodobnost jevu jistého je rovna jedné $P(I) = 1$.

3. Jsou-li jevy $B_1, B_2, B_3, ..., B_n$ po dvou neslučitelné, $B_i B_j = O$, $i \neq j$, pak je pravděpodobnost jevu $B_1 + B_2 + B_3 + ... + B_n$ rovna výrazu

   $$P(B_1 + B_2 + B_3 + ... + B_n) = P(B_1) + P(B_2) + P(B_3) + ... + P(B_n) .$$

Z uvedených axiomů plynou např. tyto důsledky:

$$P(O) = 0 ,$$
$$P(\overline{A}) = 1 - P(A) ,$$
$$P(A + B) = P(A) + P(B) - P(AB) ,$$
$$P(A + B) \leq P(A) + P(B) .$$

4. Pravděpodobnost $P(AB)$ součinu dvou jevů A a B je určena vztahy

   $$P(AB) = P(A)P(B / A) = P(B)P(A / B) ,$$

kde $P(B/A)$ a $P(A/B)$ jsou odpovídající ***podmíněné pravděpodobnosti***.

Část pro zájemce.

Je-li pro stanovení pravděpodobnosti P(A) nutný pouze soubor podmínek S*, určujících dané jevové pole, označujeme pravděpodobnost P(A) jako* ***nepodmíněnou****. Je-li však pro stanovení pravděpodobnosti jevu A nutná dodatečná podmínka výskytu jevu B, nazýváme takovou pravděpodobnost* ***podmíněnou*** *a označujeme P(A/B).*

Jev *A* je ***nezávislý na jevu*** *B* právě tehdy, platí-li

$$P(A/B)=P(A),$$

tj. když výskyt jevu *B* nemá vliv na pravděpodobnost jevu *A*. ***Nezávislost jevů je vzájemná***. Pro nezávislé jevy pak platí

$$P(AB)=P(A)P(B).$$

Pomocí uvedených axiomů můžeme odvodit dva důležité teorémy:

Nechť $B_1, B_2, B_3, ..., B_n$ jsou po dvou navzájem neslučitelné jevy, $P(B_iB_j)=0$, $j \neq i$. Dále nechť jev A se může realizovat s jedním a pouze s jedním z jevů $B_1, B_2, B_3, ..., B_n$, pak pro pravděpodobnost jevu *A* platí

$$P(A)=\sum_{i=1}^{n} P(AB_i)=\sum_{i=1}^{n} P(A/B_i)P(B_i).$$

Tento ***teorém úplné pravděpodobnosti*** má základní význam pro aplikace teorie pravděpodobnosti.

Platí-li $B_1+B_2+B_3+...+B_n=I$, kde I je jev jistý a jevy $B_1, B_2, B_3, ..., B_n$ jsou po dvou navzájem neslučitelné jevy, $P(B_iB_j)=0$, $j \neq i$, pak

$$\sum_{i=1}^{n} P(B_i)=1$$

a uvedený vztah se označujeme jako ***normovací podmínku***.

Řešená úloha č. 3:

Jaká je pravděpodobnost, že ze čtyř náhodně vybraných mariášových karet bude jako druhá a čtvrtá karta vytažen král?.

Řešení úlohy

Vyjdeme z klasické definice pravděpodobnosti, viz (2.1). Balíček mariášových karet tvoří čtyři barvy po osmi kartách. Máme tedy k dispozici 4 krále a 28 jiných karet. V prvním tahu musíme vytáhnout jinou kartu než krále. Počet možností je 28. Počet všech možností je 32 a tedy pravděpodobnost, že v prvém tahu bude tažena jiná karta než král je $P_1=28/32$. V druhém tahu musí být tažen král. Jsou 4 možností jak táhnout krále. Počet všech možností je 31 (jedna karta už byla z balíčku odebrána. Pravděpodobnost tažení krále ve druhém tahu je tedy $P_2=4/31$. Obdobnou úvahou určíme pravděpodobnost $P_3=27/30$, že ve třetím bude vytažena jiná karta než král

a že ve čtvrtém tahu bude naopak král vytažen $P_4 = 3/29$. Pravděpodobnost P_{4K} jevu, že při vytažení 4 karet bude jako druhá a čtvrtá karta vytažen král představují současnou realizaci 4 výše popsaných dílčích jevů a protože tažení karet v každém tahu je nezávislé, platí

$$P_{4K} = P_1.P_2.P_3.P_4 = 0,0105 .$$

Pravděpodobnost, že ze čtyř náhodně vybraných mariášových karet bude jako druhá a čtvrtá karta vytažen král je $P_{4K} = 0,0105$**.**

Řešená úloha č. 4:

Jaká je pravděpodobnost, že ve Sportce vyhrajete třetí pořadí, tzn. že uhodnete čtyři čísla ze šesti tažených?

Řešení úlohy

Vyjdeme opět z klasické definice pravděpodobnosti, viz (2.1). Ve Sportce je taženo náhodně 6 čísel ze 49. Třetí pořadí znamená, že z vytažených 6 čísel uhodneme libovolné 4. Počet takových možností je roven kombinaci $\binom{6}{4}$. Zbylá 2 čísla jsou libovolná 2 čísla ze 43 netažených čísel. Takových možností je $\binom{43}{2}$. Počet všech možných náhodných skupin 6 čísel ze 49 je roven kombinaci $\binom{49}{6}$. Uhodnutí třetího pořadí je opět jev složený ze současného výskytu dvou výše uvedených jevů a protože tažení čísel z osudí v každém tahu je nezávislé platí

$$P_{3p} = \frac{\binom{6}{4}.\binom{43}{2}}{\binom{49}{6}} = 0,000968$$

Pravděpodobnost, že uhodneme třetí pořadí ve Sportce je $p_{3p} = 0,000968$**.**

2.2.3 Rozdělovací funkce a hustota rozdělení pravděpodobnosti

Pomocí pravděpodobnosti $P(A)$ jevu A lze vytvářet různé charakteristiky náhodných jevů. Pravděpodobnost jevu, že náhodná proměnná ξ bude mít hodnotu menší než x, se nazývá ***rozdělovací funkce náhodné veličiny***

$$F(x) = P(\xi < x).$$

Rozdělovací funkce $F(x)$ náhodné veličina je neklesající funkcí, která je ohraničena nerovností

$$0 \le F(x) \le 1 .$$

Platí pro ni následující vztahy:

$$F(\infty) \equiv P(\xi < \infty) = 1 \ , \ F(-\infty) \equiv P(-\infty < \xi) = 0 ,$$

$$P(x_1 \le \xi < x_2) = F(x_2) - F(x_1).$$

Pro spojitě proměnnou náhodnou veličinu ξ měnící se v intervalu $(-\infty, \infty)$ je rozdělovací funkce $F(x)$ definována vztahem

$$F(x) = \int_{-\infty}^{x} \rho(z)\, dz\,,$$

kde funkci $\rho(x)$ představuje ***hustotu rozdělení pravděpodobnosti***. Platí pro ni:

- funkce $\rho(x)$ je nezáporná, tj. $\rho(x) \geq 0$,
- pro libovolné dvě hodnoty x_1, x_2 je pravděpodobnost jevu, že hodnota náhodné veličiny ξ bude ležet v intervalu $x_1 \leq \xi < x_2$ vyjádřena vztahem

$$P(x_1 \leq \xi < x_2) = \int_{x_1}^{x_2} \rho(x)\ dx = F(x_2)\ - F(x_1),$$

- pro $x_1 \to -\infty$, resp. $x_2 \to \infty$ dostaneme pomocí uvedeného vztahu normovací podmínku ve tvaru

$$P(-\infty \leq \xi < \infty) = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x)\, dx = 1,$$

- je-li $\rho(x)$ spojitá funkce v bodě x, pak výraz

$$dP = \rho(x)\, dx = P(x \leq \xi < x + dx)$$

určuje pravděpodobnost jevu, že spojitě se měnící náhodná veličina ξ bude mít hodnotu v intervalu $x \leq \xi < x + dx$.

2.2.4 Střední hodnota a střední kvadratická odchylka náhodné veličiny

Nejúplnější charakteristikou náhodné veličiny je její rozdělovací funkce $F(x)$, resp. hustota pravděpodobnosti $\rho(x)$. V mnoha případech však pro charakteristiku náhodného procesu vystačíme s mnohem menší informací, ve formě globální informace ji představuje jisté číslo, které získáme určitým předepsaným způsobem pomocí rozdělovací funkce nebo hustoty pravděpodobnosti náhodné veličiny. Nejčastěji používanou charakteristikou je ***střední (očekávaná) hodnota***, resp. ***střední kvadratická odchylka*** neboli ***disperze náhodné veličiny***.

Střední hodnota náhodné veličiny je zobecněním pojmu aritmetického průměru. Jsou-li x_i, $i = 1, 2, ...$ možné hodnoty diskrétní náhodné veličiny ξ a P_i odpovídající pravděpodobnosti hodnot x_i, je střední hodnota náhodné veličiny určena vztahem

$$\overline{x} = \langle x \rangle = \sum_{i=1}^{\infty} P_i\, x_i\,,$$

kde $\overline{x}$, resp. $\langle x \rangle$ jsou nejčastěji používaná označení střední hodnoty. Střední hodnota spojité náhodné veličiny je určena integrálem

$$\overline{x} = \langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x\, dp = \int_{-\infty}^{\infty} x \rho(x)\, dx\,.$$

Pro střední hodnoty platí následující teorémy

$$\langle c \rangle = c, \quad \langle c\, x \rangle = c \langle x \rangle, \quad c = const.,$$

$$\langle x+y\rangle = \langle x\rangle + \langle y\rangle ,$$

$$\langle xy\rangle = \langle x\rangle\langle y\rangle ,$$

$$\langle f(x)\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} P_i f(x_i),\ resp.\ \langle f(x)\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} f(x)\rho(x)\,dx .$$

Hodnoty x_i náhodné veličiny se obecně liší od střední hodnoty $\langle x\rangle$. Tato odchylka – ***fluktuace náhodné proměnné*** je určena vztahem

$$\Delta x_i = x_i - \langle x\rangle .$$

Protože obecně platí $\langle \Delta x\rangle = 0$, kladné i záporné hodnoty fluktuace se navzájem vykompenzují, je jako globální charakteristika fluktuace brána střední hodnota kvadrátu fluktuace $\langle (\Delta x)^2\rangle$. Pro diskrétní náhodnou proměnnou je střední kvadratická odchylka definována vztahem

$$\langle (\Delta x)^2\rangle = \sum_{i=1}^{\infty} P_i (\Delta x_i)^2 = \sum_{i=1}^{\infty} P_i \left(x_i - \langle x\rangle\right)^2 ,$$

resp. pro spojitě náhodnou proměnou integrálem

$$\langle (\Delta x)^2\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} (\Delta x)^2 \rho(x)\,dx = \int_{-\infty}^{\infty} \left(x - \langle x\rangle\right)^2 \rho(x)\,dx .$$

Pro praktické výpočty je velmi užitečný vztah

$$\langle (\Delta x)^2\rangle = \langle \left(x_i - \langle x\rangle\right)^2\rangle = \langle x^2\rangle - \langle x\rangle^2 .$$

Výraz

$$s = \sqrt{\langle (\Delta x)^2\rangle}$$

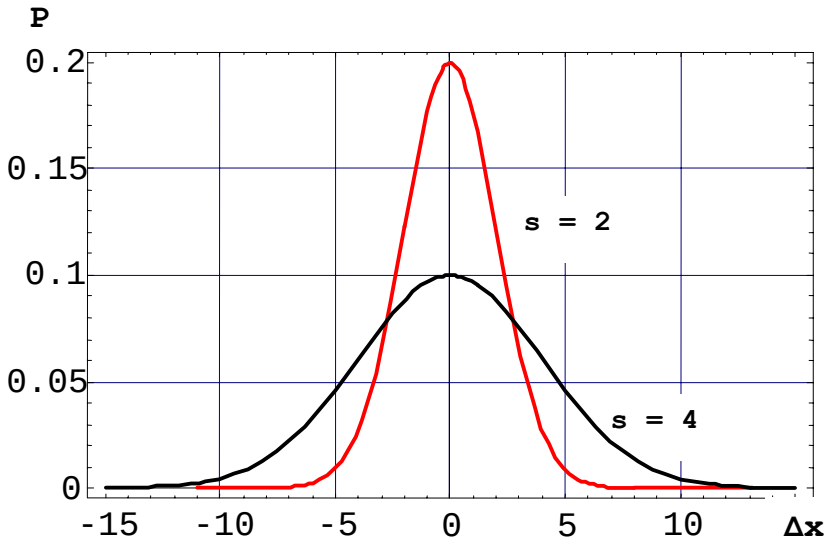
definuje tzv. ***standardní kvadratickou odchylku***.

2.2.5 Gaussovo normální rozdělení

Konkrétní tvar rozdělovací funkce $F(x)$, resp. hustoty pravděpodobnosti $\rho(x)$ závisí na souboru podmínek **S**, které definují dané jevové pole. V případě, že opakovaný výskyt daného jevu, např. výsledek opakovaného měření, lze pokládat za navzájem nezávislý jev a hodnoty spojitě se měnící náhodné proměnné x se soustřeďují do úzké oblasti kolem nejčastěji se vyskytující hodnoty, je hustota pravděpodobnosti náhodné proměnné $\rho(x)$ určena ***Gaussovým normálním rozdělením***

$$\rho(x) = \frac{1}{\sqrt{2\,\pi\,s^2}}\, e^{-\frac{(x-\bar{x})^2}{2s^2}} ,$$

kde $s^2 = \langle \left(x_i - \langle x\rangle\right)^2\rangle$ je střední kvadratická odchylka, viz obr. 2.1. Význam Gaussova normálního rozdělení je obecnější, protože představuje limitní tvar jiných rozdělení (binomického, hypergeometrického, Poissonova atd.).



Obr.2.1 Rozdělení pravděpodobnosti P odchylek Δx od střední hodnoty $\langle x \rangle$

Jak je z obrázku patrné, charakterizuje střední hodnota daný soubor tím lépe, čím menší je hodnota střední kvadratické odchylky *s*.

2.3 ZÁKLADNÍ POJMY A IDEJE STATISTICKÉ FYZIKY

2.3.1 Výchozí předpoklady a ideje

Z předpokladu o částicové struktuře látky vyplývá, že fyzikální soustavy, tzv. ***makrosoustavy***, s kterým se setkáváme v běžném životě, představují soubory o velkém počtu částic. Pro popis těchto souborů je proto nutné použít metody matematické statistiky a počtu pravděpodobnosti., doplněné o fyzikální principy a zákony.

Nejdříve musíme definovat ***statistický soubor náhodných jevů***, který budeme zkoumat. Protože naším cílem je popis chování makrosoustavy v rovnovážném stavu, bude tímto náhodným jevem stav dané soustavy při konstantních hodnotách vnějších podmínek (parametrů) zkoumané soustavy. Soubor hodnot vnějších parametrů soustavy představuje soubor podmínek **S**, za kterých je stav dané fyzikální soustavy realizován.

Náhodný charakter stavu soustavy je dán faktem, že popis soustavy, tzv. ***makrostav*** soustavy, charakterizujeme pomocí hodnot parametrů získaných na základě měření. Při měření však využíváme pouze část informace o soustavě. Úplnou informaci o stavu soustavy, tzv. ***mikrostav*** soustavy lze získat pomocí kvantové mechaniky.

Základní význam pro statistickou fyziku má hypotéza apriorně stejných pravděpodobností, podle které mají všechny fyzikálně možné mikrostavy v daném makroskopickém stavu termodynamické rovnováhy dané soustavy stejnou pravděpodobnost realizace.

Rovnovážný stav soustavy lze popsat pomocí ***hodnot vnějších polí***, které udávají vnější podmínky dané fyzikální soustavy, a její polohou v prostoru, tj. hodnotami jejích ***zobecněných souřadnic*** q_i. Časovou změnu tohoto stavu, tj. časový vývoj soustavy lze pak popsat pomocí časových změn zobecněných souřadnic, které lze

zachytit jejími ***zobecněnými hybnostmi*** p_i. Vhodnou metodou pro další úvahy je zobrazení stavu soustavy ve ***fázovém prostoru***. Je to abstraktní prostor, jehož souřadnicemi jsou zobecněné souřadnice q_i a zobecněné hybnosti p_i soustavy a jehož dimenze je rovna ***počtu stupňů volnosti*** s.

Část pro zájemce.

Zobecněné souřadnice q_i jsou obecně nezávislé parametry, které spolu se svými časovými změnami, z nichž jsou odvozeny zobecněné hybnosti p_i, popisují plně pohybový stav dané soustavy. Nejmenší počet těchto parametrů potřebný pro tento popis je roven počtu stupňů volnosti s.

Každý bod fázového prostoru reprezentuje stav soustavy v daném časovém okamžiku. Vytvoříme nyní ***statistický soubor,*** který přiřadíme zkoumané soustavě následujícím způsobem:

Místo zkoumané soustavy budeme uvažovat množinu podobných soustav, tj. soustav, které mají stejné složení, stejné hodnoty vnějších parametrů a počet stupňů volnosti. Protože při popisu makrosoustavy využíváme jenom neúplnou informaci budou se jednotlivé soustavy našeho souboru nacházet v daném okamžiku obecně v různých stavech. Námi uvažovaný statistický soubor se zobrazí ve fázovém prostoru v daném časovém okamžiku jako množina bodů, rozložených ve fázovém prostoru s různou hustotou. Vzhledem k tomu, že obsazení určitého stavu jednou z uvažovaných soustav má náhodný charakter, můžeme toto obsazení charakterizovat hustotou pravděpodobnosti $\rho(q_i, p_i)$ a určit střední hodnotu obecného parametru $\overline{A(q_i,\ p_i)}$ pomocí vztahu

$$\overline{A} = \int_{\Phi} A(q_i,\ p_i)\rho(q_i,\ p_i)\,d\Phi\,,$$

kde Φ, $d\Phi$ je fázový prostor dané soustavy, resp. jeho element. Takto získáme ***střední hodnotu*** $\overline{A}_\Phi$ ***přes fázový prostor.***

Výsledkem měření parametru A je střední hodnota vypočtená z výsledků opakovaných měření, tj. měření prováděných v různých časových okamžicích. Takto získaná střední hodnota je ***střední hodnota přes čas*** $\overline{A}_t$**.** Ve statistické fyzice se předpokládá platnost rovnosti

$$\overline{A}_t = \overline{A}_\Phi\,.$$

Tento předpoklad se označuje jako ***ergodický teorém***. Dodnes nejsou známy obecné podmínky, za kterých tato rovnost platí. Byly však nalezeny případy, kdy není splněna. Proto je nutné všechna tvrzení statistické fyziky ověřit experimentem.

2.3.2 Hustota pravděpodobnosti stavu soustavy

Z jednoznačnosti řešení pohybových rovnic částic daní soustavy vyplývá, že hustota pravděpodobnosti stavu soustavy $\rho(q_i,\ p_i)$ se v čase nemění, tzv. ***Liouvilleův teorém.*** Při použití vztažné soustavy, ve které je soustava jako celek v klidu vyplývá, že hustota pravděpodobnosti stavu soustavy $\rho(q_i,\ p_i)$ je funkcí pouze vnitřní

energie $U(q_i, p_i)$, počtu částic soustavy $N(q_i, p_i)$ a hodnot vnějších parametrů, které určují stav termodynamické rovnováhy. Konkrétní tvar funkční závislosti závisí na míře interakce soustavy se svým okolím. Podle rozsahu interakce soustavy se svým okolím rozlišujeme soustavy na

– ***Izolované***, které se svým okolím neinteragují - jejich energie U a počet částic N se nemění. Rozdělení pravděpodobnosti izolované soustavy je jednoduché. Jsou-li U_0 a N_0 hodnoty vnitřní energie a počtu částic dané soustavy, potom pro hodnoty vnitřní energie U a počet částic N, pro které $U = U_0, N = N_0$ je $\int_{\Phi} \rho(U_0, N_0)\, d\Phi = 1$. Pro všechny ostatní hodnoty vnitřní energie a počtu částic je $\rho(U, N) = 0$.

  Izolovaná soustava je ideální model, který má význam především při teoretických úvahách. Na základě vlastností izolované soustavy postuloval rakouský fyzik ***LUDWIG BOLTZMANN*** (1844 – 1906) funkční závislost entropie pro statistickou fyziku, tzv. ***Boltzmannův vztah***

$$S = k \ln \Gamma ,$$

  kde k je ***Boltzmannova konstanta*** a Γ je celkový počet mikrostavů soustavy, které realizují daný makrostav, resp. počet možných realizací daného makrostavu. Jak je patrné z uvedeného vztahu, je entropie ve statistické fyzice definovaná v absolutní hodnotě a ne pouze svojí změnou, jak je tomu ve fenomenologické termodynamice – $dS \geq dQ/T$. Je-li daná soustava tepelně izolovaná, potom $dS \geq 0$ a použitím Boltzmannova vztahu dostaneme

$$dS \approx \Delta S = S_2 - S_1 = k \ln \frac{\Gamma_2}{\Gamma_1} > 0 \quad \Rightarrow \quad \Gamma_2 > \Gamma_1 ,$$

  kde S_2 je koncová a S_1 počáteční hodnota entropie při přechodu ze stavu *1* do stavu *2* a Γ_2, resp. Γ_1 je počet mikrostavů koncového. resp. počátečního stavu. Přirozené procesy tedy probíhají tak, aby se počet možných mikrostavů realizujících daný makrostav zvětšil. Zvětšení počtu mikrostavů znamená rozvolnění struktury soustavy a tedy „zvětšení chaosu."

Entropie je ze statistického hlediska mírou uspořádanosti systému. S růstem uspořádanosti soustavy se hodnota entropie zmenšuje.

Část pro zájemce.

Ludwig Eduard Boltzmann (1844 - 1906). Rakouský fyzik, tvůrce kinetické teorie tepla a statistické fyziky, člen mnoha světových učených společností. Spoluobjevitel zákona záření absolutně černého tělesa. Vědecká revolučnost jeho statistického přístupu k řešení termodynamických problémů vyvolala značný a dlouhodobý odpor některých jeho vědeckých kolegů. I tato situace přispěla k dobrovolnému ukončení jeho života utonutím v Dvině u Terstu. Na Boltzmannově náhrobku z bílého mramoru je vytesán vzorec S = k ln W.

– ***Uzavřené,*** které interagují se svým okolím pouze tak, že s ním vyměňují pouze energii, počet částic soustavy zůstává konstantní $N = N_0$. Rozdělení pravděpodobnosti stavů uzavřené soustavy je určeno vztahem

$$\rho\left(q_i, p_i\right) = C e^{-\frac{U(q_i, p_i)}{kT}}, \tag{2.2}$$

kde C je normovací konstanta, jejíž hodnotu určíme pomocí normovací podmínky

$$\int_{\Phi} \rho\left(q_i, p_i\right) d\Phi = \int_{\Phi} C e^{-\frac{U(q_i, p_i)}{kT}} d\Phi = 1, \tag{2.3}$$

kde $\Phi, d\Phi$ je fázový prostor dané soustavy, resp. element fázového prostoru dané soustavy a T termodynamická teplota. Vztah (2.2) je označován jako ***kanonické*** nebo ***Gibbsovo rozdělení***.

– ***Otevřené***, nejobecnější případ, kdy si soustava vyměňuje se svým okolím jak energii, tak i částice. Hodnota vnitřní energie i počet částic soustavy se mění.

Rozdělení hustoty pravděpodobnosti otevřené soustavy o m složkách, z nichž každá má N_j částic, je určeno vztahem

$$\rho\ \left(q_i,\ p_i\right) = C\ \ e^{\frac{\sum_{j=1}^{m} \mu_j N_j(q_i, p_i) - U(q_i, p_i)}{kT}}, \tag{2.4}$$

kde μ_j je chemický potenciál dané složky zkoumané soustavy a hodnota normovací konstanty C určíme pomocí normovací podmínky

$$\sum_{N_j}^{\infty} \int_{\Phi} \rho\ \left(q_i,\ p_i\right)\ d\Phi = \sum_{j=1}^{m} \int_{\Phi} C e^{\frac{\sum_{j=1}^{m} \mu_j N_j(q_i, p_i) - U(q_i, p_i)}{kT}} d\Phi = 1.$$

Uvedené rozdělení označujeme jako ***grandkanonické***.

Úkol k zamyšlení.

Najděte alespoň dva příklady z každodenního života soustavy izolované, uzavřené a otevřené.

2.4 VYBRANÉ APLIKACE STATISTICKÝCH ZÁKONŮ

I když metody statistické fyziky lze aplikovat na jakoukoliv fyzikální soustavu, ne vždy se podaří, i při použití moderní výpočetní techniky, provést potřebné výpočty. Proto budeme metody statistické fyziky demonstrovat na dvou vybraných fyzikálních soustavách – klasickém a kvantověmechanickém ideálním plynu.

2.4.1 Klasický ideální plyn

Ideální plyn je nejjednodušší možná fyzikální soustava. Za ideální plyn označujeme soustavu, u které zanedbáváme potenciální energii E_p oproti energii kinetické E_k, tzn. že téměř zanedbáváme vzájemné působení částic. Slovo „téměř“ znamená, že připouštíme např. pružné srážky. Budeme uvažovat uzavřenou soustavu, tvořenou částicemi jednoho druhu. Pro celkovou vnitřní energii soustavy potom platí

$$U = E_k = \sum_{j=1}^{N} e_{kj} ,$$

kde N je celkový počet částic a e_{kj} je kinetická energie j-té částice. Budeme nejdříve uvažovat klasickou částici, tzn. částici, jejíž energie se mění spojitě. Pro kinetickou energii částice potom platí

$$e_k = \frac{1}{2} m\vec{v}^2 = \frac{\vec{p}^2}{2m} = \sum_{j=1}^{3} \frac{p_j^2}{2m}$$

kde m je hmotnost částice, v její rychlost a p_i složky hybnost. Dosazením do vztahu (2.2) dostaneme

$$\rho\left(x_i, p_i\right) = C\, e^{-\frac{U\left(x_i, p_i\right)}{kT}} = C\, e^{-\sum_{j=1}^{N} \frac{p_j^2}{2mkT}}$$

Hodnotu konstanty C určíme z normovací podmínky (2.3). Protože vnitřní energie $U\left(p_1, p_2, p_3\right)$ nezávisí na prostorových souřadnicích, přejdeme do podprostoru hybností. Dosazením výrazu pro $\rho\left(x_i, p_i\right)$ do normovací podmínky (2.3) dostaneme

$$\int_{\Phi} \rho\left(x_i, p_i\right) d\Phi_p = \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} C e^{-\sum_{j=1}^{3} \frac{p_j^2}{2mkT}} dp_1 dp_2 dp_3 == m^3 \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} C e^{-\sum_{j=1}^{3} \frac{v_j^2}{2mkT}} dv_1 dv_2 dv_3 = 1$$

kde jsme pro hybnost použili definiční vztah $\vec{p} = m\vec{v}$. Po provedení potřebných výpočtů dostaneme pro konstantu C hodnotu

$$C = \left(2\pi mkT\right)^{-\frac{3}{2}} .$$

Pravděpodobnost $dP = \rho\left(\vec{v}\right) d\vec{v}$ stavu kdy má částice ideálního plynu rychlost v intervalu $\left\langle v, v + dv \right\rangle$ je určena vztahem

$$dP\left(\vec{v}\right) = \rho\left(v_1, v_2, v_3\right) dv_1 dv_2 dv_3 = \left(\frac{2\pi}{mkT}\right)^{-\frac{3}{2}} e^{-\frac{m v^2}{2kT}} v^2 dv \qquad (2.5)$$

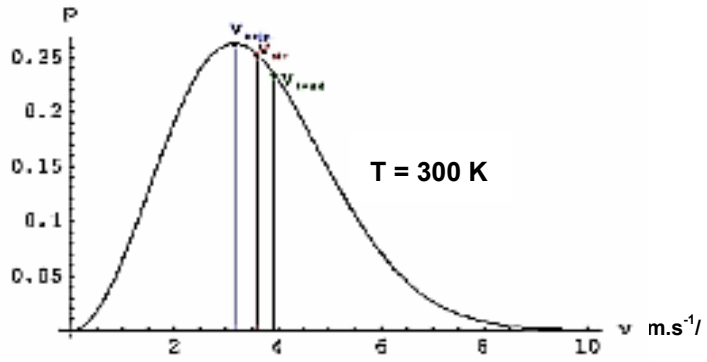
kde jsme přešli v prostoru rychlostí od kartézské soustavy souřadné k soustavě sférické se současným vystředováním přes prostorový úhel

$$dv_1 dv_2 dv_3 = 4\pi v^2 dv .$$

Vztah (2.5) popisuje ***Maxwellovo rozdělení rychlostí*** částic klasického ideálního plynu, viz obr.2.2.

2.4.2 Vnitřní energie ideálního plynu

Určíme vnitřní energii makrosoustavy tvořené ideálním plynem, např. nádobou o objemu V, uvnitř které je uzavřeno jisté množství ideálního plynu, určené celkovým počtem molekul N při teplotě T. Okamžitá energie molekuly ideálního plynu, modelované částicí bez vnitřní struktury, např. ***jednoatomová*** molekula, je rovna kinetické energii e_k jejího neuspořádaného (chaotického) posuvného pohybu



Obr. 2.2 Maxwellovo rozdělení rychlostí částic klasického ideálního plynu (molekul kyslíku), $dp = \rho(v)dv$. Na obrázku je vyznačena rychlost nejpravděpodobnější v_{nejp}, střední lineární v_{lin} a střední kvadratická v_{kvad}.

mezi dvěma po sobě následujícími pružnými srážkami s jinými molekulami. Hodnota celkové vnitřní energie U uvedené makrosoustavy představuje střední hodnotu kinetické energie všech molekul tvořících soustavu. Použitím vztahu (2.5) dostaneme

$$U = \bar{E}_k = \sum_{j=1}^{N} \bar{e}_{kj} = N \int_0^{\infty} e_k(v)\,\rho(v)\,dv_1 dv_2 dv_3 = \\ = \frac{4\pi N}{(2\pi mkT)^{\frac{3}{2}}} \int_0^{\infty} \frac{mv^2}{2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 dv = \frac{3}{2} NkT \tag{2.6}$$

Uvedený vztah teoreticky potvrzuje již dříve získané experimentální zjištění, že energie ideálního plynu závisí pouze na termodynamické teplotě T.

Důležitost tohoto vztahu spočívá v tom, že spojuje termodynamický popis fyzikální soustavy – termodynamickou teplotu T, s popisem pomocí molekulové, resp. statistické fyziky – pohybem částic, a jejich kinetickou energií $\bar{e}_k$. Daným vztahem je vyjádřena příčinná souvislost mezi makroskopicky se projevující a měřitelnou teplotou látky a mikroskopickým pohybem jejích částic - ***teplota je vnějším projevem molekulárního pohybu a mírou střední energie pohybu molekul*.**

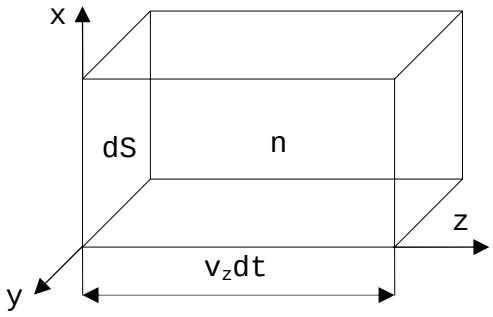
$$\overline{e_k} = \frac{1}{2} m \overline{v^2} = \frac{3}{2} kT$$

2.4.3 Tlak plynu

Při pružných nárazech molekul ideálního plynu na stěny nádoby mění molekuly plynu směr rychlosti a tedy i hybnost. Podle zákonů mechaniky proto každá molekula plynu působí při svém pružném nárazu na stěnu silovým impulsem. Makroskopicky se toto silové působení molekul projeví jako tlaková síla působící na stěnu nádoby. Je-li dS element plochy stěny nádoby, můžeme velikost síly, působící kolmo na stěnu nádoby vyjádřit pomocí vztahu $dF = p\,dS$, kde p je tlak plynu.

Velikost tlakové síly se, přísně vzato, v každém okamžiku mění v důsledku fluktuace počtu nárazů molekul plynu na stěny nádoby. Toto kolísání je však tak rychlé a při hmotnosti molekul tak nepatrné, že je běžným tlakoměrem nemůžeme postihnout.

Hodnota tlaku plynu získaná měřením představuje potom střední hodnotu této tlakové síly. Položíme osu *z* kolmo k rovině stěny nádoby, viz obr.2.3.



Obr.2.3 Schéma pro výpočet tlaku

Pohybuje-li se molekula o hmotnosti *m* ke stěně rychlostí $-\vec{v}_z$ dojde při pružném nárazu molekuly na stěnu nádoby ke změně hybnosti $\Delta\vec{p} = -m\vec{v}_z - m\vec{v}_z = -2m\vec{v}_z$. Je-li *n* počet molekul v jednotce objemu, je celkový počet molekul s rychlostí $-v_z$, které dopadnou za čas *dt* na element plochy *dS* stěn nádoby určen vztahem $dN_v = -n\, v_z dt\, dS$. Z druhého Newtonova zákona potom plyne

$$-dF\,dt = d\,p = -2m\,n v_z^2 dt\,dS \Rightarrow p = \frac{\overline{dF}}{dS} = 2\,n\,m\,\overline{v}_z^2 .$$

Střední hodnotu tlakové síly na jednotku plochy určíme pomocí vztahu (2.5)

$$p = \frac{4\pi n}{\sqrt{2\pi mkT}} \int_{\frac{\pi}{2}}^{\pi} \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{\infty} 2m v_z^2 e^{-\frac{mv^2}{2kT}} v^2 dv = nkT. \qquad (2.7)$$

Na rozdíl od vztahu (2.6) jsme vystředovali pouze přes úhel φ a integraci přes úhel θ jsme provedli, vzhledem k tomu, že uvažujeme pouze molekuly pohybující se směrem ke stěně, v intervalu $\langle \pi/2; \pi \rangle$. Stejně jako v případě teploty je i tlak plynu makroskopickým projevem molekulárního pohybu. Provedeme-li následující úpravu vztahu (2.7)

$$p = nkT = \frac{N}{V}kT \Rightarrow Vp = n_{mol} N_A kT = n_{mol} RT ,$$

kde n_{mol} je počet molů, N_A Avogadrova konstanta a *R* plynová konstanta, dostaneme stavovou rovnici ideálního plynu.

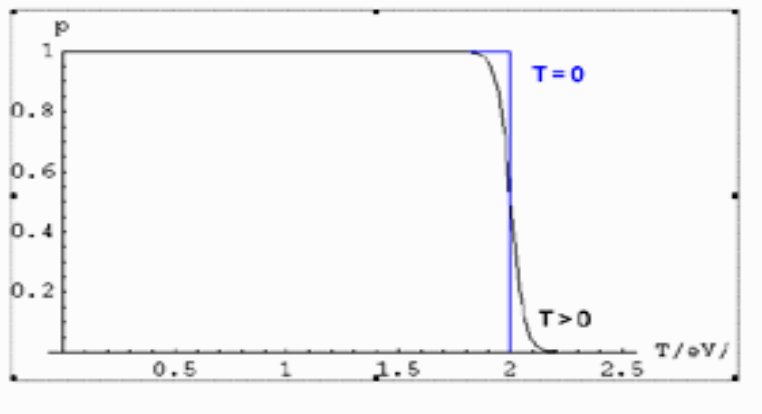
2.4.4 Termoemise elektronů – kvantověmechanický ideální plyn

Statistické zákony mají obecnou platnost a řídí se jimi nejen částice, které můžeme popsat klasicky, tzn. jejichž parametry se mění spojitě, ale i částice, které se řídí zákony kvantové fyziky, tzn. jejichž parametry se mění nespojitě. V tomto případě je ovšem nutné respektovat při aplikaci statistických zákonitostí principy kvantové fyziky. Pro soubory stejných částic je to ***princip nerozlišitelnosti částic***, který je důsledkem ***Heisenbergových relací neurčitosti.*** Podle tohoto principu nelze částice stejné fyzikální povahy navzájem rozlišit. Druhý princip, který je nutné respektovat

pro soubor ***fermionů***, je ***Pauliho vylučovací princip***. Aplikací uvedených kvantově mechanických principů na ***ideální fermionový plyn*** dostaneme pro rovnovážný počet fermionů $\overline{n}$ s energií ε, tzv. ***Termu – Diracovo rozdělení,*** vztah

$$\overline{n_e} = \frac{g}{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{kT}}+1}. \tag{2.8}$$

Na obr. 2.4 je zobrazen průběh Fermi-Diracova rozdělení elektronů mědi pro teploty $T = 0K$ a $T > 0K$. Na obrázku je vynesena pravděpodobnost $p = \overline{n}/g$ obsazení energetické hladiny ε. Z obrázku je zřejmý význam ***chemického potenciálu*** μ. Je to maximální hladina energie ε obsazená při teplotě $T = 0K$, resp. hodnota energie, která je obsazena s pravděpodobností 0,5 při teplotě $T > 0K$. Ve fyzice pevných látek je chemický potenciál μ označován jako ***Fermiho energie ε_F,*** přičemž platí $\mu = \varepsilon_F$.



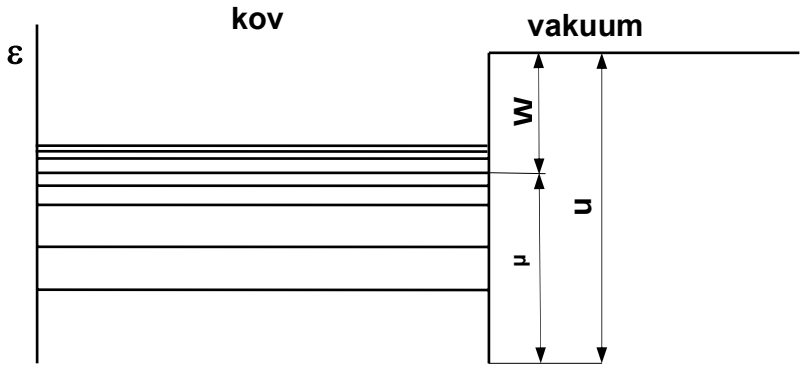
Obr.2.4 Fermi-Diracovo rozdělení pro elektrony Cu

V řadě aplikací lze elektrony v kovech modelovat ideálním fermionovým plynem, který se pohybuje v prostorovém periodickém potenciálním poli vytvářeném ionty atomů v uzlech krystalové mřížky. Při zahřívání kovu získají některé elektrony energii, která stačí k překonání jejich vazby v kovu a dojde k jejich uvolnění z kovu. Tento jev označujeme jako ***termoemise elektronů***.

Při částicovém popisu termoemise budeme předpokládat konfiguraci stejnou jako na obr. 2.5. Rovina (x, y) nyní představuje rovinu zahřívaného kovu - katody. Podmínkou emise elektronů v kladném směru z-ové osy je nerovnost $p_z \geq \sqrt{2mu}$, kde p_z je z-ová složka hybnosti elektronu a u výška potenciální bariéry elektronu v kovu, viz obr. 2.5. Stejnou úvahou jako pro stanovení počtu molekul dopadajících stěnu nádoby, odvodíme pro hustotu termoemisního proudu i, který je určen celkovým nábojem emitovaným z jednotkové plochy katody za jednotku času, vztah $i = e\,n v_z$, kde n je objemová hustota elektronů, e elementární náboj a $v_z = p_z/m$ je na hodnota z-ové složky jejich rychlosti. Celková hustota termoemisního proudu i je určena její střední hodnotou. Použitím vztahu (2.7) dostaneme pro střední hodnotu hustoty termoemisního proudu vztah

$$i = en\overline{v}_z = \frac{2e}{(2\pi\hbar)^3}\int_{-\infty}^{\infty} dp_x \int_{-\infty}^{\infty} dp_y \int_{\sqrt{2mu}}^{\infty} \frac{p_z}{m}\frac{1}{e^{\frac{p_x^2+p_y^2+p_z^2}{2mkT}}+1} dp_z, \tag{2.9}$$

kde $\hbar$ je redukovaná Planckova konstanta. Tato úprava nám umožňuje nahradit sumaci přes všechny energie v energetickém spektru elektronu integrací přes



Obr.2.5 Energetické spektrum elektronů na kontaktu kov-vakuum

všechny dovolené stavy. Tato substituce je možná v případě, kdy elektron je

$$d\Gamma = \frac{d\Phi}{(2\pi\hbar)^3},$$

excitován do vysokých energetických stavů a mezery mezi dovolenými hodnotami energie jsou relativně malé a změna energie probíhá téměř spojitě, viz obr. 2.5. V případě termoemise, kdy teplota katody dosahuje $\approx 10^3\ K$, je uvedený předpoklad splněn. Navíc lze ve jmenovateli výrazu (2.9) zanedbat jedničku. Za uvedených předpokladů lze výraz (2.9) vypočíst analyticky. Výsledný vztah má tvar (M. LAUE 1918; S.DUSHMAN, 1923)

$$i = \frac{me}{(2\pi\hbar)^3}(kT)^2 e^{-\frac{W}{kT}},$$

kde $W = u - \mu$ je výstupní práce elektronu z kovu. Uvedený vztah byl potvrzen experimentálními výsledky, což byl historicky významný výsledek potvrzující, že elektrony tvoří fermionový plyn.

Shrnutí kapitoly.

V předcházející výkladu jste se seznámili s výsledky, které lze získat na základě představy, že látky mají částicovou strukturu. Jak jsme již uvedli v úvodu této kapitoly - objev částicové struktury hmoty je jedním z nejpozoruhodnějších poznatků, ke kterým dospěla moderní fyzika. Byla to právě snaha pochopit vlastnosti a procesy na úrovni atomů, která vyvolala vznik kvantové fyziky. A statistická fyzika, která byla vypracována jako aparát, který umožňuje popis vycházející z částicové struktury látek, je dnes nejobecnější metoda popisu fyzikálních soustav.

Otázky:

1. Vysvětlete z hlediska částicové struktury látek, ochlazování horké lžíce polévky foukáním.
2. Vysvětlete na základě fluktuací, tj. odchylek od středních hodnot hustoty horkého vzduchu vznik fata morgány.
3. Vysvětlete na základě částicové struktury hmoty přenos tepla vedením.

3 KVANTOVÁ FYZIKA

Průvodce studiem.

I když představa o částicové struktuře látek vznikla v rámci klasické fyziky, při popisu procesů na molekulové a atomární úrovni klasická fyzika selhala. Pro popis těchto procesů musely být zformulovány nové ideje a vypracován nový matematický aparát. Toto všechno je obsahem následující kapitoly. Kvantová fyzika nejenže popisuje děje na atomární úrovni zcela v souladu s experimenty ale současně umožnila vývoj moderních technologií a výrobních oborů – elektroniky, informatiky, moderních diagnostických metod atd. Rozvoj moderní chemie a molekulární biologie je založen na výsledcích kvantové fyziky. Kvantová fyzika rovněž odhalila meze našeho poznání a úlohu náhody v přírodě.

V této kapitole se dozvíte:

- důvody vzniku kvantové fyziky
- základní ideje a představy kvantové fyziky
- základy operátorového počtu
- o postupech při aplikacích kvantové fyziky na vybraných problémech
- o důležitých důsledcích při aplikaci kvantové fyziky na soubory částic

Klíčová slova této kapitoly:

Kvantová fyzika, dualismus mikročástic, operátor veličiny, spin, Heisenbergovy relace neurčitosti

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly: 40 hod

3.1 HISTORICKÉ POZNÁMKY

Koncem 19.stol. se mnohým fyzikům jevila fyzika jako neperspektivní téměř již uzavřený obor lidského bádání. Zdálo se, že vše důležité bylo již řečeno. Existovalo sice několik problémů, jejichž vysvětlení zatím vzdorovalo všem snahám je objasnit ale to byly, podle vyjádření anglického fyzika **WILLIAMA KELVINA** (1824 – 1907), „pouze obláčky na jinak čistém nebi.“ Většina fyziků se domnívala, že je jenom otázkou času, kdy budou tyto problémy odpovídajícím způsobem vysvětleny. Jak mylný byl tento postoj ukázal další vývoj.

Negativní výsledek Michelson – Morleyova pokus, který měl dokázat existenci éteru, vedl ke vzniku speciální a v návaznosti i obecné teorie relativity, které revolučním způsobem změnili naše chápání času a prostoru. A stejně převratné důsledky přineslo řešení problémů spojených s procesy, které probíhají na atomární a subatomární úrovni. Některé tyto problémy uvedeme dále. Ukázalo se, že pro úspěšné vysvětlení, pochopení a popis těchto dějů je nutné změnit zásadním způsobem dosavadní přístup a metody popisu přírodních jevů. Především bylo nutné se vzdát determinismu klasické fyziky, přijmout diskrétní změny fyzikálních veličin a stochastický popis dějů.

Za vznik kvantové fyziky se obecně pokládá rok 1900, kdy německý fyzik **Max PLANCK** (1858 – 1947) poprvé vyslovil hypotézu o kvantování energie při zdůvodnění jím odvozeného vztahu pro hustotu vyzařování energie absolutně černého tělesa. Hypotéza o kvantování energie byla přijata s velkými rozpaky a mnohými fyziky byla i odmítána. V roce 1905 použil hypotézu kvantování energie **ALBERT EISTEIN** (1879 – 1955) pro vysvětlení vnějšího fotoefektu. Dánský fyzik **NIELS BOHR(**1885 – 1962**)** zveřejnil v roce 1920 model atomu vodíku, který byl založen na myšlence kvantování. Základy soudobé kvantové mechaniky pak byly položeny ve třicátých letech minulého století **WERNEREM HEISENBERGEM** (1901 – 1976), **ERVINEM SCHRŐDINGEREM** (1887 – 1961) a **WOLFGANGEM PAULIM** (1900 – 1958). Anglický fyzik **PAUL DIRAC** (1902 – 1987) pak upravil základní rovnice kvantové fyziky tak aby respektovaly výsledky speciální relativity.

Kvantová fyzika ukázala jak ošidné je spoléhat se při popisu jevů, které jsou mimo dosah našich smyslů, na naši dosavadní zkušenost nebo na „selský rozum.“ Potíže při pochopení základních idejí současné kvantové fyziky vyplývají jednak z relativně náročného matematického aparátu kvantové fyziky ale zejména ze zcela odlišného pojmového a metodického přístupu při interpretaci získaných výsledků.

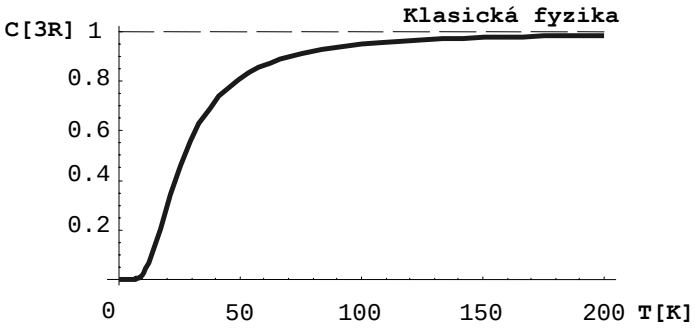
Přesto představuje kvantová fyzika jednu z nejlépe rozpracovaných fyzikálních teorií, jejíž závěry byly beze zbytku potvrzeny experimentálními výsledky. Rozvoj moderních technologií v oblasti materiálů, informatiky, elektroniky, optiky atd. vychází především z výsledků kvantové fyziky. Ale i současný bouřlivý rozvoj v oblasti biologických věd a biotechnologií vychází jednak z výsledků kvantové fyziky, jednak z pokroku experimentálních technik, jejichž principy opět využívají výsledky kvantové fyziky.

3.2 VYBRANÉ EXPERIMENTÁLNÍ DŮVODY VZNIKU KVANTOVÉ FYZIKY

Jak jsme již uvedli v úvodní kapitole, objevily se koncem 19. stol. experimenty, při jejichž vysvětlení klasická fyzika selhala. Dále uvedeme některé z nich. Vysvětlení z hlediska kvantové fyziky uvedeme v dalších kapitolách.

3.2.1 Měrné teplo krystalů

Pokrok v experimentální technice umožnil koncem 19. stol. provádět experimenty při teplotách blízkých absolutní nule. Holandský fyzik **HEIKE KAMERLING-ONNES** (1853 – 1926) zjistil, že měrná tepla krystalů jsou v blízkosti absolutní nuly teplotně závislá a jejich hodnota klesá k nule, viz obr. 3.1. Tento fakt byl v rozporu z výsledky klasické fyziky, podle které jsou molární tepla všech krystalů stejná, nezávislá na teplotě a chemickém složení – ***Dugong- Petitův zákon***.

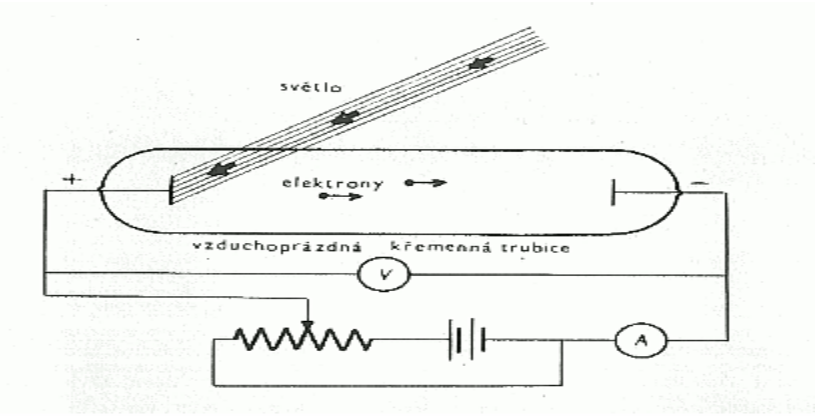


Obr.3.1 *Teplotní závislost měrného tepla c(T)*

V rámci klasické fyziky byl pokles měrných tepel v oblasti velmi nízkých teplot naprosto nepochopitelný.

3.2.2 Fotoelektrický jev

Vnější fotoefekt, viz.obr. 3.2. V roce 1887 objevil německý fyzik **HEINRICH HERTZ (**1857 – 1894**)**, že při dopadu elektromagnetického záření na povrch některých látek dochází k emisi elektronů, tz

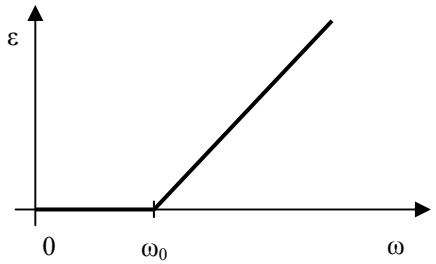


Obr.3.2 Experimentální uspořádání pro fotoefekt

Podle klasické fyziky by k fotoefektu mělo docházet při dostatečné intenzitě dopadajícího elektromagnetického záření nezávisle na jeho frekvenci a energie emitovaných elektronů by měla růst rovněž s růstem intenzity záření. Pokusy však vedly k následujícím výsledkům:

1. Pro danou frekvenci měly všechny emitované elektrony stejnou energii.
2. S růstem intenzity dopadajícího světla se energie emitovaných elektronů nezvyšovala, zvyšoval se pouze jejich počet.
3. Existuje mezní frekvence ω_0 taková, že pro $\omega < \omega_0$ fotoefekt nenastane, přičemž energie emitovaných elektronů závisí na frekvenci lineárně, viz obr. 3.3.

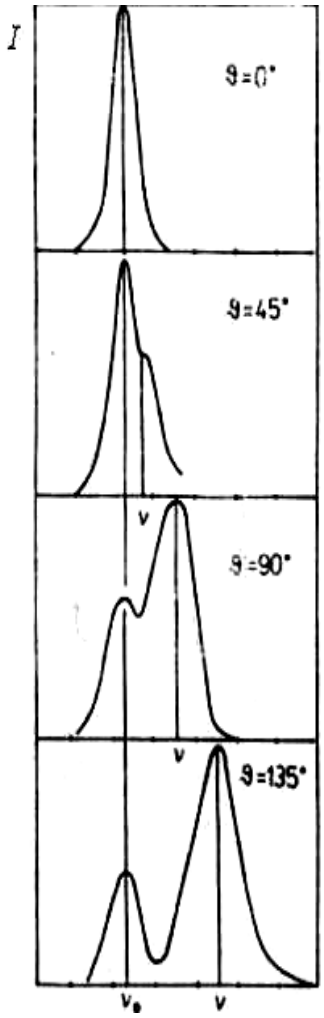
V rámci klasické fyziky byla závislost fotoefektu a energie emitovaných elektronů na frekvenci naprosto nepochopitelná. Vysvětlení v rámci kvantové fyziky je uvedeno v kap. 3.3.1.



Obr. 3.3 Závislost energie emitovaných elektronů na frekvenci

3.2.3 Comptonův jev

Při dopadu elektromagnetického záření na látkové rozhraní dojde podle klasické fyziky k odrazu dopadajícího záření, přičemž frekvence odraženého záření je rovna



Obr. 3.4 Závislost intenzity na úhlu dopadu ζ

frekvenci záření dopadajícího a úhel dopadu je roven úhlu odrazu. Anglický fyzik **ARTUR COMPTON** (1892 – 1962) studoval rozptyl rentgenového záření na kovových terčících, přičemž zjistil, že část odraženého záření měnilo frekvenci v závislosti na úhlu odrazu, viz obr. 3.4, na kterém je vynesena intenzita rozptýleného záření

v závislosti na úhlu odrazu. Uvedený jev je v naprostém rozporu se závěry, které vyplývají z Maxwellových rovnic. Vysvětlení v rámci kvantové fyziky je uvedeno v kap. 3.3.1.

3.2.4 Stabilita atomu

Podle výsledků pokusů **ERNEST RUTHERFORDA** (1871 – 1937) se atom skládá z kladně nabitého těžkého jádra a záporně nabitých elektronů, které obíhají kolem jádra. Stabilita tohoto tzv. planetárního modelu atomu by měla být zajištěna vzájemnou kompenzací odstředivé síly a Coulombovy přitažlivé síly, kterou na sebe vzájemně působí opačně nabité jádro a elektron

$$\vec{F}_{od} = \vec{F}_C \quad \Rightarrow \quad \frac{m_e v^2}{r} = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\,.$$

Zanedbáme-li pohyb jádra, které je přibližně $\approx 10^3$ - krát těžší než elektrony, pohybují se elektrony po uzavřených zakřivených trajektoriích a tedy na ně působí minimálně dostředivé zrychlení určené rovnicí

$$m_e \ddot{\vec{r}} = \frac{-e^2\vec{r}}{4\pi\varepsilon_0 r^3}\,. \tag{3.1}$$

Z Maxwellových rovnic však vyplývá, že při zrychleném pohybu nabité částice je generováno elektromagnetické záření, které odnáší část energie nabité částice. Intenzita tohoto záření je určena vztahem

$$I = \frac{e^2 c}{6\pi\varepsilon_0}\left(\frac{r}{r_0}\right)^2 \;;\; r_0 = \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 m_e c^2} \approx 2{,}8.10^{-15}\,m\,, \tag{3.2}$$

kde r_0 je tzv. „klasický poloměr“ elektronu. To ovšem znamená, že celková energie E elektronu klesá a platí

$$I = -\frac{dE}{dt} = -\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 r^2}\;\dot{r}\,. \tag{3.3}$$

Rovnováha mezi odstředivou a Coulombovou sílou je porušena, odstředivá síla klesá a elektron je stále více přitahován ke kladnému jádru až nakonec na něj dopadne – atom zkolabuje. Pomocí rovnic (3.1), (3.2) a (3.3) odvodíme pro rychlost časové změny polohového vektoru $\dot{r}$ elektronu diferenciální rovnici

$$3r^2\dot{r} + 4cr_0 = 0\,.$$

Z řešení uvedené diferenciální rovnice potom pro „dobu života“ atomu, tj. čas, za který dopadne elektron do jádra, dostaneme vztah $\tau = R_0/4cr_0^2$, kde R_0 je počáteční „velikost“ atomu. Zkušenost ale ukazuje, že atomy většiny látek jsou stabilní. V rámci klasické fyziky je opět stabilita atomu záhadou. Vysvětlení v rámci kvantové fyziky je uvedeno v kap. 3.5.3.

3.2.5 Záření absolutně černého tělesa

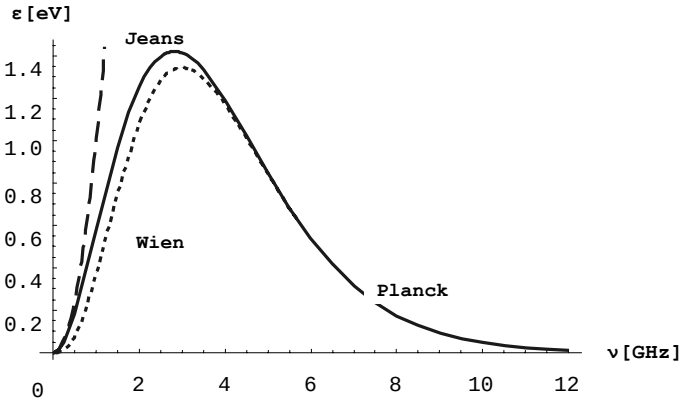
Ze zkušenosti je známo, že tělesa s teplotou vyšší než je absolutní nula emitují elektromagnetické záření. Spektrální rozdělení energie tohoto záření závisí na teplotě tělesa (viz např. zařízení pro noční vidění, světelné zdroje atd.). Pro popis tohoto jevu je důležitý model ***absolutně černého tělesa***. Je to těleso, které pohltí veškeré záření, které na něj dopadá. Experimentálně lze těleso o těchto vlastnostech realizovat poměrně snadno otvorem v uzavřené dutině. Světlo dopadající otvorem do dutiny se mnohonásobnými odrazy zeslabí natolik, že je téměř všechno absorbováno. O správnosti uvedeného tvrzení Vás přesvědčí pohled z ulice do oken okolních domů. Okno představuje otvor a místnost za ním uzavřenou dutinu. Je-li záření uzavřeno v hmotném prostředí, ustaví se uvnitř dutiny vlivem současně probíhající absorpce a emise elektromagnetického záření stav termodynamické rovnováhy. Pro podíl intenzity emitovaného záření $I_e(\nu, T, \Omega)$ a absorpce $A(\nu, T, \Omega)$ platí

$$\frac{I_e(\nu,T,\Omega)}{A(\nu,T,\Omega)} = c\,\varepsilon(\nu, T)\cos\vartheta,$$

kde ν je frekvence, T termodynamická teplota, Ω prostorový úhel, c rychlost světla a ϑ radiální složka prostorového úhlu Ω. Funkce $\varepsilon(\nu, T)$ je univerzální funkcí frekvence a teploty, nezávislá na vlastnostech stěn dutiny, tzv. ***Kirchhoffův zákon***.

Obecné termodynamické úvahy dovolují zredukovat univerzální funkci $\varepsilon(\nu,T)$ na funkci jedné proměnné

$$\varepsilon(\nu, T) = \nu^3 f\left(\frac{\nu}{T}\right).$$



Obr. 3.5 Porovnání průběhu Jeansova, Wienova a Planckova zákona

Pro odvození konkrétního tvaru funkce $f(\nu/T)$ je nutné vzít do úvahy mechanismus emise záření stěnami dutiny. Klasická teorie elektromagnetického pole vede k ***Rayleigh-Jeansovu zákonu***

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{\nu^2}{\pi c^2} kT,$$

kde k je Boltzmannova konstanta. Uvedený vztah odpovídá experimentálním datům pouze v oblasti nízkých frekvencí, viz obr. 3.5. V oblasti vysokých frekvencí vede k tzv. „ultrafialové katastrofě“ - diverguje k nekonečnu pro libovolné T. **CARL WIEN** (1864 – 1928) předpokládal, že rozdělení

energií emitovaného záření v závislosti na frekvenci má obdobný tvar jako Maxwellovo rozdělení rychlostí v ideálním plynu, viz kap. 2.4.1. Za tohoto předpokladu odvodil tzv. ***Wienův zákon záření***

$$\varepsilon(\nu, T) = \gamma \nu^3 e^{-\frac{\beta \nu}{kT}},$$

kde β a γ jsou empirické konstanty. Uvedená závislost souhlasí s experimentálními daty pouze v oblasti vysokých frekvencí.

Správný zákon záření absolutně černého tělesa nalezl M.Planck (1900)

$$\varepsilon(\nu, T) = \frac{1}{\pi^2 c^3} \frac{h\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1},$$

kde ***h*** **[J.s^{-1}]** je ***Planckova konstanta***. Při zdůvodňování uvedeného zákona musel Planck zavést hypotézu o diskrétní emisi záření. Pro kvantum energie postuloval tzv. ***Planckův vztah***

$$\boldsymbol{\varepsilon_\nu = h\nu}.$$

3.3 VLNOVĚ KORPUSKULÁRNÍ DUALIZMUS MIKROSVĚTA

3.3.1 Historický úvod

Einstein (1905) dal kvantům ε_ν radikálně novou interpretaci. Místo kvant energie zavedl částice elektromagnetického záření – ***fotony*** (z řeckého φοτόσ - světlo), z nichž každá nese energii $h\nu$ a na základě této interpretace popsal fotoefekt následující rovnicí

$$h\nu = W_0 + \frac{1}{2} m_e \upsilon^2,$$

kde W_0 je ***ionizační*** nebo ***výstupní práce***, tj. práce potřebná k uvolnění elektronu z atomu látky vykazující fotoefekt, m_e hmotnost elektronu a υ rychlost volného elektronu. Vztah vyjadřuje princip zachování energie – energie absorbovaného fotonu se spotřebuje na uvolnění elektronu z atomu dané látky a zbývající energie se projeví jako kinetická energie volného elektronu. Tento částicový charakter elektromagnetického záření se projevuje i při jiných jevech (např. Comptonův rozptyl). Elektromagnetické záření (světlo) tedy projevuje někdy své vlnové vlastnosti (difrakce, interference), a při jiných procesech (záření těles, fotoelektrický jev, Comptonův rozptyl) se chová jako částice. Je tedy světlo vlnění nebo proud částic? Takto formulovaná otázka předpokládá, že obě uvedené formy se navzájem vylučují. Co jsou to však vlny nebo částice – jsou to pouze abstraktní modely, pomocí kterých se pokoušíme popsat a pochopit procesy, které pozorujeme. Příroda je však taková jaká je, zcela nezávislá na našich představách a modelech. Pro některé projevy světla je zkrátka vhodnější model vlny a pro jiné model částice. Co je však důležité je skutečnost, že umíme přejít od jednoho modelu ke druhému pomocí vztahů

$$\boldsymbol{\varepsilon = h\nu = \hbar\omega \;;\; \vec{p} = \hbar\vec{k},\ resp.\ \ p = \frac{h}{\lambda}}. \qquad (3.4)$$

V uvedených vztazích jsou na levé straně parametry charakterizující částici (energie, hybnost) na pravé straně potom parametry charakterizující vlnu (frekvence, vlnová délka).

LUIS DE BROLIE (1892 – 1987) vyslovil hypotézu (1923), že uvedené vztahy platí pro libovolné částice. Řadou pokusů s difrakcí elektronů (**DAVISSON, GERMER**, 1928) byl tento závěr potvrzen. Pozdější pokusy prokázaly vlnové vlastnosti i dalších částic, celých atomů i molekul. Byl tak potvrzen vlnově korpuskulární charakter zákonitostí mikrosvěta.

Shrnutí kapitoly

Procesy a částice mikrosvěta vykazují vlastnosti jak vlnové, tak i korpuskulární. Tuto skutečnost označujeme jako vlnově korpuskulární dualismus mikrosvěta. Některé jevy lze dokonce vysvětlit pomocí jak vlnového, tak i korpuskulárního formalizmu.

Řešená úloha č.5

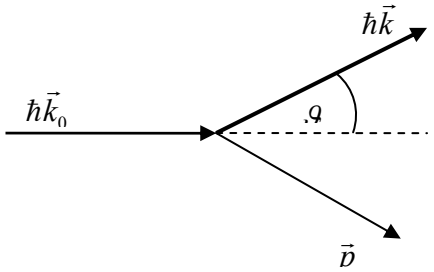
Vysvětlete pomocí vlnově korpuskulárního dualismu Comptonův jev.

Řešení úlohy

Při Comptonově jevu se rozptyluje rentgenové záření na kovových terčících, přičemž u rozptýleného záření dochází ke změně frekvence. Pro vysvětlení tohoto jevu použijeme model, kdy rentgenové záření představuje proud fotonů, které se rozptylují na volných elektronech kovového terčíku. V principu jde o model pružné srážky dvou koulí. Protože fotony rentgenového záření jsou kvanta elektromagnetického záření, pohybují se rychlostí c, a proto musíme pro vyjádření energie použít relativistický vztah

$$E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}\,,$$

kde m_0 je klidová hmotnost dané částice. Nechť elektron je na počátku v klidu, jeho hybnost je $\vec{p}_0 = 0$ a klidová energie $m_0 c^2$. Hybnost a energie dopadajícího fotonu ($m_0 = 0$) jsou $\hbar\vec{k}_0$ a $\hbar\omega_0$. Hybnost a energii elektronu po srážce označme $\vec{p}$ a $E = c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}$, hybnost a energii rozptýleného fotonu $\hbar\vec{k}$ a $\hbar\omega$, viz obr. 3.6.



Obr. 3.6 Schéma srážky fotonu s volným elektronem

Ze zákonů zachování energie a hybnosti plynou vztahy

$$\begin{aligned} \hbar\vec{k}_0 &= \vec{p} + \hbar\vec{k} \\ m_0 c^2 + \hbar\omega_0 &= \hbar\omega + c\sqrt{p^2 + m_0^2 c^2}\,. \end{aligned} \qquad (3.5)$$

Použijeme-li dále vztah

$$\left(\vec{k}-\vec{k}_0\right)^2 = k_0^2 + k^2 - 2kk_0\cos\vartheta\,,$$

odvodíme z rovnic (3.5) závislost frekvence rozptýleného záření ω na frekvenci dopadajícího záření ω_0 a úhlu rozptylu ϑ ve tvaru

$$\omega = \frac{\omega_0}{1+\dfrac{\hbar\omega_0}{m_0c^2}\left(1-\cos\vartheta\right)}\,.$$

Pro $\hbar\omega_0 << m_0c^2$ je změna frekvence zanedbatelná ale pro $\hbar\omega_0 \approx m_0c^2$ již dochází k výrazné změně frekvence. Uvedený vztah se zpravidla vyjadřuje pomocí vlnových délek ve tvaru

$$\Delta\lambda = \lambda_0 - \lambda = 2\Lambda\sin^2\frac{\vartheta}{2} \quad ; \quad \Lambda = \frac{2\pi\hbar}{m_0c}\,,$$

kde Λ je tzv. ***Comptonova vlnová délka.***

3.3.2 Vlnová funkce

Z vlnově korpuskulárního dualizmu plyne, že částici je nutné přiřadit ***vlnovou funkci*** $\psi\left(\vec{r},\ t\right)$**.** Konkrétní tvar vlnové funkce najdeme pomocí jisté obecné rovnice, o níž pojednáme později. Funkce $\psi\left(\vec{r},t\right)$ je komplexní funkcí reálné proměnné. Na základě obecných vlastností vlnění klademe na vlnovou funkci tyto čtyři standardní podmínky:

1. ***jednoznačnost***
2. ***spojitost,***
3. ***konečnost,***
4. ***kvadratickou integrabilitu*** ***(3.6)***

První tři požadavky jsou evidentní, čtvrtý souvisí s fyzikální interpretací vlnové funkce. Postulujeme: Výraz $dw = \left|\psi\right|^2 d\vec{r}$, určuje pravděpodobnost dw jevu, že částice bude v čase t nalezena v daném stavu v elementu prostoru $d\vec{r}$, viz další výklad. Kvadrát modulu vlnové funkce $\left|\psi\right|^2 = \psi\,\psi^*$, kde ψ^* je komplexně sdružená hodnota vlnové funkce, představuje tedy hustotu pravděpodobnosti uvedeného jevu a platí pro ni normovací podmínka

$$\int_V \left|\psi\right|^2 d\vec{r} = 1\,.$$

Požadavek na kvadratickou integrabilitu vyjadřuje potom požadavek na existenci uvedeného integrálu.

Je nutné upozornit na důležitý fakt, že částici je přiřazena vlnová funkce $\psi\left(\vec{r},t\right)$**,** v níž $\vec{r}$ a t jsou ***nezávisle proměnné.*** Nehledáme tedy trajektorii $\vec{r}\left(t\right)$ nýbrž vlnovou funkci $\psi\left(\vec{r},t\right)$ v bodě $\vec{r}$ a v čase t.

Skutečnost, že trajektorie ztrácí v kvantové fyzice význam má hluboký fyzikální důvod. Dříve než zdůvodníme uvedené tvrzení, musíme zavést velmi důležitý princip

kvantové fyziky – ***princip superpozice***. Z Davisson-Germerových a všech pozdějších experimentů vyplynul závažný závěr, že tvar interferenčních obrazců nezávisí na intenzitě vlny. Pro vlnovou funkci tedy platí princip superpozice, který můžeme vyjádřit rovnicí

$$\Psi = \sum_i a_i \psi_i \ ,$$

kde a_i jsou obecně komplexní konstanty. Ve smyslu tohoto principu popisují-li obecně vlnové funkce ψ_i stavy dané částice, popisuje jistý stav dané částice i jejich lineární kombinace.

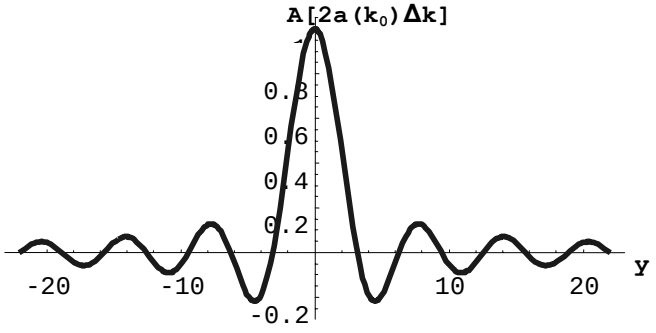
Uvažujme nyní částici, pro jednoduchost v jednorozměrném přiblížení. Ve vlnové reprezentaci představuje prostorově omezené vlnové klubko, jehož vlnovou funkci lze vyjádřit na základě principu superpozice jako superpozici rovinných vln $\psi(x,\ t) = a\, e^{i\left(\vec{k}\,\vec{r} - \omega t\right)}$ pomocí vztahu

$$\psi(x,t) = \int_{k_0-\Delta k}^{k_0+\Delta k} a(k)\, e^{i(kx-\omega t)} dk \tag{3.7}$$

kde hodnoty vlnového vektoru *k* leží v úzkém intervalu $k_0 - \Delta k \le k \le k_0 + \Delta k$. Potom můžeme položit $a(k) \approx a(k_0)$, resp. $\omega = \omega(k) \approx \omega_0 + (k - k_0)(d\omega/dk) = \omega_0 + w_g \Delta k$. Fázový faktor $kx - \omega t$ v rovnici (3.7) upravíme na tvar $k\,x - \omega\, t = k_0\, x - \omega_0\, t + \left(x - w_g t\right)\Delta k$. Po dosazení do (3.7) a integraci dostaneme

$$\psi(x,t) = A(x,t)\, e^{i\left(x - w_g t\right)\Delta k} \quad ; \quad A(x,t) = 2a(k_0)\frac{\sin\left[\left(x - w_g t\right)\Delta k\right]}{\left(x - w_g t\right)}.$$

Výsledkem je modulovaná vlna, jejíž amplituda $A(x,t)$ závisí na poloze a na čase, její tvar je na obr. 3.7 ($y = \left(x - w_g t\right)\Delta k$)



Obr. 3.7 Prostorové rozložení amplitudy vlnového svazku

Místa stejné amplitudy jsou určena rovnicí $x - w_g t = konst.$ Jsou to roviny pohybující se rychlostí w_g. Tato rychlost představuje rychlost svazku vln, a proto se nazývá ***grupovou rychlostí***. Amplituda je významně nenulová v oblasti

$x - w_g t = \Delta x$, pro níž platí $\Delta x \Delta k \approx 2\pi$. Pro de Broglieovy vlny dostaneme po dosazení z (3.1)

$$\Delta x \Delta p_x \approx h . \tag{3.8}$$

Oblast lokalizace Δx částice a neurčitost v určení hybnosti Δp_x jsou ***nepřímo úměrné***. To je diametrálně odlišný výsledek od klasické fyziky, kde jsou neurčitosti Δx a Δp_x úměrné přímo – důsledek existence trajektorie. Vztah (3.8) představuje kriterium použitelnosti klasické fyziky pro popis chování daného systému a tedy i podmínky pro zavedení pojmu trajektorie.

Upřesněný vztah (3.8) ve tvaru $\boldsymbol{\Delta x \, \Delta p_x \geq h}$ označovaný jako ***Heisenbergovy relace neurčitosti*** (W. Heisenberg, 1926) představuje jeden z nejdůležitějších vztahů kvantové fyziky.

Část pro zájemce.

Grupové rychlosti de Broglieových vln lze dát jednoduchou fyzikální interpretaci. Použitím vztahů (3.4) dostaneme

$$w_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dE}{dp} = \frac{d}{dp}\left(\frac{p^2}{2m}\right) = v ,$$

kde v je mechanická rychlost volné částice.

3.3.3 Schrödingerova rovnice

Na základě vlnově korpuskulárního dualizmu charakterizuje danou soustavu vlnová funkce $\psi(x,t)$, která je svázána s pravděpodobností výskytu dané soustavy v daném stavu v daném místě prostoru a v daném čase. Abychom mohli přiřadit vlnovou funkci dané soustavě je nutné nalézt rovnici, kterou tato vlnová funkce musí splňovat. Tuto rovnici ve tvaru

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(x,t) \right) = \hat{H}\psi \quad ; \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(x,t), \tag{3.9}$$

kde ∇ je ***gradient***, resp. ***operátor nabla,*** $\hat{U}$ operátor potenciální energie dané soustavy a $\hat{H}$ operátor Hamiltonův, postuloval E. Schrödinger (1926). Tato rovnice nese jeho jméno a patří k základním rovnicím kvantové fyziky. ***Schrödingerova rovnice*** určuje časový vývoj kvantověmechanické soustavy, a proto se nazývá ***časová Schrödingerova rovnice***.

Bezčasová neboli stacionární ***Schrödingerova rovnice*** ve tvaru

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad ; \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(x), \tag{3.10}$$

slouží k určení možných hodnot energie E dané soustavy v tzv. ***stacionárním stavu -*** $\partial \hat{H}/\partial t = 0$**,** viz kap. 3.4.4. Funkce, která řeší uvedenou rovnici musí vyhovovat podmínkám (3.6). Možné hodnoty energie jsou tak vybrány uvedenými podmínkami. V následujících kapitolách ukážeme, že obdobným způsobem se určují i možné hodnoty ostatních fyzikálních veličin.

3.4 MATEMATICKÝ A FORMÁLNÍ APARÁT KVANTOVÉ MECHANIKY

3.4.1 Operátory, základní pojmy a klasifikace

Kvantová fyzika byla zformulována téměř současně jednak v maticové formě W. Heisenbergem (1926), jednak v operátorové formě E. Schrödingerem (1926). P. Dirac (1928) ukázal, že obě formy jsou naprosto rovnocenné. Z didaktického hlediska se zdá být operátorová forma přístupnější, a proto použijeme pro další výklad operátorovou reprezentaci.

Pro naše účely bude operátor předpis, který dané funkci f přiřadí jinou funkci g. Můžeme tedy operátor definovat jako zobrazení z prostoru funkcí do prostoru funkcí. Graficky budeme operátor označovat „stříškou ^." Říkáme, že operátor $\hat{L}$ působí na funkci f, které přiřazuje funkci g

$$\hat{L} f = g .$$

Operátor nazýváme ***lineární***, platí-li pro libovolné funkce f, g a libovolné (komplexní) konstanty a, b

$$\hat{L}\left(a f\left(\vec{r},t\right)+b g\left(\vec{r},t\right)\right)=a\hat{L} f\left(\vec{r},t\right)+b\hat{L} g\left(\vec{r},t\right).$$

V kvantové fyzice vyplývá požadavek na linearitu operátorů z platnosti principu superpozice.

Danému operátoru přiřadíme ***charakteristickou rovnici*** předpisem

$$\hat{L} f = L f ,$$

kde L je reálné číslo. Řešení charakteristické rovnice, které splňuje podmínky (3.6) nazýváme ***vlastní*** neboli ***charakteristické řešení***. Ty hodnoty L, pro které vlastní řešení existuje, jsou ***vlastní hodnoty (vlastní čísla)*** daného operátoru. Množinu všech vlastních hodnot nazýváme ***spektrem operátoru.*** Spektrum může být diskrétní, spojité nebo smíšené. Existuje-li ke stejné vlastní hodnotě několik lineárně nezávislých vlastních funkcí, mluvíme o ***degenerovaném spektru***, v opačném případě o ***spektru nedegenerovaném*** neboli prostém.

Operátor je ***hermitovský*** (samosdružený, samoadjugovaný), platí-li pro dvě libovolné vlastní funkce f a g

$$\int_V f^* \hat{L} g \, d\vec{r} = \int_V g\left(\hat{L} f\right)^* d\vec{r} ,$$

kde index (*) značí komplexně sdruženou veličinu a V definiční obor vlastních funkcí. Položíme-li v uvedeném vztahu $f = g$, dostaneme $L = L^*$, což vyjadřuje reálnost vlastních hodnot spektra operátoru $\hat{L}$.

Střední hodnota $\overline{L}$ ***operátoru (veličiny)*** $\hat{L}$ je určena vztahem

$$\overline{L} = \int_V f^* \hat{L} f dx . \tag{3.11}$$

Vlastní funkce operátoru $\hat{L}$ tvoří ***ortonormální množinu funkcí***, tj. pro libovolnou dvojici vlastních funkcí f_n, f_m daného operátoru platí následující vztah

$$\int_V f_n f_m^* dx = \delta_{nm},$$

kde δ_{nm} je Croneckerovo delta, tj. symetrický tenzor jehož hodnota je *1* pro $m = n$ a *0* pro $m \neq n$. Uvedená vlastnost umožňuje za jistých podmínek vyjádřit libovolnou funkci $G(x)$ jako lineární kombinaci vlastních funkcí daného operátoru

$$G(x) = \sum_i a_i f_i(x),$$

kde a_i jsou komplexní koeficienty.

3.4.2 Operátorová algebra

V případě několika operátorů je nutné určit pravidla pro použití více operátorů. Pro ***součet operátorů*** $\hat{A}, \hat{B}$ platí

$$\left(\hat{A} + \hat{B}\right) f = \hat{A} f + \hat{B} f,$$

pro libovolnou funkci *f*.

Postupné působení dvou operátorů $\hat{A}, \hat{B}$ na funkci *f* označujeme jako součin operátorů $\hat{A}\hat{B}$. V obecném případě není součin operátorů komutativní, tj. výsledek působení operátorů záleží na pořadí operátorů. Platí-li pro operátory $\hat{A}, \hat{B}$

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] f = \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) f \neq 0$$

říkáme, že operátory $\hat{A}, \hat{B}$ jsou ***nekomutativní***. Samotný výraz $\left[\hat{A}, \hat{B}\right] = \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right)$ nazýváme ***komutátor operátorů*** $\hat{A}, \hat{B}$. Jsou –li dva operátory $\hat{A}, \hat{B}$ ***komutativní*** a tedy platí-li

$$\left[\hat{A}, \hat{B}\right] f = \left(\hat{A}\hat{B} - \hat{B}\hat{A}\right) f = 0,$$

pak mají oba operátory společné řešení charakteristické rovnice – operátory mají stejné vlastní funkce. Platí i obrácené tvrzení, takže platí následující teorém:

Nutnou a postačující podmínkou pro to, aby dva lineární hermitovské operátory měly společné vlastní funkce je komutativnost těchto operátorů.

3.4.3 Operátory základních fyzikálních veličin

V kapitole (3.4.1.) jsme definovali základní požadavky na vlastnosti operátorů fyzikálních veličin. Nyní si uvedeme konkrétní vyjádření operátorů základních fyzikálních veličin. Je-li $\psi(x,t)$ funkcí souřadnice *x*, pak ***operátorem souřadnice*** $\hat{x}$ rozumíme vynásobení touto souřadnicí

$$\hat{x}\,\psi(x,t) = x\,\psi(x,t).$$

Operátor souřadnice má ***spojité spektrum.*** Pro $x = x_0$ dostaneme charakteristickou rovnici ve tvaru

$$\hat{x}\,\psi(x,t) = x_0\,\psi(x,t) \quad \Rightarrow \quad (x - x_0)\,\psi(x,t) = 0,$$

takže pro $x \neq x_0$ je $\psi(x,t)=0$ a pro $x = x_0$ je $\psi(x,t)\neq 0$. Řešením je ***Diracova distribuce*** $\psi(x,t)=\delta(x-x_0)$, tzv. zobecněná funkce, která je určena následujícími vlastnostmi: pro $x \neq x_0$ je $\delta(x-x_0)=0$, pro $x = x_0$ je $\int_V \delta(x-x_0)\,dx = 1$.

Operátor hybnosti je definován vztahem

$$\hat{\vec{p}} = -i\hbar\nabla, \text{ resp. } \hat{p}_i = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x_i}\ ;\ i = 1,\ 2,\ 3,$$

kde *i* je imaginární jednotka. Operátor má spojité spektrum a bázi vlastních funkcí tvoří trigonometrické funkce. Složky operátoru polohového vektoru a rovněž operátoru vektoru hybnosti spolu navzájem komutují, tj. platí

$$\left[\hat{x}_i,\ \hat{x}_j\right] = 0 \quad ; \quad \left[\hat{p}_i,\ \hat{p}_j\right] = 0\,.$$

Uvedené operátory mají tedy ***společný systém vlastních funkcí***. Pro vzájemnou komutaci mezi složkami operátoru polohového vektoru a operátoru vektoru hybnosti však platí

$$\left[\hat{x}_i,\ \hat{p}_j\right] = i\hbar\delta_{ij}\,.$$

Operátory souhlasných složek operátoru vektoru polohy a operátoru vektoru hybnosti tedy spolu nekomutují a nemají žádnou společnou vlastní funkci. Fyzikálně to znamená, že fyzikální stav systému nelze popsat současným zadáním jeho polohy a hybnosti. Uvedený vztah představuje operátorové vyjádření vztahu (3.8), tj. Heisenbergových relací neurčitosti.

Pomocí operátorů polohy a hybnosti můžeme na základě analogie s klasickou mechanikou konstruovat složitější operátory.

Energie soustavy ***H*** je v klasické fyzice určena výrazem (Hamiltoniánem) $H = p^2/2m + U(r)$, kde $U(r)$ je potenciální energie soustavy. ***Halmiltnovým operátorem*** neboli ***operátorem energie*** nazveme operátor, viz vztah (3.9),

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(\hat{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + \hat{U}(\hat{r}).$$

V klasické fyzice je moment hybnosti $\vec{l}$ definován vztahem $\vec{l} = \vec{r}\times\vec{p}$, kde symbol „×“ značí vektorový součin. Opět na základě analogie definujeme operátor momentu hybnosti vztahem

$$\hat{\vec{l}} = \hat{\vec{r}}\times\hat{\vec{p}} = -i\hbar\left[\vec{r}\times\nabla\right] = \hbar\,\hat{\vec{J}}\,.$$

Mezi složkami operátoru moment hybnosti pak platí vztahy

$$\left[\hat{J}_i, \hat{J}_j\right] = i\hat{J}_k \quad ; \quad i, j, k = 1, 2, 3 \quad , \quad i \neq j \neq k\,,$$

$$\left[\hat{\vec{J}}^2, \hat{J}_i\right] = 0 \quad ; \quad \hat{\vec{J}}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + \hat{J}_3^2\,.$$

V kvantové mechanice lze tedy soustavě ***současně*** přiřadit ***velikost (absolutní hodnotu)*** vektoru momentu hybnosti a ***průmět,*** např. J_i, tohoto vektoru do dané souřadné osy “i „.

3.4.4 Časová změna operátoru. Zákony zachování

Střední hodnota $\overline{L}$ operátoru $\hat{L}$ je dána vztahem (3.11). Protože funkce $\psi(\vec{r},t)$ závisí na čase, je střední hodnota rovněž funkcí času. Kromě toho může být na čase explicitně závislý i sám operátor $\hat{L}$. Časovou změnu $d\overline{L}/dt$ dostaneme derivací vztahu (3.11) podle času

$$\frac{d\overline{L}}{dt}=\int_V\left[\psi^*\left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\right)\ \psi+\left(\frac{\partial\psi^*}{\partial t}\right)\hat{L}\psi+\psi^*\hat{L}\ \left(\frac{\partial\psi}{\partial t}\right)\ \right]dx\,.$$

Získaný vztah upravíme pomocí rovnice (3.9) na tvar

$$\frac{d\overline{L}}{dt}=\int_V\psi^*\left\{\left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\right)+\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\hat{L}-\hat{L}\hat{H}\right]\right\}\psi\ dx\,.$$

Výraz ve složených závorkách

$$\frac{d\hat{L}}{dt}=\left(\frac{\partial\hat{L}}{\partial t}\right)+\frac{i}{\hbar}\left[\hat{H}\hat{L}-\hat{L}\hat{H}\right]$$

představuje časovou změnu operátoru, resp. představuje ***operátor časové změny operátoru***. První člen souvisí s explicitní závislostí operátoru na čase, člen $\hat{H}\hat{L}-\hat{L}\hat{H}$ popisuje ***časový vývoj (změny stavu) soustavy***. Nezávisí-li operátor explicitně na čase $\left(\partial\hat{L}/\partial t=0\right)$, je časová změna dané veličiny určena komutátorem daného operátoru $\hat{L}$ s hamiltoniánem $\hat{H}$.

Zákon zachování veličiny L tedy vyžaduje aby příslušný operátor $\hat{L}$ komutoval s hamiltoniánem a obráceně komutativnost daného operátoru s hamiltoniánem implikuje zákon zachování.

3.4.5 Formální schéma kvantové mechaniky

Po seznámení se se základy operátorového počtu můžeme zformulovat postuláty, na kterých je založen operátorový formalizmus kvantové mechaniky:

1. Každé fyzikální veličině $L, M, N,...$ přiřadíme lineární hermitovský operátor $\hat{L},\hat{M},\hat{N},...$. Takovou fyzikální veličinu nazveme ***pozorovatelnou veličinou***.
2. Zjistíme soubory vzájemně ***komutujících*** operátorů. Veličiny, jejichž operátory vzájemně po dvojicích komutují, nazveme ***kompatibilně pozorovatelné***.
3. Řešíme problém ***vlastních hodnot*** daných operátorů, tj. řešíme charakteristické rovnice $\hat{L}\psi=L\psi,\hat{M}\psi=M\psi,..$ atd. pro každý soubor vzájemně komutujících operátorů.
4. Soubor vlastních hodnot $L, M, N,...$ těchto vzájemně komutujících operátorů určují ***stav*** soustavy a spektra ***vlastních hodnot*** jednotlivých operátorů představují možné hodnoty daných fyzikálních veličin**.** Každý soubor vlastních hodnot vzájemně komutujících operátorů představuje úplnou informaci o dané soustavě.

5. Nechť $n \equiv \{L_n, M_n, N_n, ...\}$ je množina vlastních hodnot vzájemně komutujících operátorů a $\psi_n(\vec{r}, t)$ příslušná vlastní funkce. Pak je možný i tzv. ***smíšený stav***

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_n a_n \psi_n(\vec{r}, t),$$

kde koeficienty a_n určují pravděpodobnost $w_n = |a_n|^2$, $\left(\sum_n |a_n|^2 = 1 \right)$ toho, že systém je v čase *t* ve stavu charakterizovaném středními hodnotami

$$\bar{L} = \sum_n |a_n|^2 L_n, \ \bar{M} = \sum_n |a_n|^2 M_n, \ \bar{N} = \sum_n |a_n|^2 N_n, ...$$

6. Časový vývoj stavu soustavy je určen ***Schrödingerovou rovnicí***.

3.5 VYBRANÉ APLIKACE KVANTOVÉ MECHANIKY

3.5.1 Heisenbergovy relace neurčitosti

V kapitole 3.3.2 jsme uvedli fyzikální důvody pro formulaci podmínky (3.8) $\Delta x \Delta p_x \approx h$, tj. Heisenbergovy relace neurčitosti. Nyní tuto relaci exaktně odvodíme. Nechť $\bar{x}$ a $\bar{p}_x$ jsou střední hodnoty operátoru souřadnice $\hat{x}$ a operátoru hybnosti $\hat{p}$ ve smyslu vztahu (3.11). Budeme-li popisovat danou soustavu v souřadném systému, který se bude pohybovat rychlostí odpovídající hybnosti $\bar{p}_x$ a počátek souřadného systému položíme do bodu $\bar{x}$, potom platí $\bar{x} = 0$ a $\bar{p}_x = 0$. Pro neurčitost složky hybnosti potom platí $\Delta p_x \equiv p_x - \bar{p}_x = p_x$ a střední kvadratická odchylka $\overline{(\Delta p_x)^2}$ je určena vztahem, viz vztah (3.11),

$$\overline{(\Delta p_x)^2} = \overline{p_x^2} = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p}_x^2 \psi \, dx = -\hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{d^2\psi}{dx^2} dx = \hbar^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\psi^*}{dx} \frac{d\psi}{dx} dx .$$

Uvažujme nyní integrál

$$I(\alpha) = \int_{-\infty}^{\infty} \left(\alpha x \psi + \frac{d\psi}{dx} \right)^2 dx \geq 0 ,$$

kde α je libovolný reálný parametr. Nezápornost uvedeného integrálu je evidentní přímo z definice. Použitím metody per partes dostaneme

$$I(\alpha) = \alpha^2 \overline{(\Delta x)^2} - \alpha + \frac{1}{\hbar^2} \overline{(\Delta p_x)^2} \geq 0 . \qquad (3.12)$$

Pozitivnost binomického polynomu $A\alpha^2 + B\alpha + C \geq 0$ vyžaduje aby platilo $4AC - B^2 \geq 0$. Z uvedené podmínky vyplývá pro rovnici (3.12) vztah

$$\sqrt{\overline{(\Delta x)^2}} \sqrt{\overline{(\Delta p_x)^2}} \geq \frac{1}{2} \hbar ,$$

který označujeme jako ***Heisenbergovy relace neurčitosti.*** Obecně platí pro libovolné dva nekomutující operátory $\hat{A}, \hat{B}$, pro které $\left[\hat{A}, \hat{B} \right] = i\hat{C}$ relace neurčitosti ve tvaru

$$\sqrt{\overline{\left(\Delta\hat{A}\right)^2}}\sqrt{\overline{\left(\Delta\hat{B}\right)^2}} \geq \frac{1}{2}\overline{C}\,. \tag{3.13}$$

3.5.2 Lineární harmonický oscilátor

S modelem harmonického lineárního oscilátoru se ve fyzice setkáváme často. Je to dáno tím, že v blízkosti rovnovážného stavu dané soustavy lze v prvním přiblížení popsat vzájemné interakce kvadratickým polynomem. Budeme proto nyní řešit kvatověmechanickou úlohu nalezení energetického spektra lineárního harmonického oscilátoru.

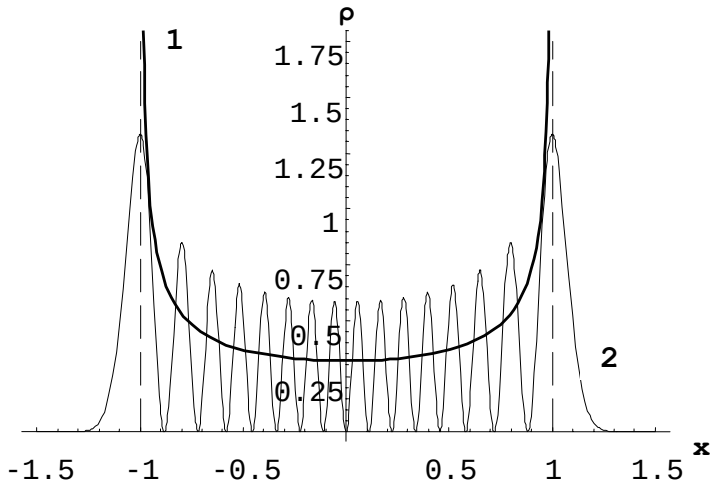
Potenciální energie lineárního harmonického oscilátoru $U(x) = m\omega^2 x^2/2$, kde m je hmotnost kmitajícího hmotného bodu, ω vlastní frekvence oscilátoru a x výchylka z rovnovážné polohy. Energetické spektrum určíme pomocí charakteristické rovnice operátoru energie $\hat{H}$ (Hamiltoniánu), tj. rovnice (3.10). Po dosazení dostaneme

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2\right)\psi(x) = E\psi(x)\,.$$

Pomocí substituce $x = \sqrt{\hbar/m\omega}\,\xi$ upravíme uvedenou rovnici na tvar

$$\left(\frac{d^2}{d\xi^2} + \xi^2\right)\psi(\xi) = (2N+1)\psi(\xi) \quad ; \quad 2N+1 = \frac{2E}{\hbar\omega}, \tag{3.14}$$

kde N je zatím blíže neurčený parametr. Řešení uvedené rovnice, která splňují podmínky (3.6) existují pouze pro hodnoty $N = n$; $n = 0, 1, 2, \ldots$ a mají tvar, viz obr. 3.8.



Obr. 3.8 Rozdělení hustoty pravděpodobnosti stavu lineárního harmonického oscilátoru ρ(x) (n=15) 1 – klasické řešení, 2 – kvantověmechanické řešení

$$\psi(\xi) = C_n H_n(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}\,. \tag{3.15}$$

kde pro ***normovací faktor*** C_n platí

$$C_n = \frac{1}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}}.$$

$H_n(\xi)$ jsou tzv**. *Hermiteovy polynomy*** určené následujícím vytvořujícím vztahem

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} e^{-\xi^2}.$$

Energie oscilátoru je potom ve shodě se vztahem (3.14) určena výrazem

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega. \tag{3.16}$$

Rozdíl sousedních hladin $E_{n+1} - E_n = \hbar\omega$. Hodnota minimální energie $\hbar\omega/2$ je ve shodě s relacemi neurčitosti (3.8). Výraz pro energii (3.16) umožňuje zajímavou interpretaci. Odečítáme-li energii od základního stavu $E_0 = 1/2\,\hbar\omega$, pak $E_n - E_0 = n\hbar\omega$ a stav oscilátoru charakterizovaný hodnotou energie E_n můžeme interpretovat jako stav s *n* kvanty o energii $\hbar\omega$. Přechod $n \to n \pm m$ pak představuje ***vznik (kreaci)*** nebo ***zánik (anihilaci***) *m* kvant**.**

V případě elektromagnetického oscilátoru nazýváme toto kvantum energie ***foton***, v případě mechanického oscilátoru ***fonon*** (z řeckého $\varphi o \nu o \nu$ - zvuk). Uvedená idea je základem tzv. ***Fockovy metody***.

3.5.3 Atom vodíku

Jedním z nejdůležitějších problémů řešení Schrödingerovy rovnice je problém energetického spektra atomu vodíku, resp. jemu podobných atomů. V tomto případě se obecně jedná o centrální přitažlivé pole, kdy interaguje atomové jádro, s nábojem $Q = Ze$, s jediným elektronem, s nábojem – *e*. Tomu odpovídá např. atom vodíku, jednonásobně ionizovaný atom helia, dvojnásobně ionizovaný atom lithia atd. Interakční energii představuje v tomto případě Coulombova interakce

$$U(r) = -\frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0 r},$$

kde *r* je vzdálenost elektronu od jádra. Hamiltonův operátor má v tomto případě tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e}\nabla^2 + \hat{U}(r), \tag{3.17}$$

kde m_e je hmotnost elektronu. Vzhledem k tomu, že se v uvedeném případě jedná o centrální pole, je výhodné, vzhledem k bodové symetrii problému, přejít od kartézské soustavy souřadné k soustavě sférické. V této soustavě má první člen na pravé straně tvar

$$\nabla^2 = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2 \frac{\partial}{\partial r}\right) + \nabla^2_{\vartheta,\varphi}\right], \tag{3.18}$$

kde

$$\nabla^2_{\vartheta,\varphi} = \left[\frac{1}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial\vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial\vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial\varphi^2} \right]^2 .$$

Operátor $\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ souvisí se dvěma operátory ***orbitálního momentu hybnosti***, $\vec{l} = \vec{r} \times \vec{p}$, který je spojen s představou pohybu po orbitě. Platí totiž

$$\hat{\vec{l}}^{\,2} = -\nabla^2_{\vartheta,\varphi} \quad ; \quad \hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial\varphi},$$

kde $-\nabla^2_{\vartheta,\varphi}$ je operátor kvadrátu velikosti orbitálního momentu hybnosti $\left|\vec{l}^{\,2}\right|$ a $-i\partial/\partial\varphi$ je operátor jeho souřadnice l_z.

Ze vztahů (3.17) a (3.18) je zřejmé, že ***operátory*** $\hat{H}, \hat{\vec{l}}^{\,2}, \hat{l}_z$ ***spolu navzájem komutují*** a tedy mají společný systém vlastních funkcí. Vázaným stavům, kdy pohyb elektronu je ***finitní*** odpovídá případ, kdy pro celkovou energii platí $E < 0$. Řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + \hat{U}(r) \right) \psi(r, \vartheta, \varphi) = E\, \psi(r, \vartheta, \varphi),$$

které splňuje podmínky (3.6) má tvar

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,l}(r)\, Y_{l,m}(\vartheta, \varphi),$$

kde n, l, m jsou parametry uvedených funkcí, které označujeme:

n – hlavní kvantové číslo, které může nabývat hodnoty $n = 1, 2, 3 \ldots$,
l – vedlejší kvantové číslo, které nabývá hodnoty $l = 0, 1, 2, 3 \ldots, n-1$
m – magnetické kvantové číslo**,** které nabývá hodnoty
$m = -l, -(l-1), \ldots, 0, \ldots, l-1, l$.

Funkce $R_{n,l}(r)$ je funkcí Laguerrových polynomů a funkce $Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$ a jsou sférické funkce. Hlavní kvantové číslo n kvantuje energii atomu

$$E_n = -\frac{1}{2n^2} \frac{Z^2 e^2}{4\pi\,\varepsilon_0 a_0} \quad ; \quad a_0 = \frac{4\pi\,\varepsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2},$$

kde a_0 je tzv. ***Bohrův poloměr***.

Vedlejší kvantové číslo l kvantuje velikosti orbitálního momentu hybnosti $\left|\vec{l}\right| = \hbar\sqrt{l(l-1)}$ a magnetické kvantové číslo m kvantuje složku l_z orbitálního momentu hybnosti $l_z = m\hbar$. „Magnetické“ se tomuto kvantovému číslu říká proto, že toto kvantové číslo vystupuje ve výrazu pro energii interakce daného atomu s vnějším magnetickým pole. Je-li toto pole charakterizováno magnetickou indukcí $\vec{B} \equiv [0, 0, B]$, můžeme energii vzájemné interakce vyjádřit vztahem

$$E_m = \frac{e\hbar B}{2m_e} m = \mu_m B\, m \quad ; \quad \mu_m = \frac{e\hbar}{2m_e},$$

kde μ_m je ***Bohrův magneton***. Soubor kvantových čísel n, l, m určuje stav soustavy v centrálním poli.

3.6 ZÁKLADY RELATIVISTICKÉ KVANTOVÉ FYZIKY

Při formulaci Schrödingerovy rovnice (3.10)

$$\hat{H}\psi = E\psi \quad ; \quad \hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{U}(x),$$

je použit klasický nerelativistický vztah pro celkovou energii H. Relativistický vztah pro celkovou energii**,** viz kap. 4.7.3, má tvar

$$E^2 = c^2\left(\vec{p}^2 + m_0^2 c^2\right), \tag{3.19}$$

kde c je rychlost světla a m_0 klidová hmotnost dané částice. Pomocí rovnice (3.19) lze odvodit ***Klein –Gordonovu*** rovnici

$$\left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \kappa^2\right)\psi = 0 \quad ; \quad \kappa = \frac{m_0 c}{\hbar},$$

která by mohla být relativistickým ekvivalentem Schrödingerovy rovnice. Z této rovnice však vyplývá pro hustotu pravděpodobnosti daného stavu jiný výraz než $|\psi|^2$ a tento výraz nelze z principielních důvodů jako hustotu pravděpodobnosti interpretovat. Anglický fyzik P. Dirac proto navrhl úpravu výrazu (3.19), pomocí které lze zformulovat tzv. ***Diracovu rovnici***, kterou lze označit za relativistický ekvivalent Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = \left[c\left(\alpha_x\hat{p}_x + \alpha_y\hat{p}_y + \alpha_z\hat{p}_z\right) + \beta m_0 c^2\right]\psi, \tag{3.20}$$

kde $\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z, \beta$ jsou ***Diracovy matice*** řádu čtyři. Z Diracovy rovnice vyplývají dva důležité závěry:

1. Při interakci dané soustavy s vnějším magnetickým polem se v rovnici (3.20) objeví nový člen, který vykazuje vlastnosti momentu hybnosti a přitom ho nelze ztotožnit s orbitálním momentem hybnosti $\vec{l}$, viz kap. 3.4.3. Tento člen se totiž objeví i když orbitální moment hybnosti je roven nule ($l = 0$). Podle Pauliho je nutné tento moment hybnosti připsat soustavě samé, je to tedy ***vlastní moment hybnosti***, neboli ***spin*** s.

   Pro elektron má tento spin vlastní hodnoty $s = \pm 1/2\,\hbar$. Relativistický hamiltonián (3.20) nekomutuje ani s operátorem orbitálního momentu hybnosti $\hat{l}_z$, ani s operátorem spinu $\hat{s}_z$ ale s ***celkovým momentem hybnosti*** $\hat{J}_z = \hat{l}_z + \hat{s}_z$. Pro úplný popis atomu je tedy nutné doplnit soubor kvantových čísel n, l, m o spin s.

2. Lze ukázat, že rovnice (3.20) platí po jistých úpravách i pro částici s opačným nábojem + e. Tato nová částice má stejnou hmotnost a spin jako elektron, a proto byla nazvána ***pozitronem***. Částici o těchto vlastnostech označujeme jako ***antičástici***.

   Pomocí Diracovy rovnice popisujeme i nukleony a stejným postupem lze odvodit, že k protonu existuje antičástice – ***antiproton***. Antičástice k neutronu je antineutron − má opačný magnetický moment a opačné ***baryonové číslo*** než neutron. V principu by bylo možné z antičástic složit antihmotu. Praktické

provedení je však komplikováno faktem, že při kontaktu hmoty s antihmotou dochází k ***anihilaci***, tj. k úplné transformaci hmoty na energii (např. na fotony).

3.7 SOUSTAVY IDENTICKÝCH ČÁSTIC

3.7.1 Princip nerozlišitelnosti kvantivěmechanických částic

Ve fyzice se často setkáváme se ***soustavou identických částic***, tj. částic, které mají stejnou hmotnost, elektrický náboj a stejné další charakteristiky. Ukazuje se, že v klasické fyzice lze tyto identické částice v principu rozlišit. Očíslujeme-li např. v daném časovém okamžiku tyto částice, můžeme tyto částice podle přiřazených čísel rozlišit kdykoliv v budoucnu, protože v principu můžeme pro každou částici určit její trajektorii.

V kvantové fyzice však Heisenbergovy relace neurčitosti možnost stanovit trajektorii principielně vylučují, a proto jsou identické částice v rámci kvantové fyziky ***principielně nerozlišitelné.***

3.7.2 Bosony a fermiony

Uvažujme pro jednoduchost soubor dvou identických částic 1 a 2. Hamiltonian $\hat{H}$ je obecně invariantní vůči záměně obou částic $\hat{H}(1,2)=\hat{H}(2,1)$. Nechť funkce $\psi(1,2)$ vyhovuje Schrödingerově rovnici

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(1,2,t)=\hat{H}(1,2)\psi(1,2,t).$$

Zavedeme ***operátor permutace*** $\hat{P}_{1,2}$, který provádí záměnu uvažovaných částic

$$\hat{P}_{1,2}\psi(1,2)=\psi(2,1).$$

Opakovaným působením tohoto operátoru dostaneme

$$\hat{P}_{1,2}^2\psi(1,2)=\psi(1,2).$$

Uvedená rovnice představuje charakteristickou rovnici operátoru $\hat{P}_{1,2}^2$, z které vyplývá pro vlastní hodnotu operátoru $\hat{P}_{1,2}^2$ číslo +1 a tedy vlastní hodnota operátoru $\hat{P}_{1,2}$ musí být ±1. Pak platí

$$\hat{P}_{1,2}\psi(1,2)=\psi(2,1)=\pm\psi(1,2).$$

Vlnová funkce soustavy identických částic je tedy buď ***symetrická*** $\psi(1,2)=\psi(2,1)$ nebo ***antisymetrická*** $\psi(1,2)=-\psi(2,1)$. Částice můžeme tedy rozdělit do dvou tříd – se symetrickou vlnovou funkcí, tyto částice označujeme jako ***bosony*** a na částice s antisymetrickou vlnovou funkcí, tyto částice označujeme jako ***fermiony***. Zařazení je nutné provést na základě experimentu.

Na základě jednoduchých úvah lze ukázat, že v souboru identických částic s antisymetrickou vlnovou funkcí může být ve stejném kvantovém stavu pouze jedna částice, platí pro ně ***Pauliho vylučovací princip***.

V souboru identických částic se symetrickou vlnovou funkcí může být ve stejném kvantovém stavu libovolný počet částic.

Na základě experimentálních výsledků bylo zjištěno, že Pauliho vylučovací princip platí pro částice s poločíselnou hodnotou spinu – fermiony představují tedy částice s poločíselnou hodnotou spinu. Libovolné obsazení stejného stavu bylo pak pozorováno u částic s celočíselnou hodnotou spinu – bosony představují tedy částice s celočíselnou hodnotou spinu.

Původně empirický vztah mezi symetrií a antisymetrií a spinem – vztah mezi spinem a statistikou dokázal Wolfgang Pauli jako jedině možný, kompatibilní s postuláty kvantové fyziky a s teorií relativity. ***Pauliho princip patří mezi základní principy kvantové fyziky.***

Shrnutí kapitoly.

V předcházející výkladu jste se seznámili s představami a aparátem kvantové fyziky. I když jak představy, tak i matematický aparát se asi vymykají Vašim každodenním zkušenostem, experimenty výsledky kvantové fyziky plně potvrzují. A nejen to, moderní elektronika, nauka o materiálu, optika atd. vycházejíce z představ kvantové fyziky vyvinuly technologie a přístroje, které v současné době výrazným způsobem ovlivňují celou společnost (informatika, telekomunikace, internet atd.). Kvantová fyzika svými výsledky podstatným způsobem podmínila i rozvoj dalších oblasti lidského poznání jako např. chemii nebo molekulovou fyziku. Navíc stochastický přístup k interpretaci získaných výsledků nutí i k zamyšlení se o možnostech a hranicích lidského poznání.

Otázky:

1. Jaký je fyzikální význam vlnové funkce?
2. Vysvětlete pomocí Pauliho vylučovacího principu a II. termodynamického principu pořadí prvků v Mendělejevově tabulce prvků.
3. Pokuste se alespoň principiálně vysvětlit jev supravodivosti, víte-li, že Cooperovy páry, vázané dvojice elektronů, představují bozony.

4 SPECIÁLNÍ A OBECNÁ TEORIE RELATIVITY

Průvodce studiem.

Od vydání Newtonových „Principií“ byl pokládán prostor a čas za absolutní. A když některé výsledky z optiky ale především v oblasti elektrických jevů nasvědčovaly, že s tímto tvrzením není něco v pořádku. Byl to, až do té doby zcela neznámý úředník patentního úřadu v Bernu – Albert Einstein, který tuto představu vyvrátil. Speciální teorie relativity ukázala nejen na relativnost času ale i na relativnost našeho poznání. Při poznávání přírody si musíme být stále vědomi časové omezenosti našeho poznání a jeho relativní platnosti. A i když se zdá, že praktické využití výsledků teorie relativity je omezené, je třeba si uvědomit, že na základě teorie relativity byly zkonstruovány jaderné zbraně a vybudovány jaderné elektrárny. Obecná teorie relativity je navíc jedinou relevantní teorií, která nám umožňuje nahlédnout jak do minulosti, tak i budoucnosti vesmíru.

V této kapitole se dozvíte:

- historii a důvody vzniku speciální a obecné teorie relativity
- základní postuláty a představy speciální a obecné teorie relativity
- o hlavních důsledcích vyplývajících ze speciální teorie relativity pro newtonovskou mechaniku
- o postupech při aplikacích kvantové fyziky na vybraných problémech
- o důležitých důsledcích při aplikaci kvantové fyziky na soubory částic

Klíčová slova této kapitoly:

Speciální a obecná teorie relativity, Lorenzova transformace, Minkowského čtyřprostor, zákon ekvivalence, relativita

Čas potřebný k prostudování učiva kapitoly: 30 hod

4.1 HISTORICKÉ POZNÁMKY

Vznik speciální a posléze i obecné teorie relativity byl podmíněn historickou situací, k níž došlo ve fyzice ve druhé polovině 19.století. Historie vzniku speciální teorie relativity je velmi poučná a zajímavá i tím, že celá řada fyziků již dlouhou dobou před vlastní formulací speciální teorie relativity víceméně tušila nutnost formulace principu obecně platnějšího než ***Galileiho mechanický princip relativity***. Zevrubnou kritiku Newtonova pojetí prostoru a času provedl profesor německé části Karlovy univerzity **ERNST MACH** (1838 – 1916), dále pak je nutné jmenovat především **HENRIHO JULESE POINCARÉHO** (1854 – 1912) a **HENDRIKA ANTOONA LORENZE** (1853 – 1928). Avšak obava z veřejného vyslovení těchto v té době „kacířských" myšlenek je však zastavila na samotném prahu epochálního objevu.

Tak se stalo, že roku 1905 se v sedmnáctém svazku odborného periodika *„Analen der Physik"* objevil třicetistránkový článek pod názvem *„K elektrodynamice pohybujících se těles,"* jehož autorem byl do té doby téměř neznámý fyzik **ALBERT EINSTEIN** (1879 – 1955). Článek byl mimořádný a pozoruhodný nejen svým obsahem, ale i tím, že v něm nebyly citovány žádné prameny a že se jeho autor neodvolával na žádné autority a zdroje. Styl článku byl velmi prostý a jeho značná část byla pochopitelná i bez náročnější matematické průpravy. Uveřejnění tohoto článku znamenalo definitivní rozhodnutí o dalším vývoji fyziky a ve svých důsledcích umožnilo kromě jiného využití jaderné energie. Ve spojení se souběžně se rozvíjející kvantovou teorií umožnilo průlom v rozvoji poznání mikrosktrukury hmoty.

4.2 VÝVOJ FYZIKY V 19. STOLETÍ

Od zveřejnění Newtonových *„Principií"* byla až do 19. století dominujícím fyzikálním oborem mechanika formálně zdokonalená **LEONARDEM EULEREM** (1707 – 1783), **PIERREM SIMONEM LAPLACEM (**1749 – 1827**), JOSEPHEM LOISEM LAGRANGEEM** (1736 – 1815) a **WILIAMEM ROWANEM HAMILTONEM** (1805 – 1865**)**. Axiomy mechaniky a její matematický formalismus byly kritériem testujícím správnost a platnost nových fyzikálních teorií a hypotéz. Mechanika, považovaná za dokonalý vzor popisu světa jak po stránce obsahové, tak i formální, ovlivnila dokonce i filosofii a mechanistický světový názor byl v tomto období (alespoň v intelektuálních kruzích) převládající.

Experimentální a zejména teoretické výsledky získané především v průběhu 19. století v optice ale zejména v oblasti elektřiny a magnetismu však toto výjimečné postavení mechaniky postupně zpochybňovaly.

V roce 1873 zveřejnil skotský fyzik **JAMES CLERK MAXWELL** (1831 – 1879) svoje *„Treatise on Electrisity and Magnetism“*, ve kterém byly poprvé zveřejněny rovnice elektromagnetického pole. Tyto rovnice však nebyly invariantní vůči Galileiho transformaci. Počátkem 20. století objevil holandský fyzik A. Lorenz, že rovnice elektromagnetického pole jsou invariantní vůči jisté transformaci souřadnic a času, kterou dnes nazýváme ***Lorentzovou transformací.*** Zdálo se být rozumné předpokládat, že rovnice mechaniky a elektromagnetického pole by měly být invariantní vůči stejné transformaci a bylo nutné uvedený rozpor řešit.

Z rovnic elektromagnetického pole vyplývala existence elektromagnetických vln šířících se rychlostí světla, jejichž existence byla potvrzena pokusy německého fyzika **HEINRICHA HERTZE** (1857 – 1894). Maxwell navíc odvodil z rovnic elektromagnetického pole zákony optiky a tak dokázal, že světlo je elektromagnetickým zářením.

V duchu soudobých mechanických představ byl jako „nosič“ elektromagnetického vlnění „oprášen“ Huygensův pojem ***éteru***. Současně s tím představa klidného a celý vesmír vyplňujícího éteru umožňovala ztotožnit éter s Newtonovým absolutním prostorem. Fyzikům se tak zdánlivě otevřela možnost určení absolutního pohybu těles vůči nehybnému éteru optickými metodami.

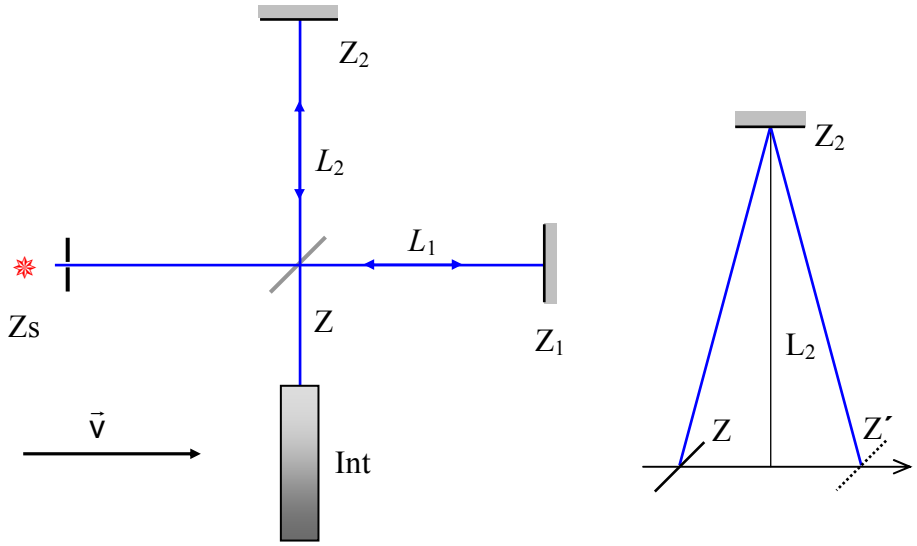
Úsilí fyziků koncem 19. století bylo tak soustředěno na experimentální důkaz existence éteru a podpory výběru jedné ze dvou možností – buď upravit Maxwellovy rovnice tak, aby byly invariantní vůči Galileově transformaci, nebo upravit Newtonovy pohybové rovnice tak, aby respektovaly invariantnost vůči Lorenzově transformaci.

Podstata všech experimentů, které byly k tomuto účelu prováděny, spočívala v aplikaci klasického a jak se později ukázalo nesprávného mechanického předpokladu o skládání rychlosti pohybu světla s rychlostí pohybu jeho zdroje nebo pozorovatele.

4.3 MICHELSON – MORLEYŮV POKUS

Klíčovým se ukázal být experiment, který navrhl americký fyzik **ALBERT ABRAHAM MICHELSON** (1852–1931). Při svém návrhu vycházel z předpokladu, že rychlost světla šířícího se klidným éterem je závislá na rychlosti a směru pohybu pozorovatele. O svém pohybovém stavu vůči klidnému éteru by tedy pozorovatel mohl rozhodnout podle jím naměřené rychlosti světla. Navrhnul proto pokus, při kterém se porovnávaly časové intervaly, během nichž světlo proběhne dvě stejné dráhy různě orientované vzhledem k Zemi, pohybující se s pozorovatelem vůči klidnému éteru. Schéma experimentálního uspořádání je uvedeno na obr. 4.1.

Světlo vychází ze zdroje **Zs** a polopropustným zrcadlem **Z** je rozděleno na dva navzájem kolmé paprsky, které po odrazu na zrcadlech $\mathbf{Z_1}$, $\mathbf{Z_2}$ spolu interferují v interferometru **Int**. Nechť rameno $L_1 = \overline{ZZ_1}$ leží ve směru pohybu Země. Čas, za který světelný paprsek urazí dráhu $\overline{ZZ_1Z}$, je potom roven



Obr.4.1 Schéma Michelson – Morleyův pokusu

$$t_1 = \frac{L_1}{c - v_Z} + \frac{L_1}{c + v_Z} = \frac{2L_1}{c} \frac{1}{1 - \left(\frac{v_Z}{c}\right)^2} = \frac{2L_1}{c\left(1 - \beta^2\right)}. \tag{4.1}$$

Protože se celé zařízení pohybuje spolu se Zemí, pohybuje se druhý paprsek po dráze $\overline{ZZ_2Z'}$. Čas k tomu potřebný dostaneme použitím Pythagorovy věty ve tvaru

$$L_2^2 + \left(\frac{v_Z t_2}{2}\right)^2 = \left(\frac{c t_2}{2}\right)^2 \Rightarrow t_2 = \frac{2L_2}{c\sqrt{1 - \beta^2}}.$$

Časový rozdíl mezi dráhami obou paprsků pak bude

$$\Delta t_1 = t_2 - t_1 = \frac{2}{c}\left(\frac{L_2}{\sqrt{1 - \beta^2}} - \frac{L_1}{1 - \beta^2}\right).$$

Otočíme-li celé zařízení o 90°, bude ve směru pohybu Země rameno L_2 a analogickou úvahou získáme časový rozdíl pro oba paprsky ve tvaru

$$\Delta t_2 = \frac{2}{c}\left(\frac{L_2}{1 - \beta^2} - \frac{L_1}{\sqrt{1 - \beta^2}}\right).$$

Při otočení celého zařízení by tedy mělo dojít k posunutí interferenčních proužků, které odpovídá časovému rozdílu

$$\Delta t = \Delta t_2 - \Delta t_1 = \frac{2}{c}\left(L_1 + L_2\right)\left(\frac{1}{1 - \beta^2} - \frac{1}{\sqrt{1 - \beta^2}}\right) \approx \frac{L_1 + L_2}{c}\beta^2.$$

Z optiky bylo známo, že k posunutí o jeden interferometrický proužek dojde tehdy, je-li časový rozdíl $\Delta t \approx \lambda/c$ a tedy musí platit $L_1 + L_2 \approx \lambda/\beta^2$, což při hodnotách $\beta \approx 10^{-4}; \lambda \approx 5.10^{-7}\,\mathrm{m}$ vyžaduje aby $L_1 + L_2 \approx 50\,\mathrm{m}$. Tuto podmínku je možno splnit vícenásobnými odrazy paprsků na zrcadlech.

První série pokusů konaných Michelsonem v r.1881 v Postupimi byla nepoužitelná, neboť předpokládaný interferenční posun byl v mezích chyby měření. Dostatečnou přesnost měla až druhá série pokusů, konaných společně s americkým chemikem E. Morleyem v Clevelandu v roce 1887. K překvapení experimentátorů i napjaté fyzikální veřejnosti však ani při opakování pokusu nedošlo k žádnému posunutí interferenčních proužků.

Pro vysvětlení negativního výsledku Michelson – Morleyova pokusu (i dalších důmyslných experimentů podobného typu) byla vymyšlena a „zkonstruována“ řada hypotéz. Vysvětlení negativního výsledku Michelson – Morleyova pokusu byly velmi blízko zejména holandský fyzik LORENTZ a Francouz POINCARÉ. Nejen oni, ale i řada dalších fyziků tušila podstatu problému, žádný z nich se však neodhodlal naplno ji vyslovit.

Řešení i vysvětlení problému podal ve fyzikálních kruzích téměř neznámý zaměstnanec patentního úřadu v Bernu Albert Einstein v r.1905. Jeho teorie založená na dvou základních postulátech byla nazvána ***speciální teorie relativity.***

4.4 EINSTEINOVY POSTULÁTY

Hluboká analýza tehdejších představ o prostoru a čase, která přivedla Einsteina k jeho výsledkům, vyvolala obrovský otřes nejen ve fyzice, ale i ve filosofii. Einstein navždy „pohřbil“ pojem absolutního času a prostoru a dospěl k závěru, že **principiálně** není možné fyzikálně od sebe odlišit žádné dvě různé inerciální soustavy.

I.postulát speciální teorie relativity – princip relativity

Pro formulaci všech fyzikálních zákonů jsou všechny inerciální soustavy rovnocenné.

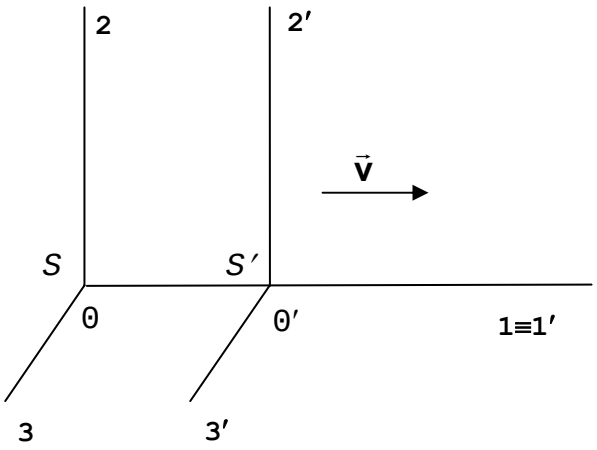
II.postulát speciální teorie relativity – princip konstantní rychlosti světla

Světelné signály se šíří ve všech inerciálních soustavách konstantní rychlostí (pro vakuum c= 299 792 458 ms^{-1}).

4.5 LORENTZOVA TRANSFORMACE

4.5.1 Odvození Lorentzovy transformace ze základních postulátů

Pro konkrétní aplikace obou výše uvedených postulátů je nutná znalost transformace prostorových souřadnic x_i, $i = 1, 2, 3$ a času t při přechodu z inerciální soustavy S do inerciální soustavy S', která se vůči soustavě S pohybuje rovnoměrně přímočaře rychlostí $\vec{v}$, viz obr. 4.2.



Obr. 4.2 Schéma pro odvození Lorenzovy transformace

Protože i sama transformace představuje fyzikální zákon, musí splňovat oba uvedené postuláty. Vyloučíme-li singularity, musí být hledaná transformace lineární v proměnných x_i, t. Nejobecnější lineární vztah mezi proměnnými x_i, t a x_i', t' vyjádříme ve tvaru

$$\begin{aligned} x_i' &= \alpha_{ij} x_j + \alpha_{i0} t + \alpha_i, \\ t' &= \alpha_{0j} x_j + \alpha_{00} t + \alpha_0. \end{aligned} \tag{4.2}$$

Při odvozování vyjdeme z nejjednodušší konfigurace kdy osy *1* a *1′* splývají a leží ve směru rychlosti $\vec{v}$, osy *2* a *2′* a *3* a *3′* jsou rovnoběžné a téhož smyslu. Položíme-li pro okamžik setkání počátků obou soustav $t = t' = 0$, musí konstantní členy v rovnicích (4.2) vymizet $\alpha_i = \alpha_0 = 0\,; i = 1, 2, 3$.

Protože dále při $x_2 = x_3 = 0$ musí být rovněž $x_2' = x_3' = 0$, je $\alpha_{21} = \alpha_{31} = 0$, resp. $\alpha_{20} = \alpha_{30} = 0$. Pro $x_2 = 0$ musí být $x_2' = 0$ a obdobně pro $x_3 = 0$ musí být $x_3' = 0$ a tedy $\alpha_{23} = \alpha_{32} = 0$. Výrazy pro x_2' a x_3' se tak zjednoduší na tvar

$$\begin{aligned} x_2' &= \alpha_{22}\, x_2, \\ x_3' &= \alpha_{33}\, x_3. \end{aligned}$$

Z rovnocennosti všech směrů kolmých na osu osy *1* a *1′* že vyplývá, $\alpha_{22} = \alpha_{33} = \alpha$. Z principu relativity, tj. rovnocennosti obou systémů pak plyne $\alpha = 1$ a tedy

$$\begin{aligned} x_2' &= x_2, \\ x_3' &= x_3. \end{aligned} \tag{4.3}$$

Zbývá určit transformační vztahy pro x_1' a t'. Nejprve opět z rovnocennosti všech směrů kolmých na osy *1* a *1′* vyplývá, že transformační vztahy pro x_1' a t' nemohou záviset na x_2' a x_3'. Transformační vztahy mají tedy tvar

$$\begin{aligned} x_1' &= \alpha_{11} x_1 + \alpha_{10} t, \\ t' &= \alpha_{01} x_1 + \alpha_{00} t. \end{aligned} \tag{4.4}$$

Konstanty α_{11} a α_{00} jsou určitě nenulové. Zavedeme nové konstanty $\alpha_{11} = \gamma, \alpha_{10} = -\gamma v$ a první ze vztahů (4.4) upravíme na tvar

$$x_1' = \gamma\left(x_1 - vt\right), \tag{4.5}$$

z něhož je patrné, že každý bod soustavy S' se pohybuje vůči soustavě S ve směru osy *1* konstantní rychlostí $v = -\alpha_{10}/\alpha_{11}$. Za předpokladu, že osy *1* a *1'* mají stejnou orientaci, je konstanta γ kladná. Princip relativity vyžaduje aby pro inverzní transformaci současně platil vztah

$$x_1 = \gamma\left(x_1' + vt\right), \tag{4.5a}$$

který se liší od vztahu (4.5) znaménkem rychlosti *v*. Pomocí vztahů (4.5) a (4.5a) dostaneme pro čas *t* vztah

$$t' = \frac{\left(1-\gamma^2\right)}{\gamma v} x_1 + \gamma t, \tag{4.6}$$

a pomocí vztahů (4.4) a (4.6) dostáváme pro konstanty α_{01} a α_{00} vyjádření

$$\alpha_{01} = \frac{\left(1-\gamma^2\right)}{\gamma v}\ ;\ \alpha_{00} = \gamma t\,.$$

Hodnotu koeficientu γ určíme pomocí postulátu o konstantní rychlosti světla. Světelný signál vyslaný v čase $t = t' = 0$ urazí v obou soustavách S a S' dráhu $x_1 = c\,t$, resp. $x_1' = c\,t'$. Dosazením vztahů (4.5) a (4.6) a následnou úpravou dostaneme pro koeficient γ vyjádření

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \quad ; \quad \beta = \frac{v}{c}.$$

Transformační vztahy (4.2) lze tedy vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned} x_1' &= \gamma\left(x_1 - vt\right) = \frac{x_1 - vt}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{x_1 - vt}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}, \quad x_2' = x_2, \quad x_3' = x_3, \\ t' &= \gamma\left(t - vc^{-2}x_1\right) = \frac{t - \frac{\beta}{c}x_1}{\sqrt{1-\beta^2}} = \frac{t - \frac{v\,x_1}{c^2}}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}. \end{aligned} \tag{4.7}$$

Pro inverzní transformaci platí stejní vztahy jen rychlost $\vec{v}$ má opačnou orientaci, tedy $-\vec{v}$. Uvedená transformace nese označení Lorenzova transformace.

4.5.2 Vztah mezi Einsteinovým a Galileiho principem relativity

Při posuzování vztahu mezi Galileiho principem relativity a Einsteinovým principem relativity je dobré si uvědomit, že Galileho princip je vlastně důsledkem Newtonových pohybových rovnic, z kterých přímo vyplývá, že rovnoměrný přímočarý pohyb neovlivňuje pohybový stav systému a dále, že čas plyne nezávisle na pohybovém stavu systému tedy, že čas je ***absolutní veličinou***. Uvedené skutečnosti vyjadřuje ***Galileiho transformace*** udávající změnu prostorových souřadnic $x_i, i = 1, 2, 3$ a času *t* při přechodu od jedné inerciální soustavy do druhé,

tj. při přechodu od soustavy S do soustavy S', která se vůči soustavě S pohybuje rovnoměrně přímočaře rychlostí $\vec{v}$

$$x_i' = x_i - v_i t\,, \quad t' = t \quad ; \quad i = 1, 2, 3\,. \tag{4.8}$$

Z uvedeného výkladu je zřejmé, že rozšíření platnosti Galileho principu relativity na jiné jevy než mechanické je diskutabilní. Je historickým paradoxem, že i Lorenzova transformace byla původně odvozena z Maxwellových rovnic a tedy např. i fakt, že světlo se šíří konstantní rychlostí ve všech soustavách, pro které platí Lorenzovy transformace, se jevil jako důsledek struktury Maxwellových rovnic.

Teprve Einstein na základě experimentálních výsledků a hluboké analýzy Newtonova pojetí času a prostoru zformuloval dva základní obecné postuláty a pomocí těchto obecných postulátů odvodil potřebné transformační vztahy. Ukázalo se, že tato transformace je totožná s transformací Lorenzovou. A protože Maxwellovy rovnice jsou vůči Lorenzově transformaci invariantní, a tedy jsou v souladu se základními postuláty, vyslovil Einstein zcela evidentní požadavek na přepracování vztahů platných dosud pro mechaniku tak, aby rovněž byly v souladu se základními postuláty.

Jistou heuristickou podporou na uvedený Einsteinův požadavek je i splnění tzv. ***principu korespondence***, podle kterého každá nová, obecnější teorie musí zahrnovat teorii starší, pokud se tato osvědčila, jako specielní případ. A protože pro $v << c$ platí pro poměr $v/c \to 0$ a vztahy (4.7) přejdou ve vztahy (4.8). To je také důvodem, proč lze pro běžné situace, kdy je uvedená podmínka splněna, použít pro praktické aplikace Newtonovy pohybové rovnice.

Vyslovením dvou základních postulátů Einstein s konečnou platností zamítl koncepci Newtonova absolutního prostoru a absolutního času. Jak vyplývá ze vztahů (4.7) i čas je závislý na pohybovém stavu systému, i čas je ***relativní***.

4.5.3 Minkowského čtyřrozměrný prostoročas

V roce 1907, dva roky po publikování základů speciální teorie relativity, zavedl německý matematik **HERMANN MINKOWSKI** (1864-1909) pojem **čtyřrozměrného prostoročasového kontinua** a novou formu zápisu veličin a fyzikálních zákonů ve **čtyřsložkovém** (**čtyřsouřadnicovém**) tvaru.

Minkowského prostoročas umožnil geometrickou interpretaci Lorentzovy transformace a vybudování matematického aparátu, díky němuž se specielní teorie relativity stala velmi přehlednou. Minkowski poukázal na to, že prostorové a časové údaje jsou vzájemně neoddělitelné a provázané. Každá událost musí tedy být popsána třemi prostorovými a jednou časovou souřadnicí. Těmito čtyřmi souřadnicemi (x_1, x_2, x_3, x_4) je jednoznačně určen bod (bodová událost) v abstraktním čtyřrozměrném prostoru - ***Minkowského prostoročase*** M_4**.** Pro zachování stejného rozměru všech čtyř souřadnic má časová souřadnice tvar $x_4 = \mathrm{i}ct$ (***i*** je imaginární jednotka a c je rychlost světla ve vakuu).

Podle Minkowského se naše realita odehrává v čtyřrozměrném prostoročasu, ve kterém je každý bod (událost) popsána prostoročasovými souřadnicemi $x_1 = x$, $x_2 = y$, $x_3 = z$, $x_4 = \mathrm{i}ct$. Tento prostoročas je ***pseudoeuklidovský*,** a proto pro něj můžeme zavést euklidovskou metriku, ve které je prostoročasový interval, tj. vzdálenost dvou prostoročasových bodů (událostí)

$s_1 \equiv \left(x_1^{(1)}, x_2^{(1)}, x_3^{(1)}, x_4^{(1)}\right) = \left(x_1, y_1, z_1, \mathrm{i}\,c\,t_1\right)$ a $s_2 = \left(x_1^{(2)}, x_2^{(2)}, x_3^{(2)}, x_4^{(2)}\right) = \left(x_2, y_2, z_2, \mathrm{i}\,c\,t_2\right)$ určen vztahem

$$\begin{aligned} s_{12}^2 &= \left(x_2 - x_1\right)^2 + \left(y_2 - y_1\right)^2 + \left(z_2 - z_1\right)^2 - c^2\left(t_2 - t_1\right)^2, \\ s_{12}^2 &= \left(x_\mu^{(2)} - x_\mu^{(1)}\right)\left(x_\mu^{(2)} - x_\mu^{(1)}\right); \quad \mu = 1,2,3,4\,, \end{aligned} \tag{4.9}$$

kde pro zdvojené řecké indexy platí Einsteinovo sumační pravidlo. Prostoročasový interval dvou bodových prostoročasových událostí je invariantem Lorentzovy transformace. V analogii s topologickými pojmy v euklidovské geometrii se zavádí čtyřvektory a tenzory vyšších řádů.

4.6 PROSTOR A ČAS VE SPECIÁLNÍ TEORII RELATIVITY

4.6.1 Relativnost současnosti událostí

Diskutujme nyní podrobněji pojem ***současnosti dvou událostí*** z hlediska speciální teorie relativity. Nechť soustava S' se pohybuje vůči soustavě S rovnoměrně přímočaře rychlostí v. Jsou-li A, B dvě bodové události, které mají v soustavě S prostoročasové souřadnice $\mathrm{A} \equiv \left(x_\mathrm{A}, 0, 0, t_\mathrm{A}\right)$ a $\mathrm{B} \equiv \left(x_\mathrm{B}, 0, 0, t_\mathrm{B}\right)$, potom se časový interval $\Delta t = t_B - t_A$, který proběhne mezi těmito událostmi v soustavě S, přetransformuje v soustavě S' podle vztahu (4.7) následujícím způsobem

$$\Delta t' = t'_\mathrm{B} - t'_\mathrm{A} = \gamma\left[\left(t_\mathrm{B} - t_\mathrm{A}\right) - \frac{v}{c^2}\left(x_\mathrm{B} - x_\mathrm{A}\right)\right] = \gamma\left(\Delta t - \frac{v}{c^2}\Delta x\right). \tag{4.10}$$

Nechť uvažované události A, B proběhnou v soustavě S současně, tj. $t_\mathrm{A} = t_\mathrm{B} \Rightarrow \Delta t = 0$. Ze vztahu (4.10) je zřejmé, že pozorovateli v soustavě S' se události A, B nejeví jako současné ($\Delta t' = t'_B - t'_A \neq 0$), je-li $x_\mathrm{A} \neq x_\mathrm{B}$. Pojem současnosti je tedy ***relativní***. Z uvedeného vztahu dále vyplývá $\left| t'_\mathrm{B} - t'_\mathrm{A} \right| < \left| x'_\mathrm{B} - x'_\mathrm{A} \right| / c$. To znamená, že jsou-li dvě události A, B v inerciální soustavě S současné, pak v žádné inerciální soustavě S' nemůže být jejich časový rozdíl větší než doba, kterou potřebuje světlo, aby dospělo z místa jedné události do místa druhé události.

4.6.2 Princip kauzality, maximální rychlost signálu

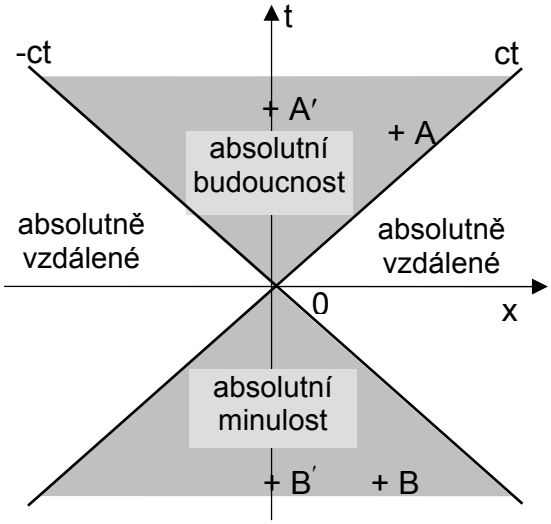
Současnost událostí je v Newtonově mechanice pojem absolutní. Je to dáno absolutním plynutím času. Ve specielní teorii relativity je však čas závislý na pohybovém stavu soustavy, ke které posuzovanou událost vztahujeme. Protože však podle Einsteinova principu relativity jsou všechny inerciální soustavy fyzikálně zcela rovnocenné, musíme současnost událostí zjištěnou měřením v soustavě S pokládat za stejně pravdivou, skutečnou a objektivní, jako jejich různý časový průběh v soustavě S'.

Je jasné, že vztahy $t_\mathrm{A} = t_\mathrm{B}\,;\, t'_\mathrm{A} > t'_\mathrm{B}\,;\, t''_\mathrm{A} < t''_\mathrm{B}$ neodporují obecné logice, neboť to jsou vztahy mezi údaji různých hodin, i když se ve všech třech případech týkají téže dvojice událostí. Není však již tak zřejmé, zda logická rovnocennost těchto vztahů neodporuje jiným, obecně uznávaným fyzikálním principům. Jedním z těchto principů je ***princip kauzality (příčinnosti***).

Tento princip má přímý vztah k časovému sledu událostí a vyžaduje aby příčina vždy předcházela následek. Tento princip je základem všeho našeho poznání a jeho porušení by zrelativizovalo veškeré naše dosud získané poznatky o vnějším světě.

Jako příčina a následek spolu mohou souviset pouze následné události A a B, jejichž prostorové a časové souřadnice splňují ve všech inerciálních soustavách nerovnost

$$\left| t_{\mathrm{A}} - t_{\mathrm{B}} \right| \geq \left| x'_{\mathrm{B}} - x'_{\mathrm{A}} \right| / c \,. \tag{4.11}$$



Obr.4.3 Struktura časoprostoru z hlediska průběh událostí

Pro zachování principu kauzality je nutné aby pro rychlost šíření fyzikálních signálů platila nerovnost $v \leq c$. Rychlost světla ve vakuu představuje ***maximální rychlost šíření signálů.***

Časové pořadí následných událostí splňujících podmínku (4.11) je absolutní (stejné ve všech inerciálních soustavách). Platí-li pro tyto události navíc také podmínka $t_{\mathrm{B}} < t_{\mathrm{A}}$, je A vůči B událostí absolutně budoucí a B vůči A událostí absolutně minulou.

Prostoročas v okolí daného prostoročasového bodu *0* lze rozdělit na tři oblasti znázorněné na obr. 4.3. Fyzické těleso nebo signál v oblasti ***absolutní minulosti*** se může dostat z libovolného bodu B rychlostí menší než je rychlost světla do bodu *0* a ovlivnit zde probíhající události. Události proběhlé v minulosti v bodě B', který leží ve stejném bodu prostoru jako bod *0*, ovlivňují proto události probíhající v bodě *0* nyní. Události probíhající v bodě *0* nyní, ovlivní běh událostí v bodě A' v budoucnu a mohou ovlivnit události v libovolném bodě A v oblasti ***absolutní budoucnosti***. Body nebo události ležící v oblastech ***absolutně vzdálených*** nemají k událostem probíhajícím v bodě *0* žádný kauzální vztah.

4.6.3 Skládání rychlostí

Negativní výsledek Michelson – Morleyova pokusu a princip konstantní rychlosti světla dává tušit, že pro skládání rychlostí musí ve speciální teorii relativity platit jiná pravidla než v mechanice Newtonově. Nechť se daný bod pohybuje v soustavě S' obecně rychlostí $\vec{u}'$ o složkách $\vec{u}' \equiv (u'_1, u'_2, u'_3)$. Pro jednotlivé souřadnice v soustavě S' potom platí: $x'_1 = u'_1 t', x'_2 = u'_2 t', x'_3 = u'_3 t'$. Po dosazení transformačních vztahů podle (4.7), diferenciaci a následném vydělení dostaneme

$$u_1 = \frac{u'_1 + v}{1 + \frac{v}{c^2} u'_1}; \; u_2 = u'_2 \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{1 + \frac{v}{c^2} u'_1}; \; u_3 = u'_3 \frac{\sqrt{1 - \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{1 + \frac{v}{c^2} u'_1}, \tag{4.12}$$

To jsou hledaná pravidla pro skládání rychlostí. Jejich správnost ověříme následujícím příkladem:

Příklad.

Nechť se v soustavě S', pohybující se rychlostí $v = c$, pohybuje bod rovněž rychlostí $u_1' = c$. Podle pravidel klasické mechaniky by měla výsledná rychlost bodu v systému S být rovna $u_1 = 2c$. Po dosazení do vztahu (4.12) dostaneme $u_1 = c$, tedy výsledek, který je v souladu s principem konstantní rychlosti světla.

4.6.4 Dilatace času

S relativností současnosti úzce souvisí další relativistický jev, tzv. ***dilatace času*** neboli zpomalení chodu hodin, které jsou v pohybu vůči zvolenému systému. Mějme opět dvě inerciální soustavy S a S', které se vůči sobě pohybují rovnoměrně přímočaře rychlostí $\vec{v}$. Naším úkolem bude porovnat „chod hodin“ v těchto soustavách. Vzhledem k relativnosti současnosti vybereme jedny určité hodiny H' v soustavě S'. Vybrané hodiny H' mají v soustavě S' neproměnné souřadnice a vůči soustavě S se pohybují rychlostí $\vec{v} \equiv (v, 0, 0)$. Protože všechny hodiny v soustavě S jsou synchronizovány vybereme pro porovnání chodu vždy ty hodiny v soustavě S, které hodiny H' právě míjí. Odečítání času t budeme tedy provádět na hodinách H soumístných s hodinami H'. Porovnání chodu provedeme tak, že porovnáme časový interval $\Delta t' = \Delta\tau$ na hodinách H', které jsou v klidu vůči soustavě S' ale vůči soustavě S se pohybují rychlostí $\vec{v}$, s údajem Δt odečteným na hodinách H, které jsou v klidu vůči pozorovateli. Vztah mezi oběma údaji udává vzorec (4.10), ve kterém, vzhledem k tomu, že se jedná o soumístnou událost položíme $\Delta x = 0$.

$$\Delta t' = \Delta\tau = \gamma\,\Delta t\,. \tag{4.13}$$

Z uvedeného vztahu vyplývá, že časová jednotka $\Delta t'$ je v soustavě S' γ^{-1}-krát delší než soustavě S a tedy hodiny systému S' jdou γ^{-1}-krát pomaleji než hodiny v systému S.

Čas plyne nejpomaleji v soustavě, vůči které jsou hodiny v klidu. Tento čas označujeme jako čas vlastní.

Dilataci času lze potvrdit experimentálně poměrně názorně na rozpadu mionů. Jsou to elementárních částic, které vznikají jako druhotné produkty při srážkách částic primárního kosmického záření s molekulami plynů atmosféry. Miony se rozpadají na elektron a dvě neutrina. Z pozorování vyplývá, že miony vznikají zhruba ve výšce *30 km* a pohybují se rychlostí *0,9 c*. Z této výšky pak dopadají na zemský povrch. Měření ukazují, že v klidu se miony rozpadají s charakteristickou dobou života $\tau_0 = 2{,}2\,.\,10^{-6}\,s$. Z uvedených údajů tak vyplývá, že pro průlet 30 km zemskou atmosférou mají dobu života podstatně delší $\Delta t \geq 10^{-4}\,s \approx 50\,\tau_0$. Vysvětlení dává vztah (4.13), který byl i na základě experimentálních výsledků potvrzen.

Část pro zájemce.

V souvislosti s dilatací času se zmiňme o tzv. paradoxu dvojčat. Jedná se o následující problém: Dva kosmonauti – dvojčata A, B, se rozhodnou, že jeden z nich – kosmonaut A, zůstane na Zemi a druhý, kosmonaut B, odletí do vesmíru, kde se pohybuje velkou rychlostí. Vzhledem k dilataci času by měl být po návratu kosmonaut B mladší než kosmonaut A. Ovšem tuto úvahu lze obrátit – z hlediska kosmonauta B se pohyboval kosmonaut A a mladší by měl být kosmonaut A. Pro

objasnění uvedeného paradoxu je nutné podrobněji analyzovat podmínky pro aplikaci principu relativity. Aby se kosmonaut B mohl vrátit, musel obrátit raketu zpět k Zemi a jeho pohyb byl alespoň po určitou dobu zrychlený a toto zrychlení musel kosmonaut B „pocítit." Tím je dán mezi oběma kosmonauty rozdíl v absolutním" smyslu. Problém není symetrický. Mladší může být pouze kosmonaut B.

4.6.5 Kontrakce délek

Dalším relativistickým efektem je tzv. kontrakce délek neboli zkracování délky ve směru pohybu. Mějme opět dvě inerciální soustavy S a S', které se vůči sobě pohybují rovnoměrně přímočaře rychlostí $\vec{v}$. Naším úkolem bude porovnat „délku měřicí tyče" ve směru pohybu v těchto soustavách. Nechť měřicí tyč délky l' je vůči soustavě S' v klidu. Chce-li pozorovatel, který je v klidu vůči soustavě S, změřit délku měřicí tyče, může to např. udělat tak, že v okamžiku $t = 0$, kdy ho míjí počátek měřicí tyče zmačkne stopky a zastaví v okamžiku, kdy ho míjí konec tyče. Potom pro délku měřicí tyče v soustavě S platí $l = v\Delta t$. Pozorovatel v soustavě S' zmačkne stopky v okamžiku $t' = 0$, kdy např. počátek soustavy S míjí počátek měřicí tyče a zastaví je v okamžiku, kdy počátek soustavy S míjí konec měřící tyče. Potom v soustavě S' platí $l' = v\Delta t'$, a tedy $\Delta t' = l'/v$. Vezmeme-li v úvahu dilataci času, vztah (4.13), pak platí

$$l = v\,t = v\frac{t'}{\gamma} = \frac{v}{\gamma}\frac{l'}{v} = \frac{l'}{\gamma} \quad \Rightarrow \quad l = l'\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}\,. \tag{4.14}$$

Pozorovateli, který je v klidu vůči soustavě S, se měřicí tyč jeví kratší, dochází ke kontrakci délky ve směru pohybu.

Kontrakce délky ve směru pohybu vysvětluje negativní výsledek Michelson – Morleyova pokusu. Dosadíme-li do vztahu (4.1) za L_1, délka vůči „klidnému éteru," redukovanou délku podle vztahu (4.14), vyjde nám ve shodě s výsledkem experimentu nulové posunutí proužků.

4.7 ENERGIE A HYBNOST VE SPECIÁLNÍ TEORII RELATIVITY

4.7.1 Relativistická hmotnost

Rozebereme nyní problém hmotnosti v speciální teorii relativity. Ukážeme, že v důsledku principu relativity a několika dalších „rozumných" předpokladů není hmotnost konstantní, jak je tomu v mechanice Newtonově ale závisí na rychlosti vztažné soustavy. Budeme analyzovat srážku dvou hmotných částic.

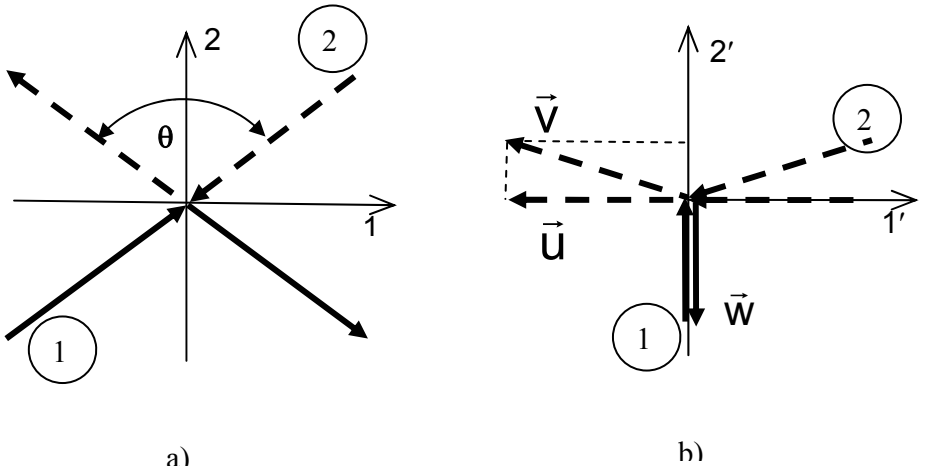
Nechť částice 1 a 2 jsou dvě naprosto stejné částice, které se pohybují proti sobě přesně stejnou rychlostí. V tomto případě se zachovává energie a hybnost. O hybnosti samotné budeme předpokládat, že ji lze zapsat jako součin hmotnosti, která může být funkcí rychlosti a rychlosti samé

$$\vec{p} = m_v(v)\,\vec{v}\,.$$

Celková hybnost uvažované soustavy je rovna nule. V důsledku zachování celkové hybnosti musí být po srážce směry pohybu obou částic přesně opačné. Navíc musí mít v důsledku zachování energie i stejné rychlosti, viz obr. 4.4a. Úhel θ je roven

odchylce částice. Vztažná soustava je zvolena tak, že osa *2* půlí úhel θ. Na obr. 4.4b je tatáž srážka zachycená ve vztažné soustavě, která se pohybuje spolu s částicí 1 ve směru osy *1′*. Změna hybnosti částice 1 je rovna

$$\Delta p_1 = 2 m_w(w) w$$



Obr. 4.4 Srážka dvou stejných částic v soustavě, ve které mají
a) obě částice stejně velkou rychlost
b) částice 1 je v klidu

V uvedené soustavě se složka *u* rychlosti částice 2 ve směru osy *1′* nemění. Změnu rychlosti částice 2 ve směru osy *2′* - *u*. $tg\theta'$ určíme nejsnáze tak, když tutéž situaci posoudíme v soustavě, která se pohybuje spolu s částicí 2 ve směru osy *1′* rychlostí – *u*. Použitím vztahů (4.12), ve kterých položíme $v = u$, $u_1' = 0$, dostaneme pro změnu hybnosti částice 2 vztah

$$\Delta p_2 = 2 m_u(u) \sqrt{1 - \left(\frac{u}{c}\right)^2}\, w .$$

Protože celková hybnost se nemění a platí princip relativity, platí $\Delta p_1 + \Delta p_2 = 0$ musí platit

$$\frac{m_w(w)}{m_u(u)} = \sqrt{1 - \left(\frac{u}{c}\right)^2} .$$

Jestliže nyní budeme uvažovat *w* infenitezimálně malé, pak pro $w \to 0 \Rightarrow m(w) \to m_0$. Konečný výsledek je

$$m_u(u) = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \left(\frac{u}{c}\right)^2}} . \qquad (4.15)$$

Pro $u = 0$ je $m(0) = m_0$. Konstanta m_0 je tedy rovna hmotnosti uvažované soustavy v případě, že tato soustava je jako celek v klidu. Proto ji označujeme jako klidovou hmotnost.

Ve speciální teorii relativity je hmotnost závislá na pohybovém stavu.

4.7.2 Relativistická dynamika a energie

Dalším naším úkolem bude posoudit, jak se změní formulace pohybových zákonů, jestliže hmotnost je závislá na pohybovém stavu soustavy. První Newtonův zákon zůstává v platnosti. V podstatě představuje aplikaci Einsteinova principu relativity na mechaniku. Formulace druhého Newtonova zákona zůstává zachována

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt}. \tag{4.16}$$

stejně jako definice hybnosti $\vec{p} = m\vec{v}$ pouze s tou změnou, že za hmotnost m je nutné dosadit vztah (4.15)

$$\vec{p} = m\vec{v} = \frac{m_0\vec{v}}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}}. \tag{4.17}$$

Dosadíme-li uvedený vztah do rovnice (4.16) je zřejmé, že účinkem silového působení dochází nejen k zvyšování rychlosti ale i k nárůstu hmotnosti. Každé zvyšování rychlosti vyžaduje působení stále větší síly. Pro objekty s nenulovou klidovou hmotností dostáváme tak další zdůvodnění proč je rychlost světla mezní rychlostí. Pro urychlení částice s nenulovou klidovou hmotností na rychlost c, by bylo nutné nekonečně velké silové působení.

4.7.3 Ekvivalence hmotnosti a energie

Upravme vztah (4.15) pomocí Tailorova rozvoje

$$m_v(v) = \frac{m_0}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}} \approx m_0\left(1+\frac{1}{2}\frac{v^2}{c^2}+\frac{3}{8}\frac{v^4}{c^4}+\ldots\right).$$

Vynásobením uvedeného vztahu c^2 dostaneme

$$mc^2 = m_0c^2 + \frac{1}{2}m_0v^2 + \ldots \tag{4.18}$$

Rovnice (4.18) má rozměr energie. Einstein interpretoval jednotlivé členy následujícím způsobem:

Výraz na levé straně rovnice (4.18) vyjadřuje ***celkovou energii*** uvažované soustavy. Poslední člen na pravé straně odpovídá klasické ***kinetické energii***. První člen vztahu (4.18) je nenulový i v případě, kdy soustava je v klidu $(v=0)$. Einstein tento člen interpretuje jako část celkové energie, kterou označil jako vnitřní energii soustavy, která nese označení ***klidová energie*** soustavy.

Ze vztahu (4.18) vyplývá, že změna kinetické energie způsobená celkovou prací sil je vždy

$$\Delta T = (m-m_0)c^2 = \Delta\, mc^2. \tag{4.19}$$

Ukážeme nyní jeden z důsledků uvedeného vztahu. Prozkoumáme případ nepružné srážky dvou těles. Budeme uvažovat dvě tělesa o klidové hmotnosti m_0 , které se pohybují proti sobě rychlostí v. Ze zachování hybnosti vyplývá, že po nepružné srážce vznikne těleso o hmotnosti

$$M_0 = 2m(v) = \frac{2m_0}{\sqrt{1-\left(\frac{v}{c}\right)^2}} = 2m_v(v).$$

Klidová hmotnost M_0 vzniklého tělesa není tedy pouhým součtem klidových hmotností původních částic m_0 , jak to vyplývá z Newtonovy mechaniky, ale je do ní započítán i přírůstek hmotnosti, který odpovídá kinetické energii obou těles před srážkou $\Delta m = \Delta T / c^2$, viz vztah (4.19). Tento závěr lze zobecnit:

Při spojení částic, při kterém částice získají potenciální nebo jakýkoliv jiný druh energie, zahrnuje výsledná hmotnost celkovou dodanou energii.

Uvedený závěr označujeme jako ***zákon ekvivalence***. Celková hmotnost a energie soustavy jsou vázány vztahem

$$\boldsymbol{E = m c^2.}$$

Ve speciální relativitě tedy nerozlišujeme zákon zachování energie a zákon zachování hmotnosti. Zákon ekvivalence oba zákony sjednocuje do jednoho zákona zachování.

Uveďme některé další důsledky zákona ekvivalence. Předpokládejme, že máme částici o hmotnosti M a ta se rozpadne na dvě stejné části o hmotnosti m, které se pohybují rychlostí u. Nechť prostředí, kterým se takto vzniklé částice pohybují, je zbrzdí do úplného zastavení. Jakou energii předají obě částice svému okolí? Anebo opačný případ kdy srážkou dvou částic vznikne nová částice. Jaká je vazební energie nově vzniklé částice? Ze zákona ekvivalence vyplývá pro tyto energie vztah $E = (M_0 - 2m_0)c^2$, kde $M_0 = 2m_u(u)$. Podle tohoto vztahu lze určit např. jaderné vazebné energie nebo energii , která se uvolní při jaderném výbuchu nebo v reaktoru atomové elektrárny.

Pomocí vztahů (4.15), (4.17) a zákona ekvivalence odvodíme snadno vztahy, které se používají při teoretických úvahách

$$E^2 - p^2c^2 = m_0^2c^4,$$

$$pc = E\frac{v}{c} \ .$$

4.8 ZÁKLADY OBECNÉ TEORIE RELATIVITY

4.8.1 Princip ekvivalence

Ve speciální teorii relativity jsou brány do úvahy výhradně inerciální soustavy a pouze sily vzájemného působení, „šířícími se od tělesa k tělesu“ konečnou rychlostí nepřevyšující rychlost c. Z úvah jsou tedy vyloučeny setrvačné síly. Ve shodě s Einsteinovým principem relativity mají v těchto soustavách všechny fyzikální

zákony týž tvar nebo jinak tyto zákony jsou invariantní vůči Lorentzově transformaci.

Podle Einsteinova principu relativity nelze od sebe odlišit inerciální soustavy žádným fyzikálním experimentem. Proto z hlediska inerciálních soustav ztrácí jakýkoliv smysl úvahy o absolutním prostoru a času.

Zcela jiná je situace z hlediska setrvačných sil. Již rovnoměrná rotace vyvolává pole setrvačných odstředivých sil, přičemž jednou z možných příčin tohoto jevu by mohla být právě absolutnost prostoru.

Vysvětlení původu setrvačných odstředivých sil na základě absolutnosti prostoru není z hlediska speciální teorie relativity přijatelné. Podnětným při řešení tohoto problému byl názor vyslovený Machem**,** profesorem německé části Karlovy univerzity koncem 19. století, že příčinou setrvačných sil je veškerá hmota vesmíru. Při tomto přístupu jsou setrvačné síly pojímány jako síly vzájemného působení těles.

Již od časů Galilea je známo, že gravitační pole se shoduje s polem setrvačných sil právě v tom, že uděluje všem tělesům totéž zrychlení (bez ohledu na jejich hmotnost). Hmotnost tělesa v gravitačním poli jiných těles (tzv. ***gravitační*** nebo také ***„těžká“ hmotnost***) je kvantitativní charakteristikou gravitační síly, kterou je těleso přitahováno k ostatním tělesům ve svém okolí.

Naopak při pohybu tělesa pod vlivem jiné než gravitační síly se hmotnost jeví jako kvantitativní charakteristika jeho setrvačnosti – „odporu“ tělesa vůči změně dosavadního stavu. V tomto případě hovoříme o tzv. ***setrvačné hmotnosti*** tělesa.

Zdálo by se, že setrvačná a těžká hmotnost spolu nemají nic společného, neboť první z nich souvisí s pohybem v libovolném silovém poli a druhá pouze s pohybem v poli gravitačním.

Podle Newtona působí gravitační pole Země na částici gravitační silou

$$F = \kappa \frac{m_g M_Z}{r^2}. \tag{4.20}$$

kde M_Z je hmotnost Země, k gravitační konstanta a m_g je gravitační hmotnost částice. Gravitační síla uděluje částici zrychlení a_g a platí

$$F = m_s a_g ,$$

kde m_s je setrvačná hmotnost částice. Srovnáním obou vztahů dostaneme

$$\frac{m_g}{m_s} = \frac{r^2}{\kappa M_Z} a_g .$$

Výraz $r^2/(\kappa M_Z)$ je pro všechny částice ve vzdálenosti r stejný. Proto je jasné, že poměr m_g/m_s je určen pouze gravitačním zrychlením a_g. Nebude-li toto zrychlení záviset na tvaru částice ani na jejím chemickém složení, bude gravitační hmotnost částice rovna její hmotnosti setrvačné. Jestliže experiment potvrdí $m_g = m_s$, můžeme hovořit o ekvivalenci gravitační a setrvačné hmotnosti.

Newton použil k měření vzájemného poměru obou hmotností kyvadla. Stejnou metodou později **F.W. BESSEL** určil, že poměr m_g/m_s se neliší od jedné více než o 10^{-5}. **L.V.EÖTVÖS** spolu s **D.PEKAREM** a **E.FEKETEM** pomocí torzních vah dosáhli

přesnosti 10^{-9}. Na stejném zařízení ale při značně vylepšeném uspořádání, dosáhli **R. H. DICKE**, **P. L. ROLL** a **R. KROTKOV** kolem roku 1964 přesnosti 10^{-11}. V roce 1971 dosáhli **V. B. BRAGINSKIJ** a **V. I. PANOV** přesnost 10^{-12}.

V rámci Newtonovské fyziky je fakt, že $m_g = m_s$ pozoruhodný ale zároveň principielně nepochopitelným faktem. Einstein vyřešil tento problém tím, že postuloval (1907)

Princip ekvivalence gravitační a setrvačné hmotnosti

a s ním související (1915)

Princip lokální ekvivalence pole gravitačních a setrvačných sil.

Podle tohoto principu jsou neinerciální vztažné soustavy lokálně ekvivalentní homogennímu gravitačnímu poli přítomnému v inerciální soustavě. Uvedené tvrzení objasníme na následujícím příkladu:

Předpokládejme, že v kabině výtahu padá volně těleso. Je-li kabina vůči Zemi v klidu, pohybuje se těleso v lokálně homogenním gravitačním poli s konstantním zrychlením a_g. Nechť nyní současně s tělesem volně padá i kabina výtahu. Při jinak stejných počátečních podmínkách se v tomto případě těleso nachází vůči kabině v klidu. Ve zrychleně se pohybující neinerciální soustavě spojené s kabinou na těleso spolu s gravitační silou působí právě opačná setrvačná síla a jejich vektorový součet je roven nule – těleso je vzhledem k působení těchto sil v rovnováze.

Uvedený příklad ukazuje, že uvnitř padající kabiny (neinerciální soustavy) nelze její zrychlený pohyb pozorovat – jinými slovy – volně padající kabina výtahu se chová jako inerciální soustava, a proto v ní platí všechny vztahy a zákony speciální teorie relativity.

Je třeba zdůraznit, že právě popsaný jev má pouze ***lokální charakter.*** Ekvivalence gravitační a setrvačné síly je vzhledem k požadavku ***homogennosti gravitačního pole*** pouze lokální, tzn.. že je omezená jen na „malé“ oblasti prostoročasového kontinua.

Gravitační pole je lokálně ekvivalentní poli setrvačných (inerciálních) sil, vznikajících při pohybu se zrychlením. Tato dvě pole nelze v uvažované malé oblasti od sebe odlišit žádným fyzikálním experimentem.

Z hlediska speciální teorie relativity Newtonův gravitační zákon nesplňuje princip relativity (není invariantní vůči Lorentzově transformaci). Navíc z něho vyplývá okamžité působení na dálku nebo jinak šíření signálu nekonečnou rychlostí. Tyto principielní nedostatky řešil Einstein formulací nové teorie gravitačního pole.

Uvažujme lokálně inerciální vztažnou soustavu spojenou s pohybující se soustavou - např. již zmíněnou kabinu výtahu volně padající v malé oblasti prostoročasového kontinua. V této lokálně inerciální soustavě S' můžeme v souladu se speciální teorií relativity vyjádřit kvadrát nekonečně malého prostoročasového intervalu $\mathrm{d}s^2$, viz vztah (4.9), ve tvaru

$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}x'^2 + \mathrm{d}y'^2 + \mathrm{d}z'^2 - c^2\mathrm{d}t'^2 = \mathrm{d}x'_\mu \mathrm{d}x'_\mu, \quad \mu = 1, 2, 3, 4 .$$

Přejdeme nyní do inerciální soustavy S (např. do soustavy spojené se Zemí). Při přechodu se prostoročasové souřadnice přetransformují pomocí transformačních vztahů

$$x'_\mu = x'_\mu(x_1, x_2, x_3, x_4);\ \mu = 1, 2, 3, 4 .$$

Invariant $\mathrm{d}s^2$ lze se při této transformaci vyjádřit jako

$$\mathrm{d}s^2 = g_{\alpha\beta}\,\mathrm{d}x_\alpha\,\mathrm{d}x_\beta ;\quad \alpha, \beta = 1, 2, 3, 4 . \tag{4.21}$$

kde $g_{\alpha\beta}$ je tzv. ***metrický tenzor***, pro nějž platí

$$g_{\alpha\beta} = \frac{\partial x'_\delta}{\partial x_\alpha}\frac{\partial x'_\delta}{\partial x_\beta} = g_{\beta\alpha};\ \alpha, \beta, \delta = 1, 2, 3, 4 .$$

Složky metrického tenzoru $g_{\alpha\beta}$ jsou obecně funkcemi souřadnic x_1, x_2, x_3, x_4. Tenzor sám charakterizuje ***geometrické vlastnosti prostoru***. Vnitřní geometrie prostoru, určená obecně vztahem (4.21) se nazývá ***geometrií Riemannovou***. Pro $g_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\beta}$ je geometrie prostoru geometrií ***euklidovskou*** (nebo ***pseudoeuklidovskou***, neboť čtvrtá souřadnice je ryze imaginární).

Posuzujeme-li vztažné soustavy z hlediska jejích vnitřní geometrie, můžeme říci, že inerciální vztažné soustavy jsou charakterizovány (pseudoeuklidovskou geometrií).

Einsteinova základní myšlenka spočívá ve spojení gravitace, jako obecně působící interakce, s vnitřní geometrií prostoru. Vnitřní geometrie prostoru, popsaná metrickým tenzorem $g_{\alpha\beta}$, je tedy funkcí gravitačního pole. Princip lokální ekvivalence gravitačních a setrvačných sil pak jenom znamená, že lokálně lze obecně Riemannovu geometrii gravitačního pole převést na geometrii euklidovskou.

Jestliže je při tomto přechodu ***tenzor křivosti*** $R_{\alpha\beta\gamma}(g_{\alpha\beta})$, tenzor definovaný pomocí složek metrického tenzoru $g_{\alpha\beta}$, vymizí $(R_{\alpha\beta\gamma} = 0)$, pak v oblasti prostoročasového kontinua, do níž přecházíme, působí speciální (odstranitelné) „gravitační“ pole, nazývané ***polem setrvačných sil***.

V případě nenulového tenzoru křivosti působí v dané oblasti prostoročasového kontinua „pravé“, skutečné“ gravitační pole, jehož zdrojem jsou hmotná tělesa, která se nacházejí v dané oblasti; v okolí těchto těles je ***prostor obecně zakřivený***.

Gravitační pole nelze žádnými transformacemi „odstranit“ v celém prostoru. Právě v tom spočívá jejich zásadní odlišnost od polí setrvačných sil. Tato pole jsou lokálně ekvivalentní s gravitačními poli.

Na základě uvedených úvah, speciální teorie relativity a Riemannovy geometrie sestavil v roce 1915 Einstein ***(Einsteinovu) rovnici gravitačního pole***, která odstranila výše uvedené nedostatky Newtonova gravitačního zákona

$$R_{\alpha\beta} - \frac{1}{2}R\,g_{\alpha\beta} + \lambda\,g_{\alpha\beta} = -\alpha\,T_{\alpha\beta},$$

kde $R_{\alpha\beta}$ je Ricciho tenzor křivosti, $T_{\alpha\beta}$ tenzor energie a hybnosti, R skalární křivost, λ tzv. kosmologická konstanta, jejíž hodnotu je nutné určit z rozložení hmoty

a $\alpha = 8\pi\kappa/c^4$. Pro statické pole a nulovou křivost přechází Einsteinův gravitační zákon v zákon Newtonův**,** viz (4.20). Dále zformuloval obecný princip relativity:

Všechny přírodní zákony mají stejný tvar (platí stejně) ve všech ekvivalentních vztažných soustavách

Za ekvivalentní přitom považujeme ty vztažné soustavy, které mají stejný metrický tenzor. Einsteinova teorie gravitace je z historických důvodů známa pod názvem ***obecná teorie relativity.***

Shrnutí kapitoly.

Je jistě zajímavé, že i když jsou důsledky výsledků teorie relativity v běžném životě prakticky zanedbatelné, přesto působí jako intelektuální výzva pro většinu přemýšlivých lidí. Je to asi tím, že pojednává zcela překvapivě o tak běžných a zároveň základních pojmech jako je čas a prostor. A navíc nám umožňuje nahlédnout jak do minulosti, tak i do budoucnosti vesmíru a tak nás nutí se zamyslet nad tím odkud jsme přišli a kam směřujeme. A to jsou natolik závažné otázky, že už to je důvod, proč stojí zato se o relativitě něco dozvědět.

Otázky:

1. Je nutné za normálních podmínek respektovat zákon specielní teorie relativity? Svůj názor krátce zdůvodněte.
2. Určete, kolik energie se uvolní při anihilaci dvojice elektron – pozitron.
3. Vysvětlete, proč se může foton pohybovat rychlostí světla.

5 DALŠÍ ZDROJE:

[1] FEYMAN R.P., LEIGHTON R.B., SANDS M: Přednášky z fyziky s řešenými příklady, Fragment, Praha 2001
[2] KVASNICA J.: Statistická fyzika, Academia, Praha 1983
[3] KVASNICA J.: Termodanamika,SNTL, PRAHA, 1965
[4] LANDAU,L.,D., LIFŠIC, J.,M.: Statističeskaja fizika, Nauka, Moskva, 1964
[5] BAIER A.: Úvod do moderní fyziky, Academia, Praha 1978
[6] DAVIDOV A.S.: Kvantová mechanika, SPN, Praha 1978
[7] KVASNICA J.: Kvantová fyzika, Pedagogická fakulta v Ústí nad Labem, 1984
[8] VOTRUBA V.:Základy speciální teorie relativity, Academia, Praha 1969
[9] KUCHAŘ K.: Základy obecné teorie relativity, Academia, Praha 1968