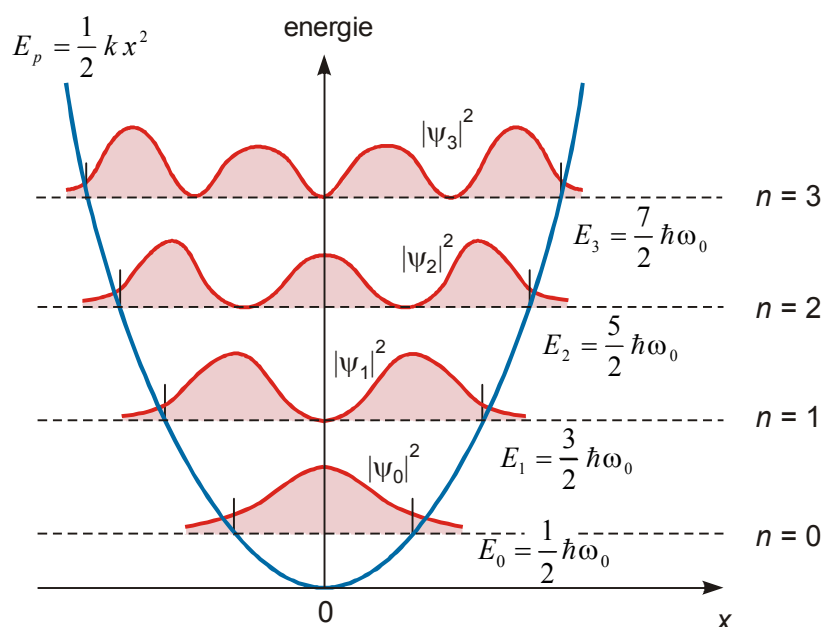


VYSOKÁ ŠKOLA CHEMICKO-TECHNOLOGICKÁ V PRAZE
FAKULTA CHEMICKO-INŽENÝRSKÁ

FYZIKA II

Doc. RNDr. Marie Urbanová, CSc.
Doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.
RNDr. Dr. Petr Alexa



Skripta z Fyziky II jsou určena posluchačům Vysoké školy chemicko-technologické v Praze jako studijní pomůcka k přednáškám a seminářům uvedeného předmětu.

Předmět Fyzika II je zařazen do studijních plánů bakalářských programů jako povinně volitelný, příp. volitelný. Navazuje na povinný předmět Fyzika I, který rozšiřuje zejména v oblastech moderní fyziky – speciální teorie relativity, teorie elektromagnetického pole, úvod do kvantové mechaniky a úvod do jaderné a částicové fyziky.

Autoři děkují paní Pozníčkové za pomoc při formální úpravě textu a nakreslení obrázků a všem čtenářům za případné připomínky a náměty.

*Marie Urbanová
Jaroslav Hofmann
Petr Alexa*

Adresy autorů:

Doc. RNDr. Marie Urbanová, CSc.

Marie.Urbanova@vscht.cz

Doc. Ing. Jaroslav Hofmann, CSc.

Jaroslav.Hofmann@vscht.cz

RNDr. Dr. Petr Alexa

Petr.Alexa@vscht.cz

*Ústav fyziky a měřicí techniky
VŠCHT Praha*

OBSAH

1 INERCIÁLNÍ A NEINERCIÁLNÍ SYSTÉMY	5
1.1 Relativnost pohybu	5
1.2 Galileova transformace.....	7
1.3 Pohyb v inerciálních a neinerciálních systémech	8
1.3.1 Inerciální systémy.....	8
1.3.2 Neinerciální systémy	8
 2 SPECIÁLNÍ TEORIE RELATIVITY	11
2.1 Postuláty speciální teorie relativity.....	12
2.2 Lorentzova transformace	12
2.3 Základní pojmy	13
2.4 Kinematické důsledky Lorentzovy transformace.....	15
2.4.1 Dilatace času	15
2.4.2 Kontrakce délek.....	16
2.4.3 Transformace rychlostí.....	17
2.5 Relativistické dynamické veličiny	18
2.5.1 Hybnost, hmotnost a síla	18
2.5.2 Energie	19
 3 ELEKTROMAGNETICKÉ POLE.....	22
3.1 Zákony elektrického a magnetického pole.....	22
3.2 Elektrické pole v dielektrikách.....	23
3.2.1 Popis pole v dielektrikách	23
3.2.2 Gaussova věta pro elektrostatické pole v dielektriku	26
3.3 Magnetické pole v látkách	28
3.3.1 Magnetismus elektronu v atomu	28
3.3.2 Magnetika.....	30
3.3.3 Diamagnetismus, paramagnetismus, feromagnetismus.....	34
3.4 Zobecněný Ampérův zákon.....	36
3.5 Indukované elektrické a magnetické pole	38
3.6 Maxwellovy rovnice	39
3.7 Elektromagnetické vlnění.....	41
3.7.1 Rovinná elektromagnetická vlna ve vakuu.....	41
3.7.2 Vlastnosti elektromagnetického vlnění	43
3.7.3 Energie přenášená elektromagnetickým vlněním.....	46
3.7.4 Spektrum elektromagnetického vlnění	47
3.7.5 Polarizace elektromagnetického vlnění	49
 4 ÚVOD DO KVANTOVÉ FYZIKY	54
4.1 Záření černého tělesa	54
4.1.1 Vlastnosti záření černého tělesa	55
4.1.2 Einsteinovy koeficienty absorpce a emise.....	57
4.1.3 Laser.....	60
4.2 Elektrony a fotony	62
4.2.1 Fotoelektrický jev.....	62
4.2.2 Comptonův jev	65
4.2.3 Rentgenové záření (X-záření)	68
4.2.4 Vlnové vlastnosti částic, de Broglieova hypotéza	72
4.2.5 Princip neurčitosti	72

5 ÚVOD DO KVANTOVÉ MECHANIKY.....	74
5.1 Vlnová funkce.....	74
5.2 Operátory.....	75
5.3 Časově závislá Schrödingerova rovnice	76
5.3.1 Časově závislá Schrödingerova rovnice v jednorozměrném případě	77
5.3.2 Časově závislá Schrödingerova rovnice v trojrozměrném případě	78
5.4 Časově nezávislá Schrödingerova rovnice	78
5.4.1 Stacionární Schrödingerova rovnice v jednorozměrném případě.....	78
5.4.2 Stacionární Schrödingerova rovnice v trojrozměrném případě	80
5.5 Vlastnosti vlnové funkce popisující stav částice	81
5.6 Řešení Schrödingerovy rovnice v jednoduchých případech.....	82
5.6.1 Volná částice	82
5.6.2 Částice v jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciální jámě	82
5.6.3 Částice v dvojrozměrné a třírozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciální jámě.....	89
5.6.4 Tunelový jev.....	93
5.6.5 Lineární harmonický oscilátor.....	98
 6 KVANTOVÉ ŘEŠENÍ ATOMŮ VODÍKU A VODÍKOVÉHO TYPU	102
6.1 Bohrov model atomu vodíku.....	102
6.1.1 Bohrovy postuláty	103
6.1.2 Energetické hladiny v Bohrově modelu atomu	104
6.2 Kvantově mechanické řešení atomů vodíkového typu.....	106
6.2.1 Schrödingerova rovnice pro částici v coulombickém poli	107
6.2.2 Interpretace vlnové funkce vodíkového atomu	112
6.2.3 Prostorové kvantování	115
6.2.4 Vliv magnetického pole na jednoelektronový atom. Zeemanův jev	116
6.2.5 Spin elektronu	118
6.3 Mnohaelektronové atomy.....	120
6.3.1 Identické částice v kvantové mechanice. Pauliho vylučovací princip.....	120
6.3.2 Výstavbový princip. Hundovo pravidlo	121
 7 JADERNÁ A ČÁSTICOVÁ FYZIKA.....	123
7.1 Základní vlastnosti atomových jader	123
7.1.1 Složení atomových jader	123
7.1.2 Označování a klasifikace atomových jader	124
7.1.3 Základní stavební kameny atomových jader: proton a neutron	124
7.1.4 Měření hmotností atomových jader: hmotnostní spektroskopie.....	125
7.1.5 Rozměry atomových jader.....	127
7.1.6 Tvar atomových jader.....	127
7.2 Radioaktivita atomových jader.....	128
7.2.1 Stabilita jader.....	128
7.2.2 Rozpadový zákon	128
7.2.3 α -rozpad	129
7.2.4 β -rozpad.....	129
7.2.5 γ -rozpad.....	130
7.2.6 Vnitřní (elektronová) konverze	130
7.2.7 Aplikace radioaktivity	130
7.3 Interakce záření s hmotou, radiační dávka, ochrana před zářením.....	130
7.3.1 Interakce nabitých a neutrálních částic s hmotou	130
7.3.2 Dozimetrické veličiny	133
7.3.3 Ochrana před zářením	134
7.4 Štěpení a fúze atomových jader	134
7.4.1 Vazebná energie jader	134
7.4.2 Zdroje energie	135
7.5 Subnukleární částice a jejich interakce.....	136
7.5.1 Přehled elementárních částic	136
7.5.2 Složené subnukleární částice.....	138
7.5.3 Interakce mezi subnukleárními částicemi.....	138

DODATKY	140
D1 VEKTOROVÉ DIFERENCIÁLNÍ OPERÁTORY	140
D1.1 Gradient skalární veličiny	140
D1.2 Divergence, Gaussova věta	141
D1.3 Rotace, Stokesova věta	144
D2 Maxwellovy rovnice v diferenciálním tvaru a vlnová rovnice	
elektromagnetického vlnění	148
D3 Oscilační obvody	151
D4 Převod spektrálních intenzit vyzařování M_λ a M_ν	155
D5 Důsledky Planckova zákona	155
D6 Odvození Comptonova vztahu	156
D7 Superpozice vlnění. Vlnový balík	157
D8 Popis vlnění	159
D9 Sférické souřadnice	160
D10 Vlnové funkce atomů vodíkového typu	161
D11 Moment hybnosti v kvantovém řešení vodíkového atomu	163
D12 Sternův-Gerlachův experiment	165
D13 Veličiny a jednotky, některé fyzikální konstanty	166

1. Inerciální a neinerciální systémy

1.1 Relativnost pohybu

Jak bylo uvedeno ve Fyzice I, vektory polohy, rychlosti a zrychlení záleží na souřadnicové soustavě, ke které vztahujeme popis pohybu tělesa. Uvažme nyní dvě souřadnicové soustavy: Soustava S' se pohybuje vzhledem k soustavě S postupným pohybem. Obě soustavy zvolíme tak, aby jejich příslušné osy byly souhlasně orientovány (obr. 1.1). Polohový vektor počátku O' soustavy S' měřený v soustavě S označíme \vec{r}_0 , jeho složky pak x_0, y_0, z_0 .

Polohový vektor bodu A vzhledem k soustavě S je \vec{r} , jeho složky jsou x, y, z . Vzhledem k soustavě S' je poloha bodu A dána polohovým vektorem \vec{r}' , jeho složky jsou x', y', z' . Nyní použijeme dva předpoklady.

1. První z nich je, že měření délky v obou systémech poskytuje stejné výsledky **. Pak můžeme sčítat dva vektory, z nichž každý je udán vzhledem k jiné soustavě. Podle (1.1) dostaneme

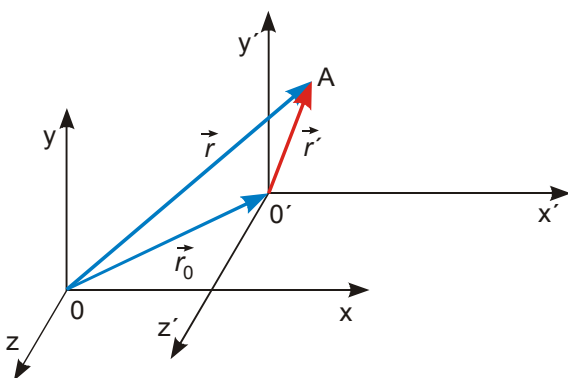
$$\vec{r} = \vec{r}_0 + \vec{r}' = (x_0\vec{i} + y_0\vec{j} + z_0\vec{k}) + (x'\vec{i}' + y'\vec{j}' + z'\vec{k}') \quad (1.1)$$

Uvážíme-li, že volba souřadnicových systémů se souhlasně orientovanými osami znamená, že vektory $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ a vektory $\vec{i}', \vec{j}', \vec{k}'$ jsou totožné, pak vztah (1.1) lze přepsat

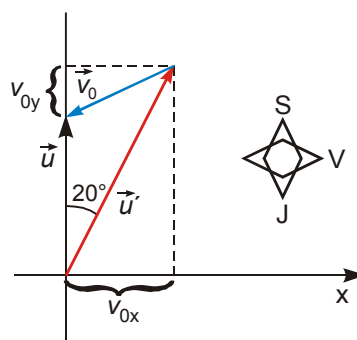
$$x = x_0 + x', \quad y = y_0 + y', \quad z = z_0 + z' \quad (1.2)$$

2. Za druhé předpokládáme, že čas v obou systémech běží stejně, $t = t'$ ***. Pak vztah (1.1) můžeme dvakrát derivovat. Přitom označíme \vec{v}_0 a \vec{a}_0 rychlost a zrychlení soustavy S' vzhledem k S , \vec{u} a \vec{a} jsou rychlost a zrychlení tělesa vzhledem k soustavě S , \vec{u}' a \vec{a}' jsou rychlost a zrychlení tělesa vzhledem k soustavě S' .

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \frac{d\vec{r}_0}{dt} + \frac{d\vec{r}'}{dt}, \quad \vec{u} = \vec{v}_0 + \vec{u}' \quad (1.3)$$



Obr. 1.1 Relativnost polohy tělesa



Obr. 1.2 K příkladu 1.1

** V kap.2 uvidíme, že při rychlostech srovnatelných s rychlostmi světla nejsme oprávněni tento předpoklad učinit.

*** Srovnejte s kap. 2.

$$\frac{d\vec{u}}{dt} = \frac{d\vec{v}_0}{dt} + \frac{d\vec{u}'}{dt} \quad , \quad \vec{a} = \vec{a}_0 + \vec{a}' \quad (1.4)$$

Vztahy (1.3) a (1.4) představují **zákony pro skládání rychlosti a zrychlení v klasické mechanice**: Rychlost (resp. zrychlení) tělesa vzhledem k souřadnicovému systému S je vektorovým součtem rychlosti (resp. zrychlení) tělesa vzhledem k soustavě S' a rychlosti (resp. zrychlení) soustavy S' vzhledem k soustavě S.

Příklad 1.1

Rychlost letadla vzhledem ke vzduchu je 500 km/h. Letadlo má dorazit do místa vzdáleného 800 km severně od výchozího místa. Aby letadlo uletělo přímoju nejkratší vzdálenost, musí jeho pohyb vzhledem k zemi směřovat pod úhlem 20° východně od severního směru. Požadovanou dráhu urazí letadlo za 2 h. Určete rychlost pohybu vzdušné masy (rychlost větru) vzhledem k zemi.

Řešení

Řešení pohybu vzhledem k různým soustavám spočívá ve správné identifikaci vektorů a dále ve vektorovém sčítání podle vztahů (1.3) nebo (1.4). Zavedeme souřadnicový systém S pevně spojený se zemí, počátek ztotožníme s výchozí polohou letadla, severní směr se směrem osy y, východní směr se směrem x-ové osy (obr. 1.2). Rychlost letadla vzhledem k zemi je \vec{u} , rychlost letadla vzhledem ke vzdušné masě je \vec{u}' , rychlost vzdušné masy vzhledem k zemi je \vec{v}_0 :

$$\vec{u} = u \vec{j}$$

$$\vec{u}' = u' \cos(90^\circ - 20^\circ) \vec{i} + u' \sin(90^\circ - 20^\circ) \vec{j}$$

$$\vec{v}_0 = v_{0x} \vec{i} + v_{0y} \vec{j}$$

Velikost rychlosti u určíme ze zadané dráhy a času, $u = \frac{800 \text{ km}}{2 \text{ h}} = 400 \text{ km/h}$, velikost rychlosti u' je zadaná rych-

lost letadla vzhledem ke vzdušné masě, $u' = 500 \text{ km/h}$. Využitím rovnice (1.3) ve složkách x a y dostáváme

$$0 = v_{0x} + u' \cos 70^\circ, \quad u = v_{0y} + u' \sin 70^\circ$$

Odtud dostaneme číselné vyjádření vektoru $\vec{v}_0 = (-171 \vec{i} - 70 \vec{j}) \text{ km/h}$. Velikost rychlosti větru vzhledem k zemi je 185 km/h.

1.2 Galileova transformace

Uvažme dva systémy, které se vzájemně pohybují konstantní rychlostí $\vec{v}_0 = \overrightarrow{\text{konst.}}$. Jestliže navíc v čase $t = 0$ je $S \equiv S'$, pak $\vec{r}_0 = \vec{v}_0 t$. Vztahy (1.2), (1.3) a (1.4) pak přejdou ve vztahy

$$\vec{r} = \vec{v}_0 t + \vec{r}' \quad , \quad \vec{u} = \vec{v}_0 + \vec{u}' \quad , \quad \vec{a} = \vec{a}' \quad (1.5)$$

$$\vec{r}' = \vec{r} - \vec{v}_0 t \quad , \quad \vec{u}' = \vec{u} - \vec{v}_0 \quad , \quad \vec{a}' = \vec{a} \quad (1.6)$$

Vztahy (1.5) a (1.6) se označují jako **Galileova transformace** souřadnic, rychlosti a zrychlení. Jestliže v obou souřadnicových systémech se nacházejí pozorovatelé, pak **Galileova transformace** dává vztahy pro polohu, rychlost a zrychlení, jak je měří tito pozorovatelé. Nezapomeňme, že tato transformace platí za výše uvedených předpokladů o čase plynoucím v obou souřadnicových systémech stejně a o nezávislosti měření délky v různých souřadnicových systémech. Podle vztahů (1.5) a (1.6) je sice poloha a rychlost tělesa závislá na systému, ve kterém je pohyb popisován, zrychlení však je v obou systémech stejné.

- **Relativnost popisu pohybu při rychlostech srovnatelných s rychlostí světla**

Galileova transformace odvozená za uvedených předpokladů selhává v případech, kdy rychlost pohybu tělesa vzhledem k alespoň jedné souřadnicové soustavě je srovnatelná s rychlostí světla (rychlost světla ve vakuu $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$). V tomto případě pak už předpoklady o stejném plynutí času v obou systémech a o stejném výsledku měření délek v obou systémech neodpovídají skutečnosti. Galileova transformace pak musí být nahrazena Lorentzovou transformací platnou ve speciální teorii relativity (odd. 2.2).

Jestliže velikosti rychlostí v_0 a u' jsou blízké rychlosti světla, pak rychlost u může podle vztahů (1.5) nabývat velikosti větší, než je rychlost světla. To je ovšem v zásadním rozporu se skutečností, že mezní velikostí rychlosti pohybu hmotných objektů je rychlost světla. Tento rozpor Galileovy transformace, který se uplatňuje při velkých rychlostech, rovněž řeší Lorentzova transformace.

1.3. Pohyb v inerciálních a neinerciálních systémech

1.3.1 Inerciální systémy

V odd. 1.2 jsme diskutovali popis pohybu tělesa ve dvou souřadnicových systémech S a S' . Jestliže se systémy S' a S pohybovaly vzhledem k sobě konstantní rychlostí, pak zrychlení tělesa vyjádřené jak v systému S , tak v systému S' bylo stejné (vztah (1.6)). Pohybuje-li se těleso vzhledem k jednomu z těchto systémů s nulovým zrychlením, pohybuje se s nulovým zrychlením i vzhledem k druhému. Podle zákona setrvačnosti potom v obou systémech výsledná síla působící na těleso je nulová. Odtud je patrné, že existuje-li jeden inerciální systém, pak všechny ostatní, které se vzhledem k tomuto systému pohybují rovnoměrně přímočaře, jsou rovněž inerciální a žádný z nich není nijak zvláštní nebo privilegovaný.

Nejlepší aproximací inerciálního systému se jeví soustava pohybující se konstantní rychlostí vzhledem k soustavě vzdálených hvězd. Pro popis pohybu běžných objektů na Zemi se za inerciální systém považuje souřadnicová soustava pevně spojená se Zemí. Je třeba si však uvědomit, že přesně vzato, tato souřadnicová soustava není inerciální, protože mimo jiné Země obíhá po eliptické trajektorii vzhledem k Slunci a koná rotační pohyb kolem své osy.*

1.3.2 Neinerciální systémy

Jestliže se pozorovatel nachází v souřadnicovém systému pohybujícím se s nenulovým zrychlením vzhledem k zemi, zjišťuje, že neplatí druhý pohybový zákon. Modelem takové soustavy může být vagón, který se pohybuje přímočaře vzhledem k zemi (obr. 1.3). Na stropě je na niti zavěšeno těleso hmotnosti m . Pokud je vagón v klidu nebo se pohybuje rovnoměrně přímočaře, těleso visí svisle. To odpovídá skutečnosti, že tíhová síla a tah lana působící na těleso jsou v rovnováze. Jestliže se ovšem vagón pohybuje se zrychlením \vec{a}_0 vzhledem k zemi, pozorovatel ve vagónu i na zemi zjistí, že těleso na niti se odchýlí od svislého směru o úhel α , který závisí na vektoru zrychlení vagónu. Vysvětlíme toto pozorování.

* Oprávněnost volby inerciálního systému pevně spojeného se Zemí plyne z odhadu zrychlení, která mají svůj původ v rotačním pohybu Země. Dostředivé zrychlení, které má příčinu v oběhu Země kolem Slunce činí asi $4,4 \cdot 10^{-3} \text{ m s}^{-2}$, dostředivé zrychlení vznikající při rotaci Země kolem osy činí na rovníku asi $3,3 \cdot 10^{-2} \text{ m s}^{-2}$. Tato zrychlení jsou o 4 a 3 řády menší než normální tíhové zrychlení, které je dominantní pro běžné pohyby v okolí Země).

Se zemí spojíme souřadnicovou soustavu S , která je inerciální a platí v ní tedy Newtonovy zákony. S vagónem spojíme souřadnicovou soustavu S' , která se pohybuje vzhledem k S se zrychlením $\vec{a}_0 = a_0 \vec{i}$ (obr. 1.3a) a je tedy neinerciální. Zrychlení tělesa \vec{a} vzhledem k systému S a zrychlení \vec{a}' vzhledem k systému S' jsou spojená vztahem (1.4), $\vec{a} = \vec{a}_0 + \vec{a}'$. Vynásobíme hmotností a dostáváme

$$m\vec{a} = m\vec{a}_0 + m\vec{a}' \quad (1.7)$$

Levá strana rovnice (1.7) pak představuje výslednou sílu \vec{F}^R působící na těleso. Úpravou rovnice (1.7) dostáváme

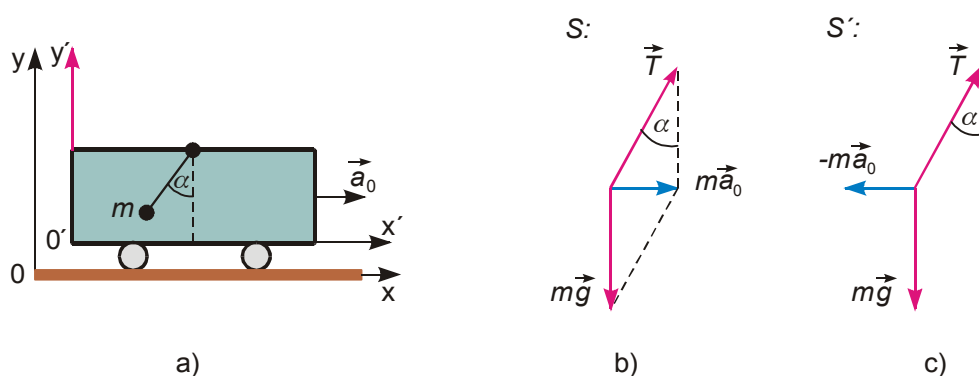
$$m\vec{a}' = \vec{F}^R - m\vec{a}_0 \quad (1.8)$$

Tento zápis můžeme slovně interpretovat tak, že těleso hmotnosti m se vzhledem k neinerciálnímu systému pohybuje s takovým zrychlením, jako by na ně kromě skutečných sil působila další síla, $-m\vec{a}_0$, která má opačný směr, než je zrychlení neinerciálního systému S' vzhledem k inerciálnímu systému S . Síla $-m\vec{a}_0$ se nazývá **setrvačná síla**. Je to síla **zdánlivá**, které chybí reálný subjekt. Pozorovatel ji zavádí v neinerciálním systému, aby vysvětlil pohybový stav těles pozorovaných v tomto systému.

Popíšeme nyní pohybový stav tělesa zavěšeného na niti v obou souřadnicových systémech. Pozorovatel v soustavě S zjišťuje, že se těleso pohybuje se zrychlením \vec{a}_0 , neboť celý vagón (vzhledem k němuž je těleso v klidu) se pohybuje s tímto zrychlením. Výslednice sil na ně působící je $\vec{F}^R = m\vec{a}_0$. Je vektorovým součtem všech sil působících na těleso, kterými jsou tíhová síla $\vec{F}_G = m\vec{g}$ a síla tahu lana \vec{T} , $\vec{F}^R = \vec{F}_G + \vec{T}$ (obr. 1.3b). Tato vektorová rovnice dává v x -ové a y -ové složce:

$$m a_0 = T \sin \alpha, \quad 0 = T \cos \alpha - m g \quad (1.9)$$

Odtud $\tan \alpha = \frac{a_0}{g}$. Protože $g \neq 0$, $a_0 \neq 0$, úhel α je rovněž nenulový a závisí na zrychlení, s jakým se vagón pohybuje.



Obr. 1.3 Popis pohybu v inerciálních a neinerciálních soustavách

Pozorovatel, který je uvnitř vagónu pohybujícím se se zrychlením, tedy spojený s neinerciálním systémem S' , však zjišťuje, že těleso je vzhledem k němu v klidu a je vychýlené z rovnovážné polohy. Aby vysvětlil tento pohybový stav tělesa, vyvozuje, že výslednice sil na

těleso působících je nulová. Kromě dvou reálných sil, tíhové síly a tahu lana, působí navíc na těleso zdánlivá síla $-m\vec{a}_0$, která má původ v neinerciálnosti systému (obr. 1.3c).

Napíšeme podmínky rovnováhy $\vec{F}^R - m\vec{a}_0 = \vec{0}$ v x' -ové a y' -ové složce a dostaneme soustavu rovnic totožnou s rovnicemi (1.9).

$$0 = T \sin \alpha - ma_0, \quad 0 = T \cos \alpha - mg$$

$$\text{Odtud } \operatorname{tg} \alpha = \frac{a_0}{g}.$$

Popis v obou systémech nám poskytl stejný výsledek pro úhlovou odchylku hmotného bodu zavěšeného na závěsu.

• Odstředivá síla

Jestliže se neinerciální systém S' otáčí konstantní úhlovou rychlostí vzhledem k inerciálnímu systému, chová se jako neinerciální systém, který se pohybuje s dostředivým zrychlením \vec{a}_0 vzhledem k inerciálnímu systému S . Zdánlivá síla působící na těleso m pozorované v neinerciálním systému má směr odstředivý a nazývá se **síla odstředivá**.

Příklad 1.2

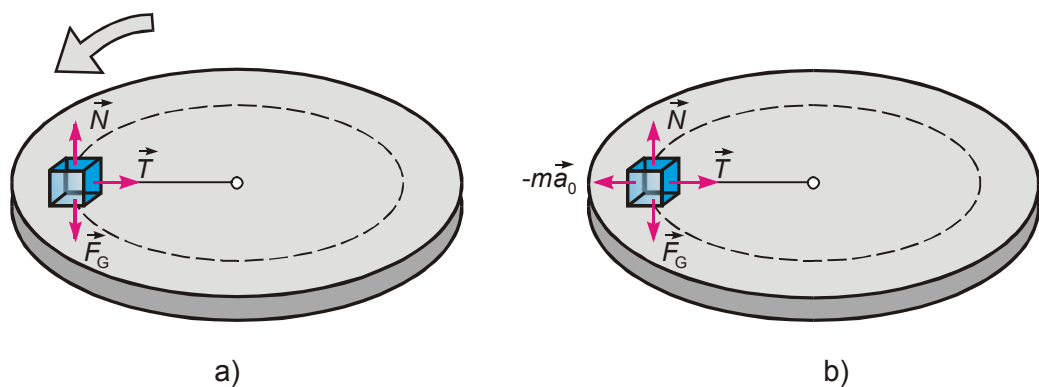
Těleso hmotnosti m umístěné na horizontálním rovnoměrně rotujícím stole je připevněno pevným lanem ke středu stolu (obr. 1.4). Tření mezi tělesem a stolem zanedbejte. Vysvětlete pohybový stav tělesa z hlediska souřadnicového systému spojeného se zemí, který považujte za inerciální, a z hlediska souřadnicového systému spojeného s otočným stolem.

Řešení

- a) Z hlediska souřadnicového systému spojeného se zemí se těleso pohybuje rovnoměrně po kružnici. Velikost výsledné síly $F^R = m \frac{v^2}{R}$, kde v je rychlost tělesa a R je poloměr kružnice, její směr je dostředivý.

Inerciální pozorovatel zjišťuje, že tato dostředivá síla je uskutečňována tahem lana \vec{T} , $T = m \frac{v^2}{R}$. Další síly působící na těleso, normálová síla \vec{N} a tíhová síla \vec{F}_G , jsou v rovnováze a nevyvolávají zrychlení tělesa (obr. 1.4a).

- b) Pozorovatel v systému spojeném s otáčejícím se stolem zjišťuje, že těleso je v klidu (obr. 1.4b). Síly \vec{N} a \vec{F}_G jsou v rovnováze, jejich výslednice je nulová. Dále kromě reálné síly tahu lana \vec{T} působí z hlediska neinerciálního pozorovatele zdánlivá *odstředivá* síla velikosti $m \frac{v^2}{R}$. Aby byl splněn 1. Newtonův zákon, musí být výsledná síla na těleso nulová, $T - m \frac{v^2}{R} = 0$. Velikost síly tahu lana je určena stejně jako v případě inerciálního pozorovatele.



Obr. 1.4 K příkladu 1.2

- **Coriolisova síla**

Zdánlivá odstředivá síla "působí" na všechna tělesa, jejichž pohybový stav popisujeme v otáčivém souřadnicovém systému. Na tělesa, která se vzhledem k tomuto systému pohybují, působí další zdánlivá síla, tzv. **Coriolisova síla**. Její velikost je $2\omega v'_o m$, kde ω je úhlová rychlost otáčení systému, v'_o je složka rychlosti tělesa hmotnosti m v rovině kolmé na osu otáčení měřená v otáčivém souřadnicovém systému. Směr Coriolisovy síly je kolmý na směr rychlosti tělesa a směr osy otáčení. Coriolisova síla související se zemskou rotací vysvětluje řadu zajímavých dějů na zemském povrchu, např. vznik vírů spojených s atmosférickými ději.

2 Speciální teorie relativity

Mechanika založená na Newtonových zákonech velmi dobře popisuje velkou skupinu fyzikálních dějů, které jsou spojeny s pohyby rychlostmi malými ve srovnání s rychlostí světla ve vakuu ($c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$). Jestliže studujeme fyzikální systémy, které se pohybují rychlostmi blízkými rychlosti světla, popis založený na Newtonových zákonech selhává a musí být nahrazen. V této kapitole, která se zabývá základy **speciální teorie relativity**, zavedeme nový pohled na prostor a čas, který vyžaduje abstrakci, protože není podložen každodenními zkušenostmi.

Souřadnicové systémy, ke kterým budeme pohyb ve speciální teorii relativity vztahovat, budou systémy inerciální. Klasická mechanika není speciální teorií relativity popřena, naopak je lépe pochopena jako odvětví fyziky dobře popisující děje v inerciálních systémech při rychlostech podstatně menších než je rychlost světla. Úvodní odstavce věnujeme proto pohybu v inerciálních systémech a v neinerciálních systémech z pohledu klasické mechaniky.

2.1 Postuláty speciální teorie relativity

Speciální teorie relativity je určena pro popis děje v inerciálních systémech při rychlostech srovnatelných s rychlostí světla. Je založena na dvou postulátech:

1. postulát (princip relativity) říká, že fyzikální zákony platí ve všech inerciálních systémech a žádný z inerciálních systémů není nijak preferován.

Z Fyziky I víme, že Newtonovy zákony mají stejný tvar ve všech inerciálních systémech. To též platí i o dalších zákonech mechaniky vycházejících z Newtonových zákonů. Tento princip se označuje jako **Galileův princip relativity**.^{*} První postulát relativity rozšiřuje Galileův princip na všechny fyzikální zákony, tedy např. i na zákony elektromagnetismu a optiky.

2. postulát (o konstantnosti rychlosti světla) říká, že rychlost světla c ve vakuu je ve všech směrech a ve všech inerciálních systémech stejná (invariantní)^{**}.

Ztotožnění se s tímto postulátem činí potíže, protože je v rozporu s běžnými zkušenostmi o skládání rychlostí. Ve fyzice, která se zabývá rychlostmi podstatně menšími, než je rychlost světla, je skládání rychlostí matematicky vyjádřeno Galileovou transformací (odst. 1.2): Jestliže se těleso pohybuje rychlostí \vec{u}' vzhledem k soustavě S' a soustava S' se pohybuje rychlostí \vec{v} vzhledem k S , pak rychlost \vec{u} tělesa vzhledem k S je $\vec{u} = \vec{u}' + \vec{v}$. Proto na základě zkušeností s rychlostmi malými ve srovnání s rychlostí světla očekáváme, že i pozorovaná rychlost světla závisí na rychlosti zdroje světla a na rychlosti pozorovatele. Druhý postulát je však třeba přijmout přinejmenším ze tří důvodů: Na úrovni dnešních experimentálních možností je dokázáno, že rychlost světla nezávisí na rychlosti zdroje (např. při rozpadu nestabilních neutrálních pionů vzniká γ -záření, jehož rychlost je rovna c i v případě, kdy se zdroj záření, tedy rozpadající se pion, pohybuje velkou rychlostí $0,99975 c$). Dalším důvodem pro akceptování postulátu je skutečnost, že všechny důsledky plynoucí ze speciální teorie relativity byly dosud experimentálně potvrzeny. A konečně, rychlost elektromagnetického vlnění ve

vakuu je dána vztahem $c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}}$, kde ϵ_0 a μ_0 jsou permitivita a permeabilita vakua, tedy

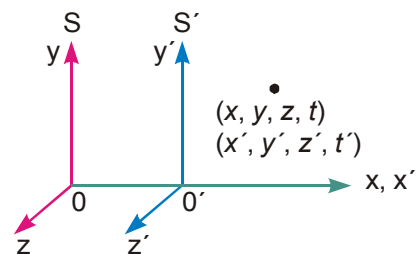
^{*} Postulát netvrdí, že měřené hodnoty fyzikálních veličin jsou stejné v různých inerciálních systémech. Tvrdí, že se zachovávají fyzikální zákony. Např. při srážce dvou těles se celková hybnost soustavy zachovává. Hodnota celkové hybnosti je však v různých inerciálních systémech odlišná.

^{**} V kap. 3 ukážeme, že světlo je elektromagnetické vlnění. Invariance se proto netýká pouze rychlosti světla, tj. elektromagnetického vlnění určitých vlnových délek, ale rychlosti šíření elektromagnetického vlnění vůbec, tedy např. γ -záření.

univerzální konstanty, které nezávisí na souřadnicovém systému. Navíc elektromagnetické vlnění se šíří i ve vakuu, nepotřebuje tedy ke své existenci hmotné prostředí.

2.2 Lorentzova transformace

Uvažme systém S' , který se pohybuje konstantní rychlostí v vzhledem k systému S . Pro jednoduchost uvažme, že systém S' se pohybuje rychlostí v ve směru osy x (obr. 2.1) a v čase $t = 0$ jsou oba systémy totožné, $t = 0: S \equiv S'$. V čase $t = 0$ je ze společného počátku obou systémů vyslán světelný pulz. Podle postulátů speciální teorie relativity se šíří všemi směry stejnou rychlostí c . Body, kam dorazí světlo v systému S a v systému S' v čase t a v čase t' , vyplní v systémech S a S' kulové plochy o poloměrech ct a ct' . Pro souřadnice bodů těchto kulových ploch musí platit



Obr. 2.1 Dva inerciální systémy

$$x^2 + y^2 + z^2 = c^2 t^2 \quad x'^2 + y'^2 + z'^2 = c^2 t'^2 \quad (2.1)$$

Jestliže by mezi souřadnicemi nečárkovanými a čárkovanými ve vztazích (2.1) platila **Galileova transformace** (1.5), dojdeme ke sporu. Zřejmě tedy předpoklady, za kterých byla odvozena Galileova transformace, totiž že měření vzdáleností v různých inerciálních systémech poskytuje stejné hodnoty a že čas plyne v různých inerciálních systémech stejně, nadále neplatí. Bez důkazu uvedeme, že požadavku (2.1) a požadavku na lineárnost transformace souřadnic vyhovují následující vztahy mezi souřadnicemi ve dvou inerciálních systémech, které se označují jako **Lorentzova transformace**. V transformačních vztazích vystupuje čas t , který se váže k systému S a čas t' , který se pojí se systémem S' .

$$x = \frac{x' + vt'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad x' = \frac{x - vt}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (2.2)$$

$$y = y' \quad y' = y$$

$$z = z' \quad z' = z$$

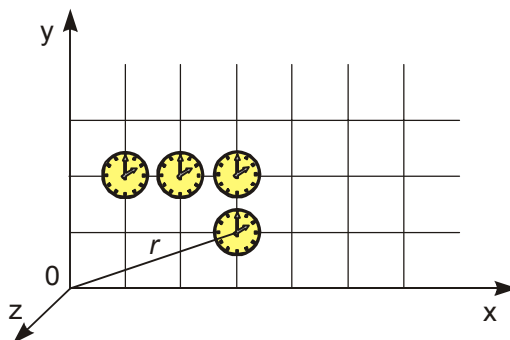
$$t = \frac{t' + \frac{v}{c^2} x'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad t' = \frac{t - \frac{v}{c^2} x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$$

- V Lorentzově transformaci nelze čas oddělit od prostorových souřadnic. Ze vztahů (2.2) totiž vidíme, že hodnota času t' nezávisí pouze na hodnotě t , ale také na souřadnici x . Namísto oddělených pojmů prostorových souřadnic a času, hovoříme o souřadnicích v čtyřrozměrném **prostoročase**. V následujícím oddíle zavedeme prostorové souřadnice a synchronizovaný čas.
- Vztahy (2.2) se dále liší od Galileovy transformace prostorových souřadnic **Lorentzovým faktorem** $\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}$. Pro rychlosti $v \ll c$, je v^2/c^2 zanedbatelné oproti 1, tedy faktor $\gamma \approx 1$. Za tohoto předpokladu přechází Lorentzova transformace na transformaci Galileovu.

- Dosazením do rovnice (2.1) se můžeme přesvědčit, že uvedená Lorentzova transformace splňuje 2. postulát speciální teorie relativity.

2.3 Základní pojmy

Pro účely dalších úvah ve speciální teorii relativity zavedeme **prostorové souřadnice** v inerciálním systému pomocí *soustavy pravoúhlých měřítek, která můžeme libovolně hustě umístit v prostoru rovnoběžně se souřadnicovými osami* (obr. 2.2). Trojice prostorových souřadnic každého bodu prostoru je určena průsečíky tří měřítek v daném bodě. S každým místem prostoru se podle Lorentzových transformačních vztahů pojí čas. Tento **čas** může být imaginárně reprezentován *lokálními hodinami, které se nacházejí v libovolném potřebném místě prostoru*. Nemohou však jít libovolně, nýbrž musejí být synchronizovány. Synchronizaci můžeme myšlenkově provést pomocí světelného signálu. Z počátku souřadnicového systému v čase, kdy lokální hodiny umístěné v počátku souřadnicového systému ukazují hodnotu $t = 0$, vyšleme do všech směrů světelný signál. U každých potřebných hodin imaginární pomocníci detekují signál, který k nim dorazil z počátku systému. Pomocník, jehož vzdálenost od počátku je r , nařídí v okamžiku detekce signálu své lokální hodiny na hodnotu r/c . Tímto způsobem budou synchronizovány hodiny ve všech potřebných místech prostoru. Kdybychom postupovali jinak, např. v počátku souřadnicového systému nejdříve nařídili všechny hodiny na stejnou hodnotu a pak roznesli do správných míst, museli bychom předpokládat, že během pohybu se chod hodin nezmění. Později uvidíme, že předpoklad o nezměněném chodu hodin je chybný.



Obr. 2.2 Zavedení prostorových a časových souřadnic, prostoročas

Důležitým pojmem v teorii relativity je **událost**. Událost je něco, co se stalo a čemu můžeme přiřadit trojici prostorových souřadnic a čas na lokálních hodinách. Pozorovatel v určitém souřadnicovém systému přiřadí události čtveřici souřadnic (x, y, z, t) z **prostoročasu**. Popis události je relativní, čtveřice čísel, kterými je tatáž událost popsána, záleží na souřadnicovém systému, z kterého je událost popisována (obr. 2.1).

Uvažujme dvě události, které jsou v systému S popsány čtveřicemi souřadnic (x_1, y_1, z_1, t_1) a (x_2, y_2, z_2, t_2) . V systému S' jsou tytéž události popsány čtveřicemi souřadnic (x'_1, y'_1, z'_1, t'_1) a (x'_2, y'_2, z'_2, t'_2) . Pro rozdíl prostorových a časových souřadnic $\Delta x = x_2 - x_1, \dots, \Delta t' = t'_2 - t'_1$ dostáváme pak ze vztahů (2.2):

$$\Delta x = \frac{\Delta x' + v \Delta t'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad \Delta x' = \frac{\Delta x - v \Delta t}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (2.3a)$$

$$\Delta y = \Delta y' \quad \Delta y' = \Delta y \quad (2.3b)$$

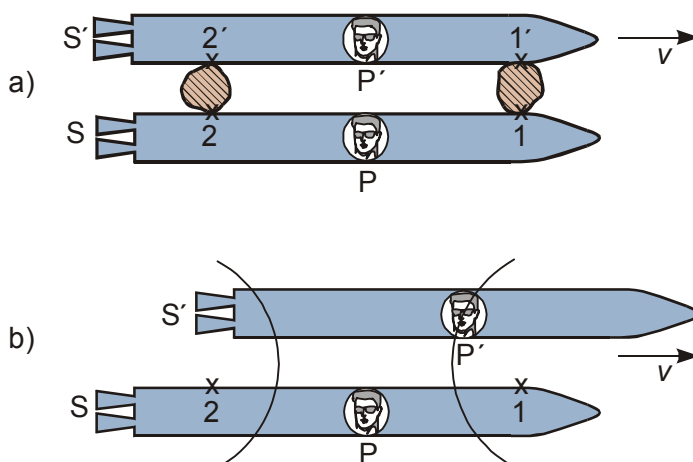
$$\Delta z = \Delta z' \quad \Delta z' = \Delta z$$

$$\Delta t = \frac{\Delta t' + \frac{v}{c^2} \Delta x'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad \Delta t' = \frac{\Delta t - \frac{v}{c^2} \Delta x}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \quad (2.3c)$$

Dvě události jsou **současné**, *jestliže rozdíl jejich časových souřadnic je nulový*^{*}. Ze vztahů (2.3c) vidíme, že současnost událostí záleží na souřadnicovém systému: Jestliže $\Delta t = 0$ a $\Delta x \neq 0$, tj. události jsou současné v systému S, pak

$$\Delta t' = \frac{-\frac{v}{c^2} \Delta x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \neq 0. \text{ Události nejsou}$$

současné v systému S'. Relativnost současnosti dvou událostí je znázorněna na obr. 2.3. Zde jsou znázorněny dvě rakety, které se vzhledem k sobě pohybují rychlostí v . Spojíme s nimi souřadnicové systémy S a S'. Dojde ke dvěma událostem, které pozorovatel P v S označí jako události 1 a 2 a pozorovatel P' v S' jako 1' a 2'. Události 1 a 2 jsou stejně vzdáleny od pozorovatele P, a události 1' a 2' stejně vzdáleny od pozorovatele P'. Světelná zpráva o událostech 1 a 2 dosáhne pozorovatele P současně, usuzuje tedy, že jde o současné události. Pozorovatel P' však obdrží zprávu o události 1' dříve než o události 2' a usoudí, že události nejsou současné.



Obr. 2.3 Relativnost současnosti dvou událostí

2.4 Kinematické důsledky Lorentzovy transformace

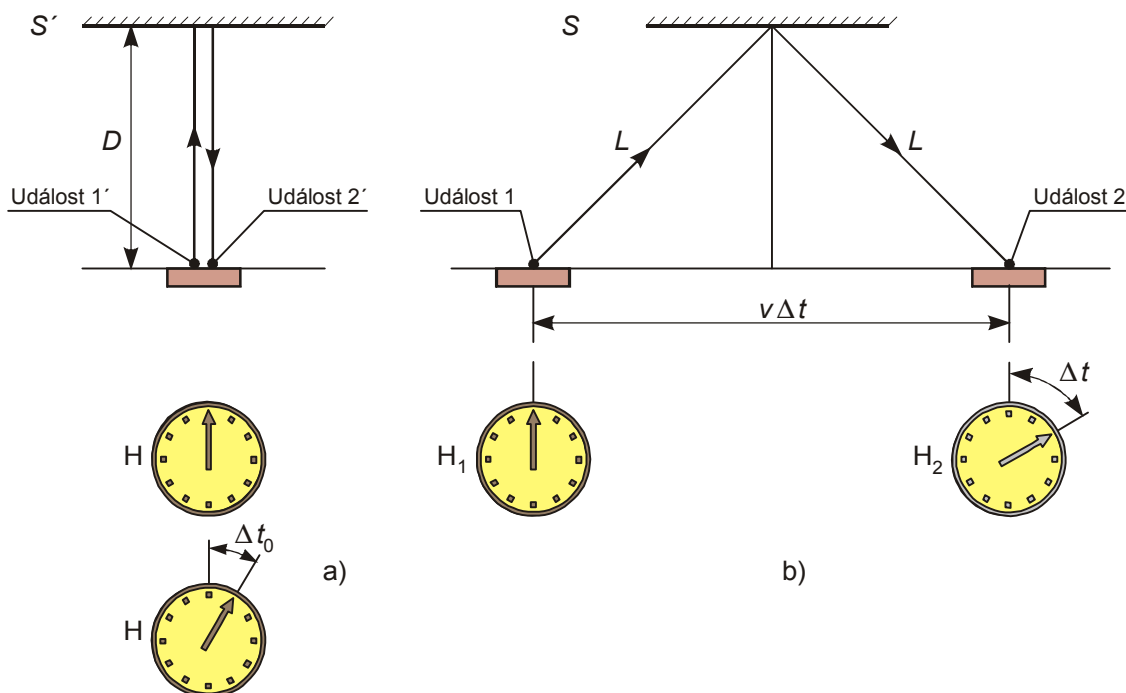
Z Lorentzovy transformace plynou některé důsledky, se kterými se nesetkáváme při rychlostech malých ve srovnání s c , tj. nejsou známy v mechanice řídicí se Newtonovými zákony. Ukážeme, že v relativistické mechanice časový interval mezi dvěma událostmi závisí na souřadnicovém systému, měření délky téhož předmětu není absolutní, nýbrž záleží na souřadnicovém systému, a rychlosti pohybu tělesa se nesčítají s rychlostí pohybu souřadnicového systému, jak tomu je v Galileově transformaci. V případě malých rychlostí přecházejí všechny důsledky Lorentzovy transformace v klasické známé vztahy, které jsou v souladu s klasickým popisem dějů při malých rychlostech.

2.4.1 Dilatace času

Uvažme dva souřadnicové systémy S a S', jak byly zavedeny v předchozích oddílech 2.1 a 2.2. V systému S' jako událost 1' označíme vyslání světelného signálu ve směru kolmém k rychlosti v pohybu soustavy S' vzhledem k S. Po odražení od zrcadla je světlo opět detekováno na tomtéž místě, z kterého bylo vysláno. Detekce signálu je událost 2'. Zrcadlo i místo vyslání a detekce signálu jsou v klidu vzhledem k soustavě S' (obr. 2.3a). Časový interval $\Delta t'$ mezi dvěma události měřený v systému S' je měřen týmiž hodinami H (na tomtéž místě), které jsou v klidu v S'. Takto měřený časový interval týmiž hodinami nazveme **vlastní časový interval** Δt_0 . Použijeme označení na obr. 2.3a. Dostáváme

^{*} Aby se jednalo o události různé, musejí se tyto události lišit v prostorových souřadnicích, tedy $\Delta x \neq 0$.

$$\Delta t_0 = \Delta t' = \frac{2D}{c} \quad (2.4)$$



Obr. 2.3 Dilatace času. (a) Události 1' a 2' pozorované v systému (b) tytéž události pozorované v systému S.

Tytěž dvě události jsou sledovány v systému S, jak je znázorněno na obr. 2.3b. V systému S měří obě události různé hodiny H_1 a H_2 , protože k událostem 1 a 2 dochází v různých místech prostoru. Použijeme označení na obr. 2.3b. Dostaneme postupně

$$\Delta t = \frac{2L}{c} \quad (2.5)$$

$$L^2 = \left(\frac{1}{2} v \Delta t \right)^2 + D^2 \quad (2.6)$$

Nahradíme L a D ve vztahu (2.6) hodnotami vyjádřenými ze (2.4) a (2.5), dostáváme

$$\Delta t = \frac{\Delta t'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \quad (2.7a)$$

$$\Delta t = \frac{\Delta t_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \gamma \Delta t_0 \quad (2.7b)$$

Diskutujeme tento vztah.

Protože $v < c$, je faktor $\gamma > 1$ a časový interval $\Delta t > \Delta t_0$. Vlastní časový interval je kratší než časový interval mezi týmiž událostmi měřený různými synchronizovanými hodinami v jiném inerciálním systému, který se pohybuje. Popsaný jev budeme ilustrovat na dalším příkladu. Předpokládejme, že události popisované jako 1' a 2' jsou po sobě následující úderů týchž hodin, které jsou v klidu v S' . Vzhledem k systému S se hodiny pohybují, události jsou popisovány jako 1 a 2 a jejich časová souřadnice je zjišťována synchronizovanými hodinami na

různých místech. Rozdíl časových souřadnic událostí 1 a 2 je podle (2.7) větší než vlastní časový interval Δt_0 . Pozorovatel v systému S zjišťuje, že pohybující se hodiny jdou pomaleji, protože interval mezi nejbližšími úderů hodin je delší. Tento jev, který je reálný a nikterak nespoisí s kvalitou nebo funkcí použitých hodin a který je popsán vztahy (2.7), označujeme jako **dilataci času**.

Vztah (2.7) ihned vyplýne ze vztahů (2.3). Vyslání a detekce signálu se konaly v témž místě prostoru v soustavě S' , $\Delta x' = 0$, $\Delta t' = \Delta t_0$. Dosazením do (2.3c) obdržíme vztah (2.7).

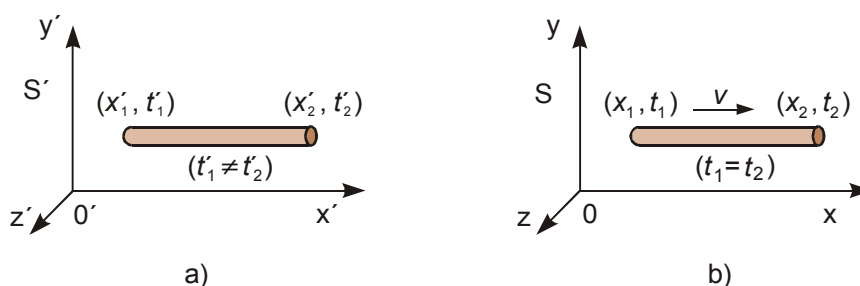
V případě, že $v \ll c$, můžeme v^2/c^2 zanedbat proti 1, faktor $\gamma \approx 1$ a $\Delta t \approx \Delta t'$. Pro malé rychlosti čas plyne v inerciálních systémech stejně, jak očekáváme z běžných každodenních zkušeností.

Poznámka

Dilatace času byla experimentálně prokázána např. při měření doby života nestabilních částic mionů. Jejich průměrná doba života v klidovém souřadnicovém systému činí $2,200 \mu s$. Tyto částice mohou být urychleny tak, že se pohybují rychlostí $0,9992c$. S pohybujícím se mionem spojíme souřadnicový systém S' , laboratoř pak se systémem S. Lorentzův faktor γ je v tomto případě $\gamma = 28,87$ a doba života v laboratorním systému je podle (2.7) $\Delta t = 63,5 \mu s$. Tato hodnota doby života pohybujících se mionů byla experimentálně zjištěna.

2.4.2 Kontrakce délek

Uvažme opět dva souřadnicové systémy S a S' , jak byly zavedeny v předchozích oddílech 2.1 a 2.2. V systému S' je umístěna tyč, která je vzhledem k němu v klidu a pohybuje se spolu se systémem S' vzhledem k systému S rychlostí v (obr. 2.4). V systému S' snadno určíme délku tyče jako rozdíl $\Delta x' = x'_2 - x'_1$ prostorových souřadnic konců tyče, které jsou stále v klidu. Délku klidné tyče označujeme jako **vlastní délku** $\Delta x' = L_0$.



Obr. 2.4 Kontrakce délek, (a) měření délky v soustavě S' , (b) měření délky v soustavě S, vzhledem ke které se tyč pohybuje

Vzhledem k systému S se tyč pohybuje. Její délku v soustavě S stanovíme jako rozdíl prostorových souřadnic koncových bodů tyče v tomtéž okamžiku. Určení polohy konců tyče současně je podstatné, protože tyč mění svou polohu. Dosazením do vztahu (2.3) za $\Delta t = 0$, dostáváme

$$\Delta x' = \frac{\Delta x}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}, \quad \Delta x = L, \quad \Delta x' = L_0$$

Odtud

$$L = L_0 \sqrt{1 - v^2/c^2} = \frac{L_0}{\gamma} \quad (2.8)$$

- Protože $\gamma > 1$, platí, že zjišťovaná délka tyče L , která se pohybuje, je menší než vlastní délka tyče L_0 , $L < L_0$. Reálný jev popsáný vztahem (2.8) označujeme jako **kontrakce délky**.
- V případě malých rychlostí vztah (2.8) přechází v rovnost obou délek, $L = L_0$. To souhlasí s běžnou zkušeností, že délka předmětu nezávisí na tom, měří-li se v systému, vzhledem ke kterému je v klidu, nebo v systému, vzhledem ke kterému se předmět pohybuje.

2.4.3 Transformace rychlostí

Z Galileovy transformace souřadnic jsme obdrželi transformační vztahy pro rychlost, které udávají, že rychlosti pohybujícího se systému a rychlost tělesa se sčítají, sledujeme-li jeho pohyb z jiného systému (odd. 1.2). Uvažme nyní opět dva již zavedené systémy S a S' a těleso, které se pohybuje vzhledem k systému S rychlostí \vec{u} a vzhledem k systému S' rychlostí \vec{u}' . Složky těchto rychlostí můžeme vyjádřit pomocí infinitezimálních rozdílů prostorových a časových souřadnic (ve vztazích (2.2) zaměníme difference mezi souřadnicemi jejich infinitezimálními rozdíly), např.:

$$u_x = \frac{dx}{dt}, \quad u'_x = \frac{dx'}{dt'} \quad (2.9)$$

Dosadíme z transformačních vztahů a postupně dostáváme

$$u_x = \frac{\frac{dx' + v dt'}{\sqrt{1 - v^2/c^2}}}{dt' + \frac{v}{c^2} dx'} = \frac{dx' + v dt'}{dt' + \frac{v}{c^2} dx'} \cdot \frac{1}{\frac{dt'}{dt'}} = \frac{\frac{dx'}{dt'} + v}{1 + \frac{v}{c^2} \frac{dx'}{dt'}} = \frac{u'_x + v}{1 + \frac{v u'_x}{c^2}}$$

Obdobně bychom postupovali při výpočtu u_y a u_z . Shrňme výsledky a dostáváme transformační vztahy pro rychlosti

$$\begin{aligned} u_x &= \frac{u'_x + v}{1 + \frac{v u'_x}{c^2}}, & u'_x &= \frac{u_x - v}{1 - \frac{v u_x}{c^2}} \\ u_y &= \frac{u'_y \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 + \frac{v u'_x}{c^2}}, & u'_y &= \frac{u_y \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}{1 - \frac{v u_x}{c^2}} \end{aligned} \quad (2.10)$$

Vztah pro složku u_z je obdobný vztahu pro u_y .

V případě malých rychlostí můžeme $\frac{v u_x}{c^2}$, $\frac{v u'_x}{c^2}$ a $\frac{v^2}{c^2}$ zanedbat proti 1 a dostáváme

$$\begin{aligned} u_x &= u'_x + v, & u'_x &= u_x - v \\ u_y &= u'_y, & u'_y &= u_y \end{aligned}$$

což jsou vztahy pro transformaci rychlosti v klasické mechanice.

Uvažujme případ, kdy se částice (foton) pohybuje rychlostí c vzhledem k S' , $u'_x = c$. Dosazením do (2.10) dostaneme, že $u_x = c$. Rychlost světla ve vakuu je mezní rychlost a jako taková je měřena ve všech inerciálních systémech se stejným výsledkem.

2.5 Relativistické dynamické veličiny

Pro další popis mechanických dějů jsou důležité dynamické veličiny hybnost, hmotnost, síla a energie. Ukazuje se, že požadavek, aby se v izolovaných systémech zachovávala hybnost a energie při popisu ve všech inerciálních systémech, vede v relativistické mechanice k modifikaci těchto veličin.

2.5.1 Hybnost, hmotnost a síla

Celková hybnost soustavy je veličina, která se v izolovaných soustavách zachovává (např. při pružné centrální srážce dvou těles). Uvažme dokonale pružnou centrální srážku dvou těles, z nichž jedno se pohybuje rychlostí v vzhledem k systému S , druhé je v klidu. S pohybujícím se tělesem spojíme souřadnicový systém S' . Bez důkazu uvedeme, že požadavek platnosti zákona zachování hybnosti v obou soustavách S a S' vede k vyjádření **relativistické hybnosti**: hybnost tělesa pohybujícího se v soustavě S rychlostí v je v této soustavě dána vztahem

$$p = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} v \quad (2.11)$$

Hmotnost m_0 je určena v souřadnicovém systému, vzhledem ke kterému je těleso v klidu, a proto se označuje někdy s přívlaskem, jako **klidová hmotnost**. Vztah (2.11) můžeme interpretovat také tak, že relativistická hybnost je dána součinem relativistické hmotnosti m a rychlosti tělesa. Při tomto popisu **relativistická hmotnost** m závisí na rychlosti podle vztahu

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \gamma m_0 \quad (2.12)$$

Diskutujeme poslední dva vztahy.

Protože $\gamma > 1$, je relativistická hmotnost větší než klidová hmotnost.

Jestliže rychlost tělesa $v \ll c$, můžeme člen v^2/c^2 zanedbat oproti 1 a dostáváme, že relativistický vztah pro hybnost (2.11) přechází v klasický výraz $p = m_0 v$ a relativistická hmotnost m (2.12) přechází v klidovou hmotnost m_0 .

Sílu jsme v klasické mechanice vyjádřili vztahem. Dosazením za relativistickou hybnost (2.11) dostáváme

$$\vec{F} = \frac{d\vec{p}}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\frac{m_0 \vec{v}}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} \right) \quad (2.13)$$

Diskutujeme tento vztah.

V klasické mechanice konstantní síla působící ve směru pohybu vyvolá konstantní zrychlení v tomto směru a tedy stále se zvětšující rychlost. Relativistická konstantní síla však způsobuje zrychlení $a \sim (1 - v^2/c^2)^{3/2}$. Z posledního vztahu vidíme, že pro $v \rightarrow c$ zrychlení

$a \rightarrow 0$ a rychlost se proto nezvětšuje nade všechny meze. Odtud plyne, že těleso s nenulovou hmotností nemůže dosáhnout rychlosti c .

2.5.2 Energie

Relativistickou kinetickou energii stanovíme užitím teorému práce - kinetická energie.

$$E_k = W_{(v'=0) \rightarrow (v)} = \int_{(v'=0)}^{(v)} \vec{F} \cdot d\vec{r} \quad (2.14a)$$

Pro jednoduchost předpokládejme, že síla působí ve směru pohybu podél osy x . Za sílu dosadíme vztah (2.13) a dále využijeme následujícího vztahu

$$\frac{dp}{dt} dx = \frac{dp}{dv} \frac{dv}{dt} dx = \frac{dp}{dv} v dv$$

Postupně dosadíme do (2.14a) poslední vztah a derivaci hybnosti (2.11) podle rychlosti (integrační proměnnou označíme v'):

$$E_k = \int_{(v'=0)}^{(v)} \vec{F} \cdot d\vec{r} = \int_0^v \frac{dp}{dv'} v' dv' = \int_0^v \frac{m_0 v'}{(1 - v'^2/c^2)^{3/2}} dv'$$

Zavedením substituce $1 - v'^2/c^2 = w$ zjednodušíme integraci, kterou pak získáme **relativistickou kinetickou energii**

$$E_k = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} - m_0 c^2 \quad (2.14b)$$

Poslední člen v předchozím vztahu představuje konstantu nezávislou na rychlosti, která se proto nazývá **klidová energie** E_0 . Relativistický výraz (2.14b) pro kinetickou energii musíme použít pro správný fyzikální popis všude tam, kde se tělesa pohybují rychlostmi srovnatelnými s rychlostí světla c^* .

- Pro rychlosti malé vzhledem k c upravíme vztah (2.14b) pomocí Taylorova rozvoje γ -faktoru:

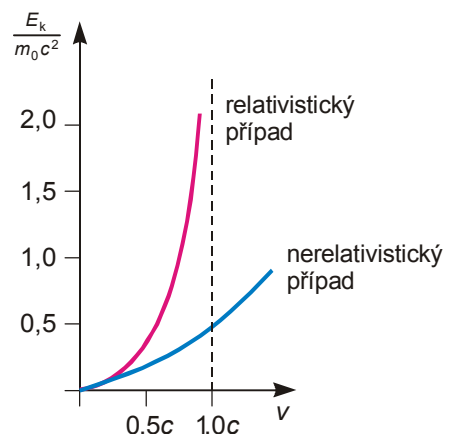
$$\gamma = (1 - v^2/c^2)^{-1/2} = 1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots$$

Po dosazení do (2.14b) a zanedbání členů vyšších řádů v Taylorově rozvoji dostáváme

$$E_k = m_0 c^2 \left(1 + \frac{1}{2} \frac{v^2}{c^2} + \dots \right) - m_0 c^2 \approx \frac{1}{2} m_0 v^2$$

tedy výraz pro nerelativistickou kinetickou energii. Srovnání závislosti kinetické energie na rychlosti v nerelativistickém a relativistickém případě je na obr. 2.5.

Součet klidové energie E_0 a kinetické energie E_k má význam **celkové relativistické energie**.



Obr. 2.5 Srovnání závislosti kinetické energie na rychlosti v nerelativistickém a relativistickém případě

* Relativistickou kinetickou energii použijeme např. při popisu Comptonova jevu.

$$E = E_k + m_0 c^2 \quad (2.15a)$$

$$E = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - v^2/c^2}} = \gamma m_0 c^2 = m c^2 \quad (2.15b)$$

Diskutujeme poslední vztah, který se stal všeobecně známým.

Vztahy (2.15) ukazují, že hmotnost a energie spolu souvisejí, a proto se tyto vztahy označují jako vztah **ekvivalence hmotnosti a energie**. Platnost ekvivalence hmotnosti a energie je dokázána při jaderných štěpeních a fúzích. Rovněž v běžných mechanických, elektrických a chemických procesech, kdy dochází k uvolnění nebo spotřebovávání energie, projeví se uvolněná nebo přijatá energie ve změně hmotnosti, $\Delta E = \Delta m c^2$. Hmotnostní ekvivalenty uvolněných a přijatých energií jsou však při těchto běžných reakcích nesrovnatelně menší než klidové hmotnosti těles, a proto jsou běžně nedetekovatelné (Příklad 2.2).

Vztahy (2.15) rovněž ukazují, že malé množství hmoty obsahuje velké množství energie*. Kromě změny hmotnosti v důsledku přijetí nebo uvolnění energie, může být celá klidová hmotnost částice přeměněna v jinou formu energie nebo hmotnost může být vytvořena např. z elektromagnetické energie. Přitom platí základní zákony zachování náboje, energie a hybnosti**. Procesy tohoto typu se zabývá fyzika jadra a elementárních částic.

- V energetických úvahách často využíváme vztahů mezi kinetickou energií a hybností. Vyloučením rychlosti z klasických vztahů pro kinetickou energii a hybnost dostáváme

$$p^2 = 2 E_k m_0$$

- Vyloučením rychlosti z relativistických vztahů (2.15) a (2.11) dostáváme v relativistické mechanice vztah mezi celkovou relativistickou energií a relativistickou hybností.

$$E^2 = (pc)^2 + (m_0 c^2)^2 \quad (2.16)$$

- Ze vztahu (2.16) plyne: Jestliže částice je v klidu, tj. $p = 0$, pak celková energie je klidová energie, $E = m_0 c^2 = E_0$. Jestliže nastane druhý extrémní případ, kdy totiž částice má nulovou hmotnost (foton), pak její energie je podle (2.16) $E = pc$. Odtud pro její hybnost platí $p = E/c$. Foton, částice elektromagnetického vlnění, mající energii $E = hf$, kde h je Planckova konstanta a f je frekvence elektromagnetického vlnění, má hybnost $p = \frac{hf}{c} = \frac{h}{\lambda}$, kde λ je vlnová délka elektromagnetického vlnění ve vakuu.

Příklad 2.1

Elektron byl urychlen tak, že jeho kinetická energie $E_k = 2,53 \text{ MeV}$ †. Klidová energie elektronu je $m_0 c^2 = 0,511 \text{ MeV}$. Určete a) celkovou energii E elektronu, b) hybnost p elektronu, c) Lorentzův faktor γ elektronu.

* Hmotnost $m = 1 \text{ g}$ v klidu představuje celkovou energii E řádově $1 \cdot 10^{12} \text{ J}$.

** Při interakci fotonu dostatečné energie s protonem za vzniku elektronu a pozitronu je elektromagnetická energie fotonu uložena v energetickém ekvivalentu klidové hmotnosti elektronu a pozitronu, které v procesu vznikly, případně v jejich kinetických energiích.

† Jednotka energie eV : $1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$.

Řešení

a) Celková energie je dána (2.15a), $E = m_0 c^2 + E_k = 0,511 \text{ MeV} + 2,53 \text{ MeV} = 3,02 \text{ MeV}$.

b) Ze vztahu (2.16) dostáváme $p = \frac{\sqrt{E^2 - (m_0 c^2)^2}}{c}$, $p = \frac{\sqrt{3,04^2 - 0,511^2}}{c} = 3,00 \text{ MeV}/c$.

c) Ze vztahu (2.55b) dostáváme $\gamma = \frac{E}{m_0 c^2}$, $\gamma = \frac{3,04 \cdot 10^6 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19}}{9,11 \cdot 10^{-31} \cdot (3,0 \cdot 10^8)^2} = 5,93$. Z této hodnoty γ -faktoru, která je výrazně větší než 1, usuzujeme na to, že při popisu elektronu z příkladu je třeba používat relativistické vztahy.

Příklad 2.2

Určete změnu hmotnosti systému tvořeného protonem a elektronem při procesu vytvoření atomu vodíku. Hmotnosti protonu a elektronu jsou postupně $1,672639 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$ a $9,109390 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$, ionizační energie vodíku je $13,6 \text{ eV}$.

Řešení

Při reakci elektronu a protonu za vzniku vodíku se uvolní ionizační energie jako ultrafialové záření. Hmotnost vodíkového atomu je proto menší než součet hmotností složek, $\Delta m = \frac{\Delta E}{c^2}$.

$$\Delta m = \frac{(13,6 \text{ eV}) (1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J/eV})}{(3 \cdot 10^8 \text{ m/s})^2} = 2,42 \cdot 10^{-35} \text{ kg}$$

Tato změna Δm je malá na to, aby byla přímo měřitelná.

3 Elektromagnetické pole

3.1 Zákony elektrického a magnetického pole

Elektrické a magnetické pole ve vakuu bylo popsáno v předmětu Fyzika I pomocí následujících zákonů.

- **Ampérův zákon** vyjadřuje, že zdrojem magnetického pole jsou elektrické proudy, tedy pohybující se náboje. Matematická formulace zákona říká, že cirkulace vektoru magnetické indukce \vec{B} po uzavřené křivce ℓ je μ_0 násobkem celkového proudu I^R , který protíná plochu ohraničenou uzavřenou křivkou ℓ . μ_0 je permeabilita vakua.

$$\oint_{\ell} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 I^R \quad (3.1)$$

- **Faradayův zákon** elektromagnetické indukce udává, že časovou změnou indukčního toku Φ (tok vektoru magnetické indukce) plochou se indukuje elektrické napětí \mathcal{E}_i . Když vyjádříme indukované napětí pomocí intenzity pole \vec{E} a použijeme integrálního vyjádření pro indukční tok, dostaneme integrální vyjádření Faradayova zákona.

$$\mathcal{E}_i = -\frac{d\Phi}{dt}$$
$$\oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (3.2)$$

- **Gaussova věta elektrostatiky** vyjadřuje, že zdrojem elektrického pole jsou náboje. Její zápis říká, že tok vektoru intenzity pole \vec{E} uzavřenou plochou S je $1/\epsilon_0$ násobkem celkového náboje Q^R , který je uzavřen uvnitř plochy. ϵ_0 je permitivita vakua.

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{Q^R}{\epsilon_0} \quad (3.3)$$

- **Gaussova věta magnetismu** vyjadřuje skutečnost, že magnetické pole je vytvářeno magnetickými dipóly, které nelze od sebe oddělit. Důsledkem toho jsou magnetické siločáry uzavřené. Stejný počet siločar do jakékoli uzavřené plochy vstupuje i vystupuje, tok vektoru magnetické indukce se záporným a kladným znaménkem je stejný a tedy jejich bilance je nulová. V matematickém zápise se tato skutečnost projevuje tím, že tok vektoru magnetické indukce \vec{B} uzavřenou plochou S je nulový.

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (3.4)$$

V následujících oddílech uvidíme, že při popisu elektrického a magnetického pole v dielektrikách a magnetikách nahrazujeme v uvedených zákonech permitivitu vakua ϵ_0 celkovou permitivitou prostředí $\epsilon = \epsilon_r \epsilon_0$, kde ϵ_r je relativní permitivita prostředí. Permeabilitu ve vakuu μ_0 nahrazujeme celkovou permeabilitou prostředí $\mu = \mu_r \mu_0$, kde μ_r je relativní permeabilita prostředí.

3.2 Elektrické pole v dielektrikách

V tomto oddíle rozšíříme popis elektrického pole na prostředí, které není vakuum a není vodič. Toto prostředí se nazývá dielektrikum. Náboje, které se v něm vyskytují, se nemohou volně pohybovat. Při popisu se omezíme na homogenní lineární dielektrikum.

3.2.1 Popis pole v dielektrikách

Při popisu dielektrik je důležitým pojmem **elektrický dipól**, který je tvořen dvěma náboji stejné velikosti a opačných znamének. **Elektrický dipólový moment** charakterizuje elektrický dipól (Fyzika I, odd. 7.3.2, 7.3.12) a je definován jako součin $\vec{p} = Q\vec{\ell}$, kde Q je velikost každého z nábojů a $\vec{\ell}$ vektor spojující oba náboje a směřující od záporného náboje ke kladnému.

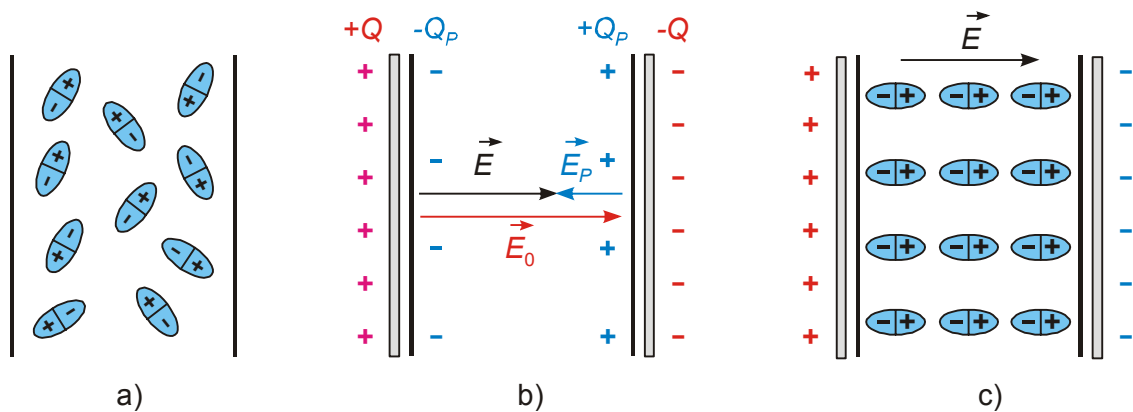
Dielektrika dělíme na

- polární dielektrika
- nepolární dielektrika.

Polární dielektrika jsou tvořena molekulami vykazujícími vlastní dipólový moment, molekuly nepolárních dielektrik nevykazují vlastní dipólový moment. Makroskopický objemový element dielektrika, které není vloženo do vnějšího pole, nevykazuje dipólový moment. V případě polárního dielektrika je to proto, že jednotlivé molekulární dipóly jsou orientovány náhodně (obr. 3.1a), v případě nepolárních dielektrik proto, že jednotlivé molekuly vyplňující objemový element vlastní dipólový moment nemají.

Polarizace dielektrika je děj, který nastává, vložíme-li dielektrikum do elektrostatického pole. Po vložení do vnějšího homogenního elektrického pole dojde v případě polárních dielektrik k natáčení dipólů do směru vnějšího pole (Fyzika I, odd. 7.3.12). V případě nepolárních dielektrik dojde k vzájemnému posunutí těžiště kladných a záporných nábojů v molekule a tím ke vzniku orientovaných dipólových momentů*. Pro jednoduchost výkladu předpokládáme, že vnější homogenní elektrické pole je vytvořené mezi dvěma opačně nabitými kovovými deskami. Je-li mezi deskami vakuum, je intenzita pole dána vektorem \vec{E}_0 , jehož směr je naznačen na obr. 3.1b. Na obr. 3.1c je potom zakreslen ideální stav po vložení polárního dielektrika do vnějšího pole. Původně neuspořádaně rozmístěné dipóly (obr. 3.25a) jsou natočeny do směru vektoru intenzity elektrostatického pole. Ve skutečnosti však úplnému vyrovnání dipólů brání chaotický tepelný pohyb molekul, který způsobí, že se vektory dipólových momentů molekul budou více nebo méně odchylovat od směru intenzity vnějšího elektrostatického pole. U nepolárního dielektrika po vložení do vnějšího pole dojde k vytvoření dipólu, které ve svém výsledku je možné popsat stejně, jak je znázorněno na obr. 3.1c.

* Podrobnější výklad je ve skriptech J. Novák a kol.: Fyzikální chemie II, Vydavatelství VŠCHT, Praha 2000



Obr. 3.1 Polarizace polárního dielektrika
 a) neuspořádaně rozmístěné dipóly polárního dielektrika b) určení výsledné intenzity c) ideálně rozmístěné dipóly

I když mechanismus polarizace obou zmíněných typů dielektrik je odlišný, výsledek jevu má stejné zákonitosti:

- Makroskopický objem dielektrika vykazuje ve vnějším elektrostatickém poli nenulový dipólový moment.
- Na povrchu dielektrika se polarizací vytvořil náboj, který se na rozdíl od náboje ve vodičích nemůže přemísťovat na makroskopické vzdálenosti. Tento náboj se proto označuje jako **vázaný náboj**. Vznik vázaného (polarizačního) náboje Q_p si můžeme názorně představit podle obr. 3.1c tak, že kladné a záporné náboje dipólů se v objemu vrstvy dielektrika vzájemně vykompenzují* a uplatní se pouze kladné náboje dipólů tvořících hraniční vrstvu dielektrika u záporně nabitě kovové desky a záporné náboje dipólů tvořící hraniční vrstvu dielektrika u kladně nabitě kovové desky.
- Elektrostatické pole v přítomnosti dielektrika můžeme určit jako superpozici elektrostatického pole **volného náboje** a elektrostatického pole vázaného náboje (obr. 3.1b). Jako volný náboj označujeme volně pohyblivý náboj, který se v uvažovaném případě nachází na kovových deskách, mezi které je vloženo dielektrikum. Vrstva ideálního dielektrika volný náboj neobsahuje. Intenzita \vec{E} výsledného elektrostatického pole je podle principu superpozice dána vektorovým součtem intenzity elektrostatického pole volného náboje \vec{E}_0 a intenzity elektrostatického pole vázaného náboje \vec{E}_p (obr. 3.1b). Platí

$$\vec{E} = \vec{E}_0 + \vec{E}_p \quad (3.5)$$

Vektory \vec{E}_0 a \vec{E}_p mají opačný směr, proto velikost výsledné intenzity E je menší než velikost intenzity E_0 . Pro případ znázorněný na obr. 3.1 můžeme psát

$$E = E_0 - E_p = \frac{E_0}{\epsilon_r} \quad (3.6)$$

* Při zjednodušeném výkladu polarizace budeme uvažovat tzv. homogenní polarizaci, při které nevzniká prostorový vázaný náboj.

kde ε_r je **relativní permitivita** dielektrika. Ze vztahu (3.6) je patrný význam veličiny relativní permitivity: Vložíme-li dielektrikum do homogenního elektrostatického pole v uspořádání podle obr. 3.1, sníží se intenzita pole ε_r krát.*

Relativní permitivita je bezrozměrná veličina, která charakterizuje z makroskopického hlediska chování dielektrika v elektrostatickém poli. Může nabývat pro různá dielektrika hodnot od jen nepatrně větších než jedna až po hodnoty řádu 10^3 . **Permitivita** dielektrika ε je dána součinem permitivity vakua ε_0 a relativní permitivity ε_r a udává se ve F m^{-1} . Platí

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r \quad (3.7)$$

Platnost vztahů uvedených pro elektrostatické pole ve vakuu můžeme rozšířit pro dielektrikum charakterizované relativní permitivitou ε_r , zaměníme-li ve vztazích permitivitu vakua ε_0 permitivitou ε . Např. velikost intenzity elektrostatického pole ve vzdálenosti r od bodového náboje Q je dána vztahem

$$E = \frac{Q}{4\pi \varepsilon r^2} = \frac{Q}{4\pi \varepsilon_0 \varepsilon_r r^2} \quad (3.8)$$

Jak bylo uvedeno, vložením dielektrika do elektrostatického pole se jeho intenzita sníží a to tím více, čím větší vázaný náboj se na hraničních vrstvách dielektrika při jeho polarizaci vytvoří. K popisu polarizace se zavádí veličina, která je spjata s představou dipólových momentů uvnitř dielektrika. Nazývá se **vektor polarizace** \vec{P} a je definována jako objemová hustota dipólového momentu

$$\vec{P} = \frac{d\vec{p}}{dV} \quad (3.9)$$

Element dielektrika si zobrazíme jako kvádr, jehož dvě stěny jsou kolmé k intenzitě \vec{E}_0 vnějšího elektrického pole (obr. 3.2). Na těchto stěnách se polarizací dielektrika vytvoří náboj dQ_p .

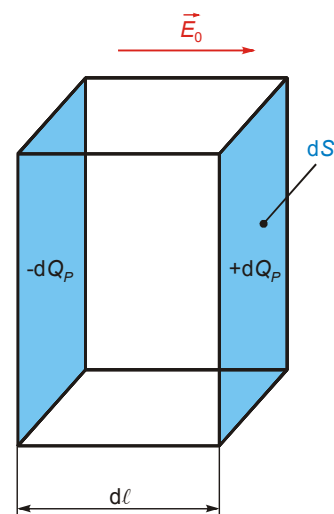
Velikost vektoru polarizace je rovna plošné hustotě vázaného náboje σ_p , jak plyne z následujícího vztahu

$$P = \frac{dQ_p d\ell}{dS d\ell} = \sigma_p \quad (3.10)$$

Vektor polarizace se proto udává ve stejné jednotce jako plošná hustota náboje, tedy v C m^{-2} .

Plošná hustota vázaného náboje (velikost vektoru polarizace) u daného dielektrika roste s rostoucí velikostí intenzity elektrostatického pole. Pro tzv. lineární dielektrika je tato závislost popsána lineární funkcí, kterou odvodíme pomocí vztahu (3.6). Pro výpočet intenzity elektrostatického pole E_p vázaného náboje použijeme vztah pro intenzitu mezi dvěma deskami ($E = \sigma/\varepsilon_0$, Fyzika I, odd. 7.3.6) nabitými nábojem o plošné hustotě σ_p .

$$E = E_0 - E_p = \varepsilon_r E - \frac{\sigma_p}{\varepsilon_0} = \varepsilon_r E - \frac{P}{\varepsilon_0}$$



Obr. 3.2 Objemový element polarizovaného dielektrika

* Velikost a směr výsledné intenzity elektrostatického pole závisí na tvaru dielektrického tělesa, které je vloženo do vnějšího homogenního elektrostatického pole. Např. uvnitř koule z lineárního dielektrika je výsledná intenzita $E = 3E_0/\varepsilon_r + 2$.

Odtud

$$P = \varepsilon_0 (\varepsilon_r - 1) E = \varepsilon_0 \chi_e E \quad (3.11)$$

Bezrozměrná veličina $\chi_e = \varepsilon_r - 1$ se nazývá **elektrická susceptibilita**. Pro izotropní a homogenní prostředí platí

$$\vec{P} = \varepsilon_0 \chi_e \vec{E} \quad (3.12)$$

Obecně je vztah mezi vektorem polarizace a intenzitou elektrostatického pole složitý a závisí na značném počtu faktorů. Důležitou skupinu nelineárních dielektrik tvoří tzv. **feroelektrické látky**, pro které je závislost vektoru polarizace na intenzitě elektrostatického pole dána **hysterézí smyčkou**.

3.2.2 Gaussova věta pro elektrostatické pole v dielektriku

Budeme nyní popisovat obecné vlastnosti elektrostatického pole v přítomnosti dielektrika. Zformulujeme Gaussovu větu pro elektrostatické pole v okolí volného i vázaného náboje. Obdobně jako při použití Gaussovy věty ve vakuu (Fyzika I, odd. 7.3.6) budeme určovat tok vektoru intenzity uzavřenou plochou. Výpočet provedeme pro jednoduché uspořádání znázorněné na obr. 3.3. Dvě velké rovnoběžné desky jsou nabitý volným nábojem $+Q$ a $-Q$, mezi nimi je vrstva dielektrika, na které se při homogenní polarizaci vytvořil vázaný náboj $+Q_P$ a $-Q_P$.

Zvolíme Gaussovu plochu tak, aby uzavírala volný náboj $+Q$ a vázaný náboj $-Q_P$ (na obr. 3.3 je vyznačena čárkovaně). Podle Gaussovy věty (3.3) píšeme pro tok vektoru intenzity \vec{E} touto plochou:

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{Q - Q_P}{\varepsilon_0} \quad (3.13)$$

Vztah (3.13) zjednodušíme a zavedeme další vektorovou veličinu popisující elektrostatické pole, která závisí pouze na volném náboji. Na pravé straně rovnice (3.13) osamostatníme volný náboj Q a vázaný náboj Q_P vyjádříme na levé straně rovnice postupně pomocí plošné hustoty σ_P a velikosti vektoru polarizace P :

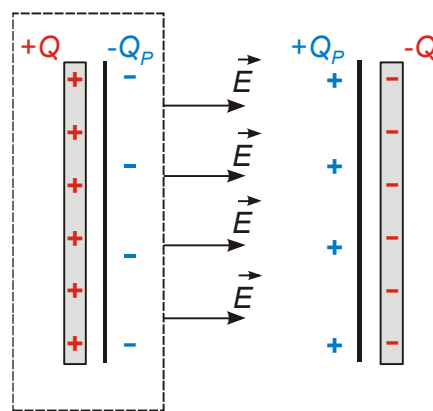
$$Q_P = \int_S \sigma_P dS = \int_S P dS = \oint_S \vec{P} \cdot d\vec{S} \quad (3.14)$$

Plošný integrál $\oint_S \vec{P} \cdot d\vec{S}$ interpretujeme jako tok vektoru polarizace zvolenou Gaussovou plochou. Vztah (3.13) je potom ve tvaru

$$\oint_S (\varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}) \cdot d\vec{S} = Q \quad (3.15)$$

Zavedeme vektor **indukce elektrostatického pole** \vec{D} a vyjádříme jeho vztah k vektoru \vec{E} pomocí (3.12)

$$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \varepsilon_0 \vec{E} + \varepsilon_0 \chi_e \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} \quad (3.16)$$



Obr. 3.3 Gaussova věta v dielektriku

Potom můžeme formulovat v integrálním tvaru **Gaussovu větu pro elektrostatické pole v dielektriku**

$$\oint_S \vec{D} \cdot d\vec{S} = Q \quad (3.17)$$

Tok vektoru indukce elektrostatického pole uzavřenou plochou se rovná celkovému **volnému náboji**, který tato plocha uzavírá.

Shrňme závěrem vlastnosti vektoru indukce \vec{D} elektrostatického pole:

- Vztahy (3.16) a (3.17) platí obecně, nejen pro případ dielektrika umístěného mezi rozlehlými opačně nabitými deskami. Pro případ znázorněný na obr. 3.3 pak ze vztahu (3.17) vyplývá, že velikost indukce D elektrostatického pole mezi deskami je dána plošnou hustotou volného náboje σ a platí $D = \sigma$. Vektor \vec{D} je v tomto uspořádání kolmý na desky. Jednotkou indukce elektrostatického pole je C m^{-2} .
- V dielektriku, které se skládá z několika vrstev s různými relativními permitivitami (obr. 3.4), je velikost vektoru indukce v jednotlivých vrstvách neměnná. Velikost intenzity elektrostatického pole ve vrstvě dielektrika je tím menší, čím je relativní permitivita vrstvy větší. Vektory \vec{E} a \vec{D} jsou v tomto uspořádání kolmé na desky.

Příklad 3.1

Určete velikosti intenzity E a indukce D v dielektriku, které je podle obr. 3.4 složeno ze dvou vrstev s relativními permitivitami ϵ_{r1} a ϵ_{r2} a tloušťkami d_1 a d_2 . Dielektrikum je vloženo mezi dvě rozlehlé rovnoběžné kovové desky, které jsou nabity nábojem $+Q$ a $-Q$. Rozhraní vrstev dielektrik je rovnoběžné s deskami o plošném obsahu S .

Řešení:

Velikosti indukce jsou v obou vrstvách dielektrika stejné ($D_1 = D_2$) a podle (3.17) platí

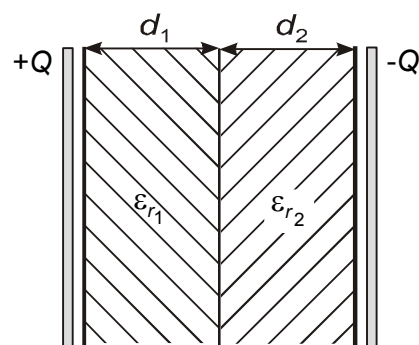
$$D = \frac{Q}{S}$$

Ze vztahu mezi indukcí a intenzitou elektrostatického pole (3.16) vy počteme velikosti intenzit E_1 a E_2

$$E_1 = \frac{D_1}{\epsilon_0 \epsilon_{r1}} = \frac{Q}{S \epsilon_0 \epsilon_{r1}} \quad E_2 = \frac{D_2}{\epsilon_0 \epsilon_{r2}} = \frac{Q}{S \epsilon_0 \epsilon_{r2}}$$

Pro poměr velikostí intenzit platí

$$\frac{E_1}{E_2} = \frac{\epsilon_{r2}}{\epsilon_{r1}}$$



Obr. 3.4 Složené dielektrikum

3.3 Magnetické pole v látkách

Pro magnetické pole má stěžejní význam pohybující se náboj a tedy i elektrické proudy: Magnetické pole je pohybujícími se náboji vytvářeno a také na pohybující se náboj a proudovodiče působí silou nebo momentem síly. V tomto oddíle uvidíme, že rovněž magnetické

vlastnosti látek jsou určeny na úrovni atomů a molekul převážně pohybem nábojů - elektronů (odd. 3.3.1). Jednotlivé látky se liší strukturou elektronových obalů atomů a molekul. Odtud vyplynou odlišné magnetické vlastnosti různých látek. V odd. 3.3.2 zavedeme veličinu **magnetizace**, která globálně charakterizuje magnetické vlastnosti látek. Různé látky se ve vnějším magnetickém poli chovají odlišně. Z tohoto hlediska se rozlišují tři základní skupiny látek (popsaných ve Fyzice I, odd. 9.4.3): paramagnetika, diamagnetika a feromagnetika.

3.3.1 Magnetismus elektronu v atomu

Orbitální magnetický moment elektronu

V klasickém modelu atomu elektrony obíhají po kružnicových trajektoriích kolem mnohem hmotnějšího jádra. V rámci tohoto modelu obíhající elektrony představují malou proudovou smyčku, magnetický dipól, který charakterizujeme magnetickým dipólovým momentem $\vec{m} = I \vec{S}$ (Fyzika I, odd. 9.1.2). Na obr. 3.5 je znázorněný elektron obíhající rychlostí \vec{v} po kružnici o poloměru r , $\vec{v} = 2\pi r/T$, kde T je doba oběhu elektronu. Elektron nese záporný náboj o velikosti e a vytváří tak elektrický proud I , který určíme jako náboj prošlý průřezem (na obr. 3.5 např. ploškou A) za jednotku času

$$I = \frac{e}{T} = \frac{e}{2\pi r/v} \quad (3.18)$$

Magnetický moment, který je spojen s proudovou smyčkou tvořenou obíhajícím elektronem, se nazývá **orbitální magnetický moment elektronu** \vec{m} . Jeho velikost je (za použití vztahu (3.18))

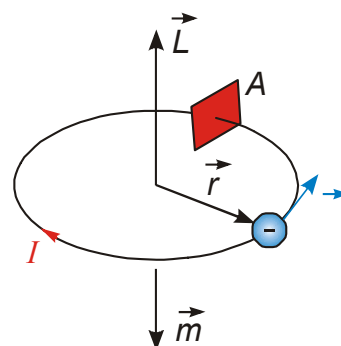
$$m = I \pi r^2 = \frac{1}{2} e v r \quad (3.19)$$

Směr vektoru \vec{m} je kolmý k rovině trajektorie (orbitu) a jeho orientace je daná znaménkovou konvencí pro směr proudu a pravidlem pravé ruky pro magnetický moment proudové smyčky (obr. 3.5, elektron nese záporný náboj!).

Elektron o hmotnosti m_e pohybující se po kružnici je v mechanice charakterizován vektorem momentu hybnosti \vec{L} . Jeho hodnota vzhledem ke středu kružnice je určena vztahem $\vec{L} = \vec{r} \times m_e \vec{v}$ (Fyzika I, odd. 3.2.3). Odtud velikost momentu hybnosti $L = m_e v r$, směr vektoru \vec{L} je kolmý k rovině trajektorie (obr. 3.5), ale je opačný než směr vektoru \vec{m} . *Orbitální magnetický moment elektronu v atomu* \vec{m} je úměrný momentu hybnosti elektronu \vec{L} :

$$\vec{m} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L} \quad (3.20a)$$

$$m = \frac{e}{2m_e} L \quad (3.20b)$$



Obr. 3.5 Elektron obíhající kolem jádra, jeho orbitální magnetický moment \vec{m} a moment hybnosti \vec{L} vzhledem ke středu trajektorie

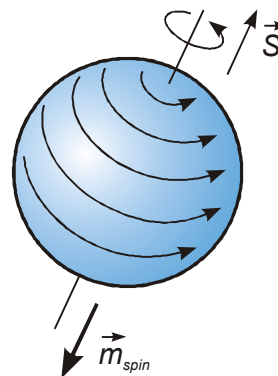
- Koeficient úměrnosti mezi magnetickým momentem a momentem hybnosti ve vztahu (3.20) se nazývá **gyromagnetický poměr*** :

$$\text{gyromagnetický poměr} = \frac{e}{2m_e} \quad (3.21)$$

- V kap. 6 uvidíme, že orbitální moment hybnosti a příslušný orbitální magnetický moment elektronu (3.20) v atomu jsou kvantovány.

Spinový magnetický moment elektronu

Dosud jsme uvažovali pohyb elektronu kolem jádra po orbitu. V kvantové mechanice budeme elektron navíc charakterizovat vlastností, kterou označujeme jako **spin**. Přibližná představa spinu, která bude v kvantové mechanice opravena, je založena na rotaci elektronu jakožto nabitě koule kolem své osy (obr. 3.6), které přísluší vnitřní moment hybnosti \vec{S} . Podle této představy jsou orbitální moment hybnosti a vnitřní moment hybnosti (spin) analogické momentu hybnosti Země při oběhu kolem Slunce a momentu hybnosti rotace Země kolem své osy. Rotace elektronu kolem vnitřní osy je rotací náboje. Proto momentu hybnosti \vec{S} přísluší rovněž magnetický moment, který označujeme jako spinový magnetický moment.



Obr. 3.6 Model rotujícího elektronu, veličiny spin \vec{S} a spinový magnetický moment \vec{m}_{spin}

$$\vec{m}_{spin} = -\frac{e}{m_e} \vec{S} \quad (3.22a)$$

$$m_{spin} = \frac{e}{m_e} S \quad (3.22b)$$

- Porovnáním vztahů (3.20) a (3.22) je zřejmé, že gyromagnetický poměr pro spinový moment je dvojnásobný než pro orbitální moment.
- Podle kvantové teorie je rovněž kvantován spin (kap. 6).
- V odd. 6.2.5 uvidíme, že spin elektronu může mít dvojí orientaci, proto i jeho spinový magnetický moment může být orientován dvojím způsobem. Spinové magnetické účinky elektronů s tzv. spárovanými spiny (elektrony mají stejně velký spin, ale vzájemně opačně orientovaný) se vzájemně vyruší.

Magnetický moment atomu

Výsledný magnetický moment atomu nebo molekuly je vektorovým součtem orbitálních a spinových magnetických momentů všech elektronů. Pro velké množství atomů platí, že orbitální magnetické momenty jednotlivých elektronů se vyruší z důvodů odlišné prostorové orientace momentu hybnosti jednotlivých elektronů, u spárovaných elektronů se vyruší i spinové momenty a výsledný magnetický moment částice bez přítomnosti magnetického pole je nulový. V atomech, které obsahují nespárované elektrony a které mají nezaplňené vnitřní slupky,

* Vztahy (3.20) a (3.21) byly odvozeny pro kružnicové orbity. V kvantové mechanice (kap. 6) budeme stav elektronu v atomech popisovat jednoelektronovou vlnovou funkcí, která určuje pravděpodobnost výskytu elektronu v prostoru. Tato pravděpodobnost může být znázorněna prostorovými útvary různých tvarů. Hovoříme o tvaru orbitalu. Vztahy (3.20) mezi orbitálním momentem hybnosti a orbitálním magnetickým momentem platí pro orbity všech tvarů.

nedochází často k úplné kompenzaci magnetických momentů elektronů a tyto atomy se vyznačují vlastním permanentním magnetickým momentem (Tab. 3.1).

Tab. 3.1 Magnetické momenty m vybraných atomů

Atom (iont)	Magnetický moment (10^{-24} J/T)
H	9,27
He	0
Li	9,27
O	13,9
Ne	0
Yb ³⁺	37,1

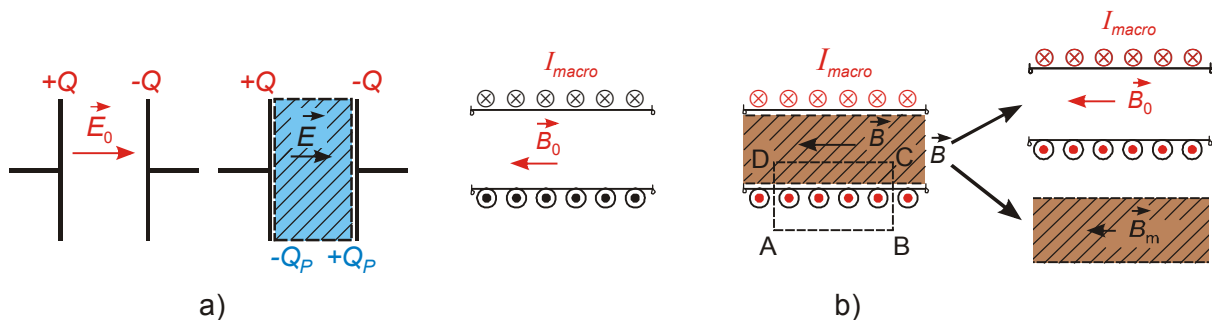
- Jádra atomů rovněž přispívají k magnetickému momentu částic (atomů nebo molekul). Protože hmotnosti jaderných částic jsou řádově 10^3 krát větší než hmotnost elektronů, ze vztahů (3.20) a (3.22) můžeme usoudit, že magnetické momenty protonu jsou řádově 10^3 menší než magnetické momenty elektronů. Často proto jejich příspěvky k celkovému magnetickému momentu atomů můžeme zanedbat.

3.3.2 Magnetika

V odd. 3.2.1 jsme charakterizovali elektrické vlastnosti látek nacházejících se ve vnějším elektrickém poli vektorem polarizace. Obdobně makroskopické magnetické vlastnosti látek popíšeme pomocí vektorové veličiny **magnetizace**: Zvolíme objemový element ΔV , který je infinitezimální, přesto však obsahuje velké množství n částic, atomů nebo molekul, z nichž každá i -tá částice má magnetický moment \vec{m}_i . Magnetizace \vec{M} je pak dána vztahem

$$\vec{M} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\sum_{i=1}^n \vec{m}_i}{\Delta V} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{\Delta \vec{m}}{\Delta V} = \frac{d \vec{m}}{d V} \quad (3.23)$$

a má význam magnetického momentu jednotky objemu. Látky vykazující nulovou magnetizaci mohou být tvořeny částicemi bez vnitřního magnetického momentu nebo jsou tvořeny částicemi s nenulovým magnetickým momentem, které jsou však v globálním měřítku uspořádány tak, že se jejich magnetické momenty vyruší. Magnetizace látky je ovlivněna fyzikálními a chemickými podmínkami, např. teplotou. Dále záleží na tom, zdali je látka vložena do magnetického pole. Z hlediska chování v magnetickém poli můžeme látky rozdělit do dvou skupin: Jestliže magnetizace látky po vložení do magnetického pole nabývá pouze malých hodnot, mluvíme o látkách **slabě magnetických**, velké hodnoty magnetizace vykazují látky **silně magnetické**. Látky charakterizované magnetizací, nazýváme **magnetika**.



Obr. 3.7 Lineární dielektrikum mezi deskami rovinného kondenzátoru (a), lineární magnetikum v dutině dlouhého solenoidu (b)

Popíšeme chování magnetika po jeho vložení do homogenního magnetického pole, které může být vytvořeno např. v dlouhém solenoidu (Fyzika I, odd. 9.2.3). V dutině solenoidu bez přítomnosti magnetika (dutina je vakuem) je magnetická indukce \vec{B}_0 . Magnetikum toto „vnější“ magnetické pole \vec{B}_0 ovlivní svým příspěvkem \vec{B}_m (obr. 3.7b), takže výsledná indukce magnetického pole v magnetiku je

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \vec{B}_m \quad (3.24)$$

V případě slabě magnetických látek je magnetická indukce výsledného magnetického pole \vec{B} (s výjimkou velmi nízkých teplot) násobkem magnetické indukce „vnějšího“ magnetického pole \vec{B}_0

$$\vec{B} = \mu_r \vec{B}_0 \quad (3.25)$$

Jestliže μ_r je konstantní, závislost na \vec{B}_0 je lineární a mluvíme o **lineárních magnetikách**. Bezrozměrná konstanta μ_r je tzv. **relativní permeabilita** látky. Připomeňme analogický vztah (3.6) mezi intenzitou elektrického pole ve vakuu a v dielektriku $\vec{E} = \frac{\vec{E}_0}{\epsilon_r}$ (obr. 3.7a).

Spojením vztahů (3.24) a (3.25) dostáváme

$$\begin{aligned} \mu_r \vec{B}_0 &= \vec{B}_0 + \vec{B}_m \\ \vec{B}_m &= (\mu_r - 1) \vec{B}_0 = \chi_m \vec{B}_0 \end{aligned} \quad (3.26)$$

Bezrozměrný parametr χ_m charakterizující magnetické vlastnosti látky

$$\chi_m = \mu_r - 1 \quad (3.27)$$

se nazývá **magnetická susceptibilita**.

Příspěvek magnetika \vec{B}_m k celkovému magnetickému poli vyjádříme nyní pomocí magnetizace magnetika. Platí

$$\vec{B}_m = \mu_0 \vec{M} \quad (3.28)$$

K vysvětlení tohoto vztahu použijeme obr. 3.8. Element magnetika, jehož magnetický moment je $d\vec{m}$, má tvar hranolu o obsahu základny dS a výšce dl rovnoběžné s vektorem $d\vec{m}$. Velikost momentu dm je

$$d m = M d \ell d S$$

protože M má význam magnetického momentu jednotky objemu. Stejný magnetický moment jako uvažovaný element magnetika má i elementární proudová smyčka, jejíž vektor plochy je $d\vec{S}$ a kterou prochází elementární tzv. vázaný magnetizační proud dI_{mag} . Velikost magnetického momentu dm můžeme vyjádřit jako součin proudu a plochy smyčky pomocí vázaného magnetizačního proudu

$$d m = dI_{mag} d S$$

Spojením posledních dvou vztahů dostáváme

$$M d \ell d S = dI_{mag} d S$$

$$M = \frac{dI_{mag}}{d \ell} \quad (3.29)$$

Magnetizace má tedy význam vázaného magnetizačního proudu na jednotku výšky sloupce magnetika. Využijeme vztah pro indukci solenoidu $B = \mu_0 z I$, kde z je počet závitů na jednotku délky solenoidu, (Fyzika I, odd. 9.2 3) a dostáváme, že indukce \vec{B}_m uvnitř solenoidu, který by byl tvořen závitů protékanými magnetizačním proudem, je dána vztahem (3.28).

Použitím vztahu (3.28) můžeme indukci celkového magnetického pole v magnetiku vyjádřit pomocí indukce vnějšího pole a magnetizace látky

$$\vec{B} = \vec{B}_0 + \mu_0 \vec{M} \quad (3.30)$$

Intenzita magnetického pole

Vyjádříme nyní výsledné magnetické pole uvnitř velmi dlouhého solenoidu plně vyplněného slabým magnetikem pomocí Ampérova zákona (3.1). Jako Ampérovu křivku použijeme obdélník ABCD na obr. 3.7b. K celkovému proudu I^R bude přispívat makroskopický proud I^{macro} (způsobuje „vnější“ magnetické pole \vec{B}_0) a proud magnetizační I_{mag} (způsobuje příspěvek \vec{B}_m). Podle (3.1)

$$\oint_{ABCD} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 (I^{macro} + I_{mag}) \quad (3.31)$$

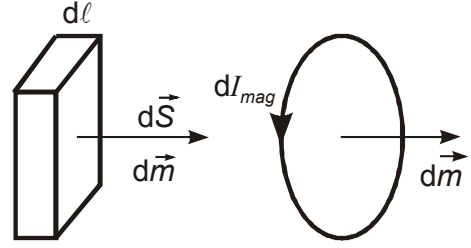
Zobecněním vztahu (3.29) dostáváme

$$dI_{mag} = \vec{M} \cdot d\vec{\ell}$$

$$I_{mag} = \oint_{ABCD} \vec{M} \cdot d\vec{\ell} \quad (3.32)$$

Upravíme (3.31) vydělením μ_0 a použijeme vztahu (3.32):

$$\oint_{ABCD} \left(\frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M} \right) \cdot d\vec{\ell} = I^{macro} \quad (3.33a)$$



Obr. 3.8 Vztah mezi magnetizací a vázaným magnetizačním proudem dI_{mag}

$$\oint \vec{H} \cdot d\vec{\ell} = I^{macro} \quad (3.33b)$$

Veličina \vec{H} za integračním znaménkem

$$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M} \quad (3.34)$$

rovněž popisuje magnetické pole a označuje se jako **intenzita magnetického pole**. Jednotkou intenzity magnetického pole je $A \cdot m^{-1}$.

Vztahy (3.33a) a (3.33b) představují Ampérův zákon v magnetiku, který platí obecně, nejen pro uvedený speciální případ magnetika v dutině solenoidu. Formulujeme ho pomocí vektoru intenzity magnetického pole: *Cirkulace vektoru intenzity magnetického pole po uzavřené křivce je rovna celkovému makroskopickému proudu procházejícímu plochou, jejíž hranice je tvořena touto uzavřenou křivkou.*

Celkovou indukci magnetického pole \vec{B} pak můžeme popsat pomocí intenzity \vec{H} a magnetizace \vec{M}

$$\vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M}) \quad (3.35)$$

Dosadíme vztahy (3.28) a (3.26) a využijeme (3.27) a toho, že \vec{H} nezávisí na přítomnosti magnetika (podle (3.33b) nezávisí na magnetizačním proudu v magnetiku I_{mag}) a tedy $\vec{B}_0 = \mu_0 \vec{H}$

$$\begin{aligned} \vec{B} &= \mu_0 \left(\vec{H} + \frac{\vec{B}_m}{\mu_0} \right) = \mu_0 \left(\vec{H} + \frac{\chi_m \vec{B}_0}{\mu_0} \right) = \mu_0 (\vec{H} + \chi_m \vec{H}) = \mu_0 (\vec{H} + (\mu_r - 1) \vec{H}) = \\ &= \mu_0 \mu_r \vec{H} = \mu \vec{H} \end{aligned}$$

Mezi veličinami magnetickou indukcí \vec{B} a intenzitou magnetického pole \vec{H} platí tedy vztah

$$\vec{B} = \mu \vec{H} \quad (3.36)$$

kde koeficient μ je **permeabilita látky**:

$$\mu = \mu_r \mu_0 \quad (3.37)$$

Popis magnetického pole v magnetikách můžeme shrnout do následujících bodů:

- Intenzita magnetického pole \vec{H} je podle (3.33) určena pouze makroskopickými proudy a nezávisí na vázaných magnetizačních proudech. Je v tomto smyslu analogická veličině elektrická indukce \vec{D} (odd. 3.2.2). Elektrická indukce \vec{D} je určena vnějšími náboji vytvářejícími elektrické pole a není ovlivněna vázanými náboji, které vzniknou při polarizaci dielektrika. Veličina magnetická indukce \vec{B} je ovlivněna magnetikem (vztahy (3.31), (3.35), (3.36)), podobně jako je intenzita elektrického pole \vec{E} ovlivněna dielektrikem (odd. 3.2.1).
- Ve Fyzice I, odd. 9.2.3 jsme odvodili pro magnetickou indukci uvnitř dlouhého solenoidu umístěného ve vakuu vztah $B = \mu_0 z I$. Jestliže solenoid je zcela vyplněn lineárním magnetikem, dostáváme pro velikost indukce uvnitř solenoidu vztah $B = \mu_r B_0 = \mu_0 \mu_r z I = \mu z I$.

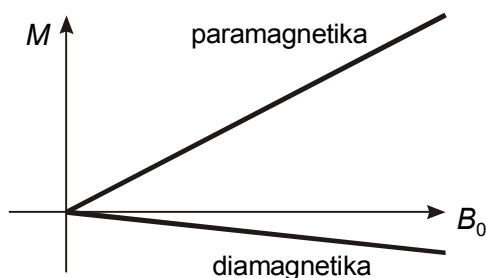
3.3.3 Diamagnetismus, paramagnetismus, feromagnetismus

Pro magnetické pole uvnitř slabých lineárních magnetik platí vztah (3.25)

$$\vec{B} = \mu_r \vec{B}_0$$

Pro určitou skupinu látek je relativní permeabilita μ_r v předchozím vztahu $\mu_r < 1$. To znamená, že magnetické pole je po vložení magnetika zeslabeno. Hodnota μ_r bývá v tomto případě velmi blízká 1, neboť toto zeslabení je velmi malé. Mluvíme o **látkách diamagnetických**. Pro další skupinu látek je $\mu_r > 1$, tedy magnetické pole je po vložení magnetika mírně zesíleno, a mluvíme o **látkách paramagnetických**.

Závislost magnetizace těchto lineárních magnetik na magnetické indukci vnějšího pole je znázorněna na obr. 3.9. Směrnice obou závislostí mají opačná znaménka (vektor magnetizace má v případě paramagnetických látek souhlasný směr jako magnetická indukce vnějšího pole, v případě diamagnetických látek je jeho směr opačný). Materiálové konstanty μ_r , μ a χ_m lineárních magnetik spolu souvisejí vztahy (3.27) a (3.37). V tabulce 3.2 jsou uvedeny příklady materiálových konstant diamagnetických a paramagnetických látek



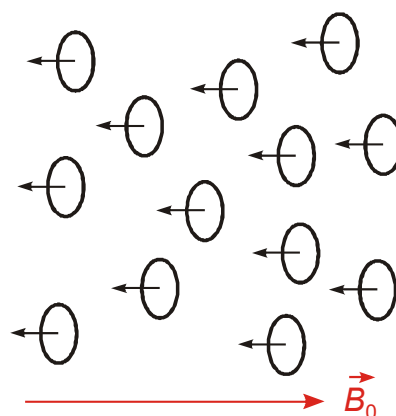
Obr. 3.9 Závislost magnetizace na magnetické indukci v případě lineárních magnetik

Tab. 3.2 Materiálové konstanty a příklady diamagnetických a paramagnetických látek při 300 K

Paramagnetické látky ($\mu_r > 1, \chi_m > 0, \mu > \mu_0$)		Diamagnetické látky ($\mu_r < 1, \chi_m < 0, \mu < \mu_0$)	
	magnetická susceptibilita χ_m		magnetická susceptibilita χ_m
hliník	$2,3 \cdot 10^{-5}$	měď	$-9,8 \cdot 10^{-6}$
kyslík	$2,1 \cdot 10^{-6}$	dusík	$-5,0 \cdot 10^{-9}$
platina	$2,9 \cdot 10^{-4}$	křemík	$-4,2 \cdot 10^{-6}$

Diamagnetismus

V diamagnetických látkách se bez přítomnosti vnějšího magnetického pole magnetické momenty dvojic elektronů v částicích (atomech, molekulách, iontech) vyruší, takže výsledný magnetický moment je nulový. Do této skupiny patří některé kovy, některé nekovové pevné látky, plyny a většina organických látek (Tab. 3.2). Po vložení do vnějšího magnetického pole se však v částicích těchto látek indukují slabé magnetické dipóly, jejichž magnetické pole má směr opačný, než je směr vnějšího magnetického pole (obr. 3.10). Pro diamagnetické látky je charakteristické to, že jsou vypuzovány z nehomogenního magnetického pole, např. blízko konců solenoidu nebo tyčových magnetů. Diamagnetismus je vlastní všem elektronům v atomech. Je však tak slabý, že je zanedbatelný ve srovnání s paramagnetismem a feromagnetismem. Susceptibilita a další materiálové magnetické konstanty diamagnetik obvykle nezávisí na teplotě (za běžných podmínek).



Obr. 3.10 Magnetické momenty proudových smyček, které vznikají indukci v diamagnetických materiálech vložených do vnějšího magnetického pole.

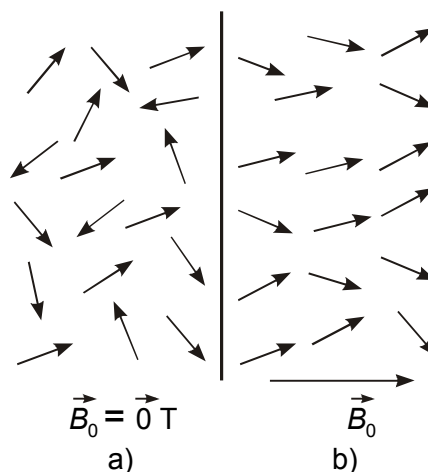
Paramagnetismus

Paramagnetismus je způsoben přítomností atomů s nenulovým permanentním magnetickým momentem. Magnetické dipólové momenty jednotlivých částic spolu interagují nepatrně a bez přítomnosti vnějšího magnetického pole jsou orientovány nahodile (obr. 3.11a). Po vložení do vnějšího magnetického pole mají částice s permanentním magnetickým dipólovým momentem snahu orientovat se souhlasně s vnějším magnetickým polem (obr. 3.11b). Tomuto ději konkuruje neuspořádaný tepelný pohyb částic. U většiny paramagnetik velikost magnetizace závisí na termodynamické teplotě T tzv. Curieovým vztahem

$$M = C \frac{B}{T} \quad (3.38)$$

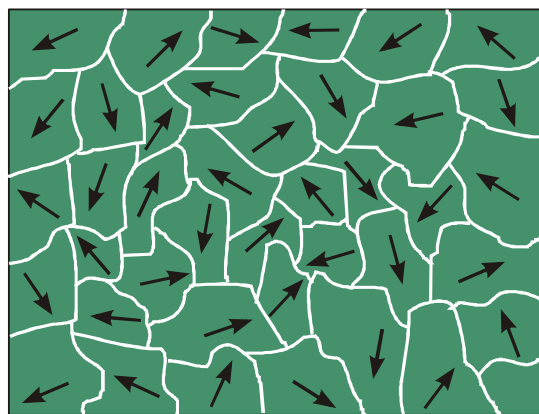
kde C je Curieova konstanta.

- Ze vztahu (3.38) je patrné, že magnetizace pro danou velikost indukce B roste s klesající teplotou. Pro $B = 0$ je magnetizace nulová, což odpovídá nahodilé orientaci permanentních magnetických dipólů. Pro nízké teploty a velké hodnoty magnetického pole dochází k maximální možné orientaci dipólů neboli k saturaci. Vztah (3.38) pak již neplatí.



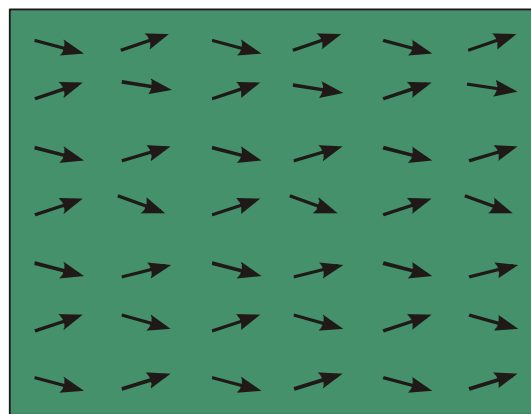
Obr. 3.11 Paramagnetická látka obsahující permanentní mikroskopické magnetické dipóly (a) bez vnějšího magnetického pole, (b) po vložení do vnějšího magnetického pole

Feromagnetika



$$\vec{B}_0 = \vec{0} \text{ T}$$

a)



$$\vec{B}_0$$

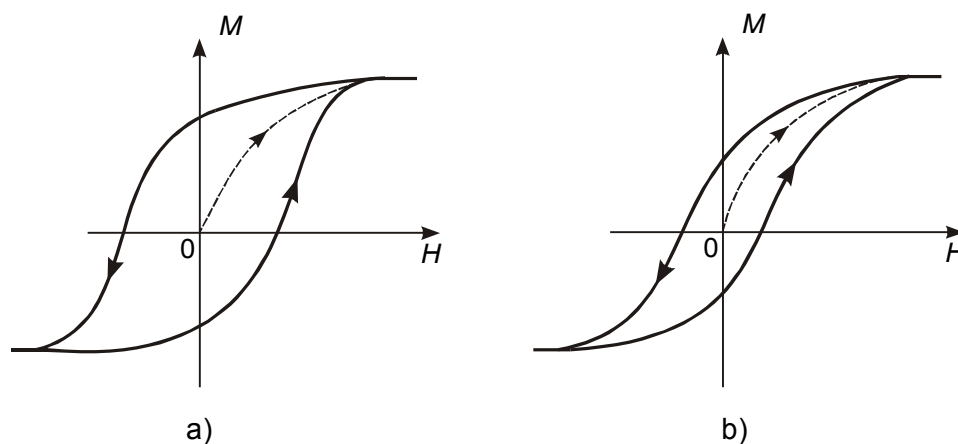
b)

Obr. 3.12 Náhodně orientované magnetické dipóly v doménách nezmagnetovaných feromagnetik bez vnějšího magnetického pole (a), orientace domén feromagnetik ve vnějším magnetickém poli (b)

Nejvýznamnější skupinou silných magnetik jsou látky feromagnetické, např. železo, kobalt, nikl, gadolinium a dysprosium. Atomy feromagnetik mají vnitřní magnetické momenty, které mají tendenci spolu silně interagovat. Všechny feromagnetické látky obsahují mikroskopické oblasti, tzv. domény (zaujímající objem 10^{-12} až 10^{-8} m^3 , obsahující 10^{17} až 10^{21} atomů). Uvnitř domén jsou magnetické momenty jednotlivých částic orientovány souhlasně. V nezmagnetovaných vzorcích jsou jednotlivé domény orientovány nahodile, takže výsledná mag-

netizace materiálu je nulová (obr. 3.12a). Ve zmagnetovaném stavu dojde k orientaci domén (obr. 3.12b).

Jestliže jsou feromagnetické látky vloženy do magnetického pole, je pro ně charakteristická složitá závislost magnetizace na intenzitě magnetického pole, historii vzorku a dalších faktorech. Průběh magnetizace feromagnetik, který byl popsán ve Fyzice I, odd. 9.4.3, je dán hysterezi křivkou, která je pro měkká a tvrdá magnetika znázorněna na obr. 3.13.



Obr. 3.13 Hysterezní křivka (a) tvrdých feromagnetik, (b) měkkých feromagnetik

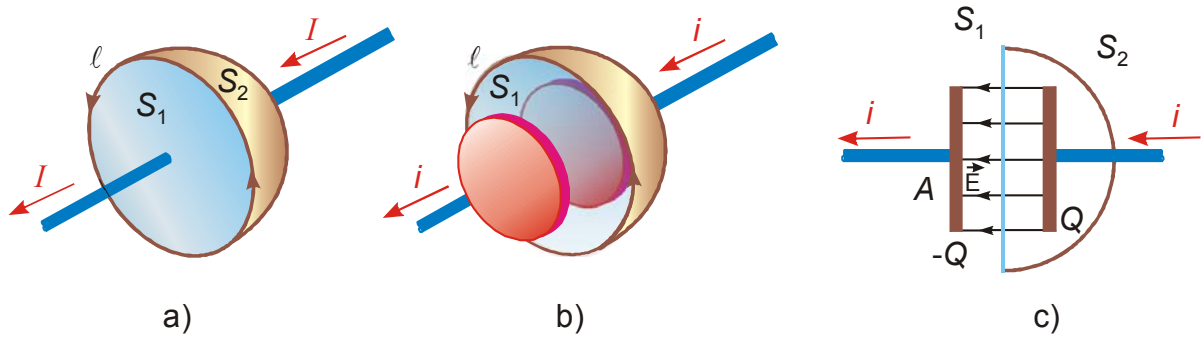
3.4 Zobecněný Ampérův zákon

Ampérův zákon (3.1) popisuje magnetické pole v případě, kdy proudovodiče nejsou přerušeny žádným elektrickým prvkem a proudy mají kontinuální charakter. Při obecnějším rozložení proudů je třeba provést zobecnění Ampérova zákona (3.1). Uvažme vodič protékaný proudem I , který je obklopen uzavřenou křivkou ℓ . Tato křivka tvoří hranici neomezenému množství ploch, z nichž dvě, S_1 a S_2 , jsou na obr. 3.14a. Mezi plochami S_1 a S_2 nedochází k akumulaci nebo ztrátám náboje, a proto podle rovnice kontinuity proudu $\oint \vec{J} \cdot d\vec{S} = 0$ je proud plochou S_1 stejný jako proud plochou S_2 . Celkový proud závisí pouze na uzavřené křivce ℓ , nikoli na ploše jí určené tak, jak vyjadřuje Ampérův zákon ve tvaru (3.1).

Nyní popíšeme jinou situaci, která je zobrazena na obr. 3.14b,c. Nacházejí se zde dvě paralelní rovinné desky kondenzátoru. Proud i (časově proměnný) představuje okamžitou hodnotu proudu vodičem. Dvě z ploch určených uzavřenou křivkou ℓ jsou znázorněny na obrázku: Plocha S_2 je protínána proudem i podobně jako na obr. 3.14a, zatímco plochou S_1 nyní neprochází proud, protože se nachází v oblasti vakua nebo dielektrika mezi deskami kondenzátoru. Na deskách kondenzátoru dochází k akumulaci a změně náboje v procesu nabíjení a vybíjení.

Přitom časová změna náboje $\frac{dq}{dt}$ je právě rovna proudu i procházejícímu plochou S_2

$$\frac{dq}{dt} = i$$



Obr. 3.14 Posuvný proud. (a) Stacionární proud vodičem: plochy S_1 a S_2 jsou protínány proudem I , (b) nestacionární případ: plocha S_1 není protínána vodičem, plochou S_2 prochází proměnný proud i , (c) řez situací (b)

kde q je okamžitá hodnota náboje na každé z desek kondenzátoru. Okamžitou hodnotu náboje vyjádříme pomocí intenzity elektrostatičkého pole mezi deskami kondenzátoru

$$E = \frac{\sigma}{\varepsilon_0} = \frac{q}{\varepsilon_0 S}$$

kde $\sigma = \frac{q}{S}$ je plošná hustota náboje na deskách kondenzátoru plochy S . Jestliže zanedbáme nehomogenitu pole v kondenzátoru v blízkosti okrajů desek, můžeme tok Ψ intenzity pole \vec{E} plochou S určit

$$\Psi = E S = \frac{q}{\varepsilon_0} \quad q = \Psi \varepsilon_0$$

Vyjádříme časovou změnu náboje, která je rovna proudu i tekoucímu vodičem:

$$i = \frac{dq}{dt} = \varepsilon_0 \frac{d\Psi}{dt} \quad (3.39)$$

Pravá strana poslední rovnice obsahuje časovou derivaci toku intenzity elektrického pole, který prostupuje plochou S_1 , zatímco levá strana je proud prostupující plochou S_2 . Tedy $\varepsilon_0 d\Psi/dt$ je matematickým ekvivalentem proudu pro plochu S_1 , kterou proud i neprostupuje. Definujeme tzv. **posuvný proud** i_p , který „nahrazuje“ skutečný proud i v oblasti, kterou proud neteče, avšak kde dochází ke změně toku intenzity elektrického pole plochou, jejíž hranicí je křivka ℓ :

$$i_p = \varepsilon_0 \frac{d\Psi}{dt} \quad (3.40)$$

$$i_p = \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \quad (3.40b)$$

Poznamenejme ještě, že proud i prostupuje plochu S_2 , zatímco posuvný proud i_p formálně prostupuje plochu S_1 a $i_p = i$.

Oba proudy, proud i nosičů náboje a proud posuvný i_p , mají magnetické účinky popsané stejným zákonem, nazývaným **zobecněný Ampérův zákon** nebo **Ampérův-Maxwellův zákon**: Cirkulace vektoru \vec{B} podél uzavřené křivky je určena celkovým proudem nosičů ná-

boje i^R uzavřenou křivkou a proudem posuvným i_p , který vzniká jako důsledek časově proměnného toku intenzity elektrického pole:

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 (i^R + i_p) \quad (3.41a)$$

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 \left(i^R + \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \right) \quad (3.41b)$$

- Tím, že do Ampérova zákona byl zahrnut posuvný proud vedle proudu reálného, kondukčního, je celkový proud prostupující libovolnými plochami určenými uzavřenou křivkou stejný.
- Výše popsané zobecnění Ampérova zákona bylo provedeno Maxwellem na základě pochopení souvislosti elektrického a magnetického pole.
- Efekt posuvného proudu je často zanedbatelný v obvodech s pomalu se měnícím proudem.
- Zobecněný Ampérův zákon bude využit v odd. 3.7 zabývajícím se elektromagnetickým vlněním.
- Uvedený Ampérův zákon je formulován pro vakuum, pro obecné izotropní prostředí má tvar

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 \mu_r \left(i^R + \varepsilon_0 \varepsilon_r \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \right) \quad (3.41c)$$

3.5 Indukované elektrické a magnetické pole

Faradayův zákon (3.2) vyjadřuje, že časová změna toku magnetické indukce vede ke vzniku indukovaného elektrického pole. Indukované elektrické pole se svými vlastnostmi liší od elektrického pole v okolí nábojů především tím, že jeho síly nejsou konzervativní. Pro konzervativní síly by totiž muselo platit, že práce po uzavřené křivce je nulová $\oint \vec{F} \cdot d\vec{\ell} = \oint q\vec{E} \cdot d\vec{\ell} = 0$, tedy $\oint \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = 0$. Podle Faradayova zákona je však cirkulace vektoru \vec{E} po uzavřené křivce nenulová, jestliže pravá strana, tj. časová změna indukčního toku, je nenulová. Indukované elektrické pole proto není potenciálové.

Z hlediska symetrie lze očekávat, že časová změna toku intenzity elektrického pole vede ke vzniku indukovaného magnetického pole. Tuto skutečnost jsme prokázali a matematicky popsali v předchozím odd. 3.4 při popisu nabíjení deskového kondenzátoru ve vakuu.

Porovnejme nyní vlastnosti indukovaného elektrického pole a magnetického pole analogicky zapsanými zákony:

Pro vznik indukovaného elektrického pole o intenzitě \vec{E} v důsledku časové změny magnetického toku $\Phi = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}$ platí Faradayův zákon (3.2)

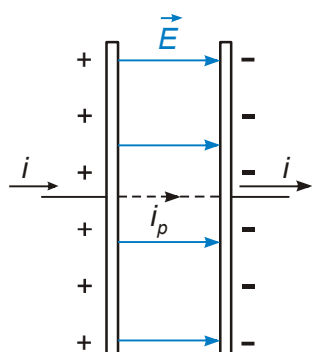
$$\oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{d\Phi}{dt} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}$$

Vznik indukovaného magnetického pole o indukci \vec{B} (magnetické pole posuvného proudu) v důsledku časové změny toku intenzity elektrického pole $\Psi = \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S}$ popisuje Maxwellův zákon. Pro vakuum platí

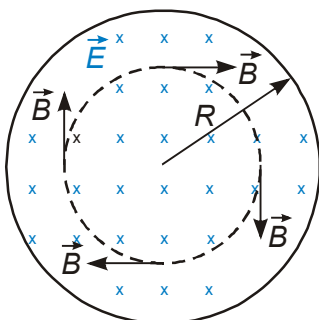
$$\oint_{\ell} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{d\Psi}{dt} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \quad (3.42)$$

Uvedené zákony přiblížíme pomocí následujících dvou obrázků. Na obr. 3.15 je znázorněn vznik indukovaného magnetického pole posuvného proudu při nabíjení deskového kondenzátoru. Desky kondenzátoru tvoří kruhy o poloměru R . Při nabíjení vzrůstá intenzita \vec{E} elektrického pole (obr. 3.15a). Proud i tekoucí ze zdroje k deskám kondenzátoru má v průběhu nabíjení stejné magnetické účinky jako posuvný proud i_p mezi deskami (odd. 3.4). Na obr. 3.15b se intenzita \vec{E} zvyšuje ve směru do nákresny a v tomto směru teče i posuvný proud. Magnetické pole posuvného proudu mezi deskami je na obr. 3.15b znázorněno jednou indukční čarou ve tvaru kružnice a vektory magnetické indukce \vec{B} , které mají směr tečny k indukční čáře orientované podle pravidla pravé ruky. Na obr. 3.16 je znázorněno indukované elektrické pole o intenzitě \vec{E} , které vzniká, zvýší-li se vektor magnetické indukce \vec{B} ve směru do nákresny. Změna magnetického toku plochou kruhu o poloměru R vede ke vzniku elektrického pole, jehož vektor \vec{E} má směr tečny k siločáře a je orientován podle Lenzova pravidla tak, že ve svém důsledku působí proti změně, která ho vyvolala.

Porovnáme-li obrázky 3.15 a 3.16, je vidět, že vektorové veličiny vzniklých indukovaných polí mají opačný směr.

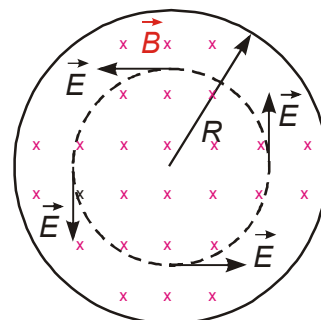


a)



b)

Obr. 3.15 Vznik indukovaného magnetického pole



Obr. 3.16 Vznik indukovaného elektrického pole

3.6 Maxwellovy rovnice

V předchozích oddílech jsme ukázali, že vzájemně závislé elektrické a magnetické pole tvoří elektromagnetické pole. Formální sjednocení zákonitostí elektromagnetického pole je obsaženo v soustavě rovnic, které podle skotského fyzika J.C. Maxwella nazýváme **Maxwellovy rovnice**. Tyto rovnice popisují experimentálně ověřené zákony elektromagnetického pole

pomocí vztahů mezi vektory \vec{E} , \vec{D} , \vec{B} a \vec{H} . Hlavní přínos Maxwella při formulaci rovnic můžeme uvést v následujících bodech:

- Zobecnil Ampérův zákon a intuitivně zavedl posuvný proud.
- Zobecnil Faradayův zákon elektromagnetické indukce tím, že předpověděl existenci indukovaného elektrického pole, které vzniká jako důsledek časových změn magnetického pole.
- Na základě svých rovnic předpověděl existenci elektromagnetického vlnění. Ukázal, že rychlost šíření elektromagnetického rozruhu je rovna rychlosti světla, a interpretoval tak světlo jako část spektra elektromagnetického vlnění.

Maxwellovy rovnice se uvádějí v integrálním a diferenciálním tvaru. Integrální tvar je vhodný pro popis vlastností makroskopického elektromagnetického pole, které lze shrnout do čtyř zákonů: zobecněný Ampérův zákon (3.41), Faradayův zákon elektromagnetické indukce (3.2), Gaussova věta pro elektrostatické pole (3.3), a zákon o neexistenci magnetických nábojů (Gaussova věta magnetismu (3.4)). Tyto zákony uvedeme v integrální podobě platné pro vakuum* a označíme je jako **Maxwellovy rovnice v integrálním tvaru**:

$$\oint_{\ell} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 \left(i^R + \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \right) \quad (3.43)$$

$$\oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (3.44)$$

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{Q}{\varepsilon_0} \quad (3.45)$$

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (3.46)$$

Připomeňme, že Gaussovu větu (3.45) pro elektrostatické pole ve vakuu, Gaussovu větu magnetismu (3.46) a Faradayův zákon elektromagnetické indukce (3.44) jsme probírali ve Fyzice I, zobecněný Ampérův zákon (3.43) včetně výkladu posuvného proudu je uveden v odd. 3.4 a indukce elektrického a magnetického pole je diskutována v odd. 3.5.

Rovnice (3.43) až (3.46) se někdy nazývají hlavní Maxwellovy rovnice. Bývají zpravidla doplňovány čtveřicí dalších rovnic, někdy označovaných jako vedlejší Maxwellovy rovnice. Patří k nim dva vztahy mezi vektory \vec{E} , \vec{D} , \vec{B} a \vec{H} , které obsahují materiálové konstanty: permitivitu ε a permeabilitu μ . K vedlejším Maxwellovým rovnicím se dále řadí Ohmův zákon v diferenciálním tvaru a vztah pro sílu, kterou elektromagnetické pole působí na náboj. Pro homogenní, izotropní a lineární prostředí jsou hodnoty permitivity a permeability konstantní a platí

$$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r \quad (3.47)$$

$$\mu = \mu_0 \mu_r \quad (3.48)$$

Vedlejší Maxwellovy rovnice pro homogenní, izotropní a lineární prostředí uvedeme ve tvaru

$$\vec{D} = \varepsilon \vec{E} = \varepsilon_0 \varepsilon_r \vec{E} \quad (3.49)$$

* Uvedené rovnice platí i pro homogenní, izotropní a lineární prostředí, nahradíme-li permitivitu vakua ε_0 a permeabilitu vakua μ_0 celkovou permitivitou ε a celkovou permeabilitou μ podle vztahů (3.7) a (3.37).

$$\vec{B} = \mu \vec{H} = \mu_0 \mu_r \vec{H} \quad (3.50)$$

$$\vec{J} = \sigma \vec{E} \quad (3.51)$$

$$\vec{F} = Q (\vec{E} + \vec{v} \times \vec{B}) \quad (3.52)$$

Maxwellovy rovnice (3.43) až (3.46) můžeme pomocí operátorů rotace a divergence (Dodatky D1, D2) převést do diferenciálního tvaru. Potom představují soustavu čtyř parciálních diferenciálních rovnic, jimiž lze popsat vlastnosti elektromagnetického pole v jednotlivých bodech prostoru.

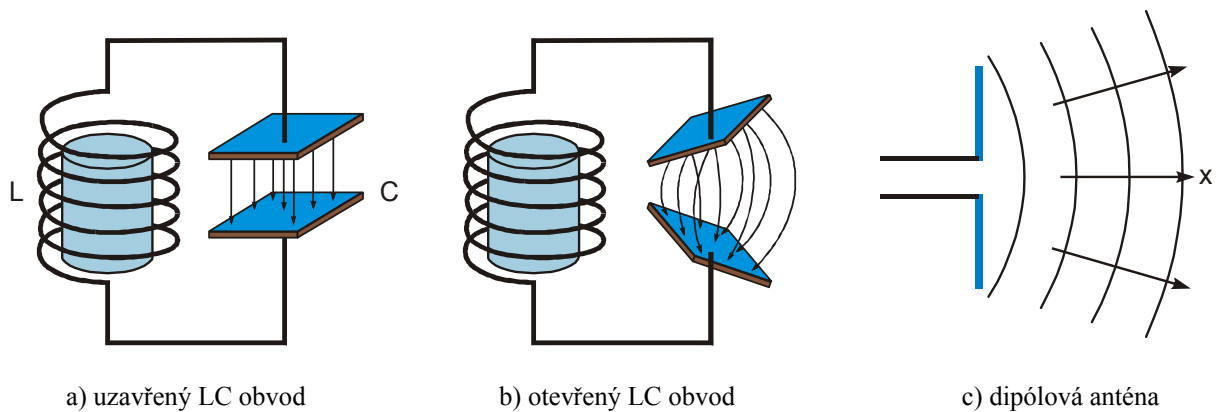
3.7 Elektromagnetické vlnění

Jedním z nejzávažnějších důsledků Maxwellových rovnic pro vývoj fyzikálního nazírání na svět byla předpověď existence **elektromagnetického vlnění** a objasnění elektromagnetické povahy světla. Některé vlastnosti elektromagnetického vlnění jsme popsali již ve skriptech Fyzika I, (Fyzika I, odd. 6.1.1). Obecnější pohled na elektromagnetické vlnění však poskytne až řešení Maxwellových rovnic.

Zdrojem mechanického vlnění je mechanický rozruch, který se šíří hmotným prostředím rychlostí závislou na elastických a setrvačných vlastnostech prostředí. Obdobně zdrojem elektromagnetického vlnění je elektromagnetický rozruch, jehož zdrojem může být například kmitající elektrický dipól realizovaný anténou TV vysílače. Tento rozruch, na rozdíl od mechanického vlnění, nepotřebuje ke svému šíření hmotné prostředí. Ukážeme, že se elektromagnetický rozruch šíří prostředím rychlostí rovnající se rychlosti světla a že ve vakuu postupuje nejrychleji, jeho rychlost je $c = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$. Elektromagnetické vlnění popíšeme obdobně jako v případě mechanického vlnění vlnovou funkcí, která je řešením vlnové rovnice. Ukážeme dále, že elektrická a magnetická složka elektromagnetického vlnění jsou navzájem závislé. Na závěr popíšeme schopnost elektromagnetického vlnění přenášet energii elektromagnetického pole. V tomto oddíle je vznik elektromagnetického vlnění popsán kvalitativně. Odvození vlnové rovnice pro elektromagnetické vlnění z Maxwellových rovnic v diferenciálním tvaru je podáno v dodatku D2.

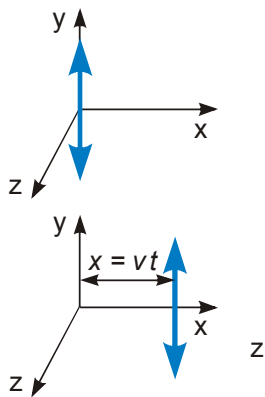
3.7.1 Rovinná elektromagnetická vlna ve vakuu

V dodatku D3 je popsán obvod tvořený kondenzátorem o kapacitě C a cívkou s vlastní indukčností L , tzv. oscilační LC obvod. Původně nabitý kondenzátor se vybíjí přes indukčnost a vzniká proměnné magnetické pole. V případě, že zanedbáme energetické ztráty, elektrické pole v kondenzátoru a magnetické pole v cívce se harmonicky mění s úhlovou frekvencí $\omega = 1/\sqrt{LC}$. Oscilační LC obvod můžeme modifikovat tak, že původní kondenzátor vytváří dipólovou anténu (obr. 3.17). Proud přivádějící náboj do pólů antény se harmonicky mění s úhlovou frekvencí ω , s toutéž frekvencí se mění i náboj q na pólech. Anténa tak představuje dipól, jehož dipólový moment se harmonicky mění s toutéž frekvencí. Oscilující dipól vytváří v ose dipólu elektrické pole, jehož intenzita se mění také harmonicky. Náboj pohybující se v pólech antény vytváří zároveň harmonicky se měnící magnetické pole, jehož indukce B ve středu antény je kolmá k nákresně.

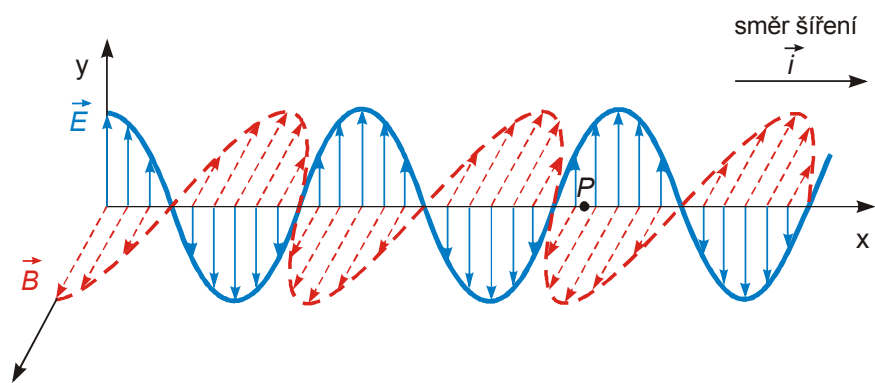


Obr. 3.17 Schématicky znázorněná anténa, která je zdrojem harmonického elektromagnetického rozruchu.

Harmonicky proměnná intenzita elektrického pole a indukce magnetického pole představují harmonický rozruch $E_y(0,t) = E_m \cos(\omega t)$ a $B_z(0,t) = B_m \cos(\omega t)$, který se šíří prostorem rychlostí v (obr. 3.18). Vzniká postupná elektromagnetická vlna. V dostatečně vzdáleném bodě P je možné zakřivení vlnoploch zanedbat a považovat vlnu za rovinnou.



3.18 Šíření harmonického rozruchu \vec{E} rychlostí v



Obr. 3.19 Rovinná elektromagnetická vlna

Intenzitu elektrického pole v bodě o souřadnici x v čase t , pak vyjádříme pomocí obr. 3.18:

$$E_y(x,t) = E_y(0, t - \frac{x}{v}) = E_m \cos\left(\omega\left(t - \frac{x}{v}\right)\right) = E_m \cos(\omega t - kx)$$

kde $k = \frac{2\pi}{\lambda}$ je vlnové číslo.

Šířící se harmonický rozruch reprezentovaný vektory \vec{E} a \vec{B} tak představuje vlnění (obr. 3.19). Složky vektorů \vec{E} a \vec{B} ve zvoleném souřadnicovém systému jsou:

$$E_x = 0 \quad E_y = E_m \cos(\omega t - kx) \quad E_z = 0 \quad (3.53)$$

$$B_x = 0 \quad B_y = 0 \quad B_z = B_m \cos(\omega t - kx) \quad (3.54)$$

3.7.2 Vlastnosti elektromagnetického vlnění

V tomto oddíle odvodíme na základě Maxwellových rovnic vztah pro rychlost šíření elektromagnetického vlnění a popíšeme vzájemnou závislost elektrické a magnetické části elektromagnetického vlnění. Budeme uvažovat prostředí bez volně pohyblivých nábojů a bez makroskopických proudů. V tomto případě Maxwellovy rovnice (3.43) a (3.44) získají více symetrický tvar.

$$\oint_{\ell} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \quad (3.55)$$

$$\oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (3.56)$$

Obecný bod P na ose x znázorněný na obr. 3.19 obklopíme infinitezimálním obdélníkem ABCD o stranách Δx a ℓ ležícím v rovině xy (obr. 3.20). Obdélník představuje uzavřenou křivku ℓ vystupující ve vztahu (3.56). Složka vektoru magnetické indukce B_z prostupující plochou obdélníka vytváří magnetický tok $\Phi = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = B_z \ell \Delta x$, jehož časová změna je

$$\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \Delta x \ell \frac{\partial B_z}{\partial t} \quad (3.57)$$

Časová změna indukčního toku vede podle (3.56) ke vzniku indukovaného elektrického pole, jehož cirkulace podél obdélníka ABCD je

$$\begin{aligned} \oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} &= E_y(x + \Delta x, t) \ell - E_y(x, t) \ell = \left[E_y(x, t) + \frac{\partial E_y}{\partial x} \Delta x \right] \ell - E_y(x, t) \ell = \\ &= \frac{\partial E_y}{\partial x} \Delta x \ell \end{aligned} \quad (3.58)$$

Dosazením (3.58) a (3.57) do rovnice (3.56) dostaneme po úpravě

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = -\frac{\partial B_z}{\partial t} \quad (3.59)$$

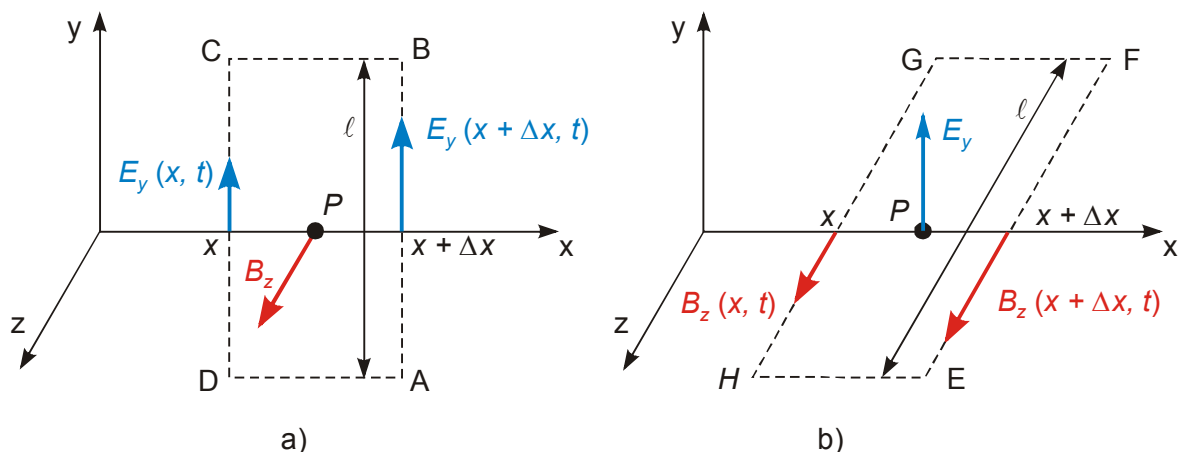
- *Úbytek složky magnetické indukce B_z v čase vede k nárůstu složky intenzity elektrického pole E_y ve směru osy x. Rovnice (3.59) jasně dokumentuje vzájemnou závislost obou složek elektromagnetického pole.*

Obdobně můžeme postupovat, aplikujeme-li rovnici (3.55) na uvažovanou rovinou monochromatickou vlnu ve stejném časovém okamžiku a ve stejném bodě P. Za uzavřenou křivku zvolíme nyní obdélník EFGH o stranách ℓ a Δx ležící v rovině xz (obr. 3.20b).

Tok vektoru intenzity \vec{E} plochou obdélníka $\int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = E_y \ell \Delta x$. V uvažovaném okamžiku

v bodě P magnetická indukce klesá. Protože intenzita elektrického pole a magnetická indukce jsou ve fázi, klesá s časem také y-ová složka intenzity elektrického pole a tedy i její tok obdélníkem EFGH a derivace toku

$$\frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \Delta x \ell \frac{\partial E_y}{\partial t} \quad (3.60)$$



Obr. 3.20 Odvození vztahu mezi vektory \vec{E} a \vec{B} : uzavřená křivka v rovině xy (a), uzavřená křivka v rovině xz (b)

má zápornou hodnotu. Výpočet cirkulace magnetické indukce $\vec{B} = B_z(x, t) \vec{k}$ podél obvodu obdélníka EFGH vede ke vztahu

$$\oint \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = -B_z(x + \Delta x, t) \ell + B_z(x, t) \ell = - \left[B_z(x, t) + \frac{\partial B_z}{\partial x} \Delta x \right] \ell + B_z(x, t) \ell =$$

$$= - \frac{\partial B_z}{\partial x} \Delta x \ell \quad (3.61)$$

Po dosazení (3.60) a (3.61) do rovnice (3.55) a po její úpravě dostaneme

$$\frac{\partial B_z}{\partial x} = -\mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial E_y}{\partial t} \quad (3.62)$$

- Pokles složky intenzity elektrického pole E_y v čase vede k nárůstu složky magnetické indukce B_x ve směru osy x a je v souladu s obr. 3.20b. Také vztah (3.62) dokumentuje vzájemnou závislost obou složek elektromagnetického pole.

V dalším kroku provedeme derivaci rovnice (3.59) podle x a derivaci (3.62) podle t . Vyloučením smíšené derivace $\partial^2 B_z / \partial x \partial t$ dostaneme

$$\frac{\partial^2 E_y}{\partial x^2} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 E_y}{\partial t^2} \quad (3.63)$$

Rovnice (3.63) má tvar obecné vlnové rovnice známé z nauky o vlnění (Fyzika I, odd. 5.2.2)

$$\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (3.64)$$

kde na místě obecné vlnové funkce $u(x, t)$ stojí složka E_y vektoru \vec{E} . Veličina představuje rychlost šíření vlnění (srovnejte též obr.3.18). Porovnáním zjišťujeme, že elektromagnetický rozruch se šíří ve vakuu rychlostí danou vztahem

$$v = c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 8,85 \cdot 10^{-12}}} \text{ ms}^{-1} = 3 \cdot 10^8 \text{ ms}^{-1} \quad (3.65a)$$

V nevodivém prostředí s permitivitou ε a permeabilitou μ je rychlost šíření rozruchu menší a je dána vztahem

$$v = \frac{1}{\sqrt{\mu \varepsilon}} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \mu_r \varepsilon_0 \varepsilon_r}} \quad (3.65b)$$

Existenci elektromagnetického vlnění teoreticky předpověděl J.C. Maxwell, který rovněž uvedeným porovnáním rychlosti šíření elektromagnetického vlnění a rychlosti světla dospěl k poznání, že *světlo je jen zvláštním případem elektromagnetického vlnění*. Optika je tedy specifickou součástí teorie elektromagnetického pole a optické vlastnosti látek lze pochopit na základě interakce elektromagnetického vlnění s atomární strukturou látky.

Z předchozího výkladu a vztahů (3.55) – (3.64) je zřejmé, že vektory \vec{E} a \vec{B} jsou na sobě závislé. Za předpokladu platnosti (3.53) najdeme poměr jejich velikostí např. pomocí rovnice (3.59). Po derivaci funkce $E_y = E_m \cos(\omega t - kx)$ podle x dostaneme

$$\frac{\partial E_y}{\partial x} = k E_m \sin(\omega t - kx) = -\frac{\partial B_z}{\partial t} \quad (3.56)$$

Odtud hledaná složka B_z magnetické indukce vyjde po integraci

$$B_z = \frac{k}{\omega} E_m \cos(\omega t - kx) = B_m \cos(\omega t - kx) \quad (3.57)$$

Je zřejmé, že vektory intenzity elektrického pole a magnetické indukce kmitají ve fázi a že poměr jejich amplitud E_m a B_m je dán vztahem

$$\frac{E_m}{B_m} = \frac{\omega}{k} = v = \frac{1}{\sqrt{\mu \varepsilon}} \quad ; \quad \text{ve vakuu} \quad \frac{E_m}{B_m} = c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} \quad (3.58)$$

Shrneme nyní vlastnosti elektromagnetického vlnění, které jsme v tomto oddíle postupně diskutovali:

- Složky vektorů \vec{E} a \vec{B} elektromagnetického pole se mohou šířit prostorem v podobě rovinné vlny fázovou rychlostí $v = \frac{1}{\sqrt{\mu \varepsilon}}$, která pro případ vakua přechází v rychlost světla ve vakuu c .
- Shoda rychlosti šíření elektromagnetického vlnění a rychlosti šíření světla vedla k tvrzení, že světlo má elektromagnetickou povahu.
- Elektromagnetické vlnění je příčné, elektrická a magnetická složka elektromagnetické vlny jsou navzájem kolmé a jsou kolmé ke směru šíření. Směrový vektor šíření (např. \vec{i}) a vektory \vec{E} a \vec{B} tvoří pravotočivou soustavu tří navzájem kolmých vektorů.
- Vektory \vec{E} a \vec{B} jsou ve vzájemném vztahu. Vektor \vec{B} je zadáním vektoru \vec{E} plně určen. Je-li změna vektoru \vec{E} v čase a v prostoru popsána harmonickou funkcí, mění se harmonicky i vektor \vec{B} a to ve fázi s vektorem \vec{E} , přičemž poměr velikostí obou vektorů je $\frac{E}{B} = v = \frac{1}{\sqrt{\mu \varepsilon}}$.
- Při vlnových dějích v elektromagnetickém poli je v prostoru transportována energie, jak ukážeme v následujícím oddíle.

3.7.3 Energie přenášená elektromagnetickým vlněním

Ukázali jsme že, elektromagnetické vlnění vzniká jako důsledek vzájemně provázaných jevů: Změna magnetického pole vyvolává změnu elektrického pole a naopak změna elektrického pole vyvolává změnu magnetického pole. Zdrojem elektromagnetického vlnění tedy nemohou být náboje v klidu ani ustálené elektrické proudy. Elektromagnetické vlnění přenáší energii a je schopné předávat tuto energii objektům, které vlnění absorbují. energii přenesenou za jednotku času a vztaženou na jednotkovou plochu kolmou na směr šíření označujeme jako **intenzitu vlnění** I (Fyzika I, odd. 5.2.4). Platí

$$I = \frac{dW}{dS dt} \quad (3.59)$$

Energii elektromagnetického pole dW můžeme pro vlnění šířící se ve směru osy x vyjádřit jako součin objemové hustoty energie elektromagnetického pole w a objemového elementu $dV = dS dx$. Vztah pro intenzitu vlnění upravíme

$$I = \frac{w dV}{dS dt} = \frac{w dS dx}{dS dt} = w v \quad (3.60)$$

kde $v = \frac{dx}{dt}$ je fázová rychlost elektromagnetického vlnění ve směru osy x , ve vakuu $v = c$.

Objemová hustota energie elektromagnetického pole w je dána součtem objemové hustoty w_e elektrického pole (Fyzika I, odd.7.6) a w_m magnetického pole (Fyzika I, 10.2). Pro homogenní, izotropní a lineární prostředí s permitivitou ε a permeabilitou μ platí

$$w = w_e + w_m = \frac{1}{2} \varepsilon E^2 + \frac{1}{2} \frac{B^2}{\mu} \quad (3.61)$$

Dosadíme-li za hodnotu intenzity elektrického pole E ze vztahu (3.58) do vztahu pro objemovou hustotu energie elektrického pole w_e , zjistíme, že objemové hustoty elektrického a magnetického pole jsou stejné.

$$w_e = \frac{1}{2} \varepsilon E^2 = \frac{1}{2} \varepsilon B^2 v^2 = \frac{1}{2} \frac{B^2}{\mu} = w_m = \frac{w}{2} \quad (3.62)$$

Vztah pro intenzitu vlnění (3.60) můžeme dále upravit pomocí (3.62) a (3.58)

$$I = w v = \frac{B^2}{\mu} v = \frac{B^2}{\mu} \frac{E}{B} = \frac{1}{\mu} E B \quad (3.63)$$

V teorii elektromagnetického pole bývá zvykem charakterizovat energii přenesenou za jednotku času a vztaženou na jednotkovou plochu kolmou na směr šíření tzv. **Poyntingovým vektorem** \vec{S}

$$\vec{S} = \frac{1}{\mu} \vec{E} \times \vec{B} \quad (3.64)$$

Směr Poyntingova vektoru je shodný se směrem šíření elektromagnetického vlnění. Protože vektory \vec{E} a \vec{B} jsou na sebe kolmé, je velikost Poyntingova vektoru dána (srovnejte (3.63))

$$S = \frac{1}{\mu} E B \quad (3.65)$$

V předchozích úvahách jsme se nezabývali, jakým způsobem se veličiny \vec{E} a \vec{B} mění v prostoru a v čase. Předpokládáme-li, že velikost intenzity E elektrického pole a magnetické indukce B se mění harmonicky, E_m a B_m jsou jejich amplitudy, $E = E_m \cos(\omega t - kx)$ a $B = B_m \cos(\omega t - kx)$, je praktické pro lineárně polarizované záření určovat střední hodnotu Poyntingova vektoru a intenzitu vlnění I definovat vztahem

$$I = \frac{1}{T} \int_0^T S dt = \frac{1}{T} \int_0^T \frac{1}{\mu v} E^2 dt = \frac{1}{\mu v} E_m^2 \frac{1}{T} \int_0^T \cos^2(\omega t - kx) dt =$$

$$= \frac{1}{2\mu v} E_m^2 = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} E_m^2 \quad (3.66)$$

protože $\frac{1}{T} \int_0^T \cos^2(\omega t - kx) dt = \frac{1}{2}$.

Intenzita vlnění je úměrná druhé mocnině amplitudy intenzity elektrického pole.

Příklad 3.2

Pozorovatel je vzdálen $r = 1,8$ m od zdroje monochromatického, lineárně polarizovaného záření, jehož výkon $P = 0,5$ mW (např. od He-Ne laseru). Vypočítejte maximální hodnotu intenzity elektrického pole E_m a maximální hodnotu magnetické indukce B_m v místě pozorovatele. Předpokládejte, že energie elektromagnetického pole o zadaném výkonu je ze zdroje vyzařována izotropně, tj. rychlost šíření elektromagnetického vlnění je ve všech směrech stejná. Parametry prostředí $\epsilon = \epsilon_0$, $\mu = \mu_0$. Rychlost šíření vlnění v uvažovaném prostředí $v = c = 3 \cdot 10^8$ m s⁻¹.

Řešení:

Intenzitu vlnění vypočteme jako energii prošlou kulovou plochou o poloměru r za jednotku času, tedy

$$I = \frac{P}{4\pi r^2}$$

Maximální intenzita E_m ve vzdálenosti r od zdroje je podle vztahu (3.66)

$$E_m = \sqrt{2I\mu v} = \sqrt{\frac{2P\mu v}{4\pi r^2}} = \sqrt{\frac{2 \cdot 0,5 \cdot 10^{-3} \cdot 4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 3 \cdot 10^8}{4\pi \cdot 1,8^2}} \text{ V/m} = 96 \text{ mV/m}$$

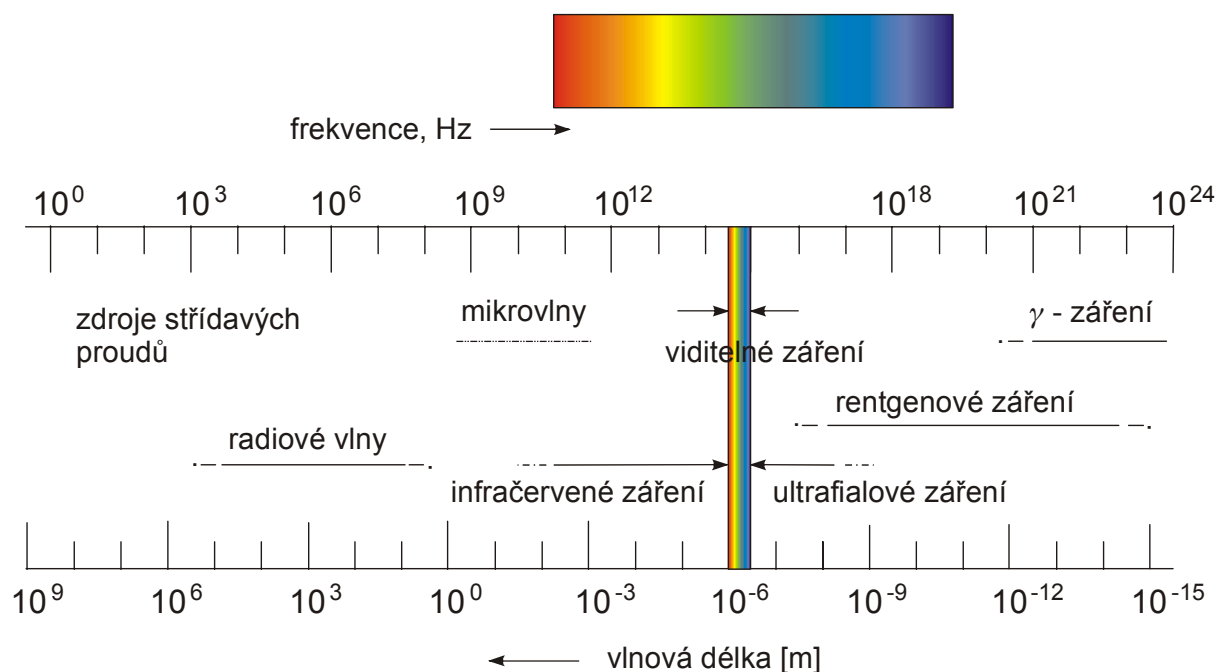
Maximální hodnota magnetické indukce B_m ve vzdálenosti r od zdroje je podle (3.58)

$$B_m = \frac{E_m}{v} = \frac{96 \cdot 10^{-3}}{3 \cdot 10^8} \text{ T} = 3,2 \cdot 10^{-10} \text{ T}.$$

3.7.4 Spektrum elektromagnetického vlnění

Frekvence elektromagnetického vlnění je určena frekvencí zdroje. Celý obor frekvencí f (nebo vlnových délek λ) elektromagnetického vlnění tvoří **spektrum elektromagnetického vlnění** nebo **záření**. Slovo „záření“ se používá jako synonymum slova „vlnění“, protože důležitou část elektromagnetického vlnění, viditelné světlo, vnímáme jako záření. V současné době známé spektrum elektromagnetického záření zahrnuje frekvenční rozsah asi 30 řádů. Jeho nejužívanější část je znázorněna na obr. 3.21. Principiální neexistuje omezení v rozšíření obo-

ru známých nebo používaných frekvencí elektromagnetického vlnění na obou koncích uvedeného intervalu. Při kvalitativním popisu vzniku elektromagnetického vlnění jsme jako zdroj použili oscilační LC obvod. Frekvence vzniklého rozruchu, který se šířil jako vlnění, bylo možné měnit hodnotami kapacity C a indukčnosti L . Zdroje elektromagnetického záření v různých oborech spektra mají velmi odlišný charakter. Celkové spektrum elektromagnetického záření se rozděluje podle podstaty těchto zdrojů a jejich detektorů na několik oborů.



Obr. 3.21 Spektrum elektromagnetického záření

Rádiové vlny zahrnují obor frekvencí od kHz ke GHz (vlnové délky dosahují mnoha km až zlomků metrů). Používají se jako navigační signály, rozhlasové vlny, k přenosu televizního signálu a komunikacím. Antény na bázi dipólu mívají různé rozměry a tvary.

Mikrovlnné záření zahrnuje frekvence od 1 GHz až 100 GHz, (vlnové délky řádově 1 m až 1 mm). Zdrojem jsou elektronická zařízení založená na vakuových trubicích nebo jejich polovodičových ekvivalentech. Mikrovlny se používají pro satelitní televizní signály, telekomunikaci, ve spotřebičích v domácnostech. Mají významné vědecké využití v mikrovlnné spektroskopii, která zkoumá jemnou strukturu kvantových energetických stavů molekul a radikálů.

Tepelné a infračervené záření (IČ, nebo IR) má frekvence v oboru 10^{12} až 10^{14} Hz (vlnové délky 1 mm až ~ 800 nm). Toto elektromagnetické vlnění vzniká v „anténách“ molekulárních rozměrů při vibračních a rotačních pohybech jader atomů. K popisu energie emitované z molekulárních systémů musí být použit formalismus kvantové mechaniky (kap. 5). Infračervené záření se používá v infračervené spektroskopii, která slouží např. k identifikaci molekul.

Viditelné záření (VID nebo VIS) zahrnuje úzký obor frekvencí od $4 \cdot 10^{14}$ do $8 \cdot 10^{14}$ Hz (asi 800 až 400 nm), na který je citlivé lidské oko. Toto vlnění je vyzařováno velmi teplými tělesy, pro něž maximum křivky záření černého tělesa leží v uvedeném intervalu, např. vlákno žárovky. Vzniká také při kvantových přechodech z atomových a iontových excitovaných stavů, nebo při pohybu nabitých částic v synchrotronech. Tato část spektra je využívána v nejdůležitějším lidském receptoru - zraku.

Ultrafialové záření (UV) navazuje na fialovou část viditelného záření. Frekvence jsou v oblasti $8 \cdot 10^{14}$ až 10^{17} Hz (~ 400 nm až ~ 1 nm). Záření vzniká při kvantových přechodech z vysoce excitovaných stavů, které jsou blízké ionizaci. To vysvětluje chemické důsledky ultrafialového záření, např. vznik ozonu ze vzdušného kyslíku. Při spektroskopickém využití ultrafialového záření se z tohoto důvodu pracuje v dusíkové atmosféře nebo vakuu.

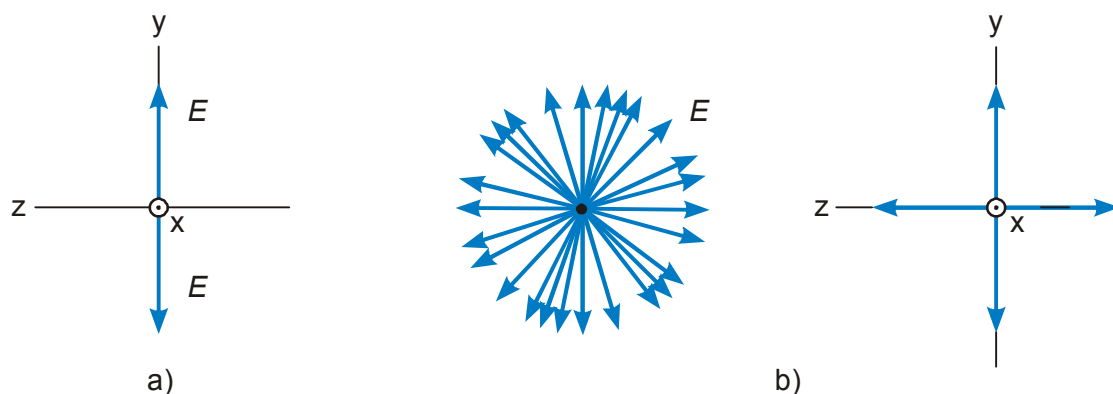
Rentgenové záření mající frekvenci v oboru 10^{17} až 10^{18} Hz (10^{-9} až 10^{-11} m) vzniká např. v rentgenových trubiciích při dopadu urychlených elektronů na anodu. Využívá se k průmyslové a zdravotnické diagnostice.

γ -záření je velmi energetické záření o frekvencích 10^{18} až 10^{23} Hz (10^{-10} až 10^{-25} m), které vzniká při kvantových přechodech v jádrech atomů, např. při jaderných reakcích. γ -záření vyšších frekvencí je pozorováno jen jako kosmické záření.

3.7.5 Polarizace elektromagnetického vlnění

V odd. 3.7.1 a 3.7.2 jsme viděli, že obě složky elektromagnetického vlnění \vec{E} a \vec{B} jsou na sobě závislé. Při popisu elektromagnetického vlnění stačí tedy uvažovat jednu složku, zpravidla elektrickou složku \vec{E} . Tímto způsobem budeme popisovat elektromagnetické vlnění i v tomto oddíle.

Charakteristickým rysem příčného vlnění je jeho **polarizace**. Na obr. 3.19 je znázorněno elektromagnetické vlnění, jehož elektrická složka kmitá v rovině xy. Takové vlnění se nazývá **lineárně polarizované** a rovina, ve které kmitá vektor \vec{E} , se nazývá **rovina kmitů**. Při pohledu proti směru šíření vlnění jsou všechny kmitající vektory v zákrytu (obr. 3.21a). Přírodní světlo nebo vlnění běžných zdrojů v ultrafialovém, viditelném nebo infračerveném oboru pochází od velkého množství zdrojů na úrovni atomů a molekul. Výsledné vlnění obsahuje vlnění s různými rovinami kmitů a s náhodnými fázemi. V obecném bodě výsledné elektrické pole kmitá v rovině kolmé ke směru šíření vlnění, ale jeho směr se náhodně mění (obr. 3.21b). Toto vlnění se nazývá **nepolarizované**. Jestliže v dostatečně dlouhém časovém intervalu sečteme všechny y-ové a z-ové složky vektorů \vec{E} , výsledné průměty do osy y a z budou mít stejné velikosti. Proto se nepolarizované vlnění schématicky znázorňuje pomocí dvou kolmých průmětů stejné velikosti (obr. 3.21b).

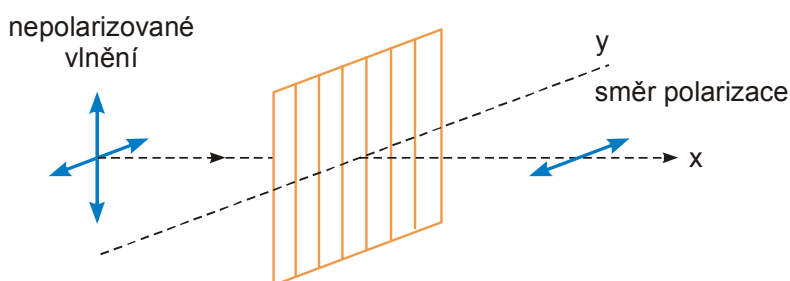


Obr. 3.21 (a) Lineárně polarizované vlnění, (b) nepolarizované vlnění

Lineárně polarizované vlnění, způsoby polarizace

Z nepolarizovaného vlnění lze získat lineárně polarizované vlnění několika způsoby.

- a) Polarizační filtry představují pro nepolarizované vlnění překážku ve tvaru „plotu“ (obr. 3.22), jehož latky mají různý charakter podle spektrálního oboru. V mikrovlnném oboru jsou polarizační filtry vytvářeny soustavou tenkých kovových vláken, v oblasti infračervené, viditelné a ultrafialové jsou polarizační filtry tvořeny dlouhými, většinou polymerními molekulami, které jsou orientovány jedním směrem. Po dopadu nepolarizovaného vlnění na polarizační filtr se absorbuje ta část elektrického pole vlnění, která je rovnoběžná s „latkami“. Např. v případě mikrovlnného polarizačního filtru volné elektrony v kovu mohou být snáze posunovány ve směru délky vláken, naopak v kolmém směru je průměr vláken příliš malý ve srovnání s vlnovou délkou a nedovoluje účinnou absorpci. Po průchodu je tak vlnění polarizováno tak, že rovina kmitů je kolmá na „latky“ polarizačního filtru (obr. 3.22). Směr, podél kterého kmitá procházející složka intenzity elektrického pole, se nazývá **směr polarizace**.

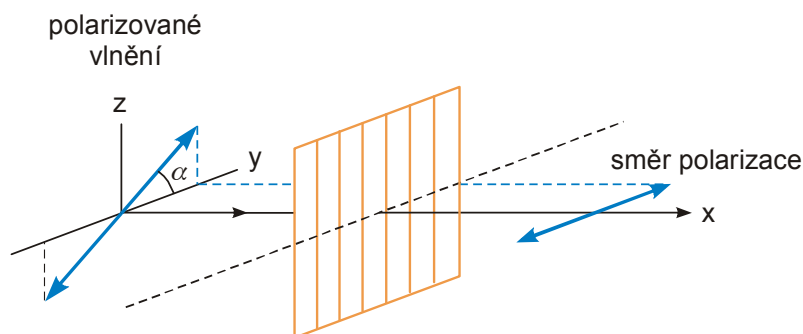


Obr. 3.22 Vznik lineárně polarizovaného vlnění průchodem polarizačním filtrem. Rovina kmitů polarizovaného vlnění je rovina xy , směr polarizace je y .

Uvažujeme případ, kdy na polarizační filtr dopadá lineárně polarizované vlnění o amplitudě E , jehož rovina kmitů svírá se směrem polarizace obecný úhel α (obr. 3.23). Toto lineárně polarizované vlnění můžeme rozložit na horizontální a vertikální složku $E_y = E \cos \alpha$ a $E_z = E \sin \alpha$. Prošlé vlnění bude obsahovat pouze složku rovnoběžnou se směrem polarizace polarizátoru. Protože intenzita vlnění je úměrná čtverci amplitudy, dostáváme vztah mezi intenzitou I prošlého a intenzitou I_0 dopadající vlnění nazývaný Malusův zákon

$$I = I_0 \cos^2 \alpha \quad (3.67)$$

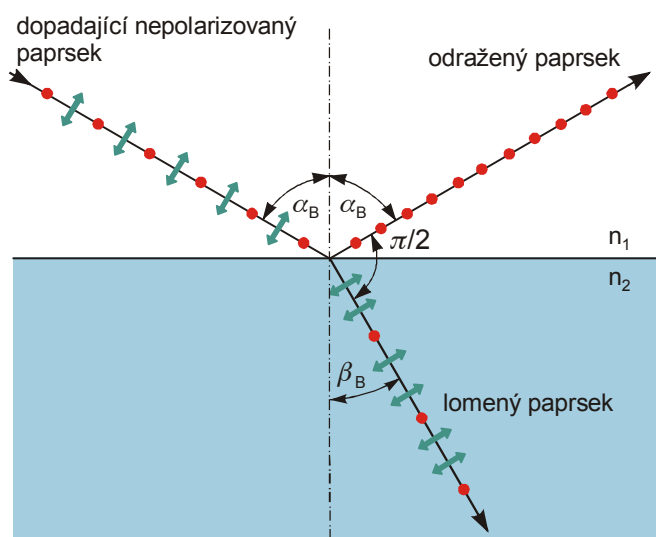
Speciálně, jestliže $\alpha = \pm \pi/2$, intenzita prošlého vlnění $I = 0$. To je v souladu s tím, že intenzita vlnění je po průchodu zkříženými polarizačními filtry nulová.



Obr. 3.23 Odvození Malusova zákona

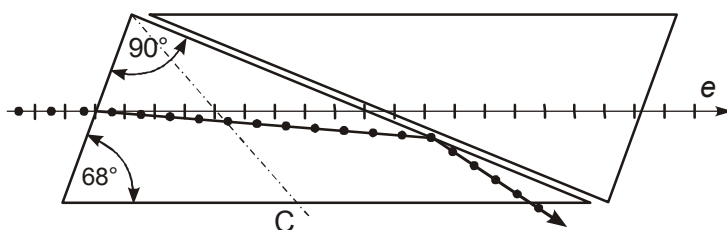
- b) Další způsob polarizace představuje **polarizace odrazem**. Předpokládejme, že na rozhraní dvou prostředí o indexech lomu n_1 a n_2 dopadá nepolarizované vlnění, které symbolicky znázorníme tak, že obsahuje stejně velké složky v rovině dopadu a v rovině k ní kolmé (obr. 3.24 šípky a body). Při odrazu dojde vždy k částečné polarizaci. Odražené vlnění je úplně polarizované, jestliže odražený a lomený paprsek svírají úhel $\pi/2$. Příslušný úhel dopadu se nazývá Brewsterův úhel α_B . Ze zákona lomu pak dostaneme

$$\alpha_B = \arctg \frac{n_2}{n_1} \quad (3.68)$$



Obr. 3.24 Polarizace odrazem

- c) Lineárně polarizované vlnění může být získáno využitím **dvojlomu**. Tento jev nastává v anizotropních prostředích, např. krystalech. Paprsek elektromagnetického vlnění, který vstoupí do takového krystalu ve směru jiném, než je tzv. optická osa krystalu, se rozštěpí na dva paprsky: **řádný** (značí se o od slova ordinary) se řídí zákonem odrazu a lomu, a **mimořádný** (e podle slova extraordinary) se těmito zákony neřídí. Vlnění v řádném a mimořádném paprsku je lineárně polarizované v rovinách k sobě kolmých. Vhodným uspořádáním je možné jeden paprsek eliminovat a získat tak lineárně polarizované vlnění, jak je ukázáno na obr. 3.25.



Obr. 3.25 Nicolův polarizační hranol

Skládání dvou vlnění lineárně polarizovaných v rovinách k sobě kolmých

Kolmé roviny kmitů dvou lineárně polarizovaných vlnění o stejné frekvenci, které budeme skládat, ztotožníme s rovinami xy a xz . Přitom kladný směr osy x je totožný se směrem šíření

vlnění. Fázový rozdíl obou vlnění je φ . Vektory intenzity elektrického pole, které popisují obě vlnění polarizovaná v rovinách xy a xz, jsou určeny vlnovými funkcemi

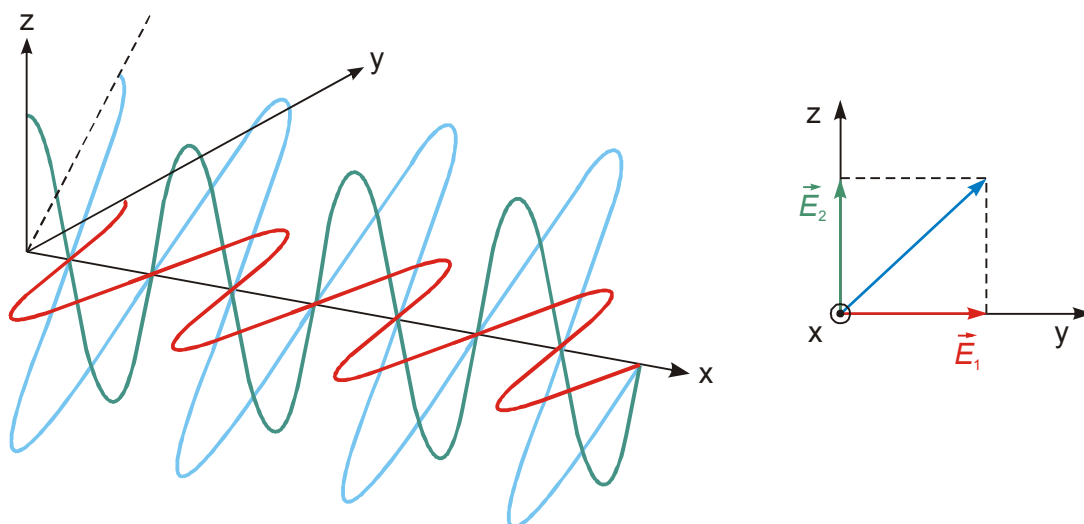
$$E_1 = E_{1,\max} \cos(kx - \omega t), \quad (3.69)$$

$$E_2 = E_{2,\max} \cos(kx - \omega t + \varphi) \quad (3.70)$$

a) V případě, že fázový rozdíl $\varphi = 0$, můžeme snadno vyloučit čas t a x :

$$E_2 = \frac{E_{2,\max}}{E_{1,\max}} E_1 \quad (3.71)$$

Koncový bod výsledného vektoru \vec{E} opisuje úsečku, jejíž směr je ve všech bodech vlnění a ve všech časech stejný a zároveň kolmý ke směru šíření vlnění (obr. 3.26). Kmitající vektor \vec{E} intenzity elektrického pole popisující výsledné vlnění leží tedy stále v jedné rovině. Výsledné vlnění je opět lineárně polarizované. Obdobný výsledek bychom obdrželi pro fázový posun $\varphi = k\pi$, kde k je celé číslo. *Skládáním dvou lineárně polarizovaných vlnění, které kmitají ve fázi (nebo v opačné fázi), vznikne opět lineárně polarizované vlnění.*



Obr. 3.26 Skládání dvou lineárně polarizovaných vlnění ve fázi

b) V případě, že fázový rozdíl $\varphi = \frac{\pi}{2}$ a amplitudy jsou navíc stejné $E_{1,\max} = E_{2,\max} = E_0$, rovnice (3.69) a (3.70) přejdou na tvar

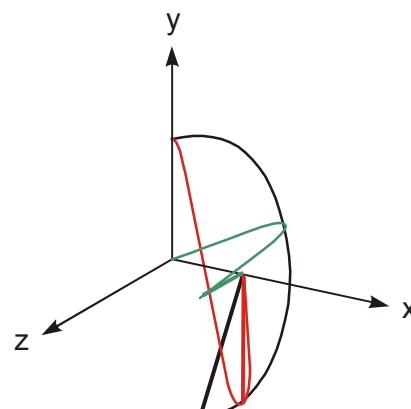
$$E_1 = E_0 \cos(kx - \omega t),$$

$$E_2 = -E_0 \sin(kx - \omega t).$$

Po umocnění obou rovnic a úpravě dostaneme rovnici kružnice

$$E_1^2 + E_2^2 = 1 \quad (3.72)$$

Výsledkem je tedy vlnění, kdy koncový bod vektoru \vec{E} opisuje v průmětu do roviny yz kružnici. Zároveň postupuje rychlosti c podél osy x (obr. 3.27). Opisuje tak



Obr. 3.27 Vznik cirkulárně polarizovaného vlnění

šroubovici s kružnicovým průřezem. Takové vlnění označujeme jako **církulárně polarizované**. Jestliže fázový rozdíl $\varphi = \frac{\pi}{2}$, jedná se o levotočivou šroubovici a hovoříme o

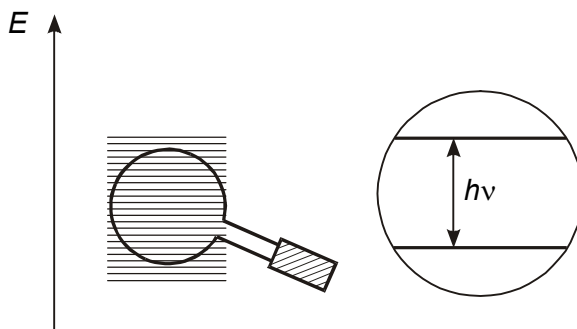
vlevo církulárně polarizovaném vlnění. Jestliže fázový rozdíl $\varphi = -\frac{\pi}{2}$, jedná se o pravotočivou šroubovici a hovoříme o **vpravo církulárně polarizovaném vlnění**.

- Církulárně polarizované vlnění se využívá v chiroptických spektroskopiích (elektronový církulární dichroismus, vibrační církulární dichroismus, Ramanova optická aktivita) k určování absolutní konfigurace malých a středních chirálních molekul a ke studiu struktury velkých chirálních molekul, jako jsou biologicky významné molekuly (peptidy, proteiny, cukry, alkaloidy, DNA).
- c) V obecném případě, kdy nejsou splněny podmínky pro fázový rozdíl a amplitudy uvedené v bodech a) a b), vznikne skládáním dvou vlnění lineárně polarizovaných v kolmých rovinách vlnění **elipticky polarizované**. Koncový bod výsledného vektoru \vec{E} opisuje šroubovici eliptického průřezu.

4 Úvod do kvantové fyziky

V mechanice jsme popisovali fyzikální objekty na různé úrovni aproximace jako hmotné body, soustavy hmotných bodů nebo jako tuhá či deformovatelná tělesa. V těchto případech jsou polohy hmotných bodů, kterými jsou tělesa tvořena, přesně určeny. V elektromagnetismu, v nauce o vlnění a v optice jsme zavedli pole a vlnění, která se rozprostírají v prostoru a nejsou přesně lokalizovaná. Při popisu systémů molekulárních až subatomárních rozměrů a interakce elektromagnetického vlnění s těmito objekty musí být klasický formalismus, ve kterém je oddělen „popis částic“ a „popis vlnění“, nahrazen novým formalismem, který je použit v **kvantové fyzice**. V této kapitole budou nejprve popsány fyzikální děje, které nemohou být vysvětleny na základě klasické fyziky. Dále budou formulovány základy kvantové mechanického popisu, který bude využit pro řešení stavů několika jednoduchých systémů.

Počátky kvantové fyziky spadají do roku 1900, kdy Max Planck vyslovil hypotézu, podle které energie oscilátoru může nabývat pouze určitých diskrétních hodnot $E_n = nh\nu$, kde n je celé číslo, ν je frekvence oscilátoru a h je **Planckova konstanta** velmi malé hodnoty, $h = 6,626 \cdot 10^{-34}$ J s (symbol h z německého *Hauptkonstante*). Jestliže energie nemůže nabývat všech spojitých hodnot, nýbrž nabývá pouze určitých diskrétních hodnot, říkáme že je **kvantována**. Rozdíly mezi sousedními hodnotami energie, tzv. **energetickými hladinami**, jsou tak malé, že při makroskopickém popisu oscilátoru jsou nezjistitelné (obr. 4.1) a energie makroskopického oscilátoru se jeví, jakoby nabývala spojitých hodnot*.



Obr. 4.1 Kvantování energie makroskopického oscilátoru

V této kapitole popíšeme fyzikální děje, při jejichž vysvětlení selhává klasický fyzikální popis, ve kterém jsou částice a vlnění popsány zcela odlišným způsobem. Tyto děje vysvětlíme, jestliže zavedeme duální popis částic a vlnění, ve kterém přisoudíme jak částicím tak vlnění současně vlastnosti částic i vlnění. V následující kap. 6 pak budou formulovány základní principy **kvantové mechaniky**, která je matematickým formalismem popisu kvantových vlastností. Pomocí tohoto formalismu pak vyřešíme některé jednoduché úlohy, jako jsou energetické stavy částice v potenciálové krabici, energetické stavy lineárního harmonického oscilátoru a energetické stavy elektronu ve vodíkovém atomu.

4.1 Záření černého tělesa

V kap. 4 bylo ukázáno, že formou existence elektromagnetického pole je elektromagnetické vlnění. Pojem „elektromagnetické vlnění“ často nahrazujeme pojmem „**elektromagnetické záření**“ a hovoříme o různých spektrálních oborech elektromagnetického záření jako o určitém záření, např. o viditelném záření, infračerveném záření nebo rentgenovém záření.

* V odd. 5.6.5 uvidíme, že kvantově mechanické řešení poskytuje pro hodnotu energie lineárního oscilátoru jiný vztah $E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) h\nu$. Energetické hladiny podle Planckovy hypotézy poskytují, jak se můžete snadno přesvědčit, správné hodnoty rozdílů mezi sousedními energetickými hladinami.

Elektromagnetické záření interaguje s hmotou v případě transparentních látek převážně „pasivně“. Výsledkem interakce je odraz od povrchu nebo lom do prostředí.

Při „aktivní“ interakci s látkou je záření částečně pohlceno, čili absorbováno, a částečně odraženo. Absorpce závisí na vlnové délce a to je příčinou toho, že vidíme barevně: Jestliže např. z dopadajícího bílého světla je pohlcena převážně červená a modrá část spektra, jeví se látka jako zelená. Látky tmavších odstínů barev absorbují více než světlejší odstíny.

Všechna tělesa elektromagnetické záření uvolňují - emitují. V závislosti na jejich teplotě leží maximum intenzity emitovaného záření v odlišných částech spektra. Např. ohřívá-li se postupně odporová spirála průchodem proudu, emituje nejprve záření s maximem v infračervené části spektra, kterou nevidíme, postupně se zvyšující se teplotou se maximum emitovaného záření posunuje ke kratším vlnovým délkám až do viditelné části spektra.

Výkon záření P [W] emitovaný tělesem plochy S je popsán experimentálně zjištěným zákonem:

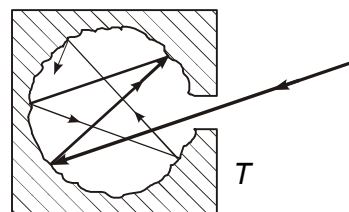
$$P = e S \sigma T^4 \quad (4.1)$$

kde $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$ je Stefanova-Boltzmannova konstanta, T je termodynamická teplota, e je emisivita charakterizující emisní vlastnosti látky, $0 \leq e \leq 1$.

Výkon záření vztažený na jednotku plochy se označuje jako **intenzita vyzařování** *: M [W m^{-2}] :

$$M = e \sigma T^4 \quad (4.2)$$

V případě, že $e = 1$, jedná se o dokonalý zářič. Jestliže je těleso dokonalý zářič, je zároveň i dokonalý absorbátor**. V tomto případě je veškerá energie dopadajícího záření absorbována a žádná její část není odražena. Takový ideální absorbátor (emitor) se označuje jako **černé těleso**. Záření emitované černým tělesem se nazývá **záření černého tělesa**. Modelem černého tělesa je dutina o teplotě T s velmi malým otvorem (obr. 4.2). Záření dopadající do dutiny tímto otvorem je mnohonásobně odraženo a přitom částečně absorbováno tak, že postupně celá část energie je pohlcena dutinou***.



Obr. 4.2 Model černého tělesa

4.1.1 Vlastnosti záření černého tělesa

Spektrum záření rozumíme závislost vyzářené energie na vlnové délce nebo frekvenci. Černé těleso vyzařuje energii ve spojitém intervalu vlnových délek. Takové záření se označuje jako **kontinuální záření**. Záření černého tělesa nezáleží na složení černého tělesa, ale pouze na jeho teplotě. Dosadíme-li do (4.2) $e = 1$, dostáváme vztah pro celkový výkon vyzářený jednotkou plochy černého tělesa, tj. intenzitu vyzařování černého tělesa, tzv. **Stefanův-Boltzmannův zákon**

$$M = \sigma T^4 \quad (4.3)$$

* Všimněme si definice veličiny intenzita vyzařování. Při popisu zejména viditelného záření se používá další veličina zářivost nebo intenzita záření I , což je výkon vyzařovaný do jednotkového prostorového úhlu, $I = \frac{dP}{d\omega}$.

** Uvedené tvrzení je možné dokázat pomocí 2. věty termodynamické.

*** Pozorný čtenář pochopí, že jakákoli část vnitřního povrchu dutiny není sama o sobě černé těleso, protože jinak by se již po prvním dopadu paprsku na povrch dutiny všechna energie absorbovala. Nikoli materiál vnitřního povrchu dutiny, nýbrž dutina s malým otvorem je modelem černého tělesa.

Emitované záření není stejně intenzivní v celé části kontinua. Proto zavádíme **spektrální intenzity vyzařování**, M_ν a M_λ , které představují intenzitu vyzářenou v jednotkovém intervalu frekvencí ν , resp. v jednotkovém intervalu vlnových délek λ . Intenzita vyzařování je pak dána

$$M = \int_0^\infty M_\nu d\nu \quad (4.4a)$$

$$M = \int_0^\infty M_\lambda d\lambda \quad (4.4b)$$

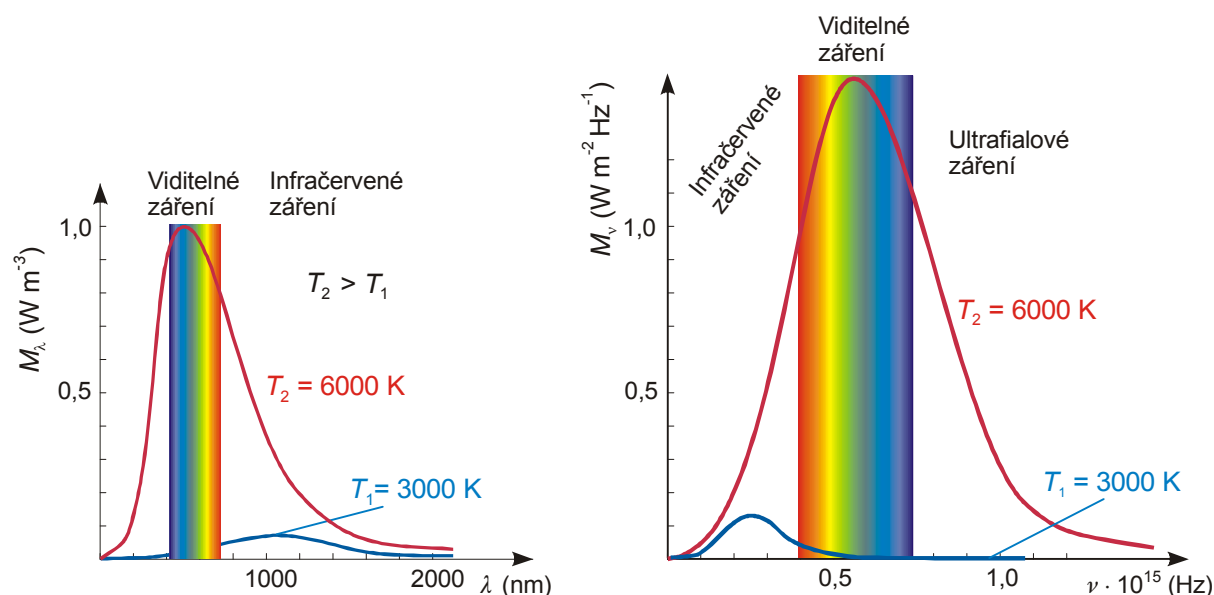
Ze vztahů (4.4) dostáváme jednotky pro spektrální intenzity, $[M_\nu] = \text{W m}^{-2} \text{Hz}^{-1}$, $[M_\lambda] = \text{W m}^{-3}$. Experimentálně zjištěný průběh spektrální intenzity vyzařování černého tělesa je pro dvě teploty na obr. 4.3. Tento průběh má následující rysy:

- Pro danou teplotu má křivka jedno maximum.
- Jestliže $T_1 < T_2$, pak $M_\lambda(T_1) < M_\lambda(T_2)$ pro všechna λ a $M_\nu(T_1) < M_\nu(T_2)$ pro všechna ν .
- Vlnová délka λ_{max} odpovídající maximu spektrální intenzity vyzařování splňuje **Wienův posunovací zákon**

$$\lambda_{\text{max}} T = 2,898 \cdot 10^{-3} \text{ K m} \quad (4.4)$$

tj. vlnová délka λ_{max} je nepřímo úměrná teplotě T .

Vysvětlení pozorovaného průběhu spektrální intenzity vyzařování pomocí klasické fyziky selhalo. První korektní vysvětlení spektrálního průběhu záření černého tělesa bylo podáno Planckem. V našich úvahách má černé těleso následující vlastnosti.



Obr 4.3 Průběh spektrálních intenzit vyzařování černého tělesa

- Částice tvořící stěny dutiny černého tělesa jsou v rovnováze s polem elektromagnetického záření. Tepelný pohyb částic excituje oscilátory elektromagnetického pole.

- Oscilátor elektromagnetického pole o frekvenci ν absorbuje nebo emituje energii, která může nabývat pouze celistvých násobků $h\nu$. Nejmenší hodnota předávané energie je

$$\Delta E = h\nu \quad (4.6)$$

a označuje se jako **kvantum energie**.

Průběh spektrální intenzity vyzařování (obr. 4.3) je dán za těchto předpokladů, tzv. **Planckovým zákonem vyzařování***

$$M_\nu d\nu = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2 (e^{h\nu/kT} - 1)} d\nu \quad (4.7a)$$

$$M_\lambda d\lambda = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)} d\lambda \quad (4.7b)$$

kde $k = 1,38 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$ je Boltzmannova konstanta a c je rychlost světla ve vakuu.

- Integrováním vztahů (4.7) přes celý obor frekvencí nebo vlnových délek získáme Stefanův-Boltzmannův zákon (4.3) (Dodatek D5).
- Nalezneme-li maximum funkce M_λ (4.7b), získáme Wienův posunovací zákon (4.4).
- Planckův zákon může být vyjádřen také pro veličiny **spektrální hustota zářivé energie**

w_λ a w_ν , kde $w_\lambda = \frac{dw}{d\lambda}$, $w_\nu = \frac{dw}{d\nu}$, $[w_\lambda] = \text{J m}^{-4}$, $[w_\nu] = \text{J m}^{-3} \text{ Hz}^{-1}$. Mezi intenzitou

vyzařování M a hustotou zářivé energie platí vztah $w = \frac{4}{c} M$. Obdobný vztah platí mezi příslušnými spektrálními veličinami, např. w_ν a M_ν .

$$w_\nu = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3 (e^{h\nu/kT} - 1)} \quad (4.7c)$$

$$w_\lambda = \frac{8\pi hc}{\lambda^5 (e^{hc/\lambda kT} - 1)} \quad (4.7d)$$

Odvození Planckova zákona je všeobecně považováno za počátek rozvoje kvantové mechaniky. Funkční závislost (4.7) našel A. Einstein při postulování procesů stimulované a spontánní emise a absorpce, jak bude ukázáno v následujícím odstavci.

4.1.2 Einsteinovy koeficienty absorpce a emise

Při popisu interakce záření a souboru částic v dutině vyjdeme z předpokladu, že částice a záření jsou v termodynamické rovnováze. Dále přijmeme následující předpoklady:

- Částice, kterými je dutina tvořena, jsou stejného druhu a jejich energie může nabývat pouze diskrétních hodnot. Nacházejí se v tzv. energetických hladinách.
- Předávání energie zářením o frekvenci ν se může dít pouze po kvantech $\Delta E = h\nu$ a v těchto kvantech se energie šíří. Kvantum energie záření o frekvenci ν budeme označovat jako **foton** o frekvenci ν (částicový charakter fotonu bude osvětlen v odd. 4.2.1 – 4.2.3).

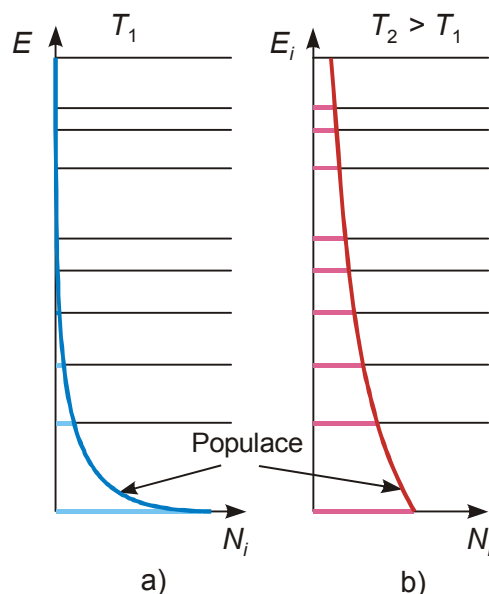
* Převod mezi vztahy (4.7a) a (4.7b) je proveden v dodatku D4.

- Obsazení jednotlivých energetických hladin je dáno **Boltzmannovým rozdělením**

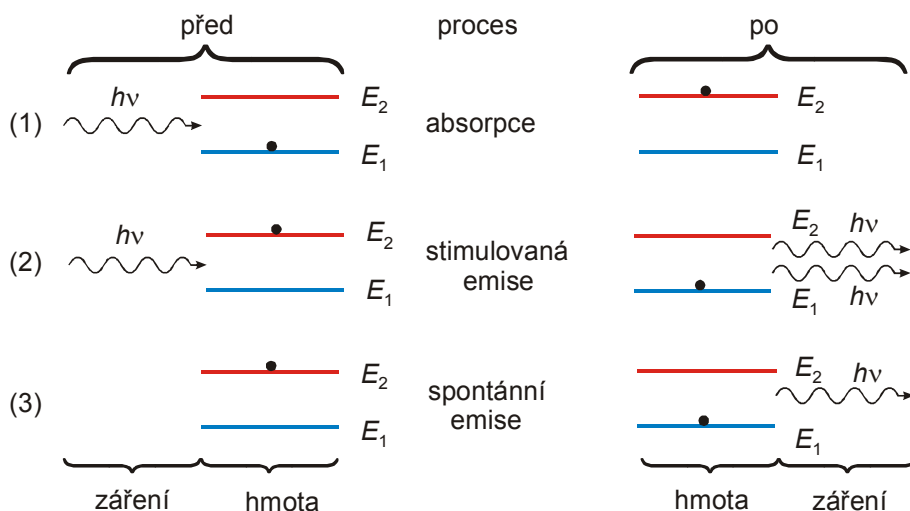
$$N_i = N_0 e^{-\frac{E_i - E_0}{kT}} \quad (4.8)$$

kde N_i je počet částic s energií E_i , N_0 je počet částic v základním stavu, tj. stavu s nejnižší hodnotou energie E_0 , T je termodynamická teplota, k je Boltzmannova konstanta. Počet částic majících určitou energii označujeme jako **populace hladiny**. Boltzmannův zákon je graficky zachycen na obr. 4.4. Při nízkých teplotách T_1 jsou významně obsazovány (populovány) pouze nejnižší energetické hladiny (obr. 4.4a), při vyšších teplotách $T_2 > T_1$ jsou rovněž populovány vyšší energetické hladiny (obr. 4.4b).

Uvažme nyní objemovou jednotku dutiny. Energie záření v jednotce objemu je dána hustotou zářivé energie. Z celé soustavy energetických hladin, na kterých se mohou částice dutiny nacházet, uvažíme pouze dvě hladiny s energiemi E_1 a E_2 . Rozdíl těchto energií označíme $\Delta E = E_2 - E_1$. Populace hladin E_1 a E_2 v objemové jednotce jsou N_1 a N_2 . Při interakci s elektromagnetickým zářením může dojít k následujícím procesům: absorpci, stimulované emisi a spontánní emisi (obr. 4.4).



Obr. 4.4 Boltzmannův zákon populace energetických hladin, (a) při teplotě T_1 , (b) při teplotě $T_2 > T_1$



Obr. 4.4 Energetické hladiny částic černého tělesa a procesy, ke kterým dochází při interakci hmoty se zářením: absorpce (1), stimulovaná emise (2), spontánní emise (3)

1. Foton o frekvenci ν je absorbován částicí o energii E_1 , tato částice získá energii $\Delta E = h\nu$ a přejde do stavu o energii E_2 . Pravděpodobnost P_1 , že jedna částice uskuteční tento přechod, je úměrná spektrální hustotě zářivé energie w_ν o frekvenci ν , $P_1 = B_{12} w_\nu$. Popsaný

děj se nazývá **absorpce** a koeficient úměrnosti B_{12} se nazývá **Einsteinův koeficient absorpce**.

2. Foton téže frekvence ν stimuluje přechod částic ze stavu o vyšší energii E_2 do stavu o nižší energii E_1 . Rozdíl energií se uvolní jako foton stejných vlastností, jaké měl foton, který proces vyvolal. Vzniklý foton je s původním fotonem koherentní. Proces se označuje jako stimulovaná emise. Pravděpodobnost přechodu P_2 částice ze stavu o energii E_2 do stavu o energii E_1 stimulovanou emisí je úměrná spektrální hustotě zářivé energie w_ν frekvence ν , $P_2 = B_{21} w_\nu$. Koeficient úměrnosti B_{21} je **Einsteinův koeficient stimulované emise**.
3. Kromě těchto jevů, které závisejí na spektrální hustotě zářivé energie, dochází k samovolnému ději, při kterém částice mající vyšší energii přechází samovolně na nižší energetickou hladinu za současného vyzáření energie $\Delta E = h\nu$. Této energii odpovídá foton o frekvenci $\nu = \frac{\Delta E}{h} = \frac{E_2 - E_1}{h}$. Popsaný děj se nazývá spontánní emise a jeho pravděpodobnost P_3 je dána **Einsteinovým koeficientem spontánní emise** A_{21} , $P_3 = A_{21}$.

V termodynamické rovnováze se zachovává populace jednotlivých hladin. Proto počet přechodů z hladiny E_1 na hladinu E_2 je stejný jako počet přechodů z hladiny E_2 na hladinu E_1 . Přitom počet přechodů z určité hladiny je úměrný počtu částic v této hladině, tj. populaci této hladiny

$$N_1 B_{12} w_\nu = N_2 B_{21} w_\nu + N_2 A_{21} \quad (4.9)$$

Odtud pro poměr N_1/N_2 populace hladin E_1 a E_2 dostáváme

$$\frac{N_1}{N_2} = \frac{B_{21} w_\nu + A_{21}}{B_{12} w_\nu} \quad (4.10)$$

Použijeme Boltzmannovo rozdělení (4.8) pro vyjádření tohoto poměru

$$\frac{N_1}{N_2} = e^{\frac{E_2 - E_1}{kT}} = e^{\frac{h\nu}{kT}} \quad (4.11)$$

Absorpce a stimulovaná emise jsou přechody stimulované zářením, lze tedy o nich předpokládat, že jsou stejně pravděpodobné. Einsteinovy koeficienty stimulovaných dějů se rovnají, $B_{12} = B_{21}$. Úpravami pak dostaneme pro spektrální hustotu zářivé energie

$$w_\nu = \frac{\frac{A_{21}}{B_{12}}}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} \quad (4.12)$$

Aby záření v dutině splňovalo Planckův zákon, musí platit

$$\frac{A_{21}}{B_{12}} = \frac{8\pi h\nu^3}{c^3} \quad (4.13)$$

odvozený vztah (4.12) pak představuje **Planckův zákon vyzařování** (4.7c) diskutovaný v odd. 4.1.1, který udává závislost spektrální hustoty zářivé energie černého tělesa na frekvenci záření v případě rovnovážného stavu černého tělesa a záření.

4.1.3 Laser

Slovo laser je akronym výrazu Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation. Laser, objevený v 60. letech, je zařízení k získávání vysoce monochromatického koherentního záření. Laser představuje systém, jehož činnost je založena na interakci záření s aktivním prostředím. Děje, ke kterým v laseru dochází, byly popsány v odd. 4.1.2. Činný laser však na rozdíl od záření černého tělesa **není systémem v rovnováze**.

Funkce laseru je podmíněná

- vytvořením tzv. **inverzní populace** aktivního prostředí systému,
- umístěním systému do tzv. **rezonátoru**.

Inverzní populací mezi hladinami E_1 a E_2 rozumíme takový stav, kdy populace N_2 hladiny s vyšší energií E_2 je větší než populace N_1 hladiny s nižší energií E_1 . $N_2 > N_1$, je-li $E_1 < E_2$ tj. obsazení hladin systému nesplňuje Boltzmannovo rozdělení (vztah (4.8), obr. 4.4). Proces vytvoření inverzní populace se nazývá **pumpování laseru**.

Rezonátor je dutina, která omezuje aktivní prostředí a uzavírá je na protilehlých koncích dvěma zrcadly. Rezonátor má dvě funkce v činnosti laseru.

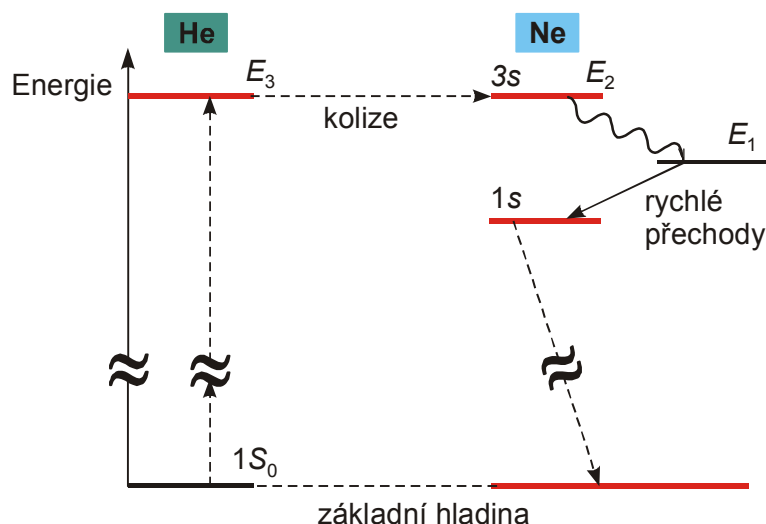
Mnohonásobnými odrazy na koncových zrcadlech prodlužuje aktivní délku laseru. Tím se zvyšuje počet fotonů, které vznikají lavinovitou reakcí.

Vzdálenost mezi zrcadly, čili délka rezonátoru, určuje vlnovou délku záření, které se na základě rezonanční podmínky zesiluje. Tímto způsobem se z několika možných vlnových délek, na nichž může laser pracovat, vybírá žádaná vlnová délka.

Helium-neonový laser

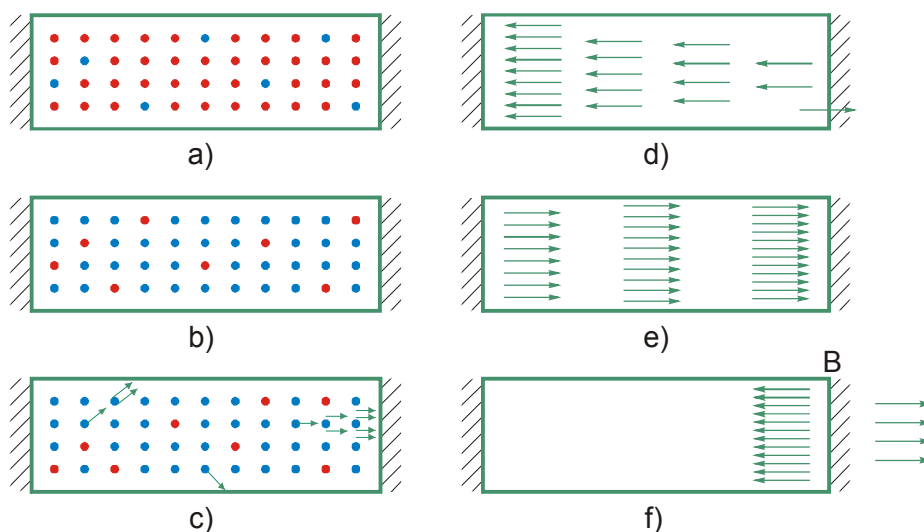
Funkci laseru vysvětlíme na případě helium-neonového laseru (He-Ne laser). Aktivní prostředí tohoto laseru je tvořeno směsí hélia a neonu v poměru 10:1. Schéma energetických hladin obou prvků, které jsou důležité pro činnost laseru, je na obr. 4.6. Hladina s nejnižší energií se označuje jako **základní hladina**, hladiny s vyšší energií jsou **hladiny excitované**.

V procesu **pumpování laseru** je převedeno aktivní prostředí z rovnovážného stavu do stavu **inverzní populace**. V případě He-Ne laseru je elektrickým výbojem dodávána energie atomům He, které jsou tak převedeny do vyšších excitovaných energetických hladin, z nichž nezářivými přechody přejdou do hladiny, která je na obr. 4.6 označena jako E_3 . Srážkami je tato energie předána atomům Ne, neboť jejich excitovaná hladina označená jako E_2 je energeticky blízká hladině E_3 helia (tzv. kolizní přechody). Hladina E_2 neonu se označuje jako hladina **metastabilní**, protože pravděpodobnost přechodu na nižší hladinu označenou E_1 je malá. Hladina E_2 má tak dostatečně dlouhou dobu života, aby mohla být vytvořena větší populace této hladiny v porovnání s populací hladiny E_1 . Dále je požadováno, aby pravděpodobnosti přechodů z hladiny E_1 na nižší hladiny byly velké, tj. aby se populace hladiny E_1 nezvyšovala. To jsou dvě podmínky nutné k tomu, aby se vytvořila a udržela inverzní populace hladin E_2 a E_1 .



Obr. 4.6 Schéma energetických hladin v He-Ne laseru

Schématicky jsou jednotlivé fáze činnosti laseru znázorněny na obr. 4.7. Rovnovážný stav je charakterizován vyšší populací nižšího energetického stavu (obr. 4.7a). Při buzení laseru vzniká inverzní populace (obr. 4.7b). Náhodný foton energie $h\nu = E_2 - E_1 = \Delta E$, který dopadne na uvažovaný systém, vyvolá obecně absorpci a stimulovanou emisi. Jestliže je mezi hladinami vytvořena inverzní populace, je počet přechodů z vyšší na nižší hladinu větší než počet přechodů z nižší hladiny na vyšší a stimulovaná emise tak převládá nad absorpcí. Výsledkem jednoho aktu stimulované emise je vznik dvou koherentních fotonů, tj. fotonů majících stejnou frekvenci, polarizaci, fázi a šířících se stejným směrem (obr. 4.7c). Tyto dva fotony vyvolají další dvě stimulované emise za vzniku čtyř koherentních fotonů a tento proces se může lavinovitě šířit v aktivním prostředí s inverzní populací. Náhodný foton, který směřuje mimo osu trubice, nevyvolá významné šíření lavinovitého děje, protože je brzy pohlcen



Obr. 4.7 Rezonátor laseru a lavinovité šíření stimulované emise: (a) rovnovážný stav aktivního prostředí, (b) inverzní populace, (c) stimulovaná emise vyvolaná dopadem náhodného fotonu, (d-f) lavinovité šíření stimulované emise podél osy rezonátoru, (f) výstup části fotonů. Prázdný kroužek znázorňuje částici ve stavu s energií E_1 , plný kroužek částici ve stavu s energií E_2 .

ve stěnách trubice (obr. 4.7c). Naopak stimulovaná emise se významně lavinovitě šíří podél osy trubice (obr. 4.7d). Zrcadla na koncích rezonátoru navíc prodlužují účinnou dráhu, na které dochází k pokračování tohoto procesu. Zrcadlo v místě B rezonátoru je částečně propustné, takže část fotonů, které chceme činností laseru získat, tudy vystupují (obr. 4.7f).

Schéma energetických hladin reálných atomárních a molekulárních systémů není tak ideální, jak je znázorněno na obr. 4.6. Hladiny mívají řadu podhladin, takže proces může současně probíhat pro fotony několika frekvencí (vlnových délek). Vlnění v uzavřené trubici se zesiluje, jestliže vlnová délka splňuje podmínku $\lambda_n = 2\ell/n$, kde ℓ je délka trubice a n je celé číslo. Volbou délky rezonanční trubice se tak může zesílit vlnění požadované vlnové délky.

Vlastnosti laserového záření a užití laseru

Výsledkem celého procesu je vznik laserového záření, které má následující vlastnosti:

- Je koherentní a monochromatické, protože stimulovanou emisí dochází k zvýšení počtu fotonů stejných vlastností.
- Bývá často polarizované mnohonásobnými odrazy.
- Laserový svazek má malou rozbíhavost, čili divergenci, protože se významně zvětšuje počet fotonů, které směřují podél osy trubice.

Lasery mohou pracovat v kontinuálním nebo pulzním režimu.

Při práci s lasery je třeba zachovávat speciální bezpečnostní opatření. Např. He-Ne laser o výkonu 1 mW může dosahovat intenzity slunečního záření za jasného dne (1 mW cm^{-2}) a může při přímém pohledu nebo odrazu poškodit zrak.

Lasery se staly důležitým zařízením, které se využívá ve spektroskopii pro technické, analytické a vědecké účely, užívá se v defektoskopii, lékařství a při přenosu informací.

4.2 Elektrony a fotony

V předchozím oddíle byly při vysvětlení jevů, které souvisely s interakcí záření s hmotou, zavedeny pojmy energetická hladina a kvantum záření – foton. V tomto oddíle bude diskutován duální charakter jak částic, tak záření.

4.2.1 Fotoelektrický jev

Fotoelektrický jev spočívá v uvolňování elektronů z katody, jestliže na ni za vhodných podmínek dopadá záření. Tím dochází k průchodu proudu mezi anodou a katodou*. Budeme diskutovat experimentální uspořádání znázorněné na obr. 4.8. Katoda K je umístěna v evakované baňce a dopadá na ni monochromatické záření o frekvenci ν . Za určitých podmínek ampérmetr v obvodu zaznamená průchod proudu.

Popsaný děj bychom mohli bez kvantových představ vysvětlit následovně: Elektrony jsou vázány vazebnými silami v katodě. Minimální energie potřebná k uvolnění elektronu je charakteristická pro daný materiál a nazývá se **výstupní práce** W . Dopadající záření předává elektronům v katodě energii. Jestliže dodaná energie je větší než výstupní práce, elektrony se uvolní, jsou přitaženy k anodě A a obvodem prochází proud. Podle tohoto vysvětlení by při

* Tento jev se přesněji označuje jako vnější fotoelektrický jev. Vnitřní fotoelektrický jev se pozoruje převážně u polovodičů: Dopad fotonu vyvolá přechod elektronu z valenčního do vodivostního pásu. V důsledku toho vzniká ve valenčním pásu díra. Elektron ve vodivostním pásu přispívá ke zvětšení vodivosti a tedy průchodu proudu.

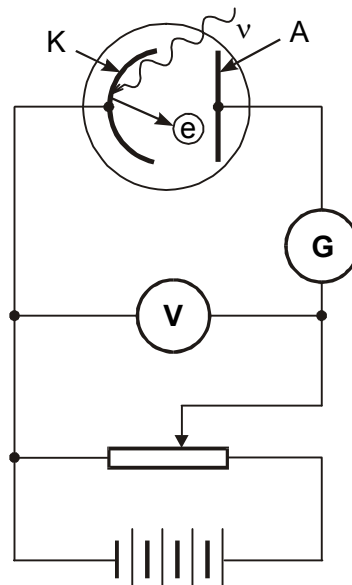
dostatečné intenzitě záření proud obvodem procházel a byl by tím větší, čím větší by byla intenzita záření.

Jestliže zdroj napětí mezi elektrodami je přepólován, tj. elektroda A má menší potenciál než elektroda K, uvolňované elektrony jsou od elektrody A odpuzovány. Obvodem projdou pouze ty elektrony, které při opuštění materiálu získaly dostatečnou kinetickou energii. Tuto kinetickou energii E_k můžeme určit pomocí tzv. **brzdného napětí** U_s . Je to hodnota napětí mezi elektrodou K a elektrodou A, při které právě začíná protékat obvodem proud, $U_s = V_K - V_A > 0$, kde V_A je potenciál elektrody A a V_K je potenciál elektrody K.

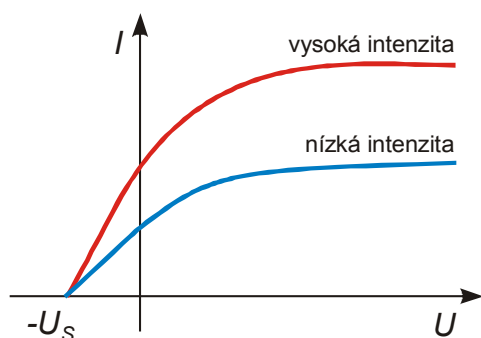
$$e U_s = E_k \quad (4.14)$$

Při studiu fotoelektrického jevu se však pozorují následující zákonitosti, které v rámci výše uvedeného popisu nelze vysvětlit:

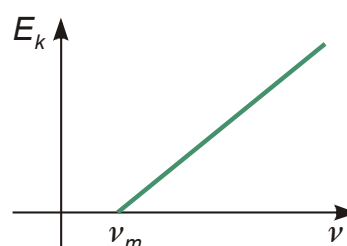
1. Průchod proudu se pozoruje pouze pro záření, jehož frekvence je větší než minimální hodnota ν_m charakteristická pro materiál dané katody. Hodnota ν_m nezáleží na intenzitě dopadajícího záření.
2. Pro frekvence záření $\nu > \nu_m$, kdy je fotoelektrický jev pozorován, je proud obvodem úměrný intenzitě záření, avšak brzdné napětí nezávisí na intenzitě záření (obr. 4.9).
3. Kinetická energie uvolňovaných elektronů určena brzdným napětím (4.14) je přímo úměrná frekvenci ν záření (obr. 4.10).



Obr. 4.8 Experimentální uspořádání pro studium fotoelektrického jevu



Obr. 4.9 Závislost procházejícího proudu na napětí mezi anodou a katodou pro dvě hodnoty intenzity záření



Obr. 4.10 Závislost hodnoty kinetické energie uvolňovaných elektronů na frekvenci dopadajícího záření

Vysvětlení závislostí pozorovaných při studiu fotoelektrického jevu podal A. Einstein. Rozšířil Planckovu představu o kvantování energie oscilátoru rovněž na záření: Monochromatické záření frekvence ν se chová jako proud částic – fotonů, z nichž každá nese energii $h\nu$. Jeden foton interaguje právě s jedním elektronem a předá mu celou svoji energii. Říkáme, že záření je absorbováno. Energie fotonu se spotřebuje jednak na výstupní práci W , jednak ji elektron získá ve formě kinetické energie

$$h\nu = W + E_k \quad (4.14a)$$

$$h\nu = W + \frac{1}{2}m_e v^2 \quad (4.14b)$$

kde m_e a v jsou hmotnost a rychlost uvolněného elektronu ($v \ll c$).

Jednoduché vztahy (4.14) vysvětlují všechny pozorované experimentální závislosti.

1. K fotoelektrickému jevu dojde pouze v případě, kdy foton má dostatečnou energii, která je vyšší než výstupní práce. Mezní hodnota energie fotonu odpovídá situaci, kdy kinetická energie elektronu $E_k = 0$ J. Ze vztahu (4.14) dostáváme pro **mezní frekvenci** záření ν_m

$$\nu_m = \frac{W}{h} \quad (4.16)$$

Použijeme vztah mezi vlnovou délkou λ a frekvencí světla $\nu = c/\lambda$ (FI) a získáme podmínku pro **mezní vlnovou délku záření** λ_m . K fotoelektrickému ději dojde tehdy, jestliže vlnová délka záření $\lambda < \lambda_m$.

$$\begin{aligned} \frac{c}{\lambda_m} &= \frac{W}{h} \\ \lambda_m &= \frac{ch}{W} \end{aligned} \quad (4.17)$$

2. Větší intenzita záření frekvence $\nu > \nu_m$ znamená větší počet dopadajících fotonů, které uvolní více elektronů z povrchu kovu a zvýší procházející proud obvodem. To odpovídá dvěma křivkám závislosti proudu na obr. 4.9. Čím je větší napětí mezi anodou a katodou, tím více elektronů je k anodě přitaženo a tím je větší proud obvodem. Proto i křivky na obr. 4.9 jsou rostoucí. Jestliže všechny uvolněné elektrony doputují k anodě, pak další zvyšování napětí nevede k zvyšování proudu a dojde k jeho nasycení (křivka závislosti na obr. 4.9 dále nestoupá). Do vztahu (4.14) dosadíme za E_k vztah (4.14a) a dostáváme

$$U_s = \frac{h}{e} \nu - \frac{W}{e} \quad (4.18)$$

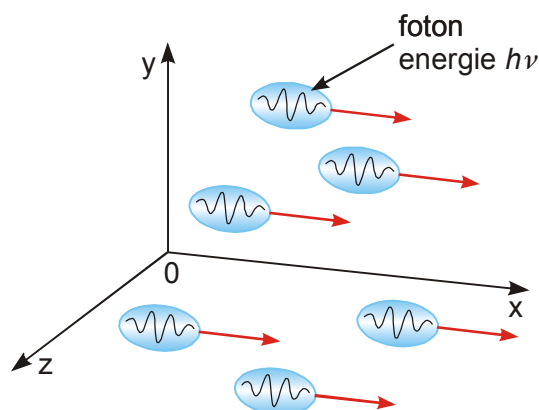
Odtud vidíme, že pro danou frekvenci ν dopadajícího záření a daný materiál katody (určující hodnotu výstupní práce W) nezávisí brzdné napětí U_s na počtu fotonů a tedy na intenzitě záření (obr. 4.9).

3. Mírou kinetické energie uvolněných fotonů je brzdné napětí U_s , jehož závislost na frekvenci je lineární a je dána vztahem (4.18). Tento průběh závislosti odpovídá obr. 4.10. Směrnice této lineární závislosti h/e může být využita k určení Planckovy konstanty h . Pozorovaná závislost kinetické energie uvolňovaných fotonů na frekvenci záření, která je znázorněna na obr. 4.10, přímo plyne ze vztahu (4.14a):

$$E_k = h\nu - W \quad (4.19)$$

V tomto oddíle bylo ukázáno, že vysvětlení pozorovaných zákonitostí při studiu fotoelektrického jevu je možné, jestliže modifikujeme představu o elektromagnetickém záření tak, že mu přiřadíme kromě vlnových vlastností vlastnosti korpuskulární. Einsteinoва představa fotonů jako kvant energie, které jsou lokalizovány v diskrétních oblastech prostoru, je znázorněna na obr. 4.11. Hustota zářivé energie a intenzita vyzařování závisejí na počtu fotonů v jednotce objemu. V následujícím oddíle 4.2.2 budeme diskutovat další korpuskulární vlastnosti záření a přiřadíme fotonu hybnost.

- Fotoelektrický jev se uplatňuje např. ve fotoelektronových spektroskopiích, které využívají UV fotony (UPS) nebo fotony s vyšší energií (XPS). Spektroskopie XPS se používá v chemické analýze (metoda ESCA, elektron spectroscopy for chemical analysis).



Obr. 4.11 Einsteinovo znázornění elektromagnetického záření jako proudu fotonů lokalizovaných v prostoru a nesoucích energii $h\nu$

4.2.2 Comptonův jev

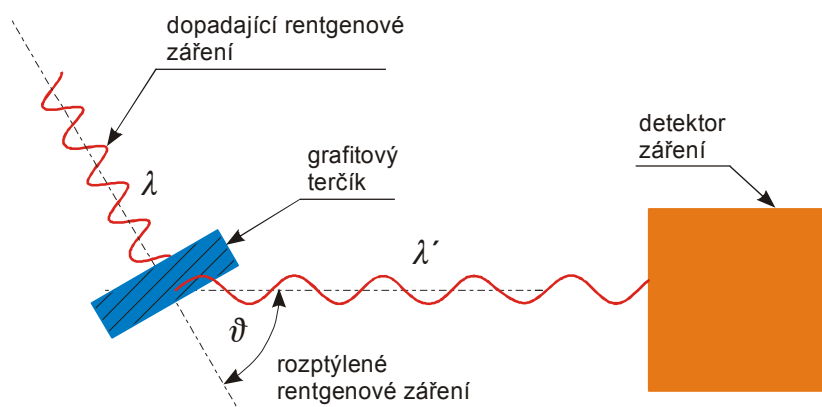
Comptonův jev spočívá ve změně vlnové délky elektromagnetického záření, ke které dochází, jestliže je záření rozptýleno na volných elektronech při dopadu na vhodně zvolený terčik. Změna vlnové délky přitom závisí na úhlu rozptylu.

Experimentální uspořádání je znázorněno na obr. 4.12. Na grafitový terčik dopadá monochromatické rentgenové záření vlnové délky λ ($\lambda \in 10^{-9} - 10^{-11}$ m). V závislosti na úhlu rozptylu je kromě původní vlnové délky λ pozorováno záření o vlnové délce λ' (obr.4.13). Experimentálně zjištěná změna vlnové délky $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ v závislosti na úhlu rozptylu ϑ je dána vztahem (vztah pro tzv. **Comptonův jev**)

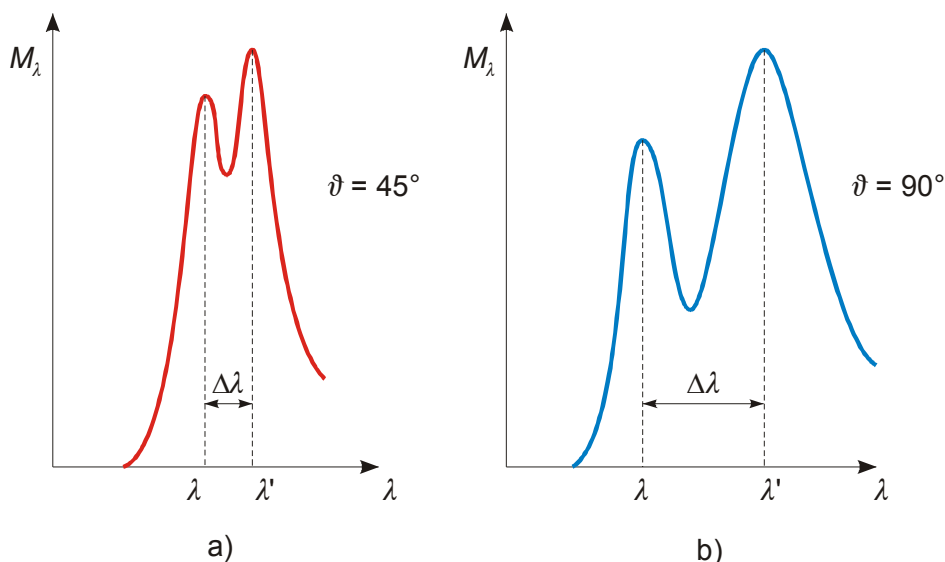
$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda \sim (1 - \cos \vartheta) \quad (4.20)$$

tj. k největší změně $\Delta\lambda$ dochází, je-li $\vartheta = 180^\circ$.

Podle klasických představ jsou elektrony v terčiku uvedeny zářením do kmitavého pohybu a vysílají rozptýlené elektromagnetické záření stejné frekvence a tedy i stejné vlnové délky, jako má dopadající záření. Klasická představa rozptylu záření je tedy v rozporu s tímto experimentem. K vysvětlení pozorovaného výsledku rozvineme duální představu fotonu.



Obr. 4.12 Experimentální uspořádání pro studium Comptonova jevu.



Obr. 4.13 Pozorovaná spektrální intenzita rozptýleného záření při Comptonově jevu pro úhly rozptylu 45° (a) a 90° (b)

V dosavadním výkladu se korpuskulární vlastnosti záření projevovaly v tom, že energie záření byla sdílená pouze po kvantech - fotonech. Nyní fotonu přiřadíme hybnost. V úvodu do speciální teorie relativity jsme uvedli vztah pro celkovou relativistickou energii E částice

$$E = \sqrt{(m_0 c^2)^2 + p^2 c^2} \quad (4.21)$$

kde m_0 je klidová hmotnost částice, p je hybnost částice a c je rychlost světla ve vakuu.

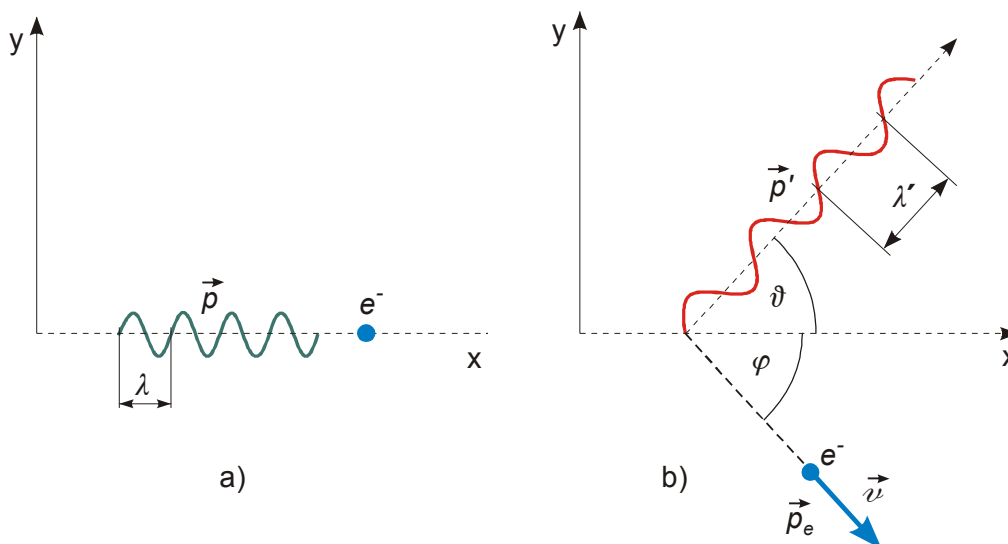
Foton má nulovou klidovou hmotnost, $m_0 = 0$. Z předchozího vztahu proto vyplývá, že energie fotonu $E = pc$. Zároveň $E = h\nu$. Odtud pro hybnost p fotonu dostáváme

$$p = \frac{h\nu}{c} \quad (4.22a)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} \quad (4.22b)$$

Fotonu tak byla přiřazena hybnost, vlastnost charakteristická pro částice. Použijeme tuto duální představu záření (vlnová délka a frekvence představují vlnové vlastnosti, energie a hybnost fotonu představují korpuskulární, tj. částicové vlastnosti) k vysvětlení Comptonova jevu.

Rozptyl fotonu na terčíku popíšeme v laboratorní souřadnicové soustavě jako pružnou srážku dvou částic, fotonu a relativně volného elektronu příslušejícímu materiálu terčíku, při které se zachovává celková energie a hybnost uvažované soustavy dvou částic. Před srážkou je elektron v klidu, foton má frekvenci ν a vlnovou délku λ . Po srážce se elektron pohybuje rychlostí \vec{v} , která svírá s původním směrem fotonu úhel φ , foton rozptýlený pod úhlem ϑ má frekvenci ν' a vlnovou délku λ' . Pro energii a hybnost musíme použít relativistické vztahy, např. energie elektronu před interakcí je rovna klidové energii $m_e c^2$, kde m_e je klidová hmotnost elektronu. Rovnost energie a hybnosti soustavy elektron a foton před a po interakci popíšeme skalární a vektorovou rovnicí



Obr. 4.14 Interagující foton a elektron před (a) a po srážce (b)

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2} \quad (4.23)$$

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e \quad (4.24)$$

kde \vec{p} a \vec{p}' jsou hybnosti fotonu o frekvenci ν a ν' před a po interakci, \vec{p}_e je hybnost elektronu po interakci s fotonem. Postupně použijeme vztah pro hybnost fotonu (4.22b) a vektorovou rovnici (4.24) zapíšeme ve dvou složkách. Po úpravách, které jsou provedeny v dodatku D6, dostaneme změnu vlnové délky rozptýleného záření při **Comptonově jevu**

$$\Delta\lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos\vartheta) \quad (4.24)$$

Tento vztah je plně v souladu s experimentem. Diskutujme některé jeho důsledky.

- Protože $-1 \leq \cos\vartheta \leq 1$, je $\Delta\lambda \geq 0$. Vlnová délka záření se při rozptylu zvětšuje nebo nemění.
- Pro $\vartheta = 0$ je $\Delta\lambda = 0$. Při rozptylu ve směru dopadu nedochází ke změně vlnové délky záření.
- Pro $\vartheta = \pi$ je $\Delta\lambda = 2 \frac{h}{m_e c}$. Při zpětném rozptylu je změna vlnové délky maximální.
- Koeficient $\frac{h}{m_e c}$ se nazývá **Comptonova vlnová délka** a udává změnu vlnové délky při

rozptylu záření pod pravým úhlem. Její hodnota je malá, přibližně $2 \cdot 10^{-12}$ m. Malá hodnota Comptonovy vlnové délky vysvětluje skutečnost, že Comptonův jev nebyl pozorován pro viditelné záření. Vlnová délka viditelného záření je o více než 4 řádů větší než Comptonova vlnová délka, a proto jsou změny vlnové délky (4.24) obtížně pozorovatelné. V případě rentgenového záření je změna vlnové délky srovnatelná s vlnovou délkou dopadajícího záření, a proto je lépe pozorovatelná.

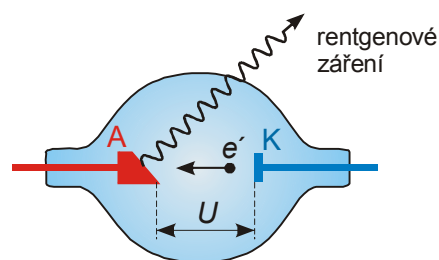
- Pozorovaná změna vlnové délky přísluší záření rozptýlenému na volných elektronech. Při rozptylu záření na jádrech, jejichž hmotnost je několik tisíc krát větší, než je hmotnost elektronu, je změna vlnové délky záření rovněž tolikrát menší a tedy nepozorovatelná.

Navíc jádra atomů jsou vázána v krystalové mřížce a nejedná se tedy o pružnou srážku. Proto se při Comptonově jevu pozoruje rovněž původní vlnová délka záření (obr. 4.13).

Při vysvětlení Comptonova jevu byla dále rozvinuta korpuskulárně-vlnová představa záření, která se projevuje při interakci s objekty atomárních a subatomárních rozměrů tak, že fotonu byla kromě energie přiřazena hybnost $p = \frac{h}{\lambda}$.

4.2.3 Rentgenové záření (X-záření)

Vznik rentgenového záření je děj opačný k fotoelektrickému ději. V evakuované baňce (obr. 4.15) je tak silně zahřívána katoda, až se z jejího povrchu uvolňují elektrony. V důsledku rozdílu potenciálů mezi katodou K a anodou A se elektron pohybuje k anodě a získá při průletu kinetickou energii $E_k = eU$, kde e je velikost náboje elektronu a U je napětí (rozdíl potenciálů) mezi anodou a katodou. Při dopadu na anodu dojde k jedné nebo více kolizím s částicemi anody, elektron je postupně zabrzděn a během tohoto procesu je celá nebo část jeho kinetické energie vyzářena ve formě fotonů.

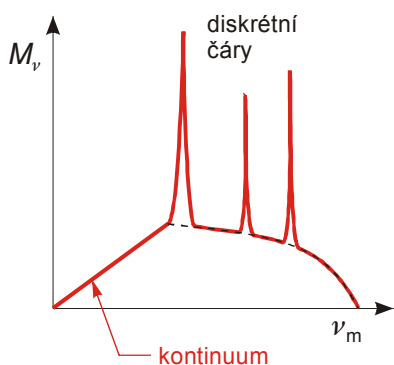


Obr. 4.15 Vznik rentgenového záření

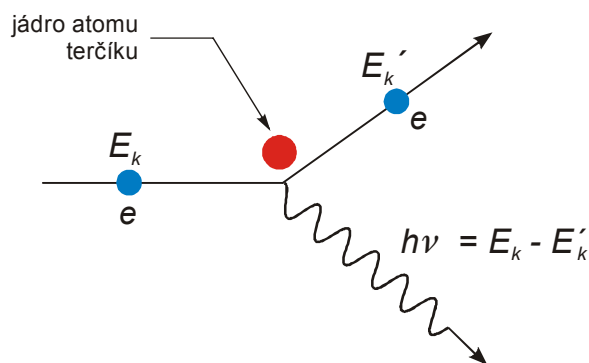
Rozdíl původní kinetické energie E_k a kinetické energie E'_k po kolizi se uvolní jako energie záření o frekvenci ν . Toto záření se nachází ve vysokofrekvenční části spektra a označuje se jako **rentgenové** nebo **X-záření**

$$h\nu = E_k - E'_k \quad (4.26)$$

Typické spektrum X-záření je na obr. 4.16.



Obr. 4.16 Spektrum rentgenového záření ($U = \text{konst.}$)



Obr. 4.17 Rozptyl elektronů při vzniku brzdného záření

Pozorované X-záření vykazuje následující rysy:

- Spektrum obsahuje spojitou, kontinuální oblast hodnot frekvencí, jejíž mezní hodnota ν_m nezáleží na materiálu anody A, nýbrž je určena napětím mezi elektrodami.
- Na pozadí kontinua se nacházejí diskrétní čáry, které jsou charakteristické pro materiál anody.

Tyto dva rysy spektra X-záření mají odlišné vysvětlení. Vysvětlení kontinuální části spektra je následující. Elektron získá průchodem potenciálním rozdílem U kinetickou energii E_k , dopadne na anodu, rozptyluje se na jádrech atomů a ztratí při tom část své energie ΔE_k (obr. 4.17). Tato energie se uvolní ve formě záření různých spojitých hodnot frekvencí. Nejvyšší možnou frekvenci má foton, který vznikl v případě, že elektron odevzdal celou svou kinetickou energii při jediné kolizi. Pro mezní (maximální) frekvenci ν_m a mezní (minimální) vlnovou délku λ_m , které omezují kontinuální část spektra brzdného záření, dostáváme ze vztahu (4.26) pro $E'_k = 0$

$$h\nu_m = E_k = eU$$

$$\nu_m = \frac{eU}{h} \quad (4.27a)$$

$$\lambda_m = \frac{hc}{eU} \quad (4.27b)$$

V případě typického potenciálového rozdílu 10 000 V je mezní vlnová délka 0,124 nm.

Diskrétní čáry ve spektru rentgenového záření vznikají odlišným způsobem než kontinuální část spektra. Elektron dopadající na anodu vyrazí jeden z elektronů nacházejících se v tzv. vnitřních orbitech (kap. 6) blízko jádra. Tím vznikne tzv. díra, která je zaplněna některým z elektronů ležících ve vnějších orbitech. Protože elektron ve vnějších orbitech má vyšší energii než elektron ve vnitřních orbitech, uvolní se při tomto přechodu energie. Uvolněná energie ve formě elektromagnetického záření nabývá pouze určitých hodnot daných energetickou strukturou atomů anody, a proto příslušné záření má jen určité hodnoty frekvencí. Vzniká tak soustava čar, čili diskrétní spektrum, které je určeno materiálem anody.

Rentgenová difrakce na krystalech

Jedním z využití rentgenového záření je studium struktury krystalů. Jestliže monochromatický rovnoběžný svazek rentgenového záření o vlnové délce λ dopadá na krystal (obr. 4.18), dochází k rozptylu tohoto záření na jednotlivých atomech, které jsou uspořádány do krystalových rovin. Uvážíme paprsky, které se rozptylují na sousedních krystalových rovinách vzdálených od sebe d tak, že mezi rozptýlenými paprsky a krystalovou rovinou je stejný úhel ϑ jako mezi dopadajícími paprsky a krystalovou rovinou. Tyto paprsky můžeme považovat za „odražené“ od krystalové roviny.

Po odrazu dochází k interferenci paprsků rozptýlených na sousedních krystalových rovinách. Intenzita se interferencí zesílí, jestliže dráhový rozdíl paprsků je roven celistvému násobku vlnové délky. Z obr. 4.18b dostáváme, že tato podmínka je pro uvažovaný případ

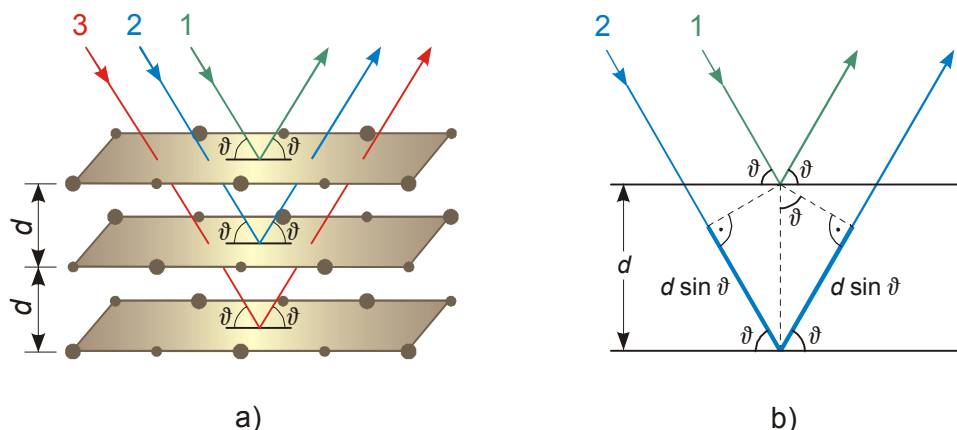
$$2d \sin \vartheta = n\lambda \quad (4.28)$$

kde n je celé číslo, λ je vlnová délka dopadajícího rentgenového záření, ϑ je úhel mezi krystalovou rovinou a dopadajícím paprskem. Tato podmínka pro zesílení rozptýlených paprsků na krystalových rovinách se označuje jako **Braggova rovnice***

Braggova rovnice je základním vztahem pro určování struktury krystalu: ze známých hodnot λ , ϑ a n můžeme určit vzdálenost krystalových rovin d . Vzhledem k typickým hod-

* Braggův vztah připomíná mřížkovou rovnici popisující polohy maxim světla po průchodu optickou mřížkou. Čtenář si jistě uvědomí rozdíly ve významu použitých symbolů ϑ a d v obou vztazích.

notám vzdálenosti d krystalových rovin je právě rentgenové záření, mající vlnovou délku řádově 10^{-10} m, vhodné pro studium struktury krystalů.



Obr. 4.18 Rozptyl rentgenového záření na krystalech. (a) „Odraz“ na krystalových rovinách, (b) dráhový rozdíl mezi paprsky

4.2.4 Vlnové vlastnosti částic, de Broglieova hypotéza

V předchozích odstavcích jsme charakterizovali duální povahu elektromagnetického záření. Vlnové vlastnosti jsou dány vlnovou délkou, frekvencí a rychlostí šíření vlnění, korpuskulární (částicové) vlastnosti jsou určeny hybností $p = \frac{h}{\lambda}$ a energií fotonu $E = h\nu$. De Brogliem byla vyslovena hypotéza, podle které se všem částicím přiřadí vlnová délka a frekvence vztahy analogickými se vztahy (4.22) a (4.6)

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv} \quad (4.29)$$

$$\nu = \frac{E}{h} \quad (4.30)$$

Vztah (4.29) se označuje jako **de Broglieův vztah** a vlnová délka příslušející částici o hmotnosti m pohybující se rychlostí v jako **de Broglieova vlnová délka**. Tím je také částicím přiřazen **duální charakter** – korpuskulární a vlnový. De Broglieova vlnová délka je vlastností částic, není spojena s vlněním, které by částice nějakým způsobem vyvolávaly. Projevem vlnových vlastností je interference a ohyb. Proto také interference de Broglieových vln je důkazem existence vlnových vlastností hmotných částic.

V následujícím příkladu přiřadíme vlnovou délku makroskopické částici a elektronu. Z příkladu bude patrné, že vlnové vlastnosti makroskopických částic nejsou podstatné pro jejich popis, zatímco u subatomárních částic jsou pozorovatelné a jsou podstatné při jejich popisu.

Příklad 4.1

- Těleso o hmotnosti $m = 10$ kg se pohybuje rychlostí $v = 10 \text{ ms}^{-1}$. Určete jeho de Broglieovu vlnovou délku λ .
- Určete de Broglieovu vlnovou délku elektronu (hmotnost elektronu $m_e = 9,1 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$), který byl urychlen průchodem potenciálním rozdílem $U = 55,0 \text{ V}$.

Řešení

- a) Podle vztahu (4.29) $\lambda = \frac{h}{mv}$, $\lambda = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{10 \cdot 10} = 6,6 \cdot 10^{-36} \text{ m}$. Vlnění s touto malou vlnovou délkou

neumíme pozorovat (např. pomocí interference nebo ohybu), a proto ani vlnové vlastnosti makroskopických částic nepozorujeme.

- b) Elektron, který byl urychlen potenciálním rozdílem U , získá rychlost $v = \sqrt{\frac{2eU}{m_e}}$, hybnost

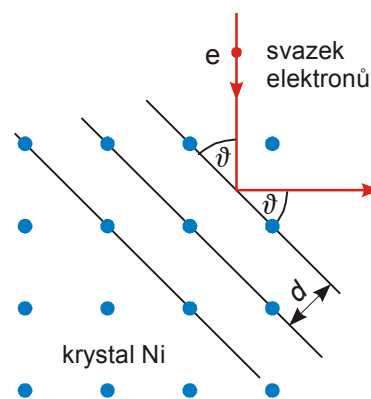
$$p = \sqrt{2m_e eU}. \text{ Příslušná de Broglieova vlnová délka je pak } \lambda = \frac{h}{\sqrt{2m_e eU}},$$

$$\lambda = \frac{6,626 \cdot 10^{-34}}{\sqrt{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} \cdot 55,0}} = 1,66 \cdot 10^{-10} \text{ m}$$

Ačkoli je tato vlnová délka malá, je již srovnatelná se vzdáleností molekul v krystalech. Difrakce elektronů na krystalech se opravdu pozoruje.

Difrakce elektronů na krystalové mřížce

Při dopadu svazku elektronů na krystaly dochází k interferenci vlnění spojených s elektrony a rozptýlených na jednotlivých krystalových rovinách. Obdobný děj se pozoruje při difrakci rentgenového záření na krystalech (odd. 4.2.3, obr. 4.18). Interference, ke které dochází při rozptylu elektronů na krystalové mřížce (obráz. 4.19), dokazuje vlnové vlastnosti elektronů a ověřuje správnost de Broglieova vztahu (4.29). Difrakce elektronů a neutronů se stala užívanou technikou studia krystalové struktury.



Elektronový mikroskop

Vlnové vlastnosti hmotných částic se využívají dále např. v elektronových mikroskopech. Mezní rozlišovací schopnost optických přístrojů o kruhové apertuře D je dána vztahem

$$\vartheta_m = 1,22 \frac{\lambda}{D}. \text{ V elektronových mikroskopech je de Broglieova vlnová délka podstatně kratší}$$

než vlnová délka viditelného světla. Proto i rozlišení elektronových mikroskopů je vyšší než rozlišení optických přístrojů.

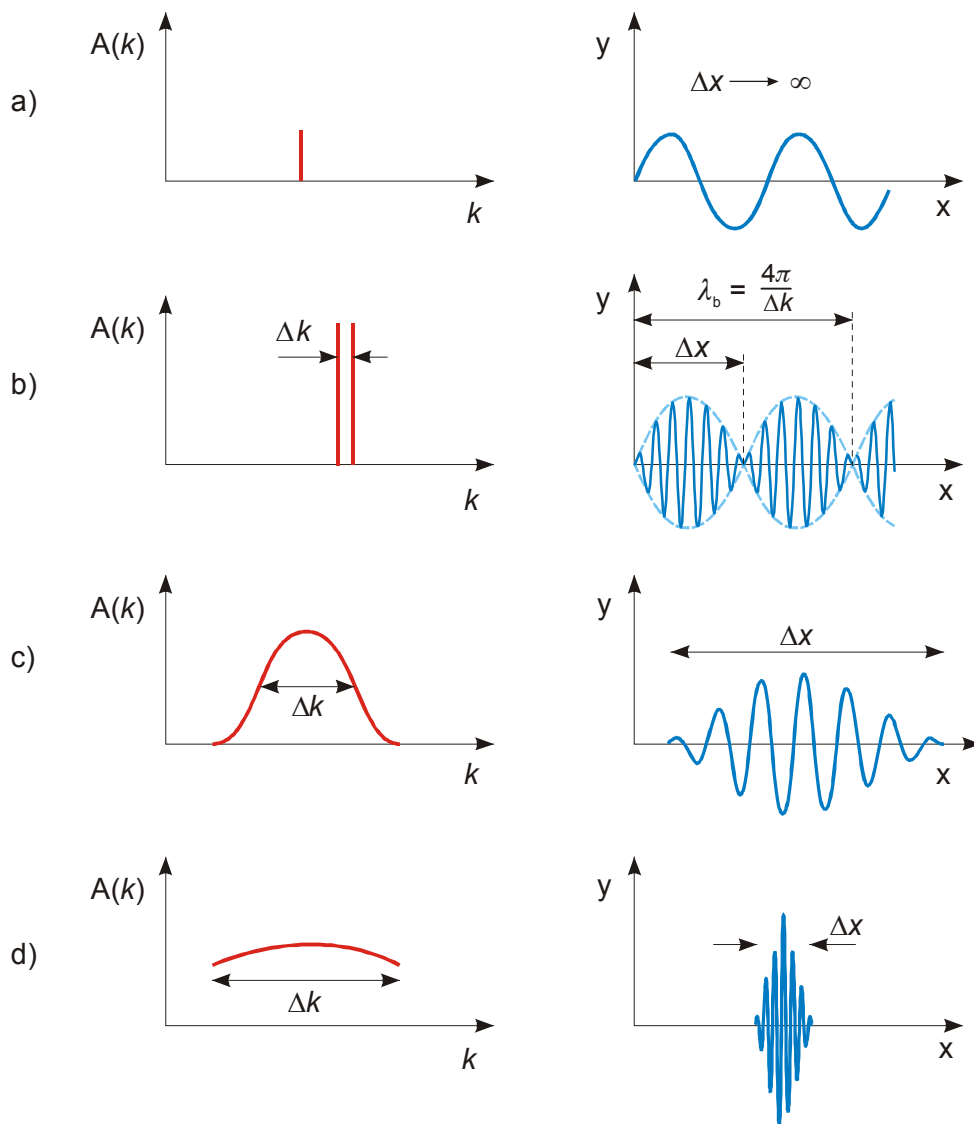
Obr. 4.19 Difrakce elektronů na krystalu niklu

Dualita částice-vlnění

K vysvětlení duálních vlastností částic použijeme obr. 4.20. Vlnění popisujeme vlnovou délkou λ nebo vlnovým číslem $k = \frac{2\pi}{\lambda}$. Vlnění charakterizované jedinou vlnovou délkou, tj.

jediným vlnovým číslem k , není lokalizované, jeho amplituda je v celém prostoru stejná (obráz. 4.20a). Jestliže složíme dvě vlnění blízkých vlnových délek, tj. blízkých diskrétních hodnot vlnových čísel, obdržíme vlnění, které postupuje ve svazcích vyšších intenzit oddělených minimy (obráz. 4.20b). Skládání vlnění dvou blízkých hodnot vlnového čísla je popsáno v Dodatku D7. V případě, že se skládá mnoho vlnění, jejichž vlnová čísla tvoří spojitý interval, vzniká jediný svazek, **vlnový balík**, který postupuje prostorem **grupovou rychlostí** v_g (obráz. 4.20c,

Dodatek D7). Čím větší je interval spojitých hodnot vlnových čísel, tím užší je vlnový balík (4.20d). Z těchto úvah docházíme k závěru, že vhodnou superpozicí vlnění může vznikat výsledné vlnění, jehož nenulová amplituda je převážně lokalizována v určité části prostoru a šíří se grupovou rychlostí jako vlnový balík. Superpozicí vlnění tak dostáváme útvar lokalizovaný v prostoru, vlnový balík, který může reprezentovat **vlnové vlastnosti částice**.



Obr. 4.20 Spektrum vlnových čísel a výsledný tvar vlnění. (a) Monochromatické vlnění, (b) dvě diskrétní hodnoty k , (c) úzký interval Δk spojitých hodnot vlnových čísel, (d) široký interval Δk spojitých hodnot vlnových čísel. $A(k)$ je amplituda jako funkce vlnového čísla k , λ_b je modulační vlnová délka, Δx je lokalizace vlnového balíku

4.2.5 Princip neurčitosti

Vlnový balík diskutovaný v předchozím odstavci představuje znázornění vlnové povahy hmotných částic. Intenzita vlnění v každém bodě, která je dána čtvercem amplitudy vlnění, je mírou pravděpodobnosti, že se částice v daném místě prostoru nachází (blíže v kap. 5). Částice není přesně lokalizována v prostoru, nýbrž nachází se s velkou pravděpodobností v oblasti vlnového balíku. Tato oblast je na obr. 4.20 označena jako Δx . Vlnový popis částice tak vná-

ší neurčitost v její poloze, přitom neurčitost její polohy Δx je dána rozměrem vlnového balíku. Rozborem obrázku 4.20 zjišťujeme, že čím menší je interval Δk , tím rozsáhlejší je vlnový balík a tím větší je neurčitost polohy Δx a naopak. V mezním případě pro přesně určenou vlnovou délku je $\Delta k = 0$ a poloha není určena vůbec. Mezi neurčitostmi vlnového čísla k a polohy x platí vztah nepřímé úměrnosti.

Použijeme vztah (4.29) a definici vlnového čísla a dostáváme pro složku hybnosti p_x částice a příslušnou de Broglieovu vlnu šířící se podél osy x

$$p_x = \frac{h}{\lambda} = \frac{h}{2\pi} k$$

Pro neurčitost příslušných veličin dostáváme

$$\Delta p_x = \frac{h}{2\pi} \Delta k = \hbar \Delta k \quad (4.31)$$

Konstanta $\frac{h}{2\pi}$ se označuje \hbar a čte „přeškrtnuté h“.

Vztah nepřímé úměrnosti mezi neurčitostmi vlnového čísla Δk a polohy Δx znázorněný na obr. 4.20 můžeme tak převést na vztah neurčitosti mezi souřadnicí a příslušnou složkou hybnosti. Pro případ de Broglieových vln byl vztah mezi neurčitostmi souřadnice a příslušné složky hybnosti vyčíslen. Tento vztah se v kvantové fyzice označuje jako **Heisenbergova relace neurčitosti**:

$$\Delta p_x \Delta x \geq \frac{\hbar}{2} \quad (4.32)$$

- Slovně vyjádříme tuto nerovnost takto: nejistota v určení složky hybnosti násobená nejistotou v určení téže složky polohového vektoru je větší nebo rovna $\hbar/2$.
- Heisenbergova relace neurčitosti má fundamentální význam pro kvantovou fyziku. Říká nám, že není možné znát současně polohu a hybnost částice.
- Vztah (4.32) nesouvisí s přesností experimentálního určení obou veličin. Je to vztah principiální, který platí pro ideálně přesný experiment. V reálných experimentech přistupuje navíc nejistota, která je určena experimentálními chybami.
- Heisenbergova relace neurčitosti platí obecně, tedy i v makrosvětě. Je třeba si ovšem uvědomit malou hodnotu Planckovy konstanty. Odtud pak plyne, že neurčitost je v makrosvětě prakticky nezjistitelná a má význam při popisu subatomárních objektů a jejich interakce se zářením.

Lze ukázat, že obdobný vztah může být vyjádřen pro dobu života Δt energetické hladiny a její šířku ΔE

$$\Delta E \Delta t \sim \hbar \quad (4.33)$$

5 Úvod do kvantové mechaniky

5.1 Vlnová funkce

V předchozích oddílech jsme viděli, že děje, při kterých částice mikrosvěta interagují se zářením, vyžadují duální, korpuskulárně-vlnový popis jak částic, tak i vlnění. Pro vlnový popis je třeba znát průběh vlnových funkcí, pro korpuskulární popis počet částic, jejich hybnost a energii. Oba popisy spolu souvisejí. Proto např. intenzita vlnění je úměrná čtverci amplitudy i počtu fotonů v jednotce objemu. Pro popis vlnových vlastností částic je nutné nalézt vlnovou funkci příslušné částice. Můžeme očekávat, že čtverec její amplitudy bude souviset s počtem částic. Z neurčitosti polohy částic však vyplývá pravděpodobnostní charakter vlnového popisu částic. Proto čtverec amplitudy vlnové funkce příslušné částici je mírou pravděpodobnosti nalezení částice v jednotkovém objemu.

Diskutujeme nejdříve obecný tvar **vlnové funkce** $\Psi(\vec{r}, t)$ popisující stav částice. Ψ je zde funkcí souřadnic, a proto hovoříme o prostorové reprezentaci. V dosavadním vyjádření vlnových funkcí jsme využívali funkce \cos nebo \sin . Vlnění je možné popisovat rovněž periodickou komplexní funkcí, což bývá často výhodnější (Dodatek D7). K vyjádření intenzity vlnění potřebujeme znát čtverec amplitudy periodické komplexní funkce $|\Psi(\vec{r}, t)|^2$. Ten je dán (Dodatek D8) součinem funkce $\Psi(\vec{r}, t)$ a k ní komplexně sdružené funkce $\Psi^*(\vec{r}, t)$

$$|\Psi(\vec{r}, t)|^2 = \Psi^*(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) \quad (5.1)$$

Jednorozměrný případ

V jednorozměrném případě bude vlnová funkce pouze funkcí jedné prostorové proměnné, $\Psi(x, t)$. Pravděpodobnost $dP(x, t)$ nalezení částice v intervalu $(x, x + dx)$ je úměrná šířce intervalu dx a podle předchozích úvah je rovněž úměrná čtverci amplitudy vlnové funkce $|\Psi(x, t)|^2$ dané vztahem (5.1):

$$dP(x, t) = |\Psi(x, t)|^2 dx = \Psi^* \Psi dx \quad (5.2)$$

Z předchozího vztahu je zřejmé, že veličina $|\Psi(x, t)|^2$ má význam pravděpodobnosti nalezení částice v čase t v jednotkovém intervalu v okolí bodu x a nazveme ji **hustota pravděpodobnosti**.

Pravděpodobnost nalezení částice v intervalu (x_1, x_2) pak získáme jako součet (integrál) pravděpodobností nalezení částice ve všech elementárních intervalech, které tvoří interval (x_1, x_2) :

$$P_{x_1, x_2}(t) = \int_{x_1}^{x_2} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx \quad (5.3)$$

Další vlastnosti vlnové funkce vyjádříme v následujících bodech.

- Uvažujme jednu částici. Pravděpodobnost jejího nalezení kdekoli, tj. v intervalu $x \in (-\infty, +\infty)$, musí být rovna 1:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \Psi(x, t) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\Psi(x, t)|^2 dx = 1 \quad (5.4)$$

Tuto podmínku, kterou splňuje vlnová funkce, nazýváme **normovací podmínka na vlnovou funkci**: *Integrál čtverce absolutní hodnoty vlnové funkce přes celý uvažovaný prostor je roven jedné.*

- V odd. 4.2.4 jsme ukázali, že nelze určit přesné hodnoty pozorovatelné veličiny souřadnice x současně s přesným určením příslušné složky hybnosti p_x . Pomocí hustoty pravděpodobnosti však můžeme určit střední hodnotu souřadnice x tzv. **očekávanou hodnotu souřadnice** $\langle x \rangle$:

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x \Psi^* \Psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^* x \Psi dx \quad (5.5)$$

Trojrozměrný případ

Vztahy (5.4) a (5.5) můžeme zobecnit na trojrozměrný případ, $\Psi = \Psi(x, y, z, t)$.

- Pravděpodobnost nalezení částice v objemu V je dána

$$P_V = \int_V \Psi^* \Psi dV \quad (5.6)$$

- Normovací podmínka (5.4) pak má tvar

$$\int_{\text{celý prostor}} \Psi^* \Psi dV = 1 \quad (5.7)$$

Z uvedených vlastností vlnové funkce $\Psi(\vec{r}, t)$ plyne: Ačkoli sama o sobě nemá měřitelný význam, její znalost umožňuje stanovit měřitelné veličiny, jako je hustota pravděpodobnosti nalezení částice.

V oddíle 5.3 budeme formulovat Schrödingerovu rovnici, která umožňuje spočítat vlnovou funkci v zadané fyzikální situaci.

5.2 Operátory

Dříve, než uvedeme základní rovnici kvantové mechaniky, zavedeme několik pojmů.

Operátor

Operátorem \hat{A} definovaným na množině funkcí budeme rozumět předpis, který funkci z nějakého oboru O přiřadí funkci z téhož oboru O .

$$\hat{A}f = g$$

kde $f \in O$, $g \in O$.

Operátor tedy představuje funkci definovanou na množině funkcí.

Příklad 5.1

Předpis, který komplexní dvojnásobně derivovatelné funkci $f(x, t)$ přiřadí její derivaci, je operátor:

$$\hat{A}f(x, t) = \frac{\partial f(x, t)}{\partial x}$$

b) Předpis, který komplexní funkci $f(x, t)$ přiřadí její násobek, je operátor:

$$\hat{A}f(x, t) = a f(x, t)$$

Vlastní rovnice

Rovnice mající tvar

(operátor) $\hat{A} \Psi = \text{konstanta} \cdot \Psi$

$$\hat{A} \Psi = a \Psi \quad (5.8)$$

se nazývá **vlastní rovnice operátoru** \hat{A} . Funkce Ψ splňující vlastní rovnici se nazývá **vlastní funkce operátoru** \hat{A} a konstanta a se nazývá **vlastní číslo operátoru** \hat{A} . Jestliže existuje více řešení vlastní rovnice $\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n$ s příslušnými konstantami a_1, a_2, \dots, a_n , pak a_1, a_2, \dots, a_n tvoří **spektrum operátoru** \hat{A} .

Dynamická veličina a operátor

Každé dynamické veličině A , přiřadíme operátor \hat{A} , např. hybnosti p_x přiřadíme v x -reprezentaci operátor \hat{p}_x , souřadnici x přiřadíme operátor \hat{x} . Možné výsledky měření fyzikálních veličin jsou reálná čísla. Proto požadujeme, aby vlastní čísla operátorů přiřazených dynamickým veličinám byla reálná. Mezi operátory, které tomuto požadavku vyhovují, patří i tzv. **hermitovské operátory**, které se v kvantové mechanice používají.

Příklad 5.2

Nechť operátor \hat{p}_x je definován v x -reprezentaci na množině dvojnásobně derivovatelných komplexních funkcí proměnných x a t předpisem $\hat{p}_x \Psi = -i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x}$. Určete $\hat{p}_x^2 \Psi$.

Řešení:

$$\begin{aligned} \hat{p}_x^2 \Psi(x, t) &= \hat{p}_x (\hat{p}_x (\Psi(x, t))) = \hat{p}_x \left(-i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) = -i\hbar \hat{p}_x \left(\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} \right) = -i\hbar \left(-i\hbar \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \right) = \\ &= -\hbar^2 \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} \end{aligned}$$

- Vztah (5.5) zobecníme na libovolnou měřitelnou funkci souřadnic a času. **Očekávanou hodnotu** $\langle Q \rangle$ pozorovatelné veličiny $Q(x, t)$, které přiřadíme operátor \hat{Q} , získáme vztahem

$$\langle Q \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \Psi^*(x, t) \hat{Q} \Psi(x, t) dx \quad (5.9)$$

- Očekávaná hodnota $\langle Q \rangle$ pozorovatelné veličiny $Q(x, y, z, t)$, které přiřadíme operátor \hat{Q} , je

$$\langle Q \rangle = \int_{\text{celý prostor}} \Psi^*(\vec{r}, t) \hat{Q} \Psi(\vec{r}, t) dV \quad (5.10)$$

5.3 Časově závislá Schrödingerova rovnice

Vlnová funkce zavedená v odd. 5.1 popisuje stav částice v kvantové mechanice. Rovnice, kterou vlnová funkce splňuje, se nazývá **Schrödingerova rovnice** (SCHR).

5.3.1 Časově závislá Schrödingerova rovnice v jednorozměrném případě

Schrödingerova rovnice představuje *základní axiom kvantové mechaniky*. Obdobně v klasické mechanice je pohybová rovnice $\vec{F}^R = m\vec{a}$ základním axiomem mechaniky. O správnosti SCHR se přesvědčujeme tím, že důsledky z ní plynoucí jsou v souladu s experimentálními výsledky.

V tomto odstavci ukážeme, že SCHR není v rozporu s našimi fyzikálními zkušenostmi. Pro jednoduchost budeme uvažovat jednorozměrný případ, kdy se částice hmotnosti m může nacházet pouze podél osy x . Aby vlnová funkce popisovala vlnění, musí splňovat vlnovou rovnici. Zároveň požadujeme, aby byly splněny vztahy (4.29) a (4.30), které popisují vlnové vlastnosti částic (odd. 4.2.4):

$$\frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} = -\frac{1}{\lambda^2} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial t^2} \quad (5.11)$$

$$E = h\nu = \hbar\omega \quad (5.12)$$

$$p = \frac{h}{\lambda} = \hbar k \quad (5.13)$$

kde použité symboly mají stejný význam jako v celé této kapitole.

Vlnovou rovnici splňuje rovinná vlna popsána funkcí $\Psi(x, t) = Ae^{i(kx - \omega t)}$ (Dodatek D8). Derivujeme ji podle času t a podle souřadnice x .

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = A(-i\omega) e^{i(kx - \omega t)} = -i\omega \Psi(x, t) \quad (5.14)$$

$$\frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = A(ik) e^{i(kx - \omega t)} = ik \Psi(x, t) \quad (5.15)$$

Vynásobíme rovnici (5.14) výrazem $(i\hbar)$ a rovnici (5.15) výrazem $(-i\hbar)$.

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = \hbar\omega \Psi(x, t) \quad (5.16)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = \hbar k \Psi(x, t) \quad (5.17)$$

Dále použijeme vztahy (5.11) a (5.13).

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = E \Psi(x, t) \quad (5.18)$$

$$-i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial x} = p_x \Psi(x, t) \quad (5.19)$$

Porovnáním vztahů (5.18) a (5.19) s rovnicí (5.8) zjišťujeme, že mají tvar vlastní rovnice. Přitom vlastní hodnoty představují hodnoty energie E a hybnosti p_x . To nás vede k tomu, abychom předpis $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ přiřadili operátoru energie \hat{E}

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = \hat{E} \quad (5.20)$$

a přepis $-i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$ operátoru x-ové složky hybnosti \hat{p}_x (x-ová složka, protože se jedná o pohyb ve směru osy x).

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial x} = \hat{p}_x \quad (5.21)$$

Celková energie částice o hmotnosti m je dána součtem kinetické energie $E_k = \frac{p_x^2}{2m}$ a potenciální energie $E_p(x, t)$:

$$\frac{p_x^2}{2m} + E_p(x, t) = E \quad (5.22)$$

Ve výrazu (4.55) nahradíme veličiny jejich operátory, které jsme jim přiřadili vztahy (5.20) a (5.21). Tvar operátoru $\hat{p}_x^2 = -\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial x^2}$ byl vypočten v Př. 5.2. Operátory pak necháme působit na funkci $\Psi(x, t)$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + E_p(x, t) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (5.23)$$

- Vztah (5.23), tzv. **časově závislá Schrödingerova rovnice**, je stěžejním vztahem kvantové mechaniky. Umožňuje na základě znalosti potenciální energie stanovit vlnovou funkci $\Psi(x, t)$, která popisuje časový vývoj stavu kvantové částice.
- Matematicky představuje SCHR parciální diferenciální rovnici 2. řádu.

5.3.2 Časově závislá Schrödingerova rovnice v trojrozměrném případě

Časově závislou Schrödingerovu rovnici zobecníme na trojrozměrný případ, kdy vlnová funkce a potenciální energie jsou obecně funkcemi tří prostorových souřadnic, $\Psi(\vec{r}, t)$, $E_p(\vec{r}, t)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \Psi(\vec{r}, t)}{\partial z^2} \right) + E_p(\vec{r}, t) \Psi(\vec{r}, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(\vec{r}, t)}{\partial t} \quad (5.24)$$

5.4 Časově nezávislá Schrödingerova rovnice

5.4.1 Stacionární Schrödingerova rovnice v jednorozměrném případě

V případě, kdy potenciální energie je pouze funkcí jedné prostorové proměnné x ,

$$E_p(x, t) = E_p(x) \quad (5.25)$$

má SCHR (5.23) tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + E_p(x) \Psi(x, t) = i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} \quad (5.26)$$

Tuto diferenciální rovnici řešíme separací proměnných, tj. hledáme řešení ve tvaru součinu dvou funkcí, z nichž každá závisí pouze na jedné proměnné

$$\Psi(x, t) = \psi(x) f(t) \quad (5.27)$$

Řešení (5.27) dosadíme do (5.26), upravíme a celou rovnici vydělíme separovanou celkovou vlnovou funkcí $\psi(x)f(t)$ (všimněme si, že po separaci proměnných je možné upustit od partiálních derivací)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} f(t) \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + E_p(x) \psi(x) f(t) = i\hbar \psi(x) \frac{df(t)}{dt}$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + E_p(x) = i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt}$$

Levá strana poslední rovnice je funkcí x (využili jsme toho, že E_p je pouze funkcí x) a pravá strana je funkcí pouze času t . Poslední rovnice je splněna, jsou-li obě strany rovny téže, tzv. separační konstantě, kterou označíme G .

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{\psi(x)} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + E_p(x) = G \quad (5.28)$$

$$i\hbar \frac{1}{f(t)} \frac{df(t)}{dt} = G \quad (5.29)$$

Řešme nejprve rovnici (5.29), kterou přepíšeme na tvar:

$$i\hbar \frac{df(t)}{dt} = G f(t)$$

Snadno se dosazením přesvědčíme, že jejím řešením je

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} G t} \quad (5.30)$$

Význam separační konstanty G zjistíme tak, že na řešení (5.27) aplikujeme operátor energie \hat{E} (5.20) a v dalším kroku dosadíme za $f(t)$ vztah (5.30). Dostáváme

$$\hat{E} \Psi(x, t) = \hat{E} (\psi(x) f(t)) = i\hbar \psi(x) \frac{df(t)}{dt}$$

$$\hat{E} \Psi(x, t) = i\hbar \psi(x) \left(-\frac{i}{\hbar} G f(t) \right) = G \Psi(x, t)$$

Odtud je zřejmé, že separační konstanta má význam celkové energie, $G = E$.

Dostáváme tak konečný tvar časové části vlnové funkce

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (5.31)$$

Rovnici (5.28), která představuje rovnici pro prostorovou část vlnové funkce, přepíšeme na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + E_p(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.32a)$$

Toto je **časově nezávislá Schrödingerova rovnice**, která má základní význam v kvantové mechanice. Tuto rovnici budeme dále diskutovat.

- Jestliže je potenciální energie pouze funkcí prostorových souřadnic, získáme řešením časově nezávislé Schrödingerovy rovnice prostorovou část vlnové funkce a zároveň hodnoty energie, kterých částice v daném stavu nabývá.
- Rovnici (5.32a) můžeme formálně přepsat na tvar

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E_p \right) \psi = E \psi \quad (5.32b)$$

Výraz v závorce je operátor, jehož působením na funkci ψ dostaneme E -násobek této funkce. Časově nezávislá Schrödingerova rovnice má tedy tvar vlastní rovnice operátoru, kde operátor

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + E_p \quad (5.33)$$

představuje operátor celkové energie, tzv. **Hamiltonův operátor**, nebo **hamiltonián**. Časově nezávislou Schrödingerovu rovnici tak můžeme napsat ve tvaru

$$\hat{H} \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.32c)$$

To je obecné vyjádření časově nezávislé SCHR ve tvaru vlastní rovnice operátoru celkové energie \hat{H} . Funkce $\psi(x)$ je vlastní funkcí operátoru celkové energie \hat{H} a vlastní hodnoty tohoto operátoru jsou možnými hodnotami energie ve stavech částice popsaných vlnovými funkcemi $\psi(x)$.

- Celková vlnová funkce je podle (5.27)

$$\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} \quad (5.34)$$

Vypočteme hustotu pravděpodobnosti podle (5.1)

$$\Psi^*(x, t) \Psi(x, t) = \psi^*(x) e^{\frac{i}{\hbar} E t} \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t} = \psi^*(x) \psi(x) = |\psi(x)|^2 \quad (5.35)$$

Časově nezávislá Schrödingerova rovnice (4.64) poskytuje tedy řešení stavů, v nichž hustota pravděpodobnosti se s časem nemění, nýbrž závisí pouze na prostorových souřadnicích prostřednictvím prostorové části vlnové funkce $\psi(x)$. Stav $\Psi(x, t) = \psi(x) e^{-\frac{i}{\hbar} E t}$ označujeme proto jako **stacionární stavy** a rovnici (5.32) jako **stacionární Schrödingerovu rovnici**. Rovnici (5.32) budeme v následujících odstavcích používat k řešení stacionárních stavů částic v některých speciálních případech.

5.4.2 Stacionární Schrödingerova rovnice v trojrozměrném případě

Nyní zobecníme stacionární Schrödingerovu rovnici na trojrozměrný případ, kdy potenciální energie se s časem nemění a je závislá obecně na třech prostorových souřadnicích:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(\vec{r})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(\vec{r})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(\vec{r})}{\partial z^2} \right) + E_p \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r})$$

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + E_p \right) \psi(\vec{r}) = E \psi(\vec{r}) \quad (5.32d)$$

Použili jsme symbol $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$ pro tzv. Laplaceův operátor.

5.5 Vlastnosti vlnové funkce popisující stav částice

Vlnovou funkci $\psi(x)$ popisující stacionární stav částice získáme řešením SCHR (5.32). Shrňme požadavky na vlnovou funkci $\psi(x)$ a následně je vysvětlíme a okomentujeme.

1. Vlnová funkce $\psi(x)$ je řešením SCHR (5.32).
2. Vlnová funkce $\psi(x)$ a její derivace $d\psi(x)/dx$ jsou omezené v celém definičním oboru.
3. Vlnová funkce $\psi(x)$ a její derivace $d\psi(x)/dx$ jsou jednoznačné v celém definičním oboru.
4. Vlnová funkce $\psi(x)$ a její derivace $d\psi(x)/dx$ jsou spojité v celém definičním oboru.
5. Vlnová funkce $\psi(x)$ je kvadraticky integrovatelná, tj. hodnota integrálu

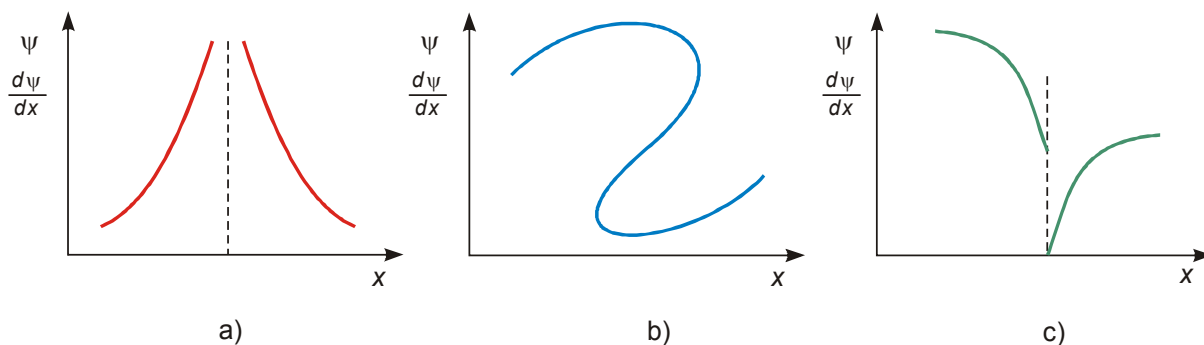
$$\int_{\text{celý obor}} \psi^*(x) \psi(x) dx = \int_{\text{celý obor}} |\psi(x)|^2 dx \text{ je konečná.}$$

Požadavky 2.- 4. kladené na vlnovou funkci $\psi(x)$ plynou z fyzikálního významu vlnové funkce: měřitelné veličiny jako hustota pravděpodobnosti (5.1) a očekávané hodnoty veličin (5.5) musejí být všude konečné a jednoznačné. Z požadavku, aby vlnová funkce byla normovatelná, plyne 4. podmínka a z ní pak navíc dostaneme, že $\psi(x) \rightarrow 0$ pro $x \rightarrow \pm\infty$. Jestliže by totiž tato podmínka nebyla splněna, pak by integrál $\int_{\text{celý obor}} \psi^*(x) \psi(x) dx$ nebyl konečný.

Požadavky na derivace vlnové funkce $d\psi(x)/dx$ vyjádřené v bodech 2.- 4. plynou z následující úvahy. SCHR (5.32a) můžeme přepsat na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} = (E - E_p(x)) \psi(x) \quad (5.32e)$$

Kdyby $d\psi(x)/dx$ nebyla všude jednoznačná, omezená a spojitá, pak by $d^2\psi(x)/dx^2$ neexistovala nebo nebyla jednoznačná nebo omezená a levá strana (5.32e) by rostla nade všechny meze. Pro E_p nabývající pouze konečných hodnot by E byla nekonečná, což je fyzikálně nemožné.*



Obr. 5.1 Příklad závislostí, které nejsou všude konečné (a), jednoznačné (b), spojité (c).

* Příklad, kdy $E_p \rightarrow \infty$, bude diskutován v odd. 5.6.2.

Na obr. 5.1 jsou znázorněny průběhy funkcí, jaké *nesmějí mít* $\psi(x)$ a $d\psi(x)/dx$.

Řešení SCHR rovnice (5.32), které splňuje podmínky 1.- 4. kladené na vlnovou funkci, se nazývá **dobře vychované** (z angl. well-behaved).

- Požadavky spojitosti vlnové funkce a její derivace stanovují podmínky v těch bodech řešení SCHR, kde potenciální energie E_p je nespojitá. Splnění těchto podmínek v místech nespojitosti E_p nazýváme **sešívání vlnových funkcí**.
- Podmínky na to, aby řešení SCHR bylo dobře vychované, vedou k tomu, že energie E nemůže nabývat libovolných hodnot, a ve svém důsledku tedy ke **kvantování energie**.

5.6 Řešení Schrödingerovy rovnice v jednoduchých případech

V tomto oddíle budeme řešit stacionární Schrödingerovu rovnici v několika případech, kdy potenciální energie má jednoduchý tvar. V celém tomto oddíle se omezíme na řešení stavů jedné částice. Kvantové systémy se v těchto případech označují speciálními názvy, jako např. volná částice, částice v pravoúhlé jámě, lineární harmonický oscilátor. Budeme hledat stacionární stavy a energie v těchto systémech. Zavedeme pojem kvantových čísel a degenerace energetických hladin.

Postup řešení SCHR bude probíhat podle následujícího schématu.

1. Sestavíme Schrödingerovu rovnici pro daný průběh potenciální energie E_p .
2. Řešením SCHR obdržíme vlnové funkce a příslušné hodnoty energie E .
3. Matematická řešení SCHR musejí být dobře vychovanými vlnovými funkcemi, tj. musejí splňovat podmínky formulované v odd. 5.5. Při aplikaci těchto podmínek omezíme možné hodnoty energie a zavedeme do řešení parametry, které nazveme **kvantovými čísly**.
4. Ze získaných vlnových funkcí vypočteme hustoty pravděpodobnosti a pomocí nich znázorníme možný výskyt částic v prostoru. Budeme diskutovat hodnoty energie, kterých částice ve stacionárních stavech může nabývat. Sestavíme diagram možných hodnot energií, tzv. **termový diagram**.

5.6.1 Volná částice

Pokud výsledná síla působící na částici je nulová, označujeme částici jako volnou. Pro jednoduchost budeme uvažovat jednorozměrný případ, kdy se částice o hmotnosti m nachází pouze

podél osy x . Síla a potenciální energie splňují vztah $-\frac{dE_p(x)}{dx} = F_x$. Jestliže je $F_x = 0$, pak

je potenciální energie $E_p(x) = konst$ pro všechna x . Zvolíme její hodnotu $E_p(x) = 0$. Při kvantovém řešení volné částice budeme postupovat podle výše uvedeného schématu.

1. Sestavíme SCHR pro daný průběh potenciální energie.

Dosadíme do SCHR (5.32a) hodnotu potenciální energie $E_p(x) = 0$ a dostaneme její konkrétní tvar pro volnou částici:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} = E \psi(x) \quad (5.36)$$

2. Řešíme diferenciální SCHR

Rovnice (4.69) představuje lineární diferenciální rovnici s konstantními koeficienty. Upravíme ji a řešíme příslušnou charakteristickou rovnici

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0$$

$$\lambda^2 + \frac{2m}{\hbar^2} E = 0$$

Kořeny charakteristické rovnice vyjádříme pomocí parametru k , který souvisí s celkovou energií E částice:

$$\lambda_{1,2} = \pm i \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} = \pm i k$$

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (5.37)$$

Obecné řešení můžeme vyjádřit v exponenciálním nebo goniometrickém tvaru.

$$\psi = C e^{ikx} + D e^{-ikx} = A \sin(kx) + B \cos(kx) \quad (5.38)$$

kde C, D, A, B jsou integrační konstanty.

3. Aplikujeme požadavky na vlnovou funkci (odd. 5.5)

Řešení (5.38) splňuje všechny požadavky kladené na dobře vychovanou vlnovou funkci kromě požadavku 4, neboť $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x)|^2 dx$ nelze pro řešení (5.38) vyčíslit, a proto nemůžeme určit

pravděpodobnost výskytu. Této obtíže se zbavíme, když stav částice popíšeme superpozicí sinových nebo kosinových vln, která dává vznik vlnovému balíku (odd. 4.2.4). Celková energie

$E = E_p + E_k = E_k$ představuje kinetickou energii $E_k = \frac{p_x^2}{2m}$ a odtud hybnost částice

$p_x = \sqrt{2mE}$. Dosadíme-li za E ze vztahu (5.37), dostáváme $p_x = \hbar k$, neboli $p_x = h/\lambda$ (srovnejte s (4.29)).

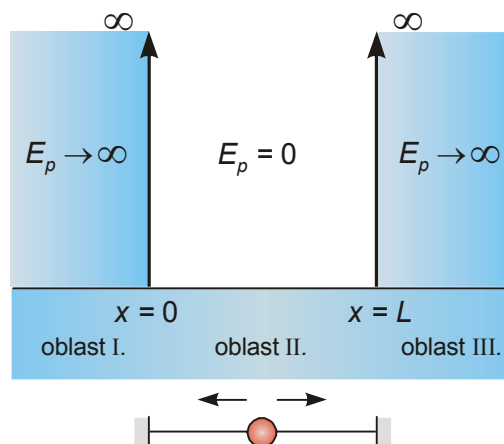
4. Diskutujeme řešení volné částice

Požadavky na vlnovou funkci nevedly k žádnému omezení hodnot energie volné částice. Vyjádřeno jazykem kvantové mechaniky, energie volné částice není kvantovaná, spektrum volné částice je spojitě. Určité hodnotě energie E částice odpovídá určitá hodnota hybnosti částice $p_x = \sqrt{2mE}$. Podle principu neurčitosti je však poloha částice pro určitou hodnotu hybnosti zcela neurčena a nelze proto stanovit hustotu pravděpodobnosti výskytu částice v závislosti na poloze.

5.6.2 Částice v jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciální jámě

V tomto oddíle budeme řešit stacionární stavy částice hmotnosti m , jejíž existence je omezena na přímku, kterou ztotožníme s osou x . Částice se nachází v poli s potenciální energií znázorněnou na obr. 5.2: V oblasti $x \in \langle 0, L \rangle$ má potenciální energie konečnou hodnotu, kterou položíme rovnou 0, vně tohoto intervalu roste potenciální energie nade všechny meze. Takový průběh potenciální energie označujeme jako **jednorozměrnou nekonečně hlubokou pravoúhlou potenciální jámu**. Klasickou analogií popsané situace je pohyb kuličky na-

vlečené na přímém drátku o délce L , na jehož koncích jsou zářežky. Částice v potenciální jámě je užitečným modelem reálných fyzikálních situací, jako jsou π -elektrony v konjugovaných lineárních uhlovodících nebo elektrony v kovech. Řešení částice v této jámě provedeme podrobně jako ukázkou použití SCHR při řešení stacionárních stavů systému a jim příslušných energií. Při řešení částice v jámě budeme postupovat podle schématu uvedeného v úvodu oddílu 5.6.



Obr. 5.2 Částice v nekonečně jednorozměrné potenciální jámě

1. Sestavíme SCHR pro daný průběh potenciální energie

Potenciální energie v nekonečně hluboké jednorozměrné jámě má tvar

$$\begin{aligned} E_p &\rightarrow \infty && \text{pro } x < 0 && \text{oblast I} \\ E_p &= 0 && \text{pro } x \in \langle 0, L \rangle && \text{oblast II} \\ E_p &\rightarrow \infty && \text{pro } x > L && \text{oblast III} \end{aligned} \quad (5.39)$$

SCHR rovnici (5.32) upravíme na tvar

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p) \psi = 0 \quad (5.40)$$

V oblastech I a III roste potenciální energie nade všechny meze a druhý člen levé strany rovnice (5.40) by neměl smysl, pokud by $\psi(x)$ nebyla nulová. Proto

$$\psi(x) = 0 \quad \text{pro } x \notin \langle 0, L \rangle \quad (5.41)$$

V oblasti II má SCHR tvar

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} E \psi = 0 \quad (5.42)$$

2. Řešíme diferenciální SCHR

Řešení SCHR (5.42) v oblasti II je totožné s řešením pro volnou částici, které bylo provedeno v odd. 5.6.1.

$$\psi = C e^{ikx} + D e^{-ikx} = A \sin(kx) + B \cos(kx)$$

kde parametr k souvisí s celkovou energií E

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (5.43)$$

Shrneme tedy matematické řešení SCHR pro jednorozměrnou nekonečně hlubokou potenciální jámu v celém oboru.

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(x) &= 0 & \text{pro } x < 0 \\ \psi_{\text{II}}(x) &= A \sin(kx) + B \cos(kx) & \text{pro } x \in \langle 0, L \rangle \\ \psi_{\text{III}}(x) &= 0 & \text{pro } x > L \end{aligned} \quad (5.44)$$

3. Požadujeme, aby řešení SCHR bylo dobře vychované

Aplikujeme požadavek spojitosti vlnové funkce v celém oboru. Získaná řešení jsou spojitá v jednotlivých oblastech I, II a III. Spojitost vlnové funkce v hraničních bodech oblastí, tedy v bodech $x = 0$ a $x = L$, musíme zajistit zvlášť, tzv. sešíváním vlnových funkcí. Podmínka na spojitost v bodě $x = 0$ dává:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{I}}(0) &= \psi_{\text{II}}(0) \\ 0 &= A \sin(k \cdot 0) + B \cos(k \cdot 0) \\ B &= 0 \end{aligned} \quad (5.45)$$

Na základě této podmínky upřesníme tvar vlnové funkce v oblasti II

$$\psi_{\text{II}} = A \sin(kx) \quad (5.46)$$

Sešijme vlnové funkce rovněž v bodě $x = L$:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{II}}(L) &= \psi_{\text{III}}(L) \\ A \sin(kL) &= 0 \end{aligned} \quad (5.47)$$

Poslední rovnice může být splněna buď

- a) jestliže $A = 0$,
- b) nebo $\sin(kL) = 0$

V případě a) by $\psi(x) = 0$ v celém oboru $(-\infty, +\infty)$. Pak by i pravděpodobnost nalezení částice

v celém oboru $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = 0$, což je spor s tím, že se částice nachází v potenciální jámě. Proto $A \neq 0$.

V případě b) platí

$$\begin{aligned} \sin(kL) &= 0 \\ kL &= n\pi & n = 1, 2, \dots \end{aligned} \quad (5.48)$$

Při aplikaci podmínek na vlnovou funkci jsme zavedli kladný celočíselný parametr n , který nazveme **kvantovým číslem**. Hodnotu kvantového čísla $n = 0$ jsme vyloučili, protože v tomto případě by $\psi(x) = 0$ v celém oboru a obdrželi bychom stejný fyzikální spor jako v případě a). Podmínka (5.48) ovšem omezuje možné hodnoty energie, protože parametr k souvisí s energií vztahem (5.43). Dosadíme-li podmínku (5.48) do tohoto vztahu, obdržíme výraz pro energii, která je parametrickou funkcí kvantového čísla n .

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad n = 1, 2, \dots$$

Částice v jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciální jámě nemůže nabývat libovolné energie. Energie je **kvantována**, nabývá pouze diskrétních hodnot daných předchozím vztahem.

Dosadíme-li možné hodnoty parametru k (5.48) do vyjádření vlnové funkce (5.46), zavedeme kvantové číslo n také do vyjádření vlnové funkce:

$$\psi_n = A \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad (5.49)$$

Integrační konstantu A určíme z normovací podmínky (5.4) a vztahu (5.35). Přitom uvážíme, že komplexně sdružená funkce k funkci reálné je s ní totožná. Upravujeme levou stranu normovací podmínky:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx = \int_{-\infty}^0 \psi_I^* \psi_I dx + \int_0^L \psi_{II}^* \psi_{II} dx + \int_L^{\infty} \psi_{III}^* \psi_{III} dx = A^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi}{L} x\right) dx = A^2 \frac{L}{2}$$

Poslední výraz musí být roven 1. Odtud

$$A = \sqrt{\frac{2}{L}} \quad (5.50)$$

Tím jsme získali konečné řešení SCHR pro případ nekonečně hluboké potenciální jámy:

$$\psi_n = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi}{L} x\right) \quad n = 1, 2, \dots \quad \text{pro } x \in \langle 0, L \rangle \quad (5.51)$$

$$\psi = 0 \quad \text{pro } x \notin \langle 0, L \rangle$$

$$E_n = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} n^2 \quad n = 1, 2, \dots \quad (5.52)$$

4. Diskutujeme získané řešení SCHR

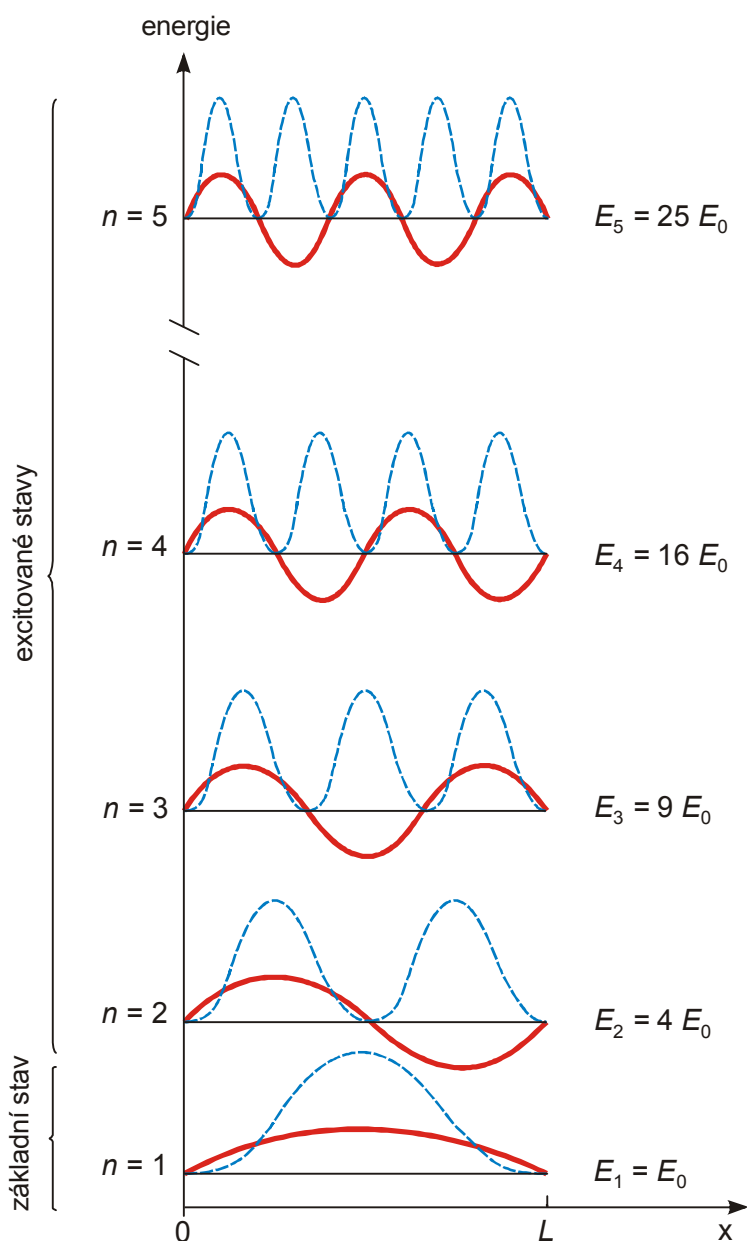
- Řešením SCHR jsme získali diskrétní hodnoty energie a příslušné stacionární vlnové funkce stavů majících tyto hodnoty energie. **Energie je kvantována**. Řešení je parametrickou funkcí kvantového čísla n .
- Energie nabývá nejmenší možnou hodnotu pro kvantové číslo $n = 1$. Tuto energii nazýváme **energií základního stavu** E_0 a příslušný stav popsáný vlnovou funkcí pro totéž kvantové číslo $n = 1$ nazveme **základní stav**. Všimněme si, že nejmenší energie, kterou může tento systém nabývat, je nenulová. Stav s jakoukoli vyšší energií se nazývá **excitovaný stav**. Energií E_n ve stavu s kvantovým číslem n můžeme vyjádřit pomocí energie základního stavu $E_0 = E_1$:

$$E_n = E_0 n^2 \quad (5.53)$$

$$E_0 = E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (5.54)$$

- Energie roste s kvadrátem kvantového čísla a je nepřímo úměrná kvadrátu rozměru jámy.

- Soubor možných hodnot energie nazýváme **spektrum energie (energetické spektrum)**. Možné hodnoty energie (5.52) jsou znázorněné na obr. 5.3. Termový diagram nezachovává měřítko osy energie. Hodnoty energií rostou se čtvercem kvantového čísla podle (5.52).
- Na tomtéž obr. 5.3 jsou znázorněny průběhy vlnových funkcí (5.51) v jednotlivých stavech daných kvantovým číslem n . Kvadráty vlnových funkcí určují závislost hustoty pravděpodobnosti výskytu částice na její poloze. Z obrázku je patrné, že částice, která je v základním stavu, se s největší pravděpodobností vyskytuje ve středu jámy. Se vzrůstajícím kvantovým číslem, se pravděpodobnost výskytu částice stává více „rovnoměrnou“ podél celé jámy. V limitním případě $n \rightarrow \infty$ se uzlové body a maxima pravděpodobnosti nacházejí velice blízko sebe, pravděpodobnost výskytu je prakticky stejná pro všechna



Obr. 5.3 Spektrum energie částice v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciální jámě, průběh vlnových funkcí (plně) a průběh hustoty pravděpodobnosti (čárkovaně). Znázorněné hodnoty energií nezachovávají měřítko osy

$x \in \langle 0, L \rangle$ a odpovídá tak klasickému popisu. Popsaná situace souhlasí s **principem korespondence**, podle něhož výsledky kvantové mechaniky pro velká kvantová čísla přecházejí ve výsledky odpovídající zákonům klasické fyziky.

Příklad 5.3

Elektron o hmotnosti m je zachycen v jednodimenzionální potenciální jámě o rozměru $L = 1,0 \cdot 10^{-10}$ m.

- Určete energii ΔE , která musí být dodána, aby elektron přešel ze základního do prvního excitovaného stavu.
- Určete pravděpodobnost nalezení elektronu v oblasti $x \in \langle 0,090 \cdot 10^{-10}, 0,110 \cdot 10^{-10} \rangle$ m v základním stavu.

Řešení:

Energie základního stavu $E_0 = E_1 = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2}$. Energie prvního excitovaného stavu $E_2 = 4E_1$. Systému musí být dodána energie $\Delta E = E_2 - E_1 = 3E_0$.

$$\text{Vypočteme } E_0 = \frac{(1,05 \cdot 10^{-34})^2 \cdot \pi^2}{2 \cdot 9,11 \cdot 10^{-31} (1,0 \cdot 10^{-10})^2} = 6,0 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 37 \text{ eV} . \Delta E = 3 \cdot 37 \text{ eV} = 111 \text{ eV}$$

K převedení elektronu ze základního do prvního excitovaného stavu je třeba dodat energii $\Delta E = 111$ eV.

Použijeme vztahy (5.35) a (5.3), kam za vlnovou funkci dosadíme vlnovou funkci základního stavu, $n = 1$,

$$\psi_1(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right).$$

$$P_{x_1, x_2} = \int_{x_1}^{x_2} \frac{2}{L} \sin^2 \frac{\pi x}{L} dx = \left(\frac{x}{L} - \frac{1}{2\pi} \sin \frac{2\pi x}{L} \right) \Bigg|_{x_1}^{x_2} . \text{ Po vyčíslení dostáváme pro pravděpodobnost nalezení částice}$$

v zadaném intervalu $P_{x_1, x_2} = 0,0038 = 0,38\%$.

Spektroskopická aplikace (metoda FEMO)

Řešení stavů částice v nekonečně hluboké potenciální jámě je podstatou kvantově mechanické metody FEMO (free elektron molecular orbital) používané k řešení energie a stavů molekulových systémů. Využívá se k řešení jednoelektronových vlnových funkcí v systémech, kde elektron může být považován za volný v určitém prostorovém intervalu, např. π -elektron v jednoduchém polyenovém řetězci.

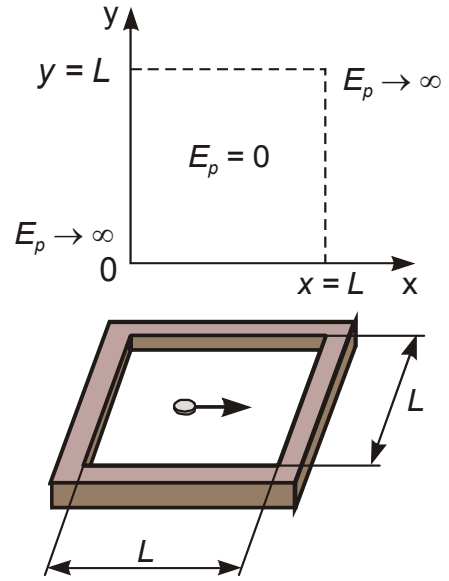
5.6.3 Částice v dvojrozměrné a třírozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciální jámě

Předchozí situaci, částici v jednorozměrné nekonečně hluboké jámě, můžeme rozšířit do dvou nebo tří rozměrů. Základní postup řešení zůstane stejný. Objeví se však nový jev, **degenerace energetických hladin**, který je důležitý při studiu struktury energetických hladin atomů (kap. 6). V tomto oddíle budeme řešit stav částice o hmotnosti m , jejíž potenciální energie je dána předpisem (5.55)

$$E_p(x, y) \rightarrow \infty \quad \text{pro} \quad x \notin \langle 0, L \rangle \vee y \notin \langle 0, L \rangle \quad (\text{oblast I})$$

$$E_p(x, y) = 0 \quad \text{pro} \quad x \in \langle 0, L \rangle \wedge y \in \langle 0, L \rangle \quad (\text{oblast II})$$

Jedná se tedy o dvojrozměrnou nekonečně hlubokou potenciální jámu. Klasickou analogií této situace je pohyb puku na ledové ploše se čtvercovou podstavou, která je omezena mantinely s výškou rostoucí nade všechny meze (obr. 5.4). Budeme opět postupovat podle bodů formulovaných na počátku odd. 5.6.



Obr. 5.4 Potenciální energie částice v dvojrozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciální jámě

1. Sestavíme SCHR pro daný průběh potenciální energie

Jestliže potenciální energie závisí na dvou proměnných x a y , pak můžeme očekávat, že i vlnová funkce závisí na těchto proměnných. Dvojdímenzionální SCHR má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y)}{\partial y^2} \right) + E_p(x, y) \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (5.56)$$

Ze stejných důvodů jako v případě jednorozměrné jámy je v oblasti I vlnová funkce $\psi(x, y) = 0$. V oblasti II přechází (5.56) na tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} \right) = E \psi \quad (5.57)$$

2. Řešíme diferenciální SCHR

Řešení této parciální diferenciální rovnice hledáme v separovaném tvaru jako součin funkcí

$$\psi(x, y) = f(x) g(y) \quad (5.58)$$

Do rovnice (5.57) dosadíme separované řešení (5.58), vydělíme funkcí $\psi(x, y) = f(x)g(y)$ a upravíme

$$\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dx^2} + \frac{1}{g} \frac{d^2 g}{dy^2} = -\frac{2m}{\hbar^2} E$$

Aby existovalo řešení, musí být členy na levé straně konstantní a jejich součet musí být roven pravé straně rovnice:

$$-k_x^2 - k_y^2 = -\frac{2m}{\hbar^2} E$$

$$k_x^2 + k_y^2 = \frac{2m}{\hbar^2} E$$

Funkce $f(x)$, $g(y)$ a zvolené konstanty tak splňují následující rovnice

$$\frac{1}{f} \frac{d^2 f}{dx^2} + k_x^2 = 0 \quad (5.59a)$$

$$\frac{1}{g} \frac{d^2 g}{dy^2} + k_y^2 = 0 \quad (5.59b)$$

$$E = \frac{\hbar^2}{2m} (k_x^2 + k_y^2) \quad (5.59c)$$

Řešení rovnic (5.59a) a (5.59b) vyjádříme v goniometrickém tvaru.

$$f(x) = A \sin(k_x x) + B \cos(k_x x)$$

$$g(y) = C \sin(k_y y) + D \cos(k_y y)$$

3. Aplikujeme požadavky na vlnovou funkci

Požadavek na spojitost vlnových funkcí vede k jejich sešívání na hranicích oblastí. Obdobný postup jako v případě jednodimenzionální jámy aplikujeme na funkce $f(x)$ a $g(y)$. Přitom se vynulují konstanty B a D a parametry k_x a k_y mohou nabývat pouze hodnot určených možnými hodnotami kvantových čísel n_x a n_y . Aplikací normovací podmínky určíme hodnoty integračních konstant A a C . Řešení má pak tvar

$$\psi_{n_x, n_y}(x, y) = f_{n_x}(x) g_{n_y}(y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_x \pi}{L} x\right) \sin\left(\frac{n_y \pi}{L} y\right) \quad n_x, n_y = 1, 2, \dots \quad (5.60)$$

$$E_{n_x, n_y} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} (n_x^2 + n_y^2) \quad n_x, n_y = 1, 2, \dots \quad (5.61)$$

4. Diskutujeme získané řešení SCHR

- Vlnová funkce popisující stav částice v dvojrozměrné pravoúhlé potenciální jámě a příslušná energie v tomto stavu jsou funkcí dvou kvantových čísel. V případě trojrozměrného problému bychom obdrželi závislost na třech kvantových číslech. Jednotlivé stavy charakterizované dvojicí kvantových čísel (n_x, n_y) jsou popsány vlnovou funkcí ve tvaru $\psi_{n_x, n_y}(x, y)$. Konkrétní tvar vlnové funkce se zjistí dosazením do vztahu (5.60).

Z vlnových funkcí se spočte hustota pravděpodobnosti $|\psi_{n_x, n_y}(x, y)|^2$.

- Nejnižší hodnota energie je pro $n_x = n_y = 1$. Základní stav je tedy stav $\psi_{1,1}(x, y)$ a energie základního stavu je podle 5.61

$$E_{1,1} = 2E_0 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{m L^2}$$

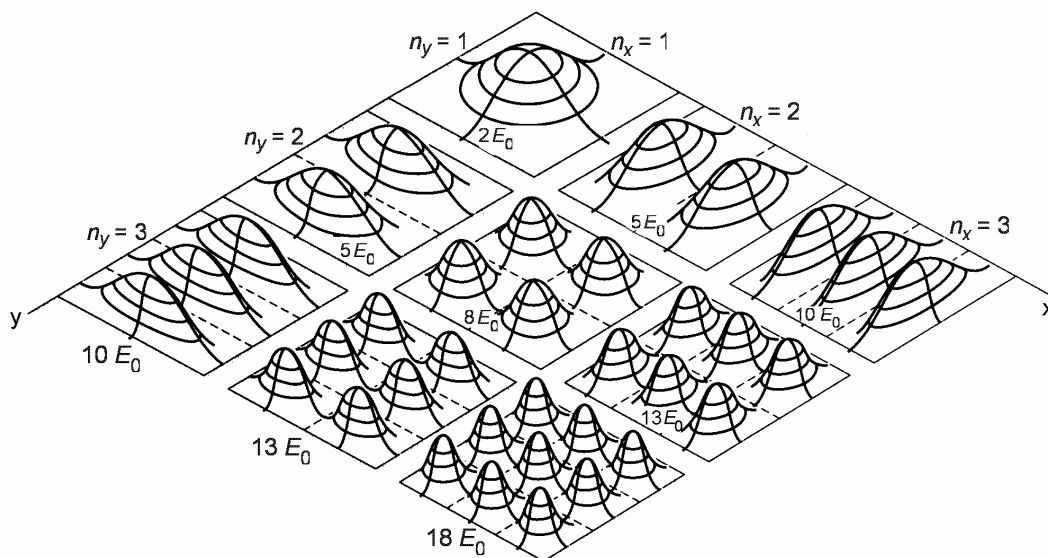
Schéma energetických hladin je znázorněno na obr. 5.5.

- V případě, že více stavů má stejnou hodnotu energie, hovoříme o **degeneraci energetické hladiny**. Stejnou hodnotu energie $5E_0$ nabývá částice v dvojrozměrné jámě ve stavech $\psi_{1,2}$ a $\psi_{2,1}$, stejnou hodnotu energie $10E_0$ ve stavech $\psi_{1,3}$ a $\psi_{3,1}$, atd. Tyto energetické hladiny jsou dvojnásobně degenerované. Některé hladiny jsou vícenásobně degenerované, např. energetická hladina $50E_0$ je trojnásobně degenerovaná, protože tuto hodnotu energie nabývá částice ve stavech $\psi_{1,7}$, $\psi_{7,1}$ a $\psi_{5,5}$, jak se snadno přesvědčíme dosazením do (5.61).
- Znázornění průběhu vlnových funkcí závislých na dvou prostorových proměnných vyžaduje již trojrozměrné zobrazení. Na obr. 5.6 jsou znázorněny průběhy hustot pravděpodobností pro několik stavů, které jsou charakterizovány kvantovými čísly n_x a n_y . Z obrázku je rovněž patrná degenerace hladin: např. stavy $\psi_{1,2}$ a $\psi_{2,1}$ mající energii $5E_0$ se od sebe jasně liší, jak je vidět z průběhu hustoty pravděpodobnosti. Ještě markantnější je odlišnost stavů $\psi_{7,1}$ a $\psi_{5,5}$ v případě degenerované energetické hladiny $50E_0$ (obr. 5.7). Degenerace energetických hladin má velký význam v kvantovém řešení atomů (kap. 6).

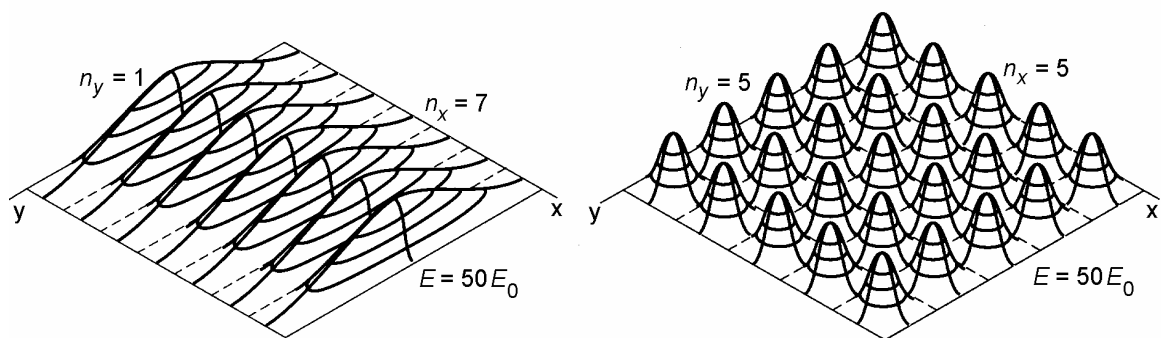
$\psi_{5,2}, \psi_{2,5}$	$29 E_0$
$\psi_{5,1}, \psi_{1,5}$	$26 E_0$
$\psi_{4,3}, \psi_{3,4}$	$25 E_0$
$\psi_{4,2}, \psi_{2,4}$	$20 E_0$
$\psi_{3,3}$	$18 E_0$
$\psi_{4,1}, \psi_{1,4}$	$17 E_0$
$\psi_{3,2}, \psi_{2,3}$	$13 E_0$
$\psi_{3,1}, \psi_{1,3}$	$10 E_0$
$\psi_{2,2}$	$8 E_0$
$\psi_{2,1}, \psi_{1,2}$	$5 E_0$
$\psi_{1,1}$	$2 E_0$

energie

Obr. 5.5 Schéma energetických hladin částice v dvojrozměrné pravoúhlé potenciální jámě



Obr. 5.6 Hustota pravděpodobnosti vybraných stavů částice v dvojrozměrné nekonečně hluboké potenciální jámě.



Obr. 5.7 Odlišný průběh hustoty pravděpodobnosti ve dvou stavech s energií $50 E_0$

Předchozí vztahy a jejich diskuzi můžeme snadno rozšířit na třírozměrný problém. Částici o hmotnosti m budeme uvažovat v nekonečně hluboké pravoúhlé potenciální jámě o hraně L .

Potenciální energie je dána předpisem

$$E_p(x, y, z) \rightarrow \infty \text{ pro } x \notin \langle 0, L \rangle \vee y \notin \langle 0, L \rangle \vee z \notin \langle 0, L \rangle \text{ (oblast I)} \quad (5.62)$$

$$E_p(x, y, z) = 0 \text{ pro } x \in \langle 0, L \rangle \wedge y \in \langle 0, L \rangle \wedge z \in \langle 0, L \rangle \text{ (oblast II)} \quad (5.63)$$

SCHR pro třídimenzionální problém má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi(x, y, z)}{\partial z^2} \right) + E_p(x, y, z) \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z)$$

Řešení této rovnice určíme podobně jako v případě dvou dimenzí

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \left(\sqrt{\frac{2}{L}} \right)^3 \sin \frac{n_x \pi}{L} x \sin \frac{n_y \pi}{L} y \sin \frac{n_z \pi}{L} z$$

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots \quad (5.64)$$

Energie částice je kvantována podle vztahu

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m L^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \quad n_x, n_y, n_z = 1, 2, \dots \quad (5.65)$$

Nejnižší energie je pro $n_x = n_y = n_z = 1$

$$E_{1,1,1} = 3E_0 = \frac{3\pi^2 \hbar^2}{2m L^2}$$

Schéma energetických hladin je na obr. 5.8

$\psi_{2,2,2}$	$12 E_0$
$\psi_{3,1,1}, \psi_{1,3,1}, \psi_{1,1,3}$	$11 E_0$
$\psi_{2,2,1}, \psi_{1,2,2}, \psi_{2,1,2}$	$9 E_0$
$\psi_{2,1,1}, \psi_{1,2,2}$	$6 E_0$
$\psi_{1,1,1}$	$3 E_0$

Obr. 5.8 Schéma energetických hladin částice v třírozměrné pravoúhlé potenciální jámě

5.6.4 Tunelový jev

V tomto oddíle budeme řešit SCHR částice nacházející se v poli s potenciální energií, která se skokem mění. Existence částice hmotnosti m je omezena na přímku, kterou ztotožníme s osou x .

Jednorozměrnou Schrödingerovu rovnici zapíšeme ve tvaru

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (E - E_p) \psi = 0 \quad (5.66)$$

Potenciální bariéra, $E > U_0$

Potenciální energie je popsána funkcí

$$E_p = 0 \quad \text{pro } x < 0 \quad \text{oblast I} \quad (5.67)$$

$$E_p = U_0 \quad \text{pro } x \geq 0 \quad \text{oblast II}$$

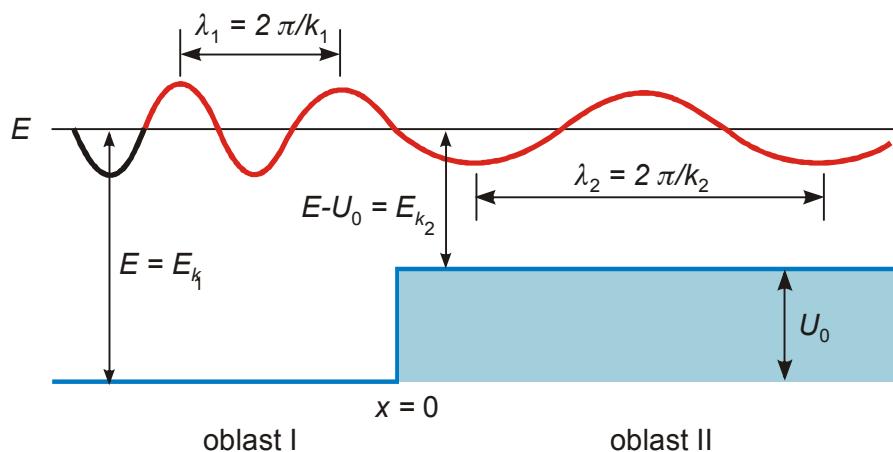
Její průběh je znázorněn na obr. 5.9. Celková energie částice nechť je $E > U_0$. V oblasti II platí $E - U_0 > 0$. Proto příslušné charakteristické rovnice sestavené pro řešení diferenciální rovnice (5.66) poskytnou komplexní řešení, která vyjádříme v exponenciálním tvaru

$$\psi_I = A e^{ik_1 x} + B e^{-ik_1 x}, \quad k_1 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (5.68)$$

$$\psi_{II} = C e^{ik_2 x} + D e^{-ik_2 x}, \quad k_2 = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (E - U_0)} \quad (5.69)$$

Příslušné vlnové funkce zahrnující časový vývoj stavu obdržíme vynásobením časovou částí

$$f(t) = e^{-\frac{i}{\hbar} E t}.$$



Obr. 5.9 Konečná potenciální bariéra, energie částice $E > U_0$

$$\Psi_I(x, t) = A e^{i\left(k_1 x - \frac{E}{\hbar} t\right)} + B e^{-i\left(k_1 x + \frac{E}{\hbar} t\right)} \quad (5.70)$$

$$\Psi_{II}(x, t) = C e^{i\left(k_2 x - \frac{E}{\hbar} t\right)} + D e^{-i\left(k_2 x + \frac{E}{\hbar} t\right)} \quad (5.71)$$

Vztah (5.70) představuje superpozici dvou vlnění: Člen s amplitudou A je vlnění postupující v kladném směru osy x , člen s amplitudou B je vlnění v záporném směru osy x , tj. od bariéry „odražené“. Obdobně ve vztahu (5.71) představuje člen s amplitudou C vlnění postupující nad bariérou směrem $k + \infty$ a člen s amplitudou D vlnění, které se šíří ze směru $+\infty$. Protože budeme uvažovat částici, která na bariéru dopadá zleva, položíme koeficient $D = 0$. Vlnová funkce a její derivace musí být spojité. Řešení sešijeme v bodě $x = 0$:

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad A + B = C$$

$$\left. \frac{d\psi_I}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=0} \quad k_1 A - k_1 B = k_2 C$$

Vyjádříme A a B pomocí C .

$$A = \frac{k_1 + k_2}{2k_1} C \quad (5.72)$$

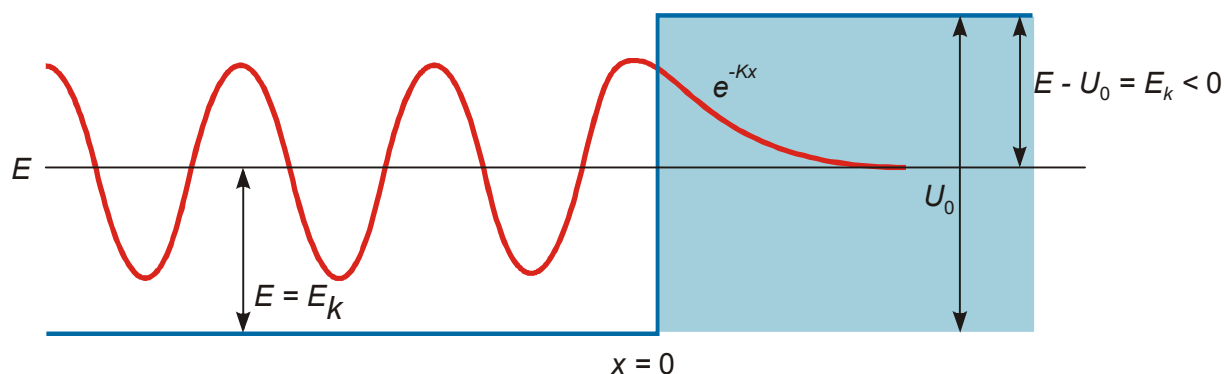
$$B = \frac{k_1 - k_2}{2k_1} C \quad (5.73)$$

Pravděpodobnost, s jakou se částice „odrazí“ od bariéry, je dána poměrem čtverců amplitud

$$R = \frac{|B|^2}{|A|^2} = \frac{(k_1 - k_2)^2}{(k_1 + k_2)^2} \quad (5.74)$$

Při klasickém popisu částice s energií $E > U_0$ nad bariérou projde a neodrazí se od ní. Kvantová částice se však s jistou pravděpodobností „odrazí“ od bariéry a s jistou pravděpodobností projde nad bariérou. Vlnová délka příslušné de Broglieovy vlny postupující nad bariérou se zvětší. Obdobně jako pravděpodobnost odrazu by mohla být spočtena pravděpodobnost průchodu nad bariérou. Jejich součet dá 1.

Potenciální bariéra, $E < U_0$



Obr. 5.10 Reálná část vlnové funkce pro konečnou potenciální bariéru a energii částice $E < U_0$.

Tvar potenciální energie zůstává stejný (vztah (5.67), obr. 5.10). Energie částice je však menší než výška potenciální bariéry. Řešení SCHR v oblasti I je stejné jako v předchozím případě:

$$\psi_I = A e^{i k x} + B e^{-i k x} \quad (5.75)$$

kde

$$k = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} E} \quad (5.76)$$

Odpovídající časový vývoj stavu je dán

$$\Psi_I(x, t) = A e^{i\left(kx - \frac{E}{\hbar} t\right)} + B e^{-i\left(kx + \frac{E}{\hbar} t\right)} = \Psi_+(x, t) + \Psi_-(x, t) \quad (5.77)$$

První člen reprezentuje vlnění postupující v kladném směru osy x , druhý člen v záporném směru osy x , tedy odraženou vlnu.

V oblasti II ($x > 0$) je $E - U_0 < 0$. SCHR rovnici převedeme na tvar

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} = K^2 \psi \quad (5.78)$$

kde

$$K = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} (U_0 - E)} \quad (5.79)$$

Príslušná charakteristická rovnice poskytuje dva reálné kořeny a vlnová funkce v oblasti II je

$$\psi_{II} = C e^{K x} + D e^{-K x} \quad (5.80)$$

Část řešení s integrační konstantou C není dobře vychovaná, protože není konečná pro $x \rightarrow \infty$. Proto položíme $C = 0$. Časový vývoj stavu v oblasti II je pak

$$\Psi_{II}(x, t) = D e^{-K x} e^{-i \frac{E}{\hbar} t} \quad (5.81)$$

Sešijeme vlnové funkce a jejich derivace v místě nespojitosti potenciální energie, tj. v bodě $x = 0$.

$$\psi_I(0) = \psi_{II}(0) \quad A + B = D$$

$$\left. \frac{d\psi_I}{dx} \right|_{x=0} = \left. \frac{d\psi_{II}}{dx} \right|_{x=0} \quad ikA - ikB = -KD$$

Dostáváme

$$A = \frac{k + iK}{2k} D \quad (5.82)$$

$$B = \frac{k - iK}{2k} D \quad (5.83)$$

Odtud vlnová funkce pro případ konečné potenciální bariéry a částice s energií $E < U_0$ je

$$\psi_I = \frac{D}{2k} (k + iK) e^{i k x} + \frac{D}{2k} (k - iK) e^{-i k x}$$

$$\psi_{II} = D e^{-Kx}$$

Hustota pravděpodobnosti $|\Psi_+(x,t)|^2$ pro dopadající vlnu (první člen ve vztazích (5.77)) a $|\Psi_-(x,t)|^2$ pro odraženou vlnu (druhý člen ve vztazích (5.77)) se vypočte podle (5.1). Využitím (5.82) a (5.83) dostáváme

$$|\Psi_+(x,t)|^2 = \Psi_+^* \Psi_+ = A^* A = \frac{(k-iK)D}{2k} \frac{(k+iK)D}{2k} = \frac{k^2 + K^2}{4k^2} D^2 \quad (5.84)$$

$$|\Psi_-(x,t)|^2 = \Psi_-^* \Psi_- = B^* B = \frac{(k+iK)D}{2k} \frac{(k-iK)D}{2k} = \frac{k^2 + K^2}{4k^2} D^2 \quad (5.85)$$

Hustoty pravděpodobnosti pro dopadající a odraženou částici jsou konstantní v oblasti $x \leq 0$. Pro $x > 0$ je hustota pravděpodobnosti

$$|\Psi_{II}(x,t)|^2 = D^2 e^{-2Kx} \quad (5.86)$$

Hustota pravděpodobnosti v oblasti II ($x > 0$) exponenciálně klesá s x . Kvalitativní rysy řešení jsou znázorněny na obr. 5.10.

Definujme **penetrační hloubku** x_p jako vzdálenost, kdy hustota pravděpodobnosti klesne na $1/e$ násobek počáteční hodnoty:

$$|\Psi_{II}(x_p, t)|^2 = \frac{D^2}{e} = D^2 e^{-2Kx_p} \quad (5.87)$$

$$x_p = \frac{1}{2K}$$

Z obr. 5.10 a ze vztahu (5.87) je patrná odlišnost kvantového a klasického popisu. V klasickém popisu se částice nemůže nacházet v oblasti $x > 0$, zatímco při kvantovém popisu částice penetruje do klasicky zakázané oblasti. Vypočteme ještě pravděpodobnost odrazu R , kterou definujeme jako poměr hustot pravděpodobnosti pro odraženou $|\Psi_-|^2$ a dopadající částici $|\Psi_+|^2$ ((5.84) a (5.85)).

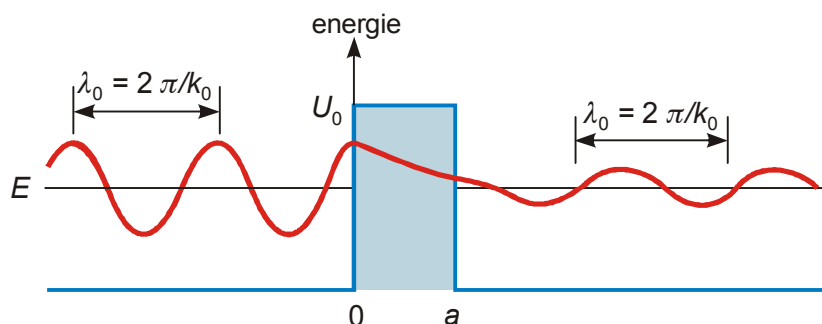
$$R = \frac{|\Psi_-|^2}{|\Psi_+|^2} = 1 \quad (5.88)$$

Výsledek je stejný jako při klasickém popisu. To není v rozporu s nenulovou penetrační hloubkou, protože penetrující částice se nakonec „vrátí“, neboť hustota pravděpodobnosti pro $x \rightarrow \infty$ je nulová.

Potenciální překážka konečného rozměru, $E < U_0$

Potenciální energie v tomto případě má průběh znázorněný na obr. 5.11. Postup kvantově mechanického řešení je obdobný předchozím případům. SCHR se řeší ve třech oblastech a na získaná řešení se uplatňují požadavky na dobře vychovanou vlnovou funkci. V tomto odstavci budeme výsledky řešení pouze kvalitativně diskutovat na základě zkušeností, které jsme získali řešením předchozích příkladů.

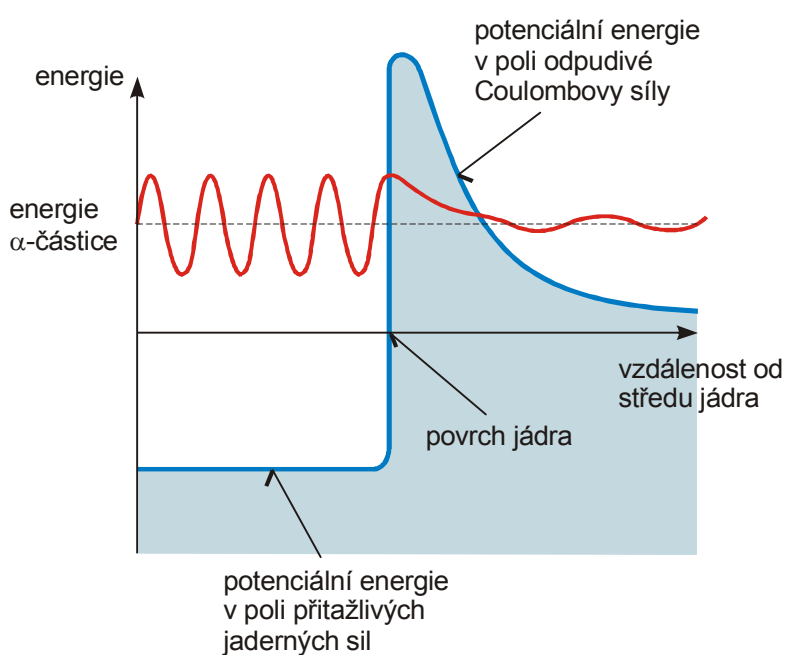
Při klasickém popisu se částice dopadající na překážku s energií $E < U_0$ s jistotou odrazí. Kvantově mechanické řešení však poskytuje nenulovou pravděpodobnost, že se částice bude nacházet v oblasti $x \in \langle 0, a \rangle$. Tato pravděpodobnost exponenciálně klesá s hloubkou prostupu. Hustota pravděpodobnosti v místě výstupu z překážky závisí na rozměru a bariéry a poměru E/U_0 . V oblasti $x > a$ se částice opět pohybuje jako volná. Hustota pravděpodobnosti výskytu je ovšem menší, než byla hustota pravděpodobnosti nalezení částice před bariérou. Popsaný kvantově mechanický proces prostupu částice překážkou se označuje jako **tunelový jev**. Uvedme několik příkladů, kdy se popsáný tunelový jev pozoruje.



Obr. 5.11 Potenciální bariéra konečné výšky a tunelový jev

- **Radioaktivní rozpad za vzniku α -částic.** Při jednom typu radioaktivního rozpadu jádro emituje α -částice, což je „agregát“ vytvořený ze dvou protonů a dvou neutronů. Aby α -částice opustila jádro, musí překonat potenciální bariéru, která je znázorněna na obr. 5.12.

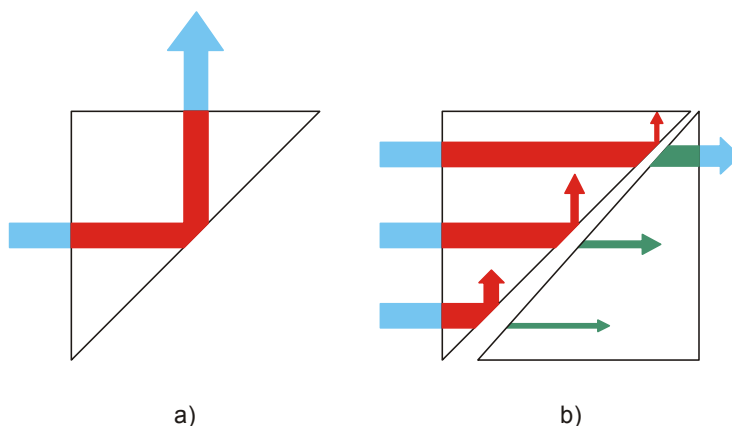
Při klasickém popisu by k α -rozpadu nemohlo dojít, protože energie α -částice je menší než výška bariéry. Podle kvantověmechanického popisu však existuje nenulová pravděpodobnost, že k rozpadu dojde. Naměřená pravděpodobnost α -rozpadu velmi dobře souhlasí s kvantově mechanickými výpočty.



Obr. 5.12 Průchod α -částice potenciální bariérou při α -rozpadu

Totální odraz. Na tomto jevu ukážeme že tunelový jev je spjat s vlnovou povahou duálního popisu. Pozorujeme ho v případě mechanického vlnění (vodní hladina), nebo elektromagnetického vlnění (světlo). Při dopadu vlnění z opticky hustšího prostředí (např. sklo) na rozhraní s opticky řidším prostředím (např. vzduch) pod úhlem dopadu větším než mezní úhel je všechno vlnění odraženo a nedochází k lomu do opticky řidšího prostředí (obráz. 5.13a). Hovoříme o totálním odrazu. Jestliže opticky řidší prostředí má tvar úzké štěrbin, za kterou násle-

duje opět opticky hustší prostředí (obr. 5.13b), dojde k částečné penetraci vlnění do tohoto prostředí. Intenzita penetrovaného vlnění závisí na šířce štěrbin. Tento jev je pozorovatelný, jestliže štěrbina je úzká, rozměru řádově několika násobků vlnové délky.



Obr. 5.13 Totální odraz (a), tunelový jev při totálním odrazu (b)

5.6.5 Lineární harmonický oscilátor

V klasické fyzice se jako lineární harmonický oscilátor označuje těleso o hmotnosti m , které se pohybuje pod vlivem lineární návratné síly $F_x = -kx$. Budeme uvažovat pohyb tělesa podél osy x (jednorozměrný případ). Souřadnice x určuje vzdálenost od rovnovážné polohy. Těleso o hmotnosti m koná pod vlivem lineární návratné síly periodický pohyb s úhlovou frekvencí $\omega_0 = \sqrt{k/m}$ a frekvencí $\nu = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{m}}$. Potenciální energie příslušející silovému poli li-

neární návratné síly závisí na vzdálenosti x od rovnovážné polohy, $E_p = \frac{1}{2} kx^2$. Nabývá své maximální hodnoty v největší vzdálenosti od rovnovážné polohy, kdy $|x| = A$, kde A je amplituda pohybu. Průběh potenciální energie je znázorněn na obr. 5.14.

Tento systém má rovněž význam v kvantové mechanice, neboť lineárním harmonickým pohybem je dobře aproximována např. vibrace dvouatomových molekul.

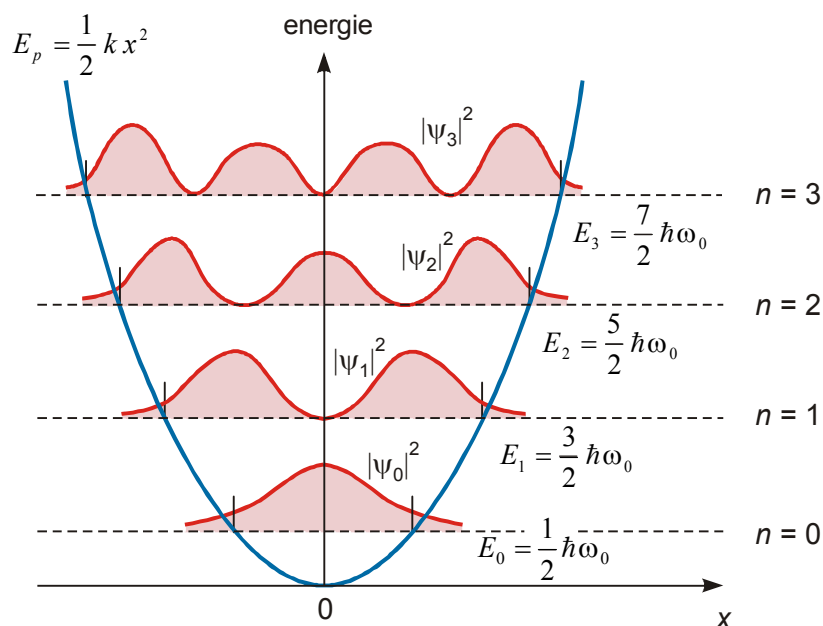
Postup matematického řešení SCHR pouze naznačíme, podrobněji budeme diskutovat až výsledky řešení. SCHR má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 \psi(x) = E \psi(x) \quad (5.89)$$

Řešení této diferenciální rovnice je již obtížnější než v případě konstantních potenciálních energií. Po aplikaci podmínek na dobře vychovanou vlnovou funkci, dostáváme polynomiální vyjádření řešení ve tvaru

$$\psi_n = A f_n(x) e^{-\beta x^2} \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.90)$$

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega_0 = \left(n + \frac{1}{2}\right) h \nu \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (5.91)$$



Obr. 5.14 Kvantově mechanické řešení lineárního harmonického oscilátoru. Vzdálenost krátkých svislých čar od osy energie představuje klasickou amplitudu A_i harmonického pohybu s celkovou energií E_i .

kde $f_n(x)$ je polynom n -tého řádu, ω_0 a ν jsou úhlová frekvence a frekvence klasického lineárního oscilátoru se silovou konstantou k . Hustoty pravděpodobnosti vypočtené z vlnových funkcí jsou znázorněny na obr. 5.14. Kvantově mechanické řešení lineárního harmonického oscilátoru má následující rysy.

- Energie nabývá pouze diskrétních hodnot, je **kvantována**. Energie základního stavu odpovídá kvantovému číslu $n = 0$,

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega_0 = \frac{1}{2} h \nu \quad (5.92)$$

Vypočteme rozdíl sousedních dvou energetických hladin

$$E_{n+1} - E_n = \left((n+1) + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 - \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 = \hbar \omega_0$$

$$\Delta E = \hbar \omega_0 = h \nu \quad (5.93)$$

Tento rozdíl nezávisí na kvantovém čísle, sousední energetické hladiny jsou v celém spektru stejně vzdálené. Energetické spektrum lineárního harmonického oscilátoru je tedy na rozdíl od energetického spektra potenciální jámy **ekvidistantní**.

- Průběh hustoty pravděpodobnosti znázorněný na obr. 5.14 má významný rys: Existuje nenulová pravděpodobnost, že se částice nachází v oblasti $x < -A$, $x > A$. Říkáme, že kvantová částice proniká do klasicky nedostupné oblasti. To je v rozporu s klasickou představou: Z obr. 5.14 totiž plyne, že pro $x \notin \langle -A, A \rangle$ je potenciální energie $E_p > E_n$, kde E_n je celková energie ve stacionárním stavu. Kinetická energie $E_k = E_n - E_p$ by byla záporná. To je v klasické fyzice nemožné, a proto v klasické fyzice částice o energii $E = E_n$ se pod vlivem lineární návratné síly se může nacházet pouze v oblasti $x \in \langle -A, A \rangle$.

Základní stav lineárního harmonického oscilátoru

V tomto odstavci vyřešíme SCHR pro základní stav lineárního harmonického oscilátoru. Vyjdeme z rovnice (5.89)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{1}{2} k x^2 \psi = E \psi \quad (5.94)$$

Řešení pro základní stav odhadneme ve tvaru podle (5.90)

$$\psi(x) = A e^{-\beta x^2} \quad (5.95)$$

Tento odhad se nám zdá přirozený, protože musí platit $\psi(x) \rightarrow 0$ pro $x \rightarrow \pm\infty$. Derivujeme

$$\frac{d\psi}{dx} = -2\beta x (A e^{-\beta x^2}) \quad , \quad \frac{d^2\psi}{dx^2} = -2\beta (A e^{-\beta x^2}) - 2\beta x (-2\beta x) A e^{-\beta x^2}$$

Dosadíme do rovnice (5.94)

$$-\frac{\hbar^2}{2m} (-2\beta A e^{-\beta x^2} + 4\beta^2 x^2 A e^{-\beta x^2}) + \frac{1}{2} k x^2 (A e^{-\beta x^2}) = E A e^{-\beta x^2}$$

Vydělíme nenulovým členem $A e^{-\beta x^2}$ a upravíme

$$\begin{aligned} \frac{\hbar^2 \beta}{m} - \frac{2\beta^2 \hbar^2 x^2}{m} + \frac{1}{2} k x^2 &= E \\ \left(-E + \frac{\hbar^2 \beta}{m} \right) + \left(-\frac{2\beta^2 \hbar^2}{m} + \frac{1}{2} k \right) x^2 &= 0 \end{aligned} \quad (5.96)$$

Tento vztah bude splněn pro všechna x , pokud výrazy v obou závorkách budou zároveň nulové. Z druhé závorky dostaneme

$$\beta = \pm \frac{1}{2} \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}}$$

Požadavku, aby vlnová funkce (5.95) nerostla nade všechny meze pro $x \rightarrow \pm\infty$, vyhovuje pouze kladný kořen. Dostáváme tak řešení ve tvaru

$$\psi(x) = A e^{-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}} x^2} \quad (5.97)$$

Z požadavku, aby první závorka ve výrazu (5.96) byla nulová, dostáváme (použijeme, že $\sqrt{k/m} = \omega_0$ je úhlová frekvence klasického oscilátoru)

$$\begin{aligned} E = \frac{\hbar^2}{m} \beta &= \frac{1}{2} \hbar \sqrt{\frac{k}{m}} \\ E = E_0 &= \frac{1}{2} \hbar \omega_0 \end{aligned} \quad (5.98)$$

Dá se ukázat, že řešení (5.98) je nejnižší možná hodnota energie E (proto označení hodnoty této energie E_0). Vlnová funkce (5.97) tedy popisuje základní stav. Hodnotu integrační konstanty A zjistíme z normovací podmínky

$$|A|^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}} x^2} dx = 1$$

Konečné řešení základního stavu je

$$\psi_0(x) = \left(\frac{mk}{\pi^2 \hbar^2} \right)^{1/8} e^{-\frac{1}{2} \sqrt{\frac{mk}{\hbar^2}} x^2} \quad (5.99)$$

Stav o vyšší energii bychom našli pro řešení ve tvaru

$$\psi = Ax e^{-\beta x^2} \quad (5.100)$$

kde A a β jsou konstanty (obecně odlišné od předchozích). Postupným řešením bychom zjistili celé spektrum energie

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_0 = \left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \nu \quad n = 0, 1, 2, \dots() \quad (5.101)$$

příslušné vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti znázorněné na obr. 5.14 .

6. Kvantové řešení atomů vodíku a vodíkového typu

V této kapitole rozvineme klasický planetární model atomu zavedením Bohrových postulátů, které umožňují vysvětlit energetickou strukturu elektronových hladin a pozorovaná čárová spektra atomů. Bohrov model atomu však selhává např. při vysvětlení spekter mnohaelektronových atomů a magnetických vlastností atomů. Teprve kvantová mechanika, kterou využijeme při nástinu řešení Schrödingerovy rovnice pro atomy podobné vodíku, umožní bez zavedení umělých postulátů vysvětlit tato experimentální fakta.

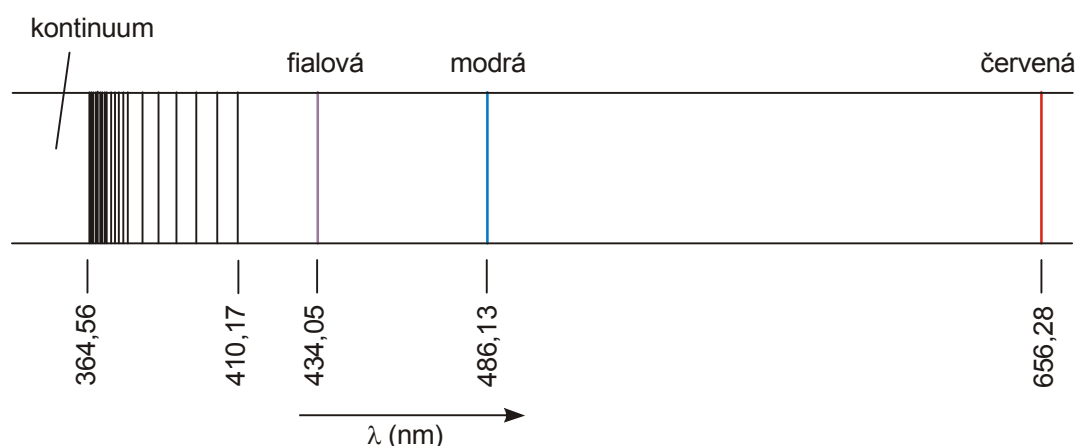
6.1 Bohrov model atomu vodíku

Podle klasické představy je atom vodíku tvořen kladně nabitým jádrem, v němž je soustředěná převážná část hmotnosti atomu a jehož rozměr je řádově 10^4 krát menší než typický rozměr celého atomu. Kolem jádra obíhají po kružnicích – **orbitech** – elektrony. Přitom dostředivou silou je coulombická síla (planetární model atomu). Podle klasické teorie elektromagnetismu by obíhající elektron musel stále emitovat elektromagnetické záření. Tím by ztrácel svou energii a poloměr jeho trajektorie by se stále zmenšoval. Podle planetárního modelu by byl atom nestabilní systém, a to je v rozporu se skutečností.

Dalším experimentálním faktem, který není vysvětlitelný pomocí planetárního modelu, je pozorování emisních atomárních spekter. Jestliže je atomům dodána energie, například elektrickým výbojem, uvolňují atomy tuto energii ve formě elektromagnetického záření. Toto záření však není spojité, nýbrž po spektrálním rozkladu obsahuje pouze diskrétní čáry určitých vlnových délek, poskytuje tzv. **čárové spektrum** (obr. 6.1), které je charakteristické pro atomy určitého prvku. Vodíkový atom poskytuje série čar, jejichž vlnové délky byly popsány empiricky. Vlnové délky čar λ_n tzv. Balmerovy série, nacházející se ve viditelném oboru spektra, splňují tzv. Rydbergův vztah

$$\frac{1}{\lambda_n} = \frac{\nu_n}{c} = R_H \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{n^2} \right) \quad (6.1)$$

kde ν_n je frekvence spektrální čáry, n je celé číslo, $n = 3, 4, 5, \dots$, $R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$ je Rydbergova konstanta.



Obr. 6.1 Spektrum vodíkového atomu ve viditelném a blízkém ultrafialovém oboru – Balmerova série.

Existenci čárových atomárních spekter je možné vysvětlit v rámci semiklasického Bohrova modelu, který rozšiřuje planetární model o několik postulátů, jejichž vysvětlení však nepodává. Přesto Bohrův model atomu vodíku má význam, protože na základě jednoduchých kvantových představ poskytuje energetické spektrum atomu vodíku, které je ve shodě s experimentálními daty.

6.1.1 Bohrovy postuláty

Bohrův model vychází z planetárního modelu atomu. Navíc jsou splněny následující postuláty.

1. postulát

Elektron se může pohybovat pouze po takových kružnicových trajektoriích (orbitech), ve kterých velikost jeho momentu hybnosti vzhledem ke středu trajektorie nabývá celistvých násobků \hbar

$$L_n = n \hbar = n \frac{h}{2\pi} \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.2)$$

*Kladné celé číslo n nazveme **hlavním kvantovým číslem**. Orbity splňující vztah (6.2) nazýváme **dovolené orbity**.*

Z hlediska de Broglieovy hypotézy (odd. 4.2.4) můžeme Bohrův 1. postulát komentovat následovně: Vyjádříme velikost momentu hybnosti elektronu vzhledem ke středu kružnicové trajektorie a elektronu majícímu hybnost p přiřadíme podle de Broglieova vztahu (4.29) vlnovou délku λ .

$$L = p r \sin \frac{\pi}{2} = p r = \frac{h}{\lambda} r$$

Dosazením do (6.2) dostáváme

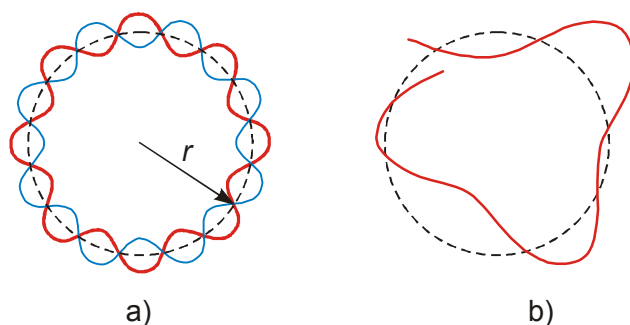
$$\begin{aligned} \frac{h}{\lambda} r &= n \frac{h}{2\pi} \\ n \lambda &= 2\pi r \end{aligned} \quad (6.3)$$

Poslední vztah můžeme interpretovat tak, že délka kružnicové trajektorie je celistvým násobkem vlnové délky vlnění, které přiřazujeme elektronu při duálním popisu. Podle obr. 6.2a je tedy Bohrův 1. postulát ekvivalentní tomu, že elektron se může pohybovat jen po takových orbitech, na kterých může vzniknout stojaté vlnění. Jestliže by se elektron pohyboval po trajektorii, která nesplňuje Bohrův 1. postulát, pak by stojaté vlnění nevzniklo a po mnoha obězích by vlnění superpozicí zaniklo (obr. 6.2b).

2. postulát

Elektrony pohybující se po dovolených orbitech, které splňují Bohrův 1. postulát, nevyzařují energii. Každý dovolený orbit je charakterizován poloměrem a energií elektronu.

Bohrův 2. postulát je v rozporu s klasickou teorií elektromagnetického pole, protože postuluje, že náboj pohybující se se zrychlením nevyzařuje energii. Můžeme ho však intuitivně přijmout, uvážíme-li skutečnost, že stojaté vlnění nepřenáší energii), a tudíž orbity určené 1. postulátem jsou stacionární.



Obr. 6.2 Stojaté vlnění příslušející elektronu, který se nachází na dovoleném orbitu (a), vlny příslušející elektronu vorbitu, který nesplňuje Bohrův 1. postulát (b)

3. postulát

Elektrony mohou přecházet pouze z jednoho dovoleného orbitu na jiný dovolený orbit. Přitom atomy vyzařují nebo pohlcují elektromagnetické záření o frekvenci

$$\nu = \frac{|E_f - E_i|}{h} \quad (6.4)$$

kde E_f a E_i jsou energie elektronu v orbitech o hlavních kvantových číslech n_f a n_i .

Bohrův 3. postulát byl zaveden proto, aby vysvětlil pozorovaná čárová spektra atomů.

6.1.2 Energetické hladiny v Bohrově modelu atomu

Vypočteme energie elektronů v Bohrově modelu atomu. Celkovou energii elektronu o hmotnosti m_e a náboji $-e$, který se rychlostí v pohybuje po kružnicové trajektorii o poloměru r , vyjádříme jako součet kinetické a potenciální energie. Protože hmotnost jádra vodíkového atomu je 1835 krát větší než hmotnost elektronu nesoucího náboj $-e$, budeme předpokládat, že nehybné jádro vytváří elektrostatické pole, ve kterém se pohybuje elektron. Celková energie elektronu je

$$E = E_k + E_p = \frac{1}{2} m_e v^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.5)$$

Elektrostatická síla (FI), kterou působí jádro na elektron, je silou dostředivou

$$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r^2} = \frac{m_e v^2}{r} \quad (6.6)$$

Tento vztah můžeme přepsat

$$m_e v^2 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (6.7)$$

a dosadit do (6.5):

$$E = \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} = -\frac{e^2}{8\pi\epsilon_0 r} \quad (6.8a)$$

Využitím vztahu (6.7) můžeme vyjádřit celkovou energii obíhajícího elektronu také ve tvaru

$$E = -\frac{1}{2} m_e v^2 \quad (6.8b)$$

Do vztahu (6.7) dosadíme za rychlost výraz z Bohrova 1. postulátu $v = \frac{n\hbar}{m_e r}$ a porovnáme

oba výrazy (6.8) pro energii:

$$r_n = \frac{4\pi\hbar^2\epsilon_0}{e^2 m_e} n^2 \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.9)$$

Obdrželi jsme vztah pro možné hodnoty r_n poloměru trajektorie elektronu pomocí hlavního kvantového čísla vodíkového atomu n . Nejmenší hodnota poloměru odpovídá hlavnímu kvantovému číslu $n = 1$ a označuje se jako **Bohrův poloměr** a_0

$$a_0 = r_1 = \frac{4\pi \hbar^2 \varepsilon_0}{e^2 m_e} \quad (6.10)$$

Bohrův 1. postulát, kvantování velikosti momentu hybnosti, se tedy projevuje rovněž v kvantování poloměru trajektorie.

Dosadíme za poloměr r do vztahu pro energii (6.8a). Dostáváme, že energie elektronu ve vodíkovém atomu je rovněž kvantovaná a je funkcí hlavního kvantového čísla n .

$$E_n = -\frac{e^4 m_e}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.11)$$

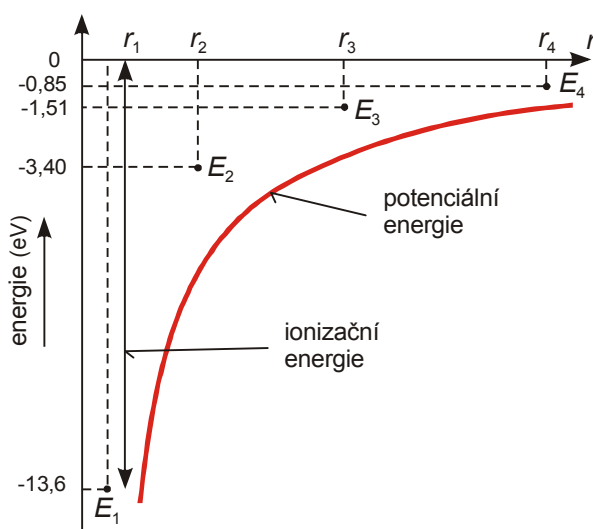
Nejnižší hodnota energie odpovídá hlavnímu kvantovému číslu $n=1$ a nabývá jí elektron nejblíže jádru nacházející se na orbitu o poloměru $r = a_0$. Tento stav se nazývá **základní stav** elektronu ve vodíkovém atomu. Je to stav s nejvíce zápornou energií a elektron je v něm nejtěsněji vázán k jádru.

$$E_1 = -E_0 = -\frac{e^4 m_e}{32\pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} \quad (6.12)$$

Absolutní hodnota $|E_1| = E_0$ po vyčíslení dává $E_0 = 2,17 \cdot 10^{-18} \text{ J} = 13,6 \text{ eV}$. Energie dalších stavů může být vyjádřena pomocí hodnoty E_0 . Struktura energetických hladin je znázorněna na obr. 6.3.

$$E_n = -E_0 \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.13)$$

Ionizační energie vodíkového atomu v základním stavu je rovna energii, která musí být dodána, aby byl elektron ze základního stavu převeden do vzdálenosti $r \rightarrow \infty$. Podle obr. 6.3 je tato ionizační energie rovna E_0 .



Obr. 6.3 Potenciální energie elektronu ve vodíkovém atomu s kvantovanými hodnotami energie E_i , kterých elektron nabývá podle Bohrova modelu

Spektrum vodíkového atomu

Podle Bohrova 2. postulátu elektron nacházející se v dovoleném stavu charakterizovaném energií a poloměrem trajektorie si svou energii zachovává a neztrácí ji vyzařováním. Podle Bohrova 3. postulátu (6.4) při přechodu ze stavu s hlavním kvantovým číslem n_i a energií E_i na stav s hlavním kvantovým číslem n_f a energií E_f ($E_f < E_i$) je atomem emitováno elektromagnetické záření o frekvenci

$$\nu = \frac{E_i - E_f}{h} \quad (6.14)$$

Dosadíme z (6.13) a dostáváme

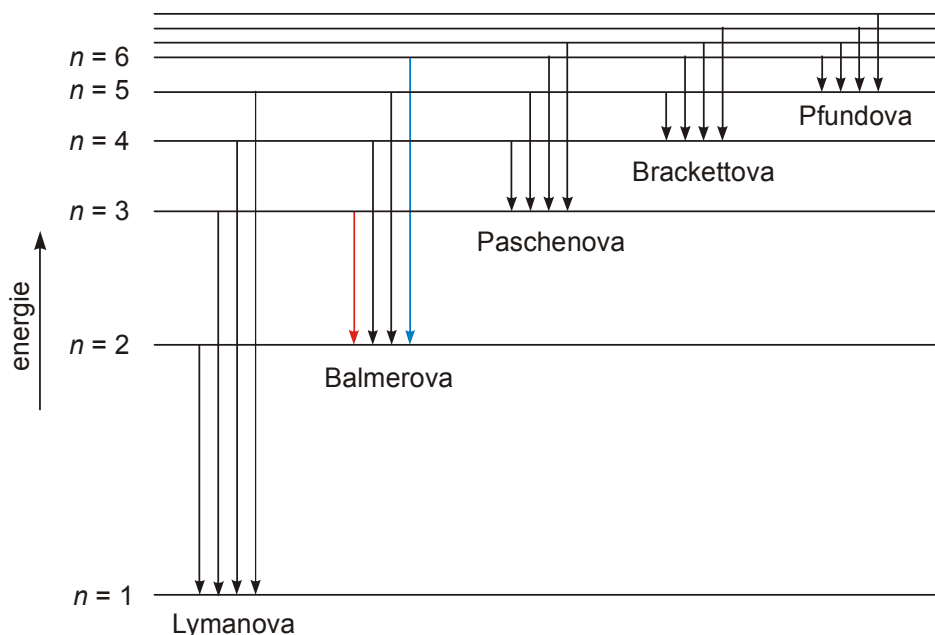
$$\nu = \frac{E_0}{h} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (6.15)$$

Pro vlnovou délku λ pak obdržíme vztah

$$\frac{1}{\lambda} = \frac{\nu}{c} = \frac{E_0}{hc} \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) = R_H \left(\frac{1}{n_f^2} - \frac{1}{n_i^2} \right) \quad (6.15)$$

Přitom jsme zavedli Rydbergovu konstantu R_H (srovnejte se vztahem (6.1)).

Přechody ze stavů s kvantovými čísly n_i do stavu s kvantovým n_f ($n_f < n_i$) vytvářejí tzv. série čar ve spektru vodíkového atomu. Jejich historické názvy jsou uvedeny na obr. 6.4. Naměřené polohy čar jsou ve shodě se vztahem (6.15), který vychází z Bohrova modelu atomu.



Obr. 6.4 Schéma energetických hladin a série přechodů ve vodíkovém atomu (energie hladin nejsou znázorněny v měřítku)

Další jednoelektronové atomy

Bohrův model vodíkového atomu může být rozšířen na další jednoelektronové atomy jako jsou izotopy vodíku ^2H a ^3H , dále He^+ , Li^{2+} , Be^{3+} apod., v nichž jeden elektron obíhá kolem jádra majícího náboj $+Ze$. Takové atomy se nazývají **atomy vodíkového typu**. Při odvozování vztahů se hodnota náboje jádra vodíkového atomu $+e$ nahradí hodnotou skutečného náboje jádra $+Ze$. Energetické spektrum je pak dáno vztahem

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{32 \pi^2 \hbar^2 \varepsilon_0^2} \frac{1}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.17)$$

6.2 Kvantově mechanické řešení atomů vodíkového typu

Bohrův model atomu vodíku dobře předpovídá energetické spektrum vodíkového atomu a dalších jednoelektronových atomů. Selhává ovšem, je-li aplikován na atom helia nebo další víceelektronové atomy. Bohrovy postuláty jsou ve svých důsledcích v rozporu s klasickou teorií elektromagnetismu. V následujících oddílech budeme řešit stavy elektronu v atomech vo-

díkového typu v souladu s kvantově mechanickým popisem, který byl zaveden v odd. 5.1 a aplikován na jednoduché systémy v odd. 5.6.

6.2.1 Schrödingerova rovnice pro částici v coulombickém poli

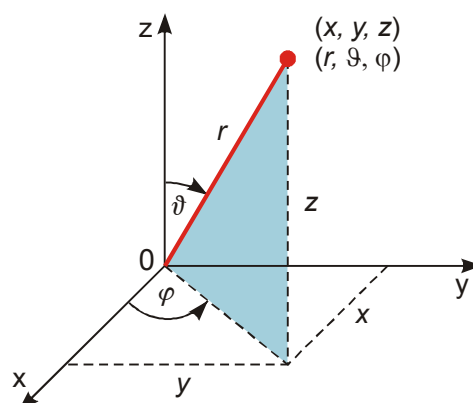
Při řešení stacionárních stavů a energií vodíkového atomu budeme využívat stejného postupu jako v odd. 5.6. Nejdříve však převedeme řešení dvoučásticového problému (jádro a elektron) na řešení jednočásticového problému (elektron v elektrostatickém poli jádra). K takovému zjednodušení jsme oprávněni, uvědomíme-li si, že hmotnost jádra, protonu, je 1835 krát větší, než hmotnost elektronu. V případě dalších atomů vodíkového typu je poměr ještě větší*. Říkáme, že řešíme vodíkový atom v *jednočásticovém přiblížení a v centrálním poli*.

1. Sestavíme SCHR pro daný průběh potenciální energie

Elektron o náboji $-e$ a jádro o náboji Ze budeme považovat za bodové náboje. Potenciální energie elektronu v poli jádra je pak vyjádřena vztahem

$$E_p(r) = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{r} \quad (6.18)$$

kde r je vzdálenost elektronu od bodového jádra, které nese náboj Ze . Protože potenciální energie je zde funkcí tří souřadnic, je nutné řešit obecnou trojrozměrnou SCHR. Zvolíme souřadnicovou soustavu s počátkem ve středu jádra (obr. 6.5). SCHR pro systém s potenciální energií (6.18) má tvar



Obr. 6.5 Poloha elektronu v kartézských a sférických souřadnicích

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} \right) - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}} \psi = E \psi \quad (6.19)$$

2. Řešíme SCHR

Pro získání analytického řešení je výhodnější přejít ke sférickým souřadnicím. Potenciální energie má ve sférických souřadnicích jednoduchý tvar (6.18), avšak Laplaceův operátor ve sférických souřadnicích dává složitější výraz:

$$\Delta \psi = \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2}$$

Dosazením do SCHR (6.19) dostáváme

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} \right) + E_p(r) \psi = E \psi \quad (6.20)$$

* Při exaktnějším postupu bychom mohli nahradit hmotnost elektronu redukovanou hmotností systému dvou částic (FI). Hmotnost elektronu a redukováná hmotnost soustavy jsou blízké a jejich rozdíl pro náš popis nepodstatný.

Řešení hledáme ve tvaru součinu tří funkcí, z nichž každá závisí na jedné sférické souřadnici

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi) \quad (6.21)$$

Část $R(r)$, která je pouze funkcí vzdálenosti od středu atomu, se nazývá **radiální část vlnové funkce**, část $\Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)$ je **úhlová část vlnové funkce**. Derivací separovaného řešení (6.21),

např. $\frac{\partial(R\Theta\Phi)}{\partial r} = \Theta\Phi \left(\frac{dR}{dr} \right)$, a vynásobením rovnice (6.20) výrazem $-\frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2 R\Theta\Phi}$ dostáváme

$$\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} + \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) = -\frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} (E - E_p(r))$$

Poslední rovnici můžeme přepsat tak, že levá strana je funkcí φ a pravá strana funkcí ϑ a r .

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} = -\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} (E - E_p(r))$$

Rovnice je splněna, jestliže obě strany se rovnají stejné, tzv. separační konstantě. Tradičně se tato konstanta volí ve tvaru $-m_\ell^2$. Levá strana dává

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Phi} \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} &= -m_\ell^2 \\ \frac{d^2 \Phi}{d\varphi^2} &= -m_\ell^2 \Phi \end{aligned} \quad (6.22)$$

Pravá strana pak dává

$$-\frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) - \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) - \frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} (E - E_p(r)) = -m_\ell^2$$

Vydělíme členem $-\sin^2 \vartheta$ a upravíme

$$\frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} (E - E_p) = \frac{m_\ell^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right)$$

Tím jsme odseparovali proměnné r a ϑ a můžeme proto obě strany poslední rovnice položit rovny společné konstantě, která má opět konvenční tvar $\ell(\ell+1)$. Po úpravě dostáváme

$$-\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \frac{m_\ell^2 \Theta}{\sin^2 \vartheta} = \ell(\ell+1) \Theta \quad (6.23)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e}{\hbar^2} (E - E_p) R = \ell(\ell+1) \frac{R}{r^2} \quad (6.24)$$

Rovnice (6.22), (6.23) a (6.24) jsou tři nezávislé obyčejné diferenciální rovnice vždy jedné proměnné, které jsou analyticky řešitelné, tj. jejich řešení může být vyjádřeno matematickou funkcí.

Substitucí se můžeme snadno přesvědčit, že řešením rovnice (6.22) je

$$\Phi = A e^{im_\ell \varphi} \quad (6.25)$$

kde A je konstanta.

Řešení rovnic (6.23) a (6.24) je matematicky složitější. Pro úplnost je uvedeme, některé aspekty řešení budou diskutovány v následujících oddílech a dodatcích (D10 a D11).

$$\Theta(\vartheta) = B \sin^{|m_\ell|} \vartheta F_{\ell, |m_\ell|}(\cos \vartheta) \quad (6.26)$$

$$R(r) = C e^{-Zr/na_0} \left(\frac{Zr}{a_0} \right)^\ell G_{n, \ell} \left(\frac{Zr}{a_0} \right) \quad (6.27)$$

kde a_0 je Bohrov poloměr (6.10), Z určuje počet protonů v jádře, $G_{n, \ell}(Zr/a_0)$ jsou tzv. přidružené Laguerrovy polynomy, $F_{\ell, |m_\ell|}(\cos \vartheta)$ jsou tzv. přidružené Legendrovy polynomy, jejichž tvar můžeme najít ve specializovaných monografiích. Přesný tvar několika vodíkových vlnových funkcí je uveden v dodatku D 10. Připomeňme, že celkové řešení SCHR je ve tvaru součinu (6.21) všech separovaných řešení.

3. Aplikujeme požadavky na vlnovou funkci (odd. 4.3.5)

Diskutujme nejprve matematické řešení (6.25) části závislé na φ . Z podmínky jednoznačnosti dostáváme, že řešení (6.25) musí nabývat stejných hodnot pro $\varphi = 0, 2\pi, \dots$, protože při změně azimutálního úhlu φ o násobky 2π se jedná o stejný bod prostoru (obr. 6.5):

$$A e^{i m_\ell \varphi} = A e^{i m_\ell (\varphi + 2\pi)}$$

Komplexní číslo po úpravě přepíšeme na goniometrický tvar

$$1 = \cos(2\pi m_\ell) + i \sin(2\pi m_\ell)$$

To je splněno pouze pro $m_\ell = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$. Parametr řešení m_ℓ má význam kvantového čísla, protože omezuje možná řešení pouze na určité hodnoty parametru.

Obdobně matematické řešení (6.25) rovnice (6.23) musí splňovat požadavky na dobře vychovanou funkci. Aplikací podmínek z odd. 4.3.5 pak dostáváme, že ℓ může nabývat pouze hodnot $|m_\ell|, |m_\ell| + 1, |m_\ell| + 2, \dots$, tj. $\ell \geq |m_\ell|$. Parametr ℓ je tak další kvantové číslo. Hodnota funkce $\Theta(\vartheta)$ závisí na parametrech ℓ a m_ℓ , které se proto píší jako indexy funkce: $\Theta_{\ell, m_\ell}(\vartheta)$.

Tvar řešení (6.27) rovnice (6.24) závisí na hodnotách parametrů ℓ a n , kde n je kladný celočíselný parametr, $n > \ell$. Proto řešení radiální části vlnové funkce se píše s indexy: $R_{n, \ell}(r)$.

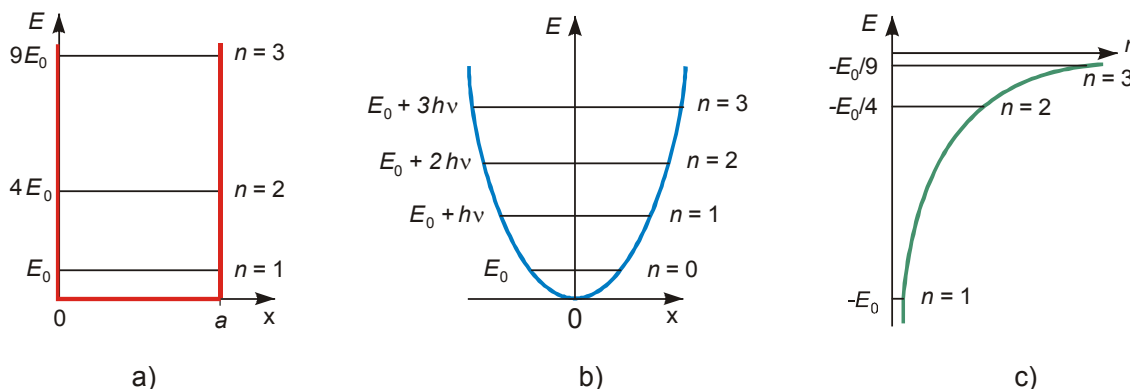
Řešení SCHR poskytuje hodnoty energie, které jsou v našem jednočásticovém přiblížení centrálního pole pouze parametrickou funkcí tzv. **hlavního kvantového čísla** n :

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{32 \pi^2 \hbar^2 \epsilon_0^2} \frac{1}{n^2} = -\frac{Z^2 E_0}{n^2} \quad n = 1, 2, \dots \quad (6.28)$$

Vidíme, že kvantově mechanické řešení poskytlo pro hodnoty energie stejný vztah, jaký vyplynul v Bohrově modelu atomu vodíku ((6.11) a (6.17)). Proto také Rydbergův vztah (6.1) a (6.15) odvozený z energetického spektra souhlasí s kvantově mechanickým přístupem. Energetické spektrum vodíkového atomu je znázorněno na obr. 6.3 a 6.4.

Na obr. 6.6 jsou srovnána energetická spektra tří významných systémů, které jsme dosud řešili: nekonečně hluboké potenciální jámy, lineárního harmonického oscilátoru a vodíkového atomu v jednočásticovém přiblížení centrálního pole. V prvním případě se energetické

spektrum se vzrůstajícím kvantovým číslem výrazně „zředí“. Excitace do vyšších hladin je se vrůstajícím kvantovým číslem stále více energeticky náročnější. Přítomnost částice v jámě je totiž omezena potenciální energií, která skokem roste nade všechny meze. V případě lineárního harmonického oscilátoru je omezení tvarem potenciální energie pozvolnější a hladiny jsou ekvidistantní. V případě vodíkového atomu jsou nejnižší stavy nejvíce vázány tvarem potenciální energie, postupně se potenciální energie rozevírá nade všechny meze a energetické spektrum se se vzrůstajícím hlavním kvantovým číslem stále „zhušťuje“, až připomínají kontinuum.



Obr. 6.6 Srovnání energetických spekter v případě jednorozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé jámy (a), lineárního harmonického oscilátoru (b) a vodíkového atomu (c)

Kvantová čísla vodíkového atomu

Aby matematická řešení SCHR vodíku a vodíku podobných atomů měla fyzikální smysl, mohou tři kvantová čísla n , ℓ a m_ℓ nabývat pouze určitých hodnot. Shrňme vlastnosti kvantových čísel a vztahy mezi nimi.

- Kvantové číslo $n = 1, 2, \dots$ se nazývá **hlavní kvantové číslo**. Určuje energii vodíkového atomu.
- Kvantové číslo $\ell < n$, $\ell = 0, 1, \dots, (n-1)$ se nazývá **orbitální kvantové číslo**. V odd. 6.2.3 uvidíme, že souvisí s hodnotou orbitálního momentu hybnosti elektronu. Pro každou hodnotu n existuje n možných hodnot orbitálního kvantového čísla ℓ .
- Kvantové číslo m_ℓ , $|m_\ell| \leq \ell$, $m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, -1, 0, 1, \dots, \ell$ se nazývá **magnetické kvantové číslo**. Určuje totiž orientaci vektoru orbitálního momentu hybnosti elektronu ve vnějším magnetickém poli (odd. 6.2.3 a 6.2.4). Pro každou hodnotu ℓ existuje $(2\ell+1)$ možných hodnot m_ℓ .

Úplné řešení stacionárních stavů jednoelektronových atomů v centrálním coulombickém poli můžeme tedy zapsat

$$\psi_{n,\ell,m_\ell}(r, \vartheta, \varphi) = R_{n,\ell}(r) \Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta) \Phi_{m_\ell}(\varphi) \quad (6.29)$$

$$n = 1, 2, \dots \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell$$

Vlnové funkce vodíkového atomu nazýváme **orbitály**. Tvar vlnových funkcí pro nejnižší energetické stavy budeme postupně diskutovat.

Degenerace energetických hladin u atomů vodíkového typu

V odd. 5.6.3 jsme zavedli pojem **degenerace energetické hladiny**, ke které dochází, má-li více stavů tutéž energii. Degenerace hladin je velmi významná u atomů vodíkového typu. Kvantová čísla vystupující ve vlnových funkcích (6.29) jsou parametry vlnové funkce. Pokud se vlnové funkce liší alespoň v jednom kvantovém čísle, jedná se o jiný stav. Energie závisí pouze na kvantovém čísle n . Pro každé n může kvantové číslo ℓ nabývat n různých hodnot. Pro každé kvantové číslo ℓ existuje opět $(2\ell + 1)$ různých čísel m_ℓ . Celkový počet různých stavů pro dané n je tedy

$$D_n = \sum_{\ell=0}^{n-1} (2\ell + 1) = 1 + 3 + \dots + 2(n-1) + 1$$

Tento vztah je aritmetická posloupnost o n členech. Její součet je dán vztahem $S_n = \frac{a_1 + a_n}{2} n$, kde a_1 a a_n jsou první a n -tý člen. Dostáváme tak, že degenerace* n -té hladiny je

$$D_n = \frac{1 + 2(n-1) + 1}{2} \cdot n = n^2 \quad (6.30)$$

Ve stavu s nejnižší možnou energií je $n = 1$, jediné možné hodnoty ℓ a m_ℓ jsou 0. Energie E_1 (v atomu vodíku má hodnotu $-13,5$ eV) nabývá atom pouze pro jeden soubor kvantových čísel $(n, \ell, m_\ell) = (1, 0, 0)$, kterému odpovídá vlnová funkce označovaná $\psi_{1,0,0}$. Neuvažujeme-li spin, je nejnižší hladina nedegenerovaná.

Pro $n = 2$, kvantové číslo ℓ může nabývat hodnot 0 nebo 1, m_ℓ může být pouze 0 v prvním případě a v druhém případě nabývá hodnot $+1$, 0 nebo -1 . Existují tedy 4 různé soubory kvantových čísel a jim odpovídají 4 různé stavy označené $\psi_{2,0,0}$, $\psi_{2,1,1}$, $\psi_{2,1,0}$ a $\psi_{2,1,-1}$. Energetická hladina E_2 je čtyřnásobně degenerovaná (nebereme-li v úvahu spin). Nejnížší energetické hladiny vodíkového atomu a příslušné stavy označené v notaci ψ_{n,ℓ,m_ℓ} jsou na obr. 6.7.

-1,5 eV	$\frac{3s}{\psi_{3,0,0}}$	$\frac{3p_1}{\psi_{3,1,1}}$	$\frac{3p_0}{\psi_{3,1,0}}$	$\frac{3p_{-1}}{\psi_{3,1,-1}}$	$\frac{3d_2}{\psi_{3,2,2}}$	$\frac{3d_1}{\psi_{3,2,1}}$	$\frac{3d_0}{\psi_{3,2,0}}$	$\frac{3d_{-1}}{\psi_{3,2,-1}}$	$\frac{3d_{-2}}{\psi_{3,2,-2}}$
-3,4 eV	$\frac{2s}{\psi_{2,0,0}}$	$\frac{2p_1}{\psi_{2,1,1}}$	$\frac{2p_0}{\psi_{2,1,0}}$	$\frac{2p_{-1}}{\psi_{2,1,-1}}$					
-13,5 eV	$\frac{1s}{\psi_{1,0,0}}$								

Obr. 6.7 Degenerace nejnižších stavů ve vodíkovém atomu

* Po zavedení spinu (odd. 6.2.5) dostaneme pro degeneraci vztah $D_n = 2n^2$.

Hodnoty kvantového čísla ℓ se často označují tzv. **spektroskopickou notací** podle tabulky

$\ell =$	0	1	2	3	4	5	5	...
	s	p	d	f	g	h	i	

Písmena pocházejí ze slov označujících skupinu spektrálních čar (sharp, principal, diffuse, fundamental). Podle této spektroskopické notace stavy s následujícími soubory kvantových čísel se označují

$(n, \ell) =$	(1,0)	(2,0)	(2,1)	(3,0)	(3,1)	(3,2)
	1s	2s	2p	3s	3p	3d

Někdy se navíc hodnota kvantového čísla m_ℓ (resp. symbol) značí jako dolní index. Tak např. stavy se soubory kvantových čísel (3,1,+1), (3,1,0) a (3,1,-1) jsou $3p_{+1}$, $3p_0$ a $3p_{-1}$. V chemických aplikacích, kdy stavy popsane vlnovou funkcí označujeme jako orbitaly, hovoříme např. o orbitalech 3p.

6.2.2 Interpretace vlnové funkce vodíkového atomu

Vlnové funkce jednoelektronového atomu jsou dány součinem (6.29) funkcí (6.25), (6.26) a (6.27). Jejich konkrétní tvar pro nejnižší stavy je dán v Tab. D10.1 v Dodatku D10. Konstanty před jednotlivými funkcemi byly získány z normovací podmínky (6.40)

$$\int_{\text{celý prostor}} \psi_{n,\ell,m_\ell}^* \psi_{n,\ell,m_\ell} dV = 1 \quad (6.31)$$

kde dV je objemový element. Z tabulky D10.1 je např. patrné, že vlnové funkce pro $\ell = 0$ nezávisí na φ a ϑ . Tato řešení jsou tedy sféricky symetrická.

Vlnová funkce sama o sobě nemá měřitelný význam. Teprve hustota pravděpodobnosti, z níž můžeme určit pravděpodobnost nalezení částice v určité části prostoru, je měřitelná veličina. V případě vodíkového atomu je pravděpodobnost nalezení částice v objemovém elementu dV dána vztahem

$$dP_{n,\ell,m_\ell}(r, \vartheta, \varphi) = [R_{n,\ell}^*(r) R_{n,\ell}(r)] [\Theta_{\ell,m_\ell}^*(\vartheta) \Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)] [\Phi_{m_\ell}^*(\varphi) \Phi_{m_\ell}(\varphi)] dV \quad (6.32)$$

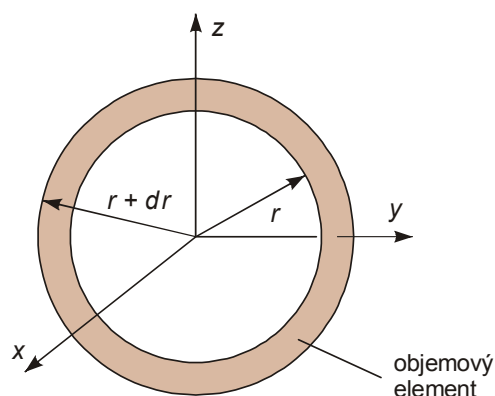
Hustota pravděpodobnosti (stojící ve výrazu (6.32) před dV) se podobně jako vlnová funkce skládá ze tří částí, radiální a dvou úhlových.

Radiální hustota pravděpodobnosti

Pravděpodobnost $dP(r, r+dr)$ výskytu elektronu v kulové slupce o poloměru r a o tloušťce dr (obr. 6.8) je daná vztahem (Dodatek D10)

$$dP(r, r+dr) = |R|^2 r^2 dr \quad (6.33)$$

Veličinu stojící ve vztahu (6.33) před elementem dr nazveme **radiální hustotu pravděpodobnosti**. Je dána podílem pravděpodobnosti výskytu elektronu v popsané kulové slupce o poloměru r a tloušťky dr této slupky



Obr. 6.8 Znárodnění kulové slupky použité při vyjádření radiální hustoty pravděpodobnosti

$$|R|^2 r^2 = \frac{dP(r, r+dr)}{dr} \quad (6.34)$$

Průběhy radiální hustoty pravděpodobnosti pro stavy s $n = 1, 2$ a 3 jsou na obr. 6.9.

Rozborem bychom získali, a z obr. 6.9 je patrné, že pro maximální možnou hodnotu ℓ pro dané n má radiální hustota pravděpodobnosti jedno maximum (stavy $1s, 2p, 3d$) nacházející se u příslušného Bohrova poloměru r_n (6.9) pro dané n . V ostatních případech existuje více lokálních maxim, a je tedy zvýšená pravděpodobnost nalezení elektronu ve dvou a více vzdálenostech od středu jádra. Největší pravděpodobnost nalezení elektronu blízko jádra ze všech stavů majících tutéž energii je v s -stavech ($\ell = 0$). Obecně však ve všech stavech radiální hustota pravděpodobnosti pro velké hodnoty r rychle klesá, takže se výrazně zmenšuje pravděpodobnost nalezení elektronu v podstatně větší vzdálenosti než odpovídá příslušnému Bohrovu poloměru.

Příklad 6.1

Dokažte, že nejpravděpodobnější hodnota souřadnice r elektronu ve vodíkovém atomu ve stavu $2p$ je $4a_0$.

Řešení:

Stav $2p$ je charakterizován kvantovými čísly $n = 2, l = 1$. V tab. D10.1 nalezneme ($Z = 1$) výraz pro radiální část vlnové funkce

$$R_{2,1}(r) = \frac{1}{\sqrt{24}} \left(\frac{1}{a_0} \right)^{3/2} \frac{r}{a_0} e^{-r/2a_0}$$

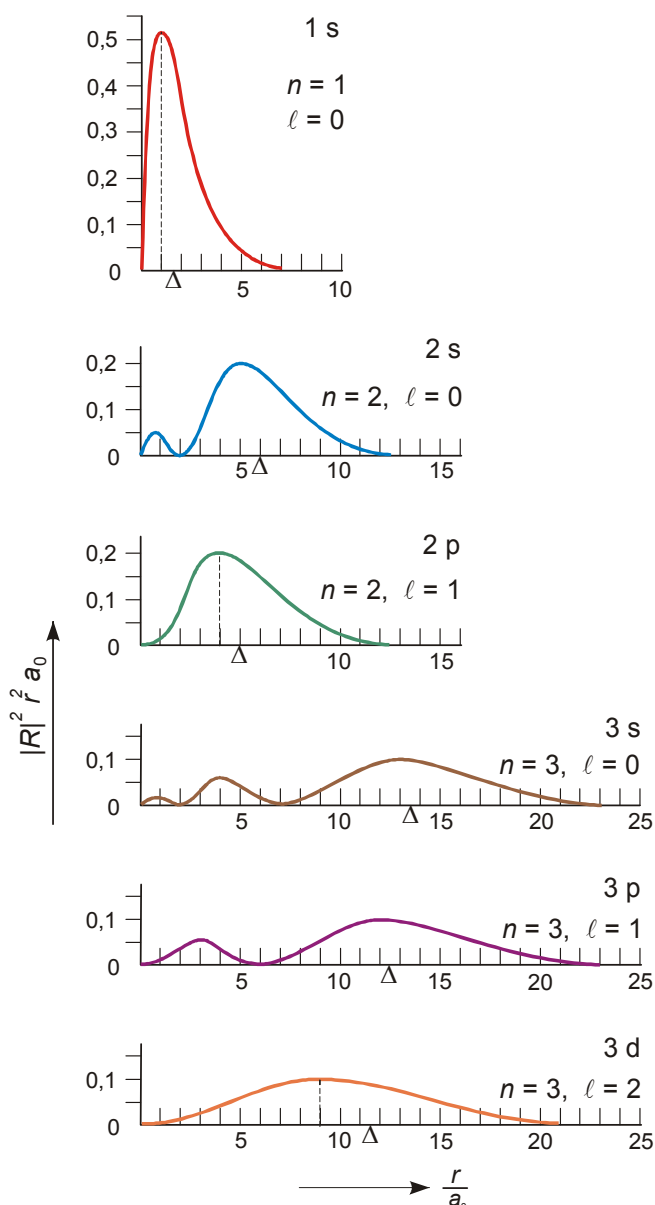
Radiální hustota pravděpodobnosti je podle (6.34)

$$r^2 |R_{2,1}(r)|^2 = \frac{r^4}{24 a_0^5} e^{-r/a_0}$$

Nejpravděpodobnější hodnotu souřadnice r určíme jako hodnotu, kdy radiální hustota pravděpodobnosti nabývá maxima. Položíme derivaci rovnu 0:

$$\frac{1}{24 a_0^5} \left(4 r^3 e^{-r/a_0} + r^4 \left(-\frac{1}{a_0} \right) e^{-r/a_0} \right) = 0$$

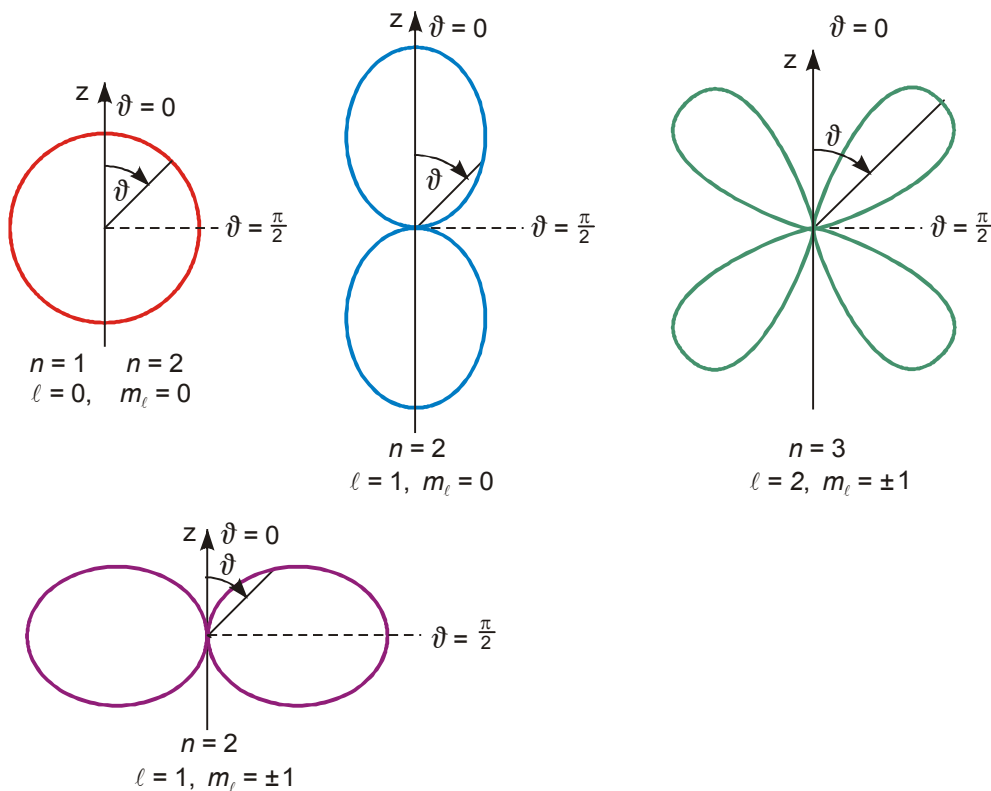
Jediné řešení je $r = 4a_0$. Toto řešení odpovídá průběhu radiální hustoty pravděpodobnosti, která je znázorněná na obr. 6.9.



Obr. 6.9 Radiální hustota pravděpodobnosti. Očekávaná hodnota r v příslušném stavu je označena Δ

Úhlová závislost hustoty pravděpodobnosti

Řešením separované SCHR jsme získali závislost jednoelektronové vlnové funkce na úhlu φ , která je dána vztahem (6.25). Příspěvek této části vlnové funkce k hustotě pravděpodobnosti je pro všechny stavy $\Phi_{m_\ell}^*(\varphi)\Phi_{m_\ell}(\varphi) = A^* e^{-im_\ell\varphi} A e^{im_\ell\varphi} = |A|^2$. To znamená, že jednoelektronová hustota pravděpodobnosti nezávisí na hodnotě úhlu φ , je stejná pro jakékoli hodnoty φ od 0 do 2π a je tedy rotačně symetrická vzhledem k ose z (obr. 6.10).



Obr. 6.10 Závislost hustoty pravděpodobnosti na úhlu ϑ

Závislost hustoty pravděpodobnosti na úhlu ϑ je dána vztahem $\Theta_{\ell,m_\ell}^*(\vartheta)\Theta_{\ell,m_\ell}(\vartheta)$ a je zachycena pro několik stavů na obr. 6.10. V s-stavech je předchozí výraz nezávislý na ϑ , a proto závislost na polárním úhlu ϑ je vyjádřena kružnicí, pro 2p stav je závislost na ϑ daná funkcemi $\cos^2 \vartheta$ nebo $\sin^2 \vartheta$. Pro 3d stav mají preferované směry, kde se elektron nachází s větší pravděpodobností, složitější průběh. Protože ve všech případech je rozdělení hustoty pravděpodobnosti symetrické kolem osy z , dostaneme celkové prostorové rozdělení hustoty pravděpodobnosti myšlenou rotací útvarů na obr. 6.10 kolem osy z . Kružnice pro 1s stav se stane kulovou plochou, útvar pro stav 2p₀ nabude tvar dvou vejcových útvarů, stav 2p_{±1} má prostorový tvar, který připomíná zploštělou koblihu. V chemických aplikacích popsané tvary nazýváme tvary orbitalu. Někdy se pravděpodobnost výskytu elektronu zobrazuje tzv. **konturovými digramy**. Jsou to prostorové útvary, v nichž se elektron nachází s větší než smluvnou hodnotou pravděpodobnosti, např. 95 %.

Rozložení hustoty náboje získáme vynásobením hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu nábojem elektronu $-e$. Kvantově mechanická představa elektronu v atomu má tedy blízko k jakémusi prostorovému obláčku náboje, jehož lokalizace má pravděpodobnostní povahu. Tím je nahrazena představa elektronu rotujícího kolem jádra, kterou poskytuje Bohrovův

model atomu, realističtějším obrazem atomu, kdy v některých částech prostoru kolem jádra je větší pravděpodobnost výskytu elektronu a tím i větší hustota náboje. Tato představa je pak použita v teorii chemické vazby.

6.2.3 Prostorové kvantování

Z obr. 6.10 je patrné, že rozložení hustoty pravděpodobnosti v různých směrech se liší a že existují určité směry v prostoru, kde je nulová hustota pravděpodobnosti nalezení elektronu. Tato prostorová vlastnost se nazývá **prostorové kvantování**. Kvantová čísla, která určují prostorové rozložení hustoty pravděpodobnosti, jsou čísla m_ℓ a ℓ . V Dodatku D11 je ukázáno, že elektron ve stavu s určitou hodnotou energie může mít zároveň určitou hodnotu velikosti momentu hybnosti a určitou hodnotu jedné složky momentu hybnosti. Zpravidla se volí tato složka jako z-ová.

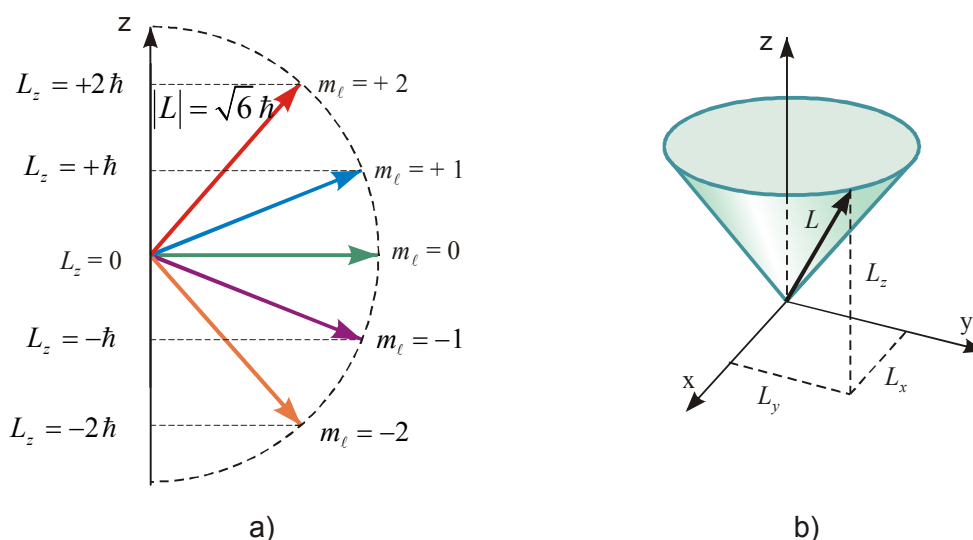
Kvantové číslo ℓ určuje velikost momentu hybnosti:

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad (6.35)$$

Pro určitou hodnotu velikosti momentu hybnosti danou kvantovým číslem ℓ existuje $2\ell+1$ možných hodnot z-ové složky momentu hybnosti určených kvantovým číslem m_ℓ . Možné hodnoty z-ové složky momentu hybnosti jsou dány vztahem:

$$L_z = m_\ell \hbar \quad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell \quad (6.36)$$

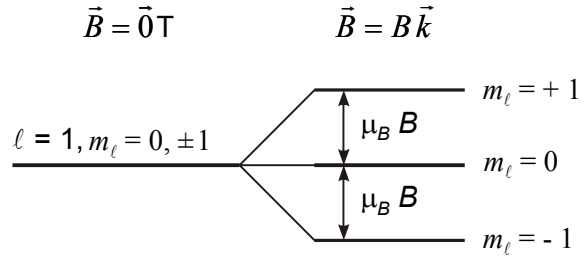
Vztahy (6.35) a (6.36) kvantifikují prostorové kvantování. Na obr. 6.11 je znázorněno prostorové kvantování pro stav s $\ell = 2$ (d-stav). Hodnota velikosti momentu hybnosti $L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} = \hbar \sqrt{6}$. Z-ová složka L_z nabývá hodnot $-2\hbar, -\hbar, 0, \hbar, 2\hbar$. Vektor \vec{L} je vzhledem ke zvolenému směru orientován způsobem, který je umožněn hodnotou jeho z-ové složky. Přitom x-ová a y-ová složka jsou zcela libovolné. Proto v prostoru je vektor \vec{L} na povrchu kužele (obr. 6.11b).



Obr. 6.11 Prostorové kvantování momentu hybnosti pro $\ell = 2$. (a) Možné hodnoty z-ových složek L_z
(b) prostorová orientace vektoru \vec{L} ve stavu s $l = 2, m_\ell = 2$

Směr osy z zvolený v předchozím výkladu je směr myšlený, zavedený pouze pro popis pomocí souřadnic. V dostatečně velkém souboru neuspořádaných volných atomů a při experimentálním studiu souboru volných atomů neexistuje žádný význačný směr. Popsané prostorové kvantování je pozorovatelné, jestliže je pro celý soubor molekul realizovaný nějaký význačný směr, např. studujeme-li molekuly v magnetickém poli určitého směru. Odtud plyne pro kvantové číslo m_ℓ název **magnetické kvantové číslo**.

Experimentální potvrzení prostorového kvantování bylo podáno ve Sternově-Gerlachově experimentu (Dodatku D12).



Obr. 6.12 Rozštěpení energetické hladiny pro $\ell = 1$ ve vnějším magnetickém poli o indukci B

6.2.4 Vliv magnetického pole na jedoelektronový atom. Zeemanův jev

Stacionárnímu stavu elektronu odpovídá v semiklasickém popisu pohyb elektronu po kružnicovém orbitu. Elektron tak vytváří proudovou smyčku, které přísluší magnetický dipólový moment. Vztah mezi orbitálním momentem hybnosti \vec{L} a orbitálním magnetickým momentem \vec{m} je dán vztahem

$$\vec{m} = -\frac{e}{2m_e} \vec{L}$$

Koeficient úměrnosti $\frac{e}{2m_e}$ mezi orbitálním momentem hybnosti \vec{L} a orbitálním magnetickým momentem \vec{m} se nazývá **orbitální gyromagnetický poměr**. Mezi operátory momentu hybnosti a magnetického momentu, existuje obdobný vztah jako mezi příslušnými veličinami (3.45).

V Dodatku D11 a odd. 6.2.3 bylo ukázáno, že velikost orbitálního momentu hybnosti a jeho z -ová složka jsou kvantovány. Je tedy kvantována i velikost orbitálního magnetického momentu hybnosti a jeho z -ová složka:

$$m = \frac{e\hbar}{2m_e} \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad (6.37)$$

$$m_z = -\frac{e\hbar}{2m_e} m_\ell = -\mu_B m_\ell \quad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell \quad (6.38)$$

kde jsme zavedli konstantu **Bohrův magneton** μ_B jako nejmenší nenulovou hodnotu velikosti m_z :

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \quad (6.39)$$

Vložíme nyní jedoelektronový atom do magnetického pole, jehož magnetická indukce má směr osy z , $\vec{B} = B\vec{k}$. Potenciální energie E_p magnetického dipólu popsaného orbitálním magnetickým momentem \vec{m} je podle

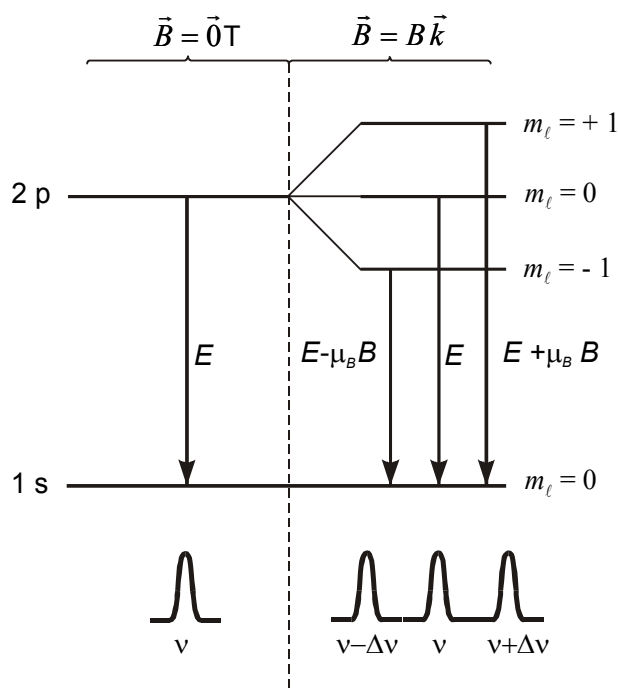
$$E_p = -\vec{m} \cdot \vec{B} = -m_z B \quad (6.40)$$

Protože veličina m_z je kvantována, může rovněž potenciální energie nabývat pouze určitých hodnot podle toho, jakých hodnot nabývá kvantové číslo m_ℓ . Pro dané ℓ existuje $2\ell + 1$ různých hodnot kvantového čísla m_ℓ . $2\ell + 1$ -násobná degenerace energetických hladin, která souvisí s kvantovým číslem m_ℓ , v magnetickém poli vymizí, protože se energie změní $\Delta E = m_\ell \mu_B B$, $m_\ell = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$. Příklad rozštěpení energetické hladiny ve vnějším magnetickém poli je znázorněn na obr. 6.12 pro stavy s kvantovým číslem $\ell = 1$, $m_\ell = -1, 0, +1$.

Frekvence záření emitovaného atomy závisí na rozdílu energií energetických hladin. Po vložení atomu do magnetického pole dojde k rozštěpení spektrálních čar na $(2\ell + 1)$ komponent, jak je ukázáno na obr. 6.13 pro stav s $\ell = 1$. Tento jev se označuje jako **normální Zeemanův jev**. Normální Zeemanův jev se pozoruje pouze u určité skupiny atomů, v nichž se vyruší tzv. spinový magnetický moment (odd. 6.2.5).

V případě řady jiných víceelektronových atomů a v případě vodíku se však pozoruje po vložení do vnějšího magnetického pole rozštěpení na sudý počet hladin.

V tomto případě hovoříme o anomálním Zeemanově jevu (odd. 6.2.5).



Obr. 6.13 Zeemanův jev

Příklad 6.2

Vypočítejte změnu vlnové délky $\Delta\lambda$ spektrální čáry, která přísluší přechodu $2p \rightarrow 1s$ v atomu vodíku, po vložení do magnetického pole o indukci $B = 2$ T.

Řešení:

Energie přechodu E a vlnová délka λ fotonu, který se při tomto přechodu uvolní, jsou svázány vztahem

$$E = \frac{hc}{\lambda}$$

Abychom vyjádřili změnu vlnové délky při malé změně energie, diferencujeme poslední vztah

$$dE = -\frac{hc}{\lambda^2} d\lambda$$

Diferenciál nahradíme malou změnou veličin a uvažujeme pouze absolutní hodnoty změn veličin.

$$\Delta E = \frac{hc}{\lambda^2} \Delta\lambda$$

Odtud

$$\Delta\lambda = \frac{\lambda^2}{hc} \Delta E$$

Nyní vyčíslíme potřebné veličiny z posledního vztahu pro náš případ. Hodnota energie přechodu $2p \rightarrow 1s$ bez přítomnosti magnetického pole

$$E = -E_0 \left(\frac{1}{2^2} - \frac{1}{1} \right) = \frac{3}{4} E_0$$

Příslušná vlnová délka

$$\lambda = \frac{hc}{E} = \frac{4hc}{3E_0}, \quad \lambda = 122 \text{ nm}$$

Po vložení do magnetického pole se rozštěpí hladina 2p podle obr. 6.13. Změna energie

$$\Delta E = \mu_B B = 18,5 \cdot 10^{-24} \text{ J} = 11,6 \cdot 10^{-5} \text{ eV}$$

Dosadíme předchozí vyčíslené hodnoty veličin do vztahu pro $\Delta\lambda$ a dostaneme $\Delta\lambda = 0,00139 \text{ nm}$

6.2.5 Spin elektronu

Namísto pozorovaného štěpení energetických hladin na $(2\ell + 1)$ složek, tj. lichý počet, anomální Zeemanův jev dává štěpení hladin na sudý počet komponent. Pro $\ell = 0$ bylo pozorováno štěpení na dvě hladiny. Tuto skutečnost vysvětlíme pomocí **spinu** elektronu. V našem výkladu zavedeme spin poněkud uměle. Jeho existence vyplyne teprve, použijeme-li k řešení atomu relativistickou kvantovou mechaniku, kterou se v rámci kurzu nebudeme zabývat.

Semiklasická představa vnitřního momentu hybnosti elektronu, čili spinu, byla uvedena. Vektorová veličina spin, kterou označíme \vec{S} , se pojí s tzv. **spinovým magnetickým momentem** \vec{m}_{spin} , podobně jako orbitální moment hybnosti \vec{L} souvisí s orbitálním magnetickým momentem \vec{m} . **Spinový gyromagnetický poměr** (poměr velikosti spinového magnetického momentu a velikosti vnitřního momentu hybnosti) je dvojnásobný než u orbitálních momentů

$$\vec{m}_{spin} = -\frac{e}{m_e} \vec{S}$$

$$m_{spin} = \frac{e}{m_e} S$$

Podobně jako je kvantován orbitální moment hybnosti a jeho z-ová složka (vztahy (6.35), (6.36)), je kvantován i spin a jeho z-ová složka:

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)} \quad (6.41)$$

$$S_z = \hbar m_s \quad (6.42)$$

kde s a m_s jsou kvantová čísla spojená se spinem. Ukazuje se, že v případě elektronu číslo s nabývá pouze hodnoty $s = \frac{1}{2}$. Proto velikost vnitřního momentu hybnosti (spinu) elektronu je

$$S = \sqrt{\frac{3}{4}} \hbar \quad (6.43)$$

Analogicky tomu, že kvantové číslo $m_\ell = -\ell, \dots, \ell$, nabývá kvantové číslo m_s vystupující ve vztahu (6.42) hodnot $m_s = -s, -s+1 = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2} = -s, +s$. Z-ová složka spinu tak může nabývat hodnot

$$S_z = \pm \frac{1}{2} \hbar \quad (6.44)$$

Spin vykazuje podobně jako orbitální moment hybnosti prostorové kvantování (obr. 6.14).

Ke třem kvantovým číslům, která vyplynula z řešení Schrödingrovovy rovnice, přidáme další tzv. **spinové kvantové číslo** m_s , které nabývá hodnot $\pm \frac{1}{2}$. Stav elektronu v jednoelektronovém atomu je pak popsán čtveřicí kvantových čísel (n, ℓ, m_ℓ, m_s) . Spinové kvantové číslo m_s , podobně jako magnetické kvantové číslo m_ℓ , neovlivňuje v našem řešení energii elektronu. Proto vztah (6.30) pro degeneraci energetické hladiny se započtením prostorového kvantování spinu upravíme

$$D_n = 2 n^2 \quad (6.45)$$

Každá energetická hladina je v jednoelektronovém přiblížení v centrálním poli $2 n^2$ krát degenerovaná, tj. tutéž hodnotu energie nabývá elektron v $2 n^2$ různých stacionárních stavech.

Na základě spinu a jeho prostorového kvantování můžeme vysvětlit anomální Zeemanův jev, tj. pozorované rozštěpení energetických hladin na sudý počet složek, ke kterému dochází v magnetickém poli: Ve vnějším magnetickém poli popsaném $\vec{B} = B\vec{k}$ nabývá magnetický dipól, který odpovídá spinovému magnetickému momentu \vec{m}_{spin} , potenciální energie E_p

$$E_p = -\vec{m}_{spin} \cdot \vec{B} = -m_{spin,z} B = \frac{e}{m_e} S_z B \quad (6.45)$$

Uvážíme-li kvantování z-ové složky spinu S_z (6.42), dostáváme

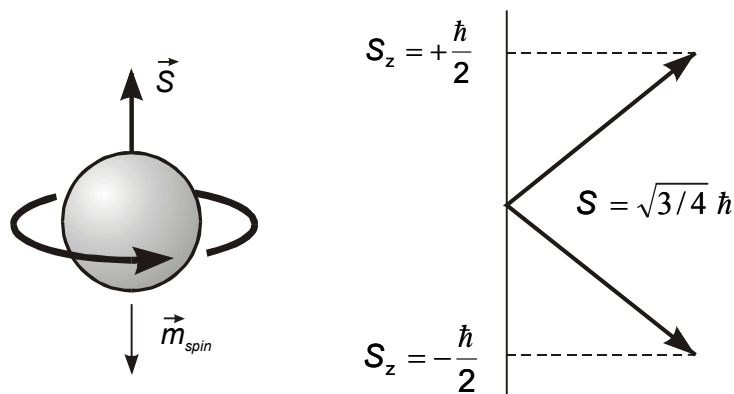
$$E_p = m_s \frac{e\hbar}{m_e} B \quad (6.47)$$

Protože $m_s = \pm \frac{1}{2}$, nabývá potenciální energie násobků Bohrova magnetonu (6.39):

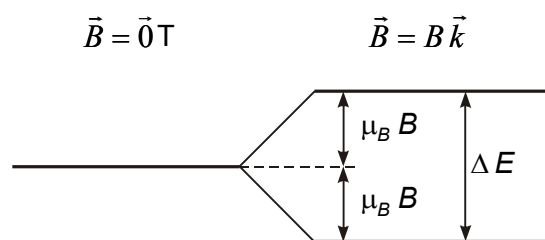
$$E_p = \pm \frac{e\hbar}{2m_e} B = \pm \mu_B B \quad (6.48)$$

Rozštěpení energetických hladin v důsledku interakce spinového magnetického momentu \vec{m}_{spin} a magnetického pole popsaného magnetickou indukcí B je znázorněno na obr. 6.15.

Vliv magnetického pole se projeví jak v interakci s orbitálním magnetickým momentem tak v interakci se spinovým magnetickým momentem a vede k rozštěpení hladin na sudý počet složek.



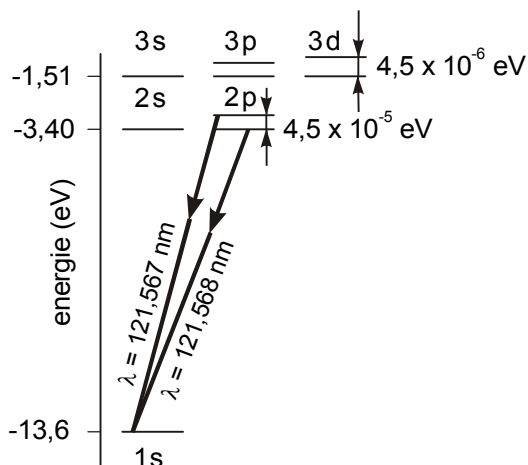
Obr. 6.14 Znázornění prostorového kvantování spinu



Obr. 6.15 Rozštěpení energetické hladiny při interakci spinového magnetického momentu a magnetického pole

Jemné štěpení

Spin elektronu se projevuje v rozštěpení energetických hladin i bez přítomnosti vnějšího magnetického pole. Jeho důvodem je interakce magnetického pole, které způsobuje orbitální magnetický moment elektronu (jeho klasickou analogií je magnetické pole proudové smyčky), a spinového magnetického momentu. Hovoříme o **spin-orbitální interakci**. Změna energií při rozštěpení v důsledku této interakce je malá, např. v případě vodíku řádově 10^{-5} až 10^{-6} eV, a proto hovoříme o **jemném štěpení energetických hladin** (obr. 6.16).



Obr. 6.16 Jemné štěpení hladin atomu vodíku ve stavech p a d

6.3 Mnohaelektronové atomy

Řešení Schrödingerovy rovnice pro mnohaelektronové atomy je velmi složité, protože se jedná o mnoho částic a tyto částice spolu interagují. Proto se zavádí celá řada aproximací, které řešení zjednodušují a přesto umožňují vysvětlit řadu zákonitostí, např. strukturu periodické soustavy prvků. V tomto textu se omezíme na tzv. **orbitální aproximaci**. V orbitální aproximaci předpokládáme, že každý elektron je ve svém „vlastním“ jednoelektronovém stavu, orbitálu. Výsledná vlnová funkce systému je dána součinem jednoelektronových funkcí $\psi(\vec{r}_1) \cdot \psi(\vec{r}_2) \cdot \dots$

$$\Psi(r_1, \vec{r}_2, \dots) = \psi(\vec{r}_1) \cdot \psi(\vec{r}_2) \cdot \dots \quad (6.49)$$

kde \vec{r}_i jsou soubory souřadnic i -tého elektronu. Jednotlivé orbitály jsou obdobné jednoelektronovým vlnovým funkcím vodíkového atomu s tím rozdílem, že náboj jádra je modifikován přítomností ostatních elektronů v atomu. V této aproximaci není zahrnuta vzájemná interakce mezi elektrony explicitně, přítomnost více elektronů je však zahrnuta v tzv. **efektivním náboji jádra**. Stav atomu pak popisujeme tzv. **konfigurací** atomu, což je souhrn obsazených orbitalů v základním stavu. Konfigurace základního stavu se řídí několika principy. Jsou to: **Pauliho vylučovací princip**, **výstavbový princip** a **Hundovo pravidlo**. Tyto principy mající fyzikální podstatu uvedeme v následujících dvou oddílech.

6.3.1 Identické částice v kvantové mechanice. Pauliho vylučovací princip

Identické částice nemůžeme v kvantové mechanice rozlišit. **Princip nerozlišitelnosti identických částic** je patrný z pravděpodobnostního charakteru jejich výskytu: Jestliže dvě identické částice jsou součástí téhož systému a nacházejí se dostatečně blízko, jejich pravděpodobnosti výskytu se překrývají a částice tak nemohou být rozlišeny.

Ukazuje se, že odlišným způsobem splňují princip nerozlišitelnosti částice s celočíselným spinovým číslem, tzv. **bosony*** (fotony, α -částice), a částice s poločíselným spinovým číslem, tzv. **fermiony** (elektrony, protony a neutrony). Pro fermiony platí **Pauliho vylučovací princip**:

* Vlastnosti těchto částic jsou podrobněji probírány v kapitole 7..

V jednom systému nemohou existovat současně dva a více fermionů v totéž stavu.

Protože elektrony jsou fermiony, nemohou se v jednom atomu nacházet žádné dva elektrony v totéž stavu. Stav elektronu je určen čtveřicí kvantových čísel. Aby se dva elektrony nenacházely v jednom systému v totéž stavu, musejí se každé dva elektrony lišit alespoň v jednom kvantovém čísle.

Bosony nejsou omezeny Pauliho principem. Naopak libovolný počet bosonů se může nacházet v totéž stavu a tato situace je energeticky výhodnější. Proto bosony mají tendenci nacházet se všechny v nejnižším energetickém stavu systému.

6.3.2 Výstavbový princip. Hundovo pravidlo

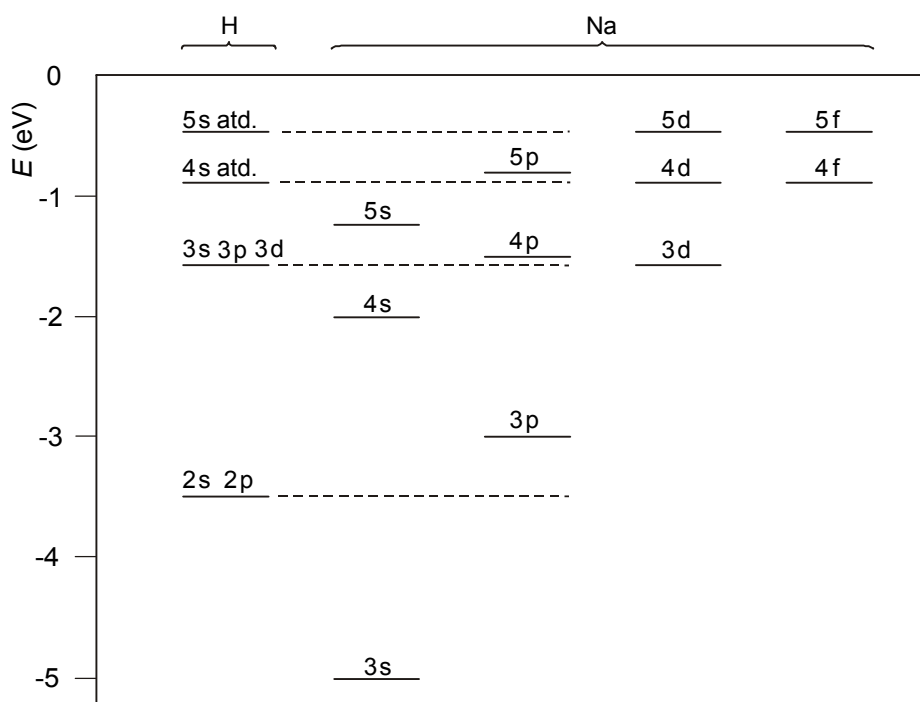
Elektrony v mnohaelektronových atomech budeme označovat podle stavů, v nichž se nacházejí, pomocí spektroskopické notace (odd. 6.2.1). Elektrony mající tutéž hodnotu kvantového čísla n náležejí do stejné **slupky**, elektrony s týmiž hodnotami n a ℓ náležejí do téže **podslupky**. Podslupky jsou označovány 1s, 2s, 2p, ... atd. Maximální možný počet elektronů v jedné podslupce (n, ℓ) je podle Pauliho vylučovacího principu dán počtem možných různých stavů s danou hodnotou n a ℓ , což je $2(2\ell + 1)$, uvažíme-li všechna čtyři kvantová čísla. Jestliže je slupka plně zaplněna, hovoříme o **uzavřené slupce**.

Elektron ve víceelektronovém atomu je ovlivněn jednak elektrostatickou přitažlivou silou jádra, jednak odpudivou silou ostatních elektronů. Ostatní elektrony, které se s velkou pravděpodobností nacházejí uvnitř orbitalu sledovaného elektronu, způsobují zdánlivé zmenšení náboje jádra a hovoříme o **stínění**, které se projevuje ve snížené hodnotě efektivního centrálního náboje. Hodnota efektivního náboje se liší pro elektrony v s- a p-stavech. Elektron v s-stavu proniká (penetruje) hlouběji do vnitřních slupek než elektron ve p-stavu (obr. 6.9). Elektron v s-stavu „pocití“ menší stínění než elektron v p-stavu. Důsledkem kombinace stínění a penetrace je to, že elektron v s-stavu je „pevněji“ vázán k jádru a jeho energie je menší, než je energie elektronu v p-stavu v téže slupce. Podobně elektron v d-stavu penetruje méně než elektron v p-stavu v téže slupce, „cítí“ více stínění ostatních elektronů, je méně těsně vázán k jádru a jeho energie je větší. Důsledkem popsání jevu je, že energie elektronů v podslupkách je seřazena v řadě $s < p < d$.

Degenerace hladin u víceelektronových atomů tedy vymizí („je sejmuta“). Srovnání hodnot energií ve stavech vodíku a sodíku je na obr. 6.17.

Obsazování jednotlivých stavů elektrony se řídí **výstavbovým principem**. Podle něj se postupné obsazování hladin děje tak, že se nejdříve obsazují hladiny s nižší energií (až na výjimky, které souvisí s odpudivými silami mezi elektrony v některých orbitalech). Tento výstavbový princip je pochopitelný, protože fyzikální systém je tím stabilnější, čím je jeho celková energie menší.

Další pravidlo, podle kterého se řídí obsazování orbitalů, je **Hundovo pravidlo**, které určuje konfiguraci elektronů v rámci jedné podslupky. Podle Hundova pravidla *atom v základním stavu je v konfiguraci s maximálním možným počtem nespárovaných elektronů*. Jeho vysvětlení podáme na případu orbitalu 2p na základě energetických úvah: Elektrony, lišící se pouze hodnotou spinového kvantového čísla, se nazývají **spárované elektrony**. Dva elektrony, jakožto souhlasné náboje, mají menší elektrostatickou potenciální energii, jestliže jsou více od sebe vzdáleny. V orbitalu 2p se může nacházet 5 elektronů s kvantovým číslem $m_\ell = -1, 0, 1$. Při postupném zaplňování této podslupky elektrony se jednotlivé elektrony musejí podle Pauliho principu lišit v kvantovém čísle m_ℓ , které určuje prostorovou orientaci jejich orbitálního momentu hybnosti (odd. 6.2.3), nebo ve spinovém čísle m_s .



6.17 Srovnání energetických hladin H a Na

Z energetického hlediska je výhodnější, aby se elektrony lišily v čísle m_ℓ , neboť toto kvantové číslo charakterizuje prostorové kvantování. Elektrony lišící se kvantovým číslem m_ℓ jsou prostorově od sebe „vzdálenější“, a tedy příspěvek jejich vzájemné coulombické interakce k celkové potenciální energii je menší než v případě, kdy mají stejné kvantové číslo m_ℓ a liší se ve spinovém kvantovém čísle m_s . Z tohoto důvodu se obsazují orbitály následovně: Druhý elektron má stejný spin jako první, liší se od prvního elektronu kvantovým číslem m_ℓ , v pořadí třetí elektron má spin stejný jako první a druhý a kvantové číslo m_ℓ odlišné od prvního a druhého, a teprve čtvrtý elektron je spárován s některým z prvních tří. Tento způsob postupného zaplňování podslupky má za následek, že počet nespárovaných elektronů je maximální.

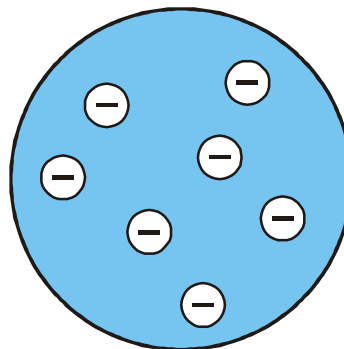
7. Jaderná a částicová fyzika

7.1 Základní vlastnosti atomových jader

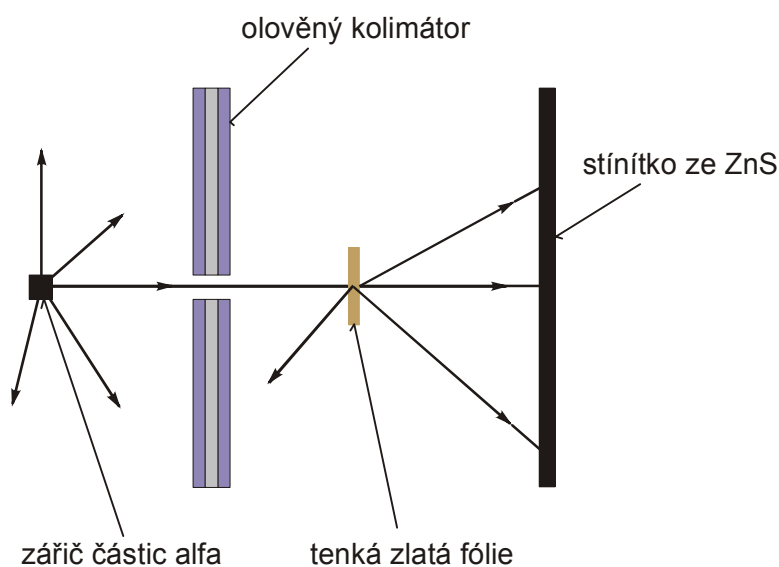
7.1.1 Složení atomových jader

V roce 1903 navrhl anglický fyzik J. J. Thomson první model atomu, podle kterého je v celém objemu atomu spojitě rozložený kladný náboj a v něm „plavou“ elektrony (obr. 7.1). Elektrostatické síly mezi kladným nábojem a elektrony jsou vykompenzovány. Pro tento model se ujal název pudinkový.

V roce 1911 pozoroval E. Rutherford rozptyl α -částic (jader ${}^4\text{He}$) na zlaté folii (obr. 7.2) a zjistil, že se tyto částice rozptylují i na úhly větší než 90° . Podle Thomsonova modelu atomu je však rozptyl α -částic na velké úhly málo pravděpodobný. Proto Rutherford navrhl nový model atomu: Kladně nabité jádro je asi 10^5 krát menší než poloměr atomu. Náboj jádra a velikost náboje elektronů, které kolem jádra obíhají, je roven Ze (e je elementární náboj).



Obr. 7.1 Thomsonův model atomu



Obr. 7.2 Rutherfordův experiment s rozptylem α -částic na zlaté folii.

Původní představa o složení atomových jader (20. léta 20. stol.) vycházela z tehdy známých elementárních částic: protonu a elektronu. Podle ní se jádra skládají pouze z protonů a elektronů, např. ${}^4\text{He}$ by se mělo skládat ze 4 protonů a 2 elektronů, čímž by byl vysvětlen náboj jádra i jeho hmotnost přibližně rovná hmotnosti 4 protonů (hmotnost elektronů můžeme zanedbat). Tato představa byla podporována i pozorováním β -rozpadu některých jader, při kterém jsou emitovány elektrony.

Uvedeme si dva argumenty proti této představě:

1. Pokud by byl deuteron d (jádro těžkého vodíku ${}^2\text{H}$ s přibližně dvojnásobnou hmotností než jádro lehkého vodíku ${}^1\text{H}$ neboli proton p) složen ze 2 protonů a 1 elektronu (proton i elektron mají spin $\frac{1}{2}$ *), musí mít poločíselný spin jako částice složená z lichého počtu částic s poločíselným spinem. Experiment ale dává hodnotu spinu deuteronu 1.
2. Velikost magnetického momentu protonu je asi 0,15 % velikosti magnetického momentu elektronu. Pokud by uvedený model platil, byl by magnetický moment jader srovnatelný s magnetickým momentem elektronu. Experiment ale ukazuje, že magnetické momenty jader jsou srovnatelné s magnetickým momentem protonu.

Tyto rozpory vedly německého fyzika W. Heisenberga (1932) k formulaci hypotézy, podle které jsou jádra složena z kladně nabitých protonů a přibližně stejně těžkých neutrálních částic – neutronů n . Tato hypotéza byla experimentálně potvrzena.

7.1.2 Označování a klasifikace atomových jader

Jádra označujeme symbolem ${}_Z^A\text{X}_N$, kde X je symbol pro prvek z Mendělejevovy tabulky, A hmotnostní číslo (počet nukleonů), Z atomové (protonové) číslo (počet protonů), N neutronové číslo (počet neutronů), $A = Z + N$.

Podle Z , A , N rozlišujeme **izotopy** (stejně Z), **izobary** (stejně A) a **izotony** (stejně N). Zrcadlová jádra mají stejné A a vzájemně prohozené hodnoty N a Z .

Izoméry jsou jádra, která mohou existovat ve vzbuzeném (excitovaném) stavu delší dobu (ms a déle).

Dále jádra rozdělujeme na stabilní a nestabilní, sudo-sudá (Z i N sudé), lichá (buď Z nebo N liché) a lichá-lichá (Z i N liché), sférická a deformovaná.

7.1.3 Základní stavební kameny atomových jader: proton a neutron

7.1.3.1 Proton

Klidová hmotnost protonu: $m_p = 938,2720 \text{ MeV}/c^2 = 1,672622 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. Náboj protonu je shodný s elementárním nábojem: $q_p = 1,602177 \cdot 10^{-19} \text{ C}$. Spin protonu: $s_p = \frac{1}{2}$.

Proton je stabilní. Existují teorie, které předpovídají jeho rozpad, ale experimentálně nebyl dosud rozpad protonu pozorován.

7.1.3.2 Neutron

Klidová hmotnost neutronu: $m_n = 939,5654 \text{ MeV}/c^2 = 1,674927 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$. Náboj neutronu: $q_n = (-0,4 \pm 1,1) \cdot 10^{-21} e$, tj. neutron je neutrální. Spin neutronu: $s_n = \frac{1}{2}$.

* Spinem nazýváme v této kapitole v souladu s terminologií obvyklou v jaderné a částicové fyzice číslo s , které je maximální hodnotou spinového kvantového čísla m , daného jádra či částice.

Střední doba života neutronu $\tau_n = 886$ s (poločas rozpadu $t_{1/2} = 10,23$ min), rozpadá se na proton, elektron a elektronové antineutrino (viz kap. 7.5.1): $n \rightarrow p + e^- + \bar{\nu}_e$ což lze, protože $m_n > m_p + m_e$.

Příklad 7.1:

Určení hmotnosti neutronu. Předpokládejme dokonale pružnou srážku neutronu s protonem nebo jádrem dusíku ${}^{14}_7\text{N}$, které jsou v klidu. Srážka probíhá v přímce. Určete hmotnost neutronu m_n na základě známých hmotností jádra dusíku m_N a protonu m_p a známých rychlostí jader dusíku v'_N a protonu v'_p po srážce s neutronem.

Řešení:

Při dokonale pružné srážce (dokonale pružném rázu) platí zákon zachování kinetické energie a zákon zachování hybnosti. Ze zákona zachování kinetické energie dostáváme

$$m_n v_n^2 = m_n v_n'^2 + m_x v_x'^2 \rightarrow m_n (v_n^2 - v_n'^2) = m_x v_x'^2 \quad (7.1)$$

a ze zákona zachování hybnosti dostáváme

$$m_n v_n = m_n v_n' + m_x v_x' \rightarrow m_n (v_n - v_n') = m_x v_x' \quad (7.2)$$

kde $x = p$ nebo N , v_n je počáteční rychlost neutronu.

Rovnice (7.1) a (7.2) podělíme a dostaneme: $v_x' = v_n - v_n'$

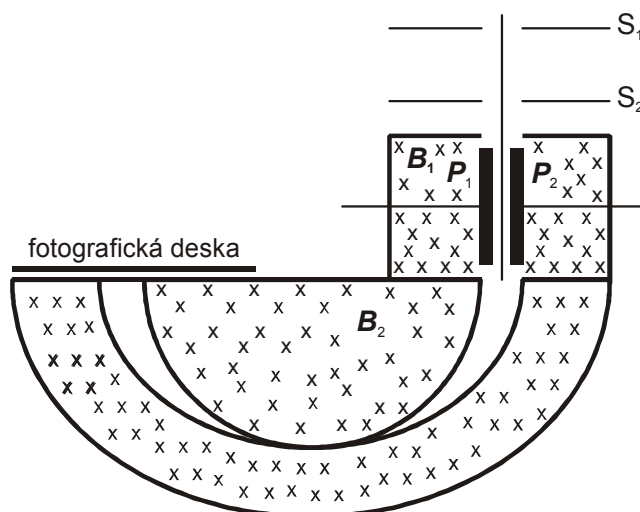
Nakonec: $2m_n v_n = (m_n + m_p) v_p'$, $2m_n v_n = (m_n + m_N) v_N' = (m_n + m_p) v_p'$

Můžeme tedy vyjádřit m_n :

$$m_n = \frac{m_N v_N' - m_p v_p'}{v_p' - v_N'}$$

7.1.4 Měření hmotností atomových jader: hmotnostní spektroskopie

Na obr. 7.3 máme schematicky znázorněn Bainbridgeův spektrograf. Do spektrografu vstupují jádra (kladně nabitě ionty).



Obr. 7.3 Bainbridgeův spektrograf.

Bainbridgeův spektrograf se skládá z rychlostního filtru, ve kterém jsou navzájem kolmá homogenní pole: elektrické s intenzitou E a magnetické s indukcí B_1 , která vybírají ze svazku ionty s rychlostí $v = E/B_1$, kolmou k E i B . Ionty pak vstupují s touto rychlostí v do homogenního magnetického pole o indukcii B_2 . V něm se pohybují po kruhových drahách o různém poloměru R , ze kterého můžeme určit jejich hmotnost m podle vztahu:

$$m = \frac{Ze R B_2}{v} = \frac{Ze R B_1 B_2}{E}$$

kde Ze je náboj iontů a poloměr R určíme z místa dopadu na fotografickou desku.

Hmotnostní spektrograf lze rovněž využít k určování izotopového složení prvků. Vzhledem k různým hmotnostem jsou dráhy jednotlivých izotopů a tím i místa jejich dopadu na fotografickou desku prostorově odděleny. Procentní zastoupení izotopu stanovíme na základě intenzity zčernání fotografické desky v místě dopadu. Moderní spektrografy nevyužívají fotografické emulze, ale polohově citlivé detektory, které přímo počítají dopadající izotopy. Pro zvýšení citlivosti je třeba používat mnohem složitější spektrografy s komplikovanějšími elektrickými a magnetickými poli.

7.1.5 Rozměry atomových jader

Příklad 7.2:

E. Rutherford bombardoval tenkou zlatou fólií α -částicemi s maximální energií $E_k = 7,7$ MeV a pozoroval rozptýlené α -částice. Na jakou nejmenší vzdálenost r_{\min} k jádru zlata se α -částice přiblížily?

Řešení:

α -částice s nábojem $Q_\alpha = 2e$ a jádro zlata s nábojem $Q_{\text{Au}} = 79e$ na sebe působí odpudivou elektrostatickou silou. Ze zákona zachování energie dostaneme:

$$E_k = E_p = k \frac{Q_\alpha Q_{\text{Au}}}{r_{\min}}$$

Tedy

$$r_{\min} = \frac{k Q_\alpha Q_{\text{Au}}}{E_k} = 3 \cdot 10^{-14} \text{ m}$$

Jelikož Rutherford nepozoroval odchylky od elektrostatického rozptylu na bodovém jádře zlata, musel být poloměr jádra zlata menší než r_{\min} .

Později byly α -částice urychleny na energie vyšší než 7,7 MeV a pronikly do menší vzdálenosti od středu jádra zlata, než je jeho poloměr. Zde nad elektrostatickou interakcí dominuje silná jaderná interakce mezi nukleony α -částice a jádra zlata. Při rozptylu α -částic pozorujeme odchylky od elektrostatického (Rutherfordova) rozptylu. Tak bylo možno určit rozměr jádra.

Další metody určování rozměrů jader:

1. rozptyl neutronů na jádrech,
2. rozptyl elektronů na jádrech: je-li kinetická energie elektronu $E_k = 1$ GeV, je jeho de Broglieova vlnová délka $\lambda = h/p = 1,2$ fm srovnatelná s rozměrem protonu nebo atomového jádra,
3. spektra mionových atomů: elektron je nahrazen mionem, částicí se stejnými vlastnostmi jako elektron ale větší hmotností ($m_\mu = 207 m_e$). Pro olovo ($Z = 82$) je poloměr 1. Bohrova

orbitu (pro $n = 1$) $r = \hbar^2 / (Ze^2 mk) = 6,5 \cdot 10^{-13}$ m pro elektron a 3 fm pro mion. V případě mionu je poloměr 1. Bohrova orbita menší, než je poloměr jádra, a mion se tedy pohybuje uvnitř objemu jádra, kde je elektrostatická potenciální energie soustavy mion – jádro Pb jiná než vně objemu jádra. Odlišná elektrostatická potenciální energie se projeví v odlišných energetických hladinách a tedy i v odlišných spektrálních čarách mionových atomů, jejichž poloha závisí na poloměru jádra.

Výsledky měření poloměru R jader:

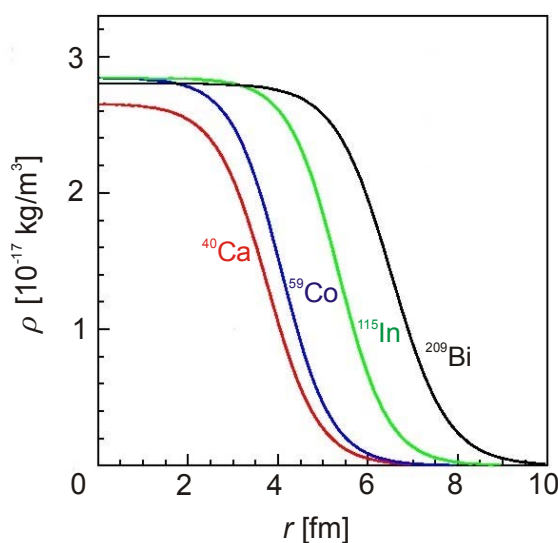
$$R = r_0 A^{1/3}$$

kde A je počet nukleonů, $r_0 \approx 1,1$ fm z rozptylu elektronů, 1,3 fm z rozptylu α -částic a neutronů. Obvykle se používá střední hodnota $r_0 = 1,2$ fm.

Za předpokladu kulového tvaru jader, můžeme spočítat hustotu ρ jader:

$$\rho = \frac{m}{V} \approx \frac{Au}{\frac{4}{3}\pi(r_0 A^{1/3})^3} = \frac{3u}{4\pi r_0^3} = 2,3 \cdot 10^{17} \text{ kg m}^{-3}$$

Vidíme, že jaderná hustota ρ je pro všechna známá jádra konstantní a nezávisí na počtu nukleonů (obr. 7.4). Můžeme tedy říci, že jaderná hmota se chová jako nestlačitelná kapalina.



Obr. 7.4 Průběh hustoty jader ρ v závislosti na vzdálenosti r od středu jádra.

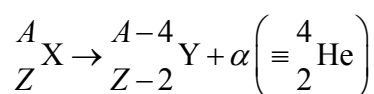
7.1.6 Tvar atomových jader

Deformovaná jádra (v oblasti $150 < A < 190$, $A > 226$) mají tvar protáhlého rotačního elipsoidu. Ostatní jádra mají sférický tvar (koule). Podle kvantové mechaniky mohou vykonávat rotační pohyb pouze deformovaná jádra, která nemají kulový tvar.

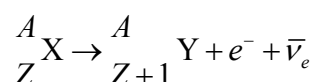
7.2 Radioaktivita atomových jader

7.2.1 Stabilita jader

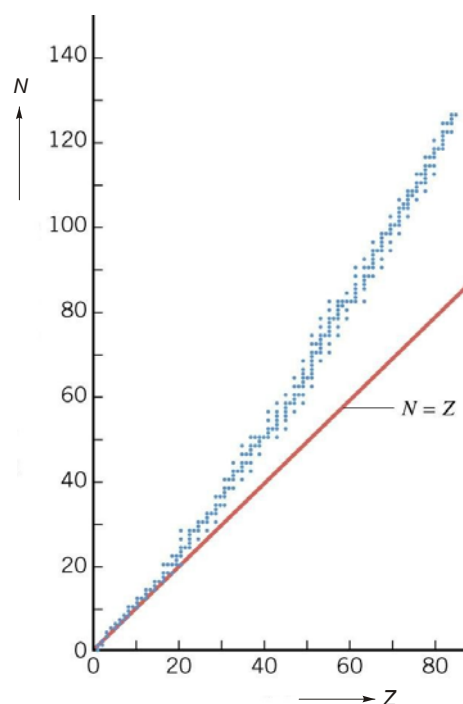
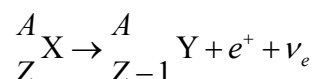
Na obr. 7.5 máme zachycena stabilní jádra (nuklidy). Oblast stabilních jader se nazývá údolí stability. Posun údolí oproti $N = Z$ do oblasti $N > Z$ je důsledkem elektrostatického odpuzování protonů. Neexistují stabilní nuklidy se $Z = 43, 61, N = 19, 35, 39, 45, 61, 89, 115, 126$ nebo s $A = Z + N = 5$ nebo 8 . Všechny nuklidy se $Z > 83, N > 126$ a $A > 209$ jsou nestabilní. Nestabilní jádra se rozpadají α -rozpadem:



β^- -rozpadem:



nebo β^+ -rozpadem (příp. elektronovým záchytem, viz kap. 7.2.4):



Obr. 7.5 Neutron-protonový diagram pro stabilní nuklidy.

7.2.2 Rozpadový zákon

Nestabilní jádra se rozpadají obvykle některým z výše uvedených rozpadů α, β či γ . Rozpad je statistická záležitost. Rozpadový zákon, který platí pro střední hodnoty veličin, byl formulován na základě experimentálních výsledků Rutherfordem a Soddyem v diferenciálním tvaru:

$$-\frac{dN}{dt} = \lambda N \quad (7.3)$$

kde $-dN/dt$ je úbytek počtu jader za jednotku času, N počet nerozpadlých jader v určitém čase a λ rozpadová konstanta typická pro počáteční stav daného jádra a typ rozpadu; λ je nezávislá na teplotě, tlaku či jiných charakteristikách okolního prostředí.

Rozpadový zákon můžeme zapsat rovněž v integrálním tvaru:

$$N = N_0 \exp(-\lambda t)$$

kde N_0 je počet nerozpadlých jader v čase $t = 0$ s. Rozpadový zákon v integrálním tvaru udává počet mateřských jader (tzn. jader, která se rozpadají) v čase t .

Pro počet N_R dceřiných jader (vznikají rozpadem mateřských jader) v čase t neboli počet rozpadů mateřských jader za čas t platí:

$$N_R = N_0 - N = N_0 [1 - \exp(-\lambda t)]$$

Poločas rozpadu $t_{1/2}$ je definován jako doba, za kterou se rozpadne polovina jader:

$$N(t_{1/2}) = \frac{N_0}{2} = N_0 \exp(-\lambda t_{1/2}), \quad t_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$$

Střední doba života τ je definována vztahem:

$$\tau = \int_{t=0}^{\infty} t dP(t) = \lambda \int_0^{\infty} t \exp(-\lambda t) dt = \frac{1}{\lambda}$$

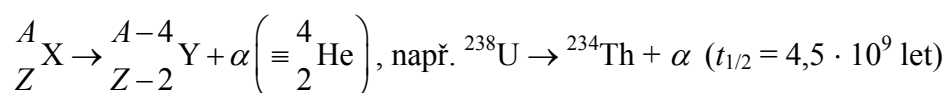
kde $dP(t) = [N(t) - N(t+dt)] / N_0$ je pravděpodobnost rozpadu v intervalu $(t, t+dt)$.

Aktivita A je definována jako počet rozpadů za jednotku času. Z rozpadového zákona v diferenciálním tvaru (7.3) pro aktivitu dostáváme:

$$A = \lambda N$$

Jednotkou aktivity je 1 becquerel = 1 Bq = 1 rozpad za 1 s. Starší jednotkou je curie, 1 Ci = 37 GBq.

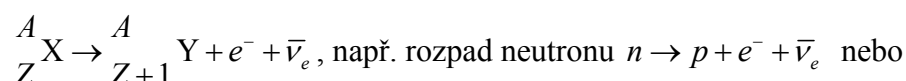
7.2.3 α -rozpad



Za α -rozpad je zodpovědná silná (jaderná) interakce. Setkáváme se s ním u aktinidů, v okolí ${}^{208}\text{Pb}$ a u vzácných zemin. Vyletující α -částice jsou monoenergetické (jejich kinetická energie je jednoznačně určena zákonem zachování hybnosti a energie). Poločasy rozpadu se pohybují mezi 10^{-20} s a 10^{18} let. Toto velké rozmezí poločasů rozpadu je možné vysvětlit pomocí tunelového jevu.

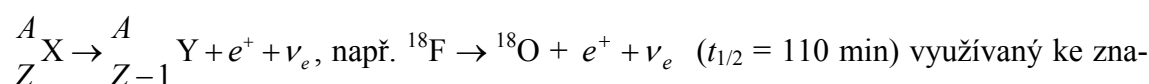
7.2.4 β -rozpad

Za β -rozpad je zodpovědná slabá interakce. Rozlišujeme β^- -rozpad

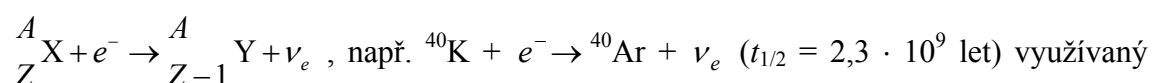


${}^{14}\text{C} \rightarrow {}^{14}\text{N} + e^- + \bar{\nu}_e$ ($t_{1/2} = 5730$ let) využívaný k datování biologických vzorků radiouhlíkovou (radiokarbonovou) metodou,

a β^+ -rozpad



čení molekul v pozitronové emisní tomografii, se spojitým spektrem vyletujících elektronů (pozitronů) a **elektronový záchyt**

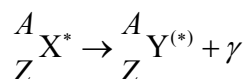


k určování stárí hornin, s monoenergetickým spektrem vyletujících částic. Elektronový záchyt převažuje nad β^+ -rozpadem u těžších jader, kdy jsou elektrony z vnitřních slupek atomu dostatečně blízko jádru a mohou jím být zachyceny.

β -rozpady jsou spojeny se vznikem elektronových neutrin ν_e či antineutrin $\bar{\nu}_e$. Protože neutrino jsou neutrální částice, nemůžeme je přímo detekovat. Můžeme je detekovat pouze

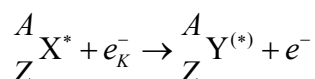
pomocí jejich interakcí, při kterých vznikají nabitě částice, které ionizují náplň detektorů. Klidová hmotnost elektronového neutrina $m_{\nu_e} < 7 \text{ eV}/c^2$, náboj elektronového neutrina $q_{\nu_e} = 0$ a spin elektronového neutrina $s_{\nu_e} = \frac{1}{2}$. Neutrina velice slabě interagují a proto jsou obtížně detekovatelná. Střední volná dráha neutrina v železe je přibližně 100 světelných let.

7.2.5 γ -rozpad



Pro γ -rozpady (deexcitace jádra emisí fotonu) je charakteristické monoenergetické spektrum. Za γ -rozpady je zodpovědná elektromagnetická interakce. Skutečnost, že dané jádro je v excitovaném (vzbuzeném) stavu, značíme hvězdičkou u symbolu příslušného prvku.

7.2.6 Vnitřní (elektronová) konverze



U vnitřní (elektronové) konverze neprobíhá deexcitace jádra emisí fotonu, nýbrž emisí jednoho z elektronů atomového obalu. Vnitřní konverze je pravděpodobnější u těžších jader, u kterých se vnitřní atomární elektrony s dostatečně velkou pravděpodobností nacházejí v objemu jádra. Pro vnitřní konverzi je charakteristické monoenergetické spektrum vyletujících elektronů a tím ji lze odlišit od β -rozpadu.

7.2.7 Aplikace radioaktivity

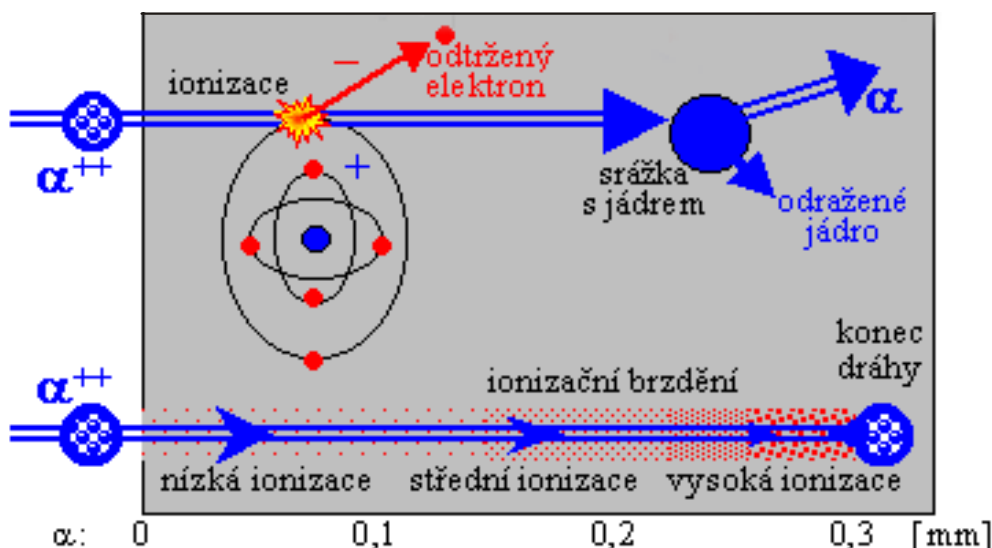
Radioaktivita se dá využít např. k určování stáří hornin. Metoda je založena na tom, že v hornině uvažované jako uzavřená soustava klesá s časem obsah mateřského izotopu a roste obsah dceřiného izotopu. Radioaktivita se rovněž využívá k datování biologických vzorků (radiouhlíková metoda), značení atomů a molekul radioaktivními izotopy (ke studiu jejich pohybu a chemických reakcí či v diagnostických metodách jako je např. pozitronová emisní tomografie).

7.3 Interakce záření s hmotou, radiační dávka, ochrana před zářením

7.3.1 Interakce nabitých a neutrálních částic s hmotou

Při radioaktivním rozpadu jader se nejčastěji uvolňují tři druhy záření:

α -částice jako nabitě částice při průchodu hmotou ionizují atomy a tím ztrácí svou energii (obr. 7.6). Dolet α -částice závisí na její počáteční kinetické energii a na vlastnostech prostředí, ve kterém se pohybuje. V pevných látkách proniká jen velmi tenkou vrstvou materiálu.



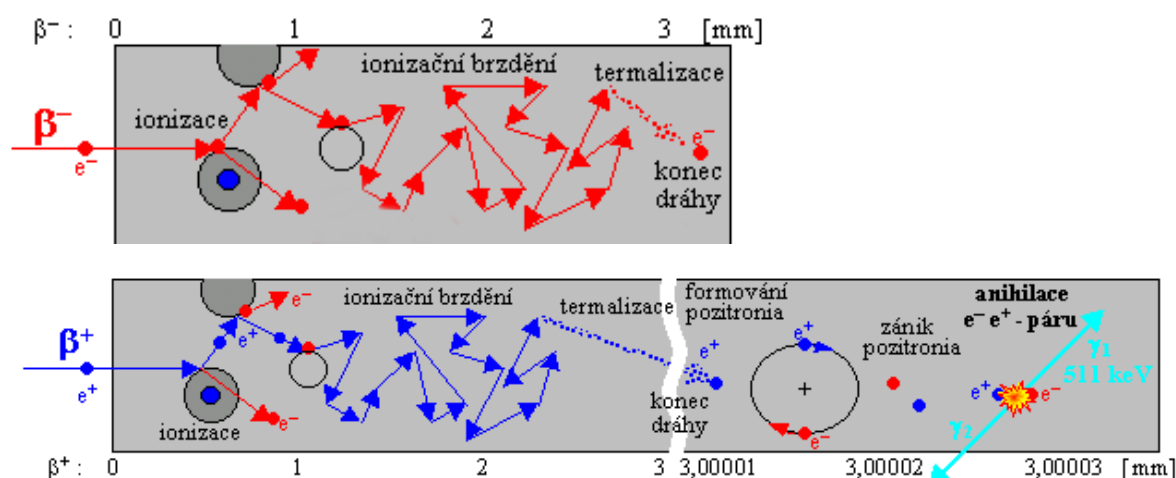
Obr. 7.6 Interakce α -částic s hmotou.

β -záření představuje proud elektronů nebo pozitronů. Obě tyto nabitě částice při průchodu hmotou vyvolávají ionizaci, ovšem mnohem nižší než těžké α -částice, a také dochází k rozptylu elektronů (pozitronů) na atomech hmotného prostředí. V důsledku těchto procesů klesá intenzita svazku elektronů (pozitronů) při průchodu hmotným prostředím se vzrůstající hloubkou průniku přibližně exponenciálně a rovněž se snižuje energie elektronů (pozitronů). Absorpční zákon má tvar:

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

kde I_0 je intenzita svazku dopadajícího na absorbátor a I je intenzita v hloubce x absorbátoru. Absorpční koeficient μ závisí na energii absorbovaného β -záření a jen nepatrně na druhu absorbujícího materiálu.

Pozitrony na konci své trajektorie mohou vytvořit před anihilací s elektronem vázaný systém elektron-pozitron, tzv. pozitronium (obr. 7.7).



Obr. 7.7 Interakce elektronů a pozitronů s hmotou.

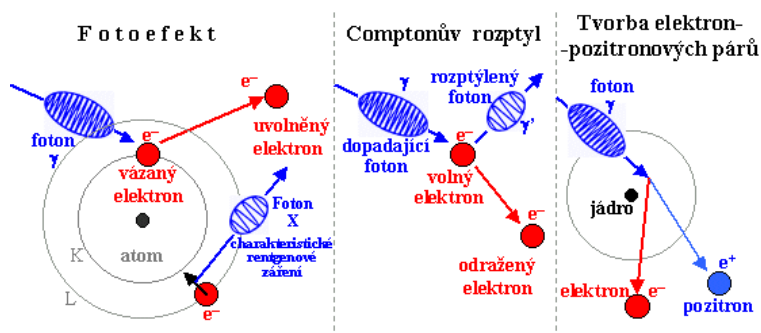
γ -záření je krátkovlnným elektromagnetickým zářením (proudem fotonů) s vlnovými délkami menšími než 10^{-10} m, jehož zdrojem jsou atomová jádra. V hmotném prostředí může γ -záření vyvolat tři druhy procesů (obr. 7.8):

1. **Fotoelektrický jev:** K fotoelektrickému jevu dochází na vnitřních elektronových slupkách atomu. Dopadající foton je absorbován elektronem z K, L, ... slupky atomového obalu, který pak opouští atom. Energie fotonu $h\nu$ se spotřebuje na kinetickou energii E_k elektronu a překonání vazebné energie E_v elektronu v atomovém obalu:

$$h\nu = E_k + E_v = \frac{1}{2}mv^2 + E_v.$$

Uvolněná místa po elektronech jsou zaplňována elektrony z vnějších slupek a tak vzniká při fotoelektrickém jevu kromě uvolněných elektronů ještě charakteristické rentgenové záření. Fotoelektrický jev převládá hlavně u měkkého, tj. nízkoenergetického γ -záření ($h\nu < 0,8$ MeV).

2. **Comptonův jev:** V tomto případě dochází k rozptylu fotonu na atomárním elektronu. Energie rozptýleného fotonu E'_γ je nižší než energie původního fotonu $h\nu$. Za předpokladu, že $E_v \ll E_\gamma$, platí: $h\nu = E'_\gamma + E_k$, kde E_k je kinetická energie rozptýleného elektronu.
3. **Tvoření párů elektron-pozitron:** V tomto procesu zaniká foton a vzniká dvojice elektron a pozitron. Může k němu dojít teprve tehdy, když je energie fotonu $h\nu$ větší než celková klidová energie elektron - pozitronového páru $2mc^2 \approx 1$ MeV (m je klidová hmotnost elektronu i pozitronu).



Obr. 7.8 Interakce γ -záření s hmotou.

Při průchodu γ -záření hmotou dochází díky uvedeným procesům k zeslabení intenzity původního svazku, tj. k absorpci γ -záření. Experimentálně bylo zjištěno, že absorpci γ -záření ve hmotě lze popsat exponenciálním vztahem

$$I = I_0 e^{-\mu x}$$

kde I_0 je intenzita γ -záření dopadajícího na absorbátor, I je intenzita γ -záření po průchodu absorbátorem o tloušťce x a μ je absorpční koeficient, který se udává v cm^{-1} . Někdy se také uvádí tzv. polotloušťka absorbátoru $x_{1/2}$, což je tloušťka, která sníží intenzitu záření na polovinu. To znamená, že platí:

$$\mu = \frac{\ln 2}{x_{1/2}}$$

Uvedené druhy záření vyvolávají při průchodu hmotným prostředím ionizaci atomů prostředí, proto se nazývají **ionizační záření**. Přímou ionizují atomy pouze nabití částice (α -částice, protony, elektrony, pozitrony), neutrální částice (fotony, neutrony) ionizují atomy nepřímo prostřednictvím nabitých částic, které vznikají při jejich interakci s hmotným prostředím. Při interakci fotonů s atomy se při fotoelektrickém či Comptonově jevu uvolňují elektrony, které ionizují atomy, nebo při tvorbě párů elektron-pozitron vznikají elektrony a pozitrony, které rovněž ionizují atomy. Při interakci neutronů s atomovými jádry vznikají fotony, protony nebo jiná kladně nabitá atomová jádra, které mohou ionizovat atomy.

7.3.2 Dozimetrické veličiny

K popisu účinků ionizačního záření na organismus se používají tyto veličiny:

Radiační dávka nebo zkráceně **dávka** D je podíl střední energie dE předané ionizačním zářením hmotnostnímu elementu dm organismu, $D = dE/dm$ jednotkou dávky je gray (1 Gy = 1 J kg⁻¹). Pokud dosáhne radiační dávka hodnoty 3 Gy, zemře 50 % zasažené populace. Dříve se pro radiační dávku používala jednotka rad (zkratka z anglického „radiation absorbed dose“), 1 Gy = 100 rad.

Průběh ozařování charakterizuje **dávkový příkon** $D' = dD/dt$, což je dávka absorbovaná v organismu za jednotku času. Jednotkou dávkového příkonu je Gy s⁻¹ (z praktických důvodů se dávkový příkon často udává také v mGy h⁻¹). Dávku a dávkový příkon měříme dozimetrem.

Odezva živého organismu na záření závisí nejen na absorbované dávce, ale také na druhu záření. Tuto skutečnost zohledňuje **dávkový ekvivalent** $H = DQN$, kde D je absorbovaná dávka, Q je jakostní faktor, který závisí na druhu záření (pro γ -záření $Q = 1$), a N je součin ostatních modifikujících faktorů, např. rozložení dávky v čase (pro vnější ozáření můžeme obvykle brát $N = 1$). Jednotkou dávkového ekvivalentu je sievert (1 Sv = 1 J kg⁻¹), veličiny Q a N jsou bezrozměrné. Dříve se pro dávkový ekvivalent používala jednotka rem (zkratka z anglického „radiation equivalent man“), 1 Sv = 100 rem.

Příkon dávkového ekvivalentu $H' = dH/dt$ udává přírůstek dávkového ekvivalentu za jednotku času, jeho jednotkou je Sv s⁻¹ (z praktických důvodů se často používá mSv h⁻¹).

V praxi se často místo dávkového ekvivalentu H používá **ekvivalentní dávka** $H_T = w_R \bar{D}$, kde w_R je radiační váhový faktor zohledňující druh absorbovaného záření ($w_R = 1$ pro β -záření a γ -záření, $w_R = 20$ pro α -záření, pro neutrony se w_R pohybuje od 5 do 20 v závislosti na jejich energii) a \bar{D} je střední absorbovaná dávka v určitém orgánu či tkáni. Jednotkou ekvivalentní dávky je sievert (Sv). Různá střední absorbovaná dávka může mít v určitém orgánu či tkáni stejný biologický účinek, např. střední absorbovaná dávka 100 mGy od γ -záření či 5 mGy od α -záření má za následek stejnou ekvivalentní dávku $H_T = 100$ mSv.

Pro stanovení radiační zátěže pro různé skupiny obyvatelstva se používá **efektivní dávka** $E = \sum_T w_T H_T$, kde sčítání probíhá přes všechny ozářené tkáně a orgány, w_T je tkáňový

váhový faktor zohledňující relativní zdravotní újmu spojenou s účinky záření v určitém orgánu či tkáni při rovnoměrném ozáření celého těla (w_T nabývá hodnot od 0,01 pro kůži či povrch kostí až po 0,20 pro pohlavní žlázy). Jednotkou efektivní dávky je sievert (Sv).

7.3.3 Ochrana před zářením

Práce s radioaktivními látkami je možno provádět jen za zvláštních bezpečnostních opatření a platí pro ně předpisy, které zajišťují ochranu pracovníků před působením ionizačního záření. Nejčastější způsob ochrany spočívá v odstínění nebezpečného záření pomocí absorbátoru.

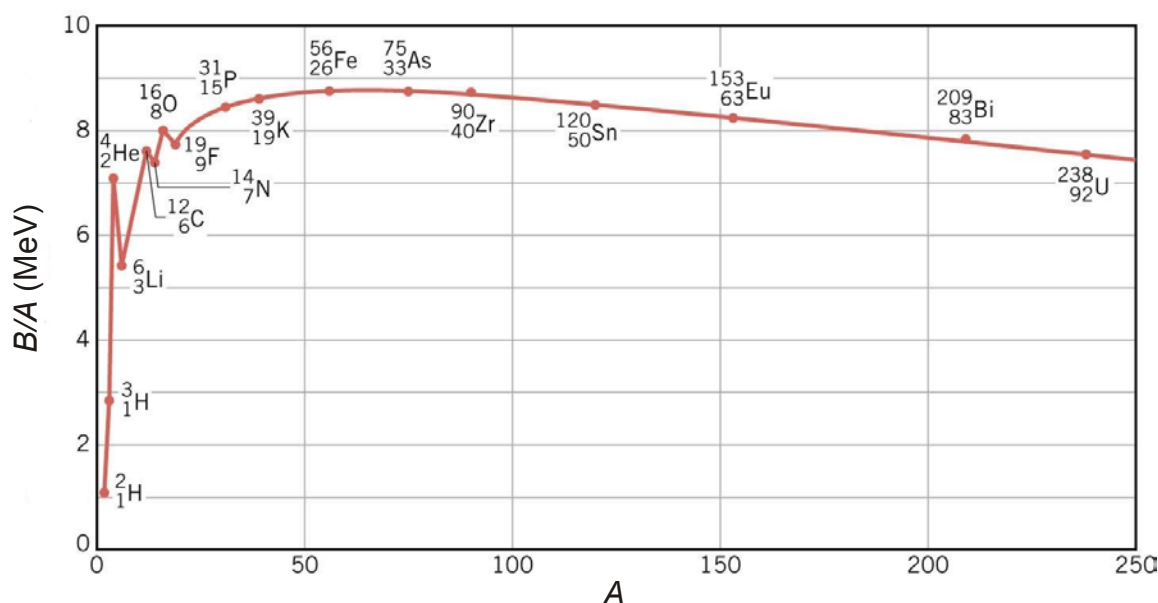
Dolet α -částic ve vzduchu je menší než 10 cm a do tkáně pronikají jen povrchově - do hloubky přibližně 0,02 mm. K poškození může tedy dojít jen na povrchu kůže, oka apod. K odstínění stačí dostatečná vzdálenost od záříče.

Pronikavost β -záření závisí na jeho energii (tvrdomosti). Dostatečnou ochranou je poměrně tenká vrstva z lehkého materiálu. Stačí, aby tloušťka stínění d v mm byla větší než dvojnásobek maximální energie β -částic v MeV: $d \text{ (mm)} \geq 2 E_{\text{max}} \text{ (MeV)}$.

Pro zajištění ochrany proti velmi pronikavému γ -záření se používá stínění z těžkých materiálů, zejména olova. Pro potřeby praxe se obvykle udává tloušťka olova potřebná pro desetinásobné zeslabení intenzity γ záření (např. 3,5 cm pro γ -záření o energiích 1,17 MeV a 1,33 MeV, které vysílá zdroj ^{60}Co).

7.4 Štěpení a fúze atomových jader

7.4.1 Vazebná energie jader



Obr. 7.9 Vazebná energie na nukleon B/A v závislosti na počtu nukleonů A .

Pro hmotnost jader $M(Z, N)$ platí:

$$M(Z, N) = Zm_p + Nm_n - B(Z, N)/c^2$$

kde $B(Z, N)$ je vazebná energie jádra, m_p hmotnost protonu a m_n hmotnost neutronu. Z experimentu vyplývá, že $B(Z, N)$ je přímo úměrná celkovému počtu nukleonů A , $B(Z, N)/A \approx 8 \text{ MeV}$. Z toho plyne, že jaderné síly, které působí mezi nukleony mají krátký dosah. Pokud by měly dlouhý dosah, byla by jejich vzájemná interakce úměrná počtu dvojic interagujících nukleonů:

$$\binom{A}{2} = \frac{A(A-1)}{2}$$

Na obr. 7.9 vidíme graf závislosti vazebné energie na nukleon $B(Z,N)/A$ na počtu nukleonů A . Tato závislost není konstantní. Důsledkem je možnost získávat energii štěpením těžkých jader (jaderné elektrárny) nebo fúzí lehkých jader (ve stadiu výzkumu).

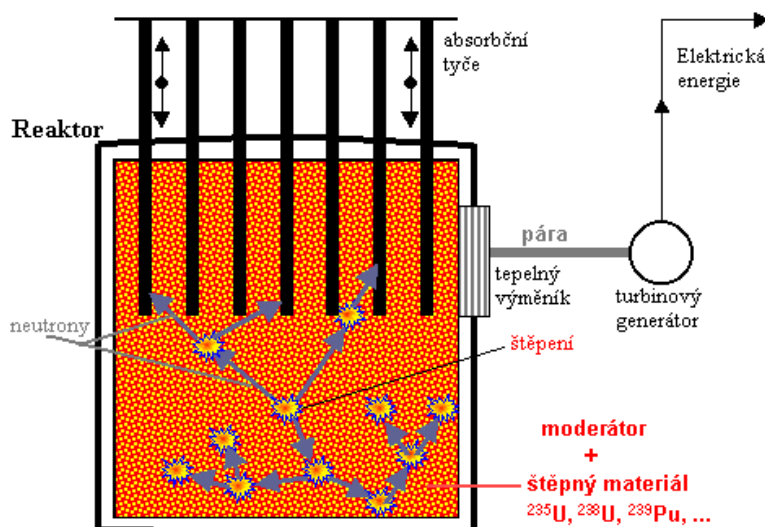
7.4.2 Zdroje energie

7.4.2.1 Jaderné reaktory

Využívají štěpení uranu neutronem, při kterém se jádro uranu rozpadne s největší pravděpodobností na dvě přibližně stejně velká jádra a uvolní se několik neutronů, které mohou dále štěpit jádra uranu (řetězová reakce). ^{235}U se nejpravděpodobněji štěpí pomalými neutrony s kinetickou energií $E_k \approx 0,02 \text{ eV}$, což se využívá v klasických reaktorech, ^{238}U se štěpí rychlými neutrony s minimální kinetickou energií $1,1 \text{ MeV}$, což se využívá v rychlých reaktorech. Schéma reaktoru je na obr. 7.10.

V $1 \text{ kg } ^{235}\text{U}$ je energie $8 \cdot 10^{13} \text{ J}$, což odpovídá $3 \cdot 10^6 \text{ kg}$ uhlí. Na 1 akt štěpení se uvolní v průměru 2,51 neutronů se střední kinetickou energií 2 MeV . Nejvhodnější energie neutronů pro štěpení ^{235}U je $0,02 \text{ eV}$. Na tuto energii je třeba neutrony zpomalit. K tomu slouží moderátor (H_2O , D_2O , C – grafit), ve kterém se neutrony srážkami zpomalují. Při tomto procesu dochází ke ztrátám: k zachytu neutronů na ^{235}U nebo ^{238}U – v přírodním uranu je izotopu ^{238}U 99,3 %, v klasických reaktorech méně díky obohacení izotopem ^{235}U ; může také docházet k zachytu neutronů na příměsích či k jejich úniku.

Aby nenastal lavinovitý průběh štěpení, je nutná regulace. Regulovat nelze počet primárních neutronů vznikajících přímo při štěpení, protože ty vznikají v rozmezí $10^{-6} \div 0,1 \text{ s}$. V tak krátkém čase nelze regulaci provádět. Regulovat ale můžeme počet sekundárních neutronů, které vznikají při rozpadu produktů štěpení v rozmezí $0,07 \div 80,2 \text{ s}$ a které tvoří 0,75 % celkového počtu neutronů na 1 akt štěpení. Regulace se provádí pomocí kadmiových tyčí (na Cd dochází s velkou pravděpodobností k zachytu neutronů). Aby se reakce udržela a zároveň reaktor zůstal pod kontrolou, musí se počet neutronů z jednoho aktu štěpení využitelný k dalšímu štěpení (po odečtení ztrát) pohybovat v rozmezí $1 \div 1,0075$.

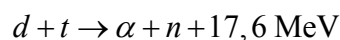


Obr. 7.10 Schéma jaderného reaktoru.

7.4.2.2 Termojaderná fúze

K termojaderné fúzi v pozemských podmínkách může dojít dvěma způsoby:

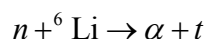
1. **vodíková bomba** s rozbuškou z ^{235}U , která vytvoří dostatečnou teplotu a tlak, aby během $1\ \mu\text{s}$ proběhla fúze deuteria a tritia ($d = {}^2\text{H}$ a $t = {}^3\text{H}$):



Uvolněná energie odpovídá $5 \cdot 10^5\ \text{kg}$ TNT či 2500 prvním uranovým bombám.

2. **řízená termojaderná reakce**

$d + t \rightarrow \alpha + n + 17,6\ \text{MeV}$, kde nestabilní tritium se vyrábí v plášti reaktoru reakcí:



Výhody:

- (a) V oceánech je $5 \cdot 10^{16}\ \text{kg}$ deuteria (0,3 g/l), v $1\ \text{km}^3$ mořské vody je energie srovnatelná s energií ve veškeré ropě na Zemi. Zásoby deuteria při spotřebě na úrovni roku 1970 vystačí na 10^9 let.
- (b) Množství radioaktivního odpadu (β -radioaktivní t a neutrony aktivované konstrukční materiály) je srovnatelné s jadernými elektrárnami, ale poločasy rozpadu se pohybují v rozmezí $1 \div 100$ let (u jaderných elektráren $100 \div 10000$ let).
- (c) Nebezpečí výbuchu je nulové, jakákoli nestabilita plazmatu ve fúzním reaktoru způsobí ukončení fúze.

Experimentálně k fúzi došlo v TOKAMAKu, kde je vysokoteplotní plazma magnetickým polem stlačována a tím zahřívána na dostatečně vysoké teploty. Aby fúze s jistotou nastala, je třeba plazmu udržet po 1 s při teplotě ($10^7 \div 10^8$) K při hustotě 10^{20} jader na m^3 . V roce 1997 se podařilo na TOKAMAKu JET v anglickém Abingdonu dosáhnout stabilního výkonu 4 MW po dobu 5 s, přičemž celková energie uvolněná při termojaderné fúzi byla 22 MJ. Na tomto TOKAMAKu byl také krátkodobě dosažen maximální výkon 16,1 MW.

7.5 Subnukleární částice a jejich interakce

7.5.1 Přehled elementárních částic

V tabulce 7.1 je uveden přehled elementárních částic podle současného stavu poznání. Bosony jsou částice s celočíselným spinem, které zprostředkují interakce mezi fermiony, říká se jim rovněž polní částice. Fermiony jsou částice s poločíselným spinem, které spolu interagují prostřednictvím (výměnou) bosonů.

Ke každé částici (vyjma elementárních bosonů) existuje antičástice se stejnou hmotností a opačným nábojem. Neutrální neutrino a antineutrino se liší pouze helicitou. V klasické mechanice zavádíme helicitu h jako projekci úhlové rychlosti $\vec{\omega}$ rotující střely do směru pohybu (rychlosti \vec{v}):

$$h = \frac{\vec{v} \cdot \vec{\omega}}{|\vec{v}| \cdot |\vec{\omega}|} = \pm 1$$

Pohybuje-li se bod na povrchu kulové rotující střely po pravotočivé šroubovici, má střela helicitu kladnou, pohybuje-li se po levotočivé šroubovici, má helicitu zápornou. V kvantové mechanice můžeme analogicky zavést helicitu jako projekci spinu \vec{s} do směru pohybu:

$$h = \frac{2\vec{s} \cdot \vec{p}}{|\vec{p}|} = \pm 1$$

Tabulka 7.1: Přehled elementárních částic.

částice	označení	klidová energie	náboj (e)	spin	stabilita	interakce
bosony						
gluon	g	0	0	1	vázaný	silná
foton	γ	0	0	1	stabilní	elektromag.
W^\pm -boson	W^\pm	80 GeV	± 1	1	nestabilní	slabá
Z -boson	Z^0	91 GeV	0	1	nestabilní	slabá
higgs	H^0	> 48 GeV	0	0		elektroslabá
higgs	H^\pm	$> 41,7$ GeV	± 1	0		elektroslabá
graviton		0	0	2		gravitační
fermiony						
kvarky						
up	u	~ 5 MeV	$+ 2/3$	$1/2$	vázaný	všechny
down	d	~ 10 MeV	$- 1/3$	$1/2$	vázaný	všechny
charm	c	$\sim 1,5$ GeV	$+ 2/3$	$1/2$	vázaný	všechny
strange	s	~ 200 MeV	$- 1/3$	$1/2$	vázaný	všechny
top	t	~ 180 GeV	$+ 2/3$	$1/2$	vázaný	všechny
bottom	b	$\sim 4,7$ GeV	$- 1/3$	$1/2$	vázaný	všechny
leptony						
elektronové neutrino	ν_e	< 7 eV	0	$1/2$	nestabilní	slabá
elektron	e^-	0,511 MeV	-1	$1/2$	stabilní	kromě silné
mionové neutrino	ν_μ	$< 0,3$ MeV	0	$1/2$	nestabilní	slabá
mion	μ^-	106 MeV	-1	$1/2$	nestabilní	kromě silné
tauonové neutrino	ν_τ	< 30 MeV	0	$1/2$	nestabilní	slabá
tauon	τ^-	1777 MeV	-1	$1/2$	nestabilní	kromě silné

Rozlišujeme tzv. 3 rodiny (generace) fermionů:

1. u, d, ν_e, e^-
2. c, s, ν_μ, μ^-
3. t, b, ν_τ, τ^-

Probíhá-li určitá interakce v jedné rodině, probíhá rovněž v dalších rodinách.

Hmota ve vesmíru je složena pouze z těchto částic: u, d a e^- (proton se skládá ze tří kvarků uud , neutron rovněž ze tří kvarků udd).

7.5.2 Složené subnukleární částice

Interakci mezi kvarky zprostředkovávají gluony. Volné kvarky a gluony v přírodě neexistují, jsou vázány v **hadronech**. Existují dva typy vázaných stavů kvarků:

1. **mezony** (vázané stavy kvarku s antikvarkem) s celočíselným spinem, tj. bosony (Tabulka 7.2), a
2. **baryony** (vázané stavy tří kvarků) s poločíselným spinem, tj. fermiony. Mezi baryony patří proton a neutron (Tabulka 7.3).

Tabulka 7.2: Přehled mezonů.

MEZON $q\bar{q}$		kvarky	elektrický náboj	hmotnost (GeV/c ²)	spin
π^+	pion	$u\bar{d}$	+1	0,140	0
K^-	kaon	$s\bar{u}$	-1	0,494	0
K^0	kaon	$d\bar{s}$	0	0,498	0
ρ^+	ró	$u\bar{d}$	+1	0,770	1
D^+	D	$c\bar{d}$	+1	1,869	0
η_c	éta-c	$c\bar{c}$	0	2,980	0

Tabulka 7.3: Přehled baryonů.

Baryony qqq		kvarky	elektrický náboj	hmotnost (GeV/c ²)	spin
p	proton	$u u d$	+1	0,938	1/2
\bar{p}	antiproton	$\bar{u} \bar{u} \bar{d}$	-1	0,938	1/2
n	neutron	$u d d$	0	0,940	1/2
Λ_0	lambda	$u d s$	0	1,116	1/2
Ω^-	omega	$s s s$	-1	1,672	3/2
Σ_c	sigma-c	$u u c$	+2	2,455	1/2

7.5.3 Interakce mezi subnukleárními částicemi

S gravitační interakcí mezi hmotnými částicemi a elektromagnetickou interakcí mezi nabitými částicemi jsme se již seznámili. Některé částice (kvarky a gluony) nesou také náboj jiného typu než elektromagnetický. Dostal název barevný náboj nebo barva. Síla mezi částicemi nesoucími barevný náboj je nesmírně velká, proto se nazývá silná interakce. Tato interakce drží pohromadě kvarky v hadronech, a proto její nosiče dostaly jméno gluony (z anglického glue - lepidlo). Atomová jádra drží pohromadě zbytková silná interakce, která má dostatečnou sílu na to, aby překonala vzájemné elektromagnetické odpuzování protonů.

Zbývá ještě jedna interakce - slabá. Existuje 6 typů kvarků a 6 typů leptonů. Všechna stabilní hmota ve vesmíru se skládá z nejméně hmotných kvarků a nabitých leptonů (u, d, e^-), protože kvarky a leptony s vyšší hmotností se na ně právě díky slabé interakci rozpadají. Když se nějaký kvark nebo lepton rozpadne na jiný (změní se jeho typ, např. z mionu se stane elektron), říkáme, že se změnila jeho vůně (slabý náboj). Slabá interakce zodpovídá např. za rozpad neutronu i za β -rozpady atomových jader. Síly čtyř základních interakcí v přírodě jsou porovnány v Tabulce 7.4.

Tabulka 7.4: Srovnání interakcí mezi subnukleárními částicemi

INTERAKCE	gravitační	slabá	elektro- magnetická	silná	
		elektroslabá		fundamentální	zbytková
působí na	hmotnost	slabý náboj („vůně“)	elektrický náboj	barevný náboj	viz text
interagující částice	všechny	leptony kvarky	elektricky nabitě	kvarky gluony	hadrony
nosiče interakce	graviton (dosud nebyl pozorován)	$W^+ W^- Z^0$	γ (foton)	gluony	mezony
síla mezi 2 kvarky $\begin{cases} \text{na } 10^{-18} \text{ m} \\ \text{na } 3 \cdot 10^{-17} \text{ m} \end{cases}$ (v poměru k elektromagnetické síle)	10^{-41} 10^{-41}	0,8 10^{-4}	1 1	25 60	nelze vyjádřit
síla mezi 2 protony v jádru	10^{-36}	10^{-7}	1	nelze vyjádřit	20

Dodatky

D.1 Vektorové diferenciální operátory

D.1.1 Gradient skalární veličiny

Je-li fyzikální vlastnost objektu popsána v každém bodě prostoru skalární veličinou, říkáme, že v prostoru je definováno **skalární pole** této veličiny. Uvažovaná veličina je obecně funkcí prostorových souřadnic a času. Nemění-li se veličina s časem, vytváří statické skalární pole. Příkladem skalárního pole je rozložení hustoty ρ v nehomogenním prostředí, rozložení teploty T v nerovnoměrně zahřátém materiálu či rozložení tlaku p v prostředí. Označíme-li skalární veličinu u , pak její závislost na poloze určené polohovým vektorem \vec{r} nebo kartézskými souřadnicemi x, y, z můžeme symbolicky zapsat

$$u(\vec{r}) = u(x, y, z) \quad (\text{D.1})$$

Položíme-li

$$u(x, y, z) = \text{konst} \quad (\text{D.2})$$

vyjádříme tím plochu, v jejíž bodech má skalární veličina stejnou hodnotu. Tyto plochy označujeme jako **ekvipotenciální plochy** nebo **hladiny** skalární veličiny. Skalární pole může být tedy znázorněno soustavou těchto ploch či hladin, které se navzájem neprotínají. Příkladem hladin skalární veličiny mohou být vrstevnice v zeměpisných mapách, které spojují místa se stejnou nadmořskou výškou. Postupujeme-li v prostoru, kde je zavedené skalární pole, po určité křivce, dostáváme se do míst s různými hodnotami skalární funkce. Postoupíme-li ve směru osy x z daného místa o dx , ve směru osy y o dy a ve směru osy z o dz , je elementární přírůstek skalární veličiny definován vztahem

$$du = \frac{\partial u}{\partial x} dx + \frac{\partial u}{\partial y} dy + \frac{\partial u}{\partial z} dz \quad (\text{D.3})$$

Tímto vztahem se v matematice zavádí **totální (úplný) diferenciál funkce**.

Postoupíme-li v tomto prostoru z daného místa o elementární vektor posunutí $d\vec{r}$, závisí přírůstek skalární veličiny na směru vektoru $d\vec{r}$. V kartézské souřadnicové soustavě můžeme zapsat vektor $d\vec{r}$ pomocí směrových vektorů souřadnicových os

$$d\vec{r} = dx \vec{i} + dy \vec{j} + dz \vec{k} \quad (\text{D.4})$$

Zavedme nyní vektor

$$\text{grad } u = \frac{\partial u}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial u}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial u}{\partial z} \vec{k} \quad (\text{D.5})$$

Tento vektor, jehož složky jsou dány parciálními derivacemi skalární funkce $u(x, y, z)$ podle jednotlivých souřadnic, označujeme jako **gradient** skalární funkce v daném bodě. Porovnáním vztahů pro totální diferenciál (D.3), elementární vektor posunutí (D.4) a gradient (D.5) zjistíme, že platí

$$du = \text{grad } u \cdot d\vec{r} \quad (\text{D.6})$$

Totální diferenciál skalární veličiny je výsledkem skalárního součinu gradientu a elementárního vektoru posunutí.

Diskutujeme **směr a velikost gradientu** skalární veličiny. Postoupíme-li v prostoru po hladině skalární veličiny, tj. elementární vektor posunutí $d\vec{r}$ má směr tečny k ekvipotenciále v daném bodě, nezmění se hodnota veličiny u . Proto

$$du = \text{grad } u \cdot d\vec{r} = 0$$

Z vlastností skalárního součinu vektorů vyplývá, že *gradient je v každém bodě kolmý k hladině (ekvipotenciále) skalární veličiny*.

Zapišme skalární součin (D.6) pomocí velikostí vektorů a úhlu α mezi oběma vektory:

$$du = |\text{grad } u| |d\vec{r}| \cos \alpha = |\text{grad } u| dn \quad (\text{D.7})$$

Výraz $dr \cos \alpha = dn$ určuje průmět vektoru $d\vec{r}$ do směru gradientu, tj. do směru normály k hladině skalární veličiny v daném bodě. Odtud je zřejmé, že velikost gradientu skalární veličiny je vyjádřena podílem

$$|\text{grad } u| = \frac{du}{dn} \quad (\text{D.8})$$

kde dn můžeme interpretovat jako nejmenší vzdálenost mezi hladinou skalární veličiny $u = \text{konst}$ a hladinou $u + du = \text{konst}$.

Gradient skalární veličiny je vektor, který je kolmý k hladině skalární veličiny a udává směr, ve kterém se tato veličina nejrychleji mění.

Gradient skalární funkce můžeme vyjádřit pomocí **diferenciálního vektorového operátoru**, který se značí symbolem $\vec{\nabla}$ a zpravidla čte „operátor nabla“. Operátorem přitom v matematice rozumíme předpis označující operaci, kterou se dané funkci přiřazuje jiná funkce.* Operátor nabla $\vec{\nabla}$ představuje následující předpis operací

$$\vec{\nabla} = \frac{\partial}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial}{\partial z} \vec{k} \quad (\text{D.9})$$

Operátor $\vec{\nabla}$ aplikovaný na skalární veličinu $u(x, y, z)$ poskytne funkci

$$\vec{\nabla} u = \frac{\partial u}{\partial x} \vec{i} + \frac{\partial u}{\partial y} \vec{j} + \frac{\partial u}{\partial z} \vec{k} = \text{grad } u \quad (\text{D.10})$$

kterou jsme definovali jako gradient skalární veličiny.

D1.2 Divergence, Gaussova věta

Analogicky skalárnímu poli je v prostoru definováno **vektorové pole** tehdy, jestliže každému bodu v prostoru je přiřazena vektorová veličina. Znázornit pole vektorové veličiny můžeme křivkami, které svojí tečnou udávají směr příslušné vektorové veličiny v daném bodě. Příkladem je rozložení vektoru rychlosti proudění reálné kapaliny (Fyzika I). Vektory rychlostí mají v daném místě směr tečny k proudovým čarám. Vložíme-li do vektorového pole plochu o plošném obsahu S , můžeme určit **tok vektorové veličiny plochou**

$$N = \iint_S \vec{v} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D.11})$$

Elementární tok dN vektorové veličiny \vec{v} elementární plochou dS je dán skalárním součinem vektorů \vec{v} a $d\vec{S}$. Platí

* Operátory se budeme podrobněji zabývat ve Fyzice II v rámci kvantové mechaniky.

$$dN = \vec{v} \cdot d\vec{S} = v dS \cos \alpha = v dS_n$$

Vektor $d\vec{S}$ má směr normály k elementární ploše dS . Tok vektorové veličiny danou plochou dS závisí na velikosti vektorové veličiny v a na úhlu α , který oba vektory svírají. Je tedy tím větší, čím je větší plošný obsah dS_n plochy kolmé ke směru vektorové veličiny (obr.5.9)

Diskutujeme nyní **tok vektorové veličiny uzavřenou plochou**, který jsme zavedli ve Fyzice I. Tato plocha vymezuje v prostoru určitý objem, např. kulová plocha vymezuje objem koule, uzavřená plocha složená ze šesti čtvercových ploch vymezuje objem krychle apod. Tok vektoru uzavřenou plochou je dán vztahem

$$N = \oint_S \vec{v} \cdot d\vec{S} \quad (D.12)$$

Hodnota toku vektorové veličiny uzavřenou plochou je výsledkem bilance vtoku a výtoku:

- Tok je kladný, převládá-li výtok vektorové veličiny nad vtokem. To je možné tehdy, jsou-li uvnitř objemu, který plocha uzavírá, tzv. **zřídla** toku vektorové veličiny.
- Tok je záporný, převládá-li vtok vektorové veličiny nad jejím výtokem. V tomto případě část toku uvnitř objemu, který plocha uzavírá, mizí, jsou zde tzv. **nory** toku vektorové veličiny.
- Tok je roven nule, je-li vtok vektorové veličiny roven jejímu výtoku.

V řadě aplikací je výhodnější posuzovat tok vektorové veličiny uzavřenou plochou v závislosti na vlastnostech pole v daném bodě. K tomuto účelu se definuje **divergence vektorové veličiny** $\text{div } \vec{v}$ jako limita toku vektorové veličiny \vec{v} uzavřenou plochou vztaženého na jednotkový objem

$$\text{div } \vec{v} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \oint_{\Delta S} \vec{v} \cdot d\vec{S} \quad (D.13)$$

kde ΔV je objem uzavřený plochou ΔS .

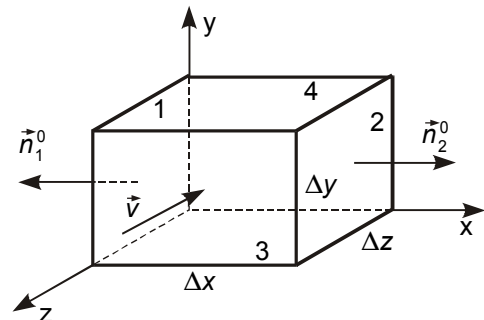
Pomocí vztahu (D.13) nalezneme jiný způsob vyjádření divergence vektorové veličiny. Uvažme pro tento účel situaci znázorněnou na obr. D.1. V poli vektorové veličiny \vec{v} je umístěn kvádr o velmi malých hranách $\Delta x, \Delta y$ a Δz . Hledejme tok vektoru \vec{v} plochou, která uzavírá velmi malý objem kvádru $\Delta V = \Delta x \Delta y \Delta z$.

Tok vektoru uzavřenou plochou je dán součtem toků vektoru šesti obdélníkovými plochami

$$\oint_{\Delta S} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \iint_{\Delta S_1} \vec{v} \cdot d\vec{S} + \iint_{\Delta S_2} \vec{v} \cdot d\vec{S} + \dots + \iint_{\Delta S_6} \vec{v} \cdot d\vec{S} \quad (D.14)$$

Směr příslušného vektoru $d\vec{S}$ je dán podle konvence směrem vnější normály k příslušné ploše. Např. u stěny 1 míří vnější normála proti směru osy x zvoleného souřadnicového systému, proto

$$\iint_{\Delta S_1} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \iint_{\Delta S_1} \vec{v} \cdot \vec{n}_1^0 dS = \iint_{\Delta S_1} -\vec{v} \cdot \vec{i} dS = -v_x \Delta y \Delta z \quad (D.15)$$



Obr. D. 1 K odvození divergence vektoru

Vektorová veličina \vec{v} není konstantní, její složky v_x , v_y a v_z jsou v různých místech různé. Změnu x-ové složky vektoru v_x při posunutí na ose x o délku Δx vyjádříme pomocí Taylorova vztahu

$$v'_x = v_x + \frac{\partial v_x}{\partial x} \Delta x \quad (\text{D.16})$$

kde $v'_x = v_x(x + \Delta x, y, z)$.

Potom analogicky vztahu (D.15) zapíšeme tok vektoru \vec{v} plochou ΔS_2 , jejíž vnější normála však míří ve směru osy x

$$\iint_{\Delta S_2} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \iint_{\Delta S_2} \vec{v} \cdot \vec{i} dS = v'_x \Delta y \Delta z = \left(v_x + \frac{\partial v_x}{\partial x} \Delta x \right) \Delta y \Delta z \quad (\text{D.17})$$

Součet toků vektoru \vec{v} plochami ΔS_1 a ΔS_2 je podle (D.15) a (D.17) roven

$$\iint_{\Delta S_1} \vec{v} \cdot d\vec{S} + \iint_{\Delta S_2} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \frac{\partial v_x}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (\text{D.18})$$

Zcela obdobně určíme výsledný tok vektoru \vec{v} plochami kolmými na osu y

$$\iint_{\Delta S_3} \vec{v} \cdot d\vec{S} + \iint_{\Delta S_4} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \frac{\partial v_y}{\partial y} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (\text{D.19})$$

a výsledný tok vektoru \vec{v} plochami kolmými na osu z

$$\iint_{\Delta S_5} \vec{v} \cdot d\vec{S} + \iint_{\Delta S_6} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \frac{\partial v_z}{\partial z} \Delta x \Delta y \Delta z \quad (\text{D.20})$$

Výsledný tok uzavřenou plochou je potom

$$\oiint_{\Delta S} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \left(\frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (\text{D.21})$$

Podle definičního vztahu (D.13) pro divergenci vektoru můžeme psát

$$\text{div } \vec{v} = \lim_{\Delta V \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta V} \oiint_{\Delta S} \vec{v} \cdot d\vec{S} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (\text{D.22})$$

Divergence vektoru je tedy skalární funkcí souřadnic x , y , z a je dána součtem parciálních derivací jednotlivých složek vektoru podle příslušných souřadnic. Divergenci vektoru $\text{div } \vec{v}$ můžeme zapsat jako skalární součin symbolického vektoru nabra $\vec{\nabla}$ (D.9) a vektoru \vec{v}

$$\text{div } \vec{v} = \vec{\nabla} \cdot \vec{v} = \frac{\partial v_x}{\partial x} + \frac{\partial v_y}{\partial y} + \frac{\partial v_z}{\partial z} \quad (\text{D.23})$$

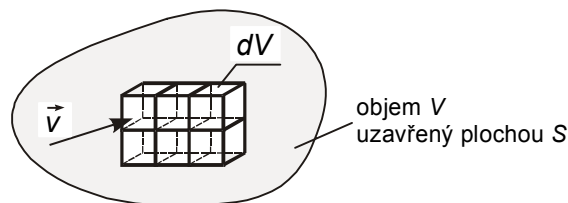
Gaussova věta

Přejdeme-li od nekonečně malého objemového elementu dV ke konečnému objemu V , je výsledný tok vektorové veličiny plochou uzavírající objem V dán součtem toků vektorové veličiny plochami uzavírajícími elementární objemy dV . Na obr. D.2 jsou objemové elementy znázorněné malými krychlemi.

Tok vektoru \vec{v} plochou uzavírající elementární objem dV můžeme vyjádřit pomocí divergence vektoru $\text{div } \vec{v}$ jako součin $\text{div } \vec{v} dV$. Výsledný tok vektoru je potom

$$N = \iiint_V \operatorname{div} \vec{v} dV \quad (\text{D.24})$$

Pro vyjádření výsledného toku vektorové veličiny uvážíme situaci mezi sousedními plochami objemových elementů. Je zřejmé (obr. D.2), že výtok vektoru z jedné plochy je současně vtokem vektoru do sousední plochy. Takové příspěvky k výslednému toku vektoru plochou se proto ruší. Výsledný tok vektoru plochou uzavírající objem V je proto dán pouze součtem příspěvků od hraničních plošek, které tvoří vnější ohraničení objemu V . Proto podle (D.24) platí



Obr. D.2 Ke Gaussově větě

$$N = \iiint_V \operatorname{div} \vec{v} dV = \oint_S \vec{v} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D.25})$$

Vztah (D.25) je zápisem **Gaussovy věty**, která umožňuje vzájemně převést uvedený prostorový integrál přes objem V na plošný integrál přes uzavřenou plochu S , která uzavírá objem V . Pomocí Gaussovy věty můžeme k integrální podobě fyzikálních zákonů zapsat jejich diferenciální formu, která je v řadě aplikací výhodnější.

Příklad D1

Pomocí Gaussovy věty nalezněte diferenciální formu rovnice kontinuity pro kapalinu.

Řešení

Rovnice kontinuity v integrálním tvaru je uvedena v 5. kapitole pod číslem (5.33a)

$$\oint_S \rho \vec{v} \cdot d\vec{S} = -\frac{d}{dt} \iiint_V \rho dV$$

Zápis této rovnice v diferenciálním tvaru nám umožní Gaussova věta, pomocí které převedeme plošný integrál na objemový

$$\oint_S \rho \vec{v} \cdot d\vec{S} = \iiint_V \operatorname{div} \rho \vec{v} dV$$

Porovnáním pravých stran uvedených rovnic dostaneme

$$\iiint_V \operatorname{div} \rho \vec{v} dV = -\frac{d}{dt} \iiint_V \rho dV$$

Rovnice kontinuity v diferenciálním tvaru je potom

$$\operatorname{div} \rho \vec{v} = -\frac{\partial \rho}{\partial t}$$

D.1.3 Rotace, Stokesova věta

Ve vektorovém poli dále definujeme **cirkulaci vektoru podél uzavřené křivky**. Tato křivka je hranicí plochy ΔS . Cirkulace vektoru je vyjádřena hodnotou křivkového integrálu vektorového pole podél uzavřené křivky ℓ

$$\oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} \quad (\text{D.26})$$

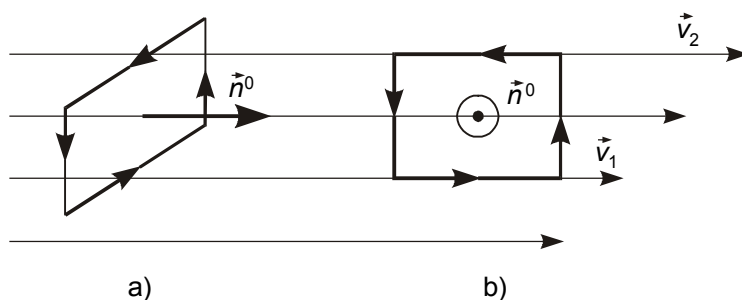
kde $d\vec{r}$ je elementární vektor posunutí, jehož směr je dán tečnou ke křivce orientovanou ve směru oběhu podél křivky. Vztáhneme-li cirkulaci vektoru \vec{v} podél křivky, která je hranicí

plochy ΔS , na plošnou jednotku, můžeme pro limitní přechod $\Delta S \rightarrow 0$ definovat vektorovou veličinu, tzv. **rotaci vektoru** $\text{rot } \vec{v}$, pomocí vztahu

$$\text{rot } \vec{v} \cdot \vec{n}^0 = \lim_{\Delta S \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta S} \oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} \quad (\text{D.27})$$

kde \vec{n}^0 je jednotkový vektor ve směru normály k ploše ΔS , jejíž hranicí je křivka ℓ . Směr vektoru \vec{n}^0 udává palec pravé ruky, ukazují-li její sevřené prsty směr oběhu podél uzavřené křivky.

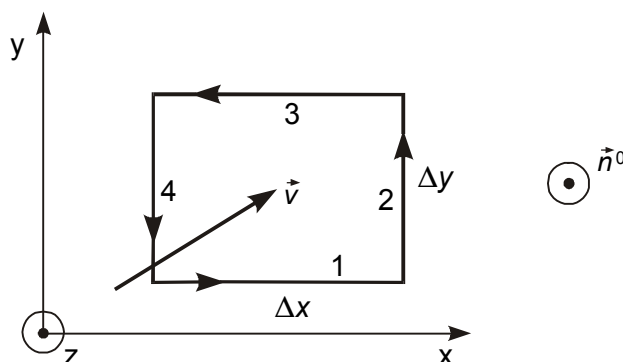
Levá strana rovnice (D.27) představuje průmět vektoru $\text{rot } \vec{v}$ do směru normály k ploše ΔS (vektoru \vec{n}^0). Míří-li \vec{n}^0 např. ve směru osy x kartézského souřadnicového systému, můžeme pomocí (D.27) určit x -ovou souřadnici vektoru $(\text{rot } \vec{v})_x$. Cirkulace vektoru $\oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r}$ podél uzavřené křivky



Obr. D.3 Závislost cirkulace na orientaci plochy

ℓ závisí na orientaci plochy ΔS ve vektorovém poli.

Na obr. D.3a je čtvercová plocha kolmá k vektoru \vec{v} , tj. vektor \vec{n}^0 je rovnoběžný s vektorem \vec{v} . Na každé straně čtverce je vektor $d\vec{r}$ kolmý na vektor \vec{v} , jejich skalární součiny jsou rovny nule a cirkulace vektoru podél křivky je proto nulová. Na obr. D.3b je cirkulace nenulová, pokud mají vektory \vec{v}_1 a \vec{v}_2 různou velikost.



Obr. D.4 K definici rotace vektoru

Na základě platnosti (D.27) odvodíme nyní další výraz pro rotaci vektoru. Uvažme podle obr. D.4 obdélník o stranách Δx a Δy , které jsou velmi malé. Obdélník je v rovině xy v poli vektoru \vec{v} . Hledejme cirkulaci vektoru \vec{v} podél křivky, která je hranicí plochy $\Delta S_z = \Delta x \Delta y$.

Postupujeme-li při integraci ve směru šipek, míří normálový vektor \vec{n}^0 plochy ve směru osy z kartézského souřadnicového systému. Strany obdélníka očíslovujeme a můžeme psát

$$\oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} = \int_{(1)} \vec{v} \cdot d\vec{r} + \int_{(2)} \vec{v} \cdot d\vec{r} + \int_{(3)} \vec{v} \cdot d\vec{r} + \int_{(4)} \vec{v} \cdot d\vec{r} \quad (\text{D.28})$$

Po uvážení směrů vektorů ve skalárních součinech platí

$$\oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} = \int_{(1)} v_x dx + \int_{(2)} v'_y dy - \int_{(3)} v'_x dx - \int_{(4)} v_y dy \quad (\text{D.29})$$

x -ové složky vektoru nejsou v místech stran 1 a 3 stejné. Jejich změnu můžeme podle Taylova rozvoje vyjádřit

$$v'_x = v_x + \frac{\partial v_x}{\partial y} \Delta y \quad (\text{D.30})$$

Obdobně y-ové složky vektoru jsou v místech stran 2 a 4 různé. Podle Taylorova rozvoje platí

$$v'_y = v_y + \frac{\partial v_y}{\partial x} \Delta x \quad (\text{D.31})$$

Po dosazení (D.30) a (D.31) do vztahu (D.29) dostaneme cirkulaci vektoru \vec{v} podél uzavřené křivky v rovině xy

$$\oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} = \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \Delta x \Delta y \quad (\text{D.32})$$

Podle (D.27) můžeme nyní definovat z-ovou složku vektoru rotace $(\text{rot } \vec{v})_z$

$$\begin{aligned} \text{rot } \vec{v} \cdot \vec{n}^0 &= \text{rot } \vec{v} \cdot \vec{k} = (\text{rot } \vec{v})_z = \lim_{\Delta S_z \rightarrow 0} \frac{1}{\Delta S_z} \oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} \\ (\text{rot } \vec{v})_z &= \frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \end{aligned} \quad (\text{D.33a})$$

Obdobně můžeme odvodit vztahy pro zbývající složky vektoru $\text{rot } \vec{v}$

$$(\text{rot } \vec{v})_x = \frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \quad (\text{D.33b})$$

$$(\text{rot } \vec{v})_y = \frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \quad (\text{D.33c})$$

Rotaci vektoru můžeme tedy zapsat jako vektor v kartézském souřadnicovém systému

$$\text{rot } \vec{v} = \left(\frac{\partial v_z}{\partial y} - \frac{\partial v_y}{\partial z} \right) \vec{i} + \left(\frac{\partial v_x}{\partial z} - \frac{\partial v_z}{\partial x} \right) \vec{j} + \left(\frac{\partial v_y}{\partial x} - \frac{\partial v_x}{\partial y} \right) \vec{k} \quad (\text{D.34a})$$

nebo jako determinant

$$\text{rot } \vec{v} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ \frac{\partial}{\partial x} & \frac{\partial}{\partial y} & \frac{\partial}{\partial z} \\ v_x & v_y & v_z \end{vmatrix} \vec{\nabla} \times \vec{v} \quad (\text{D.34b})$$

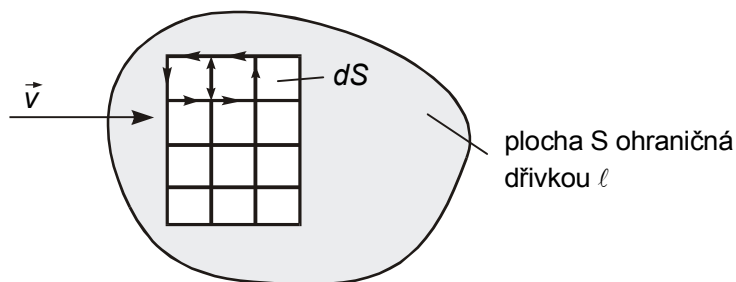
Je zřejmé, že rotace vektoru \vec{v} je vyjádřena vektorovým součinem symbolického vektoru nabla $\vec{\nabla}$ (D.9) a vektoru \vec{v} .

Stokesova věta

Chceme-li vyjádřit cirkulaci vektoru podél křivky, která je hranicí plochy S konečné velikosti, je výsledná cirkulace vektoru dána součtem cirkulací podél křivek ohraničujících elementární plochy dS . Cirkulaci podél křivky, která je hranicí elementární plochy dS , vyjádříme skalárním součinem $\text{rot } \vec{v} \cdot d\vec{S}$. Výsledná cirkulace je potom

$$\iint_S \text{rot } \vec{v} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D.35})$$

Při vyjádření výsledné cirkulace vektoru podél křivky, která je hranicí plochy S , uvážíme podle obr. D.5, že sousední strany elementárních ploch jsou probíhány vždy dvakrát v opačném směru.



Obr. D.5 Ke Stokesově větě

Příspěvky k výsledné cirkulaci vektoru tak získáme pouze při obíhání podél vnější křivky, která ohraničuje plochu S . Podle (D.35) můžeme proto psát

$$\iint_S \text{rot } \vec{v} \cdot d\vec{S} = \oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} \quad (\text{D.36})$$

kde ℓ je uzavřená křivka, která je hranicí plochy S .

Vztah (D.36) se označuje jako **Stokesova věta** a umožňuje nám vzájemně převést uvedený integrál podél uzavřené křivky na plošný integrál přes plochu, která je křivkou ohraničená. Stokesovu větu užíváme obdobně jako Gaussovu větu pro diferenciální zápis některých fyzikálních zákonů.

Příklad D2

Užitím Stokesovy věty запиšte podmínku pro nevírový charakter proudění kapaliny v diferenciálním tvaru.

Řešení

Podmínka pro nevírový charakter proudění kapaliny je v kap. 5 uvedena vztahem (5.60).

$$\oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} = 0$$

Pomocí Stokesovy věty můžeme psát

$$\oint_{\ell} \vec{v} \cdot d\vec{r} = \iint_S \text{rot } \vec{v} \cdot d\vec{S} = 0$$

Odtud

$$\text{rot } \vec{v} = \vec{0}$$

D2. Maxwellovy rovnice v diferenciálním tvaru a vlnová rovnice elektromagnetického vlnění

V tomto dodatku k odd. 3.6 uvedeme Maxwellovy rovnice v diferenciálním tvaru a z nich odvodíme vlnovou rovnici pro elektromagnetického vlnění.

Maxwellovy rovnice v integrálním tvaru platné pro vakuum* byly podrobně diskutovány v kap. 3.

$$\oint_{\ell} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 \left(i^R + \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \right) \quad (\text{D2.1})$$

$$\oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D2.2})$$

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \frac{Q}{\varepsilon_0} \quad (\text{D2.3})$$

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (\text{D2.4})$$

Nyní s využitím operátoru divergence a rotace a pomocí Gaussovy a Stokesovy věty (Dodatek 1) odvodíme jejich tvar v odpovídající diferenciální podobě, který je zvláště pro numerické řešení elektromagnetického pole výhodnější.

Pomocí Gaussovy věty (D1.25) a příkladu D1.1 nalezneme nejprve diferenciální podobu rovnice (D2.3). Převedeme plošný integrál na levé straně rovnice (D2.3) na objemový

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = \int_V \text{div } \vec{E} dV \quad (\text{D2.5})$$

Náboj Q na pravé straně rovnice (D2.3) vyjádříme pomocí objemové hustoty náboje ρ

$$\frac{Q}{\varepsilon_0} = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_V \rho dV \quad (\text{D2.6})$$

Porovnáním pravých stran rovnic (D2.5) a (D2.6) dostaneme

$$\int_V \text{div } \vec{E} dV = \frac{1}{\varepsilon_0} \int_V \rho dV \quad (\text{D2.7})$$

Rovnice (D2.3) v diferenciálním tvaru je potom

$$\text{div } \vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \quad (\text{D2.8})$$

Obdobným postupem převedeme do diferenciálního tvaru rovnici (D2.4)

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = \int_V \text{div } \vec{B} dV \quad (\text{D2.9})$$

Diferenciální tvar rovnice (D2.4) je tedy

* Uvedené rovnice platí i pro homogenní, izotropní a lineární prostředí, nahradíme-li permitivitu vakua ε_0 a permeabilitu vakua μ_0 celkovou permitivitou ε a celkovou permeabilitou μ podle vztahu (4.35).

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (\text{D2.10})$$

Diferenciální tvar rovnice (D2.1) odvodíme pomocí Stokesovy věty (D1.36) a příkladu D1.2. Křivkový integrál na levé straně rovnice (D2.1) převedeme na plošný

$$\oint_{\ell} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \int_S \operatorname{rot} \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D2.11})$$

Celkový proud i^R na pravé straně rovnice (D2.1) vyjádříme pomocí proudové hustoty \vec{J} a píšeme

$$\mu_0 \left(i^R + \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \right) = \mu_0 \left(\int_S \vec{J} \cdot d\vec{S} + \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \right) \quad (\text{D2.12})$$

Porovnáním pravých stran rovnic (D2.11) a (D2.12) dostaneme hledanou diferenciální podobu rovnice (D2.1)

$$\operatorname{rot} \vec{B} = \mu_0 \left(\vec{J} + \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \right) \quad (\text{D2.13})$$

Parciální derivací zde vyjádříme časovou změnu vektoru intenzity elektrického pole.

Obdobně převedeme křivkový integrál na levé straně rovnice (D2.2) na plošný

$$\oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = \int_S \operatorname{rot} \vec{E} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D2.14})$$

Porovnáním pravých stran rovnic (D2.14) a (D2.2) dostaneme diferenciální tvar rovnice (D2.2)

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{D2.15})$$

Vlnová rovnice elektromagnetického vlnění

Předpokládejme, že elektromagnetický rozruch se šíří ve vakuu, ve kterém neuvažujeme přítomnost elektrických nábojů ($Q = 0$ C) a elektrických proudů ($i^R = 0$ A). Maxwellovy rovnice v integrálním tvaru můžeme za tohoto předpokladu zjednodušeně psát (blíže kap. 3)

$$\oint_{\ell} \vec{B} \cdot d\vec{\ell} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{d}{dt} \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D2.16})$$

$$\oint_{\ell} \vec{E} \cdot d\vec{\ell} = -\frac{d}{dt} \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S} \quad (\text{D2.17})$$

$$\oint_S \vec{E} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (\text{D2.18})$$

$$\oint_S \vec{B} \cdot d\vec{S} = 0 \quad (\text{D2.19})$$

Obdobně můžeme zjednodušit i příslušné Maxwellovy rovnice v diferenciálním tvaru

$$\operatorname{rot} \vec{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t} \quad (\text{D2.20})$$

$$\operatorname{rot} \vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t} \quad (\text{D2.21})$$

$$\operatorname{div} \vec{E} = 0 \quad (\text{D2.22})$$

$$\operatorname{div} \vec{B} = 0 \quad (\text{D2.23})$$

Nyní ukážeme, že pomocí Maxwellových rovnic v diferenciálním tvaru lze snadno odvodit vlnovou rovnici elektromagnetického vlnění a určit jeho rychlost šíření.

Na rovnici (D2.20) uplatníme operátor rotace a píšeme

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} \vec{E} \quad (\text{D2.24})$$

Bez důkazu převezmeme identitu z vektorové analýzy pro operátor $\operatorname{rot} \operatorname{rot}$ a aplikujeme ji na vektor \vec{B}

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \vec{B} = \operatorname{grad} \operatorname{div} \vec{B} - \Delta \vec{B} \quad (\text{D2.25})$$

kde Δ značí Laplaceův operátor.

Dosadíme-li nyní do (D2.25) za $\operatorname{div} \vec{B} = 0$ podle (D2.23) a do (D2.24) za $\operatorname{rot} \vec{E}$ podle (D2.21), dostaneme porovnáním rovnic (D2.24) a (D2.25) **vlnovou rovnici pro vektor \vec{B}**

$$\Delta \vec{B} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{B}}{\partial t^2} \quad (\text{D2.26})$$

Obdobně můžeme aplikací operátoru rotace na rovnici (D2.21) po úpravě získat **vlnovou rovnici pro vektor \vec{E}**

$$\Delta \vec{E} = \mu_0 \varepsilon_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} \quad (\text{D2.27})$$

Vlnové rovnice (D2.26) a (D2.27) mají tvar obecné vlnové rovnice známé z nauky o vlnění (FI), jejímž řešením je vlnová funkce u závislá na prostorových souřadnicích a čase.

$$\Delta u = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 u}{\partial t^2} \quad (\text{D2.28})$$

Porovnáním tvaru obecné vlnové rovnice (D2.28) a vlnových rovnic pro vektory popisující elektromagnetické pole (D2.26) a (D2.27) zjišťujeme, že elektromagnetický rozruch se šíří ve vakuu rychlostí v danou vztahem

$$v = c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \varepsilon_0}} = \frac{1}{\sqrt{4\pi \cdot 10^{-7} \cdot 8,85 \cdot 10^{-12}}} \text{ m s}^{-1} = 3 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1} \quad (\text{D2.28a})$$

V nevodivém prostředí s permitivitou ε a permeabilitou μ je rychlost šíření rozruchu menší a je dána vztahem

$$v = \frac{1}{\sqrt{\mu \varepsilon}} = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \mu_r \varepsilon_0 \varepsilon_r}} \quad (\text{D2.28b})$$

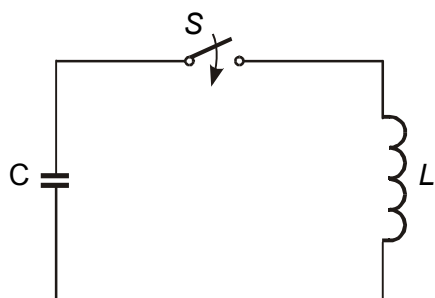
Existenci elektromagnetického vlnění teoreticky předpověděl J.C. Maxwell, který rovněž uvedeným porovnáním rychlosti šíření elektromagnetického vlnění a rychlosti světla dospěl k poznání, že *světlo je jen zvláštním případem elektromagnetického vlnění*.

D3. Oscilační obvody

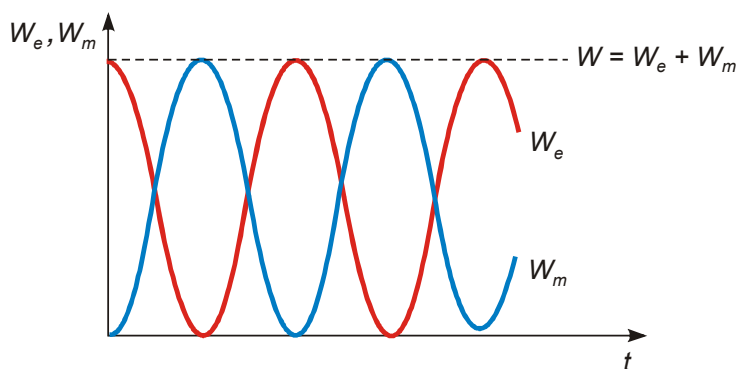
Tento dodatek věnujeme popisu vlastností oscilačních obvodů LC a RLC a zdůrazníme elektromechanickou analogii mezi kmity v těchto obvodech a kmity mechanického oscilátoru, které jsme popsali ve skriptech FI.

Netlumené kmity v obvodu LC

Obvod podle obr. D3.1 obsahuje kondenzátor o kapacitě C a cívku o vlastní indukčnosti L . V tomto případě neuvažujeme elektrický odpor, součástky jsou ideální. V čase $t = 0$ předpokládáme, že kondenzátor je nabitý nábojem Q , spínač S je rozpojený a obvodem neprochází proud. Po sepnutí spínače dojde k vybíjení kondenzátoru, jeho náboj $q(t)$ se v čase mění, obvodem začne procházet proud $i(t)$ a energie elektrického pole kondenzátoru W_e se přeměňuje na energii magnetického pole cívky W_m . V důsledku časové změny proudu cívku se v ní indukuje elektromotorické napětí, které podle Lenzova pravidla působí svými účinky proti změně, která je vyvolala. Po vybití kondenzátoru proto dochází naopak k přeměně energie magnetického pole cívky na energii elektrického pole kondenzátoru. Děj se periodicky opakuje a označujeme jej jako **netlumené elektromagnetické oscilace**. Uvedený obvod se nazývá **LC oscilátor**.



Obr. D3.1 Obvod LC



Obr. 3.2 Průběh energie elektrického a magnetického pole

Matematický popis uvedených oscilací vychází (obdobně jako u mechanických kmitů) z řešení diferenciální rovnice, kterou v daném případě sestavíme z energetické bilance LC obvodu. Protože nepředpokládáme přítomnost elektrického odporu, jsou zanedbány případné tepelné ztráty při přeměně energie. Celková energie W se proto v každém okamžiku zachovává a je dána součtem energie $W_e = \frac{q^2}{2C}$ a $W_m = \frac{Li^2}{2}$. Platí $\frac{dW}{dt} = 0$, tedy

$$\frac{d}{dt} \left(\frac{q^2}{2C} + \frac{Li^2}{2} \right) = \frac{q}{C} \frac{dq}{dt} + Li \frac{di}{dt} = 0 \quad (\text{D3.1})$$

Dosadíme-li do vztahu (D3.1) $i = \frac{dq}{dt}$, dostaneme po úpravě diferenciální rovnici analogickou pohybové rovnici pro netlumený harmonický oscilátor:

$$\frac{d^2q}{dt^2} + \frac{1}{LC} q = 0 \quad (\text{D3.2})$$

ve které na místě okamžité výchylky mechanického oscilátoru stojí okamžitá hodnota náboje kondenzátoru.

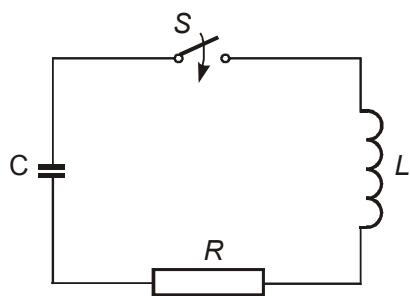
Řešení rovnice (D3.2) je ve tvaru harmonické funkce, která vyhovuje počáteční podmínce ($q(0) = Q$)

$$q = Q \cos \frac{1}{\sqrt{LC}} t = Q \cos \omega t \quad (\text{D3.3})$$

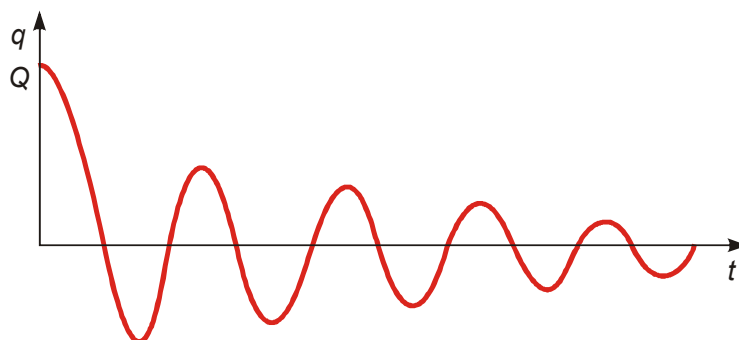
- Náboj na kondenzátoru v LC obvodu se v čase harmonicky mění s úhlovou frekvencí $\omega = \frac{1}{\sqrt{LC}}$.
- Proud tekoucí obvodem se rovněž v čase harmonicky mění podle průběhu funkce $i(t) = \frac{dq}{dt} = -\omega Q \sin \omega t$. V čase, kdy je náboj na kondenzátoru maximální, je proud nulový.
- Energie elektrického pole $W_e = \frac{q^2}{2C} = \frac{Q^2}{2C} \cos^2 \omega t$ má stejnou maximální hodnotu jako energie magnetického pole $W_m = \frac{Li^2}{2} = \frac{Q^2}{2C} \sin^2 \omega t$. Maximální hodnota energie elektrického pole však nastává v okamžiku, kdy energie magnetického pole je nulová a naopak. Časový průběh změn obou energií je na obr. D3.2 (srovnejte s průběhem kinetické a potenciální energie mechanického nethlumeného oscilátoru).

Tlumené kmity v obvodu RLC

Na rozdíl od předchozího obvodu budeme nyní uvažovat elektrický odpor R , který je na obr. D3.3 v sérii s kapacitou C a vlastní indukčností L .



Obr. D3.3 Obvod RLC



Obr. D3.4 Časový průběh náboje na kondenzátoru v RLC obvodu

V čase $t = 0$ s je kondenzátor o kapacitě C nabit počátečním nábojem Q . Po sepnutí spínače se náboj kondenzátoru bude s časem měnit, obvodem poteče proud $i(t)$. Průběh časové změny náboje $q(t)$ nalezneme, vyřešíme-li diferenciální rovnici sestavenou podle II. Kirchhoffova zákona

$$L \frac{di}{dt} + Ri + \frac{q}{C} = 0 \quad (\text{D3.4})$$

Dosadíme-li $i = \frac{dq}{dt}$, dostaneme po úpravě

$$\frac{d^2 q}{dt^2} + \frac{R}{L} \frac{dq}{dt} + \frac{1}{LC} q = 0 \quad (\text{D3.5})$$

Diferenciální rovnice (D3.5) je obdobou pohybové rovnice pro tlumený mechanický oscilátor (FI.). Porovnáním těchto rovnic zjistíme, že na místě výchylky x oscilátoru je v (D3.5) náboj kondenzátoru, kruhová frekvence netlumených kmitů je $\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}$ a $2b = \frac{R}{L}$, kde b je koeficient útlumu. Obdobně jako u harmonického oscilátoru dochází ke tlumeným harmonickým kmitům v obvodu RLC tehdy, je-li tlumení malé. Pro tento případ platí

$$\frac{R}{2L} < \frac{1}{\sqrt{LC}} \quad 1 < \frac{2}{R} \sqrt{\frac{L}{C}} \quad (\text{D3.6})$$

Výraz $\frac{1}{R} \sqrt{\frac{L}{C}}$ se označuje jako **činitel jakosti** obvodu RLC . Platí-li podmínka (D3.6), je průběh náboje na kondenzátoru popsán harmonickou funkcí s exponenciálně klesající amplitudou (obr. D3.4). Není-li splněna podmínka (D3.6), obvod se chová jako harmonický oscilátor při aperiodickém pohybu, tj. náboj kondenzátoru po sepnutí spínače monotónně klesá.

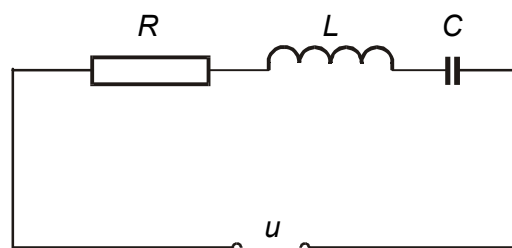
Vynucené kmity v obvodu RLC

Vyšetříme nyní vlastnosti sériového rezonančního obvodu RLC , který připojíme ke zdroji střídavého harmonického napětí, na jehož svorkách se napětí mění podle funkce

$$u = U_m \cos \omega t \quad (\text{D3.7})$$

Zapišeme II. Kirchhoffův zákon pro napětí v obvodu (obr. D3.5)

$$L \frac{di}{dt} + Ri + \frac{q}{C} = u \quad (\text{D3.8})$$



Obr. D3.5 Sériový RLC obvod

Dosadíme $q = \int i dt$ a derivujeme podle času. Dostaneme nehomogenní diferenciální rovnici 2. řádu:

$$L \frac{d^2 i}{dt^2} + R \frac{di}{dt} + \frac{1}{C} i = \frac{du}{dt} \quad (\text{D3.9})$$

Obecné řešení této rovnice $i(t)$ můžeme vyjádřit jako součet řešení příslušné homogenní rovnice $i_h(t)$ a partikulárního řešení celé rovnice $i_p(t)$.

$$i(t) = i_h(t) + i_p(t) \quad (\text{D3.10})$$

Průběh homogenního řešení jsme diskutovali u tlumených kmitů v RLC obvodu. Jeho amplituda s časem exponenciálně klesá a po určité době vymizí. Obvodem potom prochází pouze **ustálený proud** harmonicky proměnný s frekvencí danou frekvencí zdroje. Amplitudu ustáleného proudu a fázové posunutí proudu a napětí jsme v odd. 4.6.7 odvodili užitím komplexní symboliky. Kmity v obvodu RLC mají charakter vynucených kmitů, které u mechanického

oscilátoru budí harmonicky proměnná síla. V sériovém RLC obvodu obdobně jako u mechanického oscilátoru může dojít k **rezonanci**, která se projeví tehdy, je-li kruhová frekvence vlastních kmitů v obvodu $\omega_0 = \frac{1}{\sqrt{LC}}$ rovna úhlové frekvenci ω zdroje elektromotorického

napětí. Při této frekvenci má amplituda proudu maximálně možnou hodnotu $I_r = \frac{U_m}{R}$.

D4. Převod spektrálních intenzit vyzařování M_λ a M_ν

Spektrální intenzita vyzařování může být vztažena na interval frekvence záření $d\nu$ (vztah (4.7a))

$$M_\nu = \frac{2\pi h\nu^3}{c^2 \left(e^{h\nu/kT} - 1 \right)} \quad (\text{D4.1})$$

nebo může být vztažena na interval vlnových délek záření $d\lambda$ (vztah (4.7b)).

$$M_\lambda = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 \left(e^{hc/\lambda kT} - 1 \right)} \quad (\text{D4.2})$$

Při převodu vztahu (D4.1) na (D4.2) vycházíme z požadavku

$$|M_\nu d\nu| = |M_\lambda d\lambda| \quad (\text{D4.3})$$

Odtud

$$M_\lambda = M_\nu(\lambda) \left| \frac{d\nu(\lambda)}{d\lambda} \right| \quad (\text{D4.4})$$

kde $M_\nu(\lambda)$ je spektrální intenzita vyzařování (D4.1) vyjádřená ve vlnových délkách. Přitom jsme použili vztah $\nu = \frac{c}{\lambda}$. Postupnými úpravami dostaneme

$$M_\lambda = \frac{2\pi h \left(\frac{c}{\lambda} \right)^3}{c^2 \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)} \left| \frac{d}{d\lambda} \left(\frac{c}{\lambda} \right) \right| = \frac{2\pi hc^3}{\lambda^3 c^2 \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)} \cdot \frac{c}{\lambda^2}$$

$$M_\lambda = \frac{2\pi hc^2}{\lambda^5 \left(e^{\frac{hc}{\lambda kT}} - 1 \right)}$$

Obdrželi jsme žádaný vztah (D4.2) a (4.7b).

D5. Důsledky Planckova zákona

Odvození Stefanova-Boltzmannova zákona z Planckova zákona

Vyjdeme z vyjádření spektrální intenzity vyzařování (4.7a). Tento vztah budeme integrovat přes celý obor frekvencí

$$\int_0^{\infty} M_{\nu} d\nu = \frac{2\pi h}{c^2} \int_0^{\infty} \frac{\nu^3}{e^{\frac{h\nu}{kT}} - 1} d\nu$$

Provedeme substituci

$$x = \frac{h\nu}{kT}, \quad \nu = \frac{kT}{h} x, \quad d\nu = \frac{kT}{h} dx$$

$$\int_0^{\infty} M_{\nu} d\nu = \frac{2\pi h}{c^2} \int_0^{\infty} \frac{k^3 T^3 x^3}{h^3 (e^x - 1)} \frac{kT}{h} dx = \frac{2\pi k^4 T^4}{h^3 c^2} \int_0^{\infty} \frac{x^3}{e^x - 1} dx$$

Poslední integrál je roven $\frac{\pi^4}{15}$. Pro celkovou intenzitu vyzařování M pak dostáváme

$$M = \int_0^{\infty} M_{\nu} d\nu = \frac{2}{15} \frac{\pi^5 k^4}{c^2 h^3} T^4$$

Vyčíslením koeficientu před T^4 se můžeme přesvědčit, že odpovídá hodnotě Stefanovy-Boltzmannovy konstanty uvedené v odd. 4.1.

D6. Odvození Comptonova vztahu

Vyjdeme ze vztahů (4.23) a (4.24), které vyjadřují zákony zachování energie a hybnosti při srážce fotonu a volného elektronu.

$$h\nu + m_e c^2 = h\nu' + \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2} \quad (\text{D6.1})$$

$$\vec{p} = \vec{p}' + \vec{p}_e \quad (\text{D6.2})$$

Vektorový vztah (4.24) pro hybnosti \vec{p} a \vec{p}' fotonu před a po srážce a hybnosti elektronu po srážce \vec{p}_e je znázorněn na obr. D6.1.

Rovnici (D6.2) upravíme a umocníme

$$\vec{p} - \vec{p}' = \vec{p}_e$$

$$(\vec{p} - \vec{p}')^2 = \vec{p}_e^2$$

$$\vec{p} \cdot \vec{p} - 2 \vec{p} \cdot \vec{p}' + \vec{p}' \cdot \vec{p}' = \vec{p}_e^2$$

$$p^2 - 2 p p' \cos \vartheta + p'^2 = p_e^2$$

kde ϑ je úhel rozptylu fotonu (obr. 4.14b a D6.1).

Vynásobíme celou rovnici c^2 a použijeme $pc = h\nu$, $p'c = h\nu'$:

$$(pc)^2 - 2 (pc)(p'c) \cos \vartheta + (p'c)^2 = (p_e c)^2$$

$$(h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2 h^2 \nu \nu' \cos \vartheta = (p_e c)^2 \quad (\text{D6.3})$$

Nyní upravujeme postupně rovnici (D6.1):

$$h\nu - h\nu' + m_e c^2 = \sqrt{(m_e c^2)^2 + (p_e c)^2}$$

$$(h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2 h^2 \nu \nu' + 2 m_e c^2 (h\nu - h\nu') = (p_e c)^2 \quad (\text{D6.4})$$

Porovnáním pravých stran (D6.3) a (D6.4) dostáváme

$$(h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2 h^2 \nu \nu' + 2 m_e c^2 (h\nu - h\nu') = (h\nu)^2 + (h\nu')^2 - 2 h^2 \nu \nu' \cos \vartheta$$

Rovnici upravíme a vydělíme výrazem $2 c m_e h \nu \nu'$.

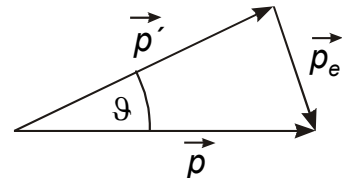
$$2 m_e c^2 (h\nu - h\nu') = 2 h^2 \nu \nu' (1 - \cos \vartheta)$$

$$\frac{c}{\nu'} - \frac{c}{\nu} = \frac{h}{m_e c} (1 - \cos \vartheta)$$

Použijeme $\frac{c}{\nu'} = \lambda'$, $\frac{c}{\nu} = \lambda$

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

což je vztah popisující Comptonův jev.



Obr. D6.1 Hybnosti fotonu a elektronu při Comptonově jevu

D7. Superpozice vlnění. Vlnový balík.

Ve FI jsme popisovali vlnění šířící se podél osy x vlnovými funkcemi

$$u = A \cos \omega \left(t - \frac{x}{v} \right) = A \cos 2\pi \left(f t - \frac{x}{\lambda} \right) \quad (\text{D7.1})$$

$$u = A \cos (\omega t - k x) \quad (\text{D7.2})$$

kde A je amplituda vlnění, ω je úhlová frekvence, t je čas, v je rychlost šíření vlnění (fázová rychlost) a k je vlnové číslo, $k = \frac{2\pi}{\lambda}$.

Uvažme dvě vlnění šířící se podél osy x , která mají stejnou amplitudu A , málo odlišné úhlové frekvence ω , $\omega + \Delta\omega$ a málo odlišná vlnová čísla k , $k + \Delta k$.

$$u_1 = A \cos (\omega t - k x)$$

$$u_2 = A \cos ((\omega + \Delta\omega)t - (k + \Delta k)x)$$

Platí

$$\Delta\omega \ll \omega, \Delta k \ll k \quad (\text{D7.3})$$

Superpozicí těchto vlnění dostaneme

$$u = u_1 + u_2 = A \cos (\omega t - k x) + A \cos ((\omega + \Delta\omega)t - (k + \Delta k)x) \quad (\text{D7.4})$$

Použitím trigonometrických vztahů $\cos \alpha + \cos \beta = 2 \cos \frac{\alpha - \beta}{2} \cos \frac{\alpha + \beta}{2}$ dostaneme

$$u = 2 A \cos \left(\frac{\Delta\omega}{2} t - \frac{\Delta k}{2} x \right) \cos \left(\frac{2\omega + \Delta\omega}{2} t - \frac{2k + \Delta k}{2} x \right) \quad (\text{D7.5})$$

Za použití vztahů (D7.3) přechází (D7.5) v

$$u = 2 A \cos \left(\frac{\Delta\omega}{2} t - \frac{\Delta k}{2} x \right) \cos(\omega t - k x) \quad (\text{D7.6})$$

Tato rovnice představuje vlnění postupující podél osy x , jehož amplituda A' se periodicky mění s časem a polohou (obr. D7.1)

$$A' = 2 A \cos \left(\frac{\Delta\omega}{2} t - \frac{\Delta k}{2} x \right) \quad (\text{D7.7})$$

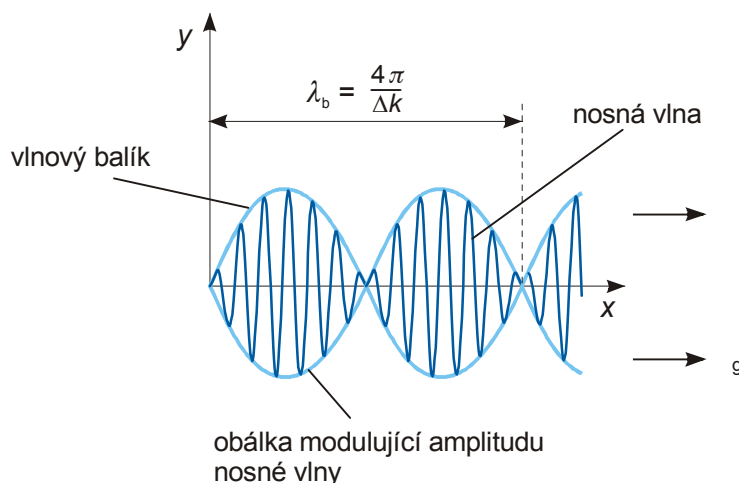
Maximální amplituda se tak šíří jako vlnění s vlnovým číslem

$$k_b = \frac{\Delta k}{2} \quad (\text{D7.8})$$

a úhlovou frekvencí

$$\omega_b = \frac{\Delta\omega}{2} \quad (\text{D7.9})$$

Výsledné vlnění se tedy šíří prostorem tak, že amplituda se periodicky mění, a hovoříme o **rázech**.



Obr. D7.1 Superpozice dvou vlnění stejných amplitud a blízkých frekvencí

Rychlost, kterou se šíří nosné vlnění (obr. D7.1), se nazývá **vlnová** nebo **fázová rychlost**. Můžeme ji vyjádřit pomocí vlnové délky λ a frekvence ν nebo úhlové frekvence ω a vlnového čísla k

$$v = \lambda \nu = \frac{\omega}{k} \quad (\text{D7.10})$$

Rychlost, kterou se šíří obálka modulující amplitudu, čili vlnový balík, se nazývá **grupová rychlost** v_g . K jejímu určení použijeme poslední vztah (D7.10), do kterého za vlnové číslo a úhlovou frekvenci dosadíme hodnoty pro šíření maxima amplitudy dané vztahy (D7.8) a (D7.9)

$$v_g = \frac{\omega_b}{k_b} = \frac{\Delta \omega}{\Delta k} \quad (\text{D7.11})$$

Poznamenejme, že energie již není rozložena v prostoru se stejnou hustotou. V oblastech maxima amplitudy je větší hustota energie, energie je tedy v prostoru lokalizována. Jestliže bychom zobecnili proces superpozice z případu dvou vlnění blízkých vlnových čísel na superpozici vlnění spojitého intervalu vlnových čísel Δk , obdržíme vlnový balík popsany na obr. 4.20. Grupovou rychlost vlnového balíku dostane zobecněním vztahu (D7.11)

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} \quad (\text{D7.12})$$

Prostorová lokalizace vlnového balíku Δx (obr. 4.20) je určena poloviční vlnovou délkou $\frac{\lambda_b}{2}$ vlnění (D7.7), které popisuje časovou a prostorovou změnu amplitudy. Porovnáním (D7.7) a (D7.1) dostáváme

$$\begin{aligned} \lambda_b &= \frac{2\pi}{k_b} = \frac{4\pi}{\Delta k} \\ \Delta x &= \frac{\lambda_b}{2} = \frac{2\pi}{\Delta k} \end{aligned} \quad (\text{D7.13})$$

D8. Popis vlnění

Kromě harmonických funkcí \cos a \sin můžeme k popisu vlnění s výhodou použít komplexního vyjádření. Uvažujeme komplexní funkci

$$\Psi(x, t) = A e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{D8.1})$$

kde x je souřadnice a t je čas. Funkce k ní komplexně sdružená má tvar

$$\Psi^*(x, t) = A^* e^{-i(kx - \omega t)} \quad (\text{D8.2})$$

Čtverec absolutní hodnoty je

$$|\Psi|^2 = \Psi^* \Psi = A^* A e^0 = |A|^2$$

A představuje modul komplexního čísla čili amplitudu vlnění.

Upravíme (D8.1) tak, že komplexní funkci v exponenciálním tvaru převedeme na tvar goniometrický

$$\Psi(x, t) = A (\cos(kx - \omega t) + i \sin(kx - \omega t)) \quad (\text{D8.3})$$

Reálná část posledního vztahu představuje námi dříve používanou vlnovou funkci rovinné vlny (D8.2), kde k je vlnové číslo a ω je úhlová frekvence.

Derivujeme $\Psi(x, t)$ dvakrát podle souřadnice x a podle času t :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = -k^2 A e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{D8.4})$$

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} = -\omega^2 A e^{i(kx - \omega t)} \quad (\text{D8.5})$$

Vztahy (D8.4) a (D8.5) dosadíme do vlnové rovnice (F1.):

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2}$$

$$-k^2 A e^{i(kx - \omega t)} = \frac{1}{v^2} (-\omega^2) A e^{i(kx - \omega t)}$$

$$\left(\frac{2\pi}{\lambda}\right)^2 = \frac{1}{v^2} \left(\frac{2\pi}{T}\right)^2$$

Uvědomíme-li si platnost vztahu $\lambda = vT$, vidíme, že funkce (D8.1) splňuje vlnovou rovnici.

Funkce $A e^{i(kx - \omega t)}$ popisuje rovinnou vlnu šířící se v kladném směru osy x , funkce $A e^{i(kx + \omega t)}$ je vlnová funkce vlny, která se šíří v záporném směru osy x .

D9. Sférické souřadnice

Poloha bodu je dána ve sférických souřadnicích trojicí souřadnic r , ϑ a φ (obr. D9.1). Převod ze sférických na kartézské souřadnice je dán vztahy

$$x = r \sin \vartheta \cos \varphi \quad \vartheta \in \langle 0, \pi \rangle, \quad \varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle \quad (\text{D9.1})$$

$$y = r \sin \vartheta \sin \varphi$$

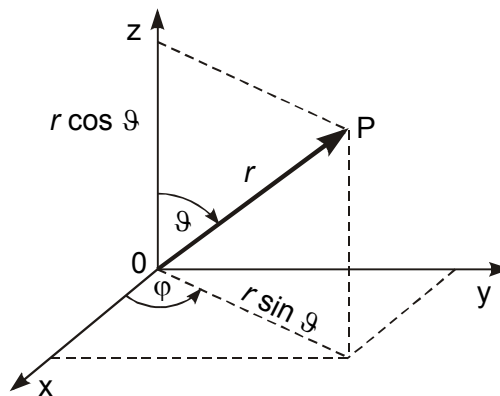
$$z = r \cos \vartheta$$

Převod z kartézských souřadnic na sférické je dán vztahy

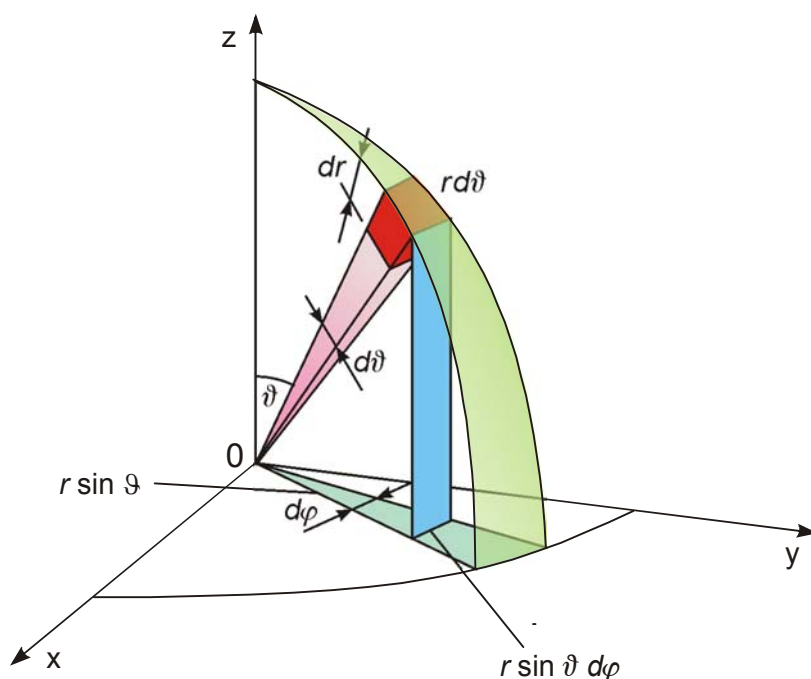
$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}} \quad (\text{D9.2})$$

$$\vartheta = \arccos \frac{z}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\varphi = \arctg \frac{y}{x}$$



Obr. D9.1 Sférické souřadnice



Obr. D9.2 Prostorový element ve sférických souřadnicích

Objemový element

Objem prostorového elementu vyjádříme ve sférických souřadnicích pomocí obr. D9.2 jako objem hranolu o stranách dr , $r d\vartheta$, $r \sin \vartheta d\varphi$:

$$dV = r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi \quad (\text{D9.3})$$

Laplaceův operátor

Uvažme skalární funkci $\psi = \psi(x, y, z) = \psi(r, \vartheta, \varphi)$. Laplaceův operátor je definován vztahem

$$\Delta\psi = \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial z^2} \quad (\text{D9.4})$$

Vyjádříme tento operátor na základě proměnných r, ϑ, φ . Jednotlivé derivace získáme jako derivace složené funkce. Např.

$$\frac{\partial\psi}{\partial x} = \frac{\partial\psi}{\partial r} \frac{\partial r}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial \vartheta} \frac{\partial \vartheta}{\partial x} + \frac{\partial\psi}{\partial \varphi} \frac{\partial \varphi}{\partial x}$$

Přitom derivace $\frac{\partial r}{\partial x}, \frac{\partial r}{\partial y}, \dots, \frac{\partial \varphi}{\partial z}$ získáme derivováním vztahů (D9.2), např.

$$\frac{\partial r}{\partial x} = \frac{1}{2} \frac{2x}{(x^2 + y^2 + z^2)^{\frac{1}{2}}} = \frac{x}{r} = \sin \vartheta \cos \varphi$$

Provedeme-li všechny potřebné derivace a dosadíme do (D9.4), obdržíme vyjádření Laplaceova operátoru ve sférických souřadnicích.

$$\Delta\psi = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial\psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin \vartheta \frac{\partial\psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2\psi}{\partial \varphi^2} \quad (\text{D9.5})$$

D10. Vlnové funkce atomů vodíkového typu

V tomto dodatku je řešena SCHR pro elektron v centrálním poli za předpokladu, že řešení je sféricky symetrické. Budou nalezena řešení pro stavy s nejnižší energií. Řešení $\psi(r)$, které je sféricky symetrické, nezávisí na proměnných ϑ a φ , je funkcí pouze r . Laplaceův operátor (D9.5) má jednoduchý tvar

$$\Delta\psi = \frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} \quad (\text{D10.1})$$

Potenciální energie elektronu v coulombickém poli bodového jádra je

$$E_p = -\frac{C}{r} \quad (\text{D10.2})$$

kde kladná konstanta $C = Ze^2/4\pi\epsilon_0$, Z je počet protonů v jádře. SCHR má tvar

$$\frac{d^2\psi}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{d\psi}{dr} + \frac{2m_e E}{\hbar^2} \psi + \frac{2m_e C}{\hbar^2} \frac{1}{r} \psi = 0 \quad (\text{D10.3})$$

Hledáme řešení ve tvaru $\psi = Ae^{-\gamma r}$, $\gamma > 0$. Řešení s kladným exponentem neuvažujeme, protože v tomto případě by $\psi(\infty) \rightarrow \infty$. Derivujeme řešení (D10.3)

$$\frac{d\psi}{dr} = -\gamma Ae^{-\gamma r}, \quad \frac{d^2\psi}{dr^2} = \gamma^2 Ae^{-\gamma r}$$

Dosadíme do (D10.3) a vydělíme $Ae^{-\gamma r}$

$$\left(\gamma^2 + \frac{2m_e E}{\hbar^2}\right) + \left(-2\gamma + \frac{2m_e C}{\hbar^2}\right) \frac{1}{r} = 0$$

Aby tato rovnice byla splněna pro každé r , musí být obě závorky rovny nule:

$$\gamma = \frac{m_e C}{\hbar^2} \quad (\text{D10.4})$$

$$E = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \gamma^2 = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{m_e C}{\hbar^2}\right)^2 = -\frac{m_e C^2}{2\hbar^2} \quad (\text{D10.5})$$

Získané řešení je řešením s nejmenší hodnotou energie. Popisuje tedy základní stav částice v centrálním coulombickém poli:

$$\psi_1 = A e^{-\frac{m_e C}{\hbar^2} r}, \quad E_1 = -\frac{m_e C^2}{2\hbar^2} \quad (\text{D10.6})$$

Vyjádříme konstanty C a γ pomocí Bohrova poloměru a_0 (6.10)

$$C = \left(\frac{\hbar^2}{m_e a_0}\right) Z, \quad \gamma = \frac{m_e C}{\hbar^2} = \frac{Z}{a_0}$$

Dostáváme vztah (6.28) pro energii základního stavu uvedený v odd. 6.2.1:

$$E_1 = -\frac{m_e C^2}{2\hbar^2} = -\frac{m_e}{2\hbar^2} \frac{Z^2 e^4}{(4\pi\epsilon_0)^2} = -Z^2 E_0 \quad (\text{D10.7})$$

Vyjádříme rovněž vlnovou funkci (D10.6) základního stavu pomocí a_0 :

$$\psi_1 = A e^{-Zr/a_0} \quad (\text{D10.8a})$$

Toto řešení je zároveň řešením rovnice (6.24) pro radiální část vlnové funkce, jestliže $n = 1$ a $\ell = 0$.

$$\psi_1(r) = R_{1,0}(r) = A e^{-Zr/a_0} \quad (\text{D10.8b})$$

Jestliže bychom hledali řešení ve tvaru $\psi = A(1 - \gamma r)e^{-\gamma r}$, získali bychom řešení stavu s energií E_2 .

$$\psi_2(r) = A \left(1 - \frac{Zr}{2a_0}\right) e^{-Zr/2a_0}$$

Obecná sféricky symetrická řešení mají tvar

$$R_{n,\ell}(r) = C e^{-Zr/na_0} \left(\frac{Zr}{a_0}\right)^\ell G_{n,\ell}\left(\frac{Zr}{a_0}\right) \quad (\text{D10.9})$$

kde $G_{n,\ell}(Zr/a_0)$ jsou přidružené Laguerrovy polynomy, jejichž tvar můžeme najít v učebnicích kvantové mechaniky.

V tabulce D10.1 jsou uvedeny tvary radiální a úhlové části vlnové funkce pro několik nejnížších stavů.

Tab. D10.1 Vlnové funkce atomu vodíku v jedoelektronovém přiblížení v centrálním poli

n	ℓ	m_ℓ	$R(r)$	$\Theta(\vartheta)$	$\Phi(\varphi)$
1	0	0	$\frac{2}{\sqrt{a_0^3}} e^{-\frac{r}{a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2a_0^3}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	0	$\frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{2}} \cos \vartheta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}}$
2	1	± 1	$\frac{1}{\sqrt{24a_0^3}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}}$	$\sqrt{\frac{3}{4}} \sin \vartheta$	$\frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i\varphi}$

Radiální hustota pravděpodobnosti

Podle (5.6) vyjádříme pravděpodobnost $dP(r, r+dr)$ výskytu elektronu v kulové slupce o poloměru r a o tloušťce dr (obr. 6.8). Postupně dostáváme

$$dP(r, r+dr) = \int_{\text{kul. slupka}} \psi^* \psi dV = \int_{\text{kul. plocha}} \psi^* \psi dr dS = \iint_{\varphi, \vartheta} |R|^2 |\Theta|^2 |\Phi|^2 dr r^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

$$dP(r, r+dr) = |R|^2 r^2 dr \iint_{\varphi, \vartheta} |\Theta|^2 |\Phi|^2 \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$$

Integrál v posledním výrazu je v případě normovaných funkcí Θ a Φ (tab. D10.1) roven 1. Pro pravděpodobnost výskytu elektronu v kulové slupce se středem v jádře atomu, která má poloměr r a tloušťku dr , tak dostáváme

$$dP(r, r+dr) = |R|^2 r^2 dr$$

Výraz $|R|^2 r^2$ nazveme **radiální hustotou pravděpodobnosti**.

D11. Moment hybnosti v kvantovém řešení vodíkového atomu

V tomto dodatku ukážeme, že vlnové funkce popisující stacionární stavy atomů podobných vodíku jsou zároveň vlastními funkcemi operátoru kvadrátu momentu hybnosti a jeho jedné, např. z-ové složky.

Moment hybnosti vzhledem ke středu kružnicové trajektorie podle (FI), je dán vztahem

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} \quad (\text{D11.1})$$

Vyjádření příslušného operátoru této veličiny získáme pomocí operátoru hybnosti \hat{p} (5.21)

$$\hat{L}_x = y \hat{p}_z - z \hat{p}_y = -i\hbar \left(y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) = i\hbar \left(\sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right) \quad (\text{D11.2})$$

$$\hat{L}_y = z \hat{p}_x - x \hat{p}_z = -i\hbar \left(z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) = i\hbar \left(-\cos\varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot\vartheta \sin\varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right)$$

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = -i\hbar \left(x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$$

Přitom jsme převedli operátory derivací podle kartézských souřadnic na derivace podle sférických souřadnic (Dodatek D10).

Operátor čtverce velikosti momentu hybnosti \hat{L}^2 získáme:

$$\hat{L}^2 = \hat{L}_x^2 + \hat{L}_y^2 + \hat{L}_z^2 = -\frac{\hbar^2}{\sin\vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left(\sin\vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) - \frac{\hbar^2}{\sin^2\vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \quad (\text{D11.3})$$

Aplikujme nyní operátor z-ové složky momentu hybnosti \hat{L}_z na stacionární vlnovou funkci vodíkového atomu, která je vyjádřena pomocí součinu (6.21). Jestliže jsou stacionární stavy zároveň vlastními stavy operátoru \hat{L}_z , musí existovat řešení vlastní rovnice (5.8). Přitom konstantu na pravé straně, která je vlastním číslem operátoru, jsme si zvolili ve vhodném tvaru:

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} (R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)) = \hbar m_\ell (R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)) \quad (\text{D11.4})$$

Operátor na levé straně rovnice působí pouze na proměnnou φ , můžeme tedy celou rovnici vydělit součinem $R(r)\Theta(\vartheta)$ a dostáváme

$$\frac{d\Phi}{d\varphi} = i m_\ell \Phi$$

Tato rovnice má řešení $\Phi(\varphi) = A e^{im_\ell \varphi}$, které je identické s řešením (6.25). Jestliže na toto řešení aplikujeme požadavek jednoznačnosti, dostáváme omezení na možné hodnoty $|m_\ell| = 0, 1, 2, \dots$. Stacionární stavy jsou tedy také vlastními stavy operátoru \hat{L}_z s vlastními čísly $m_\ell \hbar$. Ve stacionárním stavu s kvantovými čísly n, ℓ a m_ℓ může z-ová složka momentu hybnosti nabývat hodnot

$$L_z = m_\ell \hbar, \quad m_\ell = -\ell, -\ell+1, \dots, 0, \dots, \ell-1, \ell \quad (\text{D11.5})$$

Kvantové číslo m_ℓ určuje z-ovou složku momentu hybnosti.

Obdobným postupem bychom ukázali, že operátor \hat{L}^2 splňuje vlastní rovnici

$$\hat{L}^2 (R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)) = \hbar^2 \ell(\ell+1) (R(r) \Theta(\vartheta) \Phi(\varphi)) \quad (\text{D11.6})$$

kde ℓ splňuje podmínky (6.29) vyjádřené v odd. 6.2.1. Ve stavu s kvantovými čísly n, ℓ a m_ℓ může čtverec momentu hybnosti nabývat hodnot

$$L^2 = \hbar^2 \ell(\ell+1) \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad (\text{D11.7})$$

a velikost momentu hybnosti

$$L = \hbar \sqrt{\ell(\ell+1)} \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1 \quad (\text{D11.8})$$

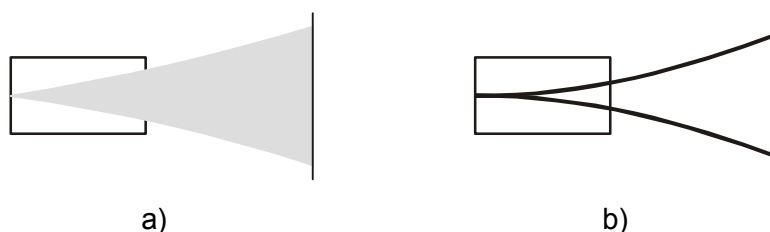
Kvantové číslo ℓ určuje velikost momentu hybnosti.

D12. Sternův-Gerlachův experiment

Prostorové kvantování bylo vyjádřeno vztahy (D11.5) a (D11.8) a znázorněno na obr. 6.11 pro orbitální moment hybnosti a na obr. 6.14 pro spin elektronu. Experimentálně bylo potvrzeno Sternovým-Gerlachovým experimentem, ve kterém byl svazek atomů veden nehomogenním magnetickým polem. V původním pokuse se jednalo o atomy stříbra, jev je však pozorovatelný také např. pro svazek atomů vodíku, který budeme v dalším vysvětlení uvažovat.

Podstata pozorovaného děje je následující. Elektron ve vodíku představuje nabitou částici, která má moment hybnosti a s ním spojený magnetický moment. Představuje tak magnetický dipól. V nehomogenním magnetickém poli je pohybující se magnetický dipól vychýlen podle vzájemné okamžité orientace dipólu a magnetické indukce pole. Jestliže by dipól mohl zaujímat libovolnou polohu vzhledem k magnetickému poli, pozorovali bychom po průchodu nehomogenním polem spojitou stopu vychýlených atomů (obr. D12.1a). Ve skutečnosti se pozorují v případě vodíku ve stavu $1s$ ($n = 1$, $\ell = 0$, $m_\ell = 0$) dvě oddělené stopy (obr. D12.1b). Toto pozorování je v souladu se dvěma možnými orientacemi spinového magnetického momentu elektronu (odd. 6.2.5).

V případě elektronů ve stavech s nenulovou hodnotou magnetického kvantového čísla m_ℓ existuje po vložení do magnetického pole navíc $(2\ell + 1)$ možných orientací orbitálního magnetického momentu a po průchodu nehomogenním magnetickým polem se pozoruje větší počet stop vychýlených atomů. Jestliže výsledný spinový magnetický moment částice je nenulový, uplatňuje se orientace obou magnetických momentů – orbitálního i spinového.



Obr. D12.1 Schéma pozorování ve Sternově-Gerlachově pokusu, (a) klasicky očekávaný výsledek, (b) pozorovaná lokalizace atomů po průchodu nehomogenním polem

D13. Veličiny a jednotky, některé fyzikální konstanty

V následujících tabulkách je sepsán stručný přehled fyzikálních veličin a jejich jednotek a to v pořadí, v jakém byly postupně uváděny v textu skript. Pro snadnou orientaci je přehled doplněn odkazy na čísla vztahů, kterými byly veličiny v textu definovány. Na závěr jsou uvedeny zaokrouhlené hodnoty vybraných fyzikálních konstant.

TABULKA D14.1 Veličiny a jednotky

Veličina	Značka	Definiční vztah	Název jednotky	Značka
elektrický náboj	Q, q	$Q = \int i \, dt$	coulomb	C
objemová hustota náboje	ρ	$\rho = \frac{dQ}{dV}$	coulomb na krychlový metr	C m ⁻³
plošná hustota náboje	σ	$\sigma = \frac{dQ}{dS}$	coulomb na čtverečný metr	C m ⁻²
délková hustota náboje	λ	$\lambda = \frac{dQ}{d\ell}$	coulomb na metr	C m ⁻¹
intenzita elektrického pole	\vec{E}	$\vec{E} = \frac{\vec{F}}{Q}$	newton na coulomb volt na metr	N C ⁻¹ V m ⁻¹
tok intenzity \vec{E}	Ψ	$\Psi = \int_S \vec{E} \cdot d\vec{S}$	volt metr	V m
elektrický potenciál	V	$\vec{E} = -\text{grad } V$	volt	V
napětí	U, u	$U_{AB} = \int_A^B \vec{E} \cdot d\vec{r}$	volt	V
elektrický dipólový moment	\vec{p}	$\vec{p} = Q\vec{\ell}$	coulombmetr	C m
polarizace	\vec{P}	$\vec{P} = \frac{d\vec{p}}{dV}$	coulomb na čtverečný metr	C m ⁻²
permitivita	ε	$\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$	farad na metr	F m ⁻¹
relativní permitivita	ε_r	$\varepsilon_r = \frac{\varepsilon}{\varepsilon_0}$	jedna	1
elektrická susceptibilita	χ_e	$\chi_e = \varepsilon_r - 1$	jedna	1
elektrická indukce	\vec{D}	$\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$	coulomb na čtverečný metr	C m ⁻²
kapacita	C	$C = \frac{Q}{U}$	farad	F
elektrický proud	i, I	$i = \frac{dQ}{dt}$	ampér	A

Veličina	Značka	Definiční vztah	Název jednotky	Značka
proudová hustota	\vec{J}	$i = \int_S \vec{J} \cdot d\vec{S}$	ampér na čtverečný metr	A m ⁻²
měrná elektrická vodivost	σ	$\vec{J} = \sigma \vec{E}$	siemens na metr	S m ⁻¹
měrný elektrický odpor	ρ	$\rho = \frac{1}{\sigma}$	ohmmetr	Ω m
elektrický odpor	R	$R = \frac{U}{I}$	ohm	Ω
elektrická vodivost	G	$G = \frac{1}{R}$	siemens	S
elektromotorické napětí	\mathcal{E}	$\mathcal{E} = \int_{-}^{+} \vec{E}^{vt} \cdot d\vec{r}$	volt	V
magnetická indukce	\vec{B}	$\vec{F}_m = Q \vec{v} \times \vec{B}$	tesla	T
magnetický moment	\vec{m}	$\vec{m} = Z I \vec{S}$	ampér čtverečný metr	A m ²
permeabilita	μ	$\mu = \mu_0 \mu_r$	henry na metr	H m ⁻¹
relativní permeabilita	μ_r	$\mu_r = \frac{\mu}{\mu_0}$	jedna	1
magnetický (indukční) tok	Φ	$\Phi = \int_S \vec{B} \cdot d\vec{S}$	weber	Wb
magnetizace	\vec{M}	$\vec{M} = \frac{d\vec{m}}{dV}$	ampér na metr	A m ⁻¹
magnetická susceptibilita	χ_m	$\chi_m = \mu_r - 1$	jedna	1
intenzita magnetického pole	\vec{H}	$\vec{H} = \frac{\vec{B}}{\mu_0} - \vec{M}$	ampér na metr	A m ⁻¹
indukované elektromotorické napětí	\mathcal{E}_i	$\mathcal{E}_i = -\frac{d\Phi}{dt}$	volt	V
vlastní indukčnost	L	$\Phi = L i$	henry	H
vzájemná indukčnost	M	$\Phi_{12} = M i_2$	henry	H
energie elektrického pole	W_e	$W_e = \frac{1}{2} C U^2$	joule	J
energie magnetického pole	W_m	$W_m = \frac{1}{2} L I^2$	joule	J
objemová hustota energie elektrického pole	w_e	$w_e = \frac{1}{2} E D$	joule na krychlový metr	J m ⁻³
objemová hustota energie magnetického pole	w_m	$w_m = \frac{1}{2} H B$	joule na krychlový metr	J m ⁻³
rychlost šíření elektromagnetického vlnění ve vakuu	c	$c = \frac{1}{\sqrt{\mu_0 \epsilon_0}}$	metr za sekundu	m s ⁻¹

Veličina	Značka	Definiční vztah	Název jednotky	Značka
intenzita vlnění	I	$I = \frac{dW}{dS dt}$	watt na čtverečný metr	W m^{-2}
Poytingův vektor	\vec{S}	$\vec{S} = \frac{1}{\mu} \vec{E} \times \vec{B}$	watt na čtverečný metr	W m^{-2}
objemová hustota energie elektromagnetického pole	w	$w = w_e + w_m$	joule na krychlový metr	J m^{-3}
střední hodnota střídavého proudu	I_s	$I_s = \frac{1}{T} \int_0^T i dt$	ampér	A
efektivní hodnota střídavého proudu	I_{ef}	$I_{ef} = \sqrt{\frac{1}{T} \int_0^T i^2 dt}$	ampér	A
výkon stejnosměrného proudu	P	$P = U I$	watt	W
činný výkon střídavého proudu	P	$P = U_{ef} I_{ef} \cos \varphi$	watt	W
zdánlivý výkon střídavého proudu	S	$S = U_{ef} I_{ef}$	voltampér	VA
jalový výkon střídavého proudu	P_j	$P_j = U_{ef} I_{ef} \sin \varphi$	var	var
induktivní reaktance	X_L	$X_L = \omega L$	ohm	Ω
kapacitní reaktance	X_C	$X_C = \frac{1}{\omega C}$	ohm	Ω
komplexní impedance	\hat{Z}	$\hat{Z} = \frac{\hat{U}}{\hat{I}}$	ohm	Ω
intenzita vyzařování	M	$M = e \sigma T^4$	watt na čtverečný metr	W m^{-2}
spektrální intenzita vyzařování	M_ν	$M = \int_0^\infty M_\nu d\nu$	watt na čtverečný metr a hertz	$\text{W m}^{-2} \text{Hz}^{-1}$
spektrální intenzita vyzařování	M_λ	$M = \int_0^\infty M_\lambda d\lambda$	watt na krychlový metr	W m^{-3}
spektrální hustota zářivé energie	w_ν	$w_\nu = \frac{dw}{d\nu}$	joule na krychlový metr a hertz	$\text{J m}^{-3} \text{Hz}^{-1}$
spektrální hustota zářivé energie	w_λ	$w_\lambda = \frac{dw}{d\lambda}$	joule na metr na čtvrtou	J m^{-4}
de Broglieova vlnová délka	λ	$\lambda = \frac{h}{p}$	metr	m
Bohrův magneton	μ_B	$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$	joule na tesla	J T^{-1}

stanta	Značka	Název jednotky	Hodnota
elementární náboj	e	coulomb	$e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
permitivita vakua	ε_0	farad na metr	$\varepsilon_0 = 8,854 \cdot 10^{-12} \text{ F m}^{-1}$
permeabilita vakua	μ_0	henry na metr	$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \text{ H m}^{-1}$
rychlost šíření elektromagnetického vlnění ve vakuu	c	metr za sekundu	$c = 2,999 \cdot 10^8 \text{ m s}^{-1}$
Stefanova-Boltzmannova konstanta	σ	watt na čtverečný metr a kelvin na čtvrtou	$\sigma = 5,670 \cdot 10^{-8} \text{ W m}^{-2} \text{ K}^{-4}$
Boltzmannova konstanta	k	joule na kelvin	$k = 1,381 \cdot 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$
Planckova konstanta	h	joulesekunda	$h = 6,626 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Planckova konstanta	\hbar	joulesekunda	$\hbar = \frac{h}{2\pi} = 1,055 \cdot 10^{-34} \text{ J s}$
Rydbergova konstanta	R_H	reciproký metr	$R_H = 1,097 \cdot 10^7 \text{ m}^{-1}$
klidová hmotnost elektronu	m_e	kilogram	$m_e = 9,110 \cdot 10^{-31} \text{ kg}$
klidová hmotnost protonu	m_p	kilogram	$m_p = 1,673 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
klidová hmotnost neutronu	m_n	kilogram	$m_n = 1,675 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
Bohrův poloměr	a_0	metr	$a_0 = 5,292 \cdot 10^{-11} \text{ m}$
Bohrův magneton	μ_B	joule na tesla	$\mu_B = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ J T}^{-1}$

Literatura

- J. Hofmann, M. Urbanová: Fyzika I, Vydavatelství VŠCHT, Praha 1998.
- J. Hofmann, K. Šobra: Sbírka příkladů z fyziky, Vydavatelství VŠCHT, Praha 1999.
- H. Uhrová a kol.: Laboratorní cvičení z fyziky, Ediční a audiovizuální centrum VŠCHT, Praha 1995.
- B. Sedlák, I. Štol: Elektřina a magnetismus, Akademia Praha, Vydavatelství Karolinum, Praha 1993.
- J. Formánek: Úvod do kvantové teorie, Akademia, Praha 1983.
- M. Mansfield, C. O'Sullivan: Understanding Physics, Wiley, Chichester 1998.
- W. E. Gettys, F.J. Keller, M. J. Skove: Physics, 2nd edition, McCraw-Hill, New York 1993.
- D. Halliday, R. Resnick, J. Walker: Fundamentals of Physics, 4th edition, Wiley, New York 1993.
- R. A. Serway: Physics for Scientists & Engineers, 3rd edition, Saunders College Publishing, Philadelphia 1982.
- K. K. Krane: Modern Physics, 2nd edition, Wiley, New York 1996.
- F. J. Blatt: Modern Physics, McCraw-Hill, New York 1992.
- E. E. Anderson: Modern Physics and Quantum Mechanics, W. B. Saunders Company, Philadelphia 1971.