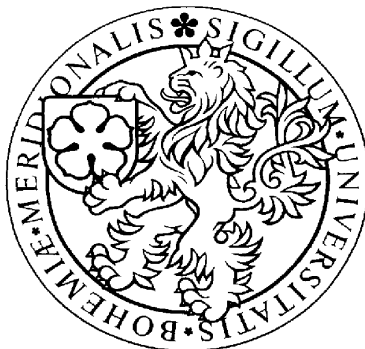


**JIHOČESKÁ UNIVERZITA
V ČESKÝCH BUDĚJOVICÍCH
Zdravotně sociální fakulta**



**VYBRANÉ KAPITOLY Z OBECNÉ A
TEORETICKÉ FYZIKY II.**

*doplňkové texty pro posluchače kombinované formy studia
studijního programu „B5345 – Specializace ve zdravotnictví“*

studijního oboru „Radiologický asistent“

Doc. RNDr. Přemysl Záškodný, CSc.

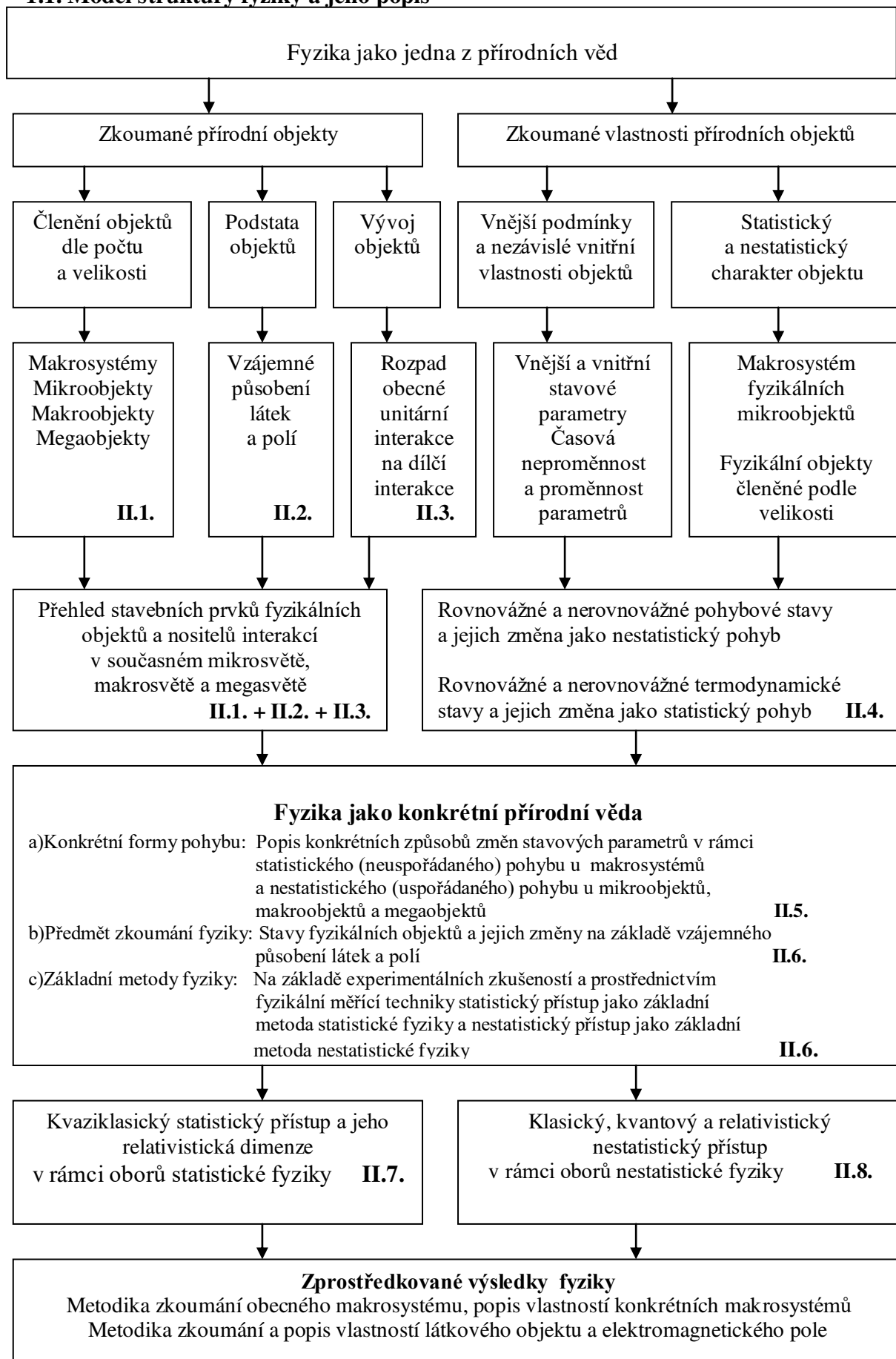
ČESKÉ BUDĚJOVICE 2007

VYBRANÉ KAPITOLY
Z OBECNÉ A TEORETICKÉ FYZIKY 2
(KVANTOVÁ A RELATIVISTICKÁ FYZIKA)

1. Struktura fyziky

Klíčová slova: Statistická a nestatistická fyzika,
Klasická dimenze,
Kvantová dimenze,
Relativistická dimenze,
Pohybová rovnice a pohybový zákon

1.1. Model struktury fyziky a jeho popis



Model na Obr.1 lze stručně popsat následujícím způsobem (v uvedené literatuře je popis proveden pomocí odstavců, které mají v Obr.1 označení II.1. až II.8.):

a) Fyzika jako jedna z přírodních věd zkoumá makrosystémy tvořené obrovským počtem objektů (většinou částic) pohybujících se neuspořádaným (statistickým) pohybem. Dále zkoumá mikroobjekty, makroobjekty a megaobjekty, které jsou buď osamocené nebo tvořeny objekty, které se pohybují uspořádaným (nestatistickým) pohybem (např. proud částic nebo vlnění). Podstatou těchto objektů je vzájemné působení látek a polí. Vývoj těchto objektů až do současnosti je spojen s postupným rozpadem obecné unitární interakce na dílčí interakce (gravitační, elektromagnetickou, silnou a slabou interakci)

b) Makrosystémy mají statistický charakter, je brána v úvahu jejich vnitřní struktura. Zkoumá je statistická fyzika, jejich stavy se nazývají stavy termodynamickými. Možným stavům je přiřazována pravděpodobnost jejich výskytu pomocí distribučních funkcí, stavové parametry těchto stavů jsou souborovými středními hodnotami fyzikálních veličin. Pohyb je pojímán jako změna stavu. Většinou jsou zkoumány stavy termodynamické rovnováhy, v nichž se střední hodnoty stavových parametrů s časem nemění. Příkladem mohou být makrosystémy molekul vzduchu, ale také makrosystémy fermionů (např. elektronový plyn v kovech jako degenerovaný Fermiho plyn) nebo bosonů (např. fotonový plyn záření černého tělesa nebo fononový a rotonový plyn v krystalech, amorfních látkách a supravodivých materiálech jako degenerované Boseho plyny)

c) Mikroobjekty, makroobjekty a megaobjekty mají nestatistický charakter, jejich vnitřní struktura není brána v úvahu. Zkoumá je nestatistická fyzika, jejich stavy se nazývají stavy pohybovými. Popis pohybových stavů umožňují pohybové zákony (kinematika), příčiny změn pohybových stavů umožňují popsat pohybové rovnice (dynamika). Jsou zkoumány stavy rovnovážné (statické, stacionární) a také stavy nerovnovážné (kvazistacionární, nestacionární). Pohyb je opět pojímán jako změna stavu. Příkladem stacionárního stavu může být stav vázaného elektronu v obalu atomu, který nezáří a neabsorbuje. Příkladem nestacionárního stavu může být stav vázaného elektronu při jeho excitaci nebo deexcitaci (atom při excitaci může absorbovat foton, při deexcitaci naopak foton vyzařovat).

d) Statistická i nestatistická fyzika mají svou variantu klasickou, kvantovou (je uplatňován vlnově korpuskulární dualismus) a relativistickou (prostor a čas závisí na rozložení a pohybu fyzikálních objektů). V rámci statistické fyziky jsou tyto tři dimenze spojovány do kvaziklasického statistického přístupu, v rámci nestatistické fyziky je klasická dimenze zkoumána klasickou mechanikou a klasickými aplikacemi elektromagnetického pole, kvantová a relativistická dimenze kvantovou a relativistickou mechanikou a kvantovými a relativistickými aplikacemi elektromagnetického pole.

e) Nestatistickou fyziku (nestatistický přístup) lze vystavět na základě pojmů **“pohybová rovnice”** (např. druhý Newtonův zákon v klasické mechanice, nestacionární Schrödingerova rovnice v nerelativistické kvantové mechanice) a **“pohybový zákon”** (např. tvar trajektorie jako množina koncových bodů polohového vektoru v klasické mechanice; v kvantové mechanice si lze představit tvar trajektorie jako množinu “pravděpodobnostních oblaků” vázaného elektronu při jeho excitaci nebo deexcitaci v obalu atomu).

f) Statistickou fyziku (statistický přístup) lze vystavět na pojmu **“distribuční funkce”** (např. Maxwellova distribuce rychlostí v molekulách plynu jako jednoduchá aplikace Maxwellova-Boltzmannova rozdělení) a **“souborová střední hodnota”** (např. střední kvadratická rychlost molekul plynu).

1.2. Potřebné matematické znalosti pro aplikaci na radiologii

- Systém elementárních funkcí

- Číselné množiny (množina přirozených čísel, množina reálných čísel, množina komplexních čísel)
- Polynomicke funkce, především 0., 1. a 2. řádu (konstantní, lineární, kvadratická funkce)
- Goniometrické funkce, především sinus, kosinus, tangens, kotangens (vztahy mezi goniometrickými funkcemi)
- Exponenciální a logaritmické funkce, Eulerovo číslo
- Lineárně lomená funkce (souřadnice průsečíku asymptot hyperboly)
- Vlastnosti funkcí (definice funkce, definiční obor a obor hodnot, inverzní funkce, složená funkce, kartézský graf funkce, periodičnost, lichost, sudost, omezenost)

- Diferenciální počet

- Limita funkce, spojitost funkce
- Definice derivace funkce jedné proměnné, derivace elementárních funkcí
- Derivace součinu a podílu funkcí, derivace složené funkce
- Funkce více proměnných, parciální derivace, úplný diferenciál
- Průběh funkce, Taylorův a Maclaurinův rozvoj funkce, diferenciální rovnice

- Integrální počet

- Plocha omezená jednoduchým grafem funkce a geometrický výpočet velikosti plochy
- Neurčitý integrál a primitivní funkce, určitý integrál
- Integrace elementárních funkcí
- Integrace per partes, integrace substitucí
- Výpočty ploch, objemů a délek křivek užitím integrálního počtu

- Vektorový počet

- Definice vektoru, souřadnice a velikost vektoru, jednotkový, opačný a nulový vektor
- Operace s vektory - součet vektorů, násobení vektoru reálným číslem, skalární, vektorový a smíšený součin vektorů
- Polohový vektor, jednotkové vektory souřadnicových os
- Vektorová funkce a její derivace, derivace polohového vektoru podle času
- Vektorová funkce a její integrace, integrace vektorové funkce zrychlení a vektorové funkce rychlosti podle času

- Analytická geometrie

- Analytická geometrie přímky
- Analytická geometrie kuželoseček

Kontrolní otázky:

- 1) Které objekty a stavy zkoumá nestatistická fyzika
- 2) Které objekty a stavy zkoumá statistická fyzika
- 3) Která z obou fyzik hraje rozhodující roli v radiologii
- 4) Co je to klasická dimenze nestatistické fyziky
- 5) Co je to kvantová dimenze nestatistické fyziky
- 6) Co je to relativistická dimenze nestatistické fyziky
- 7) Co je to pohybový zákon a pohybová rovnice

2. Kvantová mechanika

Klíčová slova: Postulátová výstavba kvantové mechaniky, Hlavní metoda pro stacionární stavy, Atom vodíku, Slupkový model jádra, Molekula vody

2.1. Postulátová výstavba kvantové mechaniky

2.1.1. Diracův princip absolutní malosti

Kvantový objekt (většinou mikroobjekt) nelze zkoumat bez použití přístrojů. To vede k závažným důsledkům - zkoumaný mikroobjekt je operací pozorování uveden do odlišného stavu než bylo před pozorováním (např. elektrony atomového obalu přejdou do excitovaného stavu s vyšší energií). Makroobjektu při přímém pozorování člověkem změna stavu nehrozí - poruchy vyvolané operací pozorování jsou tak malé, že je lze zanedbat. U mikroobjektu tyto poruchy zanedbat nelze - jinak by člověk obdržel prostřednictvím přístroje informace o jiném stavu, než který měl být původně zkoumán.

Diracův princip absolutní malosti říká: V přírodě existuje hranice absolutní malosti pro pozorování fyzikálních objektů - nad touto hranicí lze poruchy vyvolané operací pozorování zanedbat a používat klasickou mechaniku, pod touto hranicí se poruchy vyvolané operací pozorování musí stát součástí nové teorie, kvantové mechaniky.

2.1.2. Princip korespondence

Diracův princip absolutní malosti nastoluje otázku, kdy lze přejít od kvantové mechaniky k mechanice klasické. Kvantová mechanika charakterizuje stavy mikroobjektů soubory kvantových čísel. Např. pro elektron vázaný v obalu atomu jde o čtyři kvantová čísla: Hlavní kvantové číslo n , vedlejší kvantové číslo l , magnetické kvantové číslo m a spinové magnetické kvantové číslo m_s . Hlavní kvantové číslo n má nejnižší hodnotu 1. Kdyby však měla „trajektorie elektronu“ v atomu vodíku (jako soubor míst s největší pravděpodobností výskytu elektronu) přímo pozorovatelný poloměr 1 cm, odpovídala by tomu hodnota kvantového čísla přibližně $n = 10\,000$. V teorii si tak velké vodíkové atomy lze představit.

Princip korespondence (formulovaný Bohrem) **říká:** V limitě velkých kvantových čísel se stírá rozdíl mezi klasickou a kvantovou mechanikou - pro velká kvantová čísla kvantová mechanika dává stejné výsledky jako mechanika klasická.

2.1.3. Princip komplementarity, princip neurčitosti

Princip korespondence vyjasnil základní spojitost klasické a kvantové mechaniky. Objevuje se otázka, jaká je základní odlišnost obou mechanik. Na tuto otázku dá nejdříve dílčí odpověď princip neurčitosti vyjádřený Heisenbergovými relacemi neurčitosti. **Např. Heisenbergova relace neurčitosti $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar$ vypovídá:** nelze současně měřit souřadnici a hybnost elektronu v ose x , ale každá z těchto veličin by mohla být během libovolně krátkého časového okamžiku změřena samostatně s libovolně velkou přesností. Relace neurčitosti sděluje, že lze přesně pracovat buď se souřadnicí x nebo x -ovou složkou hybnosti. K úplnému poznání stavu elektronu však potřebujeme obě veličiny. Úplné poznání stavu elektronu (z pohledu Heisenbergovy relace neurčitosti $\Delta x \cdot \Delta p_x \sim \hbar$) vede k nahrazení klasické trajektorie množinou míst v okolí jádra atomu, v nichž se elektron vyskytuje s různými pravděpodobnostmi. Trajektorie je v kvantové mechanice nahrazena distribucí pravděpodobnosti, které lze populárně říkat „pravděpodobnostní oblak“.

Princip komplementarity říká: Základní odlišnost mezi klasickou a kvantovou mechanikou spočívá v tom, že kvantová mechanika pracuje s dvojicemi veličin nebo pojmů, jejichž hodnoty nebo projevy nemohou být zjištěny současně, k úplnému popisu stavu je však potřebná celá dvojice. Takovým dvojicím náleží název „dvojice komplementárních veličin nebo pojmů“.

Mezi dvojice komplementárních veličin patří vedle dvojice „souřadnice, příslušná složka hybnosti“ také dvojice „kinetická energie T , potenciální energie V “. To znamená, že celkovou energii elektronu vyjádřenou např. hodnotou Hamiltonovy funkce (B6) lze zjistit, ale nelze zjistit, jaká část připadá na kinetickou energii T a jaká část připadá na potenciální energii V . Spolehlivě komplementaritu veličin zjišťují v kvantové mechanice tzv. komutátory operátorů, které zkoumané dvě veličiny reprezentují. Jestliže je komutátor roven nule, obě veličiny lze současně změřit a nevytvářejí tudíž komplementární dvojici veličin. Jestliže je komutátor odlišný od nuly, obě veličiny nelze současně změřit a proto vytvářejí komplementární dvojici veličin.

Nejdůležitější dvojici komplementárních pojmů popisuje vlnové korpuskulární dualismus. Fyzikální objekty mají jak vlnové vlastnosti, tak i vlastnosti korpuskulární. Při jejich zkoumání lze v kvantové mechanice zjišťovat buď vlastnosti vlnové (dané např. vlnovou délkou λ a frekvencí ν), nebo vlastnosti korpuskulární (dané např. hmotností a hybností objektu). Současně nelze oba typy vlastností zkoumat, k úplnému pochopení stavu mikroobjektu a změn tohoto stavu jsou však potřebné oba typy vlastností. Např. elektron v rámci pravděpodobnostního oblaku si při interakcích s jinými částicemi zachovává svou korpuskularitu, avšak v těchto místech se vyskytuje s různými pravděpodobnostmi. „Pravděpodobnostní oblak“ je spojen s existencí de Broglieových pravděpodobnostních vln.

Vlnová délka de Broglieových vln látkové částice s velikostí hybnosti $p=mv$ (v je rychlost částice s hmotností m , v je vždy menší než rychlost světla c) je dána známým vztahem

$$(B35a) \quad \lambda_{DBV} = h/p, \text{ frekvence } \nu_{DBV} = mc^2/h.$$

Jednoduše lze s pomocí (B17) ukázat, že fázová rychlost ν_{DBV} de Broglieových vln je větší než rychlost světla:

$$(B35b) \quad \nu_{DBV} = \lambda_{DBV} \cdot \nu_{DBV} = c^2/v > c.$$

Odtud pramení opodstatněnost pojmů „pravděpodobnostní vlna“, „pravděpodobnostní oblak“ a jejich popis komplexními funkcemi a čísly. Součin komplexního čísla s jeho komplexním sdružením již dává číslo reálné, které představuje čtverec amplitudy de Broglieovy pravděpodobnostní vlny - tato amplituda odráží pravděpodobnost, že látková částice bude nalezena v určitém čase na určitém místě. Vlnová délka λ_{DBV} je i pro nejmenší látkové částice nepatrná - např. pro molekulu vodíku ($m=3,3 \cdot 10^{-27}$ kg, $v = 2000$ m.s⁻¹, $h=6,6 \cdot 10^{-34}$ Js)

vychází asi $\lambda_{DBV} = 10^{-10}$ m = 1 Å. Tato vlnová délka má velikost atomu vodíku.

Pro klasické elektrony lze z rovnice $\frac{1}{2} m_0 v^2 = eU$ (m_0 je klidová hmotnost elektronu, U je urychlující napětí) dosadit za rychlost v do (B35a) a získat vztah pro de Broglieovu vlnovou délku elektronu $\lambda_e = 1,23 \cdot 10^{-9} \cdot U^{-1/2}$ m. Pro elektrony urychlené napětím 151 V pak vychází vlnová délka $\lambda_e = 1$ Å, při urychlujícím napětí 15 100 V je $\lambda_e = 0,1$ Å.

Proudu látkových částic v podobě osového svazku lze přisoudit termín „korpuskulární záření“. Příkladem je elektronový svazek vytvořený z elektronů vystupujících ze žhavené katody - zdrojem osového svazku elektronů je elektronová tryska. **Vlnové vlastnosti korpuskulárního záření jako např. ohyb a lom** jsou změřitelné a staly se základem elektronové a iontové optiky (např. elektronové a iontové mikroskopy s rozlišovací mezí několik Å nebo hmotnostní spektrografy umožňující zjišťovat přesné hmotnosti iontů).

Důsledkem principu komplementarity je modifikace poznávacího cyklu pro nepřímo pozorovatelné mikroobjekty. Zařazení přístroje pro zjištění informací o mikroobjektu vede k posloupnosti poznávacího cyklu: **jev - experiment - matematický model - pojem - představa - aplikace**. Při možnosti pozorovat „přímo“ (včetně pozorování dalekohledem nebo mikroskopem) klasická mechanika obvykle absolvuje jinou posloupnost poznávacího cyklu: **jev - představa - pojem - matematický vztah - experiment - aplikace**.

Změnu poznávacího cyklu lze snadno demonstrovat na vyvíjení pojmu „stacionární stav“ v klasické a kvantové mechanice. V klasické mechanice automobil jedoucí přímočaře a konstantní rychlostí lze pozorovat přímo, okamžitě si lze učinit představu o stacionárním stavu a vyvodit parametry tohoto stavu - ty jsou dány vztahem pro pohyb rovnoměrný přímočarý $s = v \cdot t$ a 1. Newtonovým pohybovým zákonem, tj. zákonem setrvačnosti. Aby bylo možno popsat stacionární stav vázaného elektronu v kvantové mechanice, je nezbytné nejdříve získat experimentální údaje např. o spektrálních sériích (Lymanově, Balmerově, Paschenově atd.) a vytvořit matematický model. Teprve jeho prostřednictvím bude získán popis pravděpodobnostní vlny (např. použitím stacionární Schrödingerovy rovnice) a odvozena distribuce pravděpodobnosti výskytu elektronu. Distribuce pravděpodobnosti je spojena s tvarem „pravděpodobnostního oblaku“, který lze považovat za hledanou představu stacionárního stavu vázaného elektronu.

2.1.4. Interpretační postuláty, princip superpozice

Prostřednictvím Diracova principu absolutní malosti, principu korespondence a principu komplementarity byly identifikovány fyzikální mikroobjekty zkoumané kvantovou mechanikou. Jejich stacionární stavy byly vyjádřeny tvarem „pravděpodobnostního oblaku“ (např. atom ve stacionárním stavu „nezáří a neabsorbuje“). Tato identifikace by nebyla možná bez experimentu, bez provedení operace pozorování pomocí vhodného přístroje. **Na základě výsledků dosažených operací pozorování je zapotřebí popsat proces zpracování získaných výsledků pomocí matematického modelu kvantové mechaniky.**

Matematický model lze popsat srovnáním fyzikálních vlastností operace pozorování a matematických vlastností operátorů. K srovnání těchto dvou typů vlastností přistoupila fyzika v okamžiku, kdy byla experimentálně prokázána fakta o nespojitosti (diskrétnosti) hodnot fyzikálních veličin a tím i o diskrétnosti stavů a jejich změn (Franckův-Hertzův pokus, Sternův-Gerlachův pokus a další). **Výsledky provedeného srovnání jsou vyjádřeny třemi interpretačními postuláty a principem superpozice.**

Interpretační postulát I říká: Stavy mikroobjektů budou reprezentovány vlnovými funkcemi ψ , které jsou nositelkou úplné informace o stavu (ať již stacionárním nebo nestacionárním). **Interpretační postulát bude vyjádřen reprezentací** \textcircled{R}

$$(B36) \quad \text{stav } \textcircled{R} \text{ vlnovou funkcí } \psi \text{ (stav reprezentován vlnovou funkcí)}$$

Interpretační postulát I2 říká: Veličiny A jako parametry stavu budou reprezentovány operátory \hat{A} . Operátory musí splňovat jisté podmínky (např. podmínky hermiticity a linearity), které zajišťují reálnost parametrů stavu a platnost obecného principu superpozice. Při zkoumání konkrétního mikroobjektu je zapotřebí vymezit tzv. úplný soubor operátorů (operátory z úplného souboru reprezentují jen současně měřitelné veličiny!) - počet operátorů odpovídá počtu stupňů volnosti problému. Po provedení tzv. úplného měření (tj. nalezení vstupních hodnot veličin, které jsou reprezentovány operátory z úplného souboru operátorů) lze také nalézt pro daný vstupní okamžik vlnovou funkci stavu (tj. stav $\textcircled{R} \psi$) a zkoumat případný časový vývoj stavu. **Interpretační postulát bude vyjádřen reprezentací** \textcircled{R}

$$(B37) \quad \text{veličina } A \textcircled{R} \text{ operátorem } \hat{A} \text{ (veličina reprezentována operátorem)}$$

Interpretační postulát I3 říká: Hodnoty A_n veličin A jako parametry konkrétních stavů a funkce ψ_n popisující tyto stavy budou získány řešením tzv. vlastní rovnice $\hat{A} \psi_n = A_n \cdot \psi_n$ operátoru \hat{A} . Získané hodnoty A_n vytvoří systém vlastních hodnot $\{A_n\}$ operátoru \hat{A} , získané funkce ψ_n systém vlastních funkcí $\{\psi_n\}$ operátoru \hat{A} . Indexy u vlastních hodnot a vlastních funkcí vystihují, že během řešení soustavy vlastních rovnic operátorů z úplného souboru operátorů se budou postupně objevovat jednotlivá kvantová čísla. Množina kvantových čísel odpovídající řešení soustavy vlastních rovnic vytvoří úplný soubor kvantových čísel. **Interpretační postulát bude vyjádřen vlastní rovnicí operátoru \hat{A} a systémem vlastních hodnot a vlastních funkcí operátoru \hat{A} , tj.**

$$(B38) \quad \hat{A} \psi_n = A_n \cdot \psi_n, \{A_n\}, \{\psi_n\}$$

Princip superpozice říká: Systém vlastních funkcí umožňuje vyjádřit vlnovou funkcí ψ reprezentující libovolný stav mikroobjektu lineární kombinací vlastních funkcí ze systému vlastních funkcí $\{\psi_n\}$ operátoru \hat{A} , tj.

$$(B39) \quad \psi = \sum_n c_n \psi_n \quad (c_n \text{ jsou koeficienty lineární kombinace}).$$

2.1.5. Schrödingerova rovnice a popis matematického modelu kvantové mechaniky

a) Matematický model kvantové mechaniky je v jednoduché podobě tvořen třemi interpretačními postuláty a principem superpozice

b) Ilustrace matematického modelu: stav volné částice pohybující se v ose x s hybností p_x je reprezentován vlnovou funkcí (viz také uvedená literatura)

$$\psi = \exp \left[-\frac{i}{\hbar} (Et - p_x x) \right].$$

Energie $E = H$ (H je Hamiltonova funkce) je reprezentována Hamiltonovým operátorem

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \widehat{V}.$$

První část instrukce je operátor \widehat{T} kinetické energie T , operátor \widehat{V} potenciální energie V v sobě skrývá instrukci „násobit výrazem pro potenciální energii“, tj. $\widehat{V} = V$ krát. Jelikož jde o volnou částici, je potenciální energie $V=0$ a Laplaceův operátor Δ (viz (B20)) je redukován na druhou parciální derivaci podle x . Vlastní rovnice Hamiltonova operátoru $\widehat{H} \psi = E \cdot \psi$ by měla podle (B38) nalézt vlastní hodnotu energie volné částice. Po aplikaci Hamiltonova operátoru

$$\widehat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

na vlnovou funkci ψ volné částice a srovnáním s pravou stranou vlastní rovnice $\widehat{H} \psi = E \cdot \psi$ bude zjištěno, že

$$E = \frac{p_x^2}{2m}.$$

Tento výsledek je v plném souladu se vztahem pro kinetickou energii volné částice. Hamiltonův operátor „umí“ získat správné hodnoty energie prostřednictvím své vlastní rovnice (podrobněji viz uvedená literatura).

c) Přehled některých operátorů

$x \text{ ® } \widehat{x} = x.$	operátor x -ové souřadnice
$p_x \text{ ® } \widehat{p}_x = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x}$	operátor x -ové složky hybnosti
$E=H \text{ ® } \widehat{H} = \widehat{T} + \widehat{V}$	operátor energie (Hamiltonovy funkce)
$T \text{ ® } \widehat{T} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta$	operátor kinetické energie
$V \text{ ® } \widehat{V} = V.$	operátor potenciální energie
$b_z \text{ ® } \widehat{b}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$	operátor z -ové složky momentu hybnosti (φ je sférická souřadnice)
$b^2 \text{ ® } \widehat{b}^2 = -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi}$	operátor čtverce momentu hybnosti (obsahuje tzv. Laplaceův operátor $\Delta_{\vartheta, \varphi}$ pro kouli)

Tab.3 Přehled některých operátorů

d) Nestacionární Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\psi = i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}.$$

Nestacionární Schrödingerova rovnice se často uvádí jako nezávislý princip doplňující matematický model kvantové mechaniky tvořený třemi interpretačními postuláty a principem superpozice.

e) Stacionární Schrödingerova rovnice

Stacionární Schrödingerova rovnice je vlastní rovnice Hamiltonova operátoru \hat{H} - podle (B38) ji lze napsat ve tvaru $\hat{H}\psi_n = E_n \psi_n$. Stacionární Schrödingerova rovnice je přímým důsledkem interpretačního postulátu I3. Stacionární Schrödingerovu rovnici lze za podmínek vymezujících stacionární stav (Hamiltonův operátor \hat{H} neobsahuje časovou instrukci) odvodit z nestacionární Schrödingerovy rovnice.

2.1.6. Princip nerozlišitelnosti, Pauliho vylučovací princip

Vymezením matematického modelu kvantové mechaniky jsou vytvořeny předpoklady pro zkoumání stavů a změn stavů mikroobjektu. **Již jeden zkoumaný mikroobjekt má sám o sobě statistický charakter** - v rámci svého „pravděpodobnostního oblaku“ se nachází v různých místech s různou pravděpodobností, má svou distribuci pravděpodobnosti. **Ještě „statističtější“ charakter bude mít makrosystém kvantových mikroobjektů.** Nechť je stav makrosystému reprezentován vlnovou funkcí ψ a nechť označení „ q_j “ popisuje j -tý mikroobjekt z N mikroobjektů makrosystému. To znamená, že vlnovou funkci ψ lze vyjádřit funkční závislostí $\psi = \psi(q_1, \dots, q_j, \dots, q_k, \dots, q_N)$.

Princip nerozlišitelnosti říká: Kvantové mikroobjekty jednoho druhu jsou nerozlišitelné v tom smyslu, že stav makrosystému se nezmění při záměně libovolného mikroobjektu za jiný mikroobjekt (např. k -tý mikroobjekt může být zaměněn za j -tý mikroobjekt). Princip nerozlišitelnosti je zdůvodněn představou „překrývání pravděpodobnostních oblaků“ jednotlivých mikroobjektů.

Záměnu k -tého a j -tého mikroobjektu popisuje operátor transpozice částic \hat{P}_{jk} . Řešení vlastní rovnice tohoto operátoru

$$(B40) \quad \hat{P}_{jk} \psi_{jk} = \lambda \cdot \psi_{jk}$$

poskytuje možnost odvodit existenci dvou typů nerozlišitelných částic - fermionů (splňují Pauliho vylučovací princip, tj. ve stavu vymezeném konkrétními hodnotami kvantových čísel z úplného souboru kvantových čísel se může vyskytovat nejvýše jeden fermion) **a bosonů** (bosony nepodléhají Pauliho vylučovacímu principu).

Při sekundární aplikaci operátoru transpozice \hat{P}_{jk} na vlastní rovnici (B40) se na levé straně znovu vymění již jednou vyměněné mikroobjekty - primární působení operátoru \hat{P}_{jk} bude eliminováno. Na pravé straně po záměně pořadí „násobení vlastní hodnotou λ “ a „působení operátoru \hat{P}_{jk} “ bude získán pomocí (B40) výraz $\lambda^2 \cdot \psi_{jk}$. **Souhrnně lze tedy zapsat výsledek primárního a sekundárního působení operátoru \hat{P}_{jk} ve tvaru**

$$\psi_{jk} = \lambda^2 \cdot \psi_{jk}.$$

Odtud okamžitě plynou dvě možné vlastní hodnoty operátoru \hat{P}_{jk} : $\lambda = \pm 1$. Hodnota -1 vede k antisymetrickým vlnovým funkcím (transpozicí dvou mikroobjektů se změní znaménko vlnové funkce), které jsou typické právě pro fermiony. Hodnota $+1$ vede k symetrickým vlnovým funkcím, které jsou typické pro bosony.

Důležitým důsledkem principu nerozlišitelnosti je existence fermionů a bosonů. Jelikož fermiony mají „spin“ roven lichému násobku $\hbar/2$ a bosony sudému násobku $\hbar/2$, je zřejmé, že **potřebným důsledkem principu nerozlišitelnosti je vymezení role spinu.**

Spin jako vnitřní moment hybnosti např. elektronu nemá klasickou analogii, je reprezentován

maticovými operátory \hat{S}^2 (operátor čtverce vnitřního momentu hybnosti) a \hat{S}_z (operátor z-ové složky spinu, který má pro elektron dvě vlastní hodnoty $\pm \hbar/2$ charakterizující prostorové kvantování spinu - viz např. „sodíkový dublet“). Jelikož jde u elektronu o liché násobky $\hbar/2$, je zřejmé, že elektron je fermionem a platí pro něj Pauliho vylučovací princip. Spin popsal na základě relativistické mechaniky Dirac a prostřednictvím čtyřspinorů přetransformoval nerelativistickou Schrödingerovu rovnici na relativistickou rovnici Diracovu, která je již v souladu s existencí spinu.

2.2. Hlavní metoda kvantové mechaniky pro stacionární stavy

Postulátová výstavba kvantové mechaniky daná Diracovým principem absolutní malosti, principem korespondence, principem komplementarity a principem neurčitosti, interpretačními postuláty I1, I2, I3 (včetně stacionární a nestacionární Schrödingerovy rovnice) a principem superpozice, principem nerozlišitelnosti a Pauliho vylučovacím principem **je logicky provázanou soustavou, která umožňuje napsat algoritmus kroků hlavní metody kvantové mechaniky pro zkoumání alespoň stacionárních stavů.**

Tento algoritmus obsahuje následující posloupnost kroků:

- fyzikální vymezení problému, stanovení počátečních podmínek
- vymezení úplného souboru operátorů a veličin
- napsání soustavy vlastních rovnic operátorů, především vlastní rovnice Hamiltonova operátoru (tj. stacionární Schrödingerovy rovnice)
- nalezení systému vlastních funkcí, systémů vlastních hodnot a úplného souboru kvantových čísel
- nalezení tvarů „pravděpodobnostních oblaků“
- interpretace výsledků popisem stacionárních stavů pomocí přípustných hodnot kvantových čísel a popisem aplikací (základní aplikací např. u vázaných elektronů je zdůvodnění struktury Mendělejevovy periodické tabulky).

2.3. Aplikace hlavní metody - atom vodíku (viz uvedená literatura)

2.3.1. Fyzikální vymezení problému, stanovení počátečních podmínek

2.3.2. Vymezení úplného souboru operátorů a veličin

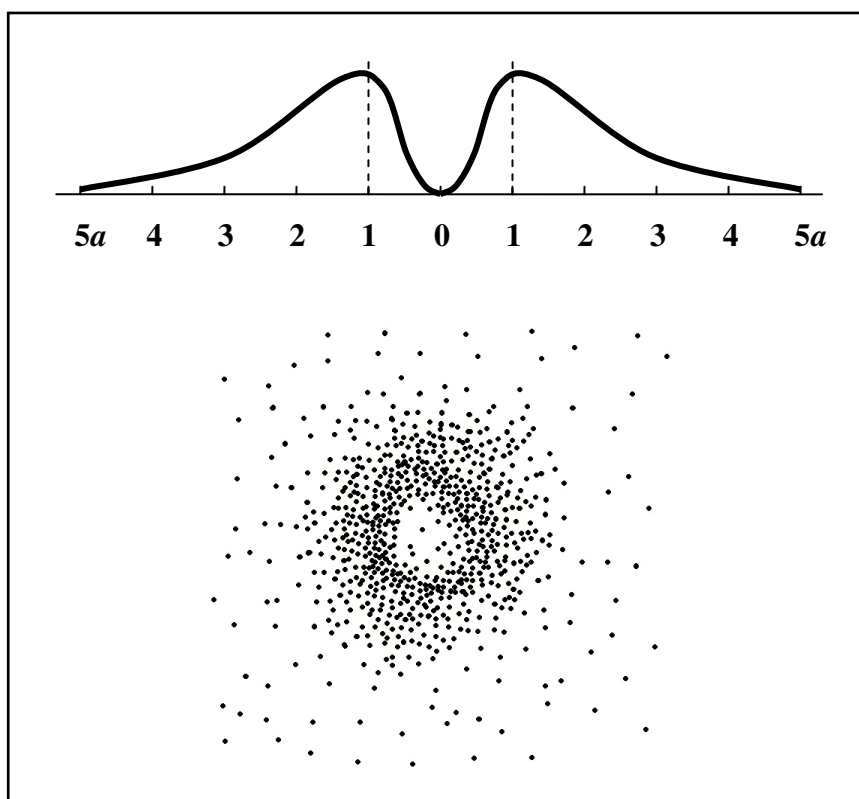
2.3.3. Soustava vlastních rovnic operátorů

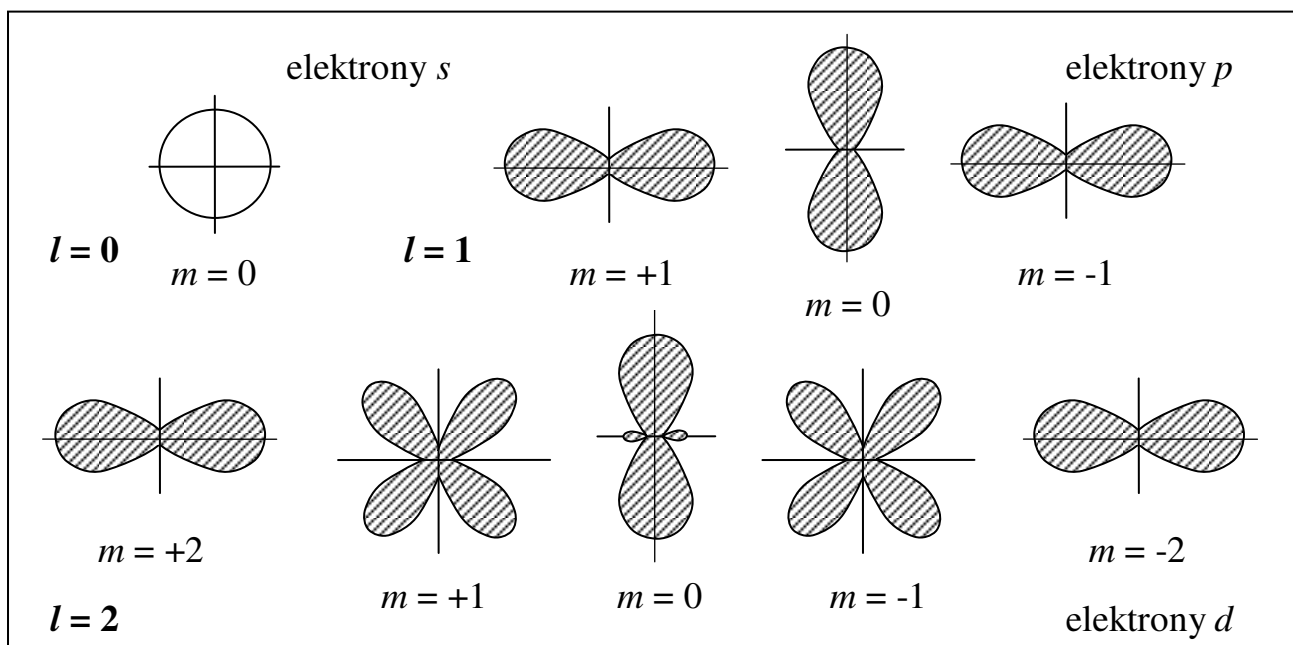
2.3.4. Nalezení systému vlastních funkcí a vlastních hodnot a úplného souboru kvantových čísel

2.3.5. Nalezení tvarů „pravděpodobnostních oblaků“

Obr.3

Graf
a
znázornění
radiální hustoty
pravděpodobnosti
pro $n=1, l=0$





Obr. 4

Grafy směrových hustot pravděpodobnosti pro elektrony s ($l = 0$), elektrony p ($l = 1$) a elektrony d ($l = 2$)

2.3.6. Interpretace výsledků popisem stacionárních stavů pomocí hodnot kvantových čísel

2.4. Aplikace hlavní metody - slupkový model atomového jádra (viz uvedená literatura)

Radiova metoda magnetické jaderné rezonance

Rozdíly v poločasech rozpadu nepatrně odlišných izotopů

2.5. Prostorová struktura molekuly vody (viz uvedená literatura)

Struktura obalu atomu kyslíku

Exaktnější cesta k pochopení prostorové struktury molekuly vody vede přes dva různé teoretické přístupy, které se používají k vyšetřování homopolární (kovalentní) vazby. První přístup nazvaný „přiblížení valenční vazby“ považuje molekulu za soubor jednotlivých atomů, druhý přístup nazvaný „přiblížení molekulových orbitů“ považuje od počátku molekulu za jeden nedílný útvar. Podle představ valenční vazby předpoklady k tvorbě molekul mají pouze atomy s nespárovanými spiny. Podle představ molekulových orbitů předpoklady k tvorbě molekul mají atomy, jejichž orbity se při přiblížení překrývají a výsledkem je zvýšená hustota pravděpodobnosti výskytu elektronů mezi nimi - vzniká vazebný molekulární orbit.

Oba přístupy „umí“ uvedenou prostorovou strukturu molekuly vody zdůvodnit. Kyslík se čtyřmi

elektrony $n=2$ a $l=1$ musí mít dva z nich spárované v rámci jedné ze tří možností $m=-1$, $m=0$, $m=1$. Má tudíž dva nespárované elektrony a v souladu s přístupem „přiblížení valenční vazby“ může vytvořit molekulu vody. Podle přístupu „přiblížení molekulových orbitů“ jsou schopné tři podorbity „ p “ atomu kyslíku (tj. pro $l=1$ tři možnosti $m=-1$, $m=0$, $m=1$) vytvářet vazebné molekulové orbity s podorbitem „ s “ atomu vodíku (tj. pro $l=0$). Molekula vody opět může vzniknout s očekávanou prostorovou strukturou.

Kontrolní otázky:

- 1) Jaká je postulátová výstavba kvantové mechaniky
- 2) Co je to vlnově korpuskulární dualismus elektronu
- 3) Co je to operátor
- 4) Co je to vlastní rovnice operátoru
- 5) Co je to stacionární Schrödingerova rovnice
- 6) Co popisuje nestacionární Schrödingerova rovnice
- 7) Jaké jsou kroky hlavní metody kvantové mechaniky
- 8) Jaká je interpretace kvantových čísel
- 9) Aplikujte hlavní metodu na atom vodíku
- 10) Aplikujte hlavní metodu na jádro atomu (popište slupkový model)
- 11) Jaká je prostorová struktura molekuly vody

3. Relativistická mechanika

Klíčová slova: Struktura relativistické mechaniky, Speciální teorie relativity, Pohybová
Rovnice relativistické dynamiky, Pohybová hmotnost, Einsteinův vztah
Pro energii

3.1. Popis struktury relativistické mechaniky

a) Pozorovatelnost relativistických objektů

Rychle se pohybující relativistické objekty nebo relativistické objekty s extrémními hustotami hmotnosti nejsou přímo pozorovatelné - o jejich existenci informují přístroje. Zatímco přímo pozorovatelné objekty makrosvětla (včetně jejich pozorování dalekohledem nebo mikroskopem) lze zkoumat klasickou cestou (**jev-představa-pojem-matematický vztah-experiment-aplikace**), relativistická cesta se podobá cestě kvantové:

- **jev**
- **experiment** (nutnost zapojení přístroje pro získání informací o relativistickém objektu)
- **matematický model** (zpracované číselné výsledky experimentu ve formě matematických souvislostí)
- **pojem** (pojem vytvořený bez přímého kontaktu se zkoumaným jevem)
- **představa** (představa využívající klasických zkušeností získaných přímým kontaktem s objekty makrosvětla)
- **aplikace.**

b) Podmínky relativističnosti jevů

Relativističnost jevů spojená s extrémními hustotami může být doložena např. pomocí podmínky degenerace Fermiho plynu.

Relativističnost jevů spojená s vysokými rychlostmi může být doložena např. Michelsonovým a Morleyovým pokusem již z r. 1887. Michelsonův pokus byl opakován a vždy vedl ke stejnému závěru - vedle kontrakce délek vedl společně s dalšími pokusy k zformulování principu konstantní rychlosti světla c . Pro vakuum tento princip postuloval, že vzájemné působení (interakce) mezi fyzikálními objekty může probíhat pouze rychlostí $v \leq c$. Odtud okamžitě vyplynula nemožnost sil působících přímo „do dálky“ (tj. okamžitě) a jen přibližná platnost Newtonova gravitačního zákona a dalších podobných zákonů sil používaných v Newtonově mechanice. Dále odtud vyplynulo, že nemohou existovat objekty látkové nebo polní formy hmoty, které by se pohybovaly nebo šířily rychlostí vyšší než rychlost světla ve vakuu.

c) Východiska klasické mechaniky

Klasická mechanika vychází z absolutního prostoru (Euklidovský prostor s obvyklou kartézskou souřadnicovou soustavou os $x=x_1$, $y=x_2$, $z=x_3$) a absolutního času, které jsou nezávislé na rozložení a pohybu fyzikálních objektů. Galileiho princip relativity pak konstatuje, že všechny inerciální vztažné soustavy jsou plně rovnoprávné z hlediska všech zákonů Newtonovy mechaniky.

d) Speciální teorie relativity

Speciální teorie relativity formuluje již Einsteinův speciální princip relativity - všechny inerciální vztažné soustavy jsou rovnoprávné a pro formulaci všech fyzikálních zákonů rovnocenné (nejen zákonů Newtonovy mechaniky, ale i např. všech elektromagnetických zákonů). Odtud ovšem vyšel požadavek opustit nejen představu absolutního prostoru (tj. představu „světelného éteru“ tento prostor vyplňující), ale také představu absolutního času a tím i absolutního pohybu. Galileiho transformace byla nahrazena transformací Lorentzovou ve známém tvaru

$$(B45) \quad x_1' = a(x_1 - ut), \quad x_2' = x_2, \quad x_3' = x_3, \quad t' = a(t - uc^{-2}x_1).$$

Tvar (B45) platí pro případ splývání os x_1' a x_1 , rovnoběžnost os x_2' a x_2 , rovnoběžnost os x_3' a x_3 a v okamžiku setkání počátků obou inerciálních soustav (pohybujících se vůči sobě rychlostí u) ukazují hodiny v obou soustavách na nulu. Koeficient a je dán výrazem

$$(B46) \quad a = (1 - u^2/c^2)^{-1/2}.$$

Mezi jednoduché aplikace speciální teorie relativity patří především důsledky Lorentzovy transformace z oblasti relativistické kinematiky (kontrakce délek, dilatace času, skládání rychlostí) a důsledky z oblasti relativistické dynamiky (závislost hmotnosti za pohybu na rychlosti mikroobjektu, Einsteinův vztah pro energii $E = mc^2$).

Euklidův prostor byl ve speciální teorii relativity nahrazen čtyřrozměrným Minkowského prostoročasem tvořeným množinou světobodů o souřadnicích x_1, x_2, x_3 a $x_4 = ict$, kde i je komplexní (imaginární) jednotka. Světočárou se stala libovolná jednorozměrná (jednoparametrová) množina světobodů (např. osy Minkowského prostoročasu). Nejdůležitějšími světočárami se staly světočáry hmotných bodů (podle Minkowského jsou „obrazem věčného životního běhu materiální částice“). Parametrem, na kterém závisejí všechny čtyři souřadnice, se stal vlastní čas hmotného bodu.

Lorentzova transformace také znamenala přechod od obyčejných (prostorových) vektorů se 3-mi složkami k čtyřvektorům, tj. k tenzorům 1. řádu se 4-mi složkami (tenzor n -tého řádu má v Minkowského prostoročase obecně 4^n složek). Příkladem čtyřvektorů jsou např. čtyřrychlost, čtyřzrychlení nebo Minkowského elektromagnetická čtyřsíla, v níž přešla Lorentzova síla $\vec{F} = Q\vec{E} + Q(\vec{v} \times \vec{B})$.

Na závěr je dobré připomenout orientační dělení částic na klasické (hmotnost za pohybu je srovnatelná s klidovou hmotností), relativistické (hmotnost za pohybu převyšuje klidovou hmotnost) a ultrarelativistické (rychlost se rovná rychlosti světla).

e) Obecná teorie relativity

Metrika Minkowského prostoročasu (čtverec intervalu dvou světobodů, tj. $ds^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 + dx_4^2$) obsahuje před jednotlivými sčítanci konstantní čísla rovná 1, její tzv. metrický tenzor je konstantní. Ukázalo se však, že gravitační pole určuje samo metriku prostoročasu prostřednictvím Einsteinova gravitačního zákona - prostoročas se stává křivým Riemannovým prostorem s nekonstantním metrickým tenzorem 2. řádu g_{ij} . Speciální teorie relativity se přetransformovala v obecnou teorii relativity, neboť speciálně relativistická teorie gravitace se ukázala být limitním případem obecně relativistické teorie gravitace.

Obecná teorie gravitace vyložila neinerciální vztažné soustavy jako systémy křivočarých souřadnic v Riemannově prostoru a vyšla z obecného principu relativity - inerciální i neinerciální vztažné soustavy jsou pro formulaci obecných fyzikálních zákonů zcela rovnocenné. Současně prokázala rovnost setrvačné a tíhové hmotností a na tomto základě zformulovala princip ekvivalence - gravitační síla není lokálně rozeznatelná od setrvačné síly.

3.2. Relativistická dynamika speciální teorie relativity

3.2.1. Pohybová rovnice relativistické mechaniky

Pohybová rovnice klasické mechaniky má v rámci newtonovského formalismu tvar (B5). Necht' platí Lorentzova transformace souřadnic ve tvaru (B45). Pak musí být vzaty v úvahu podmínky platnosti tvaru (B45): splývání os x_1' a x_1 , rovnoběžnost os x_2' a x_2 , rovnoběžnost os x_3' a x_3 , v okamžiku setkání počátků obou inerciálních soustav ukazují hodiny v obou soustavách na nulu, „čárkovaná“ soustava souřadnic se pohybuje vůči „nečárkované“ pohybem rovnoměrně přímočarým rychlostí u mající směr kladné poloosy os x_1' a x_1 .

Necht' síla má rovněž stálý směr os x_1' a x_1 a necht' hmotný bod (částice) s hmotností m se pohybuje rychlostí v mající opět směr os x_1' a x_1 . Za těchto podmínek a za podmínek platnosti Lorentzovy transformace (B45) lze pohybovou rovnici (B5) **nerelativistické mechaniky** napsat v jednorozměrném tvaru

$$F = m \frac{dv}{dt}.$$

Tento tvar platí ve všech inerciálních soustavách a nemění se Galileiho transformací

$$x_1 = x_1' + ut, \quad x_2 = x_2', \quad x_3 = x_3'.$$

Pohybová rovnice **relativistické mechaniky** nemůže upravený jednorozměrný tvar (B5) přijmout - tento tvar se s Lorentzovou transformací (B45) mění. Neměnnost vůči Lorentzově transformaci (B45) zajišťuje užití vektorů ve čtyřrozměrném Minkowského prostoročase. Formálně lze použít následující tvar jednorozměrné pohybové rovnice:

$$(B47) \quad F = \frac{d(mv)}{dt}, \text{ kde}$$

$$(B48) \quad m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad v < c, \quad m_0 \text{ je klidová hmotnost částice, } m \text{ je hmotnost za pohybu.}$$

Pohybová rovnice relativistické mechaniky (B47) a rovnice (B48) tvoří základ relativistické dynamiky.

Relativistický přírůstek hmotnosti $m - m_0$ je patrný jen při rychlostech blízkých rychlosti světla. Při rychlosti $0,1 c$ se hmotnost zvětší jen o 0,5 %, při rychlosti $0,9 c$ přírůstek hmotnosti již přesahuje 100 %. Dostatečně velké rychlosti pro měřitelnost relativistických přírůstků hmotnosti mají především elementární částice - při popisu jejich stavů a změn jejich stavů nelze používat klasické fyzikální zákony.

3.2.2. Einsteinův vztah pro energii

Rovnice (B47) a (B48) umožňují snadné odvození Einsteinova vztahu pro energii

$$(B49) \quad E = mc^2.$$

Nechť platí nadále předpoklad síly se stálým směrem a necht' se hmotný bod (částice) s hmotností m pohybuje ve směru síly. Za čas dt se hmotný bod posune o vzdálenost dr , kde dr je velikost rozdílu polohových vektorů v časech t a $t+dt$. Síla F vykoná po dráze dr elementární práci

$$dW = F dr = \frac{d(mv)}{dt} dr = v d(mv) = mv dv + v^2 dm.$$

Umocněním vztahu (B48) lze obdržet $m^2 (c^2 - v^2) = m_0^2 c^2$. Diferencováním a následnou úpravou lze získat tvar $mv dv + v^2 dm = c^2 dm$. Dosazením do výrazu pro elementární práci dW a provedením integrace od nulové rychlosti, při níž má částice klidovou hmotnost m_0 , až po rychlost v , při níž již má částice hmotnost za pohybu m , lze získat výslednou práci

$$W = \int_{v=0}^v F dr = \int_{m_0}^m c^2 dm = (m - m_0) c^2.$$

Z hlediska dráhových účinků síly a z hlediska zákona zachování energie je práce W rovna kinetické energii T částice, tj. $T = mc^2 - m_0c^2$ (s použitím binomického rozvoje lze ukázat, že tento výraz pro $v \ll c$ přechází v klasický tvar $T = \frac{1}{2} m_0 v^2$). Bude-li dále výraz $E_0 = m_0c^2$ ztotožněn s klidovou energií částice (tj. s energií, kterou má částice v klidu), lze součet $T + E_0$ kinetické energie a klidové energie označit jako celkovou energii E částice danou vztahem (B49). Einsteinův vztah pro energii byl odvozen.

Po zavedení relativistické hybnosti $p = mv$ pro zkoumaný jednorozměrný případ, kde hmotnost za pohybu m je dána vztahem (B48), je možné vztah (B49) pro celkovou energii přepsat ve tvaru (viz uvedená literatura)

$$(B50) \quad E = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}.$$

Tvar (B50) představuje vhodnou možnost, jak rozlišit nerelativistickou, relativistickou a ultrarelativistickou energii zkoumané volné částice (u volných částic jsou zanedbány vzájemné klasické nebo výměnné kvantové interakce s jinými volnými částicemi téhož druhu) – viz uvedená literatura.

Kontrolní otázky:

- 1) Jaké jsou podmínky platnosti klasické fyziky
- 2) Jaké jsou podmínky platnosti speciální teorie relativity
- 3) Jaké jsou podmínky platnosti obecné teorie relativity
- 4) Co je to kontrakce délek a dilatace času
- 5) Jaká je pohybová rovnice relativistické dynamiky
- 6) Jaký je vztah pro hmotnost za pohybu
- 7) Odvoďte Einsteinův vztah pro energii

4. Kvantové a relativistické aplikace elektromagnetického pole

Klíčová slova: Klasická a kvantová teorie elmg.pole, Vlnově korpuskulární dualismus fotonu, Elektromagnetické záření, Fotoelektrický jev, Comptonův jev, Anihilační jev

4.1. Srovnání klasické a kvantové teorie monochromatického elektromagnetického pole

Klasicky pojaté elektromagnetické pole je volným a monochromatickým elektromagnetickým polem spojeným s obrovským počtem „koherentních“ fotonů. Pak lze soubor „koherentních“ fotonů nahradit elektromagnetickým polem, které se šíří prostorem jako klasická monochromatická a makroskopická elektromagnetická vlna popsaná pohybovými rovnicemi (B34) a (B35).

Typickým rysem klasicky pojatého elektromagnetického pole je **spojitý** přenos energie. Klasickou teorií elektromagnetického pole je fenomenologická Maxwellova teorie uveřejněná již v r. 1873.

Klasická teorie monochromatického volného elektromagnetické pole představuje oddělenou vlnovou stránku vlnově korpuskulárního dualismu obecného elektromagnetického pole. Elektromagnetickou vlnu lze zkoumat klasickým nestatistickým přístupem.

Kvantová teorie monochromatického volného elektromagnetického pole vychází z **diskrétního** charakteru přenosu energie prostřednictvím menšího počtu **stejně velkých energetických kvant s vyššími frekvencemi**, jejichž nositeli jsou „koherentní“ fotony.

Např. v oblasti rádiových vln se vzhledem k nepatrné energii fotonů korpuskulární vlastnosti volného elektromagnetického pole prakticky neprojevují, ale počínaje např. viditelným světlem je nutné tyto vlastnosti brát v úvahu (foton rádiových vln má energii řádově 10^{-9} eV, foton viditelného světla již 1,6 eV až 3 eV).

Kvantová teorie monochromatického volného elektromagnetické pole představuje oddělenou korpuskulární stránku vlnově korpuskulárního dualismu obecného elektromagnetického pole.

V rámci kvantových aplikací elektromagnetického pole lze monochromatické volné elektromagnetické pole zkoumat v řadě případů klasickým nestatistickým přístupem jako uspořádaný tok částic pohybujících se rychlostí světla.

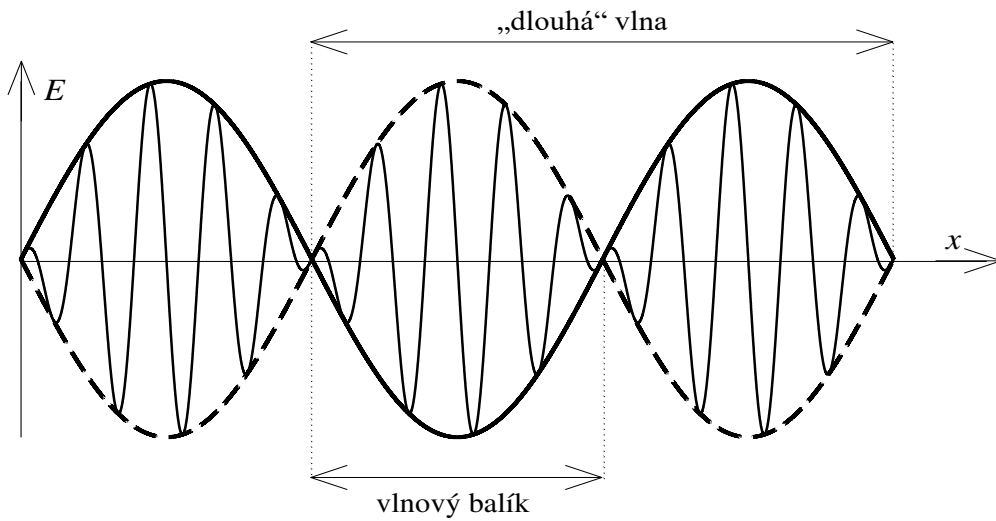
4.2. Vlnově korpuskulární dualismus fotonu

Jeden foton lze reprezentovat „vlnovým balíkem“ či „Gaussiánem“. V rámci vlnového balíku je např. intenzita elektrického pole soustředěna jen v určitých „malých“ oblastech prostoru, které se šíří rychlostí rovnou rychlosti světla c .

Jeden foton nebo malý počet fotonů nelze zkoumat bez důsledné aplikace vlnově korpuskulárního dualismu - nejdříve bude předložen vhodný model fotonu (vlnový balík viz Obr.5, „Gaussián“ viz Obr.6), pak bude odděleně popsána vlnová a korpuskulární stránka fotonu.

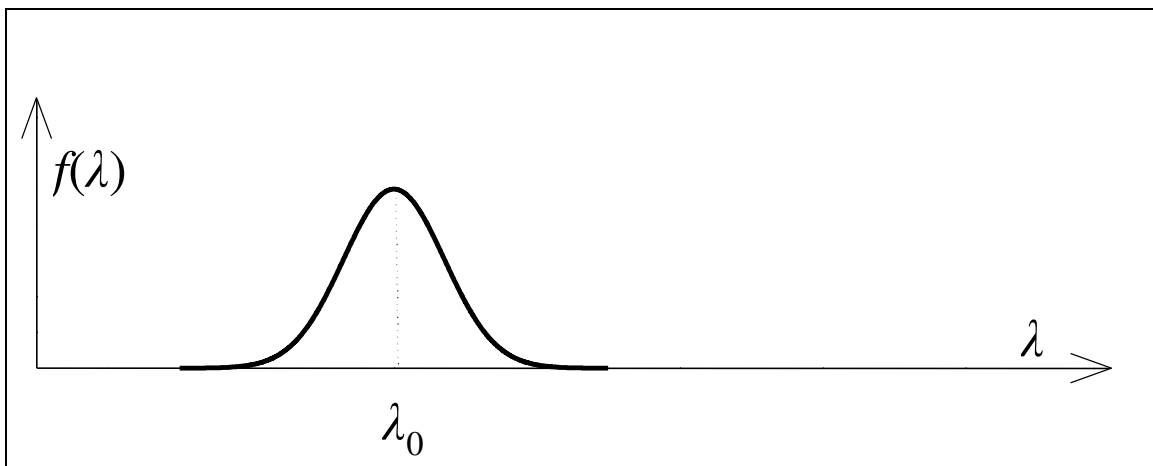
Podrobněji – viz uvedená literatura.

4.2.1. Vlnový balík jako model fotonu



Obr. 5
Vlnový balík jako model fotonu

Podle obrázku Obr. 6 si lze představit vlnový balík jako uzavřený „zvon - Gaussián“ postupující po ose x . Postupující „Gaussián“ je vhodným nástrojem pro pravděpodobnostní popis vlnového balíku (viz uvedená literatura, $f(\lambda)$ je tzv. spektrální funkce určená normálním rozdělením).



Obr. 6
Gaussián jako model pravděpodobnostního popisu fotonu

4.2.2. Vlnová stránka fotonu

Nositel kvanta elektromagnetické energie $\hbar\omega_0$ ($\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$) je vlnový balík se střední úhlovou frekvencí ω_0 a celkovou energií $\hbar\omega_0$. Vlnový balík je modelem fotonu. Podle pravděpodobnostní interpretace kvantové mechaniky je vzhledem k (B36) stav látkové částice reprezentován vlnovou funkcí ψ - násobením ψ komplexním sdružením ψ^* (tj. $\psi\psi^*$) má význam hustoty pravděpodobnosti výskytu látkové částice. S použitím analogie je možné součin spektrální funkce $f(\lambda)$ s jejím komplexním sdružením $f(\lambda)^*$, tj.

$$f(\lambda)f(\lambda)^*,$$

interpretovat jako hustotu pravděpodobnosti vlnové délky λ fotonu. Vlnový balík se spektrální funkcí $f(\lambda)$ jako „Gaussiánem“ a celkovou energií $\hbar\omega_0$ ($\lambda_0 = 2\pi c/\omega_0$) popisuje vlnovou stránku fotonu. **Pravděpodobnostní interpretace vlnové stránky fotonu jako polní částice je odlišná od pravděpodobnostní interpretace vlnové stránky látkových částic - na rozdíl od látkových částic nejde o pravděpodobnost výskytu, ale o pravděpodobnost vlnového čísla.**

4.2.3. Korpuskulární stránka fotonu

Korpuskulární stránka fotonu spočívá v interpretaci fotonu jako částice. Významnými charakteristikami každé částice (korpuskule) jsou hmotnost a hybnost. S využitím vztahů (B49), (B50), (B51) a (B51a) lze pro hmotnost a velikost hybnosti fotonu nalézt po dosažení nulové klidové hmotnosti fotonu vztahy

$$(B52) \quad m = \frac{\hbar\omega}{c^2}, \quad p = \frac{\hbar\omega}{c}.$$

Vztahy (B52) určují mimo jiné setrvačnost fotonu - tím jsou fotony charakterizovány jako částice, které mají také svou váhu. Odtud již vyplývá např. zakřivení světelných paprsků v gravitačním poli, které bylo předpovězeno obecnou teorií relativity. Hmotnost viditelného fotonu je rovna pěti miliontinám hmotnosti elektronu, foton tvrdého záření je však již stejně hmotný jako elektron, jsou však již známy fotony těžší než vodíkový atom.

4.3. Elektromagnetické záření

4.3.1. Klasická a kvantová podoba elektromagnetického záření, členění optiky

Elektromagnetické pole vzbuzené pohybujícím se nábojem se skládá ze dvou částí různé povahy - první část závisí jen na rychlosti pohybujícího se náboje a klesá s druhou mocninou vzdálenosti (tato první část odpovídá poli vzbuzenému rovnoměrně se pohybujícím nábojem). Druhá část závisí na zrychlení a při velkých vzdálenostech od náboje klesá s první mocninou vzdálenosti. Právě tato druhá část souvisí s elektromagnetickým zářením vyzařovaným pohybujícím se nábojem.

Ve velké vzdálenosti od soustavy nábojů (tj. pro volné elektromagnetické pole) a pro obrovský počet „koherentních“ fotonů lze tuto druhou část **pojímát jako „klasickou“ elektromagnetickou vlnu a nestatistický fyzikální objekt** - v těchto velkých vzdálenostech (v tzv. vlnové zóně záření) lze také elektromagnetické záření považovat za elektromagnetické vlnění. Z hlediska kvantové teorie monochromatického volného elektromagnetického pole spojeného s menším počtem „koherentních“ fotonů a s konkrétní vyšší frekvencí lze světlo považovat za soubor částic (fotonů), které se šíří „uspořádaně“ podél paprsků. Pak lze elektromagnetické záření spojovat s uspořádaným tokem částic.

Pro monochromatické volné elektromagnetické pole a pro obrovský počet „koherentních“ fotonů lze zkoumat interakci elektromagnetického záření s látkovým prostředím jako interakci elektromagnetického vlnění s tímto prostředím. Historicky odpovídá preferenci vlnové podstaty světla Huygensova undulační teorie (světlo bylo pokládáno za podélné vlnění velmi řídkého prostředí, zvaného světelný éter). **Např. z hlediska vlnové optiky jsou pak zkoumány jevy spojené s vlnovými vlastnostmi světla** - interferenční jevy, ohybové jevy (Fraunhoferova difrakce, Fresnelova difrakce), polarizační jevy (polarizace odrazem a lomem, polarizace dvojlomem v krystalu, rotační polarizace atd.), průchod světla prostředím (rozklad - disperze světla, pohlcování - absorpce světla, rozptyl - difúze světla).

Rovněž geometrická optika vychází z klasického modelování interakce světla s homogenním izotropním prostředím. Je vybudována na čtyřech zákonech (zákon přímočarého šíření světla, zákon nezávislosti světelných paprsků, zákon odrazu světelných paprsků, zákon lomu světelných paprsků), které lze formulovat bez použití jakékoliv představy o fyzikální podstatě světla. Na základě těchto zákonů se geometrická optika zabývá zobrazováním „svítících“ předmětů optickými přístroji. Menší počet „koherentních“ fotonů s konkrétní vyšší frekvencí umožňuje světlo považovat za soubor uspořádaně se šířících částic (fotonů), pro které platí uvedené čtyři zákony. „Menší počet fotonů“ neznamená „malý počet fotonů“, proto i menší počet fotonů představuje energii mnohonásobně převyšující energii jednoho kvanta. Optické zobrazování řeší úlohy, jejichž rozměry jsou mnohonásobně větší než vlnová délka fotonů. Fotony světla ve srovnání s fotony rádiových vln splňují představu „vysokoenergetických“ částic, u nichž se prosazují především korpuskulární vlastnosti. Historicky této představě dobře odpovídá korpuskulárně pojatá Newtonova emanační teorie (světlo je tvořeno rychle letícími částicemi, které vysílá svítící zdroj).

Pro malý počet fotonů se stává východiskem diskrétní charakter energie elektromagnetického pole spojený právě s fotony jako nositeli kvant energie $\hbar\omega$. Interakci elektromagnetického záření s látkovým prostředím je potřebné zkoumat jako interakci fotonu (polní částice, která je ultrarelativistickou částicí) s látkovou částicí (např. s elektronem jako klasickou nebo relativistickou částicí). **Z hlediska kvantové optiky budou zkoumány jevy na základě vlnově korpuskulárního dualismu fotonů.** Bude brána v úvahu nejen vlnová délka a frekvence spojená s fotonem, ale také jeho hmotnost a hybnost podle vztahů (B52). Důležitými jevy kvantové optiky pak jsou fotoelektrický jev (zánik polní částice se současným zvýšením hmotnosti a energie látkové částice), obrácený fotoelektrický jev (snížení hmotnosti a energie látkové částice se současným vznikem polní částice), Comptonův jev (rozptyl např. rentgenového záření u lehkých prvků - u prvků s velkou relativní atomovou hmotností, např. u kovů či fosforu, převládá u rentgenového záření absorpce), anihilační jev (zánik páru částice-antičástice se vznikem zánikového záření), obrácený anihilační jev (např. tvorba párů elektron-pozitron).

Šířeji pojatá optika zkoumá jevy spojené nejen se světlem, ale i s dalšími druhy elektromagnetického záření. Např. s tepelným zářením látek všech skupenství, které má původ v neuspořádaném tepelném pohybu jejich nabitých částic. Nebo s rentgenovým zářením, které má původ ve změnách tvarů „pravděpodobnostních oblaků“ elektronů v obalech atomů při přechodech na nižší orbity (charakteristické rentgenové záření) nebo ve změnách tvarů „pravděpodobnostních oblaků“ při náhle ztrátě energie urychlených elektronů při interakci s elektrostatickým polem atomu (brzděné rentgenové záření).

Členění optiky na optiku geometrickou, vlnovou a kvantovou je vhodným příkladem členění podle klasické a kvantové podoby elektromagnetického záření. **Geometrickou, vlnovou a kvantovou optiku lze také stručně odlišit na základě energetického a prostorového kritéria.** Geometrická optika je založena na používání obrovských energií ve srovnání s kvantem energie $\hbar\omega$ a rovněž prostory a překážky v těchto prostorech jsou mnohonásobně větší než typické vlnové délky λ . Vlnová optika je stále spojena s používáním velkých energií ve srovnání s kvantem energie $\hbar\omega$, avšak části prostorů a překážky jsou již srovnatelné s vlnovou délkou λ . Kvantová optika vychází z podmínek, kdy energie jsou již srovnatelné s kvantem energie $\hbar\omega$, části prostoru a překážky jsou rovněž srovnatelné s vlnovou délkou λ .

4.3.2. Elektromagnetické spektrum

Obecně pojatá optika je naukou především o elektromagnetickém záření, zúžené pojatá optika pojednává jen o jednom druhu elektromagnetického záření - o světle, které vnímá člověk očima a prostřednictvím kterého získává poznatky o vnějším světě.

Elektromagnetickým spektrem je nazýván přehled druhů elektromagnetického záření uspořádaný od největších vlnových délek až k vlnovým délkám nejkratším. Přehled druhů elektromagnetického záření je popsán v uvedené literatuře.

4.3.3. Kvantová optika

a) Fotoelektrický jev

Jednoduchý teoretický výklad fotoelektrického jevu podal v r. 1905 Einstein. Vyšel z představy, že jde o přímé působení fotonů na elektrony v kovu. Každý budoucí fotoelektron (elektron, který vystoupí z kovu) obdrží celou energii fotonu $\hbar\omega$, část této energie (výstupní práce A) je spotřebována na

překonání potenciálu na povrchu kovu, zbytek energie bude odpovídat kinetické energii elektronu T po vystoupení z kovu. Minimální energie potřebná k vytržení elektronu z kovu je pak dána vztahem $A = \hbar\omega_0$, kde frekvence $\nu_0 = \omega_0/2\pi$ se nazývá charakteristickou frekvencí kovu. Einsteinova fotoelektrická rovnice bude mít tedy tvar

$$(B53) \quad \hbar\omega = T + \hbar\omega_0 \quad (T \text{ je maximální možná energie fotoelektronu}).$$

Např. pro sodík je $\nu_0 = 5,15 \cdot 10^{14}$ Hz, fotoelektrický jev nastává již při dopadu viditelného světla s vlnovou délkou kratší než 5821 \AA . Výstupní práce $A = \hbar\omega_0$ pro sodík je pak asi 2,1 eV - tomu odpovídá představa potenciálové hráze na povrchu sodíku výšky 2,1 V.

b) Obrácený fotoelektrický jev

Při obráceném fotoelektrickém jevu naopak na kovy dopadají elektrony a kov vysílá fotony rentgenového záření (vlnovou povahu rentgenového záření poprvé demonstroval v r. 1906 Barkla, objevitelem rentgenového záření se stal v r. 1895 Roentgen). Je-li elektron před dopadem urychlen napětím U mezi katodou a anodou, získá energii eU a pro maximální možnou frekvenci $\nu_{\max} = \omega_{\max}/2\pi$ (nejkratší vlnovou délku λ_{\min}) lze napsat Duanův-Huntův zákon ve tvaru

$$(B54) \quad \hbar\omega_{\max} = eU, \quad U\lambda_{\min} = \frac{2\pi\hbar c}{e} = 1,24 \cdot 10^{-6} \text{ Vm}.$$

V tomto tvaru není zachycena energie, kterou získá elektron při průchodu potenciálovou hrází při vniknutí do kovu (viz vztah (B53)) - důvodem je zanedbatelnost příslušné vstupní práce (řádově několik eV) vůči celkové energii elektronu (např. 10^5 eV).

Rentgenové spektrum obsahuje dva druhy záření - brzdné rentgenové záření a charakteristické rentgenové záření. **Brzdné rentgenové záření** má spojité spektrum složené z velkého množství slabých čar všech frekvencí až do jisté nejvyšší frekvence ν_{\max} (minimální vlnové délky λ_{\min}). Tuto minimální vlnovou délku lze snadno vypočítat pomocí vztahu (B54) v závislosti na napětí mezi katodou, která emituje elektrony, a anodou, na kterou urychlené elektrony dopadají. **Charakteristické rentgenové záření** má nespojitě čárové spektrum, složené z jednotlivých čar. Vlnové délky těchto čar odpovídají materiálu anody, tj. strukturu elektronového obalu atomů (např. wolframu), které tvoří anodu. Se strukturou obalu jsou pak spojeny dovolené přechody mezi excitovanými vyššími energetickými stavy elektronu a stavy nižšími v souladu s výběrovými pravidly pro možné změny kvantových čísel - tomu pak odpovídá vzhled čárového spektra.

c) Comptonův jev

Jednoduchý teoretický výklad jevu podal v r. 1923 Compton. Studoval rozptyl rentgenových paprsků z molybdenové antikatomy v tuhé desce - v rozptýleném záření byly nalezeny spektrální čáry odpovídající původní vlnové délce λ a také nové vlnové délce $\lambda' > \lambda$. Rozdíl obou délek $\Delta\lambda = \lambda' - \lambda$ byl nazván Comptonovým posunem.

Výklad Comptonova jevu je založen na představě srážky fotonu s elektronem, který je jen slabě poután k atomu (je v podstatě volný). Pro tuto srážku platí zákon zachování energie ve tvaru

$$\hbar\omega + m_0c^2 = \hbar\omega' + mc^2$$

(ω je frekvence původního fotonu, ω' frekvence rozptýleného fotonu, m_0 klidová hmotnost elektronu - před srážkou lze vzhledem k nízkým tepelným rychlostem uvažovat klidovou hmotnost m_0 , m je hmotnost elektronu po srážce). Zákon zachování hybnosti lze napsat na základě použití kosinové věty ve tvaru

$$(mv)^2 = p_{\nu}^2 + p_{\nu'}^2 - 2p_{\nu}p_{\nu'}\cos\vartheta$$

($p_{\nu} = \hbar\omega/c$ je podle vztahu (B52) hybnost fotonu před srážkou, $p_{\nu'} = \hbar\omega'/c$ je podle vztahu (B52) hybnost fotonu po srážce, v je rychlost elektronu po srážce, ϑ je úhel, který svírá směr původní hybnosti p_{ν} a směr hybnosti $p_{\nu'}$).

Po úpravách spojených s vyloučením neznámé rychlosti v elektronu lze získat vztah pro Comptonův posun

$$(B55) \quad \Delta \lambda = \lambda' - \lambda = \frac{h}{m_0 c} (1 - \cos \mathcal{G}).$$

Graficky lze vztah (B55) znázornit např. v polárních souřadnicích kardioidou (srdcovkou), je-li zvolen směr dopadajících fotonů za polární osu. Comptonův posun $\Delta \lambda$ je pak pro daný úhel \mathcal{G} roven vzdálenosti počátku souřadnicové soustavy od kardioidy.

Vztah (B55) platí teoreticky pro foton libovolné hmotnosti (B52). Je-li však hmotnost fotonu (B52) o hodně menší než klidová hmotnost elektronu m_0 (tj. $\hbar\omega \ll m_0 c^2$) neplatí zákon zachování energie, ani vztah (B55) dosti přesně. Ztráta hybnosti fotonu je příliš nepatrná, Comptonův posun je neměřitelně malý. Comptonův jev lze tedy pozorovat jen pro fotony s velkou hmotností (tj. pro fotony rentgenového záření nebo gama záření), nikoliv pro fotony viditelného světla.

Comptonův posun je rovněž neměřitelný při srážce fotonu s elektronem pevně vázaným k jádru - pro takovou srážku by bylo nezbytné nahradit ve vztahu (B55) klidovou hmotnost elektronu klidovou hmotností jádra. Právě proto, že i atomy látek s velkým počtem slabě poutaných elektronů (např. tuha) obsahují i vnitřní elektrony pevně vázané k jádru, lze v rozptýleném záření pozorovat původní i rozptýlenou vlnovou délku.

d) Anihilační a obrácený anihilační jev

Při anihilačním jevu vznikají při setkání např. elektronu a pozitronu (tj. elektronu a jeho antičástice) fotony zářivého záření. Částice a antičástice anihilují, tj. „vyzáří se“ proměnou např. ve dva fotony velmi tvrdého záření. Jelikož klidová energie elektronu $m_0 c^2$ je 0,511 MeV, vzniklý foton má frekvenci odpovídající rovnosti $\hbar\omega = m_0 c^2$, tj. $\nu = 1,24 \cdot 10^{20}$ Hz. Takové frekvence leží v oboru gama záření.

Při obráceném anihilačním jevu obvykle proniká foton do velké blízkosti jádra, kterému odevzdá jen malou část své hybnosti. Je-li potom energie fotonu větší než energie odpovídající hmotnosti dvou elektronů, může vzniknout dvojice elektron-pozitron s výslednou kinetickou energií T danou vztahem

$$(B56) \quad T = \hbar\omega - 2 m_0 c^2.$$

Vznik dvojice elektron-pozitron lze pozorovat u gama záření vydávaného např. radioaktivním beryliem Be ($\hbar\omega = 5$ MeV) nebo také u fotonů velmi pronikavého rentgenového záření vytvořeného např. synchrotronem.

Kontrolní otázky:

- 1) Popište vlnově korpuskulární dualismus volného monochromatického elmg. pole
- 2) Popište Gaussián jako model fotonu
- 3) Popište vlnovou stránku fotonu
- 4) Popište korpuskulární stránku fotonu
- 5) Vymezte podmínky kvantové optiky
- 6) Popište Einsteinovu fotoelektrickou rovnici
- 7) Vysvětlete vznik brzdného rtg. záření
- 8) Vysvětlete vznik charakteristického rtg. záření
- 9) Popište Comptonův posun
- 10) Popište anihilační a obrácený anihilační jev

Literatura:

**Záškodný,P.: Přehled základů teoretické fyziky (s aplikací na radiologii).
Didaktis, Bratislava, 2005**

**Záškodný,P.: Survey of Principles of Theoretical Physics (with application
to radiology). Algoritmus, Avenira Foundation, 2006**

**Kozlovská,D., Skalická,Z., Záškodný,P.: Úvod do praktika z radiologické
fyziky. JU, České Budějovice, 2005**

**Záškodný,P., Tarábek,P.: Didaktická komunikace a její aplikace.
MFI, ročník 16, ISSN 1210-1761**