Přemysl Záškodný

PŘEHLED ZÁKLADŮ TEORETICKÉ FYZIKY (s aplikací na radiologii)

Publikace je výsledkem grantového projektu CURRICULUM STUDIES RESEARCH GROUP Bratislava, Slovensko

Grantové projekty vycházejí z Data Mining Approach a Curricular Process

Přehled základů teoretické fyziky

(s aplikací na radiologii)

© CURRICULUM 2018. Přepracované a doplněné třetí vydání

Žádná část této publikace nesmí být publikována a šířena žádným způsobem a v žádné podobě bez výslovného svolení autora a vydavatelství Curriculum

Za případné komentáře k publikaci předem děkují autor a vydavatelství. Komentáře je možné zaslat na níže uvedené adresy autora a vydavatelství

Udělení grantu CURRICULUM STUDIES RESEARCH GROUP, Bratislava, Slovensko

Vydavatel Curriculum, Cholupická 39, 142 00 Praha 4, yahoo&phcurriculum.com

Autor Doc. RNDr. Přemysl Záškodný, CSc., B.Němcové, Pavilon H, Nemocnice ČB CZ-370 01 České Budějovice, Czech Republic, e-mail: pzaskodny@yahoo.com

Působiště autora Jihočeská univerzita v Českých Budějovicích Vysoká škola finanční a správní, Praha

Recenzenti 1.vydání (Czech Version, ISBN 80-89160-25-5) Doc. MUDr. Leoš Navrátil, CSc. (Czech Republic) Mgr. Milan Předota, Ph.D. (Czech Republic) Doc. MUDr. Jozef Rosina (Czech Republic) Ing. Pavol Tarábek, Ph.D. (Slovakia)

Recenzenti 2.vydání (English Version, ISBN 80-902491-9-1) Prof. Aleksandr Nickoalevich Grebenyuk, M.D., DSc. (Russia) Prof.RNDr. Demeter Krupka, DrSc. (Czech Republic) Prof.Ing. Miroslav Rakovič. DrSc. (Czech Republic) Assoc.Prof. Raffaele Vitolo (Italy)

Recenzenti přepracovaného a doplněného 2.vydání (English Version, ISBN 978-80-87894-02-6, co-author Petr Procházka, M.Sc.) Assoc.Prof. Jana Škrabánková, Ph.D. (Czech Republic) Dr. Daniele Margarone, Ph.D. (Italy)

Recenzenti přepracovaného a doplněného 3.vydání (Czech Version) Assoc.Prof. Jana Škrabánková, Ph.D. (Czech Republic) Petr Procházka, M.Sc. (Czech Republic)

ISBN 978-80-87894-17-0

OBSAH

PREFACE (PŘEDMLUVA) 10

- a) Acknowledgementsb) Curricular Process as Complex Tool of Data Mining Approach
- c) Analytical Synthetic Modeling as Partial Tool of Data Mining Approach
- d) Legend to General Model of Analytical Synthetic Structure

ÚVOD I Struktura radiologie 16

- I.1. Postupný vývoj radiologie jako klinického oboru
- I.2. Vymezení radiologie jako klinického oboru
- I.3. Složky studia radiologie
- I.4. Fyzikální složka studia radiologie
- I.5. Jak vytvářet fyzikální složku profilu absolventa studia radiologie

ÚVOD II Struktura fyziky	19
II.1. Členění fyzikálních objektů podle počtu a velikosti II.2. Podstata fyzikálních objektů II.3. Vývoj fyzikálních objektů do současnosti II.4. Stavy a změny stavů fyzikálních objektů II.5. Konkrétní formy pohybu fyzikálních objektů II.6. Předmět zkoumání fyziky a metody zkoumání II.7. Metody statistické fyziky II.8. Metody nestatistické fyziky	19 20 23 27 28 29 31 32
	31

A. STATISTICKÁ FYZIKA	38
1. Volba typu statistickeho souboru (Přílohy A1,A2,A3)	38
1.1. Statistický a nestatistický přístup ve fyzice	38
1.2. Termodynamický stav, termodynamický pohyb	10
1.3 Statistický soubor makrosystémů	40
1 3 1 Zavedení statistického souhoru	42
1.3.2. Nezávislé a identické makrosystémy jako prvky statistického souboru	
1.3.3. Mikrokanonický, kanonický a grandkanonický statistický soubor	
1.4. Tolmanova hypotéza a základní charakteristiky termodynamických stavů	44
SOUHRN 1	45

2. Typologie makrosystémů (Přílohy A1.A2.A3)	16
2.1. Statistické soubory tvořené makrosystémy volných částic	40
2.2. Makrosystémy volných částic při zachování diskrétnosti hodnot energie	40
2.2. Waxwellův-Boltzmannův, Fermiho a Boseho nlvn	46
2.2.2. Nedegenerovaný a degenerovaný Fermilo a Boseho plyn	
2.3. Makrosystémy volných částic při zachování perozlišitelnosti částic	48
2.3.1 Makrosystémy klasických a kvantových částic	-10
2.3.2. Kvantový statistický přístup	
2.3.3. Klasický statistický přístup	
SOUHRN 2	50
	50
3 Kyoziklasický statistický přístup (Dřílahy A1 A2 A2)	
3. EXAMPLE 1 CONTRACT STRUCTURE (FILLOUT) (FILLOUT) (FILLOUT) (FILLOUT)	51
3.1. Relativisticky statisticky pristup k makrosystemu volnych castic	51
3.2. Váhový faktor energetické hladiny a odlišnost mezi makrosystémy	51
rozlišitelných a nerozlišitelných částic	01
3.2.1. Váhový faktor energetické hladiny	
3.2.2. Faktor degenerace energetické hladiny	
3.2.3. Určení váhového faktoru pro jednoduché případy	
3.2.4. Odlišnost rozlišitelných a nerozlišitelných částic	
3.3. Váhový faktor termodynamického stavu a entropie jako míra	55
neuspořádanosti makrosystému	
3.3.1. Entropie ve fenomenologické termodynamice	
3.3.2. Vztah entropie a váhového faktoru termodynamického stavu	
3.3.3. Entropie ve statistické termodynamice	
3.3.4. Odvození Boltzmannovy rovnice	50
3.4. Podstata kvaziklasického přístupu	58
3.4.1. Spojení klasických a kvantových předpokladů	
3.4.2. Obecne určeni počtu kvaziklasických stavu $2.4.2$. Už v $(1 - 1)$	
3.4.3. Urcení počtu kvaziklasických stavů v energetických vrstvách	
3.4.5. Kvaziklasická rozdělovací funkce a její hodnoty	
3.4.6. Obrysový algoritmus kvaziklasického statistického přístupu	
SOLIHEN 3	61
4. Termodynamické funkce makrosystému (Přílohy A1,A4,A5)	62
4.1. Členění termodynamických funkcí	62
4.2. Termodynamické postuláty	62 62
4.3. Větv termodvnamické	02
4 4 Přehled termodynamických potenciálů	64
4 4 1. Zavedení poimu termodynamický potenciál	66
4.4.2. Zavedení vnitřní energie	
4.4.3. Zavedení volné energie	
4.4.4. Zavedení entalpie	
4.4.5. Zavedení Gibbsova potenciálu	
4.4.6. Zavedení chemického potenciálu	
4.4.7. Zavedení grandkanonického potenciálu	
4.4.8. Zdůvodnění zavedení termodynamických potenciálů	
SOUHRN 4	71
	, 1
5. Metodiky zkoumání makrosystémů (Přílohy A1 A4 A5)	70
5.1 Metodika zaveházající z grandkanonického statistického souhoru	12
5.1.1. Kvantová rozdělovací funkce, velký stavový součet, souhorová střední hodnoty	72
5.1.2 Fermiho-Diracovo rozdělení	
5.1.3. Boseho-Einsteinovo rozdělení	

5.1.4. Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení

5.1.5. Využití kvaziklasického statistického přístupu	
5.1.6. Algoritmus metodiky	
5.2. Metodika vycházející z kanonického statistického souboru	77
5.2.1. Kvantová rozdělovací funkce, malý stavový součet, souborové střední hodnoty	
5.2.2. Kvaziklasická úprava malého stavového součtu pro částici	
5.2.3. Kvaziklasická úprava translačního stavového součtu pro částici	
5.2.4. Kvaziklasická úprava strukturního stavového součtu pro částici	
5.2.5. Algoritmus metodiky	
SOUHRN 5	
6. Ilustrace konkrétních makrosystémů (Přílohy A1,A4,A5)	82
6.1. Záření černého tělesa	82
6.2. Kmity krystalové mříže	84
6.3. Statistický smysl stavové rovnice ideálního plynu	86
SOUHRN 6	88

SOUBOR	PŘÍLOH A Model st	ruktury statistické fyziky	89
Příloha A1	Skladba modelu		89
Příloha A2	Znázornění modelu struktury	1., 2. a 3. kapitoly	90
Příloha A3	Popis modelu struktury	1., 2. a 3. kapitoly	91
Příloha A4	Znázornění modelu struktury	4., 5. a 6. kapitoly	92
Příloha A5	Popis modelu struktury	4., 5. a 6. kapitoly	93
	-		15

B. NESTATISTICKA FYZIKA	94
(Nestatistický přístup ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů)	74
7. Klasická mechanika (Přílohy B1,B2,B3,B8)	94
7.1. Vymezení klasické mechaniky	04
7.2. Formalismy klasické mechaniky	94
7.2.1. Posloupnost kroků lagrangeovského a hamiltonovského formalismu	96
7.2.2. Ilustrace kroků lagrangeovského a hamiltonovského formalismu	
7.3. Zákony zachování jako integrály pohybových rovnic	98
7.3.1. Zákon zachování mechanické energie	,0
7.3.2. Další zákony zachování, počet integrálů pohybových rovnic	
7.4. Mechanický kmitavý pohyb oscilátoru	101
7.4.1. Obecný a periodický pohyb kmitavý	
7.4.2. Rovnoměrný pohyb kruhový, harmonický pohyb kmitavý	
7.4.3. Dynamický a kinematický popis harmonického pohybu kmitavého	
7.4.4. Skládání harmonických kmitů	
7.4.5. Tlumený a nucený pohyb kmitavý	
7.5. Mechanické vlnění	106
7.5.1. Druhy vlnění, interference vlnění, vlnová délka	
7.5.2. Kinematický a dynamický popis mechanického vlnění	
7.5.3. Zvuk, ultrazvuk	
7.6. Mechanika kontinua	100
7.6.1. Předmět zkoumání mechaniky kontinua	109
7.6.2. Vymezení modelů kontinua	
7.6.3. Použití modelů kontinua	
7.6.4. Hlavní metoda zkoumání pohybových stavů kontinua	
7.6.5. Ilustrace hlavní metody	

8. Klasické aplikace elektromagnetického pole (Přílohy B1, B2, B3, B8)	117
8.1. Elektromagnetické pole jako klasický a nestatisticky pojatý fyzikální objekt	117
8.2. Lagrangeovský a hamiltonovský formalismus pro elektromagnetické pole	117
8.3. Pohyb klasického náboje v konstantním elektromagnetickém poli	119
8.3.1. Lagrangeovy rovnice náboje	120
8.3.2. Příčné a podélné homogenní elektrické pole	
8.3.3. Homogenní magnetické pole	
8.4. Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole	123
8.4.1. Maxwellova teorie elektromagnetického pole, zřídla a víry pole	
8.4.2. Matematicky popis zridel a viru a jejich vyber	
8.4.4. Důsledky Maxwellových rovnic	
8.5. Elektromagnetické vlnění	100
8.5.1. Maxwellovy rovnice pro volné elektromagnetické pole	128
8.5.2. Monochromatická elektromagnetická vlna	
1	
9. Kvantová mechanika (Přílohy B1,B4,B5,B8)	131
9.1. Postulátová výstavba kvantové mechaniky	131
9.1.1 Diracův princip absolutní malosti	
9.1.2. Princip korespondence	
9.1.3. Princip komplementarity, princip neurčitosti	
9.1.4. Interpretační postuláty, princip superpozice	
9.2 Hlavní metoda kvantové mechaniky pro stacionární stavy	140
0.2. Aplikaca hlavní metody atom vodíku	140
9.3.1 Evzikální vymezení problému stanovení počátečních podmínek	141
9.3.2. Vymezení úplného souboru operátorů a veličin	
9.3.3. Soustava vlastních rovnic operátorů	
9.3.4. Nalezení systému vlastních funkcí a vlastních hodnot a úplného souboru kvantových čísel	
9.3.5. Nalezení tvarů "pravděpodobnostních oblaků"	
9.3.6. Interpretace vysledku popisem stacionarnich stavu pomoci hodnot kvantových čísel	
9.4. Aplikace niavni metody - slupkovy model atomoveno jadra	152
9.5. Prostorova struktura molekuly vody	155
	157
10. Relativisticka mechanika (Přílohy B1,B6,B7,B8)	15/
10.1. Popis struktury relativistické mechaniky	157
10.2. Relativistická dynamika speciální teorie relativity	160
10.2.1. Pohybová rovnice relativistické dynamiky	
10.2.2. Einsteinuv vztah pro energii	
10.3. Friedmannovy modely (viz Dodatek 7, 8.255)	163
10.3.2. Hubbleův zákon a jeho tvary	
10.3.3. Přesnost měření vzdáleností v astronomii – supernovy typu Ia	
10.3.4. Robertsonova metrika	
10.3.5. Friedmannovy rovnice a Einsteinova gravitační rovnice	
10.3.6. Odvození Friedmannových rovnic	
10.3.7. Výsledky Friedmannových modelů v případě decelerace rychlosti expanze	
10.4. Keiativisticka kosmologie s kosmologickou konstantou (viz Dodatek 7, s.265)	163
(popularni vyklad)	
10.4.1. v yznam innacni expanze 10.4.2 Hustota vesmíru Friedmannovy modely inflace a kosmologická konstanta	
10.4.3. Pracovní verze dnešního obrazu vesmíru	

11. Kvant	tové a relativistické aplikace elektromagnetického pole	164
(Přílohy B)	I,B4,B5,B6,B7,B8)	
11.1. Kvant	ová teorie volného monochromatického elektromagnetického pole	
11.1.1. Aj	plikace hlavní metody kvantové mechaniky pro stacionární stavy	
1112 Př	ževod množiny oscilátorů na soubor fotonů	
11.1.3. Sr	ovnání klasické a kvantové teorie monochromatického elektromagnetického pole	
11.2. Kvant	ová teorie volného polychromatického elektromagnetického pole	167
11.2.1. Po	oloklasická teorie interakce se zářením	
11.2.2. O	perátory sekundárního kvantování	
11.2.3. Sr	ovnání kvantové a kvaziklasické teorie polychromatického elektromagnetického pole	
11.3. Vlnov	e korpuskulární dualismus fotonu	171
11.3.1.V	Inovy balik jako model fotonu	
11.3.2. V	niova siranka iotonu orpuskulární stránka fotonu	
11.4. Elektr	romagnetické záření	175
11.4.1. K	lasická a kvantová podoba elektromagnetického záření, členění optiky	1/5
11.4.2. El	lektromagnetické spektrum]
11.4.3. K	vantová optika	
11.5. Relati	vistický elektron v elektrostatickém poli	183
		10.6
12. Klasic	cké, kvantové a relativistické aplikace jaderné fyziky	186
(Přílohy B)	1,B2,B3,B4,B5,B6,B7,B8)	
12.1. Stavba	a atomového jádra	186
12.2. Jaderr	né záření	188
12.2.1. Př	firozená a umělá radioaktivita	
12.2.2. R	ozpadový zákon	
12.2.3. A	bsorpeni zakon	194
12.3. Velici	ny a jednotky jademeno zaremi	198
12.4. Detek	ce a dozimetrie jademeno zarem	190
12.3. Pozor	ovani a urychiovani naoliych cashe jademych zareni	201
12.0. Jaderr		201
SUIBUB	PĎÍI OH P. Model struktury postatistické fyziky	202
	Shladha madaha	203
Prilona BI	Skiadoa modelu	203
Prilona B2	Znazorneni modelu klasicke nestatisticke ryziky	204
Prilona B3	Popis modelu klasicke nestatisticke tyziky	205
Prilona B4	Znazorneni modelu kvantove nestatisticke tyziky	207
Priloha B5	Popis modelu kvantove nestatisticke fyziky	209
Priloha B6	Znazornění modelu relativistické nestatistické fyziky	211
Priloha B7	Popis modelu relativistické nestatistické fyziky	212
Přiloha B8	Výklad modelu nestatistické fyziky v 7. až 12. kapitole	214

215
215
216

14. Zdroje ionizujícího záření	
a interakce ionizujícího záření s prostředím	218
14.1. Popis zdrojů	218
14.2. Popis interakcí	220
15. Měření ionizujícího záření	223
15.1. Veličiny a jednotky ionizujícího záření	223
15.2. Detekce a dozimetrie ionizujícího záření	223
16 Fyzikální nonis radiodiagnostiky a radioteranie	225
16.1 Ponis radiodiagnostiky	225
16.2 Popis radioteranie	225
	226
17. Fyzikální popis zobrazovacích postupů	228
17.1. Nukleární medicína	228
17.2. Rentgen	228
17.3. Termografie	229
17.4. Nukleární magnetická rezonance	230
17.5. Sonografie	231
18. Fyzikální základy magnetické rezonance	232
18.1. Fyzikální podstata.	232
18.2. Fyzikální základy technického využití	233

D. DOD	АТКҮ	234
Dodatek 1	Potřebné matematické znalosti pro aplikaci na radiologii	234
Dodatek 2	Procvičení statistické fyziky	236
Dodatek 3	Řešené příklady ze statistické fyziky	239
Dodatek 4	Procvičení nestatistické fyziky	244
Dodatek 5	Řešené příklady z nestatistické fyziky	247
Dodatek 6	Procvičení ionizujícího záření a jeho aplikací v radiologii	254
Dodatek 7	Friedmannovy modely, relativistická kosmologie s kosmologickou	
	konstantou (populární výklad) – kapitoly 10.3., 10.4.	255
	l	
Index		269
	[
Bibliogra	phy	275
Constants		278
Author, Reivewers		279

SEZNAM ZKRATEK A OZNAČENÍ

MS	makrosystém, makrosystémy
FT	fenomenologická termodynamika
ST	statistická termodynamika
STR	stav termodynamické rovnováhy, stavy termodynamické rovnováhy
STN	stav termodynamické nerovnováhy, stavy termodynamické nerovnováhy
VTP	vratný termodynamický proces, vratné termodynamické procesy
MSS	mikrokanonický statistický soubor, mikrokanonické statistické soubory
KSS	kanonický statistický soubor, kanonické statistické soubory
GSS	grandkanonický statistický soubor, grandkanonické statistické soubory
1.VT	první věta termodynamiky
2.VT	druhá věta termodynamiky
3.VT	třetí věta termodynamiky
SS	statistický soubor, statistické soubory
MBP	Maxwellův-Boltzmannův plyn
FP	Fermiho plyn
BP	Boseho plyn

SEZNAM OBRÁZKŮ

Fig. 1	General model of analytical - synthetic (cognitive) structure
Obr. 2	Zavedení sférických souřadnic
Obr. 3	Graf a znázornění radiální hustoty pravděpodobnosti pro $n = 1, l = 0$
Obr. 4	Grafy směrových hustot pravděpodobností pro elektrony s, p, d $(l = 0, 1, 2)$
Obr. 5	Vlnový balík jako model fotonu
Obr. 6	Gaussián jako model pravděpodobnostního popisu fotonu
Obr. 7	Závislost koeficientu stěsnání P na nukleonovém čísle A
Obr. 8	Závislost vazební energie jádra vztažené na jeden nukleon na nukleonovém čísle
Obr. 9	Průběh výsledného potenciálu v okolí jádra s nábojem Ze (potenciálová jáma jádra)
Obr. 10	Závislost poloměru jádra r_i na nukleonovém čísle A
Obr. 11	Časový průběh radioaktivní přeměny
Obr. 12	Závislost rozpadové (přeměnové) konstanty na energii alfa částic
Obr. 13	Braggova křivka pro alfa záření radia C ve vzduchu
Obr. 14	Závislost doletu ve vzduchu na počáteční energii alfa částic
Obr. 15	Závislost ionizačního proudu I na napětí U

SEZNAM TABULEK

Tab. 1	Tři generace kvarků a leptonů
Tab. 2	Přehled základních interakcí
Tab. 3	Přehled některých operátorů
Tab. 4	Úplný soubor operátorů pro atom vodíku
Tab. 5	Systém vlastních hodnot operátorů pro atom vodíku
Tab. 6	Elektromagnetické spektrum
Tab. 7	Přehled ionizujících a neionizujících záření používaných v radiologii

PREFACE

a) Acknowledgements

This book (3nd Edition) has come into being as the result of a project grant "Data Mining Approach" given to the authors by The Curriculum Studies Research Group (Slovakia). The 1st and 2nd Editions had been supported by The Avenira Foundation (Switzerland) and was refilled by data mining approach and several new pieces of knowledge in the area of Relativistic Cosmology (only through of popular explanation). The author acknowledges the Research Group not only for the favourable terms of the grant but also for the care and patience shown to him during its preparation. Thanks are also due to reviewers for their help and support.

b) Curricular Process as Complex Tool of Data Mining Approach

Submitted book can be taken as the expression of conceptual curriculum. The conceptual curriculum can be taken as the part of curricular process. The curricular process can be taken as the complex tool of data mining approach. It will be briefly described.

The structural elements of data mining will be described as *primary step*:

Data Mining – an analytical synthetic way of extraction of hidden and potentially useful information from the large data files (continuum data-information-knowledge, knowledge discovery). Described analytical synthetic way can be taken as the important assumption for problems solving by relevant scientific branch

Data Mining Techniques – system functions of the structure of formerly hidden relations and patterns (e.g. classification, association, clustering, prediction). The delimitation of system functions can be taken as the important assumption for structuring the relevant scientific branch

Data Mining Tool – a concrete procedure how to reach the intended system functions. Data mining tools can be divided to the complex tools (the basic characteristics of relevant scientific branch) and to the partial tools (the essential procedures how to find the structures of problems solved)

Complex Tool - a resolution of the complex problem of relevant scientific branch (the succession of phases in the course of solution of complex problem, cumulatively it is connected with methodology of relevant scientific branch)

Partial Tool - a resolution of the partial problem of relevant scientific branch (the construction of global structure or partial structures of problems which are investigated by relevant scientific branch)

Result of Data Mining – a result of the data mining tool application (the described structure of methodology of relevant scientific branch, the descriptions of structures of investigated partial problems

The significant way of structure description – by means of algorithms of problem solving

Representation of Data Mining Result – a model formalization of this what is expressed (usually the formalization of model construction of problems resolution)

The significant content of model formalization – by means of algorithms of problem solving

Visualization of Data Mining Result – an optical retrieval of the data mining result (usually the optical visualization of model expression of problems resolution)

The significant optical visualization – by means of algorithms of problem solving

The data mining approach as realization of data mining cycle will be described as *secondary step*. Data mining cycle is given by the succession of stages enabling to obtain the required results of data mining. Such succession is expressing the structure of data mining cycle. Data mining approach is connected with the sequential realization of individual stages, data mining approach is given by the global realization of data mining cycle structure. The individual stages of data mining cycle will be described:

- Data Definition, Data Gathering (data accumulation data in the relation to an identified problem)

- **Data Preprocessing, Data Processing** (progressive processing data on the basis of identified problem analysis, analytical delimitation of the partial problems)

- Data Mining Techniques and Data Mining Tools (delimitation of system functions of formerly hidden relations and patterns, application of concrete procedures in the course of problem solving, by means of abstraction the delimitation of partial problems essence)

- **Discovering Knowledge or Patterns** (transformation of data in the framework of a continuum data-information-knowledge)

By means of synthesis and intellectual reconstruction of identified problem in the form of algorithm of problem solving

- **Representation and Visualization of Data Mining Results** (usually construction of structural model of worked problem out, optical retrieval of reached results)

The structural model and optical retrieval in the light of problem solving algorithm

- **Application** (utilization of the resolved problems for next development of scientific theory or for substantiation of practical application)

Utilization of problem solving algorithm

The Curricular Process can be taken not only as complex tool of data mining approach in the area of Science Education but also of methodological algorithm of Science Education (specifically also Physics Education). It will be described shortly now as *tertiary step*:

i. Variant form of curriculum – the form of education content existence

ii. The curriculum – education content

iii. The variant forms of curriculum have got the universal structure (four structural elements – sense and interpretation, set of objectives, conceptual knowledge system, factor of following transformation)

iv. The variant forms of curriculum were selected on the basis of fusion of Anglo-American curricular tradition and European didactic tradition

v. The curricular process is defined as the succession of transformations T1-T5 of curriculum variant forms:

conceptual curriculum (output of T1, the first variant form of curriculum) - the communicable scientific system of relevant natural science

intended curriculum (output of T2, the second variant form of curriculum) - the educational system of relevant natural science

projected curriculum (output of T3, the third variant form of curriculum) - the instructional project of relevant natural science

implemented curriculum-1 (output of T3, the fourth variant form of curriculum) - the preparedness of educator to education in the area of relevant natural science

implemented curriculum-2 (output of T4, the fifth variant form of curriculum) – the results of education in the area of relevant natural science

attained curriculum (output of T5, the sixth variant form of curriculum) - applicable results of education in the area of relevant natural science

On the basis of previous explanations (*primary step*, *secondary step*, *tertiary step*) the submitted book can be taken as the description of conceptual curriculum (communicable scientific system) in the area of physics education.

c) Analytical Synthetic Modeling as Partial Tool of Data Mining Approach

There is very effective approach that enables the identification, formulation and solution of problems – the approach issuing from the theory of systems. The system approach is characterized by identification of the system to be investigated, its structure is given by subsystems and their mutual operation, and then by delimitation of the superior system, which determines the investigated system by defining functions. Ascertainment of the surroundings of the investigated system and the interaction between the surroundings and the investigated system are steps of the system approach that are of no less importance. The realization of system approach can be closely connected with data mining approach and its curricular process.

Within the framework of the interaction between the curricular process and its conceptual curriculum (see theory of education communication established originally by J. Brockmeyer) and the need of visualization the data mining results, it is necessary to express and communicate appropriately the knowledge of physics. For this purpose new methods were devised which reflect a cognitive structure of physics concepts and knowledge. These methods utilize models and net graphs and can be applied through analytical synthetic modeling and matrix modeling. The main diagonal of delimited matrix can be tightly associated with problem solving algorithm. The analytical synthetic and matrix models may be taken as suitable expression of conceptual curriculum.

In submitted book above all the analytical synthetic modeling will be used for visualization of cognitive structure of physics concepts and knowledge. Analytical synthetic modeling (but also matrix modeling) can be taken as partial tool of data mining approach.

The applicability of the curricular process was confirmed by means of several other scientific disciplines. It has been shown that the theory of education communication (expressed by the curricular process) is acceptable not only for physics education but also for research of the problems concerning other scientific disciplines.

For a general model of the cognitive structure of problem investigation (without the concrete contents of conceptual knowledge) see both figure Fig.1 "General model of analytical synthetic (cognitive) structure" and the legend to Fig.1.

Fig.1 represents a general introduction that is needed for basic understanding of the analytical synthetic modeling of a cognitive structure. For this reason, Fig.1 as well as its Legend should be studied in detail – it is visualization and description of conceptual curriculum.



Fig.1

General model of analytical synthetic structure

d) Legend to General Model of Analytical Synthetic Structure (Fig.1)

- **a** (<u>Identified Complex Problem</u>) Investigated area of reality, investigated phenomenon
- B_k (<u>Analysis</u>) Analytical lay out within the framework of the corresponding physics conceptual curriculum
 B₁, B₂, ..., B_k Realization of analysis inside of Fig.1
- $\mathbf{b_k}$ (<u>Partial Problems PP-k</u>) Result of analysis: essential attributes and features of the phenomenon investigated $b_1, b_2, ..., b_k$ Results of analysis inside of Fig.1
- $\begin{array}{lll} \textbf{c}_k & (\underline{Partial\ Solutions\ of\ PP-k}) Result\ of\ abstraction:\ partial\ concepts,\ partial\ knowledge,\ various\ relationships\ etc.\\ c_1,\ c_2,\ c_3,\ c_4,\ \ldots,\ c_k Results\ of\ abstraction\ inside\ of\ Fig.1 \end{array}$
- D_k (Synthesis) Synthetic finding of dependencies among the results of abstraction within the framework of the corresponding physics conceptual curriculum
 D₁, D₂, D₃, D₄, ..., D_k Realization of synthesis inside of Fig.1
- $\begin{array}{ll} \textbf{d}_k & (\underline{Partial\ Conclusions\ PC-k}) \ \text{-}\ Result\ of\ synthesis:\ principle,\ law, \\ & dependence,\ continuity\ etc. \\ & d_1,\ d_2,\ \ldots,\ d_k Results\ of\ synthesis\ inside\ of\ Fig.1 \end{array}$
- e (<u>Total Solution of Complex Problem "a"</u>) Result of intellectual reconstruction: the analytical synthetic structure of physics conceptual curriculum

Analytical synthetic model (see Fig.1 and Legend to Fig.1) of the cognitive structure of problem investigation by the application of data mining approach reflects the process of the writing of submitted book. The models of cognitive structures have created the space not only for the elaboration of the conception of this book as a whole but also of its individual parts and their chapters. The conceptual curriculum of physics is represented by analytical synthetic models which are closely connected with the partial tool of data mining approach.

ÚVOD I Struktura radiologie

I.1. Postupný vývoj radiologie jako klinického oboru

Historicky je vznik radiologie spojen s diagnostickým a terapeutickým využitím rentgenového záření. Radiologie se rozdělila na radiodiagnostiku (vyšetřovací metody se zobrazováním výsledků) a radioterapii (léčebné metody).

V dalším vývoji radiologie rozšířila svou působnost i na záření elektromagnetického spektra s ionizujícími účinky. Mezi tato záření patří především gama záření. Fotony těchto záření ionizují nebo destruují buď jen cílový mikroobjekt absorpcí energie fotonu, nebo ionizují nepřímo prostřednictvím nabitých částic uvolněných při interakcích rentgenového záření či gama záření s prostředím.

Posléze byly k radiologii přičleněny i další diagnostické zobrazovací metody související s některými druhy neionizujících záření elektromagnetického spektra a s některými druhy mechanického vlnění. Především magnetická rezonance ve vazbě na rádiové vlnění, termografie ve vazbě na infračervené záření a sonografie ve vazbě na ultrazvukové vlnění.

V současnosti se jak k diagnostickým zobrazovacím metodám, tak i k radioterapeutickým metodám přičlenily metody využívající korpuskulární jaderné i nejaderné záření, tvořené svazky částic (např. pozitronové zobrazovací systémy nebo negativní beta zářiče zaváděné přímo do nádorových ložisek, ozařování nádorů svazky protonů, neutronů a iontů). Mezi korpuskulárními zářeními rovněž převažují ionizující záření tvořená nabitými částicemi, které jednak ionizují prostředí přímo po celé dráze svého letu, jednak destruují např. atomy či molekuly nádorové tkáně ionizací nárazem. Lze však využívat i záření tvořená nenabitými částicemi. Nenabité částice ionizují a případně i destruují podobně jako fotony buď jen zasažený cílový mikroobjekt nebo ionizují nepřímo prostřednictvím nabitých částic uvolněných při interakcích nenabitých částic s prostředím (např. neutronová terapie).

I.2. Vymezení radiologie jako klinického oboru

Radiologii jako vědní směr lze z hlediska aplikací v medicíně definovat jako vysoce specializovaný a klinicky významný obor, založený na diagnostickém a terapeutickém využití:

- přímo a nepřímo ionizujících elektromagnetických a korpuskulárních záření
- neionizujících elektromagnetických záření v oblasti rádiových vln a infračerveného záření
- mechanického ultrazvukového vlnění.

Zkratkou lze radiologii definovat jako klinický obor založený na diagnostickém a terapeutickém využití ionizujícího záření, tj. klinický obor vycházející z ionizujícího záření a jeho aplikací v medicíně (v této zkratce je implicitně skryto i využití rádiových vln, infračerveného záření a mechanického ultrazvukového vlnění).

I.3. Složky studia radiologie

Absolvent studia radiologie by měl mít ve svém profilu dvě základní složky: radiodiagnostiku a radioterapii. Tyto dvě složky by v podrobnějším členění měly nalézt odezvu v nukleární medicíně (otevřené a uzavřené zářiče, vyšetřování a zobrazování výsledků), v klasické radiografii (rentgenová terapie, rentgenová diagnostika, počítačová tomografie), v termografii (zobrazování výsledků vyšetřování bezkontaktní a kontaktní termografií), v magnetické rezonanci (zobrazování výsledků vyšetřování nukleární magnetickou rezonancí) a v sonografii (vedle možností léčby ultrazvukem - v rámci radiologie spíše vyšetřování a zobrazování výsledků vyšetření). Nezanedbatelná je také oblast ochrany před ionizujícím zářením.

Absolvent studia radiologie v širším slova smyslu by měl být připraven i pro potřebné oblasti radiochemie a radiobiologie. Důvodem je časové fázování účinků ionizujícího záření při jeho působení na člověka. První fáze je fyzikální fáze spojená s absorpcí energie ionizujícího záření s následkem excitace, ionizace a případné destrukce atomů a molekul buněk. Doba trvání fyzikální fáze je 10⁻¹³ s. Druhá fáze je chemická fáze spojená s produkcí volných radikálů reagujících se všemi komponentami ozářených buněk. Doba trvání chemické fáze je 10⁻⁵ s. Třetí fáze je biologická fáze spojená s odpovědí ozářeného organismu nebo jeho části na všech úrovních: molekulární, buněčné, tkáňové, orgánové a na úrovni organismu jako celku. Doba trvání biologické fáze může být i velmi dlouhá v řádu měsíců či let.

I.4. Fyzikální složka studia radiologie

Základy fyziky pro studující radiologie vyžadují nejen pochopení fyziky jako celku, ale také vybudování základních představ z oblasti klasické, kvantové a relativistické statistické i nestatistické fyziky. Jen tak lze správně pochopit fyzikální podstatu radiodiagnostiky a radioterapie, nukleární medicíny, rentgenu, termografie, magnetické rezonance a sonografie. U absolventů vysokoškolského studia radiologie nejde jen o pochopení fyzikální podstaty uvedených složek profilu absolventa, ale také o tvůrčí aplikace založené i na získaných fyzikálních poznatcích.

I.5. Jak vytvářet fyzikální složku profilu absolventa studia radiologie

K formování fyzikální složky profilu absolventa studia radiologie je nejdříve potřebné získat motivaci. Ta může pramenit např. z hlubokého zájmu o studované bakalářské nebo magisterské radiologické obory na lékařských fakultách, zdravotně sociálních fakultách nebo i jiných fakultách vysokých škol. Pokud se podaří identifikovat vyjmenované složky profilu absolventa studia radiologie ve studijních oborech, v jejichž názvu se vyskytuje např. "Radiologický asistent", "Aplikovaná radiobiologie", "Aplikovaná radiochemie", "Lékařská biofyzika", je potvrzeno, že zvládnutí potřebných fyzikálních poznatků je nezbytné.

Pak následuje velmi důležité rozhodnutí - zda by mělo mít zvládnutí fyzikálního základu charakter jen účelový nebo charakter vedoucí ke schopnosti tvůrčí aplikace. V prvním případě (účelové zvládnutí) si stačí nalistovat Část C "Ionizující záření a jeho aplikace v radiologii", u každé kapitoly si nalézt potřebné odkazy na fyzikální poznatky z Části A "Statistická fyzika" a z Části B "Nestatistická fyzika" a s těmito poznatky se při četbě 13. až 18. kapitoly Části C průběžně seznamovat. V druhém případě (tvůrčí zvládnutí) je potřebné pokusit se pochopit fyziku jako celek prostřednictvím Úvodu II "Struktura fyziky" a přitom sledovat

model struktury fyziky (který je modelem, jak efektivně přemýšlet při studiu) uvedený v závěru Úvodu II.

Podaří-li se strukturu fyziky pochopit, lze se zaměřit na prostudování dvou základních přístupů ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů - na přístup statistický vyložený v Části A "Statistická fyzika" v 1. až 6. kapitole a na přístup nestatistický vyložený v Části B "Nestatistická fyzika" v 7. až 12. kapitole. Upřímně řečeno, nestatistická fyzika je pro radiologii důležitější. I z tohoto důvodu jsou závěry 1. až 6. kapitoly "Statistické fyziky" opatřeny "Souhrny 1 až 6" - tyto souhrny umožňují rychlou orientaci v jednotlivých kapitolách. Kapitoly "Nestatistické fyziky" takovými souhrny opatřeny nejsou.

Osvojování statistické fyziky lze opět sledovat prostřednictvím modelů struktury jednotlivých kapitol uvedených na konci Části A pod názvem "Soubor příloh A". Obdobně i osvojování nestatistické fyziky lze sledovat prostřednictvím modelů uvedených na konci Části B, tentokrát pod názvem "Soubor příloh B". Modely uvedené na konci výkladu statistické fyziky důsledně odrážejí strukturu 1. až 6. kapitoly. Důvodem je usnadnit případnou rychlou orientaci ve statistické fyzice pomocí modelů a souhrnů jednotlivých kapitol bez hlubšího studia. Modely uvedené na konci výkladu nestatistické fyziky již neodrážejí strukturu jednotlivých kapitol, nýbrž ukazují, co má v 7. až 12. kapitole charakter klasický, kvantový nebo relativistický. Lze to snadno odhadnout již podle názvů 7. až 12. kapitoly.

Podaří-li se pochopit statistickou a především nestatistickou fyziku na základě prostudování Částí A a B, nelze pochybovat o tom, že zvládnutí základů fyziky bude mít tvůrčí charakter. O tom se lze přesvědčit pročtením Části C "Ionizující záření a jeho aplikace v radiologii", čtení 13. až 18. kapitoly této části by mělo být pohodlnou procházkou.

K procvičení osvojených fyzikálních základů slouží Dodatky. Vedle návodů k procvičení statistické fyziky (Dodatek 2), nestatistické fyziky (Dodatek 4) a radiologických aplikací (Dodatek 6) obsahují dodatky také řešené příklady ze statistické fyziky (Dodatek 3) a nestatistické fyziky (Dodatek 5). Dodatek 7 rozšiřuje relativistickou mechaniku o Friedmannovy modely vesmíru a o Relativistickou kosmologii (pojatou jen na základě populárního výkladu).

Řešené příklady se snaží především reagovat na poněkud strohá odvození poskytnutá v rámci výkladu statistické a nestatistické fyziky. Dále lze v Dodatku 1 nalézt přehled potřebných matematických znalostí a několik řešených příkladů na výpočet úplných diferenciálů. V Dodatcích nejsou vzpomenuty potřebné poznatky z matematické statistiky a počtu pravděpodobnosti - zvláště pojmy "Statistický soubor", "Rozdělovací funkce" a "Souborová střední hodnota" by bylo přínosné si zopakovat. K rychlému nalezení hledaného poznatku, poznatkového celku, odstavce kapitoly či kapitoly slouží vedle "Obsahu" na začátku knihy především "Index" umístěný za "Dodatky".

Na závěr důležité doporučení - kniha "Přehled základů teoretické fyziky (s aplikací na radiologii)" se bude dobře číst, budou-li po ruce dvě doplňkové publikace. Jedna, která smysluplným a souhrnným způsobem předkládá středoškolskou fyziku, druhá, která smysluplně a tvůrčím způsobem rozvíjí fyzikální aplikace v oblasti radiologie. Tou první publikací by mohla být výborná kniha "Odmaturuj z fyziky", kterou napsal P. Tarábek a kterou vydalo v r. 2004 nakladatelství Didaktis. Tou druhou publikací by mohla být kniha "Survey of Principles of Theoretical Physics", zpracovaná autory P.Záškodným a P.Procházkou a vydaná v r. 2014 vydavatelstvím Curriculum.

ÚVOD II Struktura fyziky

K porozumění fyziky jako jedné z přírodních věd je nejdříve potřebné vymezit přírodní objekty a jejich vlastnosti, které fyzika zkoumá.

Přírodní objekty zkoumané fyzikou budou popsány

- 1. na základě jejich členění podle počtu a velikosti,
- 2. z hlediska jejich podstaty,
- 3. z hlediska jejich vývoje až do současnosti.
- Vlastnosti přírodních objektů, které zkoumá fyzika, jsou dány
- 4. stavy fyzikálních objektů a změnami těchto stavů,
- 5. konkrétními formami pohybu fyzikálních objektů.

Po pochopení úkolů 1. až 5. popsaných v odstavcích II.1. až II.5. bude možné vymezit v odstavcích II.6. až II.8. nejen předmět, který zkoumá fyzika jako konkrétní přírodní věda, ale popsat také metody, které fyzika při zkoumání používá. Odstavce II.1. až II.8. již budou představovat úplný popis struktury fyziky jako celku. V odstavci II.9. bude proto možné znázornit model struktury fyziky. Čtení celého textu lze značně zpřehlednit a usnadnit, bude-li s jednotlivými odstavci sledováno také jejich umístění ve znázorněném modelu.

II.1. Členění fyzikálních objektů podle počtu a velikosti

Počet zkoumaných fyzikálních objektů je kritériem pro rozlišení statistického a nestatistického přístupu ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů. Je-li zkoumán nestatisticky pojatý objekt jako jeden fyzikální objekt nebo soustava několika fyzikálních objektů, je zkoumání záležitostí oborů nestatistické fyziky (např. klasická mechanika, kvantová mechanika, relativistická mechanika). Je-li zkoumán statisticky pojatý objekt jako fyzikální objekt složený z obrovského počtu dílčích fyzikálních objektů nebo je-li zkoumán přímo tento obrovský počet dílčích fyzikálních objektů, je zkoumání záležitostí oborů statistické fyziky (např. fenomenologická termodynamika, statistická termodynamika). Soubor obrovského počtu zkoumaných fyzikálních objektů obvykle nese název makrosystém (předpona makro poukazuje na velký počet zkoumaných objektů, nikoliv na velikost zkoumaných fyzikálních objektů).

Podle velikosti lze nestatisticky pojaté fyzikální objekty dělit do tří kategorií: makrofyzikální objekty (makroobjekty), mikrofyzikální objekty (mikroobjekty) a megafyzikální objekty (megaobjekty).

Makrofyzikální objekty (se souhrnným názvem "**makrosvět**") jsou přístupné přímému pozorování smysly, optickým mikroskopem nebo dalekohledem průměrné velikosti. Patří mezi ně pozemské objekty až k velkým molekulám, ale i Slunce s planetami a hvězdy tvořící galaxii "Mléčná dráha". Makrofyzika vykládá stavy a změny stavů makrofyzikálních objektů a často přitom nepřihlíží k mikrostruktuře látek a interakcím mikroobjektů, ani nepřipouští vliv kosmických objektů na pozemské jevy. K makrofyzice patří celá klasická fyzika s výjimkou molekulové fyziky (kinetické teorie látek).

Mikrofyzikální objekty (se souhrnným názvem "mikrosvět") jsou z části přístupny pozorování nejmodernějšími elektronovými a iontovými mikroskopy, z části lze jejich

existenci dokázat nepřímými experimentálními metodami (např. experimentálními informacemi, které poskytují čárová spektra prvků) založenými na teoretických představách a odvozených abstraktními úvahami. Mezi mikroobjekty patří zejména molekuly, atomy, ionty, atomová jádra a elementární částice. Mikrofyzika vykládá stavy a fyzikální jevy spojené s mikroobjekty na základě mikrostrukturních vlastností těchto objektů. Zahrnuje především molekulovou, atomovou a jadernou fyziku, fyziku pevných látek, fyziku vysokých energií a relativistickou a nerelativistickou kvantovou fyziku, která je teoretickým základem všech jmenovaných oborů.

Megafyzikální objekty (se souhrnným názvem "**megasvět**") jsou z části přístupné pozorování nejsilnějšími optickými dalekohledy, z části lze jejich existenci dokázat nepřímými experimentálními metodami (např. mohutnými radioteleskopy, které přijímají rádiové vlny z nejvzdálenějších míst kosmického prostoru) založenými na teoretických představách a odvozených abstraktními úvahami. Mezi megafyzikální objekty patří kupy galaxií a nadkupy těchto kup - soubor těchto metaskupin tvoří megastrukturu vesmíru jako celku. Megafyzika se zabývá studiem vlivu megafyzikálních objektů na stavy a fyzikální jevy. Interdisciplinárně zahrnuje astrofyziku, relativistickou kosmologii a kosmogonii. Z hlediska "čisté" fyziky patří k megafyzice především obecná teorie relativity a gravitace a další navazující obory jako např. speciální teorie relativity.

II.2. Podstata fyzikálních objektů

Z hlediska klasifikace fyzikálních objektů podle velikosti na mikrofyzikální, makrofyzikální a megafyzikální objekty je zřejmé, že fyzikální objekty se strukturou vyššího řádu vznikají složením ze struktur řádů nižších. K vystižení podstaty fyzikálních objektů je potřebné popsat především struktury nejnižších úrovní.

Tyto struktury odrážejí nejmenší známé mikroobjekty - elementární částice. Elementární částice lze dělit na dva základní typy - **fermiony** (jejich spin je roven lichému násobku $h/4\pi$ a platí pro ně Pauliho vylučovací princip) a **bosony** (jejich spin je roven sudému násobku $h/4\pi$ a neplatí pro ně Pauliho vylučovací princip). Většina elementárních částic má svou antičástici s opačným nábojem, při jejich setkání dochází k anihilaci částice a antičástice. Např. při anihilaci elektronu a antielektronu (pozitronu) obě částice zanikají a na jejich místě vznikají dva až tři vysoce energetické fotony zánikového záření. Jen elektricky neutrální bosony nejsou při svém vzniku nebo zániku spojeny se svou antičásticí.

Fermiony lze členit na kvarky a leptony a fermionové hadrony (baryony). Kvarky a leptony jsou tvořeny třemi generacemi (tzv. vůněmi) kvarků, elektronů a neutrin. Každá generace obsahuje dva kvarky, elektron nebo nějakou jeho variantu a jeden druh neutrina (viz Tab.1). Souhrnně mezi kvarky a leptony patří 6 kvarků (u - kvark up, d - kvark down, c - kvark charm, s - kvark strange, t - kvark top, b - kvark bottom), 3 varianty elektronů (běžný elektron, mion, tauon) a 3 druhy neutrin (elektronové neutrino, mionové neutrino, tauonové neutrino). Všechno, co bylo do současnosti fyzikou prozkoumáno jako strukturní stavební prvky fyzikálních objektů, se skládá z nějaké kombinace těchto tří generací kvarků a leptonů a z jejich antičástic. Elektrony mají záporný elektrický náboj o velikosti elementárního elektrického náboje $e = 1,6.10^{-19}$ C, který byl ještě v nedávné minulosti dále nedělitelný. Kvarky mají vedle elektrického náboje, který je třetinovým nebo dvoutřetinovým dílem náboje elementárního, rovněž jednu ze tří možných variant tzv. náboje barevného nebo také náboje silného. Vnitřní struktura kvarků a leptonů není známá. Nejznámějšími

1.generace	částice	hmotnost	náboj (násobky <i>e</i>)
	elektron elektronové neutrino	0,00054 < 10^{-8}	-1 0 2/2
	up - kvark u down - kvark d	0,0047 0,0074	-1/3
2.generace	částice	hmotnost	náboj (násobky <i>e</i>)
	mion	0,11	-1
	mionové neutrino	< 0,0003	0
	charm - kvark c	1,6	2/3
	strange - kvark s	0,16	-1/3
3.generace	částice	hmotnost	náboj (násobky <i>e</i>)
	tauon	1,9	-1
	tauonové neutrino	< 0,033	0
	top - kvark t	189	2/3
	bottom - kvark b	5,2	-1/3

fermionovými hadrony (baryony) jsou protony (kvarkové složení uud) a neutrony (kvarkové složení udd). Fermionové hadrony mají vnitřní kvarkovou strukturu.

Tab.1 Tři generace kvarků a leptonů (hmotnost v jednotkách hmotnosti protonu)

Rovněž bosony lze členit na bosony bez známé vnitřní struktury (gravitony, fotony, gluony, intermediální nebo také slabé kalibrační bosony Z a W) a na bosonové hadrony s vnitřní kvarkovou strukturou (mezony, z nichž důležitý je např. pion s nábojem +e a s kvarkovým složením ud, kde d je antikvark). Všechno, co bylo do současnosti fyzikou prozkoumáno jako nositelé vzájemného působení mezi strukturními stavebními prvky fyzikálních objektů, ať již to existuje v přírodě nebo to bylo vyrobeno experimentálně, je tvořeno bosony.

Struktury fyzikálních objektů jsou tvořeny strukturními stavebními prvky a nositeli vzájemného působení mezi stavebními prvky. Vzájemné působení umožňuje existenci fyzikálního objektu jako celku. Fyzikální objekty se strukturami nejnižších řádů mají jako stavební prvky fermiony, nositeli vzájemného působení jsou pak bosony.

Struktury nejnižších řádů jsou tři. Podle typu vzájemného působení je lze nazvat Fundamentální silná interakce, Zbytková silná interakce a Slabá interakce. Tyto tři interakce mají jednu společnou vlastnost, dosah vzájemného působení je velmi krátký (uplatňují se jen

u těch nejmenších mikrofyzikálních objektů). Pokud je však mikroobjekt v dosahu jejich působení, mnohonásobně převyšují interakce s neomezeným dosahem. Struktury vytvářené interakcemi s neomezeným dosahem jsou dvě - Elektromagnetická interakce a Gravitační interakce. Tyto interakce vzhledem k svému neomezenému dosahu dominují při vytváření struktur spojených s makrofyzikálními i megafyzikálními objekty. Tři struktury vytvářené interakcemi s velmi krátkým dosahem a dvě struktury vytvářené interakcemi s neomezeným dosahem budou popsány.

Struktura "**Fundamentální silná interakce**" je zodpovědná za stabilitu nukleonů - tj. protonů a neutronů. Stavebními prvky této struktury jsou ve zjednodušené podobě kvarky, nositeli fundamentální silné interakce pak gluony. Silná interakce je spojena s působením gluonového pole na tzv. barevný (silný) náboj kvarků.

Struktura "**Zbytková silná interakce**" je zodpovědná za stabilitu jader atomů. Stavebními prvky této struktury jsou ve zjednodušené podobě nukleony, nositeli zbytkové silné interakce piony (opět však jde o existenci vzájemného působení mezi kvarky a gluonovým polem).

Struktura "Slabá interakce" je zodpovědná nikoliv za stabilitu mikroobjektů, ale za jejich přeměnu, případně rozpad. Stavebními prvky těchto přeměnových struktur jsou opět fermiony (kvarky, leptony), nositeli slabé interakce pak intermediální (slabé kalibrační) bosony Z^0 , W^- a W^+ . Slabá interakce je spojena s působením na tzv. slabý náboj příslušných stavebních prvků - slabý náboj lze charakterizovat pomocí izospinu. Izospin úzce souvisí s tzv. multiplicitou, která je dána počtem částic lišících se jen elektrickým nábojem. Např. multiplicita nukleonu je rovna 2 - nukleon je tvořen dubletem proton, neutron. Přeměnová struktura "Slabá interakce" vede např. k přeměně jaderného nukleonu "neutron" na jaderný nukleon "proton", elektronové antineutrino a elektron známého radioaktivního beta záření. Základem této přeměny je přeměna kvarku d na kvark u a vzájemné působení mezi kvarky zprostředkované polem intermediálních (slabých kalibračních) bosonů W⁻.

Struktura "**Elektromagnetická interakce**" je zodpovědná za stabilitu nejen atomů jako celku, ale také za stabilitu řady makroobjektů. Její dosah je neomezený a projevuje se proto v mikrosvětě i makrosvětě. Stavebními prvky jsou konkrétní látkové prvky fyzikálních objektů popsané veličinou "elektrický náboj" (např. protony jader, elektrony obalu atomu, ale i nositelé makronáboje), nositeli elektromagnetické interakce pak fotony, které jsou úzce spojeny s elektromagnetickým polem.

Struktura "**Gravitační interakce**" je zodpovědná za stabilitu a vývoj řady makroobjektů i megaobjektů. Vzhledem ke své slabosti při srovnání se silnou a slabou interakcí se neuplatňuje v mikrosvětě v oblasti dosahu těchto interakcí. Stavebními prvky této struktury jsou látkové prvky makrofyzikálních a megafyzikálních objektů popsané veličinami "hmotnost" a "energie", nositeli gravitační interakce jsou pak gravitony, které jsou úzce spojeny s gravitačním polem.

Zatímco struktury tří nejnižších řádů vytvářejí mikrofyzikální objekty (stavebními prvky i nositeli vzájemného působení jsou elementární částice), dvě struktury vytvářené interakcemi s neomezeným dosahem mohou vytvářet nejen mikrofyzikální objekty, ale i makrofyzikální objekty a megafyzikální objekty. V tabulce Tab. 2 je uveden přehled čtyř základních interakcí, které jsou podkladem pro popis tří struktur nejnižšího řádu a dvou struktur vytvářených interakcemi s neomezeným dosahem.

Pomocí těchto pěti struktur je možné pochopit podstatu libovolného fyzikálního objektu jako vzájemné působení látek a polí. Z hlediska forem hmoty, které zkoumá fyzika, představují látka a pole dvě základní formy hmoty - látkovou formu hmoty a polní formu hmoty. Fyzikální objekty jsou tvořeny stavebními prvky (které jsou často tvořeny látkovou formou hmoty) a nositeli vzájemného působení mezi stavebními prvky (kteří jsou často tvořeni polní formou hmoty). U složitějších fyzikálních objektů může být kombinace látek a polí velmi komplikovaná.

Název interakce	Nositel vzájemného působení	Hmotnost
silná (fundamentální, zbytková)	gluon	0
elektromagnetická	foton	0
slabá	intermediální bosony W, Z	86, 97
gravitační	graviton	0

Tab.2 **Přehled základních interakcí** (klidová hmotnost nositele vzájemného působení uváděna v jednotkách klidové hmotnosti protonu)

Objev Higgsova bosonu (125 GeV) v r. 2012 potvrdil popis základních interakcí uvedených v tabulce Tab.2. Higgsovo pole (246 GeV) obdrželo v průběhu vývoje fyzikálních objektů krátce po Bing Bangu (přibližně 10⁻¹² s) nenulovou hodnotu. Prostřednictvím interakcí fermionů a intermediálních bosonů W, Z s Higgsovým bosonem (narušení levopravé symetrie slabé interakce) získaly fermiony a intermediální bosony W, Z nenulovou klidovou hmotnost.

II.3. Vývoj fyzikálních objektů do současnosti

Podstatu fyzikálního objektu a tím i celého fyzikálního světa (tvořeného mikrosvětem, makrosvětem a megasvětem a zkoumaného statistickou a nestatistickou fyzikou) lze pochopit jako vzájemné působení látek a polí. Vzájemné působení látek a polí je spojeno s pojmy "stavební prvek fyzikálního objektu", "nositel vzájemného působení mezi stavebními prvky", "tři struktury nejnižšího řádu" a "dvě struktury vytvářené interakcemi s neomezeným dosahem". Z těchto pojmů rovněž vyplývá členění elementárních částic (z nichž jsou tvořeny fyzikální objekty) na fermiony a bosony a přehled čtyř dílčích interakcí (interakce silná, interakce slabá, interakce elektromagnetická a interakce gravitační). Interakce silná je často dělena na interakci silnou fundamentální a interakci silnou zbytkovou. Proto je často uváděna existence pěti dílčích interakcí.

Vývoj fyzikálních objektů lze popsat pomocí vývojových fází vesmíru až k dnešní vývojové fázi, v jejímž rámci se člověk snaží poznávat fyzikální svět. Vývojové fáze vesmíru jsou vhodným ilustračním podkladem pro popis postupného rozpadu původní jediné obecné interakce na pět dílčích interakcí. Rozpad obecné interakce na interakce dílčí lze chápat jako postupnou redukci dokonalé symetrie vesmíru. Tato redukce se projevuje přechodem od jedné interakce, charakterizované stejnými vlastnostmi pro celý vesmír, k interakcím dílčím, které se již svými vlastnostmi vzájemně odlišují. Během tohoto postupného rozpadu vznikaly konkrétní fyzikální objekty v podobě, v níž jsou známy v současnosti.

V současné době přijímaná vědecká teorie o původu a vývoji vesmíru vychází ze sledu tří na sebe navazujících vývojových kosmologických scénářů. První vývojový kosmologický scénář lze nazvat jako "Teorii všeho (Theory of everything - TOE)".

Základním rysem tohoto scénáře je existence spojené obecné interakce a jeho trvání od počátku rozpínání vesmíru (počátek vesmíru je populárně nazýván "Velký třesk") až do času 10⁻⁴³ s. Zbývající dva vývojové kosmologické scénáře vycházejí ze střídání standardního a inflačního rozpínání vesmíru. Druhý scénář trval od časového okamžiku 10⁻⁴³ s do okamžiku 10⁻³⁴ s a nese název "standardně-inflační vesmír". Třetí scénář trvá od okamžiku 10⁻³⁴ s až do současnosti a nese název "poinflační standardní vesmír". Současnost lze zhruba vystihnout 15 miliardami let, které uplynuly od počátku rozpínání. Během **prvního scénáře TOE** nebyla symetrie vesmíru narušena. Během **druhého scénáře standardně-inflačního vesmíru** došlo k dvojímu narušení symetrie. Oddělila se gravitační interakce a byly vytvořeny podmínky pro oddělování silné interakce. Během **třetího scénáře poinflačního standardního vesmíru** se definitivně rozpadla původně obecná interakce na pět dílčích interakcí a vznikl současný obraz vesmíru.

a) Popis prvního vývojového scénáře TOE

<u>Původní obecná interakce "Unitární interakce</u>" je spojená s prvním scénářem TOE. **Teorie unitární interakce nese název "kvantová geometrodynamika" a je vlastně kvantovou teorií gravitace.** V současné době přijímaná vědecká teorie sjednocující obecnou teorii relativity a kvantovou mechaniku do kvantové geometrodynamiky vychází z předpokladu, že vesmír na samém počátku své existence prošel obdobím velmi extrémních podmínek - velmi vysoké teploty, energie, hustoty, veškerá hmota byla soustředěna do velmi nepatrného prostoru. Na počátku, asi před 15 miliardami let, došlo k jedinečné události, při níž se hmota vlivem kvantově gravitační fluktuace (odchylky od střední nulové hodnoty energie vyjádřené např. principem neurčitosti ve tvaru $\Delta E.\Delta t \ge h$) začala rozpínat z nepatrného prostoru. Není obtížné nalézt, kde k této rychlé expanzi došlo - tam, kde nyní sedíme, ale i všude jinde, neboť při "velkém třesku" byla různá místa soustředěna v nepatrném prostoru.

Počáteční zárodečný prostor nikdy nebyl pouhým bodem, nýbrž ve všech směrech mohl měřit asi jednu Planckovu délku. Planckova délka vyjadřuje spojení obecné teorie relativity (charakterizované Newtonovou gravitační konstantou κ a rychlostí světla *c*) a kvantové mechaniky (charakterizované Planckovou konstantou $\hbar = h/2\pi$). Jde o spojení teorií megasvěta a mikrosvěta v oblasti zárodečného prostoru. Teoretickým přístupem umožňujícím toto spojení je v současné době vedle teorie strun také teorie twistorů nebo i M-teorie. Např. podle teorie strun je každá elementární částice výrazem jednoho z možných způsobů kmitání uzavřené struny, jejíž délka je srovnatelná s Planckovou délkou. Zkoumáním jednotek konstant κ , *c* a $h/2\pi$ lze zjistit, že kombinace

$$[(h.\kappa)/(2\pi.c^3)]^{\frac{1}{2}}$$

má jednotky délky a hodnotu asi 1,6.10⁻³⁵. Planckova délka kolem 10⁻³⁵ m tak obsahuje jak časoprostorové vstupy κ , c, tak i vstupy kvantové mechaniky $h/2\pi$. Planckova délka je obvykle brána v přibližném smyslu, je jí míněna délka, která se liší od 10⁻³⁵ m nejvýše o několik řádů.

Obecná teorie relativity sama o sobě počáteční rychlé rozpínání z nepatrného prostoru neřeší. Její aplikací lze dojít k závěru, že v čase t = 0 byla velikost vesmíru nulová (vesmír byl pouhým bodem) a teplota T, energie E a hustota ρ měly nekonečné hodnoty. To signalizuje, že tento nekvantový teoretický model vesmíru, často nazývaný "velkým třeskem", neumí vysvětlit počátek rozpínání. Pouze spojení obecné teorie relativity a kvantové mechaniky umožňuje řešit počátek vesmíru. Teplota, energie a hustota sice byly obrovské, ale nikoliv nekonečné. Všechny prostorové rozměry (např. podle teorie superstrun, které

obsahují bosony i fermiony, je dimenze prostoročasu rovna 10) byly svinuty do nejmenší možné velikosti přibližně rovné Planckově délce. Velikost vesmíru tedy nikdy nemohla být menší než určitá dolní mez. Působila jediná obecná interakce "Unitární interakce", vesmír byl dokonale symetrický.

b) Popis druhého vývojového scénáře standardně-inflačního vesmíru

Po uplynutí Planckova času $10^{-43} s$ (čas ukončení scénáře TOE) byly např. podle teorie strun vybrány tři prostorové rozměry pro rozpínání, ostatní rozměry si zachovaly původní planckovskou velikost. Teplota činila asi 10^{32} K (tj. teplota asi 10^{24} krát větší než je v nitru Slunce) a vesmír prošel **první redukcí symetrie:** <u>z obecné "Unitární interakce"se vydělila</u> <u>gravitační interakce a ve velkém sjednocení GUT (tzv. grandunifikační teorie) zůstaly spojeny</u> <u>slabá, elektromagnetická a silná interakce.</u> Za těchto podmínek nastala realizace druhého vývojového scénáře standardně-inflačního, který trval asi do 10^{-34} s od začátku času. V rámci standardně-inflančního vývojového scénáře **po standardním předinflačním rozpínání** dominovalo v krátkém časovém údobí od 10^{-36} s do 10^{-34} s **inflační rozpínání**. U inflačního rozpínání probíhala expanze se zvětšující se rychlostí. U standardního předinflačního i standardního poinflačního rozpínání expanze probíhala a probíhá s rychlostí, která se zmenšuje - dominuje brzdící přitažlivá gravitační síla.

Inflační expanze vesmíru byla tedy odlišná od standardní expanze. Rychlost rozpínání se zvětšovala exponenciálně, v časovém intervalu od 10⁻³⁶ s do 10⁻³⁴ s se vzdálenosti ve vesmíru prodloužily asi 10³⁰ krát. Za tuto kratičkou dobu po velkém třesku vzrostla velikost vesmíru o více procent než za celých následujících 15 miliard let. **Vysvětlení inflační expanze** vychází z úvahy o odpudivé "antigravitační" síle, která se objevila jako důsledek předinflačního standardního rozpínání, a z úvahy o poklesu teploty pod teplotu kritickou, při níž měla původně nastat druhá redukce symetrie vesmíru oddělením silné interakce od slabé a elektromagnetické. Přes uvedený pokles teploty k druhé redukci symetrie nedošlo.

K pochopení vzniklé situace lze využít analogií s fázovými přechody u vody. Např. při opatrném snižování teploty vody lze dosáhnout teploty pod bodem mrazu, kdy voda zůstává v tomto "podchlazeném stavu" tekutá. Nenarušuje se "symetričnost tekuté vody", tj. stejné vlastnosti ve všech místech a směrech, na rozdíl od zamrznutí v ledové krystalky, které se uspořádají v určitém směru. Existence význačného směru je pak narušením symetrie zmrzlé vody. Nestabilní "podchlazený stav" obsahuje více energie, než kdyby došlo k fázovému přechodu. Obdobná existence přebytku energie při vývoji vesmíru mohla být vyřešena působením odpudivé "antigravitační" síly, vznikem inflační expanze v časovém intervalu od 10⁻³⁶ s do 10⁻³⁴ s. Tak se také vytvořily podmínky pro uskutečnění druhé redukce symetrie. **V časovém okamžiku 10⁻³⁴ s po velkém třesku byl ukončen druhý vývojový kosmologický scénář, scénář standardně-inflačního vesmíru**.

Pro existenci inflační expanze jsou k dispozici také experimentální poznatky. V roce 1965 bylo pomocí antény, která měla původně sloužit v telekomunikačních družicích, nalezeno elektromagnetické záření o teplotě 2,7 K. Toto reliktní záření jako pozůstatek velkého třesku v současnosti homogenně zaplňuje celý vesmír - má bez ohledu na směr, jímž byla natočena anténa, vždy stejnou teplotu. V konkrétních číslech - v každém m³ vesmíru (i v tom, v němž se právě nacházíme) je asi 400.10⁶ fotonů, které tvoří nikde nekončící moře mikrovlnného záření jako "dosvitu" velkého třesku.

Reliktní záření, homogenně rozložené ve všech směrech, by nemohlo vzniknout bez inflační expanze. Kdyby vždy fungovala pouze standardní expanze, nemohly by v minulosti docílit všechny objekty shodné teploty jako nezbytné podmínky pro vznik dokonale homogenního reliktního záření. Nastolení tepelné rovnováhy mohl zajistit signál, předávající informaci maximálně rychlostí světla. Při působení pouze standardní expanze, byly by např. po 10⁻⁹ s od velkého třesku objekty od sebe vzdáleny asi 30 cm. Tuto vzdálenost však signál letící rychlostí světla nemohl překonat za 10⁻⁹ s.

c) Popis třetího vývojového scénáře poinflačního standardního vesmíru

<u>Oddělení gravitační interakce</u> od velkého sjednocení GUT zbývajících interakcí je výsledkem druhého vývojového scénáře "standardně-inflačního vesmíru". Teorie gravitační interakce nese název "obecná teorie relativity", teorie velkého sjednocení GUT pak název "grandunification theory". Třetí vývojový scénář "poinflačního standardního vesmíru" již nepracuje s kvantovým aspektem gravitace a během první sekundy poinflační standardní expanze dochází k postupnému narušování velkého sjednocení GUT. Projevem je "uvěznění" kvarků v hadronech (tj. <u>oddělení fundamentální silné interakce</u>) a během dalších sekund začátek prvotní nukleosyntézy, tj. vznik nejjednodušších jader vodíku a helia se současným <u>oddělením zbytkové silné interakce</u>. Teorie silné interakce (fundamentální i zbytkové) nese název "kvantová chromodynamika". V důsledku oddělení záření od látky dochází v dalším vývoji také k <u>oddělení elektromagnetické interakce od slabé interakce</u>. Teorie spojené elektromagnetické a slabé interakce název "Maxwellova elektrodynamika", teorie oddělené slabé interakce pak název "Fermiho teorie".

Třetí vývojový scénář "poinflačního standardního vesmíru" lze až do současnosti rozčlenit na čtyři časově na sebe navazující vývojové éry:

Hadronová éra

- "uvěznění" kvarků v hadronech s oddělením fundamentální silné interakce,
- anihilace hadronů a antihadronů se vznikem tzv. baryonové asymetrie (přebytek nukleonů nad antinukleony),
- přebytek fotonů a leptonů

Leptonová éra

- oddělení neutrin od ostatní látky,
- vznik prvotní nukleosyntézy, tj. vznik prvních jader atomů společně s "uvězněním" nukleonů v jádrech dochází k <u>oddělení zbytkové silné interakce</u>,
- probíhání dalších nukleosyntéz až k vytvoření pralátky tvořené hvězdami a prvními galaxiemi,
- anihilace elektronů a pozitronů se vznikem nábojové neutrality vesmíru a jen s malým přebytkem elektronů,
- fotony ionizující vznikající atomy vodíku

Éra záření

- fotony již neionizují atomy vodíku, vzniká plynný vodík a hélium,
- oddělení záření od látky, neboť plynný vodík a plynné hélium jsou průzračné pro elektromagnetické záření,
- v důsledku oddělení záření od látky dochází k <u>oddělení elektromagnetické interakce od</u> slabé interakce

Éra látky (trvá dosud)

- vytváření velkorozměrných struktur ve vesmíru, tj. galaxií, kup galaxií, nadkup galaxií,

- gravitace se snaží scelit fyzikální objekty do kompaktních útvarů, tlak se snaží vyrovnávat nehomogenity v rozložení fyzikálních objektů,
- reliktní elektromagnetické záření jako pozůstatek po oddělení elektromagnetického záření od látky.

d) Výsledkem vývoje fyzikálního objektu jsou fyzikální objekty existující v současnosti. Doprovodným výsledkem tohoto vývoje je soustava pěti dílčích interakcí (gravitační, elektromagnetická, slabá, fundamentální silná a zbytková silná), které se postupně oddělovaly z jediné obecné "Unitární interakce" předinflační epochy.

II.4. Stavy a změny stavů fyzikálních objektů

Statistický přístup (statistická fyzika) a nestatistický přístup (nestatistická fyzika) ke zkoumání stavu a změny stavu fyzikálního objektu umožňují provést členění těchto stavů na termodynamické (statistické) a pohybové (nestatistické). Pohyby jako změny těchto stavů lze pak členit na pohyb statistický (termodynamický, neuspořádaný) a pohyb nestatistický (uspořádaný).

Stav fyzikálního objektu je určen souhrnem vnějších podmínek (vnějších parametrů), za nichž fyzikální objekt existuje, a souhrnem nezávislých vnitřních vlastností (vnitřních parametrů) zkoumaného fyzikálního objektu. Vnější a vnitřní parametry nesou společný název parametry stavové. Stavy fyzikálního objektu lze obecně dělit na stavy nerovnovážné (vnější nebo vnitřní parametry jsou funkcí času) a stavy rovnovážné (vnější i vnitřní parametry jsou ustálené, s časem neproměnné).

Souhrn těch vnějších parametrů, které souvisejí s pohybem fyzikálního objektu jako celku (není brána v úvahu vnitřní struktura fyzikálního objektu) je úzce navázán na **nestatistický přístup a nestatistickou fyziku**. Naopak, souhrn zbývajících vnějších parametrů a souhrn vnitřních parametrů (vnitřní struktura fyzikálního objektu je brána v úvahu) je úzce navázán na **přístup statistický a statistickou fyziku**.

Při zkoumání makrosystému, jehož pohyb jako celek není brán v úvahu, lze nejobecnější stavy rovnováhy nebo nerovnováhy nazvat stavy termodynamické rovnováhy nebo termodynamické nerovnováhy. Souhrnně lze pro stavy termodynamické rovnováhy a stavy termodynamické nerovnováhy používat název "termodynamické stavy". Typickým přístupem pro jejich popis je statistický přístup jako hlavní metoda fyziky. Přechody mezi termodynamickými statistické stavy isou spoienv s termodynamickými procesy. Termodynamický proces jako způsob změny stavových parametrů termodynamického stavu je popisem pohybu statistického (termodynamického, neuspořádaného) např. ve fenomenologické termodynamice a statistické termodynamice. Příkladem termodynamického procesu mohou být např. izotermický, izochorický, izobarický či adiabatický děj v ideálním plynu.

Naopak, je-li brán v úvahu pouze pohyb fyzikálního objektu jako celku (fyzikální objekt není považován za makrosystém), lze redukovat nejobecnější stavy rovnováhy na tzv. statické a stacionární stavy a nejobecnější nerovnovážné stavy na tzv. kvazistacionární a nestacionární stavy. Souhrnně lze pro statické, stacionární, kvazistacionární a nestacionární stavy používat název "pohybové stavy". Typickým přístupem pro popis pohybových stavů je nestatistický přístup jako hlavní metoda nestatistické fyziky. Příkladem členění pohybových stavů může být např. statická, stacionární, kvazistacionární a nestacionární teorie elektromagnetického pole (v Maxwellově fenomenologickém, tj. nestrukturálním pojetí) nebo stacionární a nestacionární stavy elektronu vázaného v obalu atomu. U elektronu ve stacionárním stavu se nemění s časem tvar "pravděpodobnostního oblaku", tj. nemění se s časem distribuce pravděpodobnosti výskytu elektronu v okolí jádra atomu. U elektronu v nestacionárních stavech se tvar "pravděpodobnostního oblaku" s časem mění. U fotonu ve stacionárním stavu se nemění s časem tvar jeho "pravděpodobnostního oblaku (Gaussiánu)", tj. nemění se s časem distribuce pravděpodobnosti vlnové délky fotonu. U fotonu v nestacionárních stavech se "Gaussián" s časem mění. Přechody mezi pohybovými stavy jsou spojeny s příslušnou formou pohybu nestatistického (uspořádaného).

II.5. Konkrétní formy pohybu fyzikálních objektů

Fyzikální objekty se statistickou povahou jsou nazývány makrosystémy, fyzikální objekty s nestatistickou povahou jsou členěny podle velikosti na mikrofyzikální, makrofyzikální a megafyzikální objekty. Makrosystémy se nacházejí v termodynamických stavech, jejichž změna jako změna příslušných stavových parametrů se nazývá pohybem statistickým (termodynamickým, neuspořádaným). Mikrobjekty, makroobjekty a megaobjekty se nacházejí v pohybových stavech, jejichž změna jako změna příslušných stavových parametrů se nazývá pohybem nestatistickým (uspořádaným).

Statistický (neuspořádaný) pohyb makrosystémů a nestatistický (uspořádaný) pohyb mikroobjektů, makroobjektů a megaobjektů lze názorně popsat jejich konkrétními formami:

a) Konkrétní formy pohybu makrosystémů

 Překrývání obrovského množství "pravděpodobnostních oblaků" a změny v překrývání u makrosystémů nerozlišitelných částic (např. u makrosystémů fermionů či látkových bosonů, tj. u Fermiho či Boseho plynu)

- Překrývání obrovského množství "Gaussiánů" a změny v překrývání u makrosystémů nerozlišitelných částic (např. u makrosystémů polních bosonů, tj. u fotonového plynu jako speciálního případu Boseho plynu)

- Tepelný neuspořádaný pohyb u makrosystémů rozlišitelných částic (např. u makrosystémů molekul klasického ideálního plynu)

b) Konkrétní formy pohybu megaobjektů

- Kosmologický pohyb vesmíru jako celku (např. podtřída modelů FRWL vyplývajících z Friedmannovy-Robertsonovy-Walkerovy-Lemaîtrovy metriky, která je buzena ideální kosmickou tekutinou s tlakem p=0, kosmologickou konstantou $\Lambda=0$ a indexy křivosti k=1,0,-1. Tato podtřída expandujících vesmírů vede při k=1 k uzavřenému vesmíru, při k=0 k Einsteinovu-de Sitterovu vesmíru a při k=-1 k otevřenému vesmíru)

 Kosmologický pohyb složek vesmíru (např. formování galaxií a kup galaxií z počátečních malých poruch metriky prostoročasu působením gravitačních nestabilit. Prostřednictvím "perturbované" metriky lze uskutečnit přechod od výlučně homogenního a izotropního FRWL vesmíru k diskrétním galaktickým strukturám při současném respektování izotropního rozložení reliktního záření)

c) Konkrétní formy pohybu makroobjektů

- Mechanický pohyb (např. pohyb rovnoměrný přímočarý v rámci rovnovážných pohybových stavů podle zákona setrvačnosti nebo křivočaré pohyby jako posloupnost nerovnovážných pohybových stavů podle zákona síly, posouvání částic kontinua, uspořádané toky částic)

- Elektromagnetické vlnění (např. šíření volného elektromagnetického pole prostorem při splnění podmínky obrovského počtu fotonů nebo elektromagnetické záření ve "vlnové zóně" záření)

 Vodivý a Maxwellův proud (např. uspořádaný pohyb elektronového plynu krystalovou mříží kovu při vloženém stejnosměrném napětí nebo uspořádaný kmitavý pohyb vázaných nábojů při polarizaci dielektrika střídavým elektrickým napětím)

d) Konkrétní formy pohybu mikroobjektů

- Pravděpodobnostní oblaky a změny jejich tvarů (např. neabsorbující a neemitující atom a naopak - absorpce či emise fotonu obalem atomu)

- Gaussiány a změny jejich tvarů (šíření fotonů v uzavřeném objemu a změny v obsazovacích číslech vyjadřujících počty koherentních fotonů v "nekoherentní směsi" vlnových délek).

II.6. Předmět zkoumání fyziky a metody zkoumání

a) Předmět zkoumání fyziky

Rozčlenění fyzikálních objektů podle velikosti a podle statistického a nestatistického přístupu k jejich zkoumání, rozpoznání současné podstaty fyzikálních objektů jako vzájemné působení látek a polí, popis termodynamických a pohybových stavů včetně popisu konkrétních forem pohybu spojených se změnami stavových parametrů - to vše umožňuje vymezit předmět, který zkoumá fyzika:

Fyzika zkoumá na základě vzájemného působení látek a polí termodynamické a pohybové stavy a změny těchto stavů (jako změny stavových parametrů) u makrosystémů a u mikrofyzikálních, makrofyzikálních a megafyzikálních objektů. Ve zkratce - fyzika zkoumá na základě vzájemného působení látek a polí stavy u statisticky a nestatisticky pojatých fyzikálních objektů a změny těchto stavů.

Toto vymezení předmětu fyziky odlišuje fyziku od ostatních přírodních věd. Např. ve srovnání s fyzikou, která zkoumá především "kvantitativní zákony vzájemného působení látek a polí", předmětem chemie jsou "zákonitosti slučování atomů v molekuly a jejich rozkladu v atomy a studium vlastností prvků a sloučenin". V mikrosvětě lze místo "vzájemného působení látek a polí" hovořit o "vzájemném působení látkových částic (látkových mikroobjektů) a polních částic (polních mikroobjektů)".

b) Statistický a nestatistický přístup k předmětu zkoumaného fyzikou

Dvě základní metody, které fyzika při zkoumání vlastností fyzikálních objektů používá, jsou statistický a nestatistický přístup. Statistický přístup je základem oborů

statistické fyziky a **na základě experimentálních zkušeností získaných experimentální fyzikou** vychází z aplikace pojmů matematické statistiky a počtu pravděpodobnosti na zkoumání termodynamických stavů a jejich změn u makrosystémů. Statistická fyzika si zavádí pojem statistického souboru jako množiny makrosystémů, hledá rozdělovací funkce přiřazující pravděpodobnosti jednotlivým termodynamickým stavům a určuje souborové střední hodnoty (statistické analogony) jako kvantitativní vyjádření hodnot stavových parametrů. **Nestatistický přístup** je základem oborů nestatistické fyziky a **na základě experimentálních zkušeností získaných experimentální fyzikou** vychází z aplikace pojmů především diferenciálního, integrálního, variačního a operátorového počtu na zkoumání pohybových stavů a jejich změn u mikrofyzikálních, makrofyzikálních a megafyzikálních objektů. Nestatistická fyzika si zavádí dynamický pojem pohybové rovnice jako vyjádření příčin pohybu a kinematický pojem pohybového zákona jako popisu pohybového stavu.

c) Tři dimenze statistického a nestatistického přístupu

Obě základní metody (statistický a nestatistický přístup) mají tři dimenze: Dimenzi klasickou, dimenzi kvantovou a dimenzi relativistickou. Kvantová dimenze vychází z respektování vlnově korpuskulárního dualismu, relativistická dimenze z respektování závislosti prostoru a času na rozložení a pohybu fyzikálních objektů.

Obory kvantové fyziky nahrazují u jednoho látkového kvantového mikroobjektu (např. elektron vázaný v obalu atomu) nebo u kvantově mechanického soustavy látkových mikroobjektů (např. soustava elektronů obalu atomu) klasickou dráhu množinou míst, v nichž se látkový kvantový objekt nebo kvantově mechanická soustava látkových objektů nachází v daném čase s největší pravděpodobností.

U polního kvantového mikroobjektu nebo u kvantově mechanické soustavy polních mikroobjektů (např. foton nebo skupina fotonů uzavřená v objemu *V*) jsou nahrazovány např. klasické vlny nebo proudy částic množinou vlnových délek, kterých nabývá polní kvantový mikroobjekt nebo kvantově mechanická soustava polních mikroobjektů v daném čase s největší pravděpodobností.

Tato nahrazení byla zajištěna vyvinutím nového matematicko fyzikálního formalismu primárního kvantování u látkových mikroobjektů a sekundárního kvantování u polních mikroobjektů.

Respektování vlnově korpuskulárního dualismu u makrosystémů mikroobjektů zajišťují obory kvantové fyziky respektováním existence množiny "pravděpodobnostních oblaků" (s odlišnou interpretací u látkových a polních částic) a jejich vzájemným překrýváním, které vede vedle statistické interpretace jevů také k nerozlišitelnosti jednotlivých mikroobjektů.

Obory relativistické fyziky nahrazují klasické pojmy "absolutní prostor" a "absolutní čas" plochým Minkowského prostoročasem ve speciální teorii relativity a zakřiveným Riemannovým prostorem v obecné teorii relativity. Toto nahrazení bylo zajištěno vyvinutím nového relativistického matematicko fyzikálního formalismu.

Jak kvantová, tak i relativistická dimenze neumožňují na rozdíl od dimenze klasické "přímé" pozorování zkoumaných fyzikálních objektů. Jejich existenci lze většinou dokázat nepřímými experimentálními metodami ("nepřímým" pozorováním zprostředkovaným přístrojem) založenými na teoretických představách a odvozených abstraktními úvahami.

Obě základní metody (statistický a nestatistický přístup) se rozčleňují do šesti dílčích přístupů ke zkoumání stavů a jejich změn u fyzikálních objektů. Statistická fyzika by v rámci statistického přístupu měla vyložit klasický statistický přístup, kvantový statistický přístup a relativistický statistický nestatistický nestatistický přístup. Nestatistická fyzika by pak v rámci nestatistického přístupu měla vyložit klasický nestatistický přístup, kvantový nestatistický přístup a relativistický nestatistický přístup.

II.7. Metody statistické fyziky

a) Klasická dimenze statistické fyziky

Klasický statistický přístup bude zkoumat termodynamické stavy makrosystémů tvořených klasickými částicemi. Prostředky tohoto zkoumání budou obvyklé: Klasické statistické soubory makrosystémů a klasické rozdělovací funkce přiřazující termodynamickým stavům pravděpodobnosti. Klasická rozdělovací funkce umožňuje výpočty souborových středních hodnot jako statistických analogonů termodynamických veličin. Příkladem může být střední kvadratická rychlost molekul ideálního plynu, která vyplývá z Maxwellova rozdělení rychlostí. Maxwellovo rozdělení rychlostí je důsledkem použití obecných rozdělovacích funkcí pro makrosystémy volných (tj. neinteragujících) a rozlišitelných částic a s nimi spojených souborových středních hodnot, které nesou název Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení. Jiným příkladem je stavová rovnice ideálních plynů zachycující vztah mezi parametry rovnovážných termodynamických stavů. Stavová rovnice ideálních plynů je ovšem také vztahem kvantovým.

b) Kvantová dimenze statistické fyziky u makrosystémů látkových částic

Kvantový statistický přístup ke zkoumání makrosystémů látkových částic je spojen se zkoumáním vlnově korpuskulárního dualismu souboru neuspořádaně se pohybujících látkových částic. Příkladem je nízkoteplotní modifikace supratekutého kapalného hélia He II, která vzniká při teplotě 2,18 K z hélia He I. Lze ukázat, že de Broglieova vlnová délka atomů kapalného hélia He II je srovnatelná s meziatomovými vzdálenostmi - soubor atomů supratekutého He II bude kvantovým objektem, kvantovou kapalinou. Soubor atomů supratekutého hélia He II lze nahradit makrosystémem fononů a rotonů (kvazičástic, které mají spin roven sudému násobku $h/4\pi$). Tyto makrosystémy je potřebné zkoumat prostřednictvím aparátu kvantového statistického přístupu. U statistických souborů tvořených makrosystémy volných bosonů je potřebné vycházet z kvantových rozdělovacích kvantových souborových středních hodnot odpovídajících funkcí а Boseho-Einsteinovu rozdělení.

U statistických souborů tvořených makrosystémy volných fermionů (např. makrosystém vodivostních elektronů jako částic elektronového plynu neuspořádaně se pohybujících krystalovou mřížkou kovu) je v rámci aparátu kvantového statistického přístupu potřebné používat Fermiho-Diracova rozdělení.

c) Kvantová dimenze statistické fyziky u makrosystémů polních částic

Kvantový statistický přístup ke zkoumání makrosystémů polních částic je spojen se zkoumáním vlnově korpuskulárního dualismu souboru neuspořádaně se pohybujících polních částic. Příkladem je obecné polychromatické elektromagnetické pole. Obecné

polychromatické elektromagnetické pole je spojeno s výskytem obrovského množství neuspořádaně se pohybujících fotonů s různými frekvencemi v rozlehlém prostoru (objem V, v němž se elektromagnetické pole nachází, lze považovat za nekonečný). Obecné elektromagnetické pole je často v interakci s nedaleko umístěnými elektrickými náboji. Na obecné elektromagnetické pole je potřebné pohlížet jako na makrosystém fotonů a zkoumat je prostřednictvím statistického přístupu. **Kvantový statistický přístup ke zkoumání makrosytému fotonů** bude spojen s aparátem statistického souboru tvořeného makrosystémy volných bosonů a s odpovídajícími rozdělovacími funkcemi. Tyto rozdělovací funkce a s nimi spojené souborové střední hodnoty vedou k Boseho-Einsteinovu rozdělení.

d) Relativistická dimenze statistické fyziky

Relativistická dimenze statistického přístupu respektuje složitost makrosystémů tvořených obrovskými počty mikroobjektů. Její aplikace vycházela především z rozpoznání důležitosti role celkové energie makrosystému a promítnutí této energie na úroveň jednotlivých mikroobjektů, které vytvářejí makrosystémy volných částic. Dosazení relativistického vztahu pro energii do tvaru příslušné rozdělovací funkce (přiřazující pravděpodobnosti termodynamickým stavům makrosystémů volných částic) umožnilo vystihnout relativistické rysy zkoumání termodynamických stavů makrosystémů.

e) Kvaziklasický statistický přístup a statistická fyzika

Vzhledem ke složitosti makrosystémů, které zkoumá statistická fyzika, je potřebné spojit přednosti klasického a kvantového statistického přístupu do kvaziklasického statistického přístupu. Obdařit kvaziklasický statistický přístup relativistickým rozměrem lze prostřednictvím vztahů pro nerelativistickou, relativistickou a ultrarelativistickou energii jedné volné částice. Kvaziklasický statistický přístup ke zkoumání makrosystémů volných částic umožňuje využít společný potenciál obsažený v Maxwellově-Boltzmannově, Boseho-Einsteinově a Fermiho-Diracově rozdělení. Touto cestou se ubírá statistická fyzika a z tohoto pohledu je také zapotřebí hodnotit názvy kapitol jejího výkladu.

II.8. Metody nestatistické fyziky

a) Tři dimenze nestatistického přístupu a nestatistická fyzika

Nestatistická fyzika se vzhledem k zanedbání vnitřní struktury zkoumaných fyzikálních objektů mohla vydat cestou odděleného klasického nestatistického přístupu (klasická mechanika, klasické aplikace elektromagnetického pole), kvantového nestatistického přístupu (kvantová mechanika, kvantové aplikace elektromagnetického pole) a relativistického nestatistického přístupu (relativistická mechanika, relativistické aplikace elektromagnetického pole). O tom svědčí názvy kapitol, které představují výklad nestatistické fyziky.

b) Klasická dimenze nestatistické fyziky

Klasické "přímé" pozorování a klasické pojmy "dráha", "absolutní prostor" a "absolutní čas" lze používat v rámci oborů klasické fyziky při splnění dvou limitních podmínek. První limitní podmínkou jsou malé rychlosti a malé hustoty hmotnosti fyzikálních objektů. Pak prostor a čas nezávisejí na rozložení a pohybu fyzikálních objektů a nabývají absolutního charakteru. Druhou limitní podmínkou jsou uspořádaný pohyb částic zkoumaného souboru a obrovské hodnoty kvantových nebo obsazovacích čísel, která při nižších hodnotách charakterizují tvar "pravděpodobnostního oblaku". Při platnosti druhé limitní podmínky je obvykle brána v úvahu jen jedna stránka vlnově korpuskulárního dualismu - buď stránka korpuskulární bez vazby na stránku vlnovou, nebo stránka vlnová bez vazby na stránku korpuskulární.

Klasická dimenze nestatistického přístupu je spojena s používáním klasických pohybových rovnic a klasických pohybových zákonů při zkoumání pohybových stavů klasické částice, menšího počtu klasických částic (např. soustavy hmotných bodů nebo soustavy částic kontinua) nebo také velkého počtu klasických částic pohybujících se uspořádaným pohybem (např. vlnění nebo uspořádaný tok částic).

Příkladem "uspořádaného toku částic" je soubor vodivostních elektronů, které se při průchodu elektrického proudu pohybují uspořádaně krystalovou mřížkou kovu. Tento soubor lze transformovat na nestatisticky pojatý fyzikální objekt - tok uspořádaně se pohybujících elektronů, jehož pohybové stavy lze zkoumat obvyklým aparátem pohybových rovnic a z nich vyplývajících zákonů zachování energie a pohybových zákonů. U stacionárního elektrického proudu lze považovat např. Ohmův zákon pro celý jednoduchý obvod za vyjádření zákona zachování energie.

Jiný příklad "uspořádaného toku částic" může nastat při menším počtu fotonů a monochromatickém volném elektromagnetickém poli s vyšší frekvencí. Pak lze vlnově korpuskulární dualismus fotonů a obecného elektromagnetického pole nahradit "čistými" korpuskulárními vlastnostmi "uspořádaně" se pohybujícího menšího počtu fotonů (rychlost "uspořádaného" pohybu jednotlivých fotonů je rovna rychlosti světla). Volné elektromagnetické pole je elektromagnetické pole bez přítomnosti nábojů - jeho energie je v popsaném případě přenášena jednotlivými fotony diskrétně (diskrétnost hodnot energie lze odvodit pomocí kvantové teorie volného elektromagnetického pole). Nestatisticky pojatý fyzikální objekt (uspořádaný tok částic, které se pohybují rychlostí světla v určitém směru) lze za daných zjednodušení zkoumat klasickým přístupem. Tento případ je "klasickým" limitním případem geometrické optiky. Charakteristické rozměry úlohy jsou velké ve srovnání s vlnovou délkou a lze hovořit o šíření např. světla podél určitých drah - paprsků.

Příklad "uspořádaného vlnového pohybu" lze spojit s obrovským množstvím fotonů a monochromatickým volným elektromagnetickým polem s nižší frekvencí. Šíření tohoto pole rozlehlým prostorem vychází z "čistých" vlnových vlastností klasicky pojaté makroskopické elektromagnetické vlny (rychlost šíření této vlny je opět rovna rychlosti světla). Volné elektromagnetické pole je opět elektromagnetické pole bez přítomnosti nábojů - jeho energie je v popsaném klasickém případě přenášena elektromagnetickým vlněním spojitě (diskrétnost hodnot energie lze zanedbat). Nestatisticky pojatý fyzikální objekt (elektromagnetická vlna, která se šíří hypotetickým prostředím, na jehož uspořádaně a příčně kmitající částice působí elektrická intenzita a magnetická indukce elektrického a magnetického pole) lze zkoumat "klasicky".

Jiný příklad "uspořádaného vlnového pohybu" je spojen se souborem elektronů, které se uspořádaně pohybují elektronovým mikroskopem. Elektronovou optiku mikroskopu lze pro svazky pomalých elektronů přirovnat k optice světelné (platnost např. obdoby Snellova zákona lomu světla). Tento soubor lze transformovat na nestatisticky a vlnově pojatý fyzikální objekt, který lze opět zkoumat "klasicky".

Mezi klasické pohybové rovnice patří zvláště Lagrangeovy rovnice nebo Hamiltonovy kanonické rovnice, které v jednoduchých případech přecházejí v 2. Newtonův zákon.

Zvláštní poznámku je potřebné učinit pro zkoumání kontinua. Částicí kontinua je malá oblast tělesa, v níž lze ještě považovat hmotnost za spojitě rozloženou. Síly působící na částice kontinua jsou obvykle vztaženy na jednotku objemu nebo jednotku hmotnosti kontinua. Z tohoto pohledu není nutné považovat soubor částic kontinua za makrosystém. Při zkoumání pohybových stavů příslušného modelu kontinua budou proto používány obecné rovnice rovnováhy a obecné pohybové rovnice vztažené na částici kontinua.

c) Kvantová dimenze nestatistické fyziky u látkových částic

Kvantová dimenze nestatistického přístupu u látkových částic je spojena s jejich vlnově korpuskulárním dualismem. Korpuskulární vlastnosti mohou být vystiženy hmotností a hybností mikroobjektu, vlnové vlastnosti vlnovou délkou a frekvencí (součin vlnové délky a frekvence je rychlost šíření vlnění). Vlnově korpuskulární dualismus látkových částic je zřejmý v oblasti vlastností korpuskulárních. O tom, že látkový objekt je nadán hmotností a hybností, je člověk přesvědčen na základě svých běžných zkušeností. Vlnové vlastnosti postuloval de Broglie s překvapivým výsledkem - rychlost šíření de Broglieových vln byla větší než rychlost světla. To ve svém důsledku vedlo k popisu těchto vln nikoliv reálnými vlnovými funkcemi, ale vlnovými funkcemi komplexními, a k interpretaci těchto vln jako vln pravděpodobnostních. Součin komplexní vlnové funkce s jejím komplexním sdružením již opět dával reálná čísla jako pravděpodobnosti výskytu látkové částice v daném čase na daném místě prostoru.

Zavedení de Broglieových vln bylo spojeno se vznikem kvantové mechaniky. Fyzikální vlastnosti operace pozorování byly srovnány s vlastnostmi matematických instrukcí (operátorů) a model kvantové mechaniky byl na světě. Fyzikální veličiny byly reprezentovány matematickými operátory, fyzikální stavy byly reprezentovány komplexními vlnovými Rozdělení pravděpodobnosti výskytu látkové funkcemi. částice bylo nazváno "pravděpodobnostním oblakem" a jeho tvar charakterizoval stav částice. Při řešení tzv. vlastních rovnic operátorů se objevily diskrétní (tj. na sebe nenavazující) hodnoty energie a soubor kvantových čísel, který popsal nejen konkrétní přípustnou hodnotu energie, ale také odpovídající tvar "pravděpodobnostního oblaku". Popsaný model kvantové mechaniky souvisí v oblasti kvantově mechanických soustav látkových částic s tzv. primárním kvantováním a jeho operátory v Schrödingerově reprezentaci (závislost na čase obsahují jen vlnové funkce), Heisenbergově reprezentaci (závislost na čase obsahují jen operátory) nebo Diracově reprezentaci (závislost na čase popisují jak vlnové funkce, tak operátory).

Nejznámější vlastní rovnicí se stala stacionární Schrödingerova rovnice jako vlastní rovnice Hamiltonova operátoru, který reprezentuje energii. **Stacionární Schrödingerova rovnice** hraje roli obecné kvantové a nerelativistické rovnice rovnováhy, která popisuje tvary "pravděpodobnostních oblaků" jako vyjádření stacionárních pohybových stavů látkové částice nebo kvantově mechanické soustavy látkových částic. Stacionární Schrödingerova rovnice je speciálním "bezčasovým" případem nestacionární Schrödingerovy rovnice.

Nestacionární Schrödingerova rovnice může v rámci Schrödingerovy reprezentace hrát roli obecné kvantové a nerelativistické pohybové rovnice, která popisuje měnící se tvary "pravděpodobnostních oblaků" jako vyjádření posloupnosti nestacionárních pohybových stavů látkové částice nebo kvantově mechanické soustavy látkových částic. Po zavedení operátoru časové změny dynamické veličiny lze v rámci Heisenbergovy reprezentace uvést v operátorovém tvaru Hamiltonovy kanonické rovnice (klasické pohybové rovnice) jako Hamiltonovy kvantové rovnice (kvantové pohybové rovnice). Odtud již vede cesta k uvedení Newtonových kvantových rovnic v operátorovém tvaru.

d) Kvantová dimenze nestatistické fyziky u polních částic

Kvantová dimenze nestatistického přístupu u polních částic je spojena s jejich vlnově korpuskulárním dualismem. Korpuskulární vlastnosti mohou být vystiženy hmotností a hybností mikroobjektu, vlnové vlastnosti vlnovou délkou a frekvencí (součin vlnové délky a frekvence je rychlost šíření vlnění).

Vlnově korpuskulární dualismus polní částice lze ukázat na příkladu fotonu. Modelem individuálního fotonu je "vlnový balík (vlnové klubko)". Vlnové vlastnosti vlnového balíku jsou spojeny s vlnovou délkou a frekvencí individuálního fotonu - vlnový balík se šíří rychlostí světla. Korpuskulární vlastnosti vlnového balíku jsou spojeny s hmotností, kvantem

energie a hybností individuálního fotonu - při interakci s látkovou částicí platí zákony zachování hmotnosti, energie i hybnosti. Kvantová dimenze nestatistického přístupu při zkoumání pohybových stavů fotonu úzce souvisí s aparátem tzv. **sekundárního kvantování**.

Stacionární a nestacionární pohybové stavy fotonu nelze v žádném případě ztotožňovat s interpretací "pravděpodobnostních oblaků" u látkových částic - pohybové stavy fotonu nesouvisejí s pravděpodobností jeho lokalizace v prostoru. Pohybové stavy fotonu souvisejí s pravděpodobnostmi hodnot jeho vlnové délky (obvykle vyjádřené vlnovým číslem $k = 2\pi / \lambda$), rozdělení těchto pravděpodobností lze nazvat "Gaussiánem". Změna "Gaussiánu" představuje změnu pohybového stavu fotonu. "Gaussián" představuje tvar "pravděpodobnostního oblaku" u fotonu jako nejznámějšího příkladu polní částice. Změna "Gaussiánu" odpovídá změně tvaru "pravděpodobnostního oblaku" fotonu. Překrývání "pravděpodobnostních oblaků" fotonů ukazuje na nerozlišitelnost jednotlivých fotonů.

Pohybové rovnice a pohybové zákony při zkoumání pohybových stavů fotonu nebo kvantově mechanické soustavy volných fotonů **uzavřených v objemu** V souvisejí s **operátory sekundárního kvantování**. Kvantově mechanickou soustavu fotonů uzavřenou v objemu V lze považovat za "nekoherentní směs monochromatických elektromagnetických vln (se stejnou polarizací)" a zkoumat pomocí obsazovacích čísel. Obsazovací čísla jsou dána počty "koherentních" fotonů s danými frekvencemi a směry šíření, které vytvářejí jednu z monochromatických vln ze zkoumané nekoherentní směsi.

V reprezentaci obsazovacích čísel lze považovat za základní operátory **operátory kreace a anihilace** (pro danou frekvenci a směr šíření zvětšují a zmenšují hodnotu obsazovacího čísla o 1). Tyto operátory umožňují zkonstruovat operátor počtu koherentních fotonů, Hamiltonův operátor volného polychromatického elektromagnetického pole a operátor reprezentující vektorový potenciál pole a nahrazující elektrickou intenzitu a magnetickou indukci elektrického a magnetického pole. V reprezentaci obsazovacích čísel je energie elektromagnetického pole rovna vlastním hodnotám Hamiltonova operátoru, fyzikální stav pole je popsán vlastními funkcemi Hamiltonova operátoru volného polychromatického elektromagnetického pole uzavřeného v objemu V. Tyto vlastní funkce mají tvar daný hodnotami obsazovacích čísel pro dílčí frekvence a směry šíření.

Vlnově korpuskulární dualismus fotonu a kvantově mechanické soustavy fotonů uzavřených v objemu V odpovídá výsledkům řešení pohybových rovnic v reprezentaci obsazovacích čísel a vyplývajících z aparátu sekundárního kvantování. Pro jednotlivý foton z dané soustavy koherentních fotonů může být odvozen pohybový zákon, který odpovídá stavu fotonu představujícímu sférickou vlnu, v níž neexistuje žádný určitý směr pohybu. Nebo bude odvozen pohybový zákon, který odpovídá stavu fotonu s určitým směrem pohybu (foton se vyznačuje určitým vektorem hybnosti), při němž jsou charakteristické rozměry úlohy velké ve srovnání s vlnovou délkou. První případ je cestou směřující ke "klasickému" limitnímu případu vlnové optiky. Druhý případ je cestou směřující ke "klasickému" limitnímu případu geometrické optiky.

e) Srovnání kvantových dimenzí nestatistické a statistické fyziky

vychází z kvantových pohybových Kvantový nestatistický přístup rovnic (Schrödingerova rovnice, Hamiltonovy a Newtonovy kvantové rovnice. rovnice v reprezentaci obsazovacích čísel) a kvantových pohybových zákonů (tvary "pravděpodobnostních oblaků" u látkových a polních částic). Tyto rovnice a zákony interpretují pohyb a pohybové stavy kvantově mechanické soustavy mikroobjektů na základě respektování vlnově korpuskulárního dualismu. Respektování vlnově korpuskulárního dualismu znamená statisticko pravděpodobnostní interpretaci také pohybových stavů jednotlivých částic. To není v rozporu s nestatistickým přístupem, neboť východiskem jsou kvantové pohybové rovnice a pohybové zákony.

Kvantový statistický přístup představuje zcela novou kvalitu v oblasti statisticko pravděpodobnostní interpretace. V makrosystémech, jejichž objekty se řídí kvantovou mechanikou a které jsou proto zkoumány kvantovým statistickým přístupem, existují specifické statistické zákonitosti, vlastní pouze velkému počtu objektů. Kvantový statistický přístup proto používá při zkoumání termodynamických stavů makrosystémů místo aparátu kvantových pohybových rovnic a kvantových pohybových zákonů aparátu statistických souborů a rozdělovacích funkcí. Tato nová kvalita v oblasti statisticko pravděpodobnostní interpretace je výrazem respektování vlnově korpuskulárního dualismu makrosystémů kvantových mikroobjektů.

f) Relativistická dimenze nestatistické fyziky

Závislost prostoru a času na rozložení a pohybu fyzikálních objektů vyžaduje u relativistické dimenze nejen nahrazení klasických pojmů "absolutní prostor" a "absolutní čas" vhodnými modely prostoročasu, ale také nový matematicko fyzikální aparát.

Relativistická dimenze nestatistického přístupu vychází z vhodných modelů prostoročasu, jejichž metrika je popsána složkami metrického tenzoru. Příkladem může být Minkowského metrika plochého prostoročasu nebo Friedmannova-Robertsonova-Walkerova-Lemaîtrova metrika zakřiveného prostoročasu v rámci modelů FRWL homogenního a izotropního vesmíru. Příslušný model prostoročasu umožňuje "přetransformovat" nerelativistické pohybové rovnice lagrangeovského, hamiltonovského a newtonovského formalismu na relativistické pohybové rovnice (rovnice geodetiky). Newtonův gravitační zákon byl zobecněn Einsteinovým gravitačním zákonem (Einsteinovou gravitační rovnicí). Z Einsteinovy gravitační rovnice jako rovnice gravitačního pole vyplývají nejen rovnice geodetiky, ale i existence gravitačních vln.

Nový matematicko fyzikální aparát zavedl místo vektorů (tenzorů prvního řádu) se třemi složkami vektory se složkami čtyřmi, místo tenzorů druhého řádu s devíti složkami tenzory druhého řádu se složkami šestnácti atd.

V teorii relativity mají tenzory dva druhy složek - kontravariantní horní složky a kovariantní dolní složky. Pomocí složek základního metrického tenzoru lze převádět kontravariantní složky na kovariantní a obráceně - tomuto procesu se říká snižování nebo zvyšování indexu. Pomocí Riemannova tenzoru křivosti, který je tenzorem čtvrtého řádu, lze v každém konkrétním případě rozhodnout, zda jde o prostor zakřivený nebo nezakřivený. Z Riemannova tenzoru křivosti lze odvodit Ricciho tenzor druhého řádu a z něho pak skalární křivost. Od skalární křivosti již vede cesta k indexu křivosti k. Nejpoužívanějšími tenzory obecné teorie relativity je Einsteinův tenzor a tenzor energie a hybnosti. Einsteinův tenzor je zkonstruován pomocí Ricciho tenzoru, metrického tenzoru a skalární křivosti. Tenzor energie a hybnosti obsahuje jako svou složku známý Einsteinův vztah pro energii $E = mc^2$ (vztažený obvykle na hustotu hmotnosti ρ). Einsteinův gravitační zákon (Einsteinova gravitační rovnice, r. 1915)) vyjadřuje vztah úměrnosti mezi Einsteinovým tenzorem na levé straně a tenzorem hybnosti a energie na straně pravé. Součástí konstanty úměrnosti je i známá Newtonova gravitační konstanta. Později (r. 1917) doplnil Einstein levou stranu kosmologickým členem, který obsahuje součin kosmologické konstanty Λ se složkami metrického tenzoru.


A. STATISTICKÁ FYZIKA

(Statistický přístup ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů)

1. Volba typu statistického souboru (Přílohy A1, A2, A3)

1.1. Statistický a nestatistický přístup ve fyzice

Kritériem pro rozlišení statistického a nestatistického přístupu ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů je počet zkoumaných fyzikálních objektů. Je-li zkoumán jeden fyzikální objekt nebo několik fyzikálních objektů, má zkoumání charakter nestatistický. Je-li zkoumán fyzikální objekt tvořený velkým počtem menších fyzikálních objektů nebo je-li zkoumán přímo tento velký počet menších fyzikálních objektů, má zkoumání charakter statistický. Soubor velkého počtu menších fyzikálních objektů je obvykle tvořen částicemi, které patří svými rozměry do mikrosvěta. Závěry získané statistickým přístupem ve fyzice byly však také s úspěchem použity v oblasti modelování vesmíru, vývoje hvězd a zvláště pak při modelování závěrečných vývojových hvězdných stádií.

Soubor velkého počtu mikroobjektů (částic) obvykle nese název **makrosystém MS** a je považován za složitý mnohočásticový systém. Předpona makro- poukazuje na velký počet zkoumaných fyzikálních objektů, nikoliv na velikost zkoumaných fyzikálních objektů. Příkladem velkého počtu je počet molekul plynu obsažený v látkovém množství 1 mol. Tento počet je dán Avogadrovou konstantou 6,023.10²³. Z hlediska fyzikálních jevů statistický přístup ve fyzice vysvětluje především makroskopické vlastnosti makrosystémů MS.

Statistický přístup ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů lze nazvat statistickou fyzikou. Z hlediska fyzikálních oborů lze statistickou fyziku členit především na fenomenologickou termodynamiku FT a statistickou termodynamiku ST.

Fenomenologická termodynamika FT pokládá MS za kontinuum a na základě několika principů a postulátů (tři věty termodynamické a dva termodynamické postuláty) studuje makrovlastnosti těchto MS jako nauku o obecných zákonitostech, jimiž se řídí transformace celkové energie MS v různé její formy. **Statistická termodynamika ST vychází ze struktury hmoty**, jsou brány v úvahu vlastnosti a pohybové zákony jednotlivých částic MS a odtud vychází zkoumání obecných makroskopických vlastností MS. Mezi obecné makroskopické vlastnosti MS patří především stavy termodynamické rovnováhy STR, stavy termodynamické nerovnováhy STN a přechody mezi nimi (tyto přechody se nazývají termodynamickými procesy). Rozhodujícím rysem statistického přístupu k MS částic je ve statistické termodynamice ST jeho kvantová dimenze, která je dle potřeby doplňována dimenzí relativistickou. Fenomenologická termodynamika FT se pak jeví jako klasická aproximace statistické termodynamiky ST a je proto nepostradatelnou pomocnicí při aplikaci statistického přístupu.

Snadno lze ukázat, že **nestatistický přístup ke zkoumání makrosystémů MS a jejich makroskopických vlastností nelze použít**. Z hlediska statistické termodynamiky ST je MS složitý mnohočásticový systém, jehož vlastnosti jsou určeny pohybovými rovnicemi všech částic tohoto MS. Řešení obrovského počtu diferenciálních rovnic na základě zadání počátečních podmínek všech částic by mohlo vést k vysvětlení makroskopických vlastností MS. Tento přístup by byl přístupem nestatistickým, matematicky je však prakticky neuskutečnitelný. Informace o MS není taková, aby bylo možno zadat počáteční podmínky ať již v klasické nebo kvantové podobě (při klasickém popisu jde o zadání počátečních hodnot souřadnic a hybností všech částic MS, při kvantově mechanickém popisu pak vymezení počátečních podmínek pro vlnové funkce reprezentující stavy opět všech částic MS).

Nepoužitelnost nestatistického přístupu ke zkoumání MS se stala základním podnětem k aplikaci statistického přístupu. V rámci statistického přístupu ke zkoumání MS se každého termodynamického procesu účastní obrovský počet částic a při tom nezávisí, které jmenovité částice se daného procesu účastní, nýbrž jen na středním počtu těchto částic a středních hodnotách fyzikálních veličin, které chování MS popisují. To umožňuje obejít neřešitelnost pohybových rovnic obrovského počtu částic a místo toho použít pojmů počtu pravděpodobnosti a matematické statistiky. Je proto nezbytné (s pomocí fenomenologické termodynamiky FT) formulovat základní východiska statistického přístupu ke zkoumání MS, tj. základní východiska statistické fyziky:

<u>Východisko č.1</u> S rostoucím počtem částic se nekomplikují obecné zákonitosti (tj. vysvětlení makroskopických vlastností MS), naopak - s rostoucím počtem částic ustupují do pozadí

mikrovlastnosti jednotlivých částic a do popředí vystupují nové zákonitosti specifické právě pro MS velkého počtu částic.

<u>Východisko č.2</u> Výsledný termodynamický proces spojený s MS nezávisí na tom, které jmenovité částice se daného termodynamického procesu účastní, nýbrž jen na celkovém počtu částic a na jejich stavech.

<u>Východisko č.3</u> Čím bude počet částic MS větší, tím bude termodynamický stav nebo termodynamický proces méně citlivý ke změnám v chování malého počtu částic.

1.2. Termodynamický stav, termodynamický pohyb

Statistický a nestatistický přístup ke zkoumání stavu a změny stavu fyzikálního objektu umožňují provést členění těchto stavů na termodynamické (statistické) a pohybové (nestatistické) a změn těchto stavů na termodynamický (statistický) a nestatistický pohyb.

Stav fyzikálního objektu je určen souhrnem vnějších podmínek (vnějších parametrů a_i), za nichž fyzikální objekt existuje, a souhrnem nezávislých vnitřních vlastností (vnitřních parametrů α_i) zkoumaného fyzikálního objektu. Vnější a vnitřní parametry nesou společný název parametry stavové. Stavy fyzikálního objektu lze obecně dělit na stavy nerovnovážné (vnější i vnitřní parametry se mohou měnit) a rovnovážné (vnější i vnitřní parametry jsou ustálené, tj. na čase nezávislé).

Souhrn těch vnějších parametrů, které souvisejí s pohybem makrosystému jako celku (není brána v úvahu vnitřní struktura makrosystému) je spojen s **nestatistickým přístupem**. Souhrn zbývajících vnějších parametrů a souhrn vnitřních parametrů (vnitřní struktura makrosystému je brána v úvahu, předmětem zkoumání je obrovský počet dílčích mikroobjektů - částic vytvářejících makrosystém MS) je spojen s **přístupem statistickým**.

Není-li brán v úvahu pohyb makrosystému jako celku, lze nejobecnější stavy rovnováhy nebo nerovnováhy nazvat stavy termodynamické rovnováhy nebo termodynamické nerovnováhy. Souhrnně lze pro stavy termodynamické rovnováhy STR a stavy termodynamické nerovnováhy STN používat název "termodynamické stavy", typickým přístupem pro jejich popis je přístup statistický. Termodynamickými funkcemi stavu jsou pak nazývány funkce stavových parametrů. Přechody mezi termodynamickými stavy jsou spojeny s termodynamickými procesy - termodynamický proces jako způsob změny termodynamického stavu je popisem termodynamického (statistického) pohybu např. ve fenomenologické termodynamice FT a statistické termodynamice ST.

Termodynamické procesy lze členit na přirozené (procesy, kterými se MS přibližuje stavu termodynamické rovnováhy STR) **a nepřirozené** (vzdalování od stavu termodynamické rovnováhy STR). **Dále lze termodynamické procesy členit na vratné** (kvazistatické) **a nevratné**. Nevratné termodynamické procesy mohou probíhat jen v jednom směru, všechny přirozené procesy jsou nevratné. Vratný (kvazistatický) termodynamický proces VTP je jistou idealizací, která vychází z předpokladu, že MS při vratném termodynamickém procesu VTP zůstává v každém okamžiku ve stavu termodynamické rovnováhy STR. Vratný termodynamický proces VTP pak představuje spojitou posloupnost rovnovážných stavů a může probíhat v obou směrech - makrosystém MS projde při obráceném procesu postupně všemi stavy jako při přímém procesu, avšak v opačném pořadí.

První postulát termodynamiky vychází ze zkušenosti, že každý makrosystém MS, který je od času t v daných časově neměnných podmínkách vnějších stavových parametrů a_i, nevyhnutelně dospěje za relaxační dobu t0 do stavu termodynamické rovnováhy STR, v němž mají všechny stavové parametry časově konstantní hodnoty. Aby bylo možno ve statistické termodynamice ST a fenomenologické termodynamice FT zkoumat především stavy termodynamické rovnováhy STR, je vytvářen model přirozeného termodynamického požadovanou přesností podobá ideálnímu vratnému procesu, který se S termodynamickému procesu VTP. Podmínku vratnosti lze formulovat jako podmínku velmi nepatrné rychlosti změny stavových parametrů při termodynamickém procesu - pak by změna stavových parametrů měla ve srovnání s relaxační dobou t_0 probíhat nekonečně dlouho.

Na základě vymezení modelu přirozeného termodynamického procesu, který se podobá ideálnímu VTP, a ve spojení s prvním postulátem termodynamiky je rozumné vymezit **zaměření statistického přístupu ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů** - statistická fyzika se bude zabývat především STR a tou formou termodynamického (neuspořádaného či statistického) pohybu, která je reprezentována VTP. Odpovídajícími fyzikálními obory jsou

fenomenologická termodynamika FT a statistická termodynamika ST. Stavy termodynamické nerovnováhy STN a složitějšími formami termodynamického pohybu se zabývá fyzikální kinetika.

1.3. Statistický soubor makrosystémů

1.3.1. Zavedení statistického souboru

Při zkoumání makrosystému MS jsou možné dvě cesty, jak zobecnit metodu určování středních hodnot termodynamických funkcí MS na základě naměřených údajů. První cesta vede přes provedení měření vícekrát na jednom MS, druhá cesta přes provedení měření na řadě MS, které lze považovat přibližně za identické. Druhou cestou se vydal statistický přístup ke zkoumání fyzikálních jevů a objektů. Místo zkoumání jednoho MS ve fázovém prostoru (klasický případ) nebo místo zkoumání jednoho MS reprezentovaného vlnovou funkcí ψ (kvantový případ) bude zkoumáno *n* nezávislých identických MS. Takový souhrn klasických nebo kvantových MS byl nazván statistickým souborem. Pojem statistického souboru byl zaveden Gibbsem a Einsteinem v r.1902 pro klasický případ a Neumannem v r.1927 pro případ kvantový. V kvantovém případě může jít o čistý statistický soubor (všechny MS jsou reprezentovány stejnou vlnovou funkcí ψ) nebo o smíšený statistický soubor (jednotlivé MS mohou být reprezentovány odlišnými vlnovými funkcemi). Zvláště kvantový smíšený statistický soubor je blízkou analogií klasického statistického souboru.

1.3.2. Nezávislé a identické makrosystémy jako prvky statistického souboru

Nezávislé a identické MS ve stavech termodynamické rovnováhy STR (tj. nezávislé, identické a rovnovážné MS) lze charakterizovat prostřednictvím následujících znaků:

- stejné složení
- stejný počet stupňů volnosti
- stejná závislost energie na souřadnicích a hybnostech (nikoliv na čase) v klasickém případě, popis všech dílčích MS stejnou vlnovou funkcí ψ a stejnou stacionární Schrödingerovou rovnicí v kvantovém případě
- jsou možné obecně různé klasické nebo kvantové počáteční podmínky (podmínka nezávislosti a odlišitelnosti jednotlivých identických MS).

Jelikož identické a nezávislé MS budou zkoumány především z hlediska stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP, lze statistické soubory vzniklé jejich sdružením chápat jako rovnovážné (stacionární) statistické soubory.

1.3.3. Mikrokanonický, kanonický a grandkanonický statistický soubor

Rovnovážné statistické soubory lze členit na:

- **Mikrokanonický statistický soubor MSS** jako rovnovážný statistický soubor uzavřených MS. Z makroskopického hlediska je MS uzavřený tím, že jeho energie *U*, vnější parametry *a_j* a počet *N* daného druhu částic jsou neměnné. MSS je tedy složen z MS, které nevyměňují se svým okolím ani energii, ani částice. Metodika zkoumání stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP vycházející z MSS bude označena jako metodika č. 3. Mikrokanonický statistický soubor MSS a tím i metodika č.3 nebudou používány vzhledem k obtížné dosažitelnosti podmínek úplné uzavřenosti dílčích MS.

- Kanonický statistický soubor KSS jako rovnovážný statistický soubor MS otevřených vzhledem k výměně energie s okolím a uzavřených vzhledem k výměně částic s okolím. Důvodem používání KSS je fakt, že předpoklad striktně uzavřeného MS není v reálných podmínkách zcela splnitelný (již měření teploty MS narušuje energetickou izolaci). Metodika zkoumání stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP vycházející z KSS bude označena jako metodika č. 2.

- Grandkanonický statistický soubor GSS jako rovnovážný statistický soubor MS otevřených jak k výměně energie s okolím, tak i k výměně částic s okolím. Kromě toho mohou v MS probíhat procesy (disociační a ionizační procesy, chemické a jaderné reakce, fázové přechody), při nichž se počet částic jednotlivých složek a fází mění. Pro zkoumání těchto druhů procesů i výměny částic s okolím je nutné opustit předpoklad konstantního počtu částic a přejít od kanonického statistického souboru KSS ke grandkanonickému statistickému souboru GSS. Metodika zkoumání stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP vycházející z GSS bude označena jako metodika č. 1.

1.4. Tolmanova hypotéza a základní charakteristiky termodynamických stavů

Tolmanova hypotéza vychází z eliminování pohybu makrosystému MS jako celku. Pak lze vyslovit Tolmanův předpoklad pro zkoumání termodynamických stavů:

"Všechny stavy se stejnou energií mají stejné apriorní pravděpodobnosti".

Nechť vnitřní energie U je zbylá energie makrosystému MS po vyloučení forem energie souvisejících s pohybem makrosystému jako celku. Vnitřní energie U makrosystému MS je ovlivňována jak interakcí makrosystému MS se svým okolím, tak také výměnou částic mezi makrosystémem MS a jeho okolím. V souladu s Tolmanovou hypotézou lze proto vybrat za základní charakteristiky λ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR zkoumaného makrosystému MS vnitřní energii U_{λ} a počet částic N_{λ} daného druhu. Za základní charakteristiky termodynamického pohybu jako změnu termodynamického stavu lze pak vybrat změnu vnitřní energie U a změnu počtu částic N daného druhu.

Nechť jsou termodynamické funkce makrosystému MS stejné pro celý makrosystém. Pro extenzivní termodynamické funkce znamená "stejnost" splnění vlastnosti aditivnosti (např. vnitřní energie U je při "stejnosti" součtem vnitřních energií částí makrosystému MS), pro intenzivní termodynamické funkce znamená "stejnost" stejnou hodnotu ve všech částech makrosystému MS (např. teplota T má při "stejnosti" všude stejnou velikost). Za splnění podmínek "stejnosti" bude makrosystém MS nazýván **makrosystémem termicky homogenním**. Bude-li makrosystém obsahovat N částic jen jednoho druhu, pak bude makrosystém MS nazýván **makrosystémem termicky**

Podporou pro přijetí Tolmanovy hypotézy je i znění druhého postulátu termodynamiky, jehož formulace se ukázala účelnou jak z hlediska fenomenologické termodynamiky FT, tak i z hlediska statistické termodynamiky ST. **Druhý postulát termodynamiky** vychází ze zkušenosti, že stav termodynamické rovnováhy STR termicky homogenního makrosystému MS je jednoznačně určen souborem a_i vnějších parametrů a jedním vnitřním parametrem, za který lze vzít vnitřní energii *U* makrosystému. Podle druhého postulátu termodynamiky lze všechny ostatní vnitřní parametry α_i vyjádřit funkční závislostí

(A1)
$$\alpha_j = f_j (U, a_i).$$

Nemění-li se počet částic makrosystému MS, lze druhý postulát termodynamiky stručně vyjádřit sdělením, že "**Stav termodynamické rovnováhy STR je charakterizován energií**".

SOUHRN 1

V první kapitole byl nejdříve rozlišen statistický a nestatistický přístup ve fyzice, byla stanovena východiska statistického přístupu a zaveden pojem makrosystému MS. Jako základní popisové prvky chování makrosystému MS byly vybrány termodynamické stavy (stav termodynamické rovnováhy STR a stav termodynamické nerovnováhy STN) a změna termodynamického stavu jako termodynamický pohyb. Termodynamický stav byl popsán souborem vnějších a vnitřních stavových parametrů. Termodynamický pohyb byl nazván termodynamickým procesem. Termodynamické procesy byly rozčleněny na přirozené a nepřirozené, na vratné a nevratné. Byl zaveden takový model přirozeného procesu, který lze za vhodných podmínek považovat za vratný termodynamický proces VTP. Současně bylo upřednostněno zkoumání makrosystémů MS především z hlediska stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP (**vstupní podmínka** α pro použití statistického přístupu ve fyzice).

Dále bylo v první kapitole na základě vyloučení pohybu makrosystému MS jako celku a prostřednictvím Tolmanovy hypotézy ukázáno, že rozhodujícími charakteristikami stavu termodynamické rovnováhy STR jsou vnitřní energie U a počet N částic zkoumaného makrosystému. Obdobně bylo charakterizováno, že zkoumání vratných termodynamických procesů VTP bude vycházet ze změn vnitřní energie U a počtu N částic (**vstupní podmínka** β pro použití statistického přístupu ve fyzice).

V první kapitole byl rovněž zaveden pojem statistického souboru jako souboru obrovského počtu nezávislých a identických makrosystémů MS. Byly vyloženy tři základní typy statistických souborů - mikrokanonický MSS (makrosystémy nevyměňují s okolím ani energii, ani částice), kanonický KSS (makrosystémy vyměňují s okolím energii, nevyměňují částice) a grandkanonický GSS (makrosystémy vyměňují s okolím energii i částice). Metodiky zkoumání makrosystémů MS pomocí aparátů statistických souborů GSS, KSS a MSS byly formálně označeny metodikami č.1 (GSS), č.2 (KSS) a č.3 (MSS). Vzhledem k obtížné dosažitelnosti úplné uzavřenosti makrosystému byly zvoleny metodiky č.1 (GSS) a č.2 (KSS) jako výchozí metodiky, které budou postupně konkretizovány (**vstupní podmínka** γ pro použití statistického přístupu ve fyzice).

První konkretizaci vybraných metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS) by měla umožnit typologie makrosystémů MS.

KONEC SOUHRNU 1

2. Typologie makrosystémů (Přílohy A1, A2, A3)

2.1. Statistické soubory tvořené makrosystémy volných částic

Statistické soubory mikrokanonický, kanonický a grandkanonický mohou být tvořeny makrosystémy MS volných částic nebo vázaných částic. **MS volných částic** budou tvořeny částicemi, u nichž lze zanedbat vzájemnou silovou interakci mezi částicemi. Někdy se MS volných částic říká ideální plyn. **MS vázaných částic** vzájemnou silovou interakci částic nezanedbává. Je zapotřebí připomenout, že i při zanedbání vzájemné silové interakce existuje u nerozlišitelných částic specifická výměnná interakce mezi částicemi.

U makrosystémů MS volných částic může být v důsledku zanedbání vzájemné interakce λ -tý stav termodynamické rovnováhy STR s energií U_{λ} a počtem částic N_{λ} rozčleněn do ν -tých energetických hladin s počty částic N_{ν} a energií ε_{ν} jedné částice. Pro MS volných částic pak platí vztahy

(A2) $U_{\lambda} = \sum N_{\nu} \varepsilon_{\nu}$, $N_{\lambda} = \sum N_{\nu}$ (sčítáno přes ν -té energetické hladiny).

Statistické soubory tvořené makrosystémy volných částic představují praktickou možnost, která vede k úspěšnému zkoumání konkrétních makrosystémů. Pak je použitelnost metodiky č.1 (východiskem je GSS) a metodiky č.2 (východiskem je KSS) velmi značná. Statistické soubory, které by byly tvořeny makrosystémy vázaných částic, by v rámci metodik č.1 až č.3 velmi obtížně nacházely matematické a statistické prostředky ke zkoumání stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP.

2.2. Makrosystémy volných částic při zachování diskrétních hodnot energie

2.2.1. Maxwellův-Boltzmannův, Fermiho a Boseho plyn

Při zachování diskrétních hodnot energie jsou MS volných částic členěny na MS rozlišitelných částic (tzv. **Maxwellův-Boltzmannův plyn** tvořený rozlišitelnými částicemi) a na MS nerozlišitelných částic (tzv. **Fermiho plyn** tvořený nerozlišitelnými fermiony nebo **Boseho plyn** tvořený nerozlišitelnými bosony). Pro fermiony platí Pauliho vylučovací

princip, pro bosony tento princip neplatí. Fermiho plyn i Boseho plyn se mohou nacházet ve stavu degenerovaném nebo ve stavu nedegenerovaném.

2.2.2. Nedegenerovaný a degenerovaný Fermiho a Boseho plyn

Nedegenerovaný Fermiho plyn a Boseho plyn pro teploty T o hodně vyšší než tzv. teplota degenerace Θ (tj. $T \gg \Theta$) obsazuje nižší i vyšší energetické hladiny. Nedegenerovaný Fermiho plyn nebo Boseho plyn je tvořen částicemi s vyšší hmotností ma splňuje podmínky nízkých hustot, vysokých teplot. Tyto podmínky jsou podmínkami přechodu k rozlišitelným částicím Maxwellova-Boltzmannova plynu.

Degenerovaný Fermiho plyn nebo Boseho plyn (pro teploty T < teplota degenerace Θ) obsazuje nejnižší možné energetické hladiny, vyšší energetické hladiny zůstávají prázdné. **Degenerovaný Fermiho plyn nebo Boseho plyn** je tvořen částicemi s malou hmotností *m* a splňuje podmínky velkých hustot N / V počtu částic plynu a nízkých teplot *T*. Všechny tyto podmínky lze vyjádřit nerovností

(A3)
$$\frac{V}{N} \left(\frac{2\pi \, mkT}{h^2}\right)^{\frac{3}{2}} << 1.$$

Nerovnost (A3) je přesnějším vyjádřením podmínky degenerace Fermiho nebo Boseho plynu než sice výstižné, ale neúplné odvolání se na vztah teploty T makrosystému k teplotě degenerace Θ .

Příkladem degenerovaného Fermiho plynu je elektronový plyn. Např. při hmotnosti elektronu $m = 10^{-30}$ kg, při počtu elektronů v m³ $N/V = 10^{29}$ by podmínka degenerace (A3) byla splněna až do teplot 2000 – 3000 K. Při srovnání s molekulami vodíku (hmotnost molekuly vodíku je asi 3700 krát větší než hmotnost elektronu) je zřejmé, že degenerace vodíkového plynu by mohla nastat při velmi nízkých teplotách a vysokých hustotách - za těchto podmínek by již byly výrazně překročeny hodnoty, které vedou ke kondenzaci plynu.

Příkladem degenerovaného Boseho plynu je fotonový plyn. Za jistých podmínek je možno na fotonový plyn pohlížet jako na Maxwellův-Boltzmannův plyn. Lze tak učinit pro "malý počet vysokofrekvenčních fotonů", kdy lze na jednotlivé fotony pohlížet jako na

rozlišitelné částice. Naopak pro "velký počet nízkofrekvenčních fotonů" lze fotonový plyn zkoumat jako "téměř" klasický plyn pomocí tzv. ekvipartičního teorému.

2.3. Makrosystémy volných částic při zachování nerozlišitelnosti částic

2.3.1. Makrosystémy klasických a kvantových částic

Při zachování nerozlišitelnosti částic jsou MS volných částic členěny na **MS klasických** částic (klasický plyn tvořený nerozlišitelnými částicemi se spojitým energetickým spektrem) a na **MS kvantových částic** (např. Fermiho nebo Boseho plyn jako kvantové plyny tvořené nerozlišitelnými částicemi s diskrétním energetickým spektrem). Klasický plyn bude zkoumán klasickým statistickým přístupem pomocí klasické rozdělovací funkce a klasických souborových středních hodnot. Kvantový plyn bude zkoumán kvantovým statistickým přístupem pomocí kvantové rozdělovací funkce a kvantových středních hodnot.

2.3.2. Kvantový statistický přístup

Kvantový statistický přístup navazuje na vlnově korpuskulární dualismus částic tvořících makrosystém MS, který se promítá do jejich nerelativistického zkoumání pomocí stacionární Schrödingerovy rovnice (tvar "pravděpodobnostního oblaku" pro stacionární stav se s časem nemění) a pomocí nestacionární Schrödingerovy rovnice (tvar "pravděpodobnostního oblaku" pro nestacionární stav na čase závisí).

Po sdružení obrovského počtu kvantových objektů do kvantových MS je zapotřebí kvantovou mechaniku částice kvantového plynu spojit s aparátem statistického souboru. V důsledku tohoto spojení je zkoumání termodynamických funkcí MS spojeno s hledáním pravděpodobnosti P_{λ} , že namátkou vybraný MS z daného typu statistického souboru bude v λ -tém stavu termodynamické rovnováhy STR. Příslušný stav termodynamické rovnováhy STR bude charakterizován potřebnými středními hodnotami termodynamických funkcí jako rovnovážnými souborovými středními hodnotami.

Hledání hodnot P_{λ} rovnovážné kvantové rozdělovací funkce a jejích rovnovážných souborových středních hodnot je základem použitelnosti metodik vycházejících z aparátu příslušného typu statistického souboru. Obecný kvantový statistický přístup ke zkoumání MS

volných částic je tak převeden na nalezení kvantové rozdělovací funkce pro příslušný typ statistického souboru a jejích souborových středních hodnot.

Rovnovážná kvantová rozdělovací funkce se nazývá matice hustoty nebo statistický operátor a označuje se $\hat{\rho}$. Tento operátor v maticovém tvaru $\hat{\rho} = |\rho_{\lambda\lambda}|$ má za jistých podmínek nenulové prvky jen na hlavní diagonále matice. Nenulové prvky hlavní diagonály $P_{\lambda} = \rho_{\lambda\lambda}$ jsou hledanými hodnotami rozdělovací funkce. Normovací podmínku lze pak zapsat obvyklým způsobem $\Sigma P_{\lambda} = \Sigma \rho_{\lambda\lambda} = 1$ (často je používán zápis pro součet diagonálních prvků matice $\hat{\rho}$ v podobě Sp $\hat{\rho} = 1$). Rovněž výraz pro souborovou střední hodnotu termodynamické funkce *L* je obvyklý $\overline{L} = \Sigma P_{\lambda} L_{\lambda}$.

2.3.3. Klasický statistický přístup

Klasický statistický přístup navazuje na klasické formalismy zkoumání stavů a pohybů částice nebo uspořádaného pohybu soustavy částic ve fázovém prostoru Φ . Fázový prostor je prostor, jehož rozměry jsou nejen např. obvyklé souřadnice *x*, *y*, *z*, ale také např. složky hybnosti p_x , p_y , p_z .

Po sdružení obrovského počtu klasických částic do klasických MS je zapotřebí klasickou mechaniku částice klasického plynu spojit s aparátem statistického souboru. V důsledku tohoto spojení je zkoumání termodynamických funkcí klasického plynu spojeno s hledáním rovnovážné klasické rozdělovací funkce ρ a jejích souborových středních hodnot jako středních hodnot termodynamických funkcí stavů termodynamické rovnováhy STR.

Rovnovážná klasická rozdělovací funkce ρ je dána pravděpodobností výskytu namátkou vybraného MS z daného typu statistického souboru v jednotkovém objemu fázového prostoru. Hodnoty d*P* klasické rozdělovací funkce určují pravděpodobnost výskytu v elementu fázového prostoru d Φ .

Hledání hodnot $dP = \rho d\Phi$ rovnovážné klasické rozdělovací funkce a jejích rovnovážných souborových středních hodnot je základem použitelnosti metodik vycházejících z aparátu příslušného typu statistického souboru. Obecný klasický statistický přístup ke zkoumání MS volných částic je tak převeden na nalezení klasické rozdělovací funkce pro příslušný typ statistického souboru a jejích souborových středních hodnot. Rovnovážná klasická rozdělovací funkce jako hustota pravděpodobnosti ρ má normovací podmínku $\int \rho d\Phi = \int dP = 1$ a vztah pro souborovou střední hodnotu má obvyklý tvar $\overline{L} = \int L\rho d\Phi = \int LdP$.

SOUHRN 2

V druhé kapitole byl vyložen způsob první konkretizace metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS) prostřednictvím typologie makrosystémů MS.

První kritérium a) "vzájemné interakce" vyšlo z možnosti výběru mezi makrosystémy MS volných nebo vázaných částic. Z hlediska dostupných matematických a statistických prostředků zkoumání se ukázalo, že toto kritérium bude jednostranné - zásadně budou zkoumány jen makrosystémy MS volných částic. Tato jednostranná volba umožnila rozložit λ -tý stav termodynamické rovnováhy STR charakterizovaný vnitřní energií U_{λ} a počtem částic N_{λ} na jednotlivé *v*-té energetické hladiny obsazené N_{V} částicemi a s energií ε_{V} jedné částice. Tento rozklad byl vyjádřen vztahy (A2).

Druhé kritérium b) "rozlišitelnosti nebo nerozlišitelnosti částic" a podprahovosti teploty degenerace vyšlo z kvantového principu nerozlišitelnosti částic při zachování diskrétnosti hodnot energie. Toto kritérium se stalo kritériem dvojstranným - lze zkoumat jak makrosystémy MS rozlišitelných částic (tzv. Maxwellův-Boltzmannův plyn), tak i makrosystémy nerozlišitelných částic (tzv. Fermiho plyn nebo Boseho plyn). Současně se ukázalo, že Maxwellův-Boltzmannův plyn lze považovat za nedegenerovaný Fermiho a Boseho plyn (rozdíl při nesplnění podmínky degenerace (A3) mizí) a že volba Fermiho nebo Boseho plynu je nezbytná v případě jejich degenerovanosti (splnění podmínky (A3)).

Třetí kritérium c) "spojitosti nebo diskrétnosti hodnot energie" vyšlo ze spojitosti hodnot energie (pak je zkoumaný MS klasickým plynem) nebo diskrétnosti hodnot energie (pak je zkoumaný makrosystém MS kvantovým plynem) při zachování nerozlišitelnosti částic. Jak u klasického plynu, tak i u kvantového plynu (jehož podobami může být např. Fermiho nebo Boseho plyn) byl stručně probrán aparát rozdělovacích funkcí a souborových středních hodnot. Toto kritérium se stalo kritériem dvojstranným - lze zkoumat jak klasický, tak i kvantový plyn.

Druhá kapitola přesně vymezila první konkretizaci metodik č.1 a č.2 - budou zásadně zkoumány MS volných částic, které mohou být buď klasickým či kvantovým plynem nebo plynem rozlišitelných částic (Maxwellův-Boltzmannův plyn) či plynem nerozlišitelných částic (Fermiho plyn, Boseho plyn). Současně se objevila potřeba druhé konkretizace metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS) - spojit klasické a kvantové předpoklady zkoumání makrosystémů MS do kvaziklasického statistického přístupu ke zkoumání makrosystémů MS.

KONEC SOUHRNU 2

3. Kvaziklasický statistický přístup (Přílohy A1, A2, A3)

3.1. Relativistický statistický přístup k makrosystému volných částic

Při zkoumání makrosystému MS volných částic lze vyjádřit rozpad λ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR na *v*-té energetické hladiny pomocí vztahu (A2). Ve vzorcích vztahu (A2) se objevuje energie ε_v jedné částice v *v*-té energetické hladině.

Relativistický statistický přístup bude spočívat v použití správného výrazu pro energii ε jedné částice.

U volných relativistických látkových částic s nenulovou klidovou hmotností m_0 bude správným výrazem pro energii ε relativistický výraz

(A4)
$$\varepsilon = c. (p^2 + m_0^2 c^2)^{\frac{1}{2}} = mc^2,$$

v němž p je hybnost částice, c rychlost světla a m hmotnost částice při hybnosti p.

U fotonů, které mají nulovou klidovou hmotnost m_0 , bude správným výrazem pro energii ε ultrarelativistický výraz

(A5) $\varepsilon = c.p$, kde hybnost fotonu s frekvencí v je dána vztahem p = h. v/c.

U volných nerelativistických látkových částic s hmotností m a hybností p bude správným výrazem pro energii ε klasický výraz

(A6)
$$\varepsilon = p^2/2m$$
.

3.2. Váhový faktor energetické hladiny a odlišnost mezi makrosystémy rozlišitelných a nerozlišitelných částic

3.2.1. Váhový faktor energetické hladiny

Při zkoumání makrosystému MS volných částic lze vyjádřit rozpad λ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR na ν -té energetické hladiny pomocí vztahu (A2). Každá z N_{ν} volných částic ν -té energetické hladiny má energií ε_{ν} . V kvantové mechanice může konkrétní ν -té energetické hladině příslušet více kvantových stavů, jejichž počet je vyjádřen tzv. faktorem degenerace g_{ν} ν -té energetické hladiny. K pochopení odlišnosti makrosystémů **rozlišitelných částic** Maxwellova-Boltzmannova plynu a makrosystémů **nerozlišitelných** částic Fermiho plynu nebo Boseho plynu si lze položit následující otázku:

Jakým počtem způsobů lze realizovat rozdělení N_v rozlišitelných a nerozlišitelných částic do *v*-té energetické hladiny λ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR, je-li tato *v*-tá energetická hladina spojena s faktorem degenerace g_v ?

Tento počet způsobů bude nazván váhovým faktorem Γ_{ν} *v*-té energetické hladiny. Váhový faktor energetické hladiny je vhodnou pomůckou pro pochopení hledané odlišnosti mezi Maxwellovým-Boltzmannovým plynem na jedné straně a Fermiho či Boseho plynem na straně druhé. Váhový faktor celého termodynamického stavu bude zkoumán později v souvislosti se zavedením entropie.

3.2.2. Faktor degenerace energetické hladiny

Faktor degenerace g_{ν} ukazuje, na kolik energetických podhladin se může rozštěpit ν -tá energetická hladina při vložení např. do vnějšího silového pole. Příkladem je štěpení spektrálních čar vzniklých přechody elektronu v elektronovém obalu atomu v magnetickém poli při "normálním Zeemanově jevu", zatímco štěpení čar při "anomálním Zeemanově jevu" je způsobeno spinem elektronu a jeho dvěma možnými orientacemi. Pro fotonový plyn je pro frekvenci ν faktor degenerace $g_{\nu} = 2$. Důvodem této hodnoty faktoru degenerace je možnost dvou různých směrů polarizace fotonů (elektromagnetického vlnění) se stejnou frekvencí ν : Kruhové polarizace ve směru nebo proti směru otáčení hodinových ručiček. Faktor degenerace může být uváděn také bez vazby na ν -tou energetickou hladinu, pak bude označován g.

3.2.3. Určení váhového faktoru pro jednoduché případy

Pro objasnění vlivu nerozlišitelnosti a rozlišitelnosti částic na váhový faktor Γ_{ν} bude zkoumán jednoduchý nestatistický případ dvou částic ($N_{\nu} = 2$), které se mohou vyskytovat v jednočásticové hladině ε_v s degeneračním faktorem $g_v = 2$ (pro fermiony musí platit $N_v \le g_v$, bosony nejsou touto podmínkou omezeny).

Pro rozlišitelné molekuly *a*, *b* Maxwellova-Boltzmannova plynu lze obdržet následující počet způsobů realizace zkoumaného stavu: (*ab*,0), (*a*,*b*), (*b*,*a*), (0,*ab*). Váhový faktor $\Gamma_{\nu} = 4$. Při libovolném N_{ν} a $g_{\nu} = 2$ platí u částic Maxwellova-Boltzmannova plynu pro váhový faktor vzorec

$$(A7) \qquad \Gamma_{\nu} = 2^{N_{\nu}}.$$

Pro fermiony *a*, *b* **Fermiho plynu** existuje jen jeden způsob (*a*,*b*) realizace zkoumaného stavu. Váhový faktor $\Gamma_{\nu} = 1$ (platnost Pauliho vylučovacího principu). Při libovolném N_{ν} a g_{ν} ($N_{\nu} \le g_{\nu}$) platí u částic Fermiho plynu pro váhový faktor vzorec

(A8)
$$\Gamma_{\nu} = \frac{g_{\nu}!}{N_{\nu}!(g_{\nu} - N_{\nu})!}.$$

Pro bosony *a*, *b* **Boseho plynu** lze obdržet následující počet způsobů realizace zkoumaného stavu: (*ab*,0), (*a*,*b*), (*0*,*ab*). Váhový faktor $\Gamma_V = 3$ (neplatnost Pauliho vylučovacího principu). Při libovolném N_V a g_V platí u částic Boseho plynu pro váhový faktor vzorec

(A9)
$$\Gamma_{\nu} = \frac{(N_{\nu} + g_{\nu} - 1)!}{N_{\nu}!(g_{\nu} - 1)!}.$$

Po dosazení do vzorců (A7), (A8) a (A9) za $N_v = 2$, $g_v = 2$ lze obdržet váhové faktory $\Gamma_v = 4$, $\Gamma_v = 1$ a $\Gamma_v = 3$ již dříve získané výčtem způsobů realizace zkoumaného stavu.

Obdobný jednoduchý nestatistický případ čtyř částic ($N_v = 4$), které se mohou vyskytovat v jednočásticové hladině ε_v s degeneračním faktorem $g_v = 2$ (pro fermiony není

ovšem splněna podmínka $N_{\nu} \le g_{\nu}$, nelze je proto zkoumat), vede s užitím vzorce (A7) pro Maxwellův-Boltzmannův plyn k váhovému faktoru $\Gamma_{\nu} = 16$ a s užitím vzorce (A9) pro Boseho plyn k váhovému faktoru $\Gamma_{\nu} = 5$.

Výčet způsobů rozdělení čtyř částic *a,b,c,d* vede u Maxwellova-Boltzmannova plynu k následujícím 16 možnostem: (*abcd*,0), (*abc,d*), (*abd,c*), (*acd,b*), (*bcd,a*), (*ab,cd*), (*ac,bd*), (*ac,bd*), (*bc,ad*), (*bd,ac*), (*cd,ab*), (*d,abc*), (*c,abd*), (*b,acd*), (*a,bcd*), (0,*abcd*).

Výčet způsobů rozdělení čtyř částic *a,b,c,d* vede u Boseho plynu k následujícím 5 možnostem: (4,0), (3,1), (2,2), (1,3), (0,4).

Vzorec (A7) popisuje rozlišitelné částice Maxwellova-Boltzmannova plynu pro speciální případ $g_v = 2$, vzorce (A8), (A9) nerozlišitelné částice Fermiho a Boseho plynu pro případ zcela obecný. Obecný vzorec pro rozlišitelné částice Maxwellova-Boltzmannova plynu by bylo možné získat z vzorců (A8) a (A9) na základě uplatnění podmínky rozlišitelnosti $g_v >> N_v$.

3.2.4. Odlišnost rozlišitelných a nerozlišitelných částic

Srovnáním obou skupin vzorců, tj. vzorce (A7) na jedné straně a vzorců (A8), (A9) na straně druhé, lze vymezit základní odlišnost rozlišitelných a nerozlišitelných částic - je to výskyt faktoriálu $N_{\nu}!$ ve jmenovatelích vzorců (A8), (A9), ve vzorci (A7) se dělení faktoriálem $N_{\nu}!$ neobjevuje.

Obecně lze konstatovat, že makrostav daného makrosystému MS se pro nerozlišitelné částice nezmění při permutaci totožných N částic. To je běžný závěr kombinatoriky - pro nerozlišitelné částice se bude ve jmenovateli vyskytovat faktoriál N!. Tento závěr lze ilustrovat např. pro fázový prostor Φ , v jehož rámci bude zkoumán makrosystém MS tvořený N nerozlišitelnými (totožnými) částicemi. Pak bude fázový objem Φ_D fyzikálně různých makrostavů roven $\Phi_D = \Phi / N!$.

Při návratu ke statistickému přístupu je také samozřejmý návrat k makrosystémům MS s obrovským počtem *N* částic. Pak lze využívat pro faktoriál *N*! tzv. Stirlingův vzorec

(A10)
$$N! = \left(\frac{N}{e}\right)^{N}.$$

Stirlingův vzorec (A10) lze odvodit užitím Eulerovy - Maclaurinovy formule.

3.3. Váhový faktor termodynamického stavu a entropie jako míra neuspořádanosti makrosystému

3.3.1. Entropie ve fenomenologické termodynamice

Ve fenomenologické termodynamice se nezavádí entropie S, nýbrž její úplný diferenciál

(A11)
$$dS = \delta Q / T.$$

 δQ je neúplný diferenciál tepla, *T* absolutní teplota **jednoduchého a termicky homogenního makrosystému MS volných částic**. Entropie je proto úzce spojena s neuspořádaným pohybem částic makrosystému v tom smyslu, že míra neuspořádanosti makrosystému nabývá maxima ve stavu termodynamické rovnováhy STR.

Úplný diferenciál entropie d*S* neumožňuje určit absolutní hodnotu entropie. Entropie *S* je určena až na konstantu S_0 . Určení hraniční podmínky pro stanovení konstanty S_0 je obsahem zvláštního termodynamického principu. Entropie je aditivní funkcí stavových parametrů jednotlivých podsystémů makrosystému (pro případ dvou podsystémů lze tuto aditivnost vystihnout zápisem d $S = d(S_1 + S_2)$).

Lze prokázat, že entropie je termodynamickou funkcí stavu. Např. pro 1 mol ideálního plynu a se zavedením molové tepelné kapacity C_V při stálém objemu lze napsat pro vnitřní energii vztah

 $dU = C_V dT$ a současně také vztah $dU = \delta Q - p dV$ (viz později uvedený vztah (A16)).

Po vydělení obou vztahů absolutní teplotou *T* a s použitím stavové rovnice ideálních plynů $pV = RT (R \text{ je plynová konstanta s hodnotou } R=8,314 \text{ J.K}^{-1}.\text{mol}^{-1})$ lze získat s pomocí (A11) vztah

$$dS = C_V (dT / T) + R(dV / V)$$
, jehož integrací lze obdržet $S = C_V \ln T + R \ln V + S_0$.

Integrace tedy závisí jen na konečném a počátečním stavu, nikoliv na integrační cestě. Entropie je termodynamickou funkcí stavu.

3.3.2. Vztah entropie a váhového faktoru termodynamického stavu

Váhový faktor Γ obecného termodynamického stavu **termicky homogenního a jednoduchého makrosystému MS volných částic** je počet způsobů, kterým může být daný stav realizován. Pravděpodobnější je ten termodynamický stav, který má vyšší váhový faktor - s růstem počtu způsobů realizace termodynamického stavu roste pravděpodobnost termodynamického stavu. Je zřejmé, že při obnovování stavu termodynamické rovnováhy STR neklesá počet způsobů realizace termodynamického stavu. Stav termodynamické rovnováhy STR má tedy váhový faktor Γ , který je maximální ve srovnání s váhovým faktorem kteréhokoliv jiného termodynamického stavu.

Neuspořádanost termodynamického stavu roste s počtem způsobů jeho realizace. Entropie S je obdobně jako váhový faktor Γ považována za vhodné vyjádření míry neuspořádanosti daného makrosystému MS. Entropie S i váhový faktor Γ spějí ve statistické termodynamice ST i fenomenologické termodynamice FT ke své maximální hodnotě ve stavu termodynamické rovnováhy STR.

Entropie jako termodynamická funkce stavu popisuje přirozené (a tím i nevratné) termodynamické procesy obnovující po uplynutí relaxační doby t_0 stav termodynamické rovnováhy STR. Váhový faktor Γ popisuje narůstání počtu způsobu realizace termodynamických stavů při jejich přibližování ke stavu termodynamické rovnováhy STR. **Ke kvantitativnímu vyjádření entropie** *S* **jako termodynamické funkce stavu je proto potřebné nalézt matematickou funkci**, která spojí aditivní vlastnosti entropie a pravděpodobnostní charakter váhového faktoru Γ termodynamického stavu.

3.3.3. Entropie ve statistické termodynamice

Statistická termodynamika ST jednoduchých a termicky homogenních makrosystémů MS volných částic bude vycházet z přímé vazby mezi entropií a mírou

pravděpodobnosti termodynamického stavu, kterou bude počet způsobů Γ realizace příslušného termodynamického stavu. Takto vymezený statistický a pravděpodobnostní smysl entropie je typickým rysem kvantového statistického přístupu (aby byl počet způsobů realizace termodynamického stavu konečný, počet energetických stavů musí vycházet z diskrétního spektra, energie musí být kvantována). <u>(Ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 1)</u>. Existuje tedy jistý univerzální vztah $S = f(\Gamma)$ mezi entropií S v daném stavu a váhovým faktorem Γ tohoto stavu. Tento univerzální vztah lze charakterizovat východisky:

a) Makrosystém MS nechť je rozdělen na 2 části, stav 1. části má váhový faktor Γ_1 své realizace, stav 2. části váhový faktor Γ_2 . Z aditivnosti entropie vzhledem k oběma částem $S = S_1 + S_2$ plyne $f(\Gamma) = f(\Gamma_1) + f(\Gamma_2)$

b) Vzhledem k malému dosahu např. mezimolekulárních sil lze pokládat části 1 a 2 za navzájem nezávislé a tudíž platí obdobně jako pro pravděpodobnosti vztah $\Gamma = \Gamma_1$. Γ_2

c) Lze požadovat, aby entropie byla neklesající funkcí váhového faktoru Γ a aby měla nezáporné hodnoty $S \ge 0$.

3.3.4. Odvození Boltzmannovy rovnice

Z východisek a), b), c) plyne, že $S = f(\Gamma) = konst$. ln Γ. Jelikož váhový faktor Γ je bezrozměrný, je rozměr [*konst*.] roven rozměru *S*, tj. J.K⁻¹. Tato univerzální konstanta s rozměrem entropie je stejná pro všechny MS a její hodnotu lze určit pomocí libovolného makrosystému MS. Např. prostřednictvím aparátu mikrokanonického statistického souboru MSS lze ukázat, že univerzální konstanta *konst*. je známou Boltzmannovou konstantou *k*, která je rovna podílu plynové konstanty *R* a Avogadrovy konstanty N_A a má hodnotu $k = 1,38066.10^{-23}$ J.K⁻¹.

Z východisek a), b), c) plyne také volba váhového faktoru Γ ($\Gamma \ge 1$) jako vhodné míry pravděpodobnosti. Obvyklá matematická pravděpodobnost $0 \le P \le 1$ není použitelná, neboť pak by byla $S \le 0$. Váhový faktor Γ se často nazývá termodynamickou pravděpodobností.

Z východisek a), b), c) a z podmínky $\Gamma = 1$ pro nejnižší hodnotu teploty (a tedy i energie) **plyne** hodnota entropie S = 0. Termodynamický stav při teplotě blížící se teplotě absolutní nuly lze za vhodných podmínek realizovat jediným způsobem (neuspořádaný pohyb částic makrosystému MS ustává).

Výsledný vztah mezi entropií *S* a váhovým faktorem Γ daného stavu má tedy tvar (A12) $S = k.\ln\Gamma$ (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 1). Tento slavný vztah se obvykle nazývá **Boltzmannovou rovnicí** a je klíčem ke spojení entropie *S* a váhového faktoru Γ s ostatními termodynamickými funkcemi. Lze poznamenat, že tato rovnice je vytesána do Boltzmannova náhrobku.

3.4. Podstata kvaziklasického statistického přístupu

3.4.1. Spojení klasických a kvantových předpokladů

Z hlediska praktické použitelnosti se ukazuje výhodným spojit klasické a kvantové předpoklady a místo odděleného klasického statistického přístupu a kvantového statistického přístupu vydat se cestou kvaziklasického statistického přístupu. Kvaziklasický statistický přístup většinou vychází ze společného používání klasického předpokladu "fázový prostor Φ " (který vychází ze spojitého spektra stavů termodynamické rovnováhy STR a tím i ze spojitého spektra energetických hodnot) a kvantového předpokladu "kvantování fázového prostoru Φ " na diskrétní buňky obsahující jeden stav termodynamické rovnováhy STR o velikosti h^f , kde f označuje počet stupňů volnosti zkoumaného problému.

3.4.2. Obecné určení počtu kvaziklasických stavů

Bude-li zkoumán makrosystém MS s N volnými částicemi (např. ideální jednoatomární plyn), pak počet stupňů volnosti f bude f = 3N. Bude-li např. v souladu s Heisenbergovými relacemi neurčitosti a v souladu s třemi stupni volnosti pro translaci jedné částice zkoumána jedna částice ideálního jednoatomárního plynu, bude možné vzít za počet stupňů volnosti fhodnotu f = 3. U jedné částice lze rovněž používat obvyklý faktor degenerace g. Takto pojatý kvaziklasický statistický přístup umožňuje vypočítat počty kvaziklasických stavů d Γ v elementu fázového prostoru d Φ pomocí vztahů

(A13)
$$d\Gamma = \frac{g \, d\Phi}{h^3}$$
 (částice ideálního jednoatomárního plynu)
(A14) $d\Gamma = \frac{d\Phi}{h^{3N}}$ (ideální jednoatomární plyn s *N* částicemi)
(A15) $d\Gamma = \frac{d\Phi}{h^f}$ (obecný případ problému s *f* stupni volnosti).

3.4.3. Určení počtu kvaziklasických stavů v energetických vrstvách

Vzhledem k Tolmanově hypotéze (viz 1.kap., odst.1.4.), která umožňuje při vyloučení pohybu makrosystému MS jako celku vzít jako základní charakteristiku termodynamického stavu energii, se výpočty počtů kvaziklasických stavů d Γ podle vztahů (A13), (A14), (A15) často převádějí na výpočty počtu kvaziklasických stavů $\Delta\Gamma$ v energetických vrstvách o šířce ΔU pro celý makrosystém MS (viz (A14)) nebo o šířce $\Delta \varepsilon$ pro částici makrosystému MS (viz (A13)) (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 6).

Např. pro vodíkovou molekulu ($m=3,34.10^{-27}$ kg) s energií $\varepsilon \sim 1$ eV v objemu V=1 cm³ lze dostat pro tloušťku $\Delta \varepsilon = 10^{-6}$ eV jak aplikací kvantové mechaniky, tak i použitím (A13) obrovský počet kvaziklasických stavů $\Delta \Gamma \sim 24.10^{20}$. Odtud vyplývá, že střední vzdálenost mezi sousedními energetickými hladinami je tak malá, že lze hovořit o energetickém kvazikontinuu.

Nechť je zkoumán celý makrosystém vodíkového plynu. Nechť je dále $\varepsilon \sim 1 \text{ eV}$, počet molekul $N \sim 6.10^{23}$ (Avogadrova konstanta pro 1 mol) a objem $V = 22,4.10^{-3} \text{ m}^3$ (objem 1 mol). Pak lze při šířce energetické vrstvy $\Delta U = 10^{-6} \text{ eV}$ dostat pro počet kvaziklasických stavů vodíkového plynu užitím (A14) a vztahu $\Phi_D = \Phi / N!$ obrovské číslo $\Delta \Gamma \sim 10^{4,7.10^{24}}$, které klasická fyzika pochopitelně aproximuje nekonečnem.

3.4.4. Vztah počtu kvaziklasických stavů a váhového faktoru

Při předcházejícím použití vzorců (A13) a (A14) pro jednu částici a pro celý makrosystém MS se objeví souvislost váhového faktoru Γ ideálního plynu a počtu kvaziklasických stavů $\Delta\Gamma$ v energetické vrstvě ΔU . S respektováním vztahu pro nerozlišitelnost částic $\Phi_D = \Phi / N!$ lze obdržet hledanou souvislost ve tvaru $\Delta\Gamma = \frac{3}{2}\Gamma \frac{\Delta U}{\varepsilon}$.

3.4.5. Kvaziklasická rozdělovací funkce a její hodnoty

Kvaziklasický statistický přístup umožňuje vhodným způsobem předefinovat hodnoty $dP = \rho \, d\Phi$ rovnovážné klasické rozdělovací funkce nebo také i hodnoty $P_{\lambda} = \rho_{\lambda\lambda}$ kvantové rozdělovací funkce (viz 2.kap., odst.2.3.). Např. při použití klasické rozdělovací funkce lze po dosazení ze vzorce (A15) získat $dP = \rho h^f d\Gamma$ a zavést rovnovážnou kvaziklasickou rozdělovací funkci $\rho' = \rho h^{f}$. Hodnoty kvaziklasické rozdělovací funkce pak budou mít tvar d $P = \rho' d\Gamma$. Souhrnně lze tedy pro hodnoty kvantové, klasické a kvaziklasické rozdělovací funkce (tj. pro hodnoty KRF, KLRF a KKRF) zapsat

(A16) $P_{\lambda} = \rho_{\lambda\lambda}$ (KRF), $dP = \rho d\Phi$ (KLRF), $dP = \rho' d\Gamma$ (KKRF-východisko KLRF).

3.4.6. Obrysový algoritmus kvaziklasického statistického přístupu

Kvaziklasický statistický přístup lze na základě získaných poznatků o jeho struktuře do jisté míry algoritmizovat. Vzniklý obrysový algoritmus je podkladem pro tvorbu exaktních algoritmů metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS). Algoritmus kvaziklasického statistického přístupu při zkoumání konkrétního MS je posloupností těchto kroků:

- Respektování vstupních podmínek statistického přístupu: Zkoumání stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP, eliminování pohybu makrosystému MS jako celku, přijetí Tolmanovy hypotézy a charakterizování termodynamických stavů a jejich změn pomocí energie a počtu částic (tj. respektování (A1)), zkoumání makrosystému MS volných částic (tj. respektování (A2))
- Volba typu statistického souboru s výběrem metodiky č.1 na základě volby grandkanonického statistického souboru GSS nebo metodiky č.2 na základě volby kanonického statistického souboru KSS
- Volba typu makrosystému MS volných částic: Výběr makrosystému MS rozlišitelných nebo nerozlišitelných částic a výběr klasického nebo kvantového plynu
- Volba vhodného vztahu (A4) nebo (A5) nebo (A6) relativistického statistického přístupu pro energii volné částice na základě respektování relativistických efektů (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 6).
- Volba kvaziklasického vztahu pro výpočet počtu stavů termodynamické rovnováhy STR v elementu fázového prostoru nebo v dané šířce energetického intervalu (viz (A13), (A14), (A15) s použitím vazby na váhový faktor soustavy volných částic podle (A7), (A8), (A9), (A10) a na váhový faktor termodynamického stavu podle (A11), (A12)) (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 1).
- Kvaziklasická úprava vztahů pro hodnoty kvantové rozdělovací funkce a klasické rozdělovací funkce s cílem získat vztah pro hodnoty kvaziklasické rozdělovací funkce (viz (A16)).

SOUHRN 3

Třetí kapitola měla splnit potřebu druhé konkretizace metodik č.1 (grandkanonický statistický soubor GSS) a č.2 (kanonický statistický soubor KSS) prostřednictvím vymezení integrujícího kvaziklasického statistického přístupu, který by spojoval předpoklady klasické i kvantové a současně řešil i otázky praktického zkoumání makrosystému MS.

Propojení klasických a kvantových předpokladů bylo provedeno volbou klasického fázového prostoru Φ souřadnic a hybností a kvantování fázového prostoru na diskrétní buňky (např. o velikosti h^3 při zkoumání MS volných částic s třemi stupni volnosti). Se zahrnutím faktoru degenerace *g* pak bylo možno pro počet kvaziklasických stavů v elementu fázového prostoru d Φ napsat vztahy (A13), (A14), (A15), které jsou základem kvaziklasického přístupu. Odtud také pramení kvaziklasická úprava hodnot klasické rozdělovací funkce nebo kvantové rozdělovací funkce (viz (A16)).

Integrující role kvaziklasického statistického přístupu byla ujasněna nalezením dvou dvou dílčích integrujících faktorů - integrujícího faktoru A daného relativistickým statistickým přístupem (viz vztahy (A4), (A5), (A6)) a integrujícího faktoru B, který vymezením váhového faktoru jak pro energetickou hladinu (viz vztahy (A7), (A8), (A9), (A10)), tak i pro obecný termodynamický stav umožnil jednak zavedení entropie *S* jako míry neuspořádanosti makrosystému (viz vztahy (A11), (A12)), jednak ozřejmil vazbu na výpočet počtu kvaziklasických stavů v elementu fázového prostoru.

Základním výsledkem třetí kapitoly je globální integrující faktor C jako obrysový algoritmus kvaziklasického statistického přístupu, který je základním předpokladem pro vznik exaktních algoritmů metodik č.1 (grandkanonický statistický soubor GSS) a č.2 (kanonický statistický soubor KSS) a tím také ke zkoumání konkrétních makrosystémů fyzikální praxe. Současně třetí kapitola ukázala na potřebu třetí konkretizace metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS): Zavedení potřebných termodynamických funkcí makrosystému jako posledního kroku před návrhem exaktních algoritmů obou metodik.

KONEC SOUHRNU 3

4. Termodynamické funkce makrosystému (Přílohy A1, A4, A5)

4.1. Členění termodynamických funkcí

Termodynamické funkce makrosystému MS lze členit na stavové parametry (stavové veličiny) a na vztahy mezi stavovými parametry (termodynamické zákony a zákonitosti, termodynamické funkce stavu). Předpokladem pro vymezování termodynamických funkcí je stanovení termodynamických postulátů a principů.

Stavové parametry se dělí na vnější a_i a vnitřní α_j , také se dělí na intenzivní (např. teplota *T*, tlak *p*) a extenzivní (např. objem *V*, vnitřní energie *U*). Extenzivní parametry splňují podmínku aditivnosti.

Vztahy mezi stavovými parametry lze členit na stavové rovnice (např. stavová rovnice ideálních plynů, kalorimetrická rovnice), na věty termodynamické (první, druhá a třetí věta termodynamická, vztahy pro termodynamické potenciály) a na vztahy popisující specifické vlastnosti makrosystému (např. Mayerův vztah, vztahy mezi derivacemi termodynamických funkcí). Stavové rovnice spíše charakterizují termodynamické stavy, věty termodynamické a vztahy pro termodynamické potenciály popisují přeměny forem energie a tím termodynamický pohyb.

4.2. Termodynamické postuláty

Termodynamické postuláty a termodynamické principy jsou blízké Carathéodoryho pojetí termodynamiky, které vychází z hlubokého zobecnění zkušeností do soustavy axiomů. Carathéodoryho axiomatika umožňuje zavést s dostatečnou exaktností potřebné termodynamické funkce fenomenologické termodynamiky FT. Umožňuje pochopit postuláty statistické termodynamiky ST (např. Tolmanovu hypotézu nebo rovnost časové střední hodnoty termodynamické funkce a souborové střední hodnoty termodynamické funkce). Umožňuje pohlížet na souborové střední hodnoty jako na statistické analogony termodynamických funkcí. umožňuje také pochopit statistický А smysl termodynamických zákonů zákonitostí, který lze získat nahrazením a termodynamických funkcí jejich statistickými analogony.

První postulát termodynamiky oprávněně předpokládá, že každý MS, který je od času t v daných časově neměnných podmínkách vnějších parametrů a_i nevyhnutelně dospěje

za relaxační dobu t_0 do stavu termodynamické rovnováhy STR, v němž mají všechny stavové parametry časově konstantní hodnoty. V makrosystému MS pak neexistují žádné termodynamické procesy, tj. stavové parametry a_i , α_i jsou rovny svým časově středním hodnotám, které odpovídají souborovým středním hodnotám.

Důsledkem prvního postulátu termodynamiky je, že při narušení stavu termodynamické rovnováhy STR se začnou stavové parametry měnit s časem, v makrosystému MS začnou probíhat termodynamické procesy jako způsob změny stavových parametrů, objeví se termodynamický pohyb. Stav termodynamické nerovnováhy STN je pak dán hodnotami potřebného souboru makroskopických stavových parametrů v daném časovém okamžiku. V MS pak obvykle proběhnou nevratné (relaxační) procesy, které přivedou MS do nového stavu termodynamické rovnováhy STR. Tyto procesy "vyrovnávání" jsou obvykle spojeny s jistými makroskopickými pohyby (toky) uvnitř MS, např. tokem látky, tokem energie, tokem elektrického náboje apod. Po obnovení STR jsou všechny makroskopické toky rovny nule a všechny stavové parametry mají opět konstantní (na čase nezávislé) hodnoty.

Podle **druhého postulátu termodynamiky** je stav termodynamické rovnováhy STR termicky homogenního MS jednoznačně určen souborem a_i vnějších parametrů a jedním vnitřním parametrem, za který lze vzít vnitřní energii U makrosystému. Podle tohoto druhého postulátu termodynamiky lze všechny ostatní vnitřní parametry α_j vyjádřit funkční závislostí (A1).

Nemění-li se počet částic MS, lze druhý postulát termodynamiky stručně vyjádřit sdělením, že **"Stav termodynamické rovnováhy STR je charakterizován energií"** - tím představuje druhý termodynamický postulát výraznou podporu pro oprávněnost Tolmanovy hypotézy.

Zavedením teploty *T* lze druhý postulát termodynamiky (A1) $\alpha_j = f_j$ (*U*, a_i) přeformulovat na funkční závislost $\alpha_j = f_j$ (*T*, a_i). Tyto funkční závislosti již představují stavové rovnice (ve stavu termodynamické rovnováhy STR jde o rovnovážné stavové rovnice). Při vratném termodynamickém procesu VTP jako spojité posloupnosti rovnovážných stavů platí v každém okamžiku rovnovážné stavové rovnice. Vhodných stavových rovnic jako vyjádření druhého postulátu termodynamiky lze použít k realizaci teplotních stupnic.

4.3. Věty termodynamické

Tři termodynamické principy fenomenologické termodynamiky FT lze vyjádřit prostřednictvím tří vět termodynamických.

Jestliže z celkové energie MS bude vyloučena kinetická a potenciální energie příslušné mechanickému pohybu MS jako celku, lze touto cestou získat vnitřní energii *U* makrosystému. Např. v mechanice nebo v teorii pole lze zákon zachování energie odvodit jako matematický důsledek pohybových rovnic, tj. zákon zachování energie nepředstavuje samostatný fyzikální princip. V reálných podmínkách MS není tento postup použitelný, navíc vystupují do popředí transformace různých forem energie a vzájemná závislost těchto transformací. Z těchto důvodů se zákon zachování vnitřní energie stává samostatným fyzikálním principem pod názvem **první věta termodynamická (1.VT)**.

Jelikož přírůstky a úbytky vnitřní energie se dějí prostřednictvím práce W (makropráce na úrovni působení makrotěles okolí a MS jako celku), prostřednictvím tepla Q (mikropráce na úrovni působení částic MS a částic okolí MS) a prostřednictvím změny energie B spojené se změnou počtu částic MS, lze změnu vnitřní energie dU zapsat ve tvaru (d - úplný diferenciál, δ - neúplný diferenciál)

(A17) $dU = \delta W + \delta Q$ (počet částic se nemění)

(A18) $dU = \delta W + \delta Q + \delta B$ (počet částic se mění).

Obvykle platí znaménková konvence, že při dodávání tepla nebo práce makrosystému MS jsou tyto hodnoty tepla a práce brány se znaménkem +, při vydávání tepla a práce makrosystémem MS se znaménkem –. Odtud také pramení známý tvar 1.VT pro jednoduchý a termicky homogenní MS při zachovávání počtu částic a při zavedení entropie *S* (viz (A11))

(A19) dU = TdS - pdV (objem V vnější parametr, teplota T a tlak p vnitřní parametry).

Zákon zachování vnitřní energie makrosystému MS (první věta termodynamická) je často formulován jako nemožnost sestrojit perpetuum mobile prvního druhu.

V první větě termodynamické (A17) d $U = \delta W + \delta Q$ se pojem teploty explicitně nevyskytuje. Proto 1.VT neklade žádná omezení na směr přenosu tepla ani na velikost práce, kterou může MS vykonat vlivem dodaného tepla - podle 1.VT by bylo možné sestrojit tzv. perpetuum mobile druhého druhu jako periodicky pracující stroj, který by odnímal teplo jednomu tělesu a tohoto tepla využíval k vykonávání práce.

Druhá věta termodynamická (2.VT) jako další termodynamický princip by tedy měla charakterizovat takové způsoby změny makroskopických parametrů (tj. takové termodynamické procesy), které sice splňují 1.VT ("nelze sestrojit perpetuum mobile prvního druhu"), ale přesto nemohou probíhat ("nelze sestrojit perpetuum mobile druhého druhu").

Takto vymezená podstata 2.VT umožňuje tento termodynamický princip formulovat dvojím způsobem:

- výčtem nevratných (a tím i jednostranných) termodynamických procesů, které jsou sice v souladu s 1.VT, ale přesto nemohou proběhnout,
- zavedením nových termodynamických funkcí stavu, které popisují přirozené (a tím i nevratné) termodynamické procesy, které obnovují po uplynutí relaxační doby t₀ stav termodynamické rovnováhy STR.

Výčet termodynamických procesů, které sice splňují 1.VT, ale přesto nemohou spontánně proběhnout, je následující:

- a) Plyn se může spontánně rozepínat, nemůže se však spontánně stlačovat
- b) Teplo nemůže spontánně přecházet z těles chladnějších na tělesa teplejší

c) Při tření se kinetická energie makroskopického pohybu mění v tepelnou energii, obrácený přechod není možný, tj. teplo se nemůže měnit v práci, aniž se přitom převede jisté množství tepla z tělesa teplejšího na těleso chladnější.

Nové termodynamické funkce, které by charakterizovaly nemožnost sestrojení perpetua mobile druhého druhu, jsou spojeny se zavedením entropie S a absolutní teploty T (viz vztahy (A11), (A12)). Druhou větu termodynamickou lze pak chápat jako zákon růstu entropie.

Z 2.VT vyplynula existence 2 stavových funkcí - entropie a absolutní teploty. V zavedení obou veličin je značný rozdíl. Absolutní teplota T byla určena jednoznačně. U entropie S je ve fenomenologické termodynamice FT situace zcela odlišná, zavádí se pouze úplný diferenciál dS a k jednoznačnému určení entropie S je nutno znát jistou hraniční podmínku, která by umožňovala určit aditivní konstantu entropie a tím i samu entropii *S*. To je cílem nového termodynamického principu, **třetí věty termodynamické (3.VT)**. Často lze použít Planckovu formulaci 3.VT, která říká, že pro chemicky čistou látku je touto hraniční podmínkou

$$\lim_{T\to 0} S = 0.$$

Ve statistické termodynamice ST je 3.VT přímým důsledkem základních postulátů kvantové statistiky (zavádí se přímo statistický analogon entropie *S*, nikoliv jen její úplný diferenciál d*S*). Ve statistické termodynamice ST nepředstavuje 3.VT samostatný, nezávislý princip. To umožňuje hlubší pohled na vlastnosti MS v blízkosti absolutní nuly, příp. v blízkosti nejnižší hodnoty energie.

4.4. Přehled termodynamických potenciálů

4.4.1. Zavedení pojmu termodynamický potenciál

V klasické mechanice lze snadno ukázat, že dráhové účinky síly lze v konzervativních silových polích popsat prací, která je rovna změně potenciální energie tohoto silového pole. Budou-li se tímto způsobem chovat (za podmínek daných např. vhodně zvoleným vratným termodynamickým procesem VTP) některé termodynamické funkce makrosystému (např. práce vykonaná MS za podmínek daného VTP bude rovna úbytku některé termodynamické funkce), pak vznikne z analogie s klasickou mechanikou oprávnění nazývat takovou termodynamickou funkci termodynamickým potenciálem (viz Dodatek 3, Příklad 1 až 4).

4.4.2. Zavedení vnitřní energie

Při vratném adiabatickém procesu ($\delta Q = 0$, dS = 0) je první věta termodynamiky (A17) redukována na tvar (dU)_S = (δW)_S. Tento tvar ukazuje, že práce (δW)_S vykonaná systémem při vratném adiabatickém procesu je rovna úbytku vnitřní energie MS a je úplným diferenciálem. Vzhledem k analogii s klasickou mechanikou lze **vnitřní energii** U nazvat termodynamickým potenciálem <u>(ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 2</u>).

4.4.3. Zavedení volné energie

Nechť platí 1.VT ve tvaru (A19) dU = T dS - p dV. Od obou stran 1.VT bude odečten úplný diferenciál d(*TS*). Po provedení této operace lze získat tvar

(A20)
$$d(U-TS) = dF = -S dT - p dV,$$

v němž U - TS = F je volná energie nebo také Helmholtzova funkce, která je termodynamickou funkcí stavu v důsledku stavovosti U, T, S. Při vratném izotermickém procesu (dT = 0) bude práce (δW)_T vykonaná systémem rovna změně volné energie (dF)_T a stává se úplným diferenciálem. Volná energie F má při vratných izotermických procesech týž význam jako vnitřní energie U při adiabatických procesech. **Volná energie** F je dalším termodynamickým potenciálem (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 2).

4.4.4. Zavedení entalpie

Nechť opět platí 1.VT ve tvaru dU = T dS - p dV. K oběma stranám 1.VT bude přičten úplný diferenciál d(*pV*). Po provedení této operace lze získat tvar

(A21)
$$d(U + pV) = dH = T dS + V dp,$$

v němž U + pV = H je entalpie, která je opět termodynamickou funkcí stavu. Při vratném izobarickém procesu (dp = 0) bude teplo $(T.dS)_p = (\partial Q)_p$ rovno změně entalpie (dH)_p a stává se proto úplným diferenciálem. **Entalpie** H je dalším termodynamickým potenciálem (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 2).

4.4.5. Zavedení Gibbsova potenciálu

V 1.VT (A17) d $U = \delta Q + \delta W$ bude nyní uvažována práce konaná nejen "zobecněnou silou" tlakem *p*, ale také dalšími zobecněnými silami A_i spojenými s vnějšími parametry a_i , tj. $\delta W = -\Sigma A_i da_i$. Ve vztahu pro δW bude oddělena práce konaná "zobecněnou silou" tlakem *p* a ostatními zobecněnými silami Λ_i (vnější parametry a_i spojené se zobecněnými silami Λ_i budou označeny z formálních důvodů λ_i). Pak bude možné pomocí takto vytvořeného vztahu pro práci δW přepsat 1.VT ve tvaru d $U = T dS - p dV - \Sigma \Lambda_i d\lambda_i$. K oběma stranám 1.VT bude připočten úplný diferenciál d(pV - TS). Po provedení této operace lze získat tvar

(A22)
$$d(U + pV - TS) = d(F + pV) = dG = -S dT + V dp - \Sigma \Lambda_i d\lambda_i = -S dT + V dp + \delta \mathcal{H},$$

v němž bude výraz U + pV - TS = F + pV = G nazván Gibbsovým potenciálem, který je opět termodynamickou funkcí stavu. Při vratném izobaricko-izotermickém procesu (dp = 0, dT = 0) bude práce ($\delta \mathcal{R}$)_{p,T}, tj. práce vykonaná "zobecněnými silami" kromě tlaku p, rovna změně Gibbsova potenciálu (dG)_{p,T} a stává se proto úplným diferenciálem. **Gibbsův potenciál** G je dalším termodynamickým potenciálem <u>(ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 2</u>).

4.4.6. Zavedení chemického potenciálu

Úplný diferenciál vnitřní energie lze při respektování závislosti na počtu částic *N* zapsat podle (A18) a (A19) ve tvaru

(A23)
$$dU = \left(\frac{\partial U}{\partial S}\right)_{V,N} dS + \left(\frac{\partial U}{\partial V}\right)_{S,N} dV + \left(\frac{\partial U}{\partial N}\right)_{S,V} dN, \quad kde \left(\frac{\partial U}{\partial N}\right)_{S,V} = \mu$$

je chemický potenciál (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 3).

Chemický potenciál μ určuje změnu energie při jednotkové změně počtu částic za platnosti podmínek *S=konst.*, *V=konst.* Změny energie tohoto druhu se vyskytují v chemických reakcích. Chemický potenciál μ je do jisté míry analogický např. elektrostatickému potenciálu φ (v elektrostatice potenciál φ určuje změnu elektrostatické energie následkem jednotkové změny náboje, tj. následkem jednotkové změny "elektrického množství").

Člen μ dN, který se stal součástí výrazu (A23) pro úplný diferenciál dU a který charakterizuje MS s měnícím se počtem částic, lze přidat k úplným diferenciálům (A20), (A21), (A22) dalších termodynamických potenciálů <u>(ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 3)</u>. Významné je si tuto možnost uvědomit u Gibbsova potenciálu G = G(T,p,N) = N.g(T,p), který závisí na intenzivních parametrech *T*, *p* a na počtu částic *N*, který představuje jediný

extenzivní parametr. Pro Gibbsův potenciál G lze napsat $dG = -S dT + V dp + \mu dN$. Odtud plyne

$$\mu = \left(\frac{\partial G}{\partial N}\right)_{T,p} = g(T,p),$$

tj. chemický potenciál μ má v proměnných *T*, *p* význam částicového Gibbsova potenciálu *g*. Odtud pramení používání častého vztahu pro Gibbsův potenciál *G* ve tvaru

(A24)
$$G = \mu N$$
.

4.4.7. Zavedení grandkanonického potenciálu

Především pro statistickou termodynamiku ST je užitečné zavést potenciál, který obsahuje chemický potenciál μ jako nezávisle proměnnou. Východiskem pro toto zavedení opět budou termodynamické procesy, při nichž se mění počet částic. Pak lze pro volnou energii *F* napsat vztah (A20) ve tvaru

 $dF = -S dT - p dV + \mu dN$ a odečíst od obou stran úplný diferenciál $d(N\mu)$. Výsledkem bude

(A25)
$$d(F - N\mu) = d(F - G) = d\Omega = -S dT - p dV - N d\mu,$$

kde se již objevuje grandkanonický potenciál $\Omega = F - G$ (podle (A24) je $G = N\mu$). Grandkanonický potenciál Ω má nezávisle proměnné *T*, *V*, μ a je v podmínkách STR roven

(A26)
$$\Omega = -pV$$

Z (A25) plynou vztahy

(A27)
$$S = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial T}\right)_{V,\mu}, \ p = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial V}\right)_{T,\mu}, \ N = -\left(\frac{\partial\Omega}{\partial\mu}\right)_{T,V}$$
 (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 3).

Poslední z těchto vztahů určuje počet částic MS s teplotou *T* a objemem *V*. Tento vztah má zásadní význam pro kvantovou a kvaziklasickou statistickou termodynamiku ST.

4.4.8. Zdůvodnění zavedení termodynamických potenciálů

Role termodynamických potenciálů spočívá především v hledání potřebných souborových středních hodnot při zkoumání chování MS ve STR a při VTP. To se týká např. makrosystému vodivostních elektronů (méně již procházejícího elektrického proudu), supratekutosti a supravodivosti jako vlastnosti MS degenerovaných částic, záření černých těles a kmitů krystalických mříží jako MS fotonů a fononů, MS částic ideálních plynů jako MS rozlišitelných částic. Fenomenologická termodynamika FT jako klasická aproximace statistické termodynamiky ST přebírá výsledky zkoumání vlastností MS ve STR - např. v podobě klasického rovnovážného Boltzmannova rozdělení poloh molekul (viz barometrická formule) nebo klasického rovnovážného Maxwellova rozdělení rychlostí molekul (viz souvislost s pojmem střední kvadratické rychlosti).

Ještě významnější roli hrají chemický a grandkanonický potenciál pro určování rovnovážného rozdělení částic podle energií u makrosystémů MS volných částic. S využitím (A27), (A2) a aditivnosti grandkanonického potenciálu

(A28)
$$\Omega = \Sigma \Omega_{\nu}$$
 (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 4)

lze pro počet částic v ν-té energetické hladině λ-tého STR získat vztah

(A29)
$$N_{\nu} = -\left(\frac{\partial \Omega_{\nu}}{\partial \mu}\right)_{T,\nu}$$
 (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 4).

Pomocí (A29) lze odvodit Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení pro rozlišitelné částice (při zachování kvantování energie), Fermiho-Diracovo rozdělení pro fermiony a Boseho-Einsteinovo rozdělení pro bosony.

Termodynamické potenciály také přispívají ke zkoumání stavů termodynamické nerovnováhy STN a tím také i ke zkoumání nevratných procesů, které směřují k nastolení nového stavu termodynamické rovnováhy STR - nabývají ve STR při splnění nezbytných podmínek své minimální hodnoty.

SOUHRN 4

Čtvrtá kapitola uskutečnila třetí konkretizaci metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS), která spočívala ve vymezení termodynamických funkcí makrosystémů MS. Potřebnost skupin termodynamických funkcí je zjevná. Prostřednictvím souborových středních hodnot ve statistické termodynamice ST jako statistických analogonů termodynamických funkcí fenomenologické termodynamiky FT a prostřednictvím statistického smyslu zákonitostí statistické termodynamiky ST jako statistických obdob těchto zákonitostí ve fenomenologické termodynamiky ST jako statistických obdob těchto zákonitostí ve fenomenologické termodynamiky ST jako statistických obdob těchto zákonitostí ve fenomenologické termodynamice FT lze popsat chování konkrétních makrosystémů MS fyzikální praxe.

Předpokladem pro vymezení termodynamických funkcí se staly z hlediska Carathéodoryho axiomatiky dva termodynamické postuláty a tři termodynamické principy. Termodynamické funkce pak byly rozčleněny na stavové parametry a na vztahy mezi stavovými parametry (mezi tyto zákonitosti patří termodynamické věty, včetně jejich vyjádření pomocí termodynamických potenciálů, stavové rovnice a další potřebné vztahy skrývající se ve vhodných derivacích termodynamických potenciálů).

Odtud také pramení tři skupiny termodynamických funkcí potřebné pro zpracování exaktních algoritmů metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS):

1. skupina termodynamických funkcí Stavové parametry a funkce stavu sloužící k nalézání statistických analogonů. <u>Výběr potřebných termodynamických funkcí:</u>

Entropie S (A12), vnitřní energie U a její členění do energetických hladin (A2), volná energie F (A20), Gibbsův potenciál G (A22), chemický potenciál μ (A23), (A24), grandkanonický potenciál Ω (A25), (A26), (A28)

2. skupina termodynamických funkcí Termodynamické věty vedoucí po dosazení statistických analogonů k vymezení jejich statistického smyslu. <u>Potřebné vztahy:</u>

Tvar pro dU (A23), tvar pro dF (A20) s členem μ dN, tvar pro d Ω (A25)

3. skupina termodynamických funkcí Stavové rovnice umožňující po provedení příslušné parciální derivace termodynamického potenciálu a dosazení statistických analogonů vymezení jejich statistického smyslu. <u>Potřebné parciální derivace jsou následující</u>:

Entropie S jako parciální derivace volné energie F - viz (A20), tlak p jako parciální derivace volné energie F - viz (A20), střední počet částic N_V v v-té energetické hladině jako parciální derivace grandkanonického potenciálu - viz (A27), (A28), (A29).

KONEC SOUHRNU 4

5.1. Metodika vycházející z grandkanonického statistického souboru

5.1.1. Kvantová rozdělovací funkce, velký stavový součet, souborové střední hodnoty

Grandkanonický statistický soubor GSS je tvořen jednoduchými makrosystémy MS, které vyměňují s okolím jak energii, tak i daný druh částic. Jak energie *U*, tak i počet částic *N* představují aditivní stavové parametry (energie i počet částic celku se rovná **součtu** dílčích energií a dílčích počtu částic jednotlivých částí celku). Pravděpodobnosti, že namátkou vybraný MS bude mít příslušné hodnoty energie a počtu částic jak z hlediska celku, tak z hlediska jednotlivých částí, budou vzhledem k nezávislosti jednotlivých částí spojeny **součinem**. Nezávislost částí je dána např. krátkým dosahem mezimolekulárních sil.

Matematická funkce, která převádí **součin na součet**, je např. přirozený logaritmus. Přirozený logaritmus pravděpodobnostních hodnot P_{λ} (A16) rozdělovací funkce $\hat{\rho}$ proto musí být lineární funkcí energie a počtu částic. Pro logaritmy pravděpodobností, že namátkou vybraný MS volných částic bude vzhledem k (A2) v λ -tém kvantovém stavu s energií $U_{\lambda} = \sum_{\nu} N_{\nu} \varepsilon_{\nu}$ a s počtem částic $N_{\lambda} = \sum_{\nu} N_{\nu}$, lze proto napsat lineární vztah

$$\ln P_{\lambda} = \alpha \beta - \beta U_{\lambda} + \beta \mu N_{\lambda} = \alpha \beta - \beta \sum_{v} N_{v} \varepsilon_{v} + \beta \mu \sum_{v} N_{v}.$$

Odtud plyne pro hodnoty P_{λ} rozdělovací funkce $\hat{\rho}$ vztah

$$P_{\lambda} = \exp(\alpha\beta) \cdot \exp\left[\sum_{\nu} \beta(\mu - \varepsilon_{\nu}) N_{\nu}\right], \text{ po úpravě } P_{\lambda} = \exp(\alpha\beta) \cdot \prod_{\nu} \exp\left[\beta(\mu - \varepsilon_{\nu}) N_{\nu}\right].$$

Pomocí vztahů (A12) pro entropii, (A20) pro volnou energii F a (A25) pro grandkanonický potenciál Ω lze ukázat význam koeficientů α , β . Koeficient β je statistickým analogonem teploty T ve tvaru $\beta = 1/(kT)$, koeficient α je statistickým analogonem grandkanonického potenciálu Ω ve tvaru $\alpha = \Omega$.
Pro normování pravděpodobnosti platí $\sum_{\lambda} P_{\lambda} = 1$, odtud s použitím (A2) a (A28)

$$1 = \exp(\Omega\beta) \cdot \prod_{\nu} \sum_{N_{\nu}} \exp[\beta(\mu - \varepsilon_{\nu}) N_{\nu}] = \exp(\Omega\beta) \cdot \prod_{\nu} \Xi_{\nu}, \text{ kde}$$

(A30)
$$\Xi_{\nu} = \sum_{N_{\nu}} \exp \left[\beta \left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right) N_{\nu}\right], \quad \Xi = \prod_{\nu} \Xi_{\nu},$$

(A31) $\Omega = -kT \ln \Xi, \quad \Omega_{\nu} = -kT \ln \Xi_{\nu}.$

 Ξ_{ν} je tzv. velký stavový součet pro ν -tou energetickou hladinu (tj. součet pro všechny možné hodnoty obsazovacího čísla $N_{\nu} = 0, 1, 2, ..., N$). Často se zavádí velký stavový součet Ξ pro celý MS $\Xi = \prod_{\nu} \Xi_{\nu}$, který charakterizuje množinu všech λ -tých kvantových stavů makrosystému MS.

Na základě provedeného normování pravděpodobnosti si lze již učinit **přehled** získaných souborových středních hodnot: statistický analogon grandkanonického potenciálu Ω , Ω_{V} - viz vztahy (A31), statistický analogon teploty T - viz význam koeficientu $\beta = 1/(kT)$, statistický analogon počtu částic N_{V} (tj. střední počet částic v V-té energetické hladině) - viz vztah (A29).

5.1.2. Fermiho-Diracovo rozdělení

Pro makrosystém fermionů (Fermiho plyn) platí Pauliho vylučovací princip, tj. $N_{\nu} = 0, 1.$ Odtud lze získat podle (A30) a (A31) pro grandkanonický potenciál Ω_{ν} vztah

$$\Omega_{\nu} = -kT \ln \left[1 + e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})}\right].$$

Provedením parciální derivace ve vztahu (A29) pro střední počet částic $\overline{N_{\nu}}$ lze pak obdržet Fermiho-Diracovo rozdělení pro střední počet fermionů $\overline{N_{\nu}}$ v ν -té energetické hladině

(A32)
$$\overline{N_{\nu}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} + 1}.$$

Jednoduchým rozborem tvaru Fermiho-Diracova rozdělení lze získat pro jeho asymptotické chování při $T \rightarrow 0$ následující výsledky:

- Jestliže $\varepsilon_V \to 0$, pak $\overline{N_V} \to 1$
- Jestliže $\varepsilon_{\nu} = \mu$, pak $\overline{N_{\nu}} = \frac{1}{2}$
- Jestliže $\varepsilon_{\nu} >> \mu$, pak $\overline{N_{\nu}} \to 0$.

Pro úplně degenerovaný Fermiho plyn (teplota *T* se blíží 0) lze proto získat pro $\varepsilon_v < \mu$ hodnotu $\overline{N_v} = 1$, pro $\varepsilon_v > \mu$ hodnotu $\overline{N_v} = 0$. Chemický potenciál μ a s ním spojená teplota dgenerace Θ Fermiho plynu ($\mu = k\Theta$) hraje roli tzv. Fermiho meze ε_F . Pro energie menší než Fermiho mez obsahuje energetická hladina právě jeden fermion, pro energie větší než Fermiho mez jsou energetické hladiny prázdné.

5.1.3. Boseho-Einsteinovo rozdělení (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 5)

Pro makrosystém bosonů (Boseho plyn) neplatí Pauliho vylučovací princip, tj. $N_{\nu} = 0, 1, 2, ..., N$. Jelikož N >> 1, lze v součtu (A30) pro grandkanonický stavový součet $\Xi_{\nu} = \sum_{N_{\nu}} \exp \left[\beta \left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right) N_{\nu}\right]$ použít meze pro N_{ν} od 0 do ∞ . Kvocient q získané nekonečné geometrické řady je $q = e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})}$, podmínka konvergence je obvyklá, tj. q < 1 (i pro libovolně malé energie ε_{ν} musí být chemický potenciál $\mu \leq 0$). Odtud lze užitím vztahu (A31) a součtem nekonečné geometrické řady s uvedeným kvocientem q získat pro grandkanonický potenciál Ω_{ν} vztah

$$\Omega_{\nu} = -kT \ln\left(\frac{1}{1 - e^{\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})}}\right) \quad (\text{ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 5}).$$

Provedením parciální derivace ve vztahu (A29) pro střední počet částic $\overline{N_{\nu}}$ lze pak obdržet Boseho-Einsteinovo rozdělení pro střední počet bosonů $\overline{N_{\nu}}$ v ν -té energetické hladině

(A33)
$$\overline{N_{\nu}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} - 1}$$
 (ilustrace viz Dodatek 3, Příklad 5).

Jednoduchým rozborem tvaru Boseho-Einsteinova rozdělení lze získat následující výsledky:

- Jestliže η_ν=(ε_ν-μ)/(kT) → 0+, pak je N_ν obrovské číslo (MS bosonů se při teplotě degenerace Θ začíná znatelným způsobem seskupovat do stavu s energií ε_ν → 0. Např. pro kapalné helium He I dochází k tomuto jevu při Θ = 3,2 K, pro kvantovou kapalinu helia He II dochází při teplotě 2,18 K navíc k supratekutosti.
- Jestliže $\varepsilon_{\nu} >> \mu$, pak je η_{ν} velké číslo a $\overline{N_{\nu}} \to 0$.

Pro chemický potenciál μ se při odvozování Boseho-Einsteinova rozdělení objevilo omezení $\mu \leq 0$. **Není-li počet** *N* **bosonů předem dán**, lze využít minima volné energie *F* (vyjádřeného podmínkou (d*F*)_{*T,V*} = 0 při daném objemu *V* a teplotě *T*) ve stavu termodynamické rovnováhy STR k určení hodnoty chemického potenciálu μ . Po přidání členu μ d*N* ve vztahu (A20) lze získat (d*F*)_{*T,V*} = μ d*N* = 0 a vzhledem k neznámé hodnotě *N* musí být chemický potenciál μ = 0. **V případě daného počtu** *N* **bosonů** je nutno považovat chemický potenciál za záporný.

5.1.4. Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení

Pro makrosystém N volných částic Maxwellova-Boltzmannova plynu musí platit při požadavcích rozlišitelnosti částic a konečného počtu energetických hladin $\Delta\Gamma$ podmínka $\Delta\Gamma >> N$. Z této podmínky vyplývá, že pravděpodobnost $P(0_v)$ nalezení žádné částice v v-té energetické hladině $P(0_v) \rightarrow 1$. Pro odvození středního počtu částic $\overline{N_{\nu}}$ v ν -té energetické hladině bude opět východiskem vztah (A31) $\Omega_{\nu} = -kT \ln \Xi_{\nu}$, kde podle (A30) je $\Xi_{\nu} = \sum_{N_{\nu}} \exp \left[\beta \left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right) N_{\nu}\right]$. Provedením obvyklé parciální derivace (A29) lze získat

$$\overline{N_{\nu}} = -\left(\frac{\partial\Omega_{\nu}}{\partial\mu}\right)_{\beta,\nu} = kT \frac{1}{\Xi_{\nu}} \cdot \frac{\partial\Xi_{\nu}}{\partial\mu} = kT \frac{\sum_{N_{\nu}} \beta N_{\nu} \exp[\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})N_{\nu}]}{\Xi_{\nu}}$$

Úpravou získaného vztahu lze obdržet tvar

$$\overline{N_{\nu}} = \sum_{N_{\nu}} N_{\nu} \frac{1}{\Xi_{\nu}} \exp[\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})N_{\nu}],$$

který lze srovnat s výrazem pro souborovou střední hodnotu

$$\overline{N_{\nu}} = \sum_{N_{\nu}} N_{\nu} \cdot P(N_{\nu}). \text{ Odtud plyne, že výraz } P(N_{\nu}) = \frac{1}{\Xi_{\nu}} \exp[\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})N_{\nu}]$$

je pravděpodobnost, že MS volných částic bude mít N_v částic s energií ε_v . Jelikož jde o MS rozlišitelných volných částic, lze vycházet ze vztahu $\overline{N_v} = 0$. $P(0_v)+1$. $P(1_v)$ a dále z podmínky $P(0_v) = 1/\Xi_v \rightarrow 1$. Nyní již lze snadno získat známý tvar Maxwellova-Boltzmannova rozdělení pro střední počet částic $\overline{N_v}$ v v-té energetické hladině kvantového stavu makrosystému MS rozlišitelných volných částic

(A34)
$$\overline{N_{\nu}} = \exp \left[\beta(\mu - \varepsilon_{\nu})\right]$$

Kvantové Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení ukazuje, za jakých fyzikálních podmínek by mělo být používáno. Jelikož $P(0_v) \rightarrow 1$ (tj. $P(N_v) \ll 1$), je zřejmé, že $\overline{N_v} \ll 1$ a tudíž také $\exp(\beta\mu) \ll 1$.

Z opačné podmínky $\exp(\beta\mu) >> 1$, ze vztahu (A34) a z kvaziklasických úvah (viz vztah (A35)) již lze odvodit podmínku degenerace (A3) Fermiho a Boseho plynu, která spočívá především ve velkých hustotách a nízkých teplotách zkoumaného plynu.

Nesplnění podmínky degenerace (A3) je naopak spojeno s "malými hustotami" a "vysokými teplotami". Je tedy zřejmé, že použití podmínky $\exp(\beta\mu) \ll 1$ a neplatnost (A3) (malé hustoty, vysoké teploty blížící se teplotám běžným) vedou k možnosti aproximovat Fermiho-Diracovo rozdělení a Boseho-Einsteinovo rozdělení rozdělením MaxwellovýmBoltzmannovým. Nedegenerovaný Fermiho a Boseho plyn se sbližují v řadě projevů a lze proto tyto plyny považovat za Maxwellův-Boltzmannův plyn.

5.1.5. Využití kvaziklasického statistického přístupu

Nechť platí obvyklé podmínky kvaziklasičnosti:

- lze současně používat element fázového prostoru $d\Phi = dx dy dz dp_x dp_y dp_z$
- konečný počet termodynamických stavů d Γ pro volné částice s počtem stupňů volnosti 3 je vyjádřen vztahem (A13) d $\Gamma = g.d\Phi / h^3$ (případně viz vztahy (A14), (A15)).

Za podmínek kvaziklasičnosti lze např. kvantové Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení transformovat na kvaziklasické Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení. Kvaziklasické Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení pak umožňuje určovat počty rozlišitelných částic $dN(x,y,z,p_x,p_y,p_z)$ v d Γ termodynamických stavech prostřednictvím vztahu

(A35)
$$dN(x,y,z,p_x,p_y,p_z) = \exp \left\{\beta \left[\mu - \varepsilon \left(x,y,z,p_x,p_y,p_z\right)\right]\right\} d\Gamma.$$

5.1.6. Algoritmus metodiky

Algoritmus metodiky č.1 (GSS) je postaven na *v*-té energetické hladině a na velkém stavovém součtu Ξ_v pro *v*-tou energetickou hladinu. Algoritmus této metodiky vychází z použití příslušného kvantového rozdělení. Při zkoumání konkrétního makrosystému MS bude použito jedno ze tří kvantových rozdělení (Fermiho-Diracovo rozdělení, Boseho-Einsteinovo rozdělení, Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení) vždy v kvaziklasické úpravě podle (A35). Příkladem použití kvaziklasické úpravy (A35) je již naznačený způsob odvození podmínky degenerace (A3) Fermiho a Boseho plynu.

5.2. Metodika vycházející z kanonického statistického souboru

5.2.1. Kvantová rozdělovací funkce, malý stavový součet, souborové střední hodnoty

Kanonický statistický soubor KSS je tvořen jednoduchými makrosystémy MS, které vyměňují s okolím jen energii a mají neměnný počet *N* částic daného druhu. Energie *U* opět představuje **"součtový"** stavový parametr. Pravděpodobnosti, že namátkou vybraný

makrosystém MS bude mít příslušnou hodnotu energie jak z hlediska celku, tak z hlediska jednotlivých částí, budou vzhledem k nezávislosti jednotlivých částí spojeny **součinem**.

Přirozený logaritmus pravděpodobnostních hodnot P_{λ} rozdělovací funkce $\hat{\rho}$ proto musí být lineární funkcí energie. Pro logaritmy pravděpodobností, že namátkou vybraný MS volných částic bude v λ -tém kvantovém stavu s energií $U_{\lambda}=N\varepsilon_{\lambda}$ (kde ε_{λ} je energie jedné volné částice v λ -tém kvantovém stavu makrosystému), lze proto získat vztah ln $P_{\lambda} = \alpha\beta - \beta U_{\lambda}$. Odtud plyne pro hodnoty P_{λ} rozdělovací funkce $\hat{\rho}$ vztah

$$P_{\lambda} = \exp(\alpha\beta) \cdot \exp(-\beta U_{\lambda})$$

Pomocí vztahů (A12) pro entropii a (A20) pro volnou energii *F* a (A25) lze ukázat význam koeficientů α , β . Koeficient β je opět statistickým analogonem teploty *T* ve tvaru $\beta = 1/(kT)$, koeficient α je statistickým analogonem volné energie *F* ve tvaru $\alpha = F$.

Pro normování pravděpodobnosti platí $\sum_{\lambda} P_{\lambda} = 1$, odtud s použitím $U_{\lambda} = N \varepsilon_{\lambda}$

$$1 = \exp(F\beta) \sum_{\lambda} \exp(-\beta U_{\lambda}) = \exp(F\beta) \cdot Z, \text{ kde}$$

(A36)
$$Z = \sum_{\lambda} \exp(-\beta U_{\lambda}), \ z = \sum_{\lambda} \exp(-\beta \varepsilon_{\lambda}), \ Z = \frac{z^{N}}{N!},$$

(A37)
$$F = -kT \ln Z$$
.

Ve vztazích (A36) je Z malý stavový součet pro celý MS, z malý stavový součet jedné volné částice (z lze považovat za součet energetických výskytů dané volné částice ve všech globálních λ -tých kvantových stavech zkoumaného MS volných částic). Poslední vztah

v (A36)
$$Z = \frac{z^N}{N!}$$

je výrazem respektování principu nerozlišitelnosti částic.

Na základě provedeného normování pravděpodobnosti si lze již učinit **přehled** získaných souborových středních hodnot: statistický analogon volné energie F - viz vztah

(A37), statistický analogon teploty T - viz význam koeficientu $\beta = 1/(kT)$, <u>statistické</u> analogony entropie *S* a tlaku *p* dané příslušnými parciálními derivacemi *F* podle (A20).

5.2.2. Kvaziklasická úprava malého stavového součtu pro částici

Kvaziklasická úprava bude vycházet jednak z klasického předpokladu fázového prostoru a kvantového předpokladu diskrétnosti hodnot energie, jednak z rozčlenění energie ε pro jednu volnou částici na složku ε_{tr} související s translací částice a složku ε^* , která bude charakterizovat elektronové stavy, vibrace, rotace, jaderné energetické hladiny (tj. vnitřní strukturu částice). Jelikož

(A38) $\varepsilon = \varepsilon_{tr} + \varepsilon^*$, pro stavový součet z volné částice bude platit $z = z_{tr} \cdot z^*$.

5.2.3. Kvaziklasická úprava translačního stavového součtu pro částici

Translační stavový součet z_{tr} bude mít podle (A6), (A13) a (A36) v kvaziklasické a nerelativistické podobě tvar

$$z_{tr} = \int e^{-\beta \frac{p^2}{2m}} dp_x dp_y dp_z dx dy dz \frac{1}{(2\pi\hbar)^3},$$

kde *x*, *y*, *z* jsou kartézské souřadnice částice a p_x , p_y , p_z složky její hybnosti (s translačním pohybem volné částice jsou spojeny 3 obvyklé stupně volnosti). S trojím využitím Gaussova integrálu

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\alpha x^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{\alpha}} \quad \text{lze získat pro translační stavový součet } z_{tr} \text{ výsledek}$$

(A39) $z_{tr} = \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{\frac{3}{2}} V$, kde V je objem MS volných částic (viz úzká vazba na (A3)).

5.2.4. Kvaziklasická úprava strukturního stavového součtu pro částici

Není-li plyn ve vnějších polích, pak lze strukturní stavový součet z^* považovat za funkci jen absolutní teploty, tj. $z^* = z^*(T)$. Celkový stavový součet z lze pak podle (A38) a (A39) napsat v konečném tvaru

(A40)
$$z = \left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2} . V.z^*(T).$$

Z hlediska kvaziklasického statistického přístupu je tedy z^* bráno v úvahu, i když jen jako funkce teploty *T*. Z hlediska klasického statistického přístupu není vnitřní struktura volných částic vůbec uvažována (z^* by bylo ve vztahu (A40) pokládáno rovno 1). Z hlediska kvantového statistického přístupu je pak zapotřebí zkoumat jednotlivé prvky vnitřní struktury částice (vibrace, rotace, elektronové stavy, jaderné stavy) a strukturní stavový součet z^* by byl zkoumán ve tvaru

$$z^* = z_{vib} \cdot z_{rot} \cdot z_{es} \cdot z_{js}$$

5.2.5. Algoritmus metodiky

Algoritmus metodiky č.2 (KSS) je postaven na jedné volné částici a na malém stavovém součtu $z = z_{tr} \cdot z^*$ pro jednu volnou částici. Při zkoumání konkrétního makrosystému MS bude vzhledem k neměnnosti počtu částic zkoumán především Maxwellův-Boltzmannův plyn, u Fermiho nebo Boseho plynu nelze obecně z tohoto předpokladu vycházet. Při zkoumání Maxwellova-Boltzmannova plynu bude algoritmus metodiky spočívat ve vhodných úpravách potřebné souborové střední hodnoty s využitím kvaziklasických podob malého stavového součtu pro jednu volnou částici (např. při odvození stavové rovnice pV = NkT ideálního plynu).

SOUHRN 5

Pátá kapitola předložila exaktní algoritmy metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS) a otevřela tak cestu ke konkrétním ilustracím.

Metodika č.1 vychází z fyzikální reality, která je respektována normováním pravděpodobnosti k 1. V rámci normování pravděpodobnosti je zaveden velký stavový součet pro energetickou hladinu a jeho prostřednictvím jsou odvozena Fermiho-Diracovo, Boseho-Einsteinovo a Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení jako souborové střední hodnoty počtu částic v dané energetické hladině. Tyto souborové střední hodnoty jsou pak doplněny možnostmi, které poskytuje kvaziklasický statistický přístup. Vzhledem k proměnlivosti počtu částic je možné zkoumat Fermiho i Boseho plyn, Maxwellův-Boltzmannův plyn je ke zkoumání metodikou č.1 vybírán tehdy, je-li obtížné dodržet podmínku konstantního počtu molekul. Současně metodika č.1 ukazuje, kdy lze Fermiho nebo Boseho plyn zkoumat jako Maxwellův-Boltzmannův plyn.

Metodika č.2 opět vychází z fyzikální reality, která je respektována normováním pravděpodobnosti k 1. V rámci normování pravděpodobnosti je zaveden malý stavový součet Z, který je pak rozložen na malé stavové součty z jednotlivých volných částic. Malé stavové součty z jsou na základě kvaziklasického statistického přístupu rozčleněny na translační a strukturní stavové součty. Prostřednictvím strukturního stavového součtu lze pak rozhodnout, zda použít kvaziklasický, klasický nebo kvantový statistický přístup. Algoritmus metodiky č.2 je zakončen krokem, který sděluje, že pomocí translačního a strukturního stavového součtu lze nalézt potřebné souborové střední hodnoty pro popis chování především Maxwellova-Boltzmannova plynu. Tento krok zvláště upozorňuje na možnost odvození stavové rovnice ideálního plynu. Vzhledem k podmínce konstantnosti počtu částic daného druhu je obtížné touto metodikou zkoumat Fermiho nebo Boseho plyn.

V rámci šesté kapitoly lze přikročit k ilustraci metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS) při zkoumání konkrétních makrosystémů MS fyzikální praxe.

KONEC SOUHRNU 5

6. Ilustrace konkrétních makrosystémů (Přílohy A1, A4, A5)

6.1. Záření černého tělesa

Modelem záření černého tělesa je elektromagnetické záření v dutině s dobře absorbujícími stěnami a malým otvorem v dutině. Každé záření, který dopadne zvnějšku do otvoru dutiny, bude po mnohonásobném odrazu od stěn dutiny zcela pohlceno (tím je splněna "definice" absolutně černého tělesa). Stěny dutiny jsou udržovány na konstantní teplotě T a počet absorpčních a emisních procesů fotonů elektromagnetického záření je v rovnováze. Z malého otvoru dutiny bude vycházet záření absolutně černého tělesa.

Záření černého tělesa bude přiřazena stejná teplota, na jaké jsou udržovány stěny dutiny. Makrosystém fotonů tvořících záření černého tělesa je makrosystémem volných bosonů, který je ve STR (počet fotonů není předem dán, chemický potenciál μ bude proto roven 0). **Při zkoumání tohoto makrosystému bude využita metodika č.1 (GSS)** podle 5.kap., odst.5.1. Použité matematické obraty jsou podrobněji vyloženy v <u>Dodatku 3, Příklad 7</u>.

Veličiny a vztahy popisující záření černého tělesa jsou následující:

- Vlnová délka $\lambda = c/v = 2\pi c/\omega$, kde *c*, *v*, ω jsou postupně rychlost světla, frekvence a úhlová frekvence záření (d $\omega/d\lambda = konst./\lambda^2$)
- Energie fotonu $\varepsilon_{\omega} = \hbar \omega$, hybnost fotonu $p = \hbar \omega / c$
- Energie objemové jednotky záření ve frekvenčním intervalu o šířce $d\omega \Rightarrow u_\omega d\omega$
- Tok energie jednotkou plochy v intervalu vlnových délek o šířce $d\lambda \Rightarrow E_{\lambda} d\lambda$
- Jelikož $u_{\omega} \sim E_{\omega} c$ a $E_{\omega} d\omega = E_{\lambda} d\lambda$, platí vztah $u_{\omega} d\omega = konst. E_{\lambda} d\lambda$

Boseho-Einsteinovo rozdělení (A33) bude upraveno následujícím způsobem:

$$\overline{N_{\nu}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} - 1}, \quad \text{tj. } \overline{N_{\omega}} = \frac{1}{\frac{\hbar\omega}{kT} - 1}, \quad \text{tj. } \overline{N_{\lambda}} = \frac{1}{\frac{c_2}{\lambda T} - 1}$$

Kvaziklasický statistický přístup bude vycházet z následujících úvah:

- Faktor degenerace g = 2 (dvě nezávislé polarizace pro fotony)
- Počet energetických hladin připadající na interval šířky døužitím (A13)

$$d\Gamma(\omega) = \frac{g \, d\Phi}{\left(2 \, \pi \, \hbar\right)^3} = \frac{g \, dx \, dy \, dz \, dp_x dp_y dp_z}{\left(2 \, \pi \, \hbar\right)^3}, \text{ odtud } d\Gamma(\omega) = \frac{2V \, dp_x dp_y dp_z}{\left(2 \, \pi \, \hbar\right)^3},$$
$$\text{odtud } d\Gamma(\omega) = \frac{2V4\pi \, p^2 dp}{\left(2 \, \pi \, \hbar\right)^3}$$

- Po dosazení za hybnost *p* lze získat d $\Gamma(\omega) = \frac{V \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$ (podrobněji viz Dodatek 3, Př. 7).

Odvození Planckova vyzařovacího zákona
$$E_{\lambda} d\lambda = \frac{c_1 d\lambda}{\lambda^5 \left(e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1 \right)}$$

- Bude využit vztah $u_{\omega} d\omega = konst. E_{\lambda} d\lambda$

- Levá strana $u_{\omega}d\omega = \overline{N_{\omega}} \cdot \hbar \omega \, d\Gamma(\omega) \cdot \frac{1}{V}$ bude upravena následujícím způsobem:

$$\overline{N_{\omega}} = \overline{N_{\lambda}}$$
, $\hbar\omega = \frac{konst}{\lambda}$, $d\Gamma(\omega) = d\Gamma(\lambda) = V \cdot \frac{konst}{\lambda^2} \frac{konst}{\lambda^2} d\lambda$
(podrobněji viz Dodatek 3, Příklad 7)

- Po dosazení provedených úprav a vhodném označení konstant bude získán hledaný Planckův vyzařovací zákon $E_{\lambda} = f(\lambda, T)$ ve výše uvedeném tvaru
- Z Planckova vyzařovacího zákona plyne ihned Stefanův-Boltzmannův zákon

$$E=\int_{0}^{\infty} E_{\lambda} \mathrm{d}\lambda = \sigma T^{4},$$

tj. energie vyzářená černým tělesem za 1 s jednotkovou plochou je přímo úměrná T^4 ($\sigma = 5,67.10^{-8}$ W.m⁻².K⁻⁴) (podrobněji viz Dodatek 3, Příklad 7).

<u>Odvození Wienova-Paschenova zákona</u> $E_{\lambda} d\lambda = \frac{c_1 d\lambda}{\frac{c_2}{\lambda^5 e^{-\lambda T}}}$:

Wienův-Paschenův zákon zkoumá malý počet vysokofrekvenčních fotonů (tj. oblast nepatrných vlnových délek λ). Pro tento případ lze použít dvou způsobů odvození hledaného zákona. První způsob vychází z Planckova vyzařovacího zákona. Druhý způsob odvození vychází z možnosti použít Maxwellova-Boltzmannova rozdělení (jsou splněny podmínky (A3) pro použití tohoto rozdělení - malá hustota fotonů daná malým počtem vysokofrekvenčních fotonů, vysoká teplota elektromagnetického záření černého tělesa).

Odvození Rayleighova-Jeansova zákona $E_{\lambda} d\lambda = c_3 \cdot \lambda^{-4} \cdot T d\lambda$:

Rayleighův-Jeansův zákon zkoumá velký počet nízkofrekvenčních fotonů (tj. oblast velkých vlnových délek λ) a v uvedeném tvaru představuje c_3 konstantu. I pro tento případ lze použít dvou způsobů odvození hledaného zákona. První způsob vychází z Planckova vyzařovacího zákona. Druhý způsob odvození vychází z možností klasické statistické fyziky daných tzv. ekvipartičním teorémem.

Odvození dalších termodynamických funkcí záření černého tělesa:

Stefanův-Boltzmannův zákon $E=\sigma T^4$ umožňuje odvození dalších termodynamických funkcí (statistických analogonů) záření černého tělesa - tepelnou kapacitu C_V , entropii S, volnou energii F, stavovou rovnici záření černého tělesa (vztah pro tlak p záření černého tělesa):

$$C_V = \left(\frac{\partial E}{\partial T}\right)_V = 4\,\sigma T^3 = 4\,\frac{E}{T}$$

$$S = \int_{0}^{T} \frac{C_{v}}{T} dT = \frac{4}{3} \sigma T^{3} = \frac{4E}{3T} = \frac{1}{3} C_{v}$$

$$F = E - TS = \sigma T^4 - \frac{4}{3} \sigma T^4 = -\frac{1}{3}E$$

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T = \frac{1}{3} \frac{E}{V}$$

6.2. Kmity krystalové mříže

Krystalová mříž jako makrosystém fononů bude popsána pomocí Einsteinova modelu krystalu. Einstein (r. 1907) zavedl model krystalu tvořeného jednoatomovými molekulami (n = 1), v němž všechny atomy kmitají se stejnou frekvencí ω . Kmity každého atomu lze považovat za kmity 3 harmonických oscilátorů, užitím kvantové mechaniky

harmonického oscilátoru (11.kap., odst.11.1.) lze pak vnitřní energii \overline{U} krystalu zapsat ve tvaru

$$\overline{U} = 3 N \left(\frac{\hbar \omega}{2} + \overline{N_{\omega}} \hbar \omega \right),$$

kde $\overline{N_{\omega}}$ je kvantové číslo určující energii každého z 3N oscilátorů.

Kvantové číslo $\overline{N_{\omega}}$ vypovídá o jednom oscilátoru z 3N oscilátorů v $\overline{N_{\omega}}$ -tém kvantovém stavu. Místo této interpretace lze energii $\overline{N_{\omega}} \hbar \omega$ interpretovat jako energii $\overline{N_{\omega}}$ částic (kvant zvukového pole - fononů) s energií $\hbar \omega$ každé částice. Jelikož $\overline{N_{\omega}}$ může nabývat hodnot libovolného přirozeného čísla, rozdělení fononů podle energie je popsáno Boseho-Einsteinovým rozdělením a **makrosystém fononů je makrosystémem bosonů**. Počet fononů není předem dán, chemický potenciál μ fononového plynu je proto roven nule. **Odtud podle metodiky č.1 (GSS)** v 5.kap., odst.5.1. a vztahu (A33) **plyne Boseho-Einsteinovo rozdělení pro MS fononů**

$$\overline{N_{\omega}} = \left[\exp(\beta \hbar \omega) - 1\right]^{-1}$$
 (β je statistický analogon teploty ve tvaru $\beta = 1/kT$)

a výraz pro vnitřní energii

$$\overline{U} = 3 N \left(\frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1} \right).$$

Pro vysoké teploty je $\beta \hbar \omega \ll 1$, tj. teplota *T* je o hodně větší než Einsteinova teplota

$$\Theta_E = \frac{\hbar \omega}{k}, T >> \Theta_E.$$

Pak přechází výraz pro \overline{U} při zanedbání prvního členu pro energii v obvyklou aplikaci ekvipartičního teorému z klasické teorie měrných tepelných kapacit U = 3NkT, $C_V = 3Nk$ (podrobněji viz Dodatek 3, Příklad 6) **Pro nízké teploty** $T \leq \Theta_E$ lze při opětovném nevypsání prvního členu pro energii získat pro vnitřní energii krystalu výraz

$$\overline{U} = 3 N \hbar \omega \exp(-\beta \hbar \omega).$$

Pro tepelnou kapacitu krystalu lze obdržet

$$\overline{C_V} = \frac{\partial \overline{U}}{\partial T} = 3Nk(\beta\hbar \omega)^2 \exp(-\beta\hbar \omega) = 3Nk \left(\frac{\Theta_E}{T}\right)^2 \exp\left(\frac{-\Theta_E}{T}\right).$$

Získaný výraz ukazuje na exponenciální pokles měrných tepelných kapacit. Takto prudký pokles není pozorován - je tedy zřejmé, že frekvenční spektrum krystalu nelze aproximovat jednou nebo jen několika frekvencemi. Jen pro úzké pásy frekvenčního spektra může Einsteinova teorie představovat dobré přiblížení.

6.3. Statistický smysl stavové rovnice ideálního plynu

Stavová rovnice ideálních plynů vystihuje základní závislost mezi intenzivními vnitřními parametry teplota T a tlak p a extenzivním vnějším parametrem objem V, které charakterizují stav termodynamické rovnováhy STR ideálního plynu. Odvození stavové rovnice pro ideální plyny je spojeno s využitím metodiky č.2 (KSS) podle 5.kap., odst.5.2. Na základě vztahu (A20) pro volnou energii F bude po dosazení vhodně upraveného statistického analogonu (A37) volné energie F do vztahu pro tlak p získán tvar stavové rovnice pro ideální plyny.

S využitím vztahu (A36) a Stirlingovy formule (A10) lze statistický analogon (A37) pro volnou energii *F* upravit na tvar

$$F = -kT \ln Z = -kTN \ln z + kT \ln N! = -kTN \ln \left(\frac{ez}{N}\right).$$

S využitím kvaziklasických úprav (A40) malého stavového součtu z lze obdržet vztah

$$F = -kTN\ln\left(\frac{eV}{N}\right) + Nf(T), \ kde \ f(T) = -kT\left[\frac{3}{2}\ln\left(\frac{mkT}{2\pi\hbar^2}\right) + \ln z^*(T)\right].$$

Po provedení parciální derivace

$$p = -\left(\frac{\partial F}{\partial V}\right)_T$$

lze okamžitě získat stavovou rovnici pro ideální plyny

$$pV = NkT$$
.

Při odvození stavové rovnice pro ideální plyny byla použita pouze parciální derivace podle objemu, parciální derivace podle teploty nehraje při odvození žádnou roli. To ovšem znamená nezávislost na funkci f(T) a strukturním stavovém součtu z^* (viz (A38)).

Stavová rovnice ideálního Maxwellova-Boltzmannova plynu platí nezávisle na vnitřní struktuře molekul (pro plyn monoatomární i polyatomární) a nezávisí na tom, zdali pohyb individuálních molekul je popisován klasickou nebo kvantovou mechanikou.

Tato nezávislost je výsadou pouze stavové rovnice pV = NkT ideálního plynu, ostatní termodynamické veličiny (energie, entropie, měrné tepelné kapacity apod.) podstatně závisejí na funkci f(T), tj. na vnitřní struktuře molekuly a na volbě příslušné mechaniky (klasické či kvantové) pro popis pohybu jednotlivých molekul.

SOUHRN 6

Šestá kapitola ilustrovala použitelnost exaktních algoritmů metodik č.1 a č.2 (pátá kapitola), nosnost provedených tří konkretizací těchto metodik (druhá, třetí a čtvrtá kapitola) a vymezení vstupních podmínek pro volbu statistického souboru (první kapitola).

Ilustraci je třeba doplnit alespoň hrubým výčtem konkrétních makrosystémů MS, které lze poměrně snadno zkoumat z hlediska stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP:

- molekuly atmosféry (barometrická formule, Maxwellovo rozdělení rychlostí) na základě metodiky č.1
- molekuly Maxwellova-Boltzmannova ideálního plynu (stavová rovnice ideálního plynu, ekvipartiční teorém, Mayerův vztah, měrné tepelné kapacity při stálém objemu a teplotě a řada dalších termodynamických funkcí) na základě metodiky č.2 v kvaziklasické, klasické a kvantové interpretaci
- záření černého tělesa (Planckův, Wienův-Paschenův, Rayleighův-Jeansův vyzařovací zákon, Stefanův-Boltzmannův zákon, další termodynamické funkce) na základě metodiky č.1 a s využitím ekvipartičního teorému (Rayleighův-Jeansův zákon) na základě metodiky č.2
- Klasický model krystalu pevné látky (Dulongovo-Petitovo pravidlo) s využitím ekvipartičního teorému (tj. klasické statistiky skryté uvnitř metodiky č.2)
- Einsteinův a Debyeův model krystalu pevné látky (měrné tepelné kapacity při nízkých a vysokých teplotách) na základě metodiky č.1
- Elektronový plyn v kovech (vlastnosti degenerovaného Fermiho plynu) na základě metodiky č.1
- Vlastnosti kovů a polovodičů (zonální teorie vodivosti, makrosystémy elektronů a děr, vlastní a příměsové polovodiče) na základě metodiky č.1
- Supratekutost (vlastnosti kvantové kapaliny a kvantového krystalu, makrosystémy fononů a rotonů) na základě metodiky č.1
- Supravodivost (makrosystém Cooperových párů jako výsledek supratekutosti elektronového plynu) na základě metodiky č.1
- Další makrosystémy: chemické reakce v plynové směsi, disociace molekul a disociační rovnováha, ionizace atomů a ionizační rovnováha, termoemise elektronů.

KONEC SOUHRNU 6

SOUBOR PŘÍLOH A Model struktury statistické fyziky

PŘÍLOHA A1 Skladba modelu

Model statistického přístupu ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů (model statistické fyziky) je složen ze šesti částí, které znázorňují strukturu všech šesti kapitol výkladu statistické fyziky. Při pročítání 1. až 6. kapitoly je možné mít před sebou odpovídající části modelu a tím mít neustálou orientaci o strukturním zařazení příslušného odstavce.

První, druhá a třetí část tohoto modelu je znázorněna v **Příloze A2**. První část modelu je podrobně popsána v 1. kapitole "Volba typu statistického souboru" prostřednictvím odstavců 1.1. až 1.4. a "Souhrnu 1". Druhá část modelu je popsána v 2. kapitole "Typologie makrosystémů" prostřednictvím odstavců 2.1. až 2.3. a "Souhrnu 2". Třetí část modelu je popsána v 3. kapitole "Kvaziklasický statistický přístup" prostřednictvím odstavců 3.1. až 3.4. a "Souhrnu 3". Odstavce 1.1. až 3.4. a Souhrny 1 až 3 prvních tří kapitol jsou řazeny tak, aby odpovídaly uspořádání prvních tří částí modelu. Odpovídající odstavce 1.1. až 3.4. a Souhrny 1 až 3 jsou připsány k jednotlivým strukturním prvkům první, druhé a třetí části modelu.

V **Příloze A3** je předložen stručný popis první, druhé a třetí části modelu. Tento stručný popis je velmi strohým vystižením obsahu 1. kapitoly "Volba typu statistického souboru", obsahu 2. kapitoly "Typologie makrosystémů" a obsahu 3. kapitoly "Kvaziklasický statistický přístup".

Čtvrtá, pátá a šestá část modelu je znázorněna v **Příloze A4**. Čtvrtá část modelu je popsána ve 4. kapitole "Termodynamické funkce" prostřednictvím odstavců 4.1. až 4.4. a "Souhrnu 4". Pátá část modelu je popsána v 5. kapitole "Metodiky zkoumání makrosystémů" prostřednictvím odstavců 5.1. a 5.2. a "Souhrnu 5". Šestá část modelu je popsána v 6. kapitole "Ilustrace konkrétních makrosystémů" prostřednictvím odstavců 6.1. až 6.3. a "Souhrnu 6". Odstavce 4.1. až 6.3. a Souhrny 4 až 6 posledních tří kapitol jsou řazeny tak, aby odpovídaly uspořádání posledních tří částí modelu. Odpovídající odstavce 4.1. až 6.3. a Souhrny 4 až 6 jsou připsány k jednotlivým strukturním prvkům čtvrté, páté a šesté části modelu.

V Příloze A5 je předložen stručný popis čtvrté, páté a šesté části modelu. Tento stručný popis je velmi strohým vystižením obsahu 4. kapitoly "Termodynamické funkce", obsahu 5. kapitoly "Metodiky zkoumání makrosystémů" a obsahu 6. kapitoly "Ilustrace konkrétních makrosystémů".



PŘÍLOHA A2 Znázornění modelu struktury 1., 2. a 3. kapitoly

PŘÍLOHA A3 Popis modelu struktury 1., 2. a 3. kapitoly

První část modelu (1. kapitola "Volba typu statistického souboru") ukazuje tři vstupní podmínky α , β , γ , při jejichž splnění lze přistoupit od obecně pojatého statistického přístupu k volbě typu statistického souboru SS:

 $\alpha)$ Zkoumání stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP u daného makrosystému MS

 β) Vyloučení pohybu MS jako celku a přijetí Tolmanovy hypotézy (energie a počet částic jako rozhodující charakteristiky STR, změny energie a počtu částic jako rozhodující charakteristiky VTP)

 γ) Sdružení identických a nezávislých MS do statistických souborů SS a jejich zkoumání prostřednictvím metodiky č.1 (východiskem je grandkanonický statistický soubor GSS) a metodiky č.2 (východiskem je kanonický statistický soubor KSS).

Druhá část modelu (2. kapitola "Typologie makrosystémů") ukazuje tři kritéria a, b, c, při jejichž respektování lze přistoupit od volby typu statistického souboru SS k výběru typu makrosystému MS:

a) Bude vybírán makrosystém MS volných částic: jednostranné kritérium - zanedbání vzájemné interakce mezi částicemi

b) Bude vybírán Maxwellův-Boltzmannův plyn (rozlišitelné částice, nadprahovost teploty degenerace) nebo Fermiho či Boseho plyn (nerozlišitelné částice, podprahovost teploty degenerace): <u>dvojstranné kritérium nerozlišitelnosti nebo rozlišitelnosti částic</u>

c) Bude vybírán klasický plyn (kvazispojité energetické spektrum promítající se do zkoumání částic bez struktury, bez kvantových efektů a pohybujících se převážně "čistou translací") nebo kvantový plyn (diskrétní energetické spektrum promítající se do zkoumání částic s vnitřní strukturou a pohybujících se v rámci vibrací, rotací, elektronových i jaderných stavů): dvojstranné kritérium diskrétnosti nebo spojitosti hodnot energie.

Třetí část modelu (3. kapitola "Kvaziklasický statistický přístup") ukazuje tři integrující faktory, na jejichž základě lze přistoupit od výběru typu makrosystému MS ke kvaziklasickému statistickému zkoumání vybraného typu MS:

A. Relativistický statistický přístup - integrující faktor umožňující dosazovat za energii volných částic výrazy, které respektují podmínky relativističnosti, ultrarelativističnosti či nerelativističnosti

B. Vztahy pro výpočty počtu kvaziklasických stavů v elementu fázového prostoru nebo v energetickém intervalu určité šířky - integrující faktor řešící kvaziklasické spojení výhod klasických a kvantových předpokladů, včetně vazby váhového faktoru termodynamického stavu na výpočty počtu kvaziklasických stavů

C. Obrysový algoritmus kvaziklasického statistického přístupu - globální integrující faktor umožňující přechod k tvorbě exaktních algoritmů metodik č.1 (východiskem je grandkanonický statistický soubor GSS) a č.2 (východiskem je kanonický statistický soubor KSS).

PŘÍLOHA A4 Znázornění modelu struktury 4., 5. a 6. kapitoly



PŘÍLOHA A5 Popis modelu struktury 4., 5. a 6. kapitoly

Čtvrtá část modelu (4. kapitola "Termodynamické funkce makrosystému") ukazuje na základě axiomatických předpokladů (dva termodynamické postuláty a tři termodynamické principy) členění termodynamických funkcí makrosystému na stavové parametry a vztahy mezi stavovými parametry (stavové rovnice, termodynamické věty, termodynamické potenciály a jejich parciální derivace). Mezi termodynamické potenciály patří vnitřní energie U, volná energie F, entalpie H, Gibbsův potenciál G, chemický potenciál μ , grandkanonický potenciál Ω . Důvodem členění je zkoumání termodynamických stavů (především stavů termodynamické rovnováhy STR) a termodynamického pohybu (především vratných termodynamických procesů VTP). V Souhrnu 4 je upozorněno na vztah termodynamických funkcí k souborovým středním hodnotám (statistickým analogonům) a k statistickému smyslu termodynamických zákonitostí. Dále je v Souhrnu 4 uveden výběr tří skupin termodynamických funkcí potřebných pro algoritmizaci metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS):

1.skupina termodynamických funkcí: hledání statistických analogonů stavových parametrů Entropie $S = k \ln \Gamma$ (viz (A8)), vnitřní energie U, volná energie F = U - TS, Gibbsův potenciál $G = \mu N$, grandkanonický potenciál $\Omega = F - G$ ($\Omega = \Sigma \Omega_V$, index ν pro ν -tou energetickou hladinu) **2.skupina termodynamických funkcí:** hledání statistického smyslu termodynamických vět Tři potřebné tvary vět termodynamických $dU = TdS - pdV + \mu dN$, $dF = -SdT - pdV + \mu dN$, $d\Omega = dF - Nd\mu$

3.skupina termodynamických funkcí: hledání statistického smyslu stavových rovnic

Entropie S a tlak p jako příslušné parciální derivace volné energie F, střední počet částic N_V jako příslušná parciální derivace grandkanonického potenciálu Ω_V

Pátá část modelu (5. kapitola "Metodiky zkoumání makrosystému") uvádí exaktní algoritmus metodiky č.1 (GSS) a metodiky č.2 (KSS). Východiskem metodiky č.1 je velký stavový součet energetické hladiny jako výraz existence statistické fyzikální reality. Algoritmem metodiky č.1 jsou Fermiho-Diracovo, Boseho-Einsteinovo a Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení jako souborové střední hodnoty počtu částic v energetické hladině a kvaziklasické úpravy při hledání dalších potřebných souborových středních hodnot. Metodika č.2 vychází z malého stavového součtu volné částice a člení jej kvaziklasicky na translační a strukturní stavový součet. Prostřednictvím malého stavového součtu pak hledá potřebné souborové střední hodnoty ke zkoumání cestou kvaziklasickou, klasickou i kvantovou. Vzhledem k podmínce konstantnosti počtu částic preferuje metodika č.2 zkoumání Maxwellova-Boltzmannova ideálního plynu. Zvláště upozorňuje na výsadní postavení stavové rovnice ideálního plynu jako vztahu platného v oblasti klasické i kvantové.

Šestá část modelu (6. kapitola "Ilustrace konkrétních makrosystémů") uvádí nejen ilustraci makrosystému fotonů, makrosystému fononů a makrosystému molekul ideálního plynu, ale také v Souhrnu 6 dává k dispozici přehled konkrétních makrosystémů volných částic, které lze pomocí metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS) poměrně snadno zkoumat z hlediska stavů termodynamické rovnováhy STR a vratných termodynamických procesů VTP. V přehledu se objevují makrosystémy fermionů (elektronový plyn v polovodičích a v kovech, makrosystémy děr ve vlastních a příměsových polovodičích), makrosystémy bosonů (fotonový plyn elektromagnetického záření, fononový plyn a rotonový plyn v krystalech, amorfních látkách a supratekutých materiálech, makrosystémy Cooperových v supravodivých materiálech) i makrosystémy rozlišitelných kvantových párů a klasických částic (kvaziklasické molekuly, klasické molekuly, kvantové molekuly, molekuly vzduchu).

B. NESTATISTICKÁ FYZIKA

(Nestatistický přístup ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů)

7. Klasická mechanika (Přílohy B1, B2, B3, B8)

7.1. Vymezení klasické mechaniky

Mechanika zkoumá pohybové stavy a změny pohybových stavů, které souvisejí s mechanickým pohybem různých fyzikálních objektů - těles, skupin těles a různých druhů kontinua (např. kapaliny, plyny). Mechanický pohyb lze definovat jako změnu polohy fyzikálního objektu vůči jiným objektům s probíhajícím časem, mezi mechanické pohyby patří pohyb fyzikálního objektu jako celku, ale i uspořádané formy pohybu soustavy částic tvořících klasický nestatistický fyzikální objekt (např. zvukové nebo mechanické vlnění). Při zkoumání pohybových stavů a jejich změn bude započato se zkoumáním těchto fyzikálních jevů u hmotného bodu.

K přesnému určení polohy a pohybu zkoumaného tělesa si mechanika často vybírá myšlený bodový objekt, kterým nahrazuje těleso - **hmotný bod**. Při popisu pohybu tělesa je potřebné určit vztažné těleso, vzhledem k němuž je pak určována poloha. Spojením vztažného tělesa se soustavou pravoúhlých kartézských souřadnic lze získat **souřadnicovou vztažnou soustavu** s obvyklými osami x, y, z. **Polohu zkoumaného hmotného bodu je možné určit pomocí polohového vektoru** \vec{r} , který lze zapsat pomocí jednotkových vektorů $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ souřadnicových os x, y, z ve tvarech

(B1)
$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k}$$
, $\vec{r}(x,y,z)$,

kde x, y, z jsou souřadnice koncového bodu polohového vektoru \vec{r} (počáteční bod leží vždy v počátku vztažné souřadnicové soustavy). Polohový vektor a jeho souřadnice x, y, z jsou funkcemi času a množina koncových bodů polohového vektoru vytváří **trajektorii hmotného bodu**.

Mechanika se člení na kinematiku a dynamiku. Kinematika zkoumá časový průběh pohybu hmotného bodu pomocí trajektorie, rychlosti a zrychlení hmotného bodu, dynamika zkoumá především síly jako příčiny pohybu hmotného bodu.

Kinematika ze znalosti polohového vektoru hmotného bodu jako funkce času

(B2)
$$\vec{r} = \vec{r} (t)$$

(tj. ze znalosti **pohybového zákona**) může derivací polohového vektoru podle času *t* získat vztahy pro rychlost \vec{v} a zrychlení \vec{a} hmotného bodu (první derivace podle času je označena tečkou, druhá derivace podle času dvěma tečkami):

(B3)
$$\vec{v}(t) = \vec{r}(t) = \dot{x}(t)\vec{i} + \dot{y}(t)\vec{j} + \dot{z}(t)\vec{k}$$
, tj. $\vec{v}(v_x, v_y, v_z)$
(B4) $\vec{a}(t) = \ddot{\vec{r}}(t) = \ddot{x}(t)\vec{i} + \ddot{y}(t)\vec{j} + \ddot{z}(t)\vec{k}$, tj. $\vec{a}(a_x, a_y, a_z)$.

Nechť je uvažován volný hmotný bod jako hmotný bod, který nemá geometrická omezení pohybu způsobená tzv. vazbami. Pak lze ze znalosti zrychlení prostřednictvím zákona síly jako součásti newtonovského formalismu napsat **pohybové rovnice** ve tvaru

(B5)
$$\vec{F} = m\vec{r}$$
 $(F_x = m \ \ddot{x}, \ F_y = m \ \ddot{y}, \ F_z = m \ \ddot{z}).$

Zatímco kinematika představuje s použitím diferenciálního počtu cestu od pohybového zákona k pohybovým rovnicím, dynamika je cestou opačnou - ze znalosti příčin pohybu (sil) vychází z pohybových rovnic (B5) a s použitím integrálního počtu získává pohybový zákon (B2). Pohybové rovnice ve tvaru (B5) jsou výrazem newtonovského formalismu, pro případ vázaného hmotného bodu by bylo zapotřebí využít formalismu lagrangeovského nebo hamiltonovského.

Základním pojmem dynamiky je pojem síly. Síly (v zjednodušené podobě jako vzájemné působení hmotných bodů, těles, polí) lze dělit na síly s deformačními účinky (statické účinky síly spojené se změnou tvaru) a na síly s translačními a rotačními účinky (dynamické účinky síly spojené se změnou polohy) nebo na síly vtištěné (síly fyzikálního původu) a síly vazbové (síly geometrického původu jako prostorová omezení pohybu) nebo

také na síly vnější (mající původ v objektech nacházejících se mimo sledovanou soustavu hmotných bodů) a síly vnitřní.

7.2. Formalismy klasické mechaniky

7.2.1. Posloupnost kroků lagrangeovského a hamiltonovského formalismu

Základními formalismy mechaniky jsou formalismus lagrangeovský a hamiltonovský. Použití lagrangeovského a hamiltonovského formalismu je dáno následující posloupností kroků a) až e):

a) vymezení fyzikálního problému a klasických počátečních podmínek (hodnoty souřadnic a rychlostí v daném časovém okamžiku),

b) stanovení odpovídajícího počtu *r* vazeb (tj. geometrických omezení pohybu) a odpovídajícího počtu *n* obecných souřadnic q_j a hybností p_j (počet q_j i p_j se získá, když se od počtu 3*N* obvyklých kartézských souřadnic *N* částic odečte počet *r* vazeb, tj. n = 3N - r),

c) nalezení Lagrangeovy funkce *L* a Hamiltonovy funkce *H* (v jednoduchých případech je H = T + V, kde *T* je kinetická energie a *V* potenciální energie)

(B6)
$$L = T - V, \quad H = \Sigma p_j \quad \dot{q}_j - L = T + V,$$

d) nalezení pohybových rovnic (Lagrangeových rovnic prvního nebo druhého druhu nebo Hamiltonových kanonických rovnic - v případě přechodu k newtonovskému formalismu nalezení příslušného tvaru 2. Newtonova pohybového zákona, tj. zákona síly). Lagrangeovy rovnice druhého druhu mají v jednoduchých případech tvar

(B7)
$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0$$

a jejich počet je n = 3N - r, Hamiltonovy kanonické rovnice lze pak zapsat

(B7a)
$$\dot{q}_j = \frac{\partial H}{\partial p_j}, \ \dot{p}_j = -\frac{\partial H}{\partial q_j}$$
 (jejich počet je 2*n*).

Zákon síly má pro jeden volný hmotný bod obvyklý tvar (B5) $\vec{F} = m \ddot{\vec{r}}$.

e) řešení pohybových rovnic s cílem nalézt tvar pohybového zákona (tj. dráhy ve fázovém prostoru v případě hamiltonovského formalismu, dráhy v konfiguračním prostoru v případě lagrangeovského formalismu nebo jen dráhy v rámci Euklidovského prostoru a běžné kartézské souřadnicové soustavy v případě newtonovského formalismu). Konfigurační prostor je *n*-rozměrný prostor obecných souřadnic q_j (pod zápisem q_j je obvykle myšleno všech *n* obecných souřadnic), fázový prostor je 2*n*-rozměrný prostor obecných souřadnic q_j i obecných hybností p_j . Obecné hybnosti p_j lze získat pomocí výrazu

(B8)
$$p_j = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j}$$

7.2.2. Ilustrace kroků lagrangeovského a hamiltonovského formalismu

Ilustrací použití lagrangeovského a hamiltonovského formalismu a jejich přechodu k formalismu newtonovskému bude zkoumání vodorovného vrhu hmotného bodu v homogenním tíhovém poli Země.

Ilustrace kroků a) až e) formalismů mechaniky pro vodorovný vrh:

- a) Vymezení klasických počátečních podmínek: $\vec{r}(0) = \vec{r}(0,h,0), \ \vec{v}(0) = \vec{v}(v_0,0,0)$
- **b**) Obecné souřadnice budou $q_1 = x$, $q_2 = y$, $q_3 = z = 0$ (q_3 uvedena jen formálně)
- c) Lagrangeova funkce bude získána podle (B6) ve tvaru

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

hybnosti podle (B8) ve tvarech

$$p_x = m \dot{x}, p_y = m \dot{y}, p_z = m \dot{z} = 0 (p_z \text{ uvedena jen formálně}),$$

Hamiltonovu funkci lze obdržet podle (B6) ve tvaru

$$H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{p_y^2}{2m} + \frac{p_z^2}{2m} + mgy$$

d) Lagrangeovy rovnice druhého druhu (B7) i Hamiltonovy kanonické rovnice (B8) se transformují po dosazení za Lagrangeovu funkci L a Hamiltonovu funkci H a provedení příslušných derivací v 2. Newtonův pohybový zákon (B5) ve tvaru

$$0 = m \ddot{x}, \quad -mg = m \ddot{y}, \quad 0 = m \ddot{z}$$

e) Řešení pohybových rovnic povede po první integraci podle času a s uplatněním počátečních podmínek pro rychlost k vektoru rychlosti vodorovného vrhu

$$\vec{v}(t) = \dot{\vec{r}}(t) = v_0 \vec{i} - gt \vec{j} + 0\vec{k}$$
,

po provedení druhé integrace podle času a s uplatněním počátečních podmínek pro polohový vektor bude získán pohybový zákon (B2) pro vodorovný vrh ve tvaru (B1)

$$\vec{r} = v_0 t \, \vec{i} - \frac{1}{2} g t^2 \, \vec{j} + 0 \, \vec{k} \; .$$

7.3. Zákony zachování jako integrály pohybových rovnic

7.3.1. Zákon zachování mechanické energie

Obvykle je zákon zachování mechanické energie uváděn pro izolovaný hmotný bod (nejsou přítomna ani vnější silové pole, ani působící okolní hmotné body) nebo pro volný hmotný bod nacházející se v konzervativním silovém poli (v konzervativním silovém poli je práce vykonaná po uzavřené křivce nulová). Oba popsané případy zachování součtu kinetické energie T a potenciální energie V (tj. mechanické energie) hmotného bodu jsou spojeny s podmínkou časové nezávislosti Lagrangeovy funkce L.

Obecně je Lagrangeova funkce *L* funkcí obecných souřadnic q_j , derivací obecných souřadnic podle času \dot{q}_j a času *t*, kde j = 1, 2, ..., n (n = 3N - r). Odtud plyne zápis funkční závislosti $L = L (q_j, \dot{q}_j, t)$.

Po provedení úplné derivace Lagrangeovy funkce dL / dt podle času (parciální derivace $\partial L / \partial t$ je při podmínce časové nezávislosti *L* nulová) lze získat

$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_{i}} \dot{q}_{i} + \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{i}} \ddot{q}_{i} = \sum_{i=1}^{n} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{i}} \dot{q}_{i} \right),$$

po úpravě pomocí (B6), (B7) a (B8)

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0.$$

Odtud již plyne, že Hamiltonova funkce H (která je za zkoumaných podmínek součtem kinetické energie T a potenciální energie V) se zachovává.

Zachovávající se veličiny se nazývají pohybovými integrály (integrály pohybových rovnic) - Hamiltonova funkce *H* je v konzervativním silovém poli (kterým je např. homogenní tíhové pole Země, v němž plní *H* roli mechanické energie) pohybovým integrálem Lagrangeových rovnic i Hamiltonových kanonických rovnic. Zákon zachování energie je v konzervativních silových polích obecně důsledkem "homogenity času". Homogenita prostoru a času znamená, že všechny polohy volného hmotného bodu jsou v každém časovém okamžiku rovnocenné.

Jednoduše lze zákon zachování energie v homogenním tíhovém poli Země dokázat pomocí dráhových účinků síly působící na hmotný bod. Dráhové účinky síly jsou pak dány vykonanou prací W, která je při přechodu hmotného bodu např. volným pádem ze stavu 1 s rychlostí v_1 do stavu 2 s rychlostí v_2 určena tzv. dráhovým integrálem síly

$$W = \int_{1}^{2} \vec{F} \, \mathrm{d} \, \vec{r} = \int_{v_{1}}^{v_{2}} mv \, \mathrm{d} v = \left[\frac{1}{2} mv^{2}\right]_{v_{1}}^{v_{2}} = T_{2} - T_{1}.$$

Dráhový integrál síly je tedy roven změně kinetické energie mezi stavy 1 a 2 určenými příslušnými polohovými vektory a rychlostmi hmotného bodu neboli mechanické práci síly mezi těmito stavy. Ve zkoumaném jednoduchém případě je s růstem kinetické energie spojen pokles potenciální energie

$$W = \int_{1}^{2} \vec{F} \, \mathrm{d} \, \vec{r} = \int_{h_{1}}^{h_{2}} - mg \, \mathrm{d} h = \left[-mg \, h \right]_{h_{1}}^{h_{2}} = V_{1} - V_{2}.$$

Odtud již vyplývá zákon zachování mechanické energie vyjádřený rovností hodnot Hamiltonovy funkce $H_1 = H_2$ v popsaných stavech 1 a 2.

7.3.2. Další zákony zachování, počet integrálů pohybových rovnic

Vedle dráhových účinků má síla také časové účinky. Časové účinky síly lze popsat pomocí časového integrálu síly, jehož dolní mez t_1 vyjadřuje okamžik, kdy síla začala na hmotný bod (těleso) působit při jeho hybnosti $\vec{p}(t_1) = \vec{p}_1$, zatímco horní mez t_2 vyjadřuje okamžik ukončení silového působení při hybnosti $\vec{p}(t_2) = \vec{p}_2$. Časový integrál síly (nazývaný také impulsem síly) lze pak zapsat

$$\vec{I} = \int_{t_1}^{t_2} \vec{F} \, \mathrm{d}t = \vec{p}(t_2) - \vec{p}(t_1) = \vec{p}_2 - \vec{p}_1.$$

Je-li impuls síly \vec{I} roven nulovému vektoru, pak platí zákon zachování hybnosti \vec{p} hmotného bodu. Obecně lze pomocí lagrangeovského a hamiltonovského formalismu ukázat, že zákon zachování hybnosti je důsledkem "homogenity prostoru" (zkoumané vlastnosti nezávisejí na posunutí v prostoru).

Mezi další důležité zákony zachování patří zákon zachování momentu hybnosti hmotného bodu. Moment hybnosti (vzhledem k zvolenému pevnému bodu) $\vec{b} = \vec{r} \times \vec{p}$, který je roven vektorovému součinu polohového vektoru hmotného bodu a hybnosti hmotného bodu, je svázán s vektorem momentu síly \vec{M} (vzhledem k témuž pevnému bodu) vztahem

$$\vec{M} = \vec{r} \times \vec{F} = \frac{\mathrm{d}\vec{b}}{\mathrm{d}t} \,.$$

Je-li působící moment síly \vec{M} roven nulovému vektoru, moment hybnosti \vec{b} se zachovává. Opět lze prostřednictvím lagrangeovského a hamiltonovského formalismu obecně ukázat, že zákon zachování momentu hybnosti je důsledkem "izotropnosti prostoru" (zkoumané vlastnosti nezávisejí na směru v prostoru).

Nejen pro hmotný bod, ale i pro izolovanou soustavu hmotných bodů platí, že taková soustava má celkem 7 aditivních pohybových integrálů - energii vyjádřenou Hamiltonovou funkcí *H*, hybnost \vec{p} a moment hybnosti \vec{b} .

7.4. Mechanický kmitavý pohyb oscilátoru

7.4.1. Obecný a periodický pohyb kmitavý

Kmitavý pohyb je pohyb, při němž hmotný bod zachovává konečnou vzdálenost od své rovnovážné polohy. Hmotný bod, který koná pohyb kmitavý se nazývá oscilátor. Periodický kmitavý pohyb je pohyb s periodickým opakováním svého průběhu - jeden stále se opakující průběh se nazývá kmit. S periodickým kmitáním jsou spojeny obvyklé pojmy doby kmitu T a frekvence v kmitavého pohybu jako počet kmitů za 1 s. Platí známý vztah

$$(B9) T = \frac{1}{\nu}.$$

Kmitá-li oscilátor po přímce, jde o lineární kmitavý pohyb. Obvykle bude zkoumán právě lineární kmitavý pohyb, jehož kmitání se bude z hlediska obvyklé volby kartézské souřadnicové soustavy odehrávat v ose y, rovnovážnou polohu pak lze spojit s počátkem souřadnicové soustavy. Okamžitá vzdálenost od rovnovážné polohy je okamžitá výchylka y, maximální okamžitá výchylka je amplituda *A*.

7.4.2. Rovnoměrný pohyb kruhový, harmonický pohyb kmitavý

Harmonický pohyb kmitavý hmotného bodu je úzce spojen s rovnoměrným pohybem kruhovým hmotného bodu se stejnou hmotností m. Při rovnoměrném pohybu kruhovém (střed kružnice splývá s počátkem souřadnicové soustavy) kolmé průměty okamžitých poloh hmotného bodu na osu y konají kmitavý pohyb, který je harmonickým pohybem kmitavým. Jelikož s rovnoměrným pohybem kruhovým je spojen pojem úhlové frekvence (úhlové rychlosti) ω jako úhlu, který polohový vektor hmotného bodu opíše za 1 s, je tato fyzikální veličina použita také při popisu harmonického pohybu kmitavého. Úhlová frekvence ω je spojena s frekvencí v vztahem

(B10)
$$\omega = 2\pi v.$$

Obvodová rychlost v rovnoměrného pohybu kruhového po kružnici o poloměru r (r je také velikost polohového vektoru), dostředivé zrychlení a_n (tečné zrychlení a_{τ} je nulové, neboť

velikost vektoru rychlosti se nemění) a dostředivá síla F_n jsou dány vztahy ve skalární a vektorové podobě

(B11)
$$v = \omega r, \ \vec{v} = \vec{\omega} \times \vec{r}, \ a_n = \omega^2 r = \omega v, \ \vec{a_n} = \vec{\omega} \times \vec{v}, \ F_n = m \ a_n, \ \vec{F_n} = m \vec{a_n}$$

7.4.3. Dynamický a kinematický popis harmonického pohybu kmitavého

Dynamickou příčinou harmonického pohybu kmitavého v ose y je síla *F*, jejíž velikost je přímo úměrná okamžité výchylce y oscilátoru a směřuje vždy do rovnovážné polohy. Působením této síly vzniká vlastní kmitání harmonického oscilátoru a je s ní spojena také potenciální energie oscilátoru *V*. Pro sílu *F* a potenciální energii *V* platí vztahy

(B12)
$$F = -Ky, V = \frac{1}{2}Ky^2$$

Užitím lagrangeovského nebo hamiltonovského formalismu (pro tento případ lze vystačit také s newtonovským formalismem) lze snadno dospět k pohybové rovnici harmonického oscilátoru. Např. Lagrangeova funkce *L* je dána vztahem

$$L = \frac{1}{2}m\,\dot{y}^2 - \frac{1}{2}Ky^2\,.$$

Po dosazení podle (B7) do Lagrangeovy rovnice 2. druhu lze obdržet hledanou pohybovou rovnici vlastních kmitů harmonického oscilátoru ve tvaru

$$(B13) \quad -Ky = m \ \ddot{y} \, .$$

Řešením této pohybové rovnice je pohybový zákon (B2), vztah pro rychlost (B3), pro zrychlení (B4) a hodnota konstanty *K* harmonického oscilátoru, vše ve tvarech

(B14)
$$y = A \sin(\omega t + \varphi_0), v = A\omega \cos(\omega t + \varphi_0), a = -A\omega^2 \sin(\omega t + \varphi_0) = -\omega^2 y,$$

 $K = m\omega^2.$

Úhel $\varphi = \omega t + \varphi_0$ je fáze harmonického pohybu kmitavého, úhel φ_0 je počáteční fáze. Amplitudy rychlosti a zrychlení jsou zřejmé ze vztahů (B14). Ze vztahů (B14) a (B12) je také vidět, že Hamiltonova funkce

$$H = T + V = \frac{1}{2} m\omega^2 A^2.$$

Jelikož jde o konstantu, Hamiltonova funkce je pro vlastní harmonické kmitání integrálem pohybových rovnic.

7.4.4. Skládání harmonických kmitů

Při zkoumání dvou harmonických kmitů s okamžitými výchylkami y_1 a y_2 je výsledná okamžitá výchylka $y = y_1 + y_2$ okamžitou výchylkou výsledného harmonického kmitu, který vznikl složením dílčích kmitů. Rozdíl fází $\varphi_1 - \varphi_2$ dílčích kmitů se nazývá fázovým rozdílem $\Delta \varphi$.

Dále budou studovány dva navzájem kolmé harmonické kmity (jeden se bude odehrávat v ose x, druhý v ose y) se stejnými amplitudami a úhlovými frekvencemi (tj. s poměrem frekvencí $v_1: v_2=1:1$), dané podle (B14) pohybovými zákony

$$x = A \sin \omega t$$
, $y = A \sin (\omega t + \varphi_0)$ a fázovým rozdílem $\Delta \varphi = \varphi_0$.

Snadnou úpravou s využitím vztahů mezi goniometrickými funkcemi lze získat tvar trajektorie výsledného složeného kmitu ve tvaru

$$y^2 - 2xy \cos \varphi_0 + x^2 = A^2 \sin^2 \varphi_0.$$

Analýza fázového rozdílu vede pro poměr frekvencí $\nu_1:\nu_2=1:1$ ke zjištění tvarů nejjednodušších tzv. Lissajousových obrazců:

 $\varphi_0 = 0^\circ$, 180° - harmonické kmitání v přímce půlící úhel obou dílčích kmitů $\varphi_0 = 90^\circ$, 270° - kruhové kmity pravotočivé (ve smyslu pohybu hodinových ručiček) a levotočivé (v opačném smyslu) \$\varphi_0 \in (90°,180°)\$ nebo (180°,270°) - eliptické kmity s hlavní osou v ose druhého a čtvrtého kvadrantu pravotočivé a levotočivé
 \$\varphi_0 \in (0°,90°)\$ nebo (270°,360°) - eliptické kmity s hlavní osou v ose prvního a třetího

kvadrantu pravotočivé a levotočivé

7.4.5. Tlumený a nucený pohyb kmitavý

Vlivem třecích sil a odporu prostředí se amplituda kmitání zmenšuje - pak lze hovořit o tlumeném kmitání. Při pohybu v odporujícím prostředí (opět je uvažováno kmitání v ose y) je odporová síla *R* často úměrná rychlosti \dot{y} , má však opačný směr. Odtud plyne pro odporovou sílu vztah $R = -2bm \dot{y}$, kde 2bm je konstanta úměrnosti a *b* se nazývá konstanta útlumu. S použitím newtonovského formalismu lze zapsat pohybovou rovnici (B5) pro tlumené kmitání ve tvaru

$$(B15) \quad -Ky-2bm\,\dot{y}\,=m\,\,\ddot{y}\,.$$

Rovnice (B15) je diferenciální rovnice, která je lineární, homogenní, 2. řádu a s konstantními koeficienty. Řešení rovnice (B15) vede za podmínky $b < \omega$ (ω je úhlová frekvence vlastního kmitání) k nalezení okamžité výchylky y tlumeného kmitání jako funkce času ve tvaru

$$y = A e^{-bt} \sin(\omega_1 t + \varphi_0)$$
, kde $\omega_1 = (\omega^2 - b^2)^{1/2}$.

Člen Ae^{-bt} představuje stále se s časem zmenšující amplitudu tlumeného kmitání. Kdyby byla konstanta útlumu $b > \omega$, nevznikly by žádné reálné kmity - takovému pohybu se říká pohyb aperiodický.

Jestliže při reálném kmitání nepůsobí na oscilátor vnější síly, kmitání vlivem tlumení časem zanikne. Periodický kmitavý pohyb, který může konat oscilátor vlivem působení vnější periodicky časově proměnné síly libovolně dlouho, je nuceným kmitáním. Vnější periodicky časová síla se nazývá budící silou F_v , vynucuje časově neomezené periodické kmitání (tzv. nucené kmitání) a je dána v nejjednodušším případě vztahem $F_v = F_0 \sin \Omega t$ (F_0 je amplituda budící síly, Ω je její úhlová frekvence). S použitím newtonovského formalismu lze zapsat pohybovou rovnici (B5) pro nucené kmitání ve tvaru

(B16)
$$-Ky - 2bm \dot{y} + F_0 \sin \Omega t = m \ddot{y}$$
.

Rovnice (B16) je diferenciální rovnice, která je lineární, nehomogenní, 2. řádu a s konstantními koeficienty. Řešení rovnice (B16) vede za podmínky $b < \omega$ (ω je úhlová frekvence vlastního kmitání) k nalezení okamžité výchylky y nuceného kmitání jako funkce času ve tvaru

$$y = A e^{-bt} \sin(\omega_1 t + \varphi_0) + A_v \sin(\Omega t + \gamma)$$
, kde $\omega_1 = (\omega^2 - b^2)^{1/2}$

Tvar řešení naznačuje, že první člen $A e^{-bt} \sin (\omega_1 t + \varphi_0)$ popisuje obvyklé tlumené kmitání. Tlumené kmitání časem zanikne a zůstanou jen nucené kmity $y = A_v \sin (\Omega t + \gamma)$ s amplitudou A_v , jejichž úhlová frekvence Ω je rovna úhlové frekvenci budící síly F_v . Po dosazení okamžité výchylky y zbylých nucených kmitů do původní pohybové rovnice (B16) je možné vypočítat jak amplitudu A_v nucených kmitů, tak fázový rozdíl $\Delta \varphi = \gamma$ mezi budící silou a nucenými kmity. Např. pro amplitudu A_v lze získat vztah

$$A_{\nu} = \frac{F_0/m}{\sqrt{\left(\omega^2 - \Omega^2\right)^2 + 4b^2\Omega^2}}$$

Získaný vztah ukazuje, že amplituda A_v nucených kmitů je maximální při takové úhlové frekvenci Ω budící síly F_v , při níž má jmenovatel zlomku minimální hodnotu. Stačí tedy položit derivaci výrazu pod odmocninou podle Ω rovnu nule. Řešením takto získané rovnice lze získat hledanou hodnotu úhlové frekvence Ω ve tvaru

$$\Omega = (\omega^2 - 2b^2)^{1/2},$$

který při malé hodnotě konstanty útlumu *b* vede ke známé podmínce rezonance $\Omega = \omega$ mezi vlastními kmity a budící silou.

7.5. Mechanické vlnění

7.5.1. Druhy vlnění, interference vlnění, vlnová délka

Mechanické vlnění je děj, při němž se kmitání šíří látkovým prostředím složeným z obrovského počtu oscilátorů - hmotných bodů. Mezi oscilátory existuje vazba, která umožňuje přenos nuceného kmitání jednoho oscilátoru postupně na oscilátory další. Oscilátory se nepřemísťují v prostoru, jen kmitají kolem rovnovážných poloh (opět budou uvažovány okamžité výchylky y jednotlivých oscilátorů pouze ve směrech rovnoběžných s osou y). Zdrojem vlnění je oscilátor - hmotný bod, z něhož se vlnění šíří. Druhy vlnění jsou vlny postupné příčné a postupné podélné, vlny stojaté příčné a stojaté podélné.

Jestliže postupují látkovým prostředím dvě nebo více vlnění, pak dochází k jejich skládání neboli interferenci. Např. stojaté vlnění vzniká interferencí vlnění o stejné amplitudě a frekvenci, která postupují proti sobě.

Vlnová délka λ je vzdálenost, do které se rozšíří vlnění v řadě bodové za dobu kmitu *T*. Bude-li *v* označovat rychlost šíření vlnění, pak pro vlnovou délku λ lze napsat s použitím (B9) vztahy

(B17)
$$\lambda = vT = v / v$$

7.5.2. Kinematický a dynamický popis mechanického vlnění

Dále bude zkoumáno vlnění šířící se množinou oscilátorů tvořících řadu bodovou, řada bodová bude ztotožněna se souřadnicovou osou x, zdroj vlnění bude umístěn v počátku souřadnicové soustavy a jednotlivé oscilátory řady bodové budou kmitat harmonicky na základě vztahů (B14). Pohybový zákon (B14) pro okamžitou výchylku jednoho oscilátoru vyjadřoval funkční závislost jen na čase *t*. Pro případ množiny oscilátorů tvořících osu x bude nutné včlenit do pohybového zákona (do vztahu pro okamžitou výchylku) také závislost na souřadnici *x*, která bude charakterizovat konkrétní oscilátor z dané množiny oscilátorů. Jelikož se kmitání rozšíří do vzdálenosti *x* za čas x/v, kde *v* je rychlost šíření vlnění, bude možné pohybový zákon (okamžitou výchylku) postupného vlnění šířícího se kladnou poloosou osy x napsat s použitím (B10), (B14) a (B17) ve tvarech

(B18)
$$y = A \sin \omega (t - \frac{x}{v}) = A \sin 2\pi \left(\frac{t}{T} - \frac{x}{\lambda}\right).$$

Při šíření v opačném směru se změní jen znaménko – na znaménko +. Pohybový zákon (B18) se nazývá **vlnová funkce**.

Při přechodu od kinematiky vlnění (viz vlnová funkce (B18)) k dynamice vlnění je nutno přihlížet také k příčinám vlnění, tj. k souvislosti vlnění se silami, jimiž se vlnění řadovou bodovou (osou x) přenáší. S využitím newtonovského formalismu bude sestavena pohybová rovnice zkoumaného vlnění tak, aby byla splněna po dosazení vlnové funkce (B18). Taková pohybová rovnice vlnění se nazývá **vlnovou rovnicí** a má tvar

(B19)
$$v^2 \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\partial^2 y}{\partial t^2}$$

Po srovnání vlnové rovnice (B19) se zjednodušeným tvarem F=ma zákona síly (B5) lze učinit následující závěry:

- na pravé straně vlnové rovnice je **okamžité zrychlení** jednoho oscilátoru řady bodové (obecněji: **okamžité zrychlení** objemového elementu rozvlněného prostředí)

levá strana má podle zákona síly význam podílu síly působící v jednotlivých místech řady bodové na oscilátor a hmotnosti oscilátoru (obecněji: význam podílu síly působící v jednotlivých místech rozvlněného prostředí na objemový prvek a hmotnosti objemového prvku). Levá strana se číselně rovná síle působící na prvek s jednotkovou hmotností

dosazením vlnové funkce (B18) do vlnové rovnice (B19) lze zjistit, že vlnová funkce splňuje vlnovou rovnici.

Na závěr kinematického a dynamického popisu mechanického vlnění lze učinit zobecnění tvaru vlnové rovnice (B19) na libovolné šíření prostorem (nikoliv pouze řadou bodovou) zavedením obecného označení vlnové funkce písmenem řecké abecedy ψ a Laplaceova operátoru Δ

(B20)
$$\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}.$$

Pak lze vlnovou rovnici (B19) přepsat s použitím (B20) ve tvaru

(B21)
$$\Delta \psi - \frac{1}{v^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0.$$

7.5.3. Zvuk, ultrazvuk

Zvuk je nejen sluchový vjem, ale i vnější příčina sluchového vjemu - uspořádaný pohyb molekul látky (tedy i vzduchu), který se jako postupná podélná i příčná vlna (zvuková vlna) přenáší působením sil, kterými na sebe molekuly působí. Frekvence zvukových vln je v rozmezí 16 Hz až 20 kHz. Zdroje zvukových vln jsou tělesa, ve kterých vzniká chvění jako stojaté příčné nebo stojaté podélné vlnění. Např. tyč délky *l* upnutá uprostřed a podélně rozechvěná vydává základní zvuk o frekvenci v = v / 2l. Kmitající konec tyče funguje jako zdroj zvukového vlnění šířícího se do okolního prostředí. Čím kratší je tyč, tím vyšší je frekvence. Při jisté délce tyče dojde k přechodu z oboru slyšitelných zvuků do oboru ultrazvuku (např. při rychlosti šíření zvuku v tyči $v = 5.10^3$ m.s⁻¹ bude překročena frekvence 20 kHz při délce tyče 0,125 m).

Ultrazvuk je lidským uchem neslyšitelný zvuk s frekvencí větší než 20 kHz. K buzení ultrazvukových vln se používá místo mechanického podélného rozkmitání tyčí jevu magnetostrikčního nebo piezoelektrického.

Magnetostrikční jev spočívá v tom, že některé feromagnetické látky (např. ve tvaru tyče) se ve střídavém elektromagnetickém poli periodicky zkracují a prodlužují. Nelze sice dosáhnout příliš vysokých frekvencí (asi do 90 kHz, pak je již tyč rezonující se střídavým elektromagnetickým polem příliš krátká), ale lze získat značné intenzity ultrazvuku přesahující 200 W.cm⁻² (intenzita zvuku od rádia nastaveného na normální poslech je 10⁻⁹ W.cm⁻²). Intenzita ultrazvuku je energie ultrazvukového vlnění, která projde za 1 s jednotkovou plochou, jednotková plocha se obvykle volí cm².
Přímý piezoelektrický jev vzniká u krystalů, které nejsou středově souměrné (např. u krystalu křemene nebo titaničitu barnatého) Je-li podrobena vhodně vyříznutá destička v jistých směrech tahu nebo tlaku, destička i molekuly krystalu se deformují, změní se poloha nábojů a tak vzniknou podobně jako u polarizace dielektrika opačné povrchové náboje na protilehlých plochách destičky. Mezi protilehlými plochami vzniká piezoelektrické napětí.

Obrácený piezoelektrický jev se objevuje při opačném postupu - je-li vložen na protilehlé plochy destičky potenciálový rozdíl, destička se deformuje. Je-li vloženo na protilehlé plochy destičky střídavé elektrické napětí, destička se rozkmitá a stává se zdrojem ultrazvuku. S využitím vyšších harmonických kmitů základního kmitání destičky lze dosáhnout frekvence až 10⁶ kHz a intenzit kolem 50 W.cm⁻².

Ultrazvukové vlny jsou příliš krátké, proto se šíří prakticky přímočaře a odrážejí se podle rovnosti úhlu dopadu a úhlu odrazu. Značně se zeslabují ve vzduchu a v plynech, podstatně méně v kapalinách a pevných látkách. S využitím Dopplerova jevu lze z rozdílu frekvence ultrazvukové vlny dopadající na pohybující se rozhraní a odražené od pohybujícího se rozhraní zjistit rychlost pohybu rozhraní.

7.6. Mechanika kontinua

7.6.1. Předmět zkoumání mechaniky kontinua

Mechanika kontinua se zabývá zkoumáním pohybu plynných, kapalných a pevných pružně deformovatelných těles. Pohyb těchto těles je zkoumán na základě lagrangeovského a hamiltonovského formalismu a na základě předpokladu, že tato tělesa zaplňují prostor spojitě (spojité rozložení hmoty). Částice kontinua je malá oblast tělesa, v níž lze ještě považovat hmotu za spojitě rozloženou. Jestliže bude částice kontinua zkoumána jako nekonečně malé okolí bodu kontinua, pak zobrazení tohoto okolí při přemisťování částice lze považovat za afinní (přímky přecházejí v přímky, roviny v roviny, rovnoběžnostěn v rovnoběžnostěn). Na základě takto vymezeného vztahu mezi bodem a částicí kontinua lze podle fyzikálního charakteru zkoumaného problému používat oba pojmy. Nachází-li se těleso v silovém poli, působí toto silové pole v celém objemu kontinua, na každou částici kontinua. **Tento druh sil je popisován silami objemovými nebo silami hmotnostními**. Objemové síly jsou vztaženy na jednotku objemu kontinua, hmotnostní síly na jednotku hmotnosti. Částici kontinua lze proto chápat také v podobě vhodné jednotky objemu nebo vhodné jednotky hmotnosti kontinua.

Působí-li na povrch tělesa vnější síla, přenáší se toto působení uvnitř kontinua od jedné jeho části k dalším částem prostřednictvím myšlených styčných ploch těchto částí. **Vzhledem k mechanismu působení těchto sil lze tyto síly nazvat silami plošnými**. Rovněž v podobě vhodně vymezených malých částí kontinua lze chápat pojem částice kontinua.

Vzhledem k objemovým a plošným silám je třeba vycházet ze vzájemného působení částic kontinua - soustava částic kontinua není soustavou volných částic. Vzhledem k vymezení částice kontinua nelze považovat soustavu částic kontinua za makrosystém. K popisu pohybu částic kontinua je zapotřebí jednotlivé částice identifikovat a označit. K tomu se používá buď Lagrangeova nebo Eulerova východiska. **Lagrangeovo východisko** se opírá o popis vývoje pohybových stavů každé částice kontinua zvlášť. **Eulerovo východisko** nevychází z popisu vývoje pohybových stavů individuálních bodů kontinua, ale z popisu dějů v daném geometrickém bodu prostoru, kterým v různých časových okamžicích procházejí různé částice kontinua.

Soustavu částic (bodů) kontinua nelze považovat za makrosystém volných částic. Zkoumání pohybu plynných, kapalných a pevných pružně deformovatelných těles v mechanice kontinua je proto součástí nestatistické fyziky. V důsledku nestatistického přístupu budou zkoumány pohybové stavy a jejich změny v rámci jednotlivých modelů kontinua. Mechanika kontinua bude používat obvyklé dynamické východisko nestatistické fyziky (kterým je pohybová rovnice) a obvyklé kinematické východisko nestatistické fyziky (kterým je pohybový zákon).

Mechanika kontinua vychází ze tří základních hypotéz, jejichž platnost a použitelnost prověřila zkušenost - z hypotézy spojitosti (tělesa lze zkoumat jako prostředí zaplňující prostor spojitým způsobem), z hypotézy použitelnosti takového metrického prostoru, v němž lze zavést jedinou kartézskou souřadnicovou soustavu (skutečný fyzikální prostor pro nepříliš velké vzdálenosti lze považovat s velkou přesností za euklidovský) a z hypotézy použitelnosti absolutního času (čas plyne stejně pro všechny pozorovatele, nejsou uvažovány efekty teorie relativity).

Pomocí Lagrangeova a Euklidova východiska lze vymezit základní kinematické pojmy mechaniky kontinua (např. s použitím Euklidova východiska vektor posunutí, rychlosti a zrychlení, ale také např. tenzor malých deformací) a základní dynamické pojmy mechaniky kontinua (vedle již uvedených objemových a plošných sil především zavedení vektoru a tenzoru napětí). Vymezené pojmy umožňují užitím lagrangeovského a hamiltonovského formalismu formulovat obecnou rovnici rovnováhy kontinua (součet objemových a plošných sil působících např. na jednotku objemu kontinua v daném bodě kontinua je roven nulovému vektoru) a obecnou pohybovou rovnici kontinua (součet objemových a plošných sil působících na jednotku objemu kontinua v daném bodě kontinua je roven nulovému vektoru) a obecnou pohybovou rovnici kontinua (součet objemových a plošných sil působících na jednotku objemu kontinua v daném bodě kontinua je podle D'Alembertova principu roven objemové setrvačné síle). Důležitým výstupem je také rovnice kontinuity jako výraz platnosti zákona zachování hmotnosti.

7.6.2. Vymezení modelů kontinua

Na základě vztahu mezi složkami tenzoru napětí a tenzoru malých deformací lze vymezit Pascalovu dokonalou tekutinu, Newtonovu vazkou tekutinu, Euklidovu tuhou látku a Hookovo elastické kontinuum.

Pascalova dokonalá tekutina se skládá z částic, jimž není při pohybu uvnitř kontinua kladen žádný odpor. V rovnovážném stavu jsou tečná napětí nulová, normálová napětí souvisejí s obvyklým homogenně pojatým tlakem. Aplikací těchto podmínek lze zjednodušit obecnou pohybovou rovnici kontinua na Eulerovu hydrodynamickou rovnici.

Newtonova vazká tekutina vykazuje v rovnovážném stavu stejné vlastnosti jako Pascalova dokonalá tekutina. Chová se odlišně při pohybu, neboť klade odpor pohybu částic. Tenzor napětí je v případě vazké tekutiny lineární funkcí tenzoru rychlosti deformace. Aplikací těchto podmínek lze zjednodušit obecnou pohybovou rovnici kontinua na Navierovu-Stokesovu rovnici.

Euklidova tuhá látka je nestlačitelná (hustota hmotnosti je konstantní) a nepodléhá deformaci. Složky tenzoru malých deformací a složky tenzoru napětí jsou nulové. Obecná

pohybová rovnice kontinua přechází pro zkoumanou jednotku objemu kontinua v obvyklý zákon síly jako součást newtonovského formalismu - na jedné straně rovnice je objemová síla, na druhé straně hustota hmotnosti násobená vektorem zrychlení.

Hookovo elastické kontinuum podléhá pružné deformaci, která je popsána Hookovým zobecněným zákonem v tenzorovém tvaru. Pohybová rovnice kontinua je používána v obecném tvaru.

Řešení pohybových rovnic pro jednotlivé modely kontinua vede z hlediska rheologie látek (tj. z hlediska doplňkových vztahů mezi tenzorem malých deformací a tenzorem napětí) k popisu pohybových stavů a změn stavu pomocí 10 stavových parametrů: hustota hmotnosti, složky rychlosti, složky tenzoru napětí.

7.6.3. Použití modelů kontinua

Model Pascalovy dokonalé tekutiny umožňuje odvodit základní rovnici hydrostatiky a při zanedbání hmotnostních sil obvyklý tvar Pascalova zákona. Mezi další výsledky použití tohoto modelu patří popis vířivého a nevířivého proudění dokonalé tekutiny. Užitím tzv. Gromkeho-Lambovy úpravy lze pak získat tvary časové a bezčasové Bernoulliho rovnice.

Model Hookova elastického kontinua umožňuje pro izotropní elastické kontinuum nalézt jednoduchá vyjádření lineární závislosti složek tenzoru napětí na složkách tenzoru malých deformací. Inverzní Hookův zákon pro izotropní elastické kontinuum pak vyjadřuje složky tenzoru malých deformací pomocí složek tenzoru napětí. Je-li izotropní elastické kontinuum deformováno jednoduchým tlakem ve směru některé souřadnicové osy, objeví se již místo složitého tenzoru elastických modulů známý Youngův modul pružnosti.

7.6.4. Hlavní metoda zkoumání pohybových stavů kontinua

Lagrangeovský, hamiltonovský a ďalembertovský formalismus použitý pro kontinuum vede k následujícím krokům hlavní metody zkoumání pohybových stavů kontinua:

 vymezení fyzikálního problémů a klasických počátečních podmínek s cílem použít obecnou pohybovou rovnici kontinua nebo obecnou rovnici rovnováhy kontinua, volba modelu kontinua (Pascalova dokonalá tekutina, Newtonova vazká tekutina, Euklidova tuhá látka, Hookovo elastické kontinuum),

 nalezení pohybové rovnice odpovídající vybranému modelu (Eulerova hydrodynamická rovnice pro Pascalův model, Navierova-Stokesova rovnice pro Newtonův model, přechod k newtonovskému formalismu pro Euklidův model, zobecněný Hookův zákon a obecná pohybová rovnice kontinua pro Hookův model),

 řešení pohybových rovnic z hlediska rheologie látek (popis pohybových stavů a změn stavu pomocí 10 stavových parametrů: hustota hmotnosti, složky rychlosti, složky tenzoru napětí).

7.6.5. Ilustrace hlavní metody

Ilustrace lagrangeovského a hamiltonovského formalismu pro kontinuum bude spojena s odvozením známého vztahu pro hydrostatický tlak $p = p_b + h\rho g$.

Z hlediska kinematiky kontinua bude pro popis deformace kontinua v pevné kartézské pravoúhlé souřadnicové soustavě $Ox_1x_2x_3$ (O - počátek souřadnicové soustavy, Ox_1 - osa x, Ox_2 - osa y, Ox_3 - osa z) použit vektor posunutí \vec{u} částice kontinua v bodě $P[x_1, x_2, x_3]$ následkem deformace. Vektor posunutí \vec{u} nechť má složky \vec{u} (u_1 , u_2 , u_3).

Pro malé deformace lze změnu vzdálenosti bodů kontinua vystihnout pomocí 9 složek tenzoru malé deformace

$$e_{jk} = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial u_j}{\partial x_k} + \frac{\partial u_k}{\partial x_j} \right).$$

Stejnojmenné složky e_{jj} vyjadřují relativní změnu délky úseček, rovnoběžných se souřadnicovými osami Ox_j, v důsledku deformace. Nestejnojmenné složky e_{jk} vyjadřují polovinu změny pravého úhlu, svíraného před deformací úsečkami rovnoběžnými s osami Ox_j a Ox_k, následkem deformace.

Z hlediska dynamiky kontinua bude zavedena objemová síla a hmotnostní síla a plošná síla. Objemová síla

$$\vec{F}$$
 (*F*₁, *F*₂, *F*₃)

bude vztažena na jednotku objemu kontinua a měřena v jednotkách N.m-3, hmotnostní síla

$$\vec{G}(G_1, G_2, G_3)$$

bude vztažena na jednotku hmotnosti kontinua a měřena v jednotkách N.kg⁻¹. Plošná síla

$$T_1(T_{11}, T_{12}, T_{13})$$

bude působit na jednotkovou plochu rovnoběžnou se souřadnicovou rovinou Ox_2x_3 a s normálou \vec{i} (1,0,0). Obdobně budou zavedeny plošné síly

$$\overrightarrow{T_2}$$
 (T_{21} , T_{22} , T_{23}) a $\overrightarrow{T_3}$ (T_{31} , T_{32} , T_{33}).

Složky všech tří vektorů

 $\overrightarrow{T_{1,}}$ $\overrightarrow{T_{2,}}$ $\overrightarrow{T_{3}}$ vytvářejí 9 složek tenzoru napětí τ_{ij} .

Stejnojmenné složky

 $\tau_{11}, \tau_{22}, \tau_{33}$

se nazývají normálová napětí, neboť mají tendenci posouvat plošky s normálami $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ podél souřadnicových os. Nestejnojmenné složky

 τ_{ij} (i \neq j)

se nazývají tečná napětí a snaží se posunout uvažovanými ploškami podél souřadnicových rovin Ox_ix_i.

Bude-li v kontinuu zvolen objem V uzavřený plochou S, pak na tuto část kontinua působí objemové síly \vec{F} a plošné síly, vyjádřené vektorem napětí $\vec{T_n}$ ve všech bodech plochy S (\vec{n} je vektor normály k jednotkové plošce v daném bodě plochy S).

Podmínka rovnováhy objemu V **kontinua vůči translačnímu pohybu** bude mít obvyklý tvar

$$\int_{V} \vec{F} \, dV + \int_{S} \vec{T_n} \, dS = 0.$$

Převodem plošného integrálu na objemový pomocí tzv. Gaussovy-Ostrogradského věty lze již obdržet **obecnou rovnici rovnováhy kontinua**

$$F_i + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = 0.$$

Obecnou pohybovou rovnici kontinua lze získat aplikací D'Alembertova principu, který k působícím silám zavádí příslušnou setrvačnou sílu. Pro kontinuum půjde o objemovou setrvačnou sílu

$$\rho \frac{\mathrm{d}v_i}{\mathrm{d}t}$$
, kde $\vec{v} = \dot{\vec{u}}$ je rychlost posunutí bodu $P[x_1, x_2, x_3]$.

Obecná pohybová rovnice kontinua má tvar

$$F_i + \sum_{j=1}^3 \frac{\partial \tau_{ij}}{\partial x_j} = \rho \frac{\mathrm{d} v_i}{\mathrm{d} t}.$$

V Pascalově dokonalé tekutině jsou v rovnovážném stavu při působení vnějších sil tečná napětí nulová: $\tau_{12} = \tau_{21} = \tau_{13} = \tau_{31} = \tau_{23} = \tau_{32} = 0$. Vektor napětí má v tekutinách vždy směr normály k ploše, působí homogenní tlak *p*. Pro stejnojmenné složky platí $\tau_{11} = \tau_{22} = \tau_{33} = -p$. S využitím Kroneckerova delta δ_{ij} ($\delta_{ij} = 0$ pro $i \neq j$, $\delta_{ij} = 1$ pro i=j) lze pro složky tenzoru napětí zapsat vztah $\tau_{ij} = -\delta_{ij}.p$. Rovnice rovnováhy Pascalovy dokonalé i Newtonovy vazké tekutiny nabývá po dosazení do obecné rovnice rovnováhy kontinua tvar

$$F_i - \sum_{j=1}^3 \delta_{ij} \frac{\partial p}{\partial x_j} = F_i - \frac{\partial p}{\partial x_i} = 0.$$

Po úpravě s užitím vztahu $\vec{F} = \rho \vec{G}$ lze zapsat rovnici rovnováhy tekutiny ve tvaru

$$-\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x_i} + G_i = 0$$

Z obdržené rovnice rovnováhy tekutin lze získat řadu známých zákonů statiky tekutin. Nachází-li se tekutina v homogenním tíhovém poli, lze při vhodné volbě kartézské pravoúhlé souřadnicové soustavy získat složky hmotnostní síly \vec{G} ve tvaru $G_1=G_2=0$, $G_3=-g$. S užitím vztahů

$$dp = \sum_{i=1}^{3} \frac{\partial p}{\partial x_i} dx_i \quad a \quad \sum_{i=1}^{3} G_i dx_i = -g \ dx_3$$

lze rovnici rovnováhy zapsat ve tvaru

$$\mathrm{d}p = -\rho g \,\mathrm{d}x_3.$$

Pro nestlačitelnou kapalinu ($\rho = konst.$) lze integrací obdržet $p = -\rho g x_3 + C$. Na volnou hladinu kapaliny ve výšce $x_3 = d$ působí barometrický tlak p_b , tzn. $p_b = \rho g d + C$. Odtud $C = p_b + \rho g d$ a po dosazení a označení hloubky pod volnou hladinou kapaliny $h=d-x_3$ lze získat hledaný známý vztah pro hydrostatický tlak

$$p = p_b + h\rho g.$$

Obdobně lze odvodit barometrickou formuli (závislost hustoty ρ na tlaku p pro odvození barometrické formule lze např. u ideálního plynu získat užitím Boylova-Mariottova zákona), Archimedův zákon pro plyny a kapaliny, zobecněný Pascalův zákon pro barotropní tekutinu (tj. pro tekutinu se závislostí hustoty ρ na tlaku p), Pascalův zákon p = konst. pro nestlačitelnou tekutinu ($\rho = konst$.) a při zanedbání hmotnostních sil.

8. Klasické aplikace elektromagnetického pole (Přílohy B1, B2, B3, B8)

8.1. Elektromagnetické pole jako klasický a nestatisticky pojatý fyzikální objekt

Východiska klasické nestatistické fyziky spočívají v nekvantové aproximaci a v nerelativistické aproximaci jevů, které jsou spojeny s nestatisticky pojatým fyzikálním objektem. Proto je zapotřebí hledat podmínky, za jejichž platnosti lze elektromagnetické pole považovat za klasický a nestatistický fyzikální objekt. Tyto podmínky by měly vymezit, kdy lze kvantový pohled daný vlnově korpuskulárním dualismem redukovat na klasický pohled daný preferencí pouze jedné stránky dualismu a kdy lze opustit relativistické efekty spojené s jinými objekty, které s elektromagnetickým polem mohou interagovat. Současně je zapotřebí uvést hledané podmínky do souladu s často používaným pojmem "elektromagnetické záření".

První podmínku lze získat při prozkoumání elektromagnetického pole vzbuzeného jedním pohybujícím se bodovým nábojem (popis např. Liénardovými-Wiechertovými potenciály). Vzbuzené pole 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 lze tuto druhou část **pojímat 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. Speciálním případem elektromagnetických vln bude případ, kdy pole závisí jen na jedné prostorové souřadnici, např. x, a čase t - pak lze hovořit o rovinných elektromagnetických vlnách.

První podmínku lze tedy formulovat jako přítomnost elektromagnetického pole v "rozlehlém" prostoru bez přítomnosti nábojů. Takové elektromagnetické pole se nazývá **volným elektromagnetickým polem** a při jeho zkoumání se stačí omezit jen na vlnovou stránku vlnově korpuskulárního dualismu - pole se šíří prostorem (např. vakuem nebo dielektrikem) jako **monochromatická elektromagnetická vlna** s jistou úhlovou frekvencí *ω*

a s fázovou rychlostí rovnou rychlosti světla *c*. Rovněž elektromagnetické záření je za této podmínky elektromagnetickým vlněním.

Druhou podmínku lze získat prozkoumáním kvantového popisu elektromagnetického pole (podrobněji viz 11.kap., odst.11.1.). Kvantový popis spočívá v rozkladu pole na oscilátory. Po zavedení Hamiltonova operátoru \hat{H} (tj. operátoru, který reprezentuje Hamiltonovu funkci H) monochromatického volného elektromagnetického pole s úhlovou frekvencí ω lze ukázat, že hledání vlastních hodnot operátoru nevyžaduje speciální výpočty. Problém se redukuje na známý problém energetických hladin lineárních oscilátorů. Vlastní hodnoty energie *k*-tého lineárního oscilátoru nechť jsou

$$H_{nk} = (n_k + \frac{1}{2}) \hbar \omega$$
 (výraz $\frac{1}{2} \hbar \omega$ je tzv. "nulová energie" oscilátoru),

kde kvantové číslo n_k nabývá hodnot $n_k = 0, 1, 2, ...$ pro všechny lineární oscilátory. Po zanedbání "nulové energie" všech oscilátorů lze pro celkovou energii pole získat vztah

$$H=\sum_k n_k\,\hbar\omega\,.$$

Jednotlivé hodnoty kvantových čísel lze považovat za obsazovací čísla stavů lineárních oscilátorů. Úvaha o obsazovacích číslech a vztah pro celkovou energii H již umožňují zavést pojem fotonů. Volné elektromagnetické pole lze pokládat za soubor koherentních fotonů, z nichž každý má energii $\hbar \omega$ a velikost hybnosti $\hbar \omega / c$ (c je rychlost světla). Jeden dílčí foton lze reprezentovat "vlnovým balíkem" či "Gaussiánem" (viz 11.kap., odst.11.2.). Pak je např. intenzita elektrického pole soustředěna jen v určitých "malých" oblastech prostoru, které však také postupují fázovou rychlostí c (nejde však o elektromagnetické vlnění nebo elektromagnetické záření v makroskopickém a nestatistickém pojetí vymezeném první podmínkou).

Druhou podmínku lze tedy formulovat jako případy velkých kvantových čísel n_k oscilátorů s úhlovou frekvencí ω , na které se v rámci kvantové teorie pole rozkládá elektromagnetické pole. Velkým kvantovým číslům n_k odpovídají **obrovské počty**

koherentních fotonů. Pak lze přejít od reprezentace dílčího fotonu "vlnovým balíkem" či "Gaussiánem" s energií $\hbar \omega$ k elektromagnetické vlně v "rozlehlém" prostoru, v němž nejsou náboje a v němž je energie rozložena spojitě. Tato elektromagnetická vlna již reprezentuje intenzitu \vec{E} makroskopického elektrického pole a magnetickou indukci \vec{B} makroskopického magnetického pole a chová se jako "klasická" vlna a jako jeden nestatistický fyzikální objekt, byť má tato "klasická" vlna fázovou rychlost šíření rovnu rychlosti světla.

Elektromagnetické pole a elektromagnetické záření lze považovat za klasický a nestatistický fyzikální objekt za následujících dvou podmínek:

a) obrovské počty fotonů (pak lze přejít k monochromatické elektromagnetické vlně, která reprezentuje intenzitu \vec{E} makroskopického elektrického pole a magnetickou indukci \vec{B} makroskopického magnetického pole)

 b) velké vzdálenosti od soustavy nábojů (pak lze elektromagnetické pole považovat za volné a šířící se prostorem opět jako monochromatické elektromagnetické vlnění).

8.2. Lagrangeovský a hamiltonovský formalismus pro elektromagnetické pole

Jestliže se náboj nachází v elektromagnetickém poli, je nejen vystaven působení pole, ale také sám působí na pole a mění je. Jestliže náboj *Q* není velký, je možné jeho vliv na pole zanedbat. Podmínka "malosti" náboje spočívá v malosti tzv. brzdné síly záření, která vzniká při pohybu náboje - náboje vyzařující elektromagnetické záření ztrácejí energii a "zpomalují". Pro tento případ lze při zkoumání pohybu náboje v zadaném poli předpokládat, že pole nezávisí ani na poloze, ani na rychlosti náboje.

Vzhledem k zachycení vzájemného působení elektromagnetického pole a nábojů je potřebné lagrangeovský a hamiltonovský formalismus pro elektromagnetické pole formulovat následujícím způsobem:

- nalezení pohybových rovnic náboje v elektromagnetickém poli (většinou Lagrangeovy rovnice druhého druhu (B7), použita Lagrangeova funkce náboje v elektromagnetickém poli),

- úprava pohybových rovnic a nalezení vztahu pro Lorentzovu sílu (včetně zavedení intenzity elektrického pole a magnetické indukce magnetického pole),

- po vyřešení pohybu náboje v konstantním elektromagnetickém poli (konstantní pole nezávisí na čase) lze za vedlejší produkt považovat vymezení prvních dvou rovnic elektromagnetického pole (první dvojice Maxwellových rovnic pro víry elektrického pole a zřídla magnetického pole),

zapsání tzv. Hamiltonova principu (principu nejmenšího účinku jako základní úlohy variačního počtu) pro elektromagnetické pole,

 nalezení třetí a čtvrté rovnice elektromagnetického pole (druhé dvojice Maxwellových rovnic pro víry magnetického pole a zřídla elektrického pole)

potvrzení existence elektromagnetických vln v prostředích bez volných nábojů (ve vakuu, v dielektriku) odvozením vlnové rovnice elektromagnetického vlnění.

Kroky popsaného formalismu určují také sled dalšího zkoumání klasických rysů elektromagnetického pole - od zkoumání pohybu klasického náboje v konstantním elektromagnetickém poli, přes nalezení obecných Maxwellových rovnic elektromagnetického pole a jejich specifického tvaru pro volné pole, až k popisu klasické a nestatistické varianty pole dané existencí a šířením elektromagnetických vln v prostředích bez volných nábojů.

8.3. Pohyb klasického náboje v konstantním elektromagnetickém poli

8.3.1. Lagrangeovy rovnice náboje

Konstantní elektromagnetické pole je pole, které nezávisí na čase. Klasický náboj je nabitá částice pohybující se nerelativistickými rychlostmi po obvyklých trajektoriích.

K nalezení Lagrangeovy funkce L náboje Q v konstantním poli bude zapotřebí zobecnit vztah (B6) pro tuto funkci - místo vztahu L = T - V bude zapotřebí použít vztah L = T - U se zobecněnou potenciální energií U (zobecněná potenciální energie závisí i na rychlostech). Kinetická energie T náboje je dána vztahem

$$T = \frac{1}{2} mv^2,$$

kde v je nerelativistická rychlost náboje. Potenciální energii U lze vyjádřit vztahem

$$U = -Q\vec{E}\vec{r} - \frac{Q}{2}\vec{B}(\vec{r}\times\vec{v}),$$

kde \vec{E} a \vec{B} jsou intenzita konstantního elektrického pole a magnetická indukce konstantního magnetického pole, \vec{r} je obvyklý polohový vektor. Pak lze Lagrangeovu funkci pro konstantní pole zapsat ve tvaru

(B22)
$$L = T - U = \frac{1}{2} mv^2 + Q\vec{E}\vec{r} + \frac{Q}{2}\vec{B}(\vec{r}\times\vec{v}).$$

Po dosazení za *L* do Lagrangeových rovnic 2.druhu (B7) (zobecněné souřadnice $q_1=x$, $q_2=y$, $q_3=z$) lze získat souhrnný tvar pro všechny tři pohybové rovnice

(B23) $m\ddot{\vec{r}} = Q.\vec{E} + Q(\vec{v} \times \vec{B})$ (podrobné odvození viz Dodatek 5, Příklad 1).

Po srovnání se zákonem síly (B5) lze vidět, že zkoumané elektromagnetické pole působí na náboj elektromagnetickou silou $\overrightarrow{F_{elmg}}$ (tzv. Lorentzova síla), která je složena z elektrické síly $\overrightarrow{F_{el}}$ a magnetické síly $\overrightarrow{F_{mg}}$ (viz Dodatek 5, Příklad 1):

(B24)
$$\overrightarrow{F_{elmg}} = \overrightarrow{F_{el}} + \overrightarrow{F_{mg}} = Q. \vec{E} + Q (\vec{v} \times \vec{B}).$$

Konstantní elektromagnetické pole bude dále zkoumáno odděleně jako homogenní elektrické pole a homogenní magnetické pole.

8.3.2. Příčné a podélné homogenní elektrické pole

Rychlost náboje nechť má směr osy x a konstantní velikost při vniknutí do homogenního elektrického pole např. mezi deskami kondenzátoru. Osa x nechť má počátek v místě vniknutí náboje. Magnetické pole je nulové a intenzita elektrického pole s konstantní velikostí má směr osy y. Počáteční podmínky pak budou \vec{v} (v_0 , 0,0), \vec{r} (0,0,0), \vec{E} (0,*E*,0), \vec{B} (0,0,0).

Po dosazení do (B23) budou získány pohybové rovnice ve tvaru

$$m\ddot{x}=0,\ m\ddot{y}=Q.E,\ m\ddot{z}=0,$$

Řešením pohybových rovnic bude získán pohybový zákon (B2) ve tvaru

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

Náboj se pohybuje po parabole s vrcholem v počátku <u>(podrobné odvození viz Dodatek 5,</u> <u>Příklad 2)</u>. **Pro podélné homogenní elektrické pole** lze nalézt <u>podrobné odvození</u> <u>v Dodatku 5, Příklad 3</u>.

8.3.3. Homogenní magnetické pole (podrobné odvození viz Dodatek 5, Příklady 4 až 7)

Homogenní a konstantní magnetické pole bude mít magnetickou indukci B(0,0,B), elektrické pole intenzitu $\vec{E}(0,0,0)$. Počáteční podmínky pohybu náboje jsou $\vec{v}(0,v_0,0)$, $\vec{r}(0,0,0)$. Po dosazení do Lagrangeovy funkce (B22) bude získán její tvar

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{Q}{2}B(x\dot{y} - \dot{x}y) \text{ (viz Dodatek 5, Příklad 4)}.$$

Po dosazení do Lagrangeových rovnic 2. druhu (B7) za Lagrangeovu funkci lze obdržet pohybové rovnice ve tvaru

$$m\ddot{x} - \frac{Q}{2}B\dot{y} - \frac{Q}{2}B\dot{y} = 0$$
, $m\ddot{y} + \frac{Q}{2}B\dot{x} + \frac{Q}{2}B\dot{x} = 0$, $m\ddot{z} = 0$.

Užitím počátečních podmínek a zavedením $\omega = \frac{QB}{m}$ lze první dvě pohybové rovnice získat v jednoduchém tvaru $\ddot{x} = \omega \dot{y}$, $\ddot{y} = -\omega \dot{x}$ (viz Dodatek 5, Příklad 5).

Řešení pohybových rovnic lze provést zavedením komplexní proměnné $\alpha = x + iy$. Rovnici $\ddot{y} = -\omega \dot{x}$ pak lze vynásobit imaginární jednotkou i a sečíst s rovnicí $\ddot{x} = \omega \dot{y}$, výsledkem bude vztah $\ddot{\alpha} = -i \omega \dot{\alpha}$. V této rovnici bude provedena integrace s výsledkem ln $\dot{\alpha} = -i \omega t + \ln C$, tj. $\dot{\alpha} = i v_0 \exp(-i\omega t)$ (integrační konstanta $C = iv_0$). S použitím Eulerova vztahu lze obdržet $\dot{\alpha} = i v_0 \cos \omega t + v_0 \sin \omega t$. Na základě rovnosti komplexních čísel na levé a pravé straně získané rovnice a další provedené integrace již lze obdržet pohybový zákon (B2) ve tvaru

$$x = -\frac{v_0}{\omega} \cos \omega t + \frac{v_0}{\omega}, \quad y = \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t \text{ (viz Dodatek 5, Příklad 6)}.$$

Trajektorie je tedy kružnice v souřadnicové rovině os x a y se středem o souřadnicích

$$\frac{v_0}{\omega}$$
 a 0 a poloměru $r = \frac{v_0}{\omega} = \frac{mv_0}{QB}$ (viz Dodatek 5, Příklad 7).

8.4. Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole

Na základě zavedení intenzity elektrického pole \vec{E} a indukce magnetického pole \vec{B} při odvození Lagrangeových rovnic (B23) a na základě aplikace Hamiltonova principu (principu nejmenšího účinku) lze odvodit čtyři Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole pro zřídla a víry elektrického a magnetického pole. Teoretické odvození je matematicky náročné, proto bude při výběru zřídel a vírů elektromagnetického pole použita fenomenologická Maxwellova teorie elektromagnetického pole.

8.4.1. Maxwellova teorie elektromagnetického pole, zřídla a víry pole

Maxwellova teorie elektromagnetického pole (uveřejněná již v r. 1873) byla teorií makroskopickou, která popisovala elektromagnetické pole vzbuzené makroskopicky rozloženými náboji a makroskopickými proudy bez přihlédnutí k jejich mikroskopické struktuře. Proto tato teorie mohla náboj i proud považovat za spojitě rozložené a zavést hustotu náboje ρ , hustotu vodivého proudu \vec{i} (vodivý proud je spojen s uspořádaným pohybem volných nábojů) a také hustotu Maxwellova proudu

$$a_0 \varepsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$$
 (a_0 je absolutní permitivita a ε_r relativní permitivita prostředí).

Maxwellův proud je pokračováním vodivého proudu v izolantu, relativní permitivita ε_r vyjadřuje známým způsobem vliv prostředí na elektrické pole. Obdobně je s absolutní

permeabilitou μ_0 spojena relativní permeabilita μ_r , která vyjadřuje vliv prostředí na magnetické pole. Propojení vodivého proudu a Maxwellova proudu je potvrzením Maxwellovy hypotézy, že všechny elektrické proudy jsou uzavřené.

Z hlediska mikroskopického pojetí struktury náboje i vodivého a Maxwellova proudu přestávají materiálové konstanty "relativní permitivita" a "relativní permeabilita" hrát svou roli. Rovnice elektromagnetického pole vycházející z mikroskopického pojetí se pak nazývají Lorentzovy-Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole.

Východiskem pro uvedení Maxwellových rovnic bude výběr zřídel a vírů elektromagnetického pole na základě fenomenologické Maxwellovy teorie elektromagnetického pole a jejich popis prostřednictvím operátorů divergence (div) a rotace (rot). Hledání zřídel a vírů elektromagnetického pole je hledání míst, která jsou zdrojem "změn" stavu pole.

8.4.2. Matematický popis zřídel a vírů a jejich výběr

Matematický popis zřídel a vírů lze uskutečnit pomocí operátorů div a rot. Pro zavedení matematických instrukcí (které jsou podstatou každého operátoru) bude vhodné zavést symbolický vektor "nabla" ∇ , jehož složky mají charakter vektorových instrukcí:

(B25)
$$\nabla = \nabla \left(\frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right).$$

Bude-li tento symbolický vektor spojen s vektorem stojícím napravo od něj skalárním součinem, bude jeho aplikace nazvána divergencí a označena div. Bude-li tento symbolický vektor spojen s vektorem stojícím napravo od něj vektorovým součinem, bude jeho aplikace nazvána rotací a označena rot. Odtud plyne např. aplikace nabla na vektor \vec{E} (E_x , E_y , E_z):

(B26) div
$$\vec{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z}$$
, rot $\vec{E} = \operatorname{rot} \vec{E} \left(\frac{\partial E_z}{\partial y} - \frac{\partial E_y}{\partial z} \right)$, $\frac{\partial E_x}{\partial z} - \frac{\partial E_z}{\partial x}$, $\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y} \right)$

Zřídla lze hledat zjednodušeně řečeno u všech silových polí jako místa, z nichž vycházejí nebo do nichž vcházejí otevřené silokřivky příslušného pole. Víry si pak lze představit jako místa, která jsou "obkroužena" uzavřenými silokřivkami.

Při aplikaci představy zřídel a vírů na elektromagnetické pole je zřejmé, že existence elektrického náboje směřuje ke zřídlovosti elektrického pole a neexistence magnetického náboje k nezřídlovosti magnetického pole. Elektrické siločáry mohou být otevřenými křivkami, jestliže vycházejí z náboje nebo do náboje vcházejí. Zřídlo elektrického pole pak bude možné popsat hustotou ρ elektrického náboje. Indukční čáry magnetického pole jsou naopak vždy uzavřenými křivkami - magnetické pole nebude mít zřídla.

Odlišná je situace u vírů elektromagnetického pole. Existuje elektrické pole charakterizované uzavřenými elektrickými siločarami a spojené s jevem elektromagnetické indukce - lze tedy vyvodit, že vírem elektrického pole bude proměnné magnetické pole. Proměnnost magnetického pole lze zachytit nenulovostí parciální derivace magnetické indukce podle času, tj. nenulovostí výrazu $\partial \vec{B}/\partial t$. Magnetické pole se objeví, dá-li se náboj do pohybu. Víry magnetického pole budou proto spojeny s hustotou \vec{i} vodivého proudu a s hustotou $\epsilon_0 \varepsilon_r \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ Maxwellova proudu. Vodivý proud je spojen s pohybem volných nábojů, Maxwellův proud s pohybem vázaných nábojů (s polarizací dielektrika).

8.4.3. Formulace soustavy Maxwellových rovnic

Na základě matematického popisu zřídel a vírů polí pomocí (B25) a (B26) a na základě provedené analýzy zřídlovosti a vírovosti elektrického a magnetického pole lze přistoupit k formulaci Maxwellových rovnic ($\varepsilon = \varepsilon_0 \varepsilon_r$, $\mu = \mu_0 \mu_r$):

(B27) div $\vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon}$ (zřídlem elektrického pole je elektrický náboj)

(B28) div $\vec{B} = 0$ (magnetické pole je nezřídlové)

(B29) rot $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$ (vírem elektrického pole je proměnné magnetické pole)

(B30) rot $\vec{B} = \mu \vec{i} + \varepsilon \mu \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$ (víry magnetického pole jsou vodivý a Maxwellův proud).

Maxwellovy rovnice platí pro popis statických, stacionárních a kvazistacionárních stavů elektromagnetického pole. Při popisu nestacionárních stavů je omezující podmínkou předpoklad platnosti Maxwellových rovnic - rychlosti nábojů jsou malé ve srovnání s rychlostí světla. Následující popis statických, stacionárních, kvazistacionárních a nestacionárních stavů elektromagnetického pole má jen přibližnou platnost.

Statické stavy elektromagnetického pole (elektrostatické pole, magnetické pole neexistuje) jsou spojeny s nepohyblivými náboji, Maxwellovy rovnice mají tvary

div
$$\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}$$
, div $\vec{B} = 0$, rot $\vec{E} = 0$, rot $\vec{B} = 0$ (viz Dodatek 5, Příklad 8).

Stacionární stavy elektromagnetického pole jsou spojeny se stacionárním pohybem náboje, tj. s ustáleným pohybem v jednom směru, a tedy se stejnosměrným proudem. Objevuje se magnetické pole a často je lze společně s jen zřídlovým elektrickým polem považovat za konstantní elektromagnetické pole. Maxwellovy rovnice mají tvary

div
$$\vec{E} = \frac{\rho}{\epsilon}$$
, div $\vec{B} = 0$, rot $\vec{E} = 0$, rot $\vec{B} = \mu \vec{i}$.

Kvazistacionární stavy elektromagnetického pole jsou spojeny s pomalými změnami směru pohybu náboje, tj. s nízkofrekvenčním střídavým proudem (změny proudu mají charakter elektromagnetických oscilací např. v rámci *RLC* obvodu). Změny v čase jsou natolik pomalé, že se stačí ustavovat rozložení nábojů odpovídající rovnovážným stavům. Vedle zřídlového elektrického pole se objevuje i jeho vírová varianta a s ní i řada technických aplikací (např. ve spojení se zákonem elektromagnetické indukce generátory elektrického proudu a elektromotory). Maxwellovy rovnice mají tvary

div
$$\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}$$
, div $\vec{B} = 0$, rot $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$, rot $\vec{B} = \mu \vec{i}$.

Nestacionární stavy elektromagnetického pole jsou spojeny s rychlými změnami směru pohybu náboje, tj. s vysokofrekvenčním střídavým proudem. Vedle zřídlového

a vírového elektrického pole se uplatňují oba víry magnetického pole. Maxwellovy rovnice mají tvary dané (B27), (B28), (B29), (B30).

8.4.4. Důsledky Maxwellových rovnic

Mezi základní důsledky Maxwellových rovnic patří zákony zachování náboje, energie, hybnosti a momentu hybnosti v elektromagnetickém poli. Pomocí Maxwellových rovnic (B29) a (B30) lze odvodit vztah

(B30a)
$$-\frac{\partial u}{\partial t} = \operatorname{div} \vec{P} + \vec{i} \cdot \vec{E}$$
, kde $u = \frac{1}{2}\varepsilon E^2 + \frac{1}{2\mu}B^2$, $\vec{P} = \frac{1}{\mu}\vec{E}\times\vec{B}$

Veličina *u* má rozměr hustoty energie a je funkcí polních veličin \vec{E} a \vec{B} . Představuje hustotu energie elektromagnetického pole. Veličina \vec{P} se nazývá Poyntingův vektor a vzhledem k fyzikálnímu významu operace div (výtok dané veličiny z jednotkového objemu) má Poyntingův vektor fyzikální význam množství energie, která vyteče z jednotkového objemu za jednotku času, tj. proudové hustoty energie elektromagnetického pole. Celý vztah (B30a) je vyjádřením zákona zachování energie v elektromagnetickém poli: Úbytek energie elektromagnetického pole za jednotku času z jednotky objemu je roven množství energie, které z tohoto objemu vyteče za jednotku času přes jeho povrch (div \vec{P}) a práci sil pole za jednotku času v tomto jednotkovém objemu (\vec{i} . \vec{E}).

Významnou spojitost s Maxwellovými rovnicemi má také popis elektromagnetického pole pomocí elektromagnetických potenciálů, skalárního potenciálu φ a vektorového potenciálu \vec{A} . Oba potenciály lze zavést pomocí rovnic (zavedení operátoru grad viz (B33))

(B30b)
$$\vec{B} = \operatorname{rot} \vec{A}, \ \vec{E} = -\operatorname{grad} \varphi - \frac{\partial \vec{A}}{\partial t}$$

U časově proměnného pole je potenciál φ funkcí nejen souřadnic, ale i času. Nelze proto položit \vec{E} = - grad φ , časově proměnné elektromagnetické pole není polem konzervativním. Oba potenciály nejsou určeny rovnicemi (B30b) jednoznačně, proto lze na ně klást dodatečnou kalibrační podmínku. Lorentzova kalibrační podmínka má tvar (B30c) div $\vec{A} + \varepsilon \mu \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0$, její realizace je spojena s podmínkami div $\vec{A} = 0, \varphi = 0$.

Užitím (B30c) a Maxwellových rovnic (B27) až (B30) lze po zavedení d'Alembertova operátoru

$$\Box = \Delta - \varepsilon \,\mu \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad \text{(Laplaceův operátor } \Delta \text{ je určen vztahem (B20))}$$

hledat potenciály \vec{A} , φ jako řešení nehomogenních vlnových rovnic

(B30d)
$$\Box \vec{A} = -\mu \vec{i}, \ \Box \varphi = -\frac{\rho}{\varepsilon}.$$

Nalezením potenciálů \vec{A} , φ lze získat elektromagnetické pole \vec{E} , \vec{B} vyhovující Maxwellovým rovnicím (B27) až (B30).

8.5. Elektromagnetické vlnění

8.5.1. Maxwellovy rovnice pro volné elektromagnetické pole

Podmínky pro pojetí elektromagnetického pole jako klasického a nestatistického fyzikálního objektu byly spojeny s podmínkami volného elektromagnetického pole a obrovského počtu koherentních fotonů. Podmínka volného elektromagnetického pole znamená nepřítomnost volných nábojů a výskyt pole v prostředí, které je buď vakuem nebo neferomagnetickým dielektrikem. Pro volné elektromagnetické pole budou mít v dielektriku Maxwellovy rovnice tvar

(B31) div
$$\vec{E} = 0$$
, div $\vec{B} = 0$, rot $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$, rot $\vec{B} = \varepsilon \mu \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$.

Ve vakuu se tvar (B31) změní na základě odstranění materiálových konstant:

(B32) div
$$\vec{E} = 0$$
, div $\vec{B} = 0$, rot $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$, rot $\vec{B} = \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \vec{E}}{\partial t}$

Popis volného elektromagnetického pole lze provést také užitím skalárního a vektorového potenciálu elektromagnetického pole (viz vztahy (B30b)) a s nimi spojenými vlnovými rovnicemi (B30d). Pro volné elektromagnetické pole nehomogenní vlnové rovnice (B30d) přecházejí v homogenní vlnové rovnice

 $\Box \vec{A} = \vec{0}$, $\Box \varphi = 0$, v nichž symbol $\vec{0}$ je symbolem nulového vektoru.

8.5.2. Monochromatická elektromagnetická vlna

Zřejmě nejdůležitějším klasickým rysem elektromagnetického pole je šíření volného elektromagnetického pole prostorem ve formě monochromatického elektromagnetického vlnění. Podmínky vzniku elektromagnetického vlnění jsou dvě: "volné elektromagnetické pole" a "obrovský počet koherentních fotonů" - souhrnně "monochromatické volné elektromagnetické pole v rozlehlém prostoru". Za těchto dvou podmínek lze také elektromagnetické záření spojovat s elektromagnetickým vlněním.

Pohybovou rovnicí vlnění je vlnová rovnice (B21) nebo pro vlnění v řadě bodové vlnová rovnice (B19). Např. vlnové rovnici (B19) pak vyhovuje pohybový zákon vlnění - vlnová funkce (B18). Připomenutý mechanismus pohybových zákonů a pohybových rovnic pro vlnění umožňuje prostřednictvím rovnic (B31) a (B32) dokázat, že monochromatické volné elektromagnetické pole se šíří "rozlehlým" prostorem formou "klasické" monochromatické elektromagnetické vlny s fázovou rychlostí rovnou rychlosti světla.

K důkazu je nejdříve potřebné doplnit aplikaci symbolického vektoru "nabla" (B25) z hlediska jeho působení na skalár f (skalární funkci f). Tato aplikace má tvar

(B33)
$$\nabla f = \operatorname{grad} f\left(\frac{\partial f}{\partial x}, \frac{\partial f}{\partial y}, \frac{\partial f}{\partial z}\right).$$

Na základě definic operátorů div a rot podle (B26), operátoru grad podle (B33) a Laplaceova operátoru Δ podle (B20) lze dokázat operátorový vztah pro dvojnásobný vektorový součin

rot rot = grad div –
$$\Delta$$
.

Použití tohoto operátorového vztahu na intenzitu elektrického pole vede ke vztahu

rot rot
$$\vec{E} = \text{grad div } \vec{E} - \Delta \vec{E}$$
.

Podle rovnic (B31) i (B32) je

div
$$\vec{E} = 0$$
 a rot $\vec{E} = -\frac{\partial \vec{B}}{\partial t}$

Odtud plyne s využitím záměnnosti operátorů rot a $\frac{\partial}{\partial t}$ vztah

$$\Delta \vec{E} - \frac{\partial}{\partial t} \operatorname{rot} \vec{B} = 0.$$

Po dosazení za rot \vec{B} z rovnic (B31) a (B32) lze získat pro vakuum rovnici

(B34)
$$\Delta \vec{E} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0$$

a pro dielektrikum bez volných nábojů podobnou rovnici

(B35)
$$\Delta \vec{E} - \varepsilon \mu \frac{\partial^2 \vec{E}}{\partial t^2} = 0.$$

Rovnice (B34) a (B35) je možné obdobně odvodit i pro magnetické pole. Po srovnání s obecnou vlnovou rovnicí (B21) je zřejmé, že volné elektromagnetické pole se pro obrovský počet koherentních fotonů šíří prostorem jako monochromatické vlnění, které spočívá v tom, že změny intenzity elektrického pole a indukce magnetického pole postupují prostorem rychlostí vyjádřenou ve vakuu a v dielektriku vzorci

$$c = \frac{1}{\sqrt{\varepsilon_0 \mu_0}}, \ v = \frac{c}{\sqrt{\varepsilon_r \mu_r}}$$

Elektrické a magnetické vlny nejsou na sobě nezávislé, neboť vektory intenzity elektrického pole a indukce magnetického pole jsou vázány vztahy (B31) a (B32) - elektrické a magnetické vlnění tvoří nedělitelný celek. Proto lze hovořit o monochromatickém elektromagnetickém vlnění, které se ve vakuu šíří rychlostí světla. Vzhledem ke vztahu (B30a) je zřejmé, že Poyntingův vektor má pro monochromatickou elektromagnetickou vlnu směr odpovídající směru jejího šíření a popisuje spojitý transport energie ve volném elektromagnetickém poli. Shoda rychlostí elektromagnetických a optických vln ve vakuu vedla Maxwella k elektromagnetické teorii světla. Experimentálně byla existence elektromagnetických vln potvrzena v r. 1888 Hertzem.

9. Kvantová mechanika (Přílohy B1, B4, B5, B8)

9.1. Postulátová výstavba kvantové mechaniky

9.1.1. 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 tomu 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.

9.1.2. 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 kvantové 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.

9.1.3. 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 Δx . $\Delta p_x \sim \hbar$ 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 Δx . $\Delta p_x \sim \hbar$) vede k nahrazení klasické trajektorie množinou míst v okolí jádra atomu, v nichž se elektron vyskytuje s různými je v kvantové mechanice pravděpodobnostmi. Trajektorie 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 vlnově 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 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)
$$\lambda_{DBV} = h/p$$
, frekvence $v_{DBV} = mc^2/h$.

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

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

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 ($m=3,3.10^{-27}$ kg, v = 2000 m.s⁻¹, $h=6,6.10^{-34}$ Js) vychází asi $\lambda_{DBV} = 10^{-10}$ m = 1 Å. Tato vlnová délka má velikost atomu vodíku.

Pro klasické elektrony lze z rovnice $\frac{1}{2} m_0 v^2 = eU (m_0 \text{ je klidová hmotnost elektronu,} U \text{ je urychlující napětí) dosadit za rychlost v do (B35a) a získat vztah pro de Broglieovu vlnovou délku elektronu <math>\lambda_e = 1,23.10^{-9}.U^{-1/2}$ m. Pro elektrony urychlené napětím 151 V pak vychází vlnová délka $\lambda_e = 1 \text{ Å}$, při urychlujícím napětí 15 100 V je $\lambda_e = 0,1 \text{ Å}$.

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.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 pravděpodobnostní ho oblaku", který lze považovat za hledanou představu stacionárního stavu vázaného elektronu.

9.1.4. 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 I1 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 ®

(B36) stav \mathbb{R} vlnovou funkcí ψ (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 hermicity 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 $\circledast \psi$) a zkoumat případný časový vývoj stavu. Interpretační postulát bude vyjádřen reprezentací \circledast

(B37) veličina $A \otimes operátorem \hat{A}$ (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 <u>úplný</u> <u>soubor kvantových čísel</u>. Interpretační postulát bude vyjádřen vlastní rovnicí operátoru \hat{A} a systémem vlastních hodnot a vlastních funkcí operátoru \hat{A} , tj.

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

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

(B39)
$$\psi = \sum_{n} c_n \psi_n$$
 (*c_n* jsou koeficienty lineární kombinace).

9.1.5. 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 Dodatek 5, Příklad 9)

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

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 \hat{T} kinetické energie *T*, operátor \hat{V} potenciální energie *V* v sobě skrývá instrukci "násobit výrazem pro potenciální energii", tj $\hat{V} = V$ 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 $\hat{H} \ \psi = E.\psi$ 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 $\hat{H} \ \psi = E. \ \psi$ 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 Dodatek 5, Příklad 9).

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

c) Přehled některých operátorů

Tab.3 Přehled některých operátorů

d) Nestacionární Schrödingerova rovnice

Nestacionární Schrödingerova rovnice popisuje časový vývoj kvantového stavu mikroobjektu (tzn. změny tvaru "pravděpodobnostního oblaku" jako změny stavu). Vychází z operátoru \hat{L} časové změny stavu. Tento operátor je definován

$$\hat{L} = \frac{1}{\hbar}\hat{H}$$
.

Odtud již pramení tvar nestacionární Schrödingerovy rovnice

$$\widehat{H}\psi = \mathrm{i}\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t}$$

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.

9.1.6. 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 $\psi = \psi(q_1, ..., q_j, ..., q_k, ..., q_N)$. **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

$$(B40) \qquad \widehat{P}_{ik} \quad \psi_{jk} = \lambda \cdot \psi_{jk}$$

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 λ^2 . ψ_{jk} . Souhrnně lze tedy zapsat výsledek primárního a sekundárního působení operátoru \hat{P}_{jk} ve tvaru

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

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 čyřspinorů přetransformoval nerelativistickou Schrödingerovu rovnici na relativistickou rovnici Diracovu, která je již v souladu s existencí spinu.

9.2. 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).

9.3. Aplikace hlavní metody - atom vodíku

9.3.1. Fyzikální vymezení problému, stanovení počátečních podmínek

Vodíkový atom je složen z jádra tvořeného protonem a jednoho elektronu v obalu atomu. Proton je 1836 krát hmotnější než elektron - proto si lze jádro představit jako nehybné. Elektron se vyskytuje v okolí jádra s různými pravděpodobnostmi - rozmanité distribuce pravděpodobností vytvářejí různé stacionární stavy vázaného elektronu charakterizované různými tvary "pravděpodobnostních oblaků". Elektronu brání v úniku elektrické pole protonu. Metodami klasické mechaniky nelze stacionární stavy vázaného elektronu ani nalézt, ani zdůvodnit stabilitu vodíkového atomu.

Klasický obrázek elektronu by byl založen na dvou pilířích vycházejících z klasické mechaniky - Newtonových pohybových zákonech a Coulombově zákonu. Pak by měl elektron kinetickou energii

$$T=\frac{1}{2}mv^2,$$

Coulombovskou potenciální energii (e je elementární náboj)

$$V = - \frac{e^2}{4\pi \,\varepsilon_0 \,r}$$

a obíhal by kolem protonu po kruhové dráze s poloměrem *r*. Třetím klasickým pilířem jsou klasické rysy elektromagnetického pole - elektrický náboj pohybující se zrychleným pohybem vyzařuje energii ve formě elektromagnetického záření. Tento klasický obrázek vede ke katastrofální předpovědi - mělo by stačit 10^{-16} s, aby se "stabilní" atom vodíku zhroutil (elektron by se vlivem ztráty energie spirálovitě přibližoval k jádru, až by byl jádrem "pohlcen" a atom by přestal existovat). Výpočet času "zhroucení" vychází z celkové energie E = T + V = 13,6 eV a z průměrného vyzařování energie za 1 s.

9.3.2. Vymezení úplného souboru operátorů a veličin

Úplný soubor operátorů (komutátor libovolné dvojice operátorů se musí rovnat 0) a veličin (musí jít o současně měřitelné veličiny) je tvořen čtyřmi operátory:

$E=H$ ® $\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}$	operátor energie elektronu (Hamiltonovy funkce elektronu)
$b^2 \otimes \hat{b}^2 = -\hbar^2 \Delta_{g,\varphi}$	operátor čtverce orbitálního momentu hybnosti elektronu
	(obsahuje Laplaceův operátor $\Delta_{\mathcal{G}, \varphi}$ pro kouli)
$b_z \otimes \hat{b}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$	operátor z-ové složky orbitálního momentu hybnosti elektronu
$S_z \circledast \widehat{S}_z = \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0\\ 0 & -1 \end{pmatrix}$	maticový operátor z-ové složky spinového momentu hybnosti
	elektronu

Tab. 4 Úplný soubor operátorů pro atom vodíku

9.3.3. Soustava vlastních rovnic operátorů

Soustava vlastních rovnic bude mít pro čtyři operátory z úplného souboru operátorů podle (B38) následující podobu:

$\widehat{H} \psi_i = E_i \psi_i$	
$\widehat{b}^2 \ \psi_i = b_i^2 \ \psi_i$	
$\hat{b}_z \ \psi_i = b_{zi} \ \psi_i$	
$\widehat{S}_z \ \psi_i = S_{zi} \ \psi_i$	

Na levých stranách vlastních rovnic je operátorové působení jednotlivých operátorů na hledané vlastní funkce ze systému vlastních funkcí { ψ_i } (systém vlastních funkcí je stejný pro všechny operátory), na pravých stranách je násobení vlastních funkcí příslušnou vlastní hodnotou ze systémů vlastních hodnot jednotlivých operátorů (systémy vlastních hodnot jsou specifické pro každý z operátorů). Index *i* souhrnně označuje všechna kvantová čísla, která se objeví během řešení soustavy vlastních rovnic.

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

Řešení soustavy vlastních rovnic (s cílem nalézt systém vlastních funkcí, systémy vlastních hodnot a úplný soubor kvantových čísel) je vzhledem k centrálnímu charakteru silového pole jádra (řada funkcí závisí na velikosti r polohového vektoru) matematicky nejsnadnější ve sférických souřadnicích. Kartézské souřadnice x,y,z bodu P (počátek souřadnicové soustavy bude umístěn v nehybném jádru atomu) budou převedeny na sférické souřadnice r, φ, ϑ obvyklými transformačními vztahy (viz obrázek Obr.2)

$$x = r \sin \theta \cos \varphi, \quad y = r \sin \theta \sin \varphi, \quad z = r \cos \theta.$$

Úhel \mathcal{G} je úhel mezi polohovým vektorem \vec{r} a kladnou poloosou osy z, úhel φ je úhel mezi projekcí polohového vektoru \vec{r} do souřadnicové roviny xy a kladnou poloosou osy x.



Zavedení sférických souřadnic umožní provést v hledaných vlastních funkcích separaci proměnných r, φ, ϑ - vlastní funkce se stanou součinem dílčích tří funkcí, z nichž každá závisí jen na jedné sférické souřadnici. Funkci závislou na ϑ lze vyjádřit pomocí tzv. Legendrových polynomů, funkci závislou na r pomocí Laguerrových polynomů, funkce závislá na φ má poměrně jednoduché vyjádření exponenciálním tvarem. Hledané vlastní funkce a přípustné vlastní hodnoty operátorů budou nalezeny řešením vlastních rovnic odpovídajících provedené separaci proměnných.

Systémy vlastních hodnot pro jednotlivé operátory již budou úzce souviset s jednotlivými kvantovými čísly. Jejich podoba bude následující:

Systém vlastních hodnot Hamiltonova operátoru \hat{H} :

 $E_n = \frac{-konst}{n^2}$, *n* je hlavní kvantové číslo nabývající hodnot n = 1, 2, ...

Systém vlastních hodnot operátoru \hat{b}^2 čtverce orbitálního momentu hybnosti:

 $b^2 = \hbar^2 l (l+1), l$ je vedlejší kvantové číslo nabývající hodnot l = 0, 1, ..., n-1

Systém vlastních hodnot operátoru \hat{b}_z z-ové složky orbitálního momentu hybnosti:

 $b_z = \hbar m$, m je magnetické kvantové číslo nabývající hodnot m = -l, ..., 0, ..., +l

Systém vlastních hodnot operátoru \hat{S}_z z-ové složky spinového momentu hybnosti:

 $S_z = -\frac{\hbar}{2}, +\frac{\hbar}{2}, \text{tj.} S_z = m_s \hbar, m_s$ je spinové magnetické kvantové číslo nabývající hodnot $m_s = -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}$.

Tab.5 Systém vlastních hodnot operátorů pro atom vodíku

Úplný soubor kvantových čísel je tvořen kvantovými čísly n, l, m, m_s . Odtud plyne i způsob zápisu systému vlastních funkcí, který je společný pro všechny čtyři operátory

$$\{\psi_i\} = \{\psi_{n,l,m,m_s}\}.$$
9.3.5. Nalezení tvarů "pravděpodobnostních oblaků"

Jednotlivé pravděpodobnostní oblaky jsou charakterizovány konkrétními hodnotami čtveřice kvantových čísel *n*, *l*, *m*, *m*_s. S hlavním kvantovým číslem jsou spojeny tzv. orbity (slupky) označované písmeny velké abecedy

n=1 (orbit K), n=2 (orbit L), n=3 (orbit M) atd.

S vedlejším kvantovým číslem *l* jsou spojeny podorbity (podslupky) označované písmeny malé abecedy

l=0 (podorbit *s*, tj. sharp), l=1 (podorbit *p*, tj, principal), l=2 (podorbit *d*, tj. diffuse), l=3 (podorbit *f*, tj. fundamental) atd.

Magnetické kvantové číslo m a spinové magnetické číslo m_s si ponechávají obvykle jen svá číselná vyjádření.

V rámci orbitu K lze tedy objevit dva pravděpodobnostní oblaky:
Oblak 1,0,0,1/2 a 1,0,0,-1/2 (souhrnné označení obou oblaků 1s)
Orbit K je tedy plně obsazen dvěma elektrony (netečný plyn hélium)

V rámci orbitu L lze objevit osm pravděpodobnostních oblaků: Oblaky 2,0,0,1/2 a 2,0,0,-1/2, (souhrnné označení obou oblaků 2s). Oblaky 2,1,-1,1/2 a 2,1,-1,-1/2 a 2,1,0,1/2 a 2,1,0,-1/2 a 2,1,1,1/2 a 2,1,1,-1/2 (souhrnné označení těchto šesti oblaků 2p) Orbit L je tedy plně obsazen osmi elektrony (netečný plyn neon).

Obdobně by bylo možno pokračovat v rozepisování dalších **orbitů** M,N,... na jednotlivé pravděpodobnostní oblaky. Přitom by bylo potřebné respektovat energetickou hodnotu příslušející skupinám oblaků - např. skupina oblaků 4*s* předchází skupině oblaků 3*d*.

Hledání tvarů pravděpodobnostních oblaků bude ukázáno ve speciálním případě radiálních pravděpodobností. Součin vlnové funkce ψ a jejího komplexního sdružení ψ^* dává hustotu pravděpodobnosti výskytu elektronu. Prointegrováním přes směrové charakteristiky výskytu elektronu (tj. přes úhly φ , ϑ) lze získat **radiální hustoty pravděpodobnosti** (viz Dodatek 5, Příklad 10). Příklady nejjednodušších radiálních hustot pravděpodobnosti P_r jsou následující:

n=1, *l*=0 (viz obrázek Obr. 3)

Radiální hustota pravděpodobnosti je dána tvarem

$$P_r = konst.r^2.\exp\left(\frac{-2r}{a}\right),$$

kde *a* je tzv. Bohrův poloměr (s tímto poloměrem se kdysi kreslily kruhové dráhy elektronů při jejich "oběhu" kolem jádra atomu vodíku). Nyní lze jednoduše prokázat, že vzdálenost r = a je vzdálenost od jádra, v níž se elektron atomu vodíku vyskytuje s největší pravděpodobností. K provedení důkazu stačí nalézt derivaci

$$dP_r/dr$$

a položit ji rovnu nule. Řešením pak lze objevit hledanou vzdálenost r = a pro nejpravděpodobnější výskyt elektronu.





Radiální hustota pravděpodobnosti je dána tvarem

$$P_r = konst.r^4.\exp\left(\frac{-r}{a}\right),$$

kde *a* je opět Bohrův poloměr. Opět lze jednoduše prokázat, že vzdálenost r = 4a je vzdálenost od jádra, v níž se elektron atomu vodíku vyskytuje s největší pravděpodobností. K provedení důkazu stačí nalézt derivaci

$$\frac{\mathrm{d}P_r}{\mathrm{d}r}$$

a položit ji rovnu nule. Řešením pak lze objevit hledanou vzdálenost r = 4a pro nejpravděpodobnější výskyt elektronu (viz Dodatek 5, Příklad 10).

Hledání tvarů pravděpodobnostních oblaků bude dále ukázáno ve speciálním případě směrových pravděpodobností. Součin vlnové funkce ψ a jejího komplexního sdružení ψ^* opět dává hustotu pravděpodobnosti výskytu elektronu. Prointegrováním tentokrát přes vzdálenostní charakteristiku výskytu elektronu (tj. přes velikost polohového vektoru r) lze získat směrové hustoty pravděpodobnosti (viz Dodatek 5, Příklad 11). Grafy směrových hustot pravděpodobnosti pro elektrony s (l = 0), elektrony p (l = 1) a elektrony d (l = 2) jsou znázorněny na obrázku Obr. 4. Příklady nejjednodušších směrových hustot pravděpodobnosti P_s jsou následující:

l=1, *m*=0

Směrová hustota pravděpodobnosti je dána tvarem

 $P_s = konst. \cos^2 \vartheta$

(závislost na úhlu φ vymizí již při součinu s komplexním sdružením). Bude-li osa z souřadnicové soustavy zvolena v nákresu jako svislá osa, graf směrové pravděpodobnosti P_s bude dán "stojatou osmičkou" (maximální pravděpodobnost výskytu pro úhly $\mathcal{G} = 0^\circ$, 180°, minimální pravděpodobnost výskytu pro úhly $\mathcal{G} = 90^\circ$, 270°) - <u>viz Dodatek 5, Příklad 11</u>

l=1, *m*=1

Směrová hustota pravděpodobnosti je dána tvarem

$$P_s = konst. \sin^2 \theta$$

(závislost na úhlu φ opět vymizí již při součinu s komplexním sdružením). Bude-li osa z

souřadnicové soustavy zvolena v nákresu jako svislá osa, graf směrové pravděpodobnosti P_s bude dán "ležatou osmičkou" (minimální pravděpodobnost výskytu pro úhly $\mathcal{G} = 0^{\circ}$, 180°, maximální pravděpodobnost výskytu pro úhly $\mathcal{G} = 90^{\circ}$, 270°).



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

9.3.6. Interpretace výsledků popisem stacionárních stavů pomocí hodnot kvantových čísel

a) Význam hlavního kvantového čísla *n*: Kvantování energie elektronu v atomu vodíku (viz tvar vlastních hodnot Hamiltonova operátoru \hat{H})

b) <u>Význam vedlejšího kvantového čísla l</u>: Interpretace tohoto kvantového čísla je méně zřejmá - v podstatě určuje velikost orbitálního momentu hybnosti elektronu. Přípustné hodnoty vedlejšího kvantového čísla ukazují, že orbitální moment hybnosti je kvantován a zachovává se. Tento výsledek souvisí s rozborem vlastních hodnot operátoru kinetické

energie vázaného elektronu.

c) Význam magnetického kvantového čísla *m*: Úplný popis orbitálního momentu hybnosti vyžaduje kromě popisu přípustných hodnot jeho velikosti také popis přípustných směrů (moment hybnosti je vektorová veličina). "Směr v prostoru" nemá zdánlivě pro vodíkový atom význam - to je pravdou tehdy, nevyskytuje-li se atom vodíku ve vnějším magnetickém poli. Vzhledem k výskytu elektronu v okolí jádra v různých místech s různou pravděpodobností, lze si tento pravděpodobnostní jev představit jako existenci magnetického momentu $\vec{\mu}$ klasické mikroskopické proudové smyčky $\vec{\mu} = -e \vec{w}$, kde \vec{w} je plošná rychlost elektronu. Plošná rychlost souvisí s orbitálním momentem hybnosti \vec{b} vztahem $\vec{b} = 2m\vec{w}$, odtud již plyne pro tzv. gyromagnetický poměr *g* elektronu vztah

(B41)
$$\frac{\mu}{b} = -\frac{e}{2m} = g.$$

Znaménko - ukazuje, že magnetický moment elektronu a orbitální moment hybnosti mají opačný směr.

Při vložení atomu vodíku do vnějšího magnetického pole s magnetickou indukcí \vec{B} (nechť je směr magnetické indukce totožný se směrem osy z) se bude magnetické pole snažit natočit směr magnetického momentu $\vec{\mu}$ do směru vektoru \vec{B} prostřednictvím silového momentu

(B42)
$$\overrightarrow{M} = \overrightarrow{\mu} \times \overrightarrow{B}$$
.

Objevuje se význačný směr v prostoru, který zdůvodňuje kvantování směru orbitálního momentu hybnosti \vec{b} . Toto prostorové kvantování je určeno hodnotami magnetického kvantového čísla *m*, *z*-ové složky b_z orbitálního momentu hybnosti leží ve směru magnetického pole. Např. pro l = 2 nabývá magnetické kvantové číslo *m* pěti hodnot m = -2, -1, 0, 1, 2, které ukazují pět možných prostorových orientací orbitálního momentu hybnosti \vec{b} . Jelikož b_z je vždy menší než velikost orbitálního momentu hybnosti $|\vec{b}|$ (viz systémy vlastních hodnot operátorů \hat{b}^2 a \hat{b}_z v Tab. 5, tj. $\hbar m < [l.(l+1)]^{1/2}\hbar$]), nemůže být orbitální moment hybnosti \vec{b} nikdy přesně paralelní nebo antiparalelní s vektorem magnetické indukce \vec{B} .

Tento kvantový úkaz je důsledkem principu neurčitosti - složky orbitálního momentu hybnosti např. b_x a b_z nejsou současně změřitelné (komutátor příslušných dvou operátorů je různý od nuly). Odtud plyne, že při dané konkrétní hodnotě složky b_z musí mít zbývající složky b_x , b_y neodstranitelnou vnitřní neurčitost - vektor \vec{b} nemůže být nikdy trvale v jednom směru a současně nemůže být paralelní nebo antiparalelní se směrem vektoru magnetické indukce \vec{B} , vektor \vec{b} musí sledovat v prostoru povrch kužele. Tomuto periodickému precesnímu pohybu (tzv. Larmorově precesi) lze přiřadit úhlovou frekvenci Ω pomocí vztahu (B42) a prostřednictvím klasických úvah (které mají svou platnost i v kvantové oblasti) ve tvaru

(B43)
$$\overrightarrow{M} = \overrightarrow{\Omega} \times \overrightarrow{b}$$
.

Při zjednodušení vektorových součinů ve vztazích (B42) a (B43) a s použitím vztahu (B41) lze dosáhnout pro frekvenci Larmorovy precese u elektronu výraz

(B44)
$$\Omega = g.B \ (g = \frac{\mu}{b} = -\frac{e}{2m}$$
 je gyromagnetický poměr pro elektron).

Vztah (B44) lze zobecnit i na např. proton v jádře - jen je zapotřebí dosadit místo gyromagnetického poměru pro elektron gyromagnetický poměr pro proton.

Závěrem lze shrnout význam magnetického kvantového čísla m - představuje prostorové kvantování orbitálního momentu hybnosti elektronu, umožňuje zavedení úhlové frekvence Larmorovy precese vztahem (B44), **připomíná pojem "degenerace vlastní hodnoty - jedné vlastní hodnotě náleží více vlastních funkcí".** Až ve vnějším magnetickém poli je degenerace vlastní hodnoty odstraněna. Ve vnějším magnetickém poli závisí energie určitého stavu nejen na hlavním kvantovém čísle n, ale také na hodnotě magnetického kvantového čísla m - stav se rozdělí na několik energeticky odlišných podstavů, jednotlivé spektrální čáry se rozštěpí na oddělené čáry (normální Zeemanův jev). d) Význam spinového magnetického kvantového čísla m_s : Spinové magnetické číslo popisuje prostorové kvantování vnitřního momentu hybnosti elektronu. Opět lze zavést magnetický moment μ_s související s vnitřním momentem hybnosti \vec{S} elektronu obdobným vztahem vztahu (B44) - jen gyromagnetický poměr zde nabývá dvojnásobné hodnoty. Vzhledem k dvěma vlastním hodnotám operátoru \hat{S}_z jsou možné dvě prostorové orientace spinového momentu hybnosti \vec{S} , složka S_z podél magnetického pole v ose z může mít kladnou hodnotu $\hbar/2$ ("paralelní spin") nebo zápornou hodnotu $-\hbar/2$ ("antiparalelní spin").

Spin nemá klasickou analogii a je příčinou jemné struktury spekter projevující se zdvojováním spektrálních čar - tento efekt lze vysvětlit spinorbitální interakcí a jeho experimentální podobou je anomální Zeemanův jev.

e) Výběrová pravidla změny kvantových čísel pro dovolené přechody: Otázka přípustných změn hodnot kvantových čísel při přechodech elektronu např. z energetické hladiny E_m na nižší energetickou hladinu E_n je úzce spojená s otázkou, kdy atom září nebo absorbuje (vyzařuje nebo absorbuje elektromagnetické záření) a kdy atom nezáří. Jestliže se elektron nachází podle (B36) ve stacionárním stavu reprezentovaném vlnovou funkcí ψ_m (s odpovídající hodnotou energie E_m) nebo ve stacionárním stavu reprezentovaném vlnovou funkcí ψ_n (s odpovídající hodnotou energie E_n), lze ukázat, že střední poloha atomového elektronu vzhledem k jádru je konstantní v čase - pak atom nevyzařuje žádné záření.

Jestliže střední poloha elektronu vzhledem k jádru osciluje při přechodu elektronu ze stavu ψ_m do stavu ψ_n po předchozím excitačním procesu (např. dopadající záření nebo srážka s jinými částicemi), dochází k emisi elektromagnetického záření. Frekvence elektromagnetického záření je totožná s frekvencí ν oscilací střední polohy elektronu (tato frekvence je dána očekávaným vztahem $\nu = (E_m - E_n) / h)$ - vzniká spektrální čára odpovídající frekvenci ν .

Lze rovněž snadno ukázat, že při dovolených přechodech elektronu není změna hlavního kvantového čísla n omezena, vedlejší kvantové číslo l se musí změnit o ± 1 a magnetické kvantové číslo m se buď nemění nebo se může změnit o ± 1 . Tyto přípustné změny kvantových čísel se nazývají výběrová pravidla.

a) Fyzikální vymezení problému, stanovení počátečních podmínek

Stabilitu jader lze vysvětlit prostřednictvím zbytkové silné interakce - přitažlivé jaderné síly krátkého dosahu jsou charakterizovány výměnou π mezonů (Yukawa, 1935). Síly působící mezi dvěma neutrony nebo dvěma protony jsou výsledkem výměny neutrálních mezonů π^0 , jaderná síla působící mezi neutronem a protonem je pak výsledkem výměny nabitých mezonů π^+ a π^- .

Kapkový model jádra je založen na představě, že se jádro podobá nukleární kapalině tvořené protonovou a neutronovou kapalinou. Tyto "molekuly" nukleární kapaliny na sebe působí přitažlivými silami krátkého dosahu, jež jsou příčinou povrchového napětí dávajícího jádru tvar s nejmenším povrchem, tj. kulový tvar. Jádra se pak chovají jako "kapky" nukleární kapaliny různé velikosti, v nichž si nukleony neustálými srážkami předávají energii - proto je fyzikálně definován jen celkový stav jádra.

Slupkový model předpokládá existenci různých stacionárních kvantových stavů jednotlivých nukleonů a vychází z představy, že každý nukleon se nachází ve výsledném silovém poli ostatních nukleonů. Na rozdíl od kapkového modelu lze tedy zkoumat individuální stavy nukleonů. Nukleony jsou navíc fermiony a platí pro ně Pauliho vylučovací princip podobně jako pro vázané elektrony v obalu atomu. Analogii s vázanými elektrony v obalu je užitečná - podobně jako vzácné plyny hélium a neon se zcela zaplněným orbitem *K* u hélia (2 elektrony) a orbity *K* a *L* u neonu (10 elektrony) lze vysledovat častější výskyt jader s 2, 8, 20 atd. neutrony nebo protony. Význam těchto čísel, známých pod názvem magická čísla, spočívá v plném obsazení příslušných orbitů, je jen zapotřebí předpokládat dostatečně silnou spinorbitální interakci.

Konzistentní zachycení předností obou modelů (slupkový model je modelem kvantově mechanickým zvláště pro individuální nukleon, kapkový model se snaží popsat stav jádra jako celku) vedlo k návrhu např. kolektivního modelu, který vedle zkoumání kvantových stavů jednotlivých nukleonů počítá i s možností kmitání a rotace jádra jako celku.

b) Vymezení úplného souboru operátorů a veličin (slupkový model)

U lehčích jader se jednotlivé spinové momenty hybnosti nukleonů váží na výsledný spinový moment hybnosti a jednotlivé orbitální momenty na výsledný orbitální moment hybnosti a ty pak spinorbitálně interagují. U těžších jáder se již u jednotlivých nukleonů spojují spinový a orbitální moment hybnosti do výsledného momentu hybnosti nukleonu a již zde se projevuje spinorbitální interakce. Vzhledem k předpokládané dostatečně silné spinorbitální interakci je zřejmé, že úplný soubor operátorů může mít různorodější podobu. Lze alespoň uvést Hamiltonův operátor \hat{H} pro neutrony (nacházejí se jen v poli jaderných sil nukleonů, které je charakterizováno střední potenciální energií V_j) a pro protony (protony se navíc vyskytují v elektrostatickém poli ostatních protonů, které je charakterizováno elektrostatickou energií V_e):

 $E=H \otimes \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{j} \qquad \text{operator energie neutronu (Hamiltonovy funkce neutronu)}$ $E=H \otimes \hat{H} = \hat{T} + \hat{V}_{j} + \hat{V}_{e} \qquad \text{operator energie protonu (Hamiltonovy funkce protonu)}$

c) Napsání soustavy vlastních rovnic operátorů (slupkový model)

Soustava vlastních rovnic bude redukována jen na vlastní rovnici Hamiltonova operátoru \hat{H} pro neutron a pro proton, podle (B38) bude tedy napsána jen stacionární Schrödingerova rovnice pro oba typy nukleonu:

$$(-\frac{\hbar^2}{2m_n}\Delta + \hat{V}_j) \psi_i = E_i \psi_i$$
 (stacionární Schrödingerova rovnice neutronu s hmotností m_n)

$$(-\frac{n}{2m_p}\Delta + V_j + V_e) \psi_i = E_i \psi_i$$
 (stacionární Schrödingerova rovnice protonu s hmotností m_p)

d) Nalezení systému vlastních funkcí, systémů vlastních hodnot a úplného souboru kvantových čísel (slupkový model)

Řešení soustavy vlastních rovnic je spojeno s řešením stacionární Schrödingerovy rovnice, objeví se stacionární stavy charakterizované kvantovými čísly n, l, m, m_s podobně jako v analogickém případě stacionárních stavů elektronů vázaných v atomovém obalu.

K dosažení souladu s pozorovanými magickými čísly je zapotřebí zahrnout dostatečně silnou spinorbitální interakci.

e) Nalezení tvarů "pravděpodobnostních oblaků" (slupkový model)

Tvary pravděpodobnostních oblaků jsou odlišné pro neutrony a pro protony. Neutrony a protony obsazují odlišné skupiny stavů, neboť protony interagují vedle zbytkové silné interakce také elektromagnetickou interakcí v její elektrostatické podobě. Tvary pravděpodobnostních oblaků se také liší podle zahrnutí či nezahrnutí spinorbitální interakce.

<u>f)</u> Interpretace výsledků popisem stacionárních stavů pomocí přípustných hodnot kvantových čísel (slupkový model)

Rabiova metoda magnetické jaderné rezonance

Souhrn vztahů (B41), (B42), (B43) vedl u vázaného elektronu ke vztahu (B44) pro úhlovou frekvenci Larmorova precesního pohybu. Při nahrazení gyromagnetického poměru *g* pro elektron ve vztahu (B44) gyromagnetickým poměrem např. pro proton tvořící jádro vodíku, je možné získat úhlovou frekvenci Larmorovy precese i pro jádra. Rabi a Ramsey (1939) vypracovali experimentální metodu měření frekvence Larmorovy precese jader, jejímž základem se staly rezonanční efekty vyplývající z totožnosti frekvence střídavého pole vkládaného do zařízení pro Rabiovu metodu a frekvence Larmorovy precese. Z frekvence střídavého pole pak již bylo možno odečíst hodnotu frekvence (B44) Larmorovy precese pro zkoumané jádro. Rabiova metoda magnetické rezonance je svědectvím o významu úplného souboru kvantových čísel. Bez přípustných hodnot kvantových čísel nelze vysvětlit existenci Larmorova precesního pohybu.

Rozdíly v poločasech rozpadu nepatrně odlišných izotopů

Odlišnost skupin stavů (tvarů pravděpodobnostních oblaků) pro protony a neutrony získaná v rámci slupkového modelu jádra umožnila vysvětlit i značné rozdíly v poločasech rozpadu izotopů, které jsou si složením velmi podobné. Např. polonium ²¹⁰₈₄Po(jádro obsahuje 126 neutronů) má poločas rozpadu 138 dnů, zatímco polonium ²¹²₈₄Po (jádro obsahuje 128 neutronů) má poločas rozpadu 3.10⁻⁷ s. Obdobná situace je u izotopů ²⁰⁹₈₃Bi (126 neutronů)

a ²¹¹₈₃Bi (128 neutronů) - izotop se 126 neutrony je stabilní, izotop se 128 neutrony má poločas rozpadu 120 s. Rozdíl ve stabilitě plně vysvětluje slupkový model - 126 neutronů zcela obsazuje prvních 7 slupek, dva neutrony navíc představují vzhledem k neobsazenosti další slupky podstatně nižší stabilitu jádra. Úplný soubor kvantových čísel opět hraje významnou roli v rámci slupkového modelu.

9.5. Prostorová struktura molekuly vody

Molekula jako stabilní uspořádání dvou nebo více atomů může být tvořena homopolární vazbou mezi jednotlivými atomy (dvojice elektronů s paralelním a antiparalelním spinem patří společně dvěma atomům - pravděpodobnost výskytu elektronů je největší poblíž spojnice jader obou atomů) nebo heteropolární vazbou mezi jednotlivými atomy (po přechodu elektronů z jednoho do druhého atomu se vzniklý kladný a záporný iont přitahují). Příkladem homopolární vazby je např. molekula vodíku H₂ nebo molekula vody H₂0, příkladem heteropolární vazby je např. molekula NaCl. Pro vyšetřování stavů molekul lze opět často použít hlavní metodu kvantové mechaniky pro stacionární stavy doplněnou o poruchové metody - molekulové vlnové funkce lze získat pomocí vhodných atomových vlnových funkcí (na tomto principu staví např. metoda LCAO - linear combination of atomic orbitals).

K prozkoumání prostorové struktury molekuly vody bude použito podstatně jednoduššího postupu. Nejdříve bude prozkoumána struktura obalu atomu kyslíku s cílem nalézt elektrony, které nevytvářejí dvojice s paralelním a antiparalelním spinem. Pro tyto elektrony pak bude provedena analýza tvarů jejich pravděpodobnostních oblaků na základě dílčím způsobem použitelné analogie s atomem vodíku.

Struktura obalu atomu kyslíku

Obal atomu kyslíku obsahuje 8 elektronů

V rámci orbitu K lze objevit dva elektrony odpovídající pravděpodobnostním oblakům 1,0,0,1/2 a 1,0,0,-1/2.

V rámci orbitu L lze objevit šest elektronů odpovídajících např. pravděpodobnostním oblakům * 2,0,0,1/2 * 2,0,0,-1/2 * 2,1,-1,1/2 * 2,1,-1,-1/2 * 2,1,0,1/2 * 2,1,1,1/2.

Je zřejmé, že jen dva poslední elektrony nejsou součástí dvojic elektronů s paralelním a antiparalelním spinem. Tyto dva poslední elektrony mají vedlejší a magnetická kvantová čísla l=1, m=0 a l=1, m=1.

Na základě "stojaté osmičky" a "ležaté osmičky" obou elektronů atomu kyslíku (viz Obr. 4) s nespárovanými spiny je zřejmé, že ke vzniku molekuly vody H₂O je potřebná prostorová "spolupráce" dvou atomů vodíku, které se přibližují ve směrech svírajících pravý úhel. Mají-li elektrony atomů kyslíku potřebné antiparalelní spiny, mohou vytvořit se "stojatou osmičkou" a "ležatou osmičkou" homopolární vazby. Úhel 104,5° (pozorovaný ve skutečnosti) lze připsat vzájemnému odpuzování atomů vodíku (např. ve vazebně podobné molekule H₂S je tento úhel 92°).

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.

10. Relativistická mechanika (Přílohy B1, B6, B7, B8)

10.1. 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 makrosvěta (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 makrosvěta)
- aplikace.

b) Podmínky relativističnosti jevů

Relativističnost jevů spojená s extrémními hustotami může být doložena např. pomocí podmínky degenerace Fermiho plynu (A3). Tuto podmínku lze zjednodušeně napsat ve tvaru $kT \ll \mu = k\Theta$ (Θ je teplota degenerace Fermiho plynu, *k* je Bolzmannova konstanta, μ je chemický potenciál Fermiho plynu odpovídající tzv. Fermiho mezi ε_F , *T* je teplota Fermiho plynu). S pomocí Fermiho meze ε_F

$$\varepsilon_F = konst. \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3}$$
 lze podmínku degenerace zapsat v podobě $kT \ll \frac{\hbar^2}{2m} \rho^{2/3}$

(ρ je hustota počtu částic N/V - kritérium degenerace je splněno tím přesněji, čím větší je hustota fermionů). Bude-li *r* označením pro střední vzdálenost mezi fermiony, pak lze při

platnosti vztahu $V=Nr^3$ napsat pro hustotu počtu částic vztah $\rho=1/r^3$. Po dosazení klidové hmotnosti m_0 místo hmotnosti m a klidové energie m_0c^2 místo energie kT lze kritérium relativističnosti pro mikroobjekty formulovat ve tvaru

$$r \leq \frac{\hbar}{m_0 c}$$
, tj. $\rho \geq \left(\frac{m_0 c}{\hbar}\right)^3$.

Pro hustoty a rozměry v mikrosvětě vymezené tímto kritériem je nutno brát v úvahu jevy speciální a obecné teorie relativity. Vzhledem ke vztahu (B35a) pro de Broglieovu vlnovou délku, který lze považovat za rozměrové vyjádření kritéria kvantovosti (tj. kritéria vlnově korpuskulárního dualismu), lze rozpoznat propojení kritérií relativističnosti a kvantovosti.

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

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

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 hmotnosti a na tomto základě zformulovala princip ekvivalence - gravitační síla není lokálně rozeznatelná od setrvačné síly.

10.2. Relativistická dynamika speciální teorie relativity

10.2.1. Pohybová rovnice relativistické mechaniky

Pohybová rovnice klasické mechaniky má v rámci newtonovského formalismu tvar (B5). Nechť 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 x₁'a x₁.

Nechť síla má rovněž stálý směr os x_1 a x_1 a nechť 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

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

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)
$$F = \frac{\mathrm{d}(mv)}{\mathrm{d}t}$$
, kde

(B48)
$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, v < c, m_0$$
 je klidová hmotnost částice, *m* 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 přírůstku hmotnosti mají především elementární částice - při popisu jejich stavů a změn jejich stavů nelze používat klasické fyzikální zákony.

10.2.2. Einsteinův vztah pro energii

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

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

Nechť platí nadále předpoklad síly se stálým směrem a nechť 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

$$W = \int_{v=0}^{v} F \, \mathrm{d}r = \int_{m_0}^{m} c^2 \, \mathrm{d}m = (m - m_0) \, c^2.$$

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 $T = \frac{1}{2}m_0v^2$). 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 Dodatek 5, Příklad 12)

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

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):

a) Nerelativistický případ v << c (viz také vztah (A6))

Hybnost
$$p = m_0 v$$

kinetická energie
$$T = \frac{1}{2}m_0v^2 = \frac{p^2}{2m_0}$$

energie volné částice
$$\varepsilon = \frac{p^2}{2m_0}$$
.

b) Relativistický případ $v \in (0, c), v >> 0$ (viz také vztah (A4))

Hybnost
$$p = mv$$
,

kinetická energie $T = mc^2 - m_0 c^2$,

energie volné částice $\varepsilon = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$.

c) Ultrarelativistický případ $v = c (m_0 = 0)$ (viz také vztah (A5))

Hybnost p = mc (pro foton $p = \frac{\hbar\omega}{c}$),

energie $E = mc^2$,

energie volné částice $\varepsilon = pc$ (pro foton $\varepsilon = \hbar \omega$).

10.3. Friedmannovy modely

(viz Dodatek 7, s.255)

10.4. Relativistiká kosmologie s kosmologickou konstantou (populární výklad) (viz Dodatek 7, s.265)

11. Kvantové a relativistické aplikace elektromagnetického pole (Přílohy B1,B4,B5,B6,B7,B8)

11.1. Kvantová teorie volného monochromatického elektromagnetického pole

Kvantový popis volného monochromatického elektromagnetického pole spočívá v rozkladu pole na množinu oscilátorů. V důsledku tohoto postupu budou nejdříve užitím hlavní metody kvantové mechaniky pro stacionární stavy (viz 10.kap., odst.10.2.) nalezeny energetické hladiny jednoho lineárního harmonického oscilátoru, následně pak bude převedena množina oscilátorů na soubor fotonů.

11.1.1. Aplikace hlavní metody kvantové mechaniky pro stacionární stavy na lineární harmonický oscilátor

a) Fyzikální vymezení problému, stanovení počátečních podmínek

Klasický lineární harmonický oscilátor s hmotností *m* kmitající v ose x s úhlovou frekvencí ω má celkovou energii $E = H = \frac{p_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 x^2}{2}$ (*H* je Hamiltonova funkce (B6))

b) Vymezení úplného souboru operátorů a veličin

Úplný soubor operátorů se redukuje na Hamiltonův operátor reprezentující podle (B37) energii *E* (Hamiltonovu funkci *H*) oscilátoru: $\hat{H} = \frac{\hat{p}_x^2}{2m} + \frac{m\omega^2 \hat{x}^2}{2}$

c) Napsání soustavy vlastních rovnic operátorů

Soustava vlastních rovnic operátorů se redukuje na vlastní rovnici Hamiltonova operátoru, tj. na stacionární Schrödingerovu rovnici $\hat{H}\psi = E\psi$ (viz (B38)). Po zavedení označení

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}}$$
 a $\lambda = \frac{2E}{\hbar\omega}$ získá vlastní rovnice tvar $\frac{d^2\psi}{d\xi^2} + (\lambda - \xi^2)\psi = 0$

d) Nalezení systému vlastních funkcí, systémů vlastních hodnot a úplného souboru kvantových čísel

Stacionární Schrödingerova rovnice se řeší jako obyčejná homogenní lineární diferenciální

rovnice 2. řádu s proměnnými koeficienty. **Systém vlastních funkcí** (viz (B38) lze nalézt ve tvaru

$$\psi_n(x) = konst. \exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right) \cdot H_n(\xi),$$

kde Hermitovy polynomy $H_n(\xi)$ mají tvar

$$H_n(\xi) = (-1)^n \exp(\xi^2) \frac{\mathrm{d}^n}{\mathrm{d}\xi^n} \left[\exp(-\xi^2) \right] \,.$$

Písmeno *n* označuje kvantové číslo, které nabývá hodnot n = 0, 1, 2, ...

Systém vlastních hodnot (viz (B38)) má tvar $H_n = E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$ (výraz $\frac{1}{2} \hbar \omega$ je tzv.

"nulová energie" oscilátoru).

e) Nalezení tvarů "pravděpodobnostních oblaků", interpretace výsledků popisem stacionárních stavů pomocí přípustných hodnot kvantových čísel a popisem aplikací

Tvary "pravděpodobnostních oblaků" ukazují na nenulovou pravděpodobnost výskytu kvantového harmonického oscilátoru i za "klasickými" body obratu (důsledek principu komplementarity a principu neurčitosti - kinetickou energii T a potenciální energii V nelze změřit současně).

Během řešení stacionární Schrödingerovy rovnice se objeví operátory kreace a anihilace - operátory, které nereprezentují fyzikální veličiny, ale operaci posunutí harmonického oscilátoru mezi energetickými stavy. Působení operátoru kreace lze popsat $\left(\frac{\partial}{\partial\xi}-\xi\right) \psi_{n-1} \rightarrow \psi_n$, operátoru anihilace $\left(\frac{\partial}{\partial\xi}+\xi\right) \psi_n \rightarrow \psi_{n-1}$. Operátor kreace zvyšuje

hodnotu kvantového čísla o 1, operátor anihilace naopak hodnotu o 1 snižuje.

11.1.2. Převod množiny oscilátorů na soubor fotonů

Monochromatické volné elektromagnetické pole bylo rozloženo na množinu oscilátorů. Proto hledání vlastních hodnot Hamiltonova operátoru \hat{H} (tj. operátoru, který reprezentuje Hamiltonovu funkci *H*) volného elektromagnetického pole s úhlovou frekvencí ω nevyžaduje speciální výpočty - problém se redukuje na hledání energetických hladin harmonických lineárních oscilátorů. Vlastní hodnoty energie *k*-tého lineárního oscilátoru nechť jsou

$$H_{nk} = \left(n_k + \frac{1}{2}\right) \hbar \omega$$
 (výraz $\frac{1}{2} \hbar \omega$ je "nulová energie" oscilátoru).

kde kvantové číslo n_k nabývá hodnot $n_k = 0, 1, 2, ...$ pro všechny lineární oscilátory. Po zanedbání "nulové energie" všech oscilátorů lze pro celkovou energii pole získat vztah

$$H = \sum_{k} n_k \, \hbar \omega \, .$$

Jednotlivé hodnoty kvantových čísel n_k lze považovat za obsazovací čísla energetických stavů lineárních oscilátorů stejným počtem n_k fotonů (hodnoty obsazovacích čísel lze zmenšovat nebo zvětšovat o 1 prostřednictvím operátorů anihilace a kreace). Úvaha o obsazovacích číslech a vztah pro celkovou energii H již umožňují převést množinu oscilátorů na soubor "koherentních" fotonů - sečtením všech obsazovacích čísel n_k lze obdržet obsazovací číslo N monochromatického volného elektromagnetického pole celkovým počtem N fotonů. Kreační operátor, který zvětšuje obsazovací číslo N o 1, bude označen \hat{A}^+ , anihilační operátor, který zmenšuje N o 1, ponese označení \hat{A} . Monochromatické volné elektromagnetické pole lze tedy pokládat za soubor "koherentních" fotonů, z nichž každý má energii

(B51)
$$\varepsilon = \hbar \omega$$
.

11.1.3. Srovnání klasické a kvantové teorie monochromatického elektromagnetického pole

elektromagnetické pole je volným a monochromatickým Klasicky pojaté 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) (B35). klasicky а Typickým rysem pojatého elektromagnetického pole je spojitý přenos energie, který je charakterizován Poyntingovým vektorem (B30a). 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.

11.2. Kvantová teorie volného polychromatického elektromagnetického pole

Často používaným modelem elektromagnetického vlnění je modelová představa rovinné a monochromatické lineárně polarizované elektromagnetické vlny šířící se v daném směru (viz pohybové rovnice (B34) a (B35)). V takové vlně vektor \vec{E} intenzity elektrického pole nemění směr. "Monochromatická lineárně polarizovaná vlna" je především z hlediska "monochromatičnosti" obecně nerealizovatelnou idealizací. V reálném případě je zapotřebí uvažovat nekoherentní směs monochromatických vln se stejnou polarizací, která představuje šíření polychromatického volného elektromagnetického pole uzavřeného v objemu V. To vede ke zkoumání počtů "koherentních" fotonů, které jsou obsaženy ve zkoumané nekoherentní polychromatické směsi a které odpovídají jednotlivým frekvencím a jednotlivým směrům šíření. Počty fotonů představují obsazovací čísla pro jednotlivé monochromatické vlny a lze je získat pomocí **operátorů sekundárního kvantování**. Součástí popisovaného reálného případu je rovněž **interakce elektromagnetického záření s kvantově mechanickou soustavou nabitých částic**. Těmito cestami se bude ubírat budování hledané kvantové teorie.

11.2.1. Poloklasická teorie interakce s elektromagnetickou vlnou

Interakce kvantově mechanické soustavy obsahující Z nabitých částic s monochromatickou lineárně polarizovanou vlnou s frekvencí ω vede k přechodům mezi kvantovými stavy E_n a E_m podle vzorce $E_n = E_m \pm \hbar \omega$. Poloklasická teorie interakce kvantově mechanické soustavy s lineárně polarizovanou monochromatickou vlnou vede k výpočtu pravděpodobnosti excitace soustavy (tj. k výpočtu pravděpodobnosti absorpce fotonu) a k výpočtu pravděpodobnosti stimulované deexcitace soustavy (tj. k výpočtu pravděpodobnosti stimulované emise fotonu). Poloklasická teorie nevede k určení pravděpodobnosti spontánní emise fotonu.

Interagující monochromatická elektromagnetická vlna je obvykle popisována vlnovým vektorem \vec{k} , který je dán vztahem

(B51a)
$$\vec{k} = \frac{2\pi}{\lambda}\vec{n}$$
, kde \vec{n} je jednotkový vektor ve směru šíření elektromagnetického záření.

Velikost *k* vlnového vektoru se nazývá vlnovým číslem. Pro vlnový vektor existují dvě ortogonální lineární polarizace vyjádřené dvěma vzájemně ortogonálními vektory polarizace \overrightarrow{pol} . Tyto dvě ortogonální polarizace budou označovány *pol*. Hybnost fotonu interagujícího monochromatického elektromagnetického záření je dána s užitím (B49), (B51) a (B51a) vztahem

(B51b)
$$\vec{p} = \hbar \vec{k} = \frac{\hbar \omega}{c} \vec{n}$$
.

11.2.2. Operátory sekundárního kvantování

S reprezentací danou obsazovacími čísly jednotlivých monochromatických lineárně polarizovaných vln, které vytvářejí nekoherentní směs, je spojeno sekundární kvantování a jeho operátory. Základními operátory sekundárního kvantování jsou již zavedený kreační operátor \hat{A}^+ , který zvětšuje obsazovací číslo o 1, a rovněž zavedený anihilační operátor \hat{A} , který obsazovací číslo zmenšuje o 1.

Dalším operátorem je operátor \hat{N} počtu fotonů s hybností \vec{p} a polarizací *pol*. Tento operátor lze snadno zkonstruovat pomocí operátorů \hat{A}^+ , \hat{A} ve tvaru \hat{N} (\vec{p} , *pol*) = $\hat{A}^+ \hat{A}$. Vlastní hodnoty tohoto operátoru jsou hledaná obsazovací čísla $N_1, N_2, ..., N_j, ...$ pro počty "koherentních" fotonů spojených s jednotlivými monochromatickými vlnami vytvářejícími nekoherentní směs. Obsazovací číslo N_1 sděluje, že N_1 fotonů má hybnost \vec{p}_1 a polarizaci *pol*₁. Obsazovací číslo N_2 sděluje, že N_2 fotonů má hybnost \vec{p}_2 a polarizaci *pol*₂ atd.

Energie zkoumaného polychromatického volného elektromagnetického pole musí být rovna vlastním hodnotám Hamiltonova operátoru, který bude mít vzhledem k (B51) a (B51b) tvar

$$\hat{H} = \sum_{pol=1}^{2} \sum_{\vec{p}} cp \ \hat{N} \ (\vec{p}, pol) = \sum_{pol=1}^{2} \sum_{\vec{p}} cp \ \hat{A}^{+} \ \hat{A} \ .$$

Klasicky je energie W elektromagnetického pole v objemu V dána pro vakuum vztahem

$$W = \int_{V} u \, \mathrm{d}V = \frac{\varepsilon_0}{2} \int_{V} \left(E^2 + c^2 B^2 \right) \mathrm{d}V = \varepsilon_0 \int_{V} E^2 \mathrm{d}V \,.$$

Tento vztah lze upravovat

- po dosazení za *u* ze vzorce (B30a),

- po použití (B30b) s kalibrační podmínkou (B30c) ve tvaru $\varphi = 0$,

- po vyjádření vektorového potenciálu $\vec{A}(\vec{r},t)$ polychromatického volného elektromagnetického pole uzavřeného v objemu V pomocí vektorových potenciálů jednotlivých monochromatických složek $\vec{A}_{\vec{p}, pol}(\vec{r},t)$ vztahem

$$\vec{A}(\vec{r},t) = \sum_{pol=1}^{2} \sum_{\vec{p}} \vec{A}_{\vec{p},pol}(\vec{r},t),$$

- po dosazení výrazu pro $\vec{A}(\vec{r},t)$ vyjádřeného v komplexním tvaru pomocí Eulerových vzorců za E^2 do výrazu (B30b) (již upraveného zavedením kalibrační podmínky ve tvaru $\varphi = 0$) se objeví komlexně sdružená a komplexní amplituda A^* a A vektorových potenciálů jednotlivých monochromatických složek.

Konečná podoba upraveného vztahu pro W bude

$$W = 2 \varepsilon_0 V c^2 \sum_{pol=1}^2 \sum_p \frac{p^2}{\hbar^2} A^* A.$$

Srovnáním výrazu pro *W* a tvaru Hamiltonova operátoru lze přechod od klasické teorie ke kvantové teorii polychromatického volného elektromagnetického pole charakterizovat podle (B37) operátorem ve tvaru

$$\vec{A}_{\vec{p}, pol}(\vec{r}, t) \otimes \frac{\hbar}{(2\varepsilon_0 cVp)^{\frac{1}{2}}} \hat{O}_{\vec{p}, pol},$$

kde operátor \hat{O} je zkonstruován z kreačního a anihilačního operátoru \hat{A}^+ a \hat{A} . Parciální časová derivace tohoto operátoru má vztah ke svému komutátoru s Hamiltonovým operátorem. Operátor \hat{O} je operátorem polychromatického volného elektromagnetické pole uzavřeného v objemu V. Operátor \hat{O} sekundárního kvantování respektuje reprezentaci obsazovacích čísel.

11.2.3. Srovnání kvantové a kvaziklasické teorie polychromatického elektromagnetického pole

Kvantová teorie polychromatického volného elektromagnetického pole uzavřeného v objemu V umožňuje po zavedení operátoru \hat{O} zkoumat Hamiltonův operátor celého systému, který je složen z Hamiltonova operátoru kvantově mechanické soustavy nabitých částic (při vypnuté interakci s elektromagnetickým polem), z interakčního Hamiltonova operátoru a z Hamiltonova operátoru \hat{H}_{VELMG} volného polychromatického elektromagnetického pole. Vlastní funkce operátoru \hat{H}_{VELMG} lze pro uzavřený objem V zapsat v reprezentaci obsazovacích čísel ve tvaru N1, N2, ..., Nj, .../ N, kde celkový počet fotonů N je dán součtem obsazovacích čísel pro jednotlivé monochromatické složky. Pro celý systém složený z kvantově mechanické soustavy nabitých částic, polychromatického volného elektromagnetického pole а "zapnuté" interakce mezi nabitými částicemi a elektromagnetickým polem se vedle pravděpodobností absorpce fotonu a stimulované emise fotonu objeví i pravděpodobnost spontánní emise. Důsledkem je změna tvaru vlastní funkce operátoru \hat{H}_{VELMG} na tvar např. $N_1, N_2, ..., N_j \pm 1, .../ N \pm 1$. Změna tvaru vlastní funkce poukazuje na nezávislost pravděpodobností absorpce a obou emisí na přítomnosti fotonů s jinou hybností a polarizací.

Při přechodu k nekonečně velkému objemu se objeví potřeba přechodu od kvantové nestatistické fyziky ke kvantové statistické fyzice. V rámci tohoto přechodu bude zapotřebí pracovat s kvantovým statistickým souborem volných částic (obvykle grandkanonickým statistickým souborem tvořeným makrosystémy Boseho plynu), s kvantovou rozdělovací funkcí a kvantovými souborovými hodnotami. Praktická uskutečnitelnost přechodu ke statistické fyzice bude spojena s kvantováním fázového prostoru a s použitím kvaziklasického statistického přístupu. Konkrétním výsledkem může být odvození výrazu pro spektrální hustotu záření např. v podobě Planckova vyzařovacího zákona pro záření černého tělesa.

11.3. 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, "Gaussián"), pak bude odděleně popsána vlnová a korpuskulární stránka fotonu.

11.3.1. Vlnový balík jako model fotonu

Pohybový zákon vlnění je dán vztahem (B18). Nechť se elektromagnetická vlna šíří v ose x, nechť vektor intenzity \vec{E} má nenulovou složku E_y a vektor magnetické indukce \vec{B} má nenulovou složku B_z . Elektrická i magnetická vlna jsou vzhledem k (B31) a (B32) propojeny ve vlně elektromagnetické. V tomto jednoduchém případě je pohybový zákon elektromagnetického vlnění dán podle (B18) vztahy

$$E_y = E_0 \cos \omega \left(t - \frac{x}{c} \right) = E_0 \cos \left(\omega t - kx \right), \ B_z = B_0 \cos \left(\omega t - kx \right),$$

kde *k* je vlnové číslo dané podle (B51a) vztahy $k = 2\pi/\lambda = \omega/c$. Vzhledem k později použitým tvarům součtových vzorců pro goniometrické funkce byla v pohybovém zákoně (B18) zvolena goniometrická funkce cosinus místo goniometrické funkce sinus.

Vlnový balík lze matematicky popsat interferencí dvou elektromagnetických vln (pro popis budou zvoleny pouze dvě vlny elektrické o stejných amplitudách E_0 , o úhlových

frekvencích ω_1 a ω_2 a s odpovídajícími vlnovými čísly k_1 a k_2). S využitím součtových vzorců lze získat pro výslednou elektrickou vlnu

$$E = 2E_0 \cos\left(\frac{\omega_1 - \omega_2}{2}t - \frac{k_1 - k_2}{2}x\right) \cos\left(\frac{\omega_1 + \omega_2}{2}t - \frac{k_1 + k_2}{2}x\right).$$

Člen

$$2E_0\cos\left(\frac{\omega_1-\omega_2}{2}t-\frac{k_1-k_2}{2}x\right)$$

představuje "dlouhou" vlnu s dlouhou vlnovou délkou a s nízkou frekvencí a šířící se rychlostí rovnou rychlosti světla c. V "dlouhé" vlně již lze rozeznat jednoduché modely vlnových balíků (viz obrázek Obr. 5). Člen

$$\cos\left(\frac{\omega_1+\omega_2}{2}t-\frac{k_1+k_2}{2}x\right)$$

představuje rychle se měnící vlnovou strukturu s krátkou vlnovou délkou a s vysokou frekvencí "uvnitř" vlnových balíků "dlouhé" vlny.



Zobecnění vlnového balíku pro interferenci nekonečného počtu vln ze spojitého intervalu s různými frekvencemi $\omega = ck$ lze zapsat ve tvaru

$$E(x,t) = \int_{-\infty}^{+\infty} E_0 f(k) g(\omega t - kx) dk = \int_{-\infty}^{+\infty} E_0 f(k) g\left(ck\left(t - \frac{x}{c}\right)\right) dk,$$

kde člen $E_0 f(k)$ představuje "dlouhou" vlnu popsanou tzv. spektrální funkcí f(k) a člen $g(\omega t - kx)$ je rychle se měnící strukturou uvnitř vlnového balíku. Po výběru izolovaných vlnových balíků si lze představit intenzitu elektrického pole soustředěnou v určitých oblastech prostoru, které se opět šíří rychlostí světla *c*.

Spektrální funkce f(k) bude vybrána jako Gaussovo normálního rozdělení

$$\mathbf{f}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}\right).$$

Z <u>Dodatku 5, Příklad 13</u> vyplývá, že grafem spektrální funkce f(k) je typická "zvonová" Gaussova křivka. Bude-li Gaussova křivka redukována na vlnová čísla *k* z bezprostředního okolí vlnového čísla k_0 (tj. na vlnová čísla *k*, pro která je $f(k) \neq 0$ velmi výrazně), lze si podle obrázku Obr. 6 představit uzavřený "zvon - Gaussián" postupující po ose x. Postupující "Gaussián" je vhodným nástrojem pro pravděpodobnostní popis vlnového balíku.



11.3.2. Vlnová stránka fotonu

Nositelem kvanta elektromagnetické energie $\hbar\omega_0$ ($k_0 = \omega_0/c$) 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 - násobení ψ komplexním sdružením ψ^* (tj. $\psi\psi^*$) má význam hustoty pravděpodobnosti výskytu látkové částice. S použitím analogie je možné součin spektrální funkce f(k) s jejím komplexním sdružením $f(k)^*$, tj.

$$f(k) f(k)^*$$

interpretovat jako hustotu pravděpodobnosti vlnového čísla k fotonu. Vlnový balík se spektrální funkcí f(k) jako "Gaussiánem" a celkovou energií $\hbar \omega_0$ ($\omega_0 = ck_0$) 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.

11.3.3. 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 dosazení nulové klidové hmotnosti fotonu vztahy

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

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 zánikového záření je však již stejně hmotný jako elektron, jsou však již známy fotony těžší než vodíkový atom.

11.4. Elektromagnetické záření

11.4.1. 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 **pojímat 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), 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 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" elektronů při interakci s elektrostatickým polem atomu (brzdné 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 .

11.4.2. Elektromagnetické spektrum

Obecně pojatá optika je naukou především o elektromagnetickém záření (o elektronové a iontové optice vycházející z korpuskulárního záření jako osových svazků látkových částic byla učiněna zmínka v 9.kap., odst.9.1.), zúženě 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 uveden v Tab. 6.

Sloupce tabulky postupně uvádějí: <u>název záření</u>, <u>přibližné hranice pro vlnové délky</u> (lze si všimnout, že např. pro tvrdé rentgenové záření a zánikové záření se hranice vlnových délek překrývají), <u>frekvenci v Hz</u> (hranice jsou uvedeny jen schematicky, neodpovídají přesně nejmenší a největší vlnové délce), <u>energii jednoho fotonu v eV</u> (hranice opět uvedeny jen schematicky, energie nižší než 10^{-6} eV již ztrácejí svou kvantovou výpovědní hodnotu, pro tuto oblast již mnohé směřuje ke klasicky pojatému elektromagnetickému vlnění), <u>charakteristickou teplotu Θ </u> (teplota vyplývající ze srovnání "kvantové" energie fotonu a "klasické" energie *k* Θ , kde *k* je Boltzmannova konstanta. Teploty Θ nižší než 10^{-2} K ztrácejí smysl, neboť jde v podstatě o teplotu absolutní nuly - jsou uvedeny jen z formálních důvodů).

Druh záření	Vlnová délka λ	Frekvence v	Energie fotonu	Charakteristická
(název)	v metrech (m)	v Hertzích (Hz)	$\varepsilon = \hbar \omega$ (eV)	teplota
				$\Theta = \hbar \omega / k (\mathbf{K})$
Rozhlasové vlny				
dlouhé	1 – 15 km	$10^{6} - 10^{5}$	$10^{-9} - 10^{-10}$	$10^{-5} - 10^{-6}$
střední	200 – 700 m	$10^7 - 10^6$	$10^{-8} - 10^{-9}$	$10^{-4} - 10^{-5}$
krátké	2 – 100 m	$10^8 - 10^7$	$10^{-7} - 10^{-8}$	$10^{-3} - 10^{-4}$
Hertzovy		109 108	10-6 10-7	10-1 10-2
viny	0,1-2 m	$10^{\circ} - 10^{\circ}$	$10^{-6} - 10^{-7}$	$10^{-1} - 10^{-2}$
Mikroylny	1 – 100 mm	$10^{11} - 10^{10}$	$10^{-4} - 10^{-5}$	$10^1 - 10^{-1}$
Tenelné	1 100 1111	10 10	10 10	10 10
záření	10 – 1000 µ m	$10^{13} - 10^{12}$	$10^{-1} - 10^{-3}$	$10^3 - 10^1$
Světlo	p.			
infračervené	0,75 – 10 μ m	$10^{14} - 10^{13}$	$10^0 - 10^{-1}$	$10^4 - 10^3$
Světlo				
viditelné	0,35 – 0,75 μ m	$10^{15} - 10^{14}$	$10^1 - 10^0$	$10^5 - 10^4$
Světlo				
ultrafialové	$0,014 - 0,35 \ \mu \ m$	$10^{16} - 10^{15}$	$10^2 - 10^1$	$10^6 - 10^5$
Měkké RTG	10 1000 Å			
záření	10 - 1000 A	$10^{17} - 10^{16}$	$10^3 - 10^2$	$10^7 - 10^6$
Tvrdé RTG				
záření	1 - 10 A	$10^{18} - 10^{17}$	$10^4 - 10^3$	$10^8 - 10^7$
Měkké	0.1.1 Å			
záření γ	0,1 - 1 Л	$10^{19} - 10^{18}$	$10^5 - 10^4$	$10^9 - 10^8$
Tvrdé	000.1 - 0.1 Å			
záření γ	000,1 - 0,1 11	$10^{21} - 10^{19}$	$10^7 - 10^5$	$10^{11} - 10^9$
Zánikové				
záření	$10^{-13} - 10^{-12} \text{ m}$	$10^{21} - 10^{20}$	$10^7 - 10^6$	$10^{11} - 10^{10}$
Penetrantní				
záření	$10^{-15} - 10^{-13} \text{ m}$	$10^{23} - 10^{21}$	$10^9 - 10^7$	$10^{13} - 10^{11}$

Tab. 6 Elektromagnetické spektrum

Stručný popis jednotlivých druhů záření uvedených v tabulce elektromagnetického spektra bude obsahovat: typický zdroj záření v přírodě, umělý zdroj záření, způsob detekce záření a schopnost ionizovat atomy prostředí.

Rozhlasové vlny (neionizující záření)

Typickým zdrojem v přírodě jsou přechody v systému jaderných spinů (především v oblasti velmi krátkých vln), mezi umělé zdroje patří vedle vysílače s vysílací anténou (otevřeného elektrického obvodu) např. magnetrony a klystrony (speciální elektronky ve

vysokofrekvenčních generátorech, které mohou pracovat jako vysokofrekvenční oscilátory o velmi vysokých frekvencích řádově GHz). Detekce rozhlasových vln využívá přijímačů s přijímací anténou, důležitou součástí je činnost např. krystalových detektorů, jejichž činnost je v podstatě činností usměrňovací.

Mikrovlny (neionizující záření)

Typickým zdrojem v přírodě jsou přechody v systému elektronových spinů, mezi umělé zdroje patří radary, jejichž vysílací anténa vyzáří najednou značnou elektromagnetickou energii - pak se vysílání přeruší. Tyto pulsy se opakují mnohokrát za 1 s. Detekce je založena na přepojení antény na přijímač po každém pulsu - např. po tisícině sekundy se vše opakuje.

Tepelné záření (neionizující záření)

Typickým zdrojem v přírodě jsou všechna tělesa s teplotou vyšší než je teplota absolutní nuly. V těchto tělesech se odehrávají přechody mezi kvantovými stavy rotačními (např. molekul) a vibračními (např. molekul). Umělé zdroje jsou rovněž spojeny s použitím vhodného tělesa zahřátého na potřebnou teplotu. Mezi detektory patří např. baterie termočlánků, termokamery.

Světlo infračervené, viditelné, ultrafialové (neionizující záření)

Typickým zdrojem v přírodě jsou přechody mezi kvantovými stavy vnějších elektronů v atomech, ale také mezi vibračními stavy molekul. Mezi umělé zdroje patří např. výboj v plynu, obloukový a jiskrový výboj, rozžhavená vlákna. Vhodnými detektory jsou vedle termočlánků také fotobuňky a fotonásobiče.

Rentgenové záření (ionizující záření)

Typickým zdrojem v přírodě jsou přechody mezi kvantovými stavy vnitřních elektronů v atomech. Mezi umělé zdroje patří především rentgenka. Vhodnými detektory jsou Geigerovy a scintilační počítače a ionizační komůrky, ale také vhodné filmy. Při detekci se využívají především luminiscenční a fotochemické účinky rentgenového záření.

Gama záření (ionizující záření)

Typickým zdrojem v přírodě jsou vedle reakcí fundamentálních částic přechody mezi kvantovými stavy v jádrech atomů. Mezi umělé zdroje patří vedle uměle vyrobených radionuklidů (např. v radionuklidových generátorech) také urychlovače částic, např. betatrony

a elektronové synchrotrony, které mohou poskytovat gama záření vlnové délky až 10⁻¹⁵ m (formálně takové gama záření patří již do oblasti zánikového a penetrantního záření - tzv. ultragama záření). Mezi detektory lze opět zařadit scintilační počítače, krystalové počítače a ionizační komůrky s vhodnými rozsahy voltampérových charakteristik.

11.4.3. 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 $v_0 = \omega_0/2\pi$ se nazývá charakteristickou frekvencí kovu. Einsteinova fotoelektrická rovnice bude mít tedy tvar

(B53) $\hbar\omega = T + \hbar\omega_0$ (*T* je maximální možná energie fotoelektronu).

Např. pro sodík je $\nu_0 = 5,15.10^{14}$ Hz, fotoelektrický jev nastává již při dopadu viditelného světla s vlnovou délkou kratší než 5821 Å. 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 $v_{\text{max}}=\omega_{\text{max}}/2\pi$ (nejkratší vlnovou délku λ_{min}) lze napsat Duanův-Huntův zákon ve tvaru

(B54)
$$\hbar \omega_{\text{max}} = eU, \ U\lambda_{\text{min}} = \frac{hc}{e} = 1,24.10^{-6} \text{ Vm}.$$
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. 10⁵ 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 v_{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 nespojité čárové spektrum, složené z jednotlivých čar. Vlnové délky těchto čar odpovídají materiálu anody, tj. struktuře 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 antikatody v tuhové 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

$$\hbar\omega + m_0 c^2 = \hbar\omega' + mc^2$$

(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

$$(mv)^2 = p_v^2 + p_v'^2 - 2 p_v p_v' \cos \theta$$

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

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

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

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. $\hbar\omega \ll m_0c^2$) 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 zánikového záření. Částice a antičástice anihilují, tj. "vyzáří se" proměnou např. ve dva fotony velmi tvrdého záření. Jelikož klidová energie elektronu m_0c^2 je 0,511 MeV, vzniklý foton má frekvenci odpovídající rovnosti $\hbar \omega = m_0c^2$, tj. $v = 1,24.10^{20}$ 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

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

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.

11.5. Relativistický elektron v elektrostatickém poli

Nechť homogenní elektrostatické pole působí na elektron, který byl v čase t=0 v klidu. Stálý směr intenzity elektrostatického pole nechť je totožný se směrem kladné poloosy osy x.

Jednorozměrná pohybová rovnice relativistické dynamiky má tvar (B47), s ní je spojen vztah (B48) pro hmotnost *m* fyzikálního objektu za pohybu. Ze vztahu (B24) pro Lorentzovu sílu pak vyplývá výraz pro sílu, kterou působí elektrostatické pole na elektron.

Nyní je již možné použít běžný newtonovský formalismus, který v rámci relativistické dynamiky vede od relativistické pohybové rovnice k nalezení pohybového zákonu (B2). Jednotlivé kroky formalismu budou stručně komentovány.

a) Napsání jednorozměrné relativistické pohybové rovnice (B47) a její úprava

$$-eE = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(m\dot{x}) \implies \mathrm{d}(m\dot{x}) = -eE \,\mathrm{d}t$$

b) První integrace rovnice, dosazení za *m* ze vztahu (B48), úprava rovnice a nalezení vztahu pro rychlost \dot{x}

$$\frac{m_0}{\sqrt{1-\frac{\dot{x}^2}{c^2}}} \cdot \dot{x} = -eEt \implies \dot{x}^2(c^2+a^2t^2) = a^2t^2c^2 \implies \dot{x} = \frac{at}{\sqrt{1+\left(\frac{at}{c}\right)^2}}, \text{ kde } a = -\frac{eE}{m_0}$$

c) Druhá integrace rovnice s cílem nalézt pohybový zákon

$$x = \int_{0}^{t} \frac{at}{\sqrt{1 + \left(\frac{at}{c}\right)^2}} \, \mathrm{d}t,$$

po použití substituce

$$y = \left(\frac{at}{c}\right)^2$$

se objeví na rozdíl od parabolické závislosti dráhy x na čase t při pohybu nerelativistického elektronu hyperbolická závislost dráhy x na čase t, tj. pohybový zákon ve tvaru

$$x = \frac{c^2}{a} \left[\sqrt{1 + \left(\frac{at}{c}\right)^2} - 1 \right], \text{ po úpravě } (x + \frac{c^2}{a})^2 - c^2 t^2 = \frac{c^4}{a^2}$$

d) Interpretace pohybového zákona a vztahu pro rychlost

Po znázornění pohybového zákona x = x(t) v pravoúhlých souřadnicích se objeví hyperbola s asymptotou, jejíž směrnice je rychlost světla *c*. Rychlost elektronu stále stoupá, ale rychlosti světla nedosáhne. Tento poznatek potvrzující základy speciální teorie relativity okamžitě vyplývá z výpočtu limity

$$\lim_{t \to \infty} \dot{x}.$$

Po dosazení za \dot{x} ze vztahu po provedené první integraci lze obdržet výsledek

$$\lim_{t \to \infty} \dot{x} = c.$$

Pohyb relativistického elektronu za působení stálé síly po přímce je hyperbolickým pohybem. Proto nejde o pohyb rovnoměrně zrychlený, který je v rámci klasické mechaniky buzen stálou silou.

Pro obecný pohyb elektronu v elektrostatickém poli lze odvodit jednoduchý vztah pro získané energie a rychlosti při průchodu napětím *U*. Tento vztah vyplývající z (B49) lze zapsat

$$T = (m - m_0) c^2 = eU$$
 (pro pomalé elektrony lze dosadit za $T = \frac{1}{2} m_0 v^2$).

Pak lze zjistit, že při urychlujícím napětí 10² V lze dosáhnout rychlosti asi 2 % rychlosti světla a hmotnost za pohybu je jen nepatrně odlišná od klidové hmotnosti elektronu, avšak při urychlujícím napětí 3,1 MV lze dosáhnout rychlosti 2,97.10⁸ m.s⁻¹ (téměř rychlosti světla) při vzrůstu hmotnosti až na sedminásobek klidové hmotnosti.

Při urychlujícím napětí 3 MV má elektron energii 3 MeV. Při dalším zvyšování energie elektronu elektrostatickým polem, která by měla být pro vznik velmi tvrdého rentgenového záření několik desítek až set MeV, vznikají vzhledem k dalšímu růstu hmotnosti elektronu technické problémy. Z těchto příčin byly sestrojeny místo lineárních urychlovačů elektronů urychlovače kruhové. Na principu indukčního urychlovače betatron využívající vakuových prstencových trubic, v nichž je elektron udržen vhodným magnetickým polem, na principu fázové stability elektronové synchrotrony. Elektronové synchrotrony spojují výhody elektrostatického urychlování a indukčního urychlování. Např. u synchrotronu se silnou fokusací (využití střídavého gradientu magnetického pole) lze dosahovat u elektronů energie v řádu GeV (např. při energii 1 GeV je rychlost elektronů menší jen o 0,4 m.s⁻¹ než je rychlost světla ve vakuu a jejich hmotnost je 1960 m_0).

12. Klasické, kvantové a relativistické aplikace jaderné fyziky (Přílohy B1 až B8)

12.1. Stavba atomového jádra

a) **Jádro je složeno** z protonů a neutronů, tj. z nukleonů. Protonové (atomové) číslo Z udává počet protonů, nukleonové (hmotnostní) číslo A udává počet nukleonů. Prvek je charakterizován protonovým číslem Z. Různé izotopy prvku jsou určeny stejným Z a odlišným A, různé izobary jsou určeny stejným A a odlišným Z, nuklid je dán stejným Z a stejným A, izomer je dán vedle stejného Z a stejného A odlišnými radioaktivními vlastnostmi.

b) Koeficient stěsnání jádra *P* je bezrozměrné číslo definované vztahem $P = (A_r - A)/A$. A_r je relativní atomová hmotnost, která udává, kolikrát je atom hmotnější než 1/12 nuklidu uhlíku ${}_{6}^{12}$ C. Hmotnost 1/12 nuklidu uhlíku ${}_{6}^{12}$ C definuje atomovou hmotnostní konstantu (atomovou hmotnostní jednotku) m_u a má hodnotu $m_u = 1,66.10^{-27}$ kg. Hmotnost *m* atomu s relativní atomovou hmotností A_r je $m = A_r.m_u$. Relativní atomová hmotnost protonu je 1,007, neutronu 1,009, elektronu 0,00055, lehkého vodíku 1,00755.

Koeficient stěsnání *P* je roven nule jen pro izotop uhlíku ${}_{6}^{12}$ C, schematické znázornění závislosti *P* na nukleonovém čísle na obrázku Obr. 7 jeví výrazné minimum pro středně těžké prvky (*A*~50).



c) **Hmotnostní defekt jádra** B_j je dán vztahem $B_j=Z.m_p+(A-Z)m_n-m_j$, kde m_p a m_n jsou klidové hmotnosti protonu a neutronu, m_i je klidová hmotnost jádra.

Vazební energie jádra je pak dána podle (B49) vztahem $W_j = B_j c^2$ (tuto energii je třeba jádru dodat, aby se již vytvořené jádro rozložilo na volné nukleony). Vazební energie jádra vztažená na jeden nukleon je mírou stability jádra a jeví maxima pro jádra s plně obsazenými slupkami protony a neutrony (viz magická čísla vyjadřující plné obsazení slupek ve slupkovém modelu jádra), pro A > 30 se vazební energie vztažená na jeden nukleon již příliš nemění. Tento fakt je v souladu s poznatkem, že jaderné síly jsou síly krátkého dosahu a uplatňují se hlavně mezi dvěma sousedními nukleony. Schematicky znázorněná závislost vazební energie vztažené na jeden nukleon (bez maxim pro jádra s nižšími nukleonovými čísly a s plně obsazenými slupkami protony a neutrony) je na obrázku Obr. 8.



d) **Poloměr jádra** má úzkou vazbu např. na Hamiltonův operátor $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ pro protony a neutrony v jádře (viz slupkový model jádra v 9.kap., odst.9.4.). Operátor potenciální energie \hat{V} je složen ze záporné potenciální energie přitažlivé jaderné síly a z kladné potenciální energie odpudivé Coulombovské síly. Průběh celkové potenciální energie V v závislosti na vzdálenosti od "středu" jádra odráží velkou převahu jaderných sil nad silami Coulombovskými v rámci krátkého dosahu jaderných sil a převahu Coulombovských sil ve větších vzdálenostech, v nichž již jaderné síly nepůsobí. Grafické znázornění průběhu výsledného potenciálu φ (potenciální energie V vztažené na jednotkový náboj) v okolí jádra s nábojem Ze má na obrázku Obr. 9 v první části (dominují jaderné síly) tvar pravoúhlé jámy, která je obklopena elektrostatickým potenciálového valu na okraji potenciálové jámy je rovna elektrostatickému potenciálu φ_0 ve vzdálenosti r_j , kde r_j je poloměr potenciálové jámy

$$\varphi_0 = \frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \cdot \frac{Ze}{r_j} \, .$$



Právě poloměr r_j potenciálové jámy lze prohlásit za poloměr jádra. Empiricky zjištěný vztah pro poloměr jádra, schematicky znázorněný na obrázku Obr. 10, je dán závislostí

$$r_i = R \sqrt[3]{A}$$

kde konstanta $R \sim 1.3.10^{-15} \text{ m} = 1.3 \text{ fm}$ má význam dosahu jaderných sil.



e) **Spin jádra** je spojen se zjištěním, že protony i neutrony jsou fermiony s velikostí spinového momentu hybnosti $\hbar/2$. Otázky celkového spinu jádra a spinorbitální interakce byly naznačeny v 9.kap., odst.9.4. v rámci výkladu slupkového modelu jádra. Např. celkový spin a magnetický moment jader hélia (alfa částic) je nulový, jádra hélia se chovají jako bosony

12.2. Jaderné záření

12.2.1. Přirozená a umělá radioaktivita

Procesy v jádře atomu jsou často spojeny s přeměnou nestabilních jader v jádra stabilní (někdy i se změnou chemické podstaty prvku) - průvodním jevem je vysílání jaderného

záření. **Vysílání jaderného záření se nazývá radioaktivitou.** Při vysílání jaderného záření se obvykle mění původní prvky (mateřské prvky) na prvky dceřinné.

Radioaktivita se dělí na přirozenou (vysílání jaderného záření spontánně se měnícími jádry, která se vyskytují v přírodě) **a umělou** (vysílání jaderného záření měnícími se jádry, která byla vyrobena uměle např. v urychlovačích částic nebo jaderných reaktorech).

Přirozeně radioaktivní prvky byly objeveny v r.1896 Becquerelem. Při přirozené radioaktivní přeměně jsou vysílána záření alfa, beta a gama. Přirozeně radioaktivní prvky tvoří čtyři radioaktivní rozpadové řady končící stabilními izotopy olova nebo vismutu. Nukleonová čísla členů thoriové řada odpovídají vzorci 4*n*, řady neptuniové vzorci 4*n*+1, řady urano-rádiové vzorci 4*n*+2 a řady aktiniové vzorci 4*n*+3. Při vysílání alfa záření se zmenšuje nukleonové číslo o 4, protonové číslo o 2 (alfa částicemi jsou jádra hélia, všechny alfa částice vysílané radioaktivním prvkem mají stejnou energii). Při vysílání negativního beta záření se nukleonové číslo nemění a protonové se zvětšuje o 1 (beta částicemi jsou elektrony, v jádru se při emisi beta částice mění neutron na proton za současného vyslání elektronu a elektronového antineutrina, beta záření má spojité spektrum). Posouvání prvku v Mendělejevově periodické tabulce v důsledku radioaktivní alfa a beta přeměny je nazýváno Fajansovým-Soddyho posuvným pravidlem. Zatímco alfa a beta záření má nespojité čárové spektrum) je jevem průvodním. Obvykle vzniká při obnovování rovnováhy jádra porušené alfa nebo beta radioaktivitou.

K doložení kvantově mechanického charakteru přirozeně radioaktivních rozpadů lze krátce uvést teorii alfa rozpadu. Alfa částice se nachází v potenciálové jámě jádra (viz Obr. 9), která je pro těžká jádra obklopena potenciálovým valem o výši asi 25 MeV. Alfa částice mají při rozpadu energie jen od 4 do 9 MeV (podle konkrétního přirozeně radioaktivního prvku) - tato energie je podstatně menší než je výška potenciálového valu, která představuje podle klasických představ energii potřebnou k úniku z jádra.

Na základě použití hlavní metody kvantové mechaniky pro stacionární stavy (viz 9.kap., odst.9.2.) lze snadno prokázat existenci tunelového jevu - existuje nenulová pravděpodobnost "průchodu" částice potenciálovým valem, i když energie *E* (reprezentovaná Hamiltonovým operátorem) této částice je nižší než výška potenciálového valu. Lze také prokázat existenci nadbariérového odrazu od valu - existuje nenulová pravděpodobnost "odrazu" částice od potenciálového valu, i když energie E částice je vyšší než výška potenciálového valu.

Bude-li uvažován jednorozměrný případ (pohyb alfa částice ve směru kladné poloosy osy x), lze Hamiltonovy operátory $\hat{H}_I, \hat{H}_{II}, \hat{H}_{II}$ alfa částice před valem, ve valu a za valem zapsat podle (B37) ve tvarech

$$\hat{H}_{I} = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dx^{2}}, \quad \hat{H}_{II} = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dx^{2}} + V, \quad \hat{H}_{III} = -\frac{\hbar^{2}}{2m}\frac{d^{2}}{dx^{2}}$$

Pro tyto Hamiltonovy operátory lze napsat podle (B38) stacionární Schrödingerovy rovnice. Řešením stacionárních Schrödingerových rovnic lze podle (B38) nalézt systémy vlastních funkcí a systémy vlastních hodnot před valem, ve valu a za valem. Za potenciálovým valem (schematicky znázorněným pravoúhlým tvarem) lze nalézt vlastní funkci ψ_{III} , která vynásobená komplexním sdružením ψ_{III}^* dává hustotu pravděpodobnosti výskytu alfa částice za potenciálovým valem. Tato hustota pravděpodobnosti $\psi_{III}.\psi_{III}^*$ vychází nenulová. "Průchod" potenciálovým valem jádra je možný, navíc dojde po průchodu k urychlení odpudivým elektrostatickým potenciálem. Tím jsou experimentálně pozorované alfa rozpady teoreticky zdůvodněny.

Alfa částice jsou emitovány (na rozdíl např. od protonů nebo jader ${}^{3}_{2}$ He) na základě přirozeně radioaktivního rozpadu proto, že mají vysokou vazební energii (viz 12.kap., odst.12.1.). Např. alfa rozpad ${}^{235}_{92}$ U je provázen uvolněním energie 5,4 MeV. Kdyby měl být emitován proton, musela by být dodána z vnějšího zdroje energie asi 6,1 MeV, kdyby mělo být emitováno jádro ${}^{3}_{2}$ He, musela by být zevně dodána energie dokonce 9,6 MeV.

Mezi jiné případy tunelových jevů lze uvést např. studenou emisi elektronů z kovu (jen několik elektronů má energii *E* větší než výška potenciálového valu kovu - termoemise je tedy nepatrná) nebo autoionizace atomů (po přiložení silného vnějšího pole se šíře potenciálového valu pro elektrony v kovu zúží a "tunelová" autoionizace jako tunelový "průchod" elektronu valem se stane pravděpodobnější).

Pravděpodobnost *P* průchodu konkrétní alfa částice potenciálovým valem jádra je velmi malá. Nechť alfa částice existuje samostatně uvnitř těžkého jádra a nechť koná kmitavý pohyb s frekvencí $v = v/2r_j$, kde v je rychlost alfa částice uvnitř potenciálové jámy o poloměru r_j (viz Obr. 9). Pak lze rozpadovou konstantu λ jako pravděpodobnost rozpadu za jednotku času vyjádřit vztahem $\lambda = v.P$. Jestliže budou vzaty v úvahu typické hodnoty pro $v = 2.10^7$ m.s⁻¹ a $r_j = 10^{-14}$ m, pak frekvence v "nárazů" na potenciálový val vychází $v \sim 10^{21}$ Hz. Přes obrovskou frekvenci čeká alfa částice v průměru až 10¹⁰ let, než z některého jádra unikne (tj. $\lambda \sim 3.10^{-17}$). To vypovídá o nepatrnosti pravděpodobnosti *P* tunelového jevu alfa částice.

Uměle radioaktivní prvky lze získat transmutací (jadernou reakcí jádra s jinými částicemi) původně stabilního jádra. Transmutace lze docílit ostřelováním prvků např. protony, deuterony, alfa částicemi, elektrony, ionty, zvláště účinné je ostřelování neutrony. Uměle radioaktivní jaderná záření mohou mít rozmanitou povahu (např. při pozitivním beta

záření jsou beta částicemi pozitrony, v jádru se pak mění proton na neutron za současného vyslání pozitronu a elektronového neutrina).

12.2.2. Rozpadový zákon

Rozpadový (přeměnový) zákon popisuje ubývání mateřského prvku s časem. Vychází z předpokladu, že pravděpodobnost radioaktivní přeměny jádra během zvoleného časového intervalu je pro každý mateřský prvek konstantní (bez ohledu na poloze časového intervalu na časové stupnici). Nechť λ označuje pravděpodobnost přeměny mateřského prvku v jednotkovém časovém intervalu, nechť dn označuje počet mateřských prvků přeměněných v dceřinné za čas dt a nechť n je počet mateřských prvků v čase t. Pak lze pro pravděpodobnost dp přeměny v intervalu dt napsat vztah (viz Dodatek 5, Příklad 14)

 $dp = \lambda dt = -\frac{dn}{n}$ (znaménko minus popisuje ubývání mateřských prvků s časem).

Integrací této diferenciální rovnice lze získat rozpadový exponenciální zákon ve tvaru

(B57)
$$n = n_0 \exp(-\lambda t) = n_0 \exp\left(-\frac{\ln 2}{T} t\right) = n_0 \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{1}{T}}$$
 (viz Dodatek 5, Příklad 14).

V rozpadovém zákoně je n_0 počet mateřských prvků v čase t=0, λ se nazývá rozpadovou (přeměnovou) konstantou, T je poločas rozpadu jako doba, za kterou se pravděpodobně přemění polovina mateřských prvků v prvky dceřinné (tj. za čas t=T bude $n=n_0$ /2). Rozpadový (přeměnový) zákon se potvrzuje nejen pro přirozeně radioaktivní záření, ale i pro všechny druhy záření uměle radioaktivních (pozitronová, protonová, neutronová). Na obrázku Obr. 11 je schematicky znázorněna závislost poměrného množství mateřských prvků (plná křivka) a dceřinných prvků (čárkovaná křivka) na počtu poločasů rozpadu.



Např. při přeměnách mateřských prvků spojených s alfa zářením dosahují alfa částice rychlosti kolem 2 % rychlosti světla a jejich energie leží zhruba mezi 4 MeV a 9 MeV. Srovnání energie ε_{α} alfa částic s pravděpodobností rozpadu mateřského prvku jako alfa zářiče (tj. s rozpadovou či přeměnovou konstantou λ) ukazuje, že mezi těmito veličinami existuje přímá závislost. Kvantitativně je tato závislost vystižena Geigerovým-Nuttalovým zákonem

$$\log \lambda = A_1 + A_2 \log \varepsilon_{\alpha}$$

 $(A_1, A_2 \text{ jsou empirické konstanty})$. Energii ε_{α} alfa částic lze s dostatečnou přesností vyjádřit jejich počáteční kinetickou energií T_{α} . Pak lze Geigerův-Nuttalův zákon přepsat ve tvaru

$$\log \lambda = A_1 + A_2 \log T_{\alpha}$$

Obrázek Obr. 12 jen schematicky ukazuje, že empirická konstanta A_2 má přibližně stejnou hodnotu pro všechny přirozené alfa zářiče, kdežto empirická konstanta A_1 se pro radioaktivní řady urano-rádiovou, thoriovou a aktiniovou poněkud liší.





Nechť dolet *D* je délka dráhy, na níž ionizující látková částice ztratí při interakci s prostředím počáteční kinetickou energii a zastaví se. Jelikož pro daný alfa zářič mají všechny alfa částice stejnou energii T_{α} , má každý alfa zářič svůj charakteristický dolet. Proto lze dolet *D* zavést do Geigerova-Nuttalova zákona místo počáteční kinetické energie např. v podobě log $\lambda = A_1 + A_3 \log D$, kde A_3 je nová empirická konstanta.

Je-li i dceřinný prvek radioaktivní (s rozpadovou konstantou λ' , s poločasem rozpadu T'a s počtem n' dceřinných prvků v čase t), může pro něj nastat radioaktivní rovnováha (počet dceřinných prvků se dlouhodobě nemění) za podmínky $\lambda n = \lambda' n'$, tj. n/T = n'/T'. Podmínku radioaktivní rovnováhy lze snadno odvodit z (B57).

12.2.3. Absorpční zákon

Jaderná záření interagují s prostředím - jeho částice jsou při těchto interakcích pohlcovány, přeměňovány, rozptylovány. Nechť n_0 je počet částic n_0 , který dopadne na rozhraní s danou látkou (tj. pro x = 0). Počet *n* částic pronikajících do vzdálenosti x od rozhraní s danou látkou se zmenšuje s rostoucí tloušťkou x průniku do příslušné látky.

Odvození absorpčního zákona vychází z předpokladu, že pravděpodobnost úbytku částice s původními parametry je během zvoleného intervalu tloušťky pro každou částici konstantní (bez ohledu jak na polohu intervalu vzdálenosti na stupnici tloušťky, tak i na energii částice). Nechť μ označuje pravděpodobnost úbytku částice v jednotkovém intervalu tloušťky, nechť dn označuje úbytek částic na tloušťce dx a nechť n je počet částic, které pronikly do tloušťky x vrstvy příslušné látky. Pak lze matematicky cestou identickou cestě odvození rozpadového zákona (i když fyzikální obsah je diametrálně odlišný) získat tvar absorpčního zákona (viz Dodatek 5, Příklad 15)

(B58)
$$n = n_0 \exp(-\mu x) = n_0 \exp(-\frac{\ln 2}{a}x) = n_0 \left(\frac{1}{2}\right)^{\frac{x}{a}}, \quad I = I_0 \exp(-\mu x).$$

V absorpčním zákoně se μ nazývá koeficientem absorpce, *a* je polotloušťka (polovrstva) příslušné látky jako tloušťka vrstvy, na které bude úbytek částic pravděpodobně roven polovině původního počtu částic (tj. na tloušťce x = a bude $n = n_0/2$).

Absorpční zákon se nepotvrzuje v exponenciálním tvaru pro záření tvořená těžkými částicemi. Velmi přesně platí pro beta záření a gama záření. Pro elektromagnetická záření (např. gama záření) se obvykle místo počtu částic používá intenzita záření I udávaná např. ve W/cm² (intenzitu I lze zavést zjednodušeně následující úvahou - jde o počet částic násobený energií jedné částice, který projde kolmo jednotkovou plochou za jednotku času).

Jevy spojené s průchodem jaderných záření prostředím (příslušnou látkou) mají často úzkou vazbu na absorpční zákon. Např. při průchodu gama záření prostředím se odehrává absorpce a zeslabování gama záření prostřednictvím tři jevů - fotoelektrickým jevem podle (B53) (koeficient absorpce μ_f), Comptonovým jevem podle (B55) (koeficient absorpce μ_c) a obráceným anihilačním jevem podle (B56) (koeficient absorpce μ_a). Absorpční zákon (B58) pak lze pro gama záření zapsat ve tvaru $I = I_0 \exp \left[-(\mu_f + \mu_c + \mu_a)x\right]$. Při interakci gama záření s jádry atomů prostředí je zapotřebí zkoumat jevy spojené s fotodezintegrací jader (např. emise nukleonu spojená s přeměnou jádra) nebo s excitací jader (absorpcí gama fotonu se jádro převede do vzbuzeného stavu). Obdobně je zapotřebí zkoumat zeslabení alfa záření při průchodu prostředím (ionizace prostředí, rozptyl alfa částic) nebo zeslabení beta záření (ionizace prostředí, rozptyl beta částic).

K zeslabení beta záření přispívá vedle ionizace rozptyl jak na elektronech v atomovém obalu, tak na jádrech. V obou případech má jev velký význam u nerelativistických elektronů. K zeslabení beta záření přispívá také vznik brzdného elektromagnetického záření vlivem silného přibrzdění elektronu při průchodu elektrickým polem jádra i celého atomu. Brzdění elektronů při jejich průchodu těmito elektrickými poli je spojeno se vznikem brzdného rentgenového záření.

Zeslabení alfa záření je spojeno především s ionizací (při každé srážce např. s molekulou plynu ztrácí alfa částice energii na ionizaci). Při zkoumání počtu iontových párů (přesněji: kladných iontů a elektronů) vytvořených alfa částicí např. na 1 mm délky dráhy se ukáže, že na počátku dráhy si tato specifická ionizace udržuje přibližně konstantní hodnotu a pomalu stoupá. Ke konci doletu alfa částice však specifická ionizace vzrůstá více než dvakrát. Křivka specifické ionizace je popsána Braggovou křivkou. Křivka specifické

ionizace dosahuje maxima několik mm od konce doletu alfa částice. Na obrázku Obr. 13 je jen schematicky vykreslena Braggova křivka pro alfa záření radia C ($^{214}_{83}$ RaC) ve vzduchu.



Alfa částice mají jako i jiné těžké nabité částice vysokou specifickou ionizaci (vznikají tisíce iontů na dráze 1 mm). Specifická ionizace beta částic je podstatně nižší než u alfa částic. Z tohoto důvodu se u beta částic při vzniku ztrát energie vlivem interakce s prostředím uplatňují vedle ionizace a excitace také procesy rozptylu a vzniku brzdného elektromagnetického záření. Gama částice ionizují jen nepřímo prostřednictvím sekundárních elektronů. Jejich specifická ionizace je malá a tyto částice mají podstatně vyšší pronikavost (a tím i dolety) než jiné druhy záření.

12.3. Veličiny a jednotky jaderného záření

Vedle dalších veličin (např. dávková rychlost, ozařovací rychlost, integrální dávka) jsou nejdůležitější veličiny popisující jaderná záření uvedeny v následujícím přehledu:

a) <u>Aktivita A radioaktivního zdroje (zářiče, nositele mateřských prvků)</u>

Aktivita A zářiče je mírou radioaktivity zářiče, je definována jako četnost, s níž zářič uvolňuje částice jaderného záření. Odtud plyne definiční vztah a jeho úprava podle (B57)

(B59)
$$A = - \frac{dn}{dt} = \lambda n.$$

U dlouhodobých radionuklidů lze aktivitu A nahradit počtem přeměn za jednotku času, obecněji jde o součin rozpadové konstanty λ a okamžitého počtu *n* radioaktivních jader mateřského prvku. Jednotkou aktivity A je becquerel (Bq) - aktivita 1 Bq odpovídá u dlouhodobých radionuklidů přeměně jednoho radioaktivního jádra za 1 s. Často se používá jednotka curie (Ci). 1 Ci odpovídá 3,7.10¹⁰ přeměn za 1 s. Rovněž se používá jednotka rutherford (Rd). Platí převodní vztah 1 mCi = 37 Rd.

b) Intenzita I jaderného záření

Intenzita I je energie záření, která projde plošnou jednotkou kolmou ke směru postupu záření za 1 s. Jednotkou intenzity I je W.m⁻². Měrnou ztrátu intenzity záření lze definovat jako

poměr intenzity záření I v dané tloušť ce prostředí pod jeho povrchem k počáteční intenzitě záření I_{max} na povrchu prostředí. Specifickou ionizaci jako počet iontových párů vytvořených ionizující částicí na jednotkové tloušť ce prostředí, např. na 1 mm dráhy, lze vhodným způsobem charakterizovat pomocí převrácené hodnoty měrné ztráty intenzity.

c) Pohlcená dávka D, expozice (ozáření) X

Praktický význam má jen ta část jaderného záření, která se v ozařované látce pohlcuje a způsobuje v ní nějaké změny. To lze posoudit podle výsledné ionizace vyvolané zářením v jednotkové hmotnosti příslušné látky (veličina "expozice-ozáření X" s jednotkou C.kg⁻¹) nebo podle úhrnné energie pohlcené jednotkovou hmotností příslušné látky za dobu ozařování (veličina "pohlcená dávka D" s jednotkou J.kg⁻¹ - tato jednotka nese název gray se zkratkou Gy). V praxi se často používá pro expozici X jednotka rentgen (R), kde 1 R = 2,58.10⁻⁴ C.kg⁻¹. Pro pohlcenou dávku se používá také jednotka "fyzikální ekvivalent rentgenu (rep - roentgen equivalent physical)", kde 1 rep = 0,84.10⁻² Gy.

d) <u>Dávkový ekvivalent H</u>

Dávkový ekvivalent *H* kvantifikuje biologické účinky jaderného záření. Dávkový ekvivalent *H* závisí nejen na pohlcené dávce *D*, ale také na bezrozměrných modifikujících faktorech, které charakterizují jednak druh záření z hlediska jeho biologických účinků na člověka, jednak prostorovou distribuci dávky. Jednotkou je sievert (Sv), rozměr jednotky je J.kg⁻¹. Pro biologické účinky se používá také jednotky rem (roentgen equivalent man). Jednotka "rem" je definována jako dávka libovolného záření, které způsobí u člověka týž účinek jako 1 R rentgenového nebo gama záření. Např. pro gama a beta záření je 1 rep = 1 rem, ale pro protony a rychlé neutrony je 1 rep = 10 až 20 rem. Odtud je vidět, že těžké částice působí při stejné pohlcené energii mnohem silněji než elektrony a fotony.

e) <u>Účinný průřez σ interakce</u>

Účinný průřez σ interakce je obvykle definován pro volné atomy prostředí (tj. pro atomy, které spolu interagují při srážkách jen jako tuhé koule) vztahem

$$(B60) \qquad \sigma = \pi r_j^2,$$

kde r_j je poloměr jádra atomu prostředí a veličina πr_j^2 vyjadřuje geometrický průřez jádra. Pro přitahující se částice prostředí je $\sigma > \pi r_j^2$, pro odpuzující se částice prostředí je $\sigma < \pi r_j^2$. Jednotkou účinného průřezu je m² v soustavě SI, praktické použití má jednotka barn (bn) definovaná 1 bn = 10^{-28} m², která je řádově velikosti geometrického průřezu jádra. Účinný průřez σ , který je schopen vyjádřit pravděpodobnost, že ostřelující částice jaderného záření bude jistým způsobem interagovat s jádrem terčové částice, má úzkou vazbu na koeficient absorpce μ . Tato vazba souvisí s pravděpodobností obsaženou v definici koeficientu absorpce μ . Obvykle je zapotřebí tuto pravděpodobnost rozčlenit podle možných druhů ztráty energie při interakci jaderného záření s prostředím.

Účinný průřez σ interakce je významnou charakteristikou interakce např. ionizujících částic s jádry atomů prostředí. Jeho význam lze vyložit následujícím postupem:

- Plošná hustota ρ počtu atomů (jde o atomy ve zkoumané rovině o ploše *S* a o tloušť ce *x*) je počet atomů v plošce d*S* dělený touto ploškou d*S*

- Pro tenkou vrstvičku roviny o tloušťce dx lze plošnou hustotu d ρ počtu atomů (nechť N_0 je počet atomů v jednotkovém objemu absorbujícího prostředí) zavést vztahem

$$\mathrm{d}\rho = N_0 \,\mathrm{d}V / S = N_0 S \,\mathrm{d}x / S = N_0 \,\mathrm{d}x$$

- Pravděpodobnost *p*, že s některým terčovým atomem zkoumané roviny interaguje ionizující částice, je přímo úměrná plošné hustotě ρ . Koeficient úměrnosti lze označit σ a pak platí vztah $p = \sigma \rho$. Pravděpodobnost *p* je také podílem celkového průřezu atomů ve zkoumané rovině ($\rho . S. \pi r_j^2$, kde r_j je poloměr jádra atomu zavedený v 12.kap., odst.12.1.) a plochy *S* zkoumané roviny, tj.

$$p = \pi r_j^2$$
. ρ .

- Srovnáním obou vztahů pro pravděpodobnost *p* lze získat vztah $\sigma = \pi r_j^2$, tj. vztah (B60), který je vztahem pro účinný průřez σ interakce pro ionizující částice ostřelující jádra volných atomů daného prostředí

- Ze vztahu $p = \sigma \rho$ plyne pro vrstvičku tloušťky dx pravděpodobnost pohlcení ionizující částice d $p = \sigma d\rho = -dn/n$ (vztah dp = -dn/n viz odvození absorpčního zákona (B58)). Po dosazení za d $\rho = N_0 dx$ a po provedení integrace lze získat tvar absorpčního zákona

$$n = n_0 \cdot \exp\left(-\sigma N_0 x\right),$$

který po srovnání s (B58) vede k důležitému vztahu mezi koeficientem absorpce μ a účinným průřezem σ ve tvaru

$$(B61) \qquad \mu = \sigma N_0.$$

Tím je potvrzeno, že účinný průřez σ interakce (viz vztah (B60)) je schopen vyjádřit pravděpodobnost interakce ostřelující částice ionizujícího záření s jádrem terčové částice.

f) Dolet D látkové částice jaderného záření

Dolet D je délka dráhy, na níž látková částice ztratí při interakci s prostředím (většinou procesem ionizace atomů prostředí) počáteční kinetickou energii a zastaví se.

Např. ztráta kinetické energie -dT, kterou **alfa částice** ztratila ionizací na dráze dx, je při vztažení na jednotkovou dráhu v daném prostředí funkcí f(T) jen okamžité kinetické energie T (křivka vyjadřující závislost -dT/dx = f(T) prostřednictvím závislosti měrné ztráty energie -dT/dx na uražené dráze je již dříve zmíněná Braggova křivka s výrazným Braggovým maximem a s poklesem na nulu ve vzdálenosti, která je doletem D alfa částice). Teoreticky byl nejobecněji tvar funkce f(T) odvozen Blochem. Bude-li počáteční kinetická energie alfa částice označena T_{α} , pak lze dolet D alfa částice vypočítat pomocí integrálu

$$D = \int_{0}^{D} dx = \int_{0}^{T_{\alpha}} \frac{dT}{f(T)}$$

Dolet *D* alfa částice ve vzduchu jsou řádově centimetry, ve tkáni mikrometry. Dolety *D* jsou v tkáních u běžných beta záření řádově milimetry. Závislost středního doletu *D* ve vzduchu na počáteční energie T_{α} alfa částic je schematicky znázorněna třemi křivkami na obrázku Obr. 14. Těchto křivek lze použít k určení počáteční energie alfa částic (např. pro ²¹⁴₈₄Ra C' lze přibližně odečíst pomocí křivky A pro dolet *D* ~7 cm počáteční energii $T_{\alpha} \sim 8$ MeV).



12.4. Detekce a dozimetrie jaderného záření

a) Ionizační komůrky, plynové počítače ionizujících částic

Ionizační komůrky jsou v podstatě plynové kondenzátory, které jsou vystaveny ionizačním účinkům záření. Je-li na desky kondenzátoru vloženo napětí, jsou ionty vzniklé ionizaci uváděny elektrickým polem do pohybu, mezi deskami kondenzátoru protéká ionizační proud. Ionizační komůrka se vybíjí a pomocí poklesu napětí lze měřit intenzitu záření a srovnávat aktivity zářičů.

Při dostatečně velkém vloženém napětí se objeví ionizace nárazem, vyvolaná ionty vzniklými při ionizaci plynové náplně komůrky primárními částicemi jaderných záření. Pak začíná ionizační komůrka po vhodném uzpůsobení plnit funkci počítačů primárních částic.

Počítače částic jaderného záření jsou schopny zjistit počet primárních částic, které v jednotce času ionizaci vyvolaly - a to je možnost ke stanovení absolutní hodnoty aktivity radioaktivního zdroje přímo v jednotkách aktivity.

Závislost ionizačního proudu I na vloženém napětí U odhaluje při svém grafickém znázornění na obrázku Obr. 15 několik oblastí vyplývajících z průběhu závislosti:

- Oblast Ohmova zákona I platí pro malá napětí $U < U_1$ a vyznačuje se úměrností ionizačního proudu s napětím, s rostoucím napětím roste počet přitažených iontů. Stoupání proudu se zpomaluje, při napětí U_2 se proud ustálí.

- Oblast nasyceného proudu II je pro napětí $U_2 < U < U_3$ charakterizována přibližně stálou hodnotou ionizačního proudu, všechny ionty vzniklé za 1 s v celém objemu plynové náplně komůrky jsou přitaženy, rychlosti iontů jsou již velké proti rychlosti tepelného neuspořádaného pohybu.

- **Oblast proporcionálnosti III** je spojena s dosažením hodnoty napětí U_3 , při kterém ionty vzniklé průchodem jaderného záření jsou urychleny do té míry, že jsou samy schopny nárazy na neutrální molekuly vytvářet další ionty - objevuje se ionizace nárazem. Každý urychlený ion vytvoří až do napětí U_4 stejný počet nových iontů, který nezávisí na napětí kondenzátoru ionizační komůrky. Proporcionalita poukazuje na úměrnost mezi počtem iontů, které dopadly na desky kondenzátoru, a energií primárních částic.

- Geigerova oblast IV je spojena s dosažením hodnoty napětí U_4 ' a končí napětím U_5 , při němž již vznikne samostatný výboj. Částice jaderného záření plní prostřednictvím původní vyvolané ionizace již jen funkci spouštěče lavinovité ionizace. Ionizační proud již není proporcionální počtu iontů vzniklých přímým působením záření a tudíž ani intenzitě záření.

K měření intenzity jaderného záření je nejvhodnější ionizační komůrka např. v režimu oblasti nasyceného proudu (např. nízkotlaké statické komůrky).



b) Další typy počítačů částic jaderných záření

Jiskrový počítač využívá k počítání ionizačních částic jiskrového výboje mezi elektrodami uloženými za normálního tlaku ve vzduchu - po vložení dosti vysokého napětí na elektrody se projeví průlet ionizující částice jiskrovým výbojem.

Krystalový počítač je tvořen dokonalým krystalem (např. CdS, AgCl), v němž se při ozáření alfa nebo beta zářením uvolňují elektrony z mřížkových atomů krystalu a tím se výrazně zvyšuje elektrická vodivost.

Scintilační počítače jsou založeny na zonální teorii krystalů, podle níž je u izolantu vodivostní zóna VOZ oddělena od valenční zóny VAZ širokou zakázanou zónou ZZ. Vniknutím iontů cizích prvků do krystalové mřížky krystalu mohou vzniknout v zakázané zóně ZZ luminiscenční centra - krystal se tak stává aktivovaným scintilátorem (např. krystal ZnS se aktivuje Ag nebo Cu). Při vniknutí částice jaderného záření do aktivovaného scintilátoru mohou elektrony z VAZ nebo z luminiscenčních center přejít do VOZ. Při zpětném přechodu jsou pak zachyceny luminiscenčními centry se současným vyzářením fotonu fluorescenčního záření. Slabé "záblesky" (scintilace) jsou fotonásobičem zesíleny a registračním zařízením zachyceny. Používají se rovněž organické scintilátory a kapalinové scintilátory.

Čerenkovovy počítače používají k registraci jaderného záření místo luminiscence (viz scintilační počítače) Čerenkovova záření. Toto optické záření vzniká průchodem nabité částice izolantem tehdy, jestliže je rychlost částice větší než rychlost světla v izolantu. Nejde o druh brzdného elektromagnetického záření, neboť Čerenkovovo záření vzniká i při rovnoměrném pohybu nabité částice.

12.5. Pozorování a urychlování nabitých částic jaderných záření

a) Pozorování drah nabitých částic

Studium vlastností částic tvořících jaderná záření (ale také např. částic kosmického záření) je možné také prostřednictvím stopování jejich pohybu a zviditelňování drah. Mezi "dráhové" detektory patří různé typy komor. **Wilsonova (mlžná) komora** s adiabatickou expanzí je založena na srážení drobných kapiček na iontech ve vzduchu s přesycenými parami vhodného druhu (vodní, alkoholové páry). Sled takových iontů zanechává za sebou při průletu ionizující částice (foton sice také ionizuje, ale může ionizovat po absorpci jen jeden atom,

proto nelze zviditelňovat jeho dráhu). **Bublinková komora** pracuje proti mlžné komoře na principu opačném - místo přesycených par obsahuje pod tlakem drženou přehřátou kapalinu (např. kapalný vodík). Při nepatrném snížení tlaku se v místech průchodu ionizující částice začne přehřátá kapalina bouřlivě vypařovat a drobné bublinky páry lemují dráhu ionizující částice. **Jiskrová komora** spojuje princip jiskrového počítače plněného neónem a hodoskopické komory tvořené baterií jiskrových počítačů. Uzavírací doba jiskrové komory je tisíckrát kratší než u komory bublinkové (bublinková komora má zase vyšší rozlišovací schopnost) - to umožňuje pozorovat i dosti vzácné jevy.

Mezi dráhové detektory patří dále např. jaderné emulze, v nichž zanechávají nabité částice charakteristické stopy, nebo také dosti jednoduchá metoda koincidenční a antikoincidenční.

b) Urychlovače elektronů a iontů

Zjednodušený teoretický základ lineárních a kruhových urychlovačů byl vyložen na příkladě urychlování klasické nabité částice v 8.kap., odst.8.3. a na příkladě urychlování relativistického elektronu v 11.kap., odst.11.5. Moderní urychlovače lze dělit např. na urychlovače lineární a kruhové, na urychlovače elektrostatické a elektromagnetické, na urychlovače elektronů a iontů. Pro jadernou fyziku jsou urychlovače elektronů méně významné.

O urychlovačích elektronů byl podán výklad ve výše uvedených kapitolách a odstavcích. Vedle klasických a relativistických lineárních urychlovačů byla učiněna rovněž zmínka o kruhových urychlovačích - o betatronech, pracujících na principu indukčního urychlování, a elektronových synchrotronech, pracujících na principu fázové stability a spojujících výhody elektrostatického lineárního urychlování a indukčního urychlování.

Mezi urychlovači iontů a elektronů je zásadní rozdíl. Zatímco elektron již při urychlujícím napětí 3,1 MV dosahuje relativistické rychlosti 2,97.10⁸ m.s⁻¹ (téměř rychlosti světla) při vzrůstu hmotnosti až na sedminásobek klidové hmotnosti, proton si ještě při urychlujícím napětí 10 MV pohodlně zachovává klasické vlastnosti (jeho hmotnost se stále příliš neliší od hmotnosti klidové, rychlost dosahuje hodnoty 4,37.10⁷ m.s⁻¹).

Lineární urychlovače urychlují částice (elektrony i ionty) přímočaře v evakuované urychlovací trubici a lze je dělit na elektrostatické a vysokofrekvenční s elektrodami nebo vysokofrekvenční s "nosnou" elektromagnetickou vlnou.

Prvním kruhovým urychlovačem iontů byl klasický cyklotron. Ionty krouží v cyklotronu se stálou frekvencí v ve dvou duantech, v nichž je odstíněno elektrické pole. S touto frekvencí musí souhlasit frekvence střídavého napětí v mezerách mezi duanty, v nichž je iont urychlován. Tuto rezonanční podmínku lze pomocí výsledků 8.kap. odst.8.3. zapsat ve tvaru $v = ZeB / 2\pi m_0$, kde Z je protonové číslo urychlovaného iontu, B je magnetická indukce homogenního magnetického pole, které udržuje ionty na kruhové dráze v duantech, m_0 je klidová hmotnost urychlovaného iontu. K dosažení vyšších energií několika desítek MeV u urychlovaných iontů lze zajistit splnění rezonanční podmínky pomocí cyklotronů s modulovanou frekvencí. Tyto cyklotrony jsou stručně nazývány synchrocyklotrony nebo také fázotrony. Konstrukce protonových synchrotronů (zvaných také synchrofázotrony) je podobně jako u elektronových synchrotronů spojena s využitím principu fázové stability.

12.6. Jaderné reakce (transmutace prvků)

Vedle samovolné přeměny přirozeně radioaktivních prvků lze přivodit přeměnu prvků i uměle - přirozené i umělé přeměně prvku se říká jaderná reakce nebo také transmutace prvku.

a) Zákony zachování při jaderných reakcích

Nechť *m* a *m*' jsou hmotnosti za pohybu (viz (B48)) látkových částic (prvků) vstupujících a vystupujících z jaderné reakce, nechť *v* a *v*' jsou frekvence polní částice (fotonu) vstupující a vystupující z jaderné reakce. Pak lze zákony zachování energie a hmotnosti napsat pomocí vztahů (B49) a (B52) ve tvarech

$$\sum mc^{2} + hv = \sum m'c^{2} + hv', \quad \sum m + hv/c^{2} = \sum m' + hv'/c^{2}.$$

Nechť A, Z, A₁, Z₁ a A', Z', A₁', Z₁' jsou protonová a nukleonová čísla prvků a dalších mikroobjektů (které lze charakterizovat protonovými a nukleonovými čísly - jiné mikroobjekty nebudou pro zjednodušení zápisu uvažovány) vstupujících a vystupujících z jaderné reakce, nechť Q je např. přebytek energie, který se reakcí uvolní. Pak lze jadernou reakci zapsat ve tvaru

$${}^{A}_{Z}\mathbf{J} + {}^{A_{l}}_{Z_{l}}\mathbf{X} = {}^{A'}_{Z'}\mathbf{J'} + {}^{A'_{l}}_{Z_{l}'}\mathbf{X'} + Q.$$

Z tohoto zápisu lze snadno vyvodit zjednodušené zápisy zákonů zachování nukleonového čísla (hmotnosti) a protonového čísla (náboje) ve tvaru $A + A_1 = A' + A_1'$, $Z + Z_1 = Z' + Z_1'$.

Mezi další zákony zachování při jaderných reakcích patří např. zákon zachování hybnosti nebo zákon zachování spinu.

b) Přehled typů jaderných reakcí

- Jaderné reakce vyvolané přirozeným radioaktivním zářením. Mezi historicky nejvýznamnější reakce tohoto typu patří Rutherfordův objev protonu (ostřelování dusíku alfa částicemi s produkcí kyslíku a protonu), Chadwickův objev neutronu (ostřelování berylia alfa částicemi s produkcí uhlíku a neutronu), objev umělé radioaktivity Joliotovými (ostřelování hliníku alfa částicemi se vznikem radioaktivního fosforu a neutronu, radioaktivní fosfor se transmutuje s poločasem rozpadu 3 min 15 s na křemík za vysílání pozitivního beta záření).

- **Transmutace urychlenými částicemi**. Mezi historicky významnou transmutaci (r. 1941) patří ostřelování lithia urychlenými protony se vznikem dvou alfa částic. Kromě ostřelování urychlenými protony je produktivní také ostřelování např. urychlenými deuterony nebo jádry helia.

- **Transmutace prvků neutrony**. Neutrony jsou velmi užitečné střely pro transmutaci prvků. Zdrojem ostřelujících neutronů je řada transmutací, které uvolňují při jaderných reakcích rychlé neutrony se značnými energiemi. Ostřelováním neutrony lze změnit téměř všechny známé prvky na jejich radioizotopy. Kromě pohlcení neutronu bez emise částice je někdy vniknutí neutronu do jádra provázeno emisí alfa částice nebo protonu. Jako příklady těchto reakcí lze uvést:

$$_{35}^{79}$$
Br + $_{0}^{1}$ n = $_{35}^{80}$ Br .

Vzniká radioaktivní bróm v podobě dvou izomerů s poločasy rozpadu 4,4 hod. a 18 min.

$${}^{14}_{7}N + {}^{1}_{0}n = {}^{14}_{6}C + {}^{1}_{1}p$$

Při této reakci vzniká radioaktivní uhlík ${}_{6}^{14}$ C, který vysílá negativní beta záření s poločasem rozpadu řádu 10⁴ let. Vzhledem ke značnému poločasu rozpadu je tento radioizotop vynikajícím časovým indikátorem v biologii.

- **Štěpení jader**. Některé těžké radionuklidy pohlcují pomalé neutrony a rozpadají se na dvě téměř stejně těžké části za současné produkce 2 až 3 pomalých neutronů. Příkladem štěpné reakce je štěpení izotopu uranu 235:

$${}^{235}_{92}U + {}^{1}_{0}n = {}_{36}Kr + {}_{56}Ba + (2 \, a \breve{z} \, 3) {}^{1}_{0}n$$

$${}^{235}_{92}U + {}^{1}_{0}n = {}_{38}Sr + {}_{54}Xe + (2 \, a \breve{z} \, 3) {}^{1}_{0}n \, .$$

- Štěpná řetězová reakce. Řízené uvolňování jaderné energie vychází z použití přírodního uranu, který je směsí tří izotopů s nukleonovými čísly 234, 235 a 238 a s procentuálním zastoupením 0,006 %, 0,7 % a 99,3 %. Při určitém kritickém množství uranu se uplatní štěpná reakce u izotopu uranu 235, jejímž výtěžkem jsou nejen 2 až 3 pomalé neutrony udržující štěpnou reakci v řetězovém chodu, ale také značný energetický výtěžek. Např. v jaderných elektrárnách se uvolněná jaderná energie přeměňuje na energii elektrickou. Radioaktivním odpadem při štěpné řetězové reakci je výsledek transmutace izotopu uranu 238 na neptunium, které se s poločasem rozpadu 23 min transmutuje na plutonium. Plutonium má však poločas rozpadu kolem 24 000 let.

SOUBOR PŘÍLOH B Model struktury nestatistické fyziky

PŘÍLOHA B1 Skladba modelu

Model nestatistického přístupu ke zkoumání fyzikálních objektů a jevů (nestatistické fyziky) je složen ze tří samostatných dílčích modelů, které odpovídají šesti kapitolám (7. až 12. kapitole) výkladu nestatistické fyziky. Při pročítání 7. až 12. kapitoly je možné mít před sebou odpovídající části modelu a tím mít neustálou orientaci o strukturním zařazení příslušného odstavce.

První samostatný dílčí model "Model klasického nestatistického přístupu" je znázorněn v **Příloze B2**. Tento model znázorňuje způsob zkoumání nejdůležitějších klasických fyzikálních objektů - klasického hmotného bodu (částice), soustavy malého počtu hmotných bodů nebo velkého počtu hmotných bodů (které se pohybují nějakou formou nestatistického, tj. uspořádaného pohybu jako určitý celek), tuhého tělesa, různých druhů kontinua, klasicky pojatého elektromagnetického pole. Základem je zkoumání klasických pohybových stavů a změn těchto stavů jako možných forem nestatistického pohybu. V **Příloze B3** je uveden popis modelu klasického nestatistického přístupu podrobněji.

Druhý samostatný dílčí model "Model kvantového nestatistického přístupu" je znázorněn v **Příloze B4**. Tento model považuje za východisko vlnově korpuskulární dualismus a znázorňuje způsob zkoumání fyzikálních objektů mikrosvěta na příkladě stacionárního a nestacionárního stavu elektronu a časového vývoje těchto kvantových stavů. V **Příloze B5** je uveden popis modelu kvantového nestatistického přístupu podrobněji.

Třetí samostatný dílčí model "Model relativistického nestatistického přístupu" je znázorněn v **Příloze B6**. Tento model znázorňuje způsob zkoumání nejdůležitějších relativistických fyzikálních objektů - objektů mikrosvěta, makrosvěta i megasvěta. Kromě relativistického formalismu je upozorněno na základní postupy zkoumání relativistických pohybových stavů a jejich změn v rámci speciální a obecné teorie relativity. V **Příloze B7** je uveden popis modelu relativistického nestatistického přístupu podrobněji.

Příloha B8 stručně popisuje, které dílčí prvky modelu nestatistického přístupu (tvořeného třemi dílčími samostatnými modely znázorněnými a popsanými v Přílohách B2 až B7) byly vyloženy v 7. až 12. kapitole tvořících výklad "Nestatistické fyziky".



PŘÍLOHA B2 Znázornění modelu klasické nestatistické fyziky

PŘÍLOHA B3 Popis modelu klasické nestatistické fyziky

Východiska klasického nestatistického přístupu lze spatřovat v nekvantové aproximaci a v nerelativistické aproximaci.

V nekvantové aproximaci není uvažován vlnově korpuskulární dualismus. Volné elektromagnetické pole s danou frekvencí a s obrovským počtem nízkofrekvenčních fotonů se šíří ve vakuu i v dielektriku jako "čistá" elektromagnetická vlna. Nízký počet vysokofrekvenčních fotonů volného elektromagnetického pole s danou frekvencí, hmotné body, tuhá tělesa nebo částice kontinua se naopak chovají jako "čisté" korpuskule.

V nerelativistické aproximaci jsou prostor a čas považovány za absolutní - proto neplatí tvrzení, podle něhož fyzikální zákony vyjadřují vztahy mezi "materiálními objekty". Tuto aproximaci lze přijmout za podmínky malých rychlostí a malých hustot hmotnosti u zkoumaných fyzikálních objektů.

V oblasti elektromagnetického pole lze klasickou a nestatistickou "čistě" vlnovou interpretaci přijmout jen pro případy velkých kvantových čísel oscilátorů s frekvencí v, na které se v rámci kvantové teorie pole rozkládá volné elektromagnetické pole (pole bez přítomnosti nábojů). Velkým kvantovým číslům odpovídají obrovské počty fotonů, pak lze přejít od reprezentace dílčího fotonu "vlnovým balíkem" či "Gaussiánem" s energií hv k elektromagnetické vlně v "rozlehlém" prostoru bez přítomnosti nábojů. Tato elektromagnetická vlna již popisuje svou pohybovou rovnicí silové působení intenzity makroskopického elektrického pole a magnetické indukce makroskopického magnetického pole např. na uspořádaně příčně kmitající částice hypotetického prostředí. Chová se jako "klasická" vlna a jako jeden nestatistický fyzikální objekt, byť má tato "klasická" vlna fázovou rychlost šíření rovnu rychlosti světla. Pro reprezentaci jednoho fotonu "Gaussiánem" je např. intenzita elektrického pole soustředěna jen v určitých "malých" oblastech prostoru, které však také postupují fázovou rychlostí c - nejde však o elektromagnetické vlnění nebo elektromagnetické záření v obvyklém makroskopickém pojetí.

Dále lze v oblasti elektromagnetického pole klasickou a nestatistickou interpretaci přijmout jen pro velké vzdálenosti od soustavy nábojů - jelikož tato podmínka je podmínkou **volného elektromagnetického pole** je nutno ji spojit s podmínkou **obrovského počtu fotonů**. Za těchto dvou podmínek lze elektromagnetické pole považovat za klasický a nestatistický fyzikální objekt, který se šíří prostorem (vakuem nebo neferomagnetickým dielektrikem) jako "klasická" elektromagnetická vlna. Ve velkých vzdálenostech od soustavy nábojů (v tzv. vlnové zóně záření) a při obrovských počtech fotonů lze také **elektromagnetické záření** považovat za elektromagnetické vlnění.

Model klasického nestatistického přístupu ukazuje, že hlavní metodou zkoumání klasických pohybových stavů a jejich změn (jako forem klasického nestatistického pohybu) je d'alembertovský a z něho vyplývající lagrangeovský a hamiltonovský formalismus. Tento formalismus v oblasti volných částic a konzervativních silových polí a v oblasti některých modelů kontinua (např. Euklidova tuhá látka) přechází v dobře známý newtonovský formalismus. V oblasti "ultrarelativistického" elektromagnetického pole je potřebné vycházet z lagrangeovského a hamiltonovského formalismu bez zjednodušení na formalismus newtonovský.

Lagrangeovský a hamiltonovský formalismus obsahuje pro soustavu N částic následující kroky:

- a) Vymezení fyzikálního problémů a klasických počátečních podmínek (hodnoty souřadnic a rychlostí v daném časovém okamžiku),
- b) Stanovení odpovídajícího počtu r vazeb a odpovídajícího počtu obecných souřadnic q_j a hybností p_j (počet q_j a p_j se získá, když se od počtu 3N obvyklých kartézských souřadnic N částic odečte počet r vazeb),
- c) Nalezení Lagrangeovy funkce L a Hamiltonovy funkce H (v jednoduchých případech je L = T V, H = T + V, kde T je kinetická energie a V potenciální energie),
- d) Nalezení pohybových rovnic ve tvaru Lagrangeových rovnic nebo Hamiltonových kanonických rovnic v případě přechodu k newtonovskému formalismu nalezení příslušného tvaru 2. Newtonova zákona, tj. zákona síly $\vec{F} = m \ddot{\vec{r}}$, kde \vec{r} je polohový vektor zkoumaného hmotného bodu.
- e) Řešení pohybových rovnic s cílem nalézt tvar pohybového zákona (tj dráhy ve fázovém prostoru v případě hamiltonovského formalismu, dráhy v konfiguračním prostoru v případě lagrangeovského formalismu nebo jen obvyklé dráhy v rámci Euklidovského prostoru a běžné kartézské souřadnicové soustavy v případě newtonovského formalismu).

Lagrangeovský a hamiltonovský formalismus obsahuje pro kontinuum následující kroky:

- **a**) Vymezení fyzikálního problémů a klasických počátečních podmínek s cílem použít obecnou pohybovou rovnici kontinua nebo obecnou rovnici rovnováhy kontinua,
- **b**) Volba modelu kontinua (Pascalova dokonalá tekutina, Newtonova vazká tekutina, Euklidova tuhá látka, Hookovo elastické kontinuum),
- c) Nalezení pohybové rovnice odpovídající vybranému modelu (Eulerova hydrodynamická rovnice pro Pascalův model, Navierova-Stokesova rovnice pro Newtonův model, přechod k newtonovskému formalismu pro Euklidův model, zobecněný Hookův zákon a obecné rovnice kontinua pro Hookův model),
- **d**) Řešení pohybových rovnic z hlediska rheologie látek (popis pohybových stavů a změn stavu pomocí 10 stavových parametrů: hustota hmotnosti, složky rychlosti, složky tenzoru napětí).

Lagrangeovský a hamiltonovský formalismus obsahuje pro elektromagnetické pole následující kroky:

- a) Nalezení pohybových rovnic náboje v elektromagnetickém poli (většinou Lagrangeovy rovnice druhého druhu, použita Lagrangeova funkce náboje v elektromagnetickém poli),
- **b**) Úprava pohybových rovnic a nalezení vztahu pro Lorentzovu sílu (včetně zavedení intenzity elektrického pole a magnetické indukce magnetického pole),
- c) Po vyřešení pohybu náboje v konstantním elektromagnetickém poli (konstantní pole nezávisí na čase) lze jako vedlejší produkt vymezit první dvě rovnice elektromagnetického pole (první dvojice Maxwellových rovnic pro víry elektrického pole a zřídla magnetického pole),
- **d**) Zapsání Hamiltonova principu (principu nejmenšího účinku jako základní úlohy variačního počtu) pro elektromagnetické pole,
- e) Nalezení třetí a čtvrté rovnice elektromagnetického pole (druhé dvojice Maxwellových rovnic pro víry magnetického pole a zřídla elektrického pole),
- **f**) Potvrzení existence elektromagnetických vln v prostředích bez volných nábojů (ve vakuu, v dielektriku) odvozením vlnové rovnice elektromagnetického vlnění.

PŘÍLOHA B4 Znázornění modelu kvantové nestatistické fyziky



Znázornění modelu "A"



PŘÍLOHA B5 Popis modelu kvantové nestatistické fyziky

Objekty mikrosvěta nejsou přímo pozorovatelné - o jejich existenci informují přístroje. Přímo pozorovatelné objekty makrosvěta (včetně jejich pozorování dalekohledem nebo mikroskopem) lze zkoumat klasickou cestou:

Jev - Představa - Pojem - Matematický vztah - Experiment - Aplikace.

Kvantová cesta je zcela odlišná:

- a) Jev spojený s mikroobjektem (mikroobjekty nejsou dostupné přímému pozorování)
- b) Experiment (nutnost zapojení přístroje pro získání informací o mikroobjektu)
- c) Matematický model (zpracované číselné výsledky experimentu ve formě matematických souvislostí)
- d) Pojem (pojem vytvořený bez přímého kontaktu se zkoumaným jevem)
- e) Představa (představa využívající klasických zkušeností získaných přímým kontaktem
 - s objekty makrosvěta)

f) Aplikace.

Tato odlišnost kvantové cesty od cesty klasické vedla k potřebě vybudovat novou teorii mikroobjektů - kvantovou mechaniku. Kvantová mechanika pracuje s dvojicemi komplementárních pojmů. Takovou dvojicí je např. "poloha mikroobjektu", "rychlost mikroobjektu" - nelze současně zjistit místo výskytu a rychlost, přesto oba pojmy jsou nezbytné pro úplné pochopení podstaty mikroobjektu. Základní dvojici komplementárních pojmů tvoří dvojice "vlnové vlastnosti mikroobjektu" (vlnová délka, frekvence), "korpuskulární vlastnosti mikroobjektu" (hmotnost, hybnost). Kvantová mechanika zkoumá novou kvalitu fyzikálních objektů, která nese název "vlnově korpuskulární dualismus".

Tato nová kvalita vedla k opuštění fyzikálních veličin a k jejich reprezentování operátory na podkladě **primárního kvantování pro látkové částice a sekundárního kvantování pro částice polní.** Operátor je matematická instrukce, jaké operace je nutno provádět s funkcí stojící napravo od operátoru. Vlnově korpuskulární dualismus dále vedl k opuštění klasických pohybových stavů a k reprezentování kvantových pohybových stavů komplexními vlnovými funkcemi. Tyto vlnové funkce lze nalézt řešením vlastních rovnic operátorů jako tzv. vlastní funkce operátoru, souběžně lze nalézt i vlastní hodnoty operátoru jako přípustné číselné hodnoty stavových parametrů (většinou mají vlastní hodnoty diskrétní spektrum). Vlnově korpuskulární dualismus rovněž vedl u látkových částic k opuštění klasické dráhy fyzikálního objektu a k jejímu nahrazení "pravděpodobnostním oblakem". Pravděpodobnostní oblak vystupuje v roli množiny míst, v nichž se zkoumaný mikroobjekt vyskytuje s různými pravděpodobnostmi.

Model kvantového nestatistického přístupu na příkladu elektronu (**tj. v oblasti primárního kvantování**) popisuje hlavní metodu kvantové mechaniky pro zkoumání stacionárních stavů (tvar "pravděpodobnostního oblaku" se na rozdíl od časového vývoje nestacionárních stavů nemění):

- a) Fyzikální vymezení problému a stanovení kvantových počátečních podmínek,
- b) Vymezení úplného souboru veličin a odpovídajících operátorů,
- c) Napsání a řešení soustavy vlastních rovnic operátorů,
- **d**) Nalezení systému vlastních funkcí a systémů vlastních hodnot operátorů charakterizovaných kvantovými čísly,

e) Nalezení tvarů "pravděpodobnostních oblaků",

f) Interpretace výsledků, která vychází z přípustných hodnot kvantových čísel.

Zvláště důležitým operátorem je Hamiltonův operátor (reprezentující energii), jehož vlastní rovnicí je stacionární Schrödingerova rovnice. Operátor časové změny stavu (úzce spojený s Hamiltonovým operátorem) vede k nestacionární Schrödingerově rovnici, která umožňuje popis časového vývoje kvantového stavu.

Završením je pak soubor základních pojmů a představ o látkovém objektu mikrosvěta vzniklý **na podkladě aplikace primárního kvantování**:

- a) Představa elektronu jako projevu vlnově-korpuskulárního dualismu,
- b) Představa stacionárního stavu elektronu jako tvaru "pravděpodobnostního oblaku",
- c) Představa pohybu elektronu jako představa změny stavu vyjádřená změnou tvaru "pravděpodobnostního oblaku",
- d) Představa skupiny elektronů jako představa překrývajících se "pravděpodobnostních oblaků" spojená s nerozlišitelností elektronů.

Nejjednodušší aplikace směřují k nalézání stacionárních stavů vázaných elektronů v obalu atomu, ke zjišťování prostorové struktury molekul a ke kvantovým modelům jádra atomu. Důležitou součástí aplikací je identifikace dvou základních typů částic - bosonů a fermionů jako důsledek aplikace kvantového principu nerozlišitelnosti. Odtud je již jen krůček ke statistické fyzice a jejím bohatým aplikacím.

Model kvantového nestatistického přístupu je modelem, který vychází z nerelativistické kvantové mechaniky elektronu. Přechod k relativistické kvantové mechanice není možný jednoduchým zobecněním poznatků nerelativistické kvantové mechaniky. Např. Heisenbergova relace neurčitosti Δx . $\Delta p_x \sim \hbar$ vypovídá: Nelze současně měřit souřadnici a hybnost elektronu v ose x (čím přesněji se změří jedna z těchto veličin, tím nepřesněji je měřitelná druhá veličina), ale každá z těchto veličin by mohla být během libovolně krátkého časového okamžiku změřena samostatně s libovolně velkou přesností.

Existence hraniční rychlosti (rychlost světla c) v relativistické oblasti zcela mění situaci. Nejvyšší dosažitelná přesnost měření např. hybnosti je nyní při daném časovém intervalu Δt dána zlomkem \hbar / c . V relativistické kvantové mechanice již nelze uskutečnit libovolně přesné měření hybnosti elektronu. Obdobně i souřadnici elektronu lze změřit s přesností jen po určitou hranici (tím se ještě více omezuje smysl pojmu "lokalizace elektronu").

V relativistické kvantové mechanice se při úvahách o relacích neurčitosti objevuje také otázka zavedení spinu elektronu. Jelikož spin elektronu nevyplývá z řešení Schrödingerovy rovnice bylo zapotřebí docílit relativistické invariance vybudováním teorie čtyřrozměrných spinorů, která vedla k nahrazení Schrödingerovy rovnice relativistickou vlnovou rovnicí. Tuto rovnici odvodil pro volnou částici v r. 1928 Dirac, proto byla nazvána Diracovou rovnicí. Schrödingerova rovnice se stala součástí spinorů.

PŘÍLOHA B6 Znázornění modelu relativistické nestatistické fyziky



Rychle se pohybující relativistické objekty nebo relativistické objekty s extrémními hustotami hmotnosti nejsou přímo pozorovatelné - o jejich existenci informují přístroje. Zatímco přímo pozorovatelné objekty makrosvěta (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 - Matematický model - Pojem - Představa - Aplikace.

Klasická mechanika vychází z absolutního prostoru 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.

Speciální teorie relativity formuluje Einsteinův speciální princip relativity - všechny inerciální vztažné soustavy jsou rovnoprávné a pro formulaci všech fyzikálních zákonů rovnocenné. Galileiho transformace byla nahrazena transformací Lorentzovou. Lorentzova transformace také znamenala přechod k tenzorům n-tého řádu s 4^n složkami. Euklidův prostor byl ve speciální teorii relativity nahrazen čtyřrozměrným Minkowského prostoročasem tvořeným množinou světobodů o čtyřech souřadnicích.

Obecná teorie relativity vyšla z obecného principu relativity - inerciální i neinerciální vztažné soustavy jsou pro formulaci obecných fyzikálních zákonů zcela rovnocenné. Současně prokázala rovnost setrvačné a tíhové hmotnosti a na tomto základě zformulovala princip ekvivalence - gravitační síla není lokálně rozeznatelná od setrvačné síly.

Podle obecné teorie relativity je prostoročas zakřiven zdroji gravitačního pole (jiná pole, částice, tělesa a další fyzikální objekty). Metriku zakřiveného prostoročasu jako čtverec intervalu "vzdálenosti" mezi dvěma blízkými světobody lze získat pomocí složek metrického tenzoru g_{ij} . Zakřivenost nebo nezakřivenost prostoročasu lze popisovat pomocí tenzoru 4. řádu nazvaného Riemannův tenzor křivosti. Z Riemannova tenzoru křivosti lze odvodit tenzor 2. řádu R_{ij} nazvaného Ricciho tenzor. Z tenzoru R_{ij} pak již lze získat skalární křivost R. Jedním z nejpoužívanějších tenzorů obecné teorie relativity je Einsteinův tenzor G_{ij}

$$G_{ij}=R_{ij}-\frac{1}{2} g_{ij}.R.$$

Zdroje gravitačního pole jako např. spojitě rozložená hmota (látka, pole, tělesa, různé modely kontinua) mohou být popsány tenzorem 2. řádu T_{ij} nazvaného tenzor energie a hybnosti. Tento tenzor má často používané tvary např. pro ideální tekutinu či pro elektromagnetické pole.

Einsteinova gravitační rovnice (r. 1915) vyjadřuje úměrnost mezi Einsteinovým tenzorem a tenzorem energie a hybnosti $G_{ij} = k$. T_{ij} . Po doplnění tzv. kosmologickým členem - Λg_{ii} (Λ - kosmologická konstanta) nabyla v r. 1917 Einsteinova gravitační rovnice tvar

$$R_{ij}-\frac{1}{2} g_{ij}.R-\Lambda g_{ij}=k. T_{ij}.$$

Srovnáním s Newtonovou teorií je konstanta úměrnosti $k = 8\pi\kappa / c^4$, kde κ je obvyklá Newtonova gravitační konstanta $\kappa = 6,672.10^{-11}$ N m² kg⁻². Einsteinova gravitační rovnice pak již získává známý tvar

$$R_{ij}-\frac{1}{2} g_{ij}R-\Lambda g_{ij}=\frac{8\pi\kappa}{c^4}. T_{ij}.$$

Einsteinova gravitační rovnice je soustavou 10 nelineárních diferenciálních rovnic pro 10 složek symetrického metrického tenzoru g_{ii} ($g_{ii} = g_{ii}$).

Z aplikací obecné teorie relativity týkajících se její spolupráce s kvantovou mechanikou lze uvést stručnou informaci o významných kandidátech na kvantovou teorii gravitace: O teorii strun a o twistorové teorii.

Teorie strun jako vícedimenzionální teorie by měla dát odpověď na otázku, proč jsou pozorovány tři prostorové dimenze a jedna dimenze časová. Mohla by také objasnit sice malou, ale pravděpodobně nenulovou hodnotu kosmologické konstanty Λ v našem vesmíru.

Ukázalo se, že závislost mezi čtvercem hmotnosti některých elementárních částic (popisovaných silnou interakcí) a jejich spinem má lineární charakter. Tato linearita vedla k předpokladu, že elementární částice nejsou bodové útvary, ale jednorozměrné struny s délkou srovnatelnou s Planckovou délkou.

Rozvoj strunové teorie vedl k předpovědi mnoha různých způsobů "kmitání" strun (tj. k předpovědi přítomnosti mnoha typů elementárních částic), mimo jiné také k předpovědi gravitonu jako nositele gravitačního silového působení. Posléze také k začlenění supersymetrie (každému bosonu odpovídá fermion) a tím ke vzniku teorie superstrun. Výsledky studia superstrun navozují představu jednotné teorie nazývané M-teorie. Rozvíjející se teorie strun pak umožnila zavést strunové prostoročasy a jejich vhodné fyzikální obrazy jako tzv. bránové světy.

Základní myšlenkou twistorové teorie je využití souvislostí mezi kvantovou mechanikou a prostoročasovou strukturou zachycených prostřednictvím tzv. Riemannovy sféry.

Riemannova sféra je vhodným zobrazením množiny komplexních čísel na povrchu koule (podobně jako Gaussova rovina komplexních čísel, na kterou lze Riemannovu sféru promítnout). Komplexní čísla jsou základní pro kvantovou teorii a jejich struktura leží také v základech struktury prostoročasu.

V rámci twistorové teorie je považován twistorový prostor jako prostor světelných paprsků za základní, prostoročas je odvozeným pojmem. Bod v prostoročase je reprezentován množinou světelných paprsků jím procházejících. Světelné paprsky v Minkowského prostoročase se lze představit jako body v twistorovém prostoru. Bod prostoročasu se tak stává Riemannovou sférou v twistorovém prostoru.

Díky tzv. helicitě fotonu, která může být pravotočivá nebo levotočivá, je twistorový prostor komplexní projektivní třídimenzionální prostor se šesti reálnými dimenzemi (každý komplexní prostor musí být sudě dimenzionální). Projektivní twistorový prostor může být popsán poměry čtyř komplexních čísel, světobody v prostoročase jsou dány čtyřmi reálnými čísly - tato úvaha tvoří základ korespondence prostoročasové a twistorové struktury. Např. twistorová kosmologie uvažuje o velkém třesku s indexem křivosti k<0, který vede k otevřenému vesmíru.

PŘÍLOHA B8 Výklad modelu nestatistické fyziky v 7. až 12. kapitole

Přílohy B2 a B3 znázorňují a popisují model klasické nestatistické fyziky. Dílčí prvky modelu klasické nestatistické fyziky jsou vyloženy v následujících kapitolách:

- 7. kapitola "Klasická mechanika" redukuje lagrangeovský a hamiltonovský formalismus na fromalismus newtonovský. Newtonovský formalismus je aplikován v odstavcích 7.1. až 7.5. na mechanický pohyb hmotného bodu, na mechanický kmitavý pohyb oscilátoru a na mechanické vlnění. Formalismus d'alembertovský je použit v odstavci 7.6. při zkoumání pohybu částice kontinua.

- 8. kapitola "Klasické aplikace elektromagnetického pole" je založena v odstavcích 8.1. a 8.2. na použití lagrangeovského a hamiltonovského formalismu při zkoumání klasické podoby elektromagnetického pole, včetně působení konstantního elektromagnetického pole na klasickou nabitou částici v odstavci 8.3. V odstavci 8.4. jsou popsány Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole a v odstavci 8.5. je prokázáno, že volné elektromagnetické pole s danou frekvencí a s obrovským počtem fotonů se šíří prostorem jako elektromagnetické vlnění s fázovou rychlostí rovnou rychlosti světla.

- 12.kapitola "Klasické, kvantové a relativistické aplikace jaderné fyziky" využívá v některých částech odstavců 12.1. až 12.6. některé závěry klasické mechaniky.

Přílohy B4 a B5 znázorňují a popisují model kvantové nestatistické fyziky. Dílčí prvky modelu kvantové nestatistické fyziky jsou vyloženy v následujících kapitolách:

- 9.kapitola "Kvantová mechanika" na příkladu elektronu, jádra atomu a molekuly vody popisuje v odstavcích 9.1. až 9.5. vlnově korpuskulární dualismus látkových částic.

- 11.kapitola "Kvantové a relativistické aplikace elektromagnetického pole" popisuje v odstavcích 11.1. až 11.3. vlnově korpuskulární dualismus volného monochromatického a polychromatického elektromagnetického pole i vlnově korpuskulární dualismus polní částice "foton". Oba "vlnově korpuskulární dualismy" nelze zkoumat izolovaně - to se ukazuje v odstavci 11.4. při výkladu elektromagnetického záření.

- 12.kapitola "Klasické, kvantové a relativistické aplikace jaderné fyziky" využívá v některých částech odstavců 12.1. až 12.6. některé závěry kvantové mechaniky.

Přílohy B6 a B7 znázorňují a popisují model relativistické nestatistické fyziky. Dílčí prvky modelu relativistické nestatistické fyziky jsou vyloženy v následujících kapitolách:

 10.kapitola "Relativistická mechanika" uvádí v odstavcích 10.1. a 10.2. vedle popisu celkové struktury relativistické mechaniky také základní vztahy relativistické dynamiky: Jednorozměrnou relativistickou pohybovou rovnici, vztah pro hmotnost za pohybu. Odvození Einsteinova vztahu pro celkovou energii kapitolu uzavírá.

- 11.kapitola "Kvantové a relativistické aplikace elektromagnetického pole" využívá v odstavcích 11.1. až 11.4. hojně vztahy pro hmotnost za pohybu a Einsteinův vztah pro celkovou energii. Odstavec 11.5. je pak založen na použití jednorozměrné relativistické pohybové rovnice v rámci působení elektromagnetického pole na relativistickou částici.

- 12.kapitola "Klasické, kvantové a relativistické aplikace jaderné fyziky" využívá v některých částech odstavců 12.1. až 12.6. vztahy pro hmotnost za pohybu a Einsteinův vztah pro celkovou energii.

C. IONIZUJÍCÍ ZÁŘENÍ A JEHO APLIKACE V RADIOLOGII

13. Ionizace prostředí, prostředky a způsoby ionizace, ionizující záření

13.1. Proces ionizace prostředí

Elektrický proud v kovech je spojen s pohybem téměř volných elektronů, které vznikly odtržením valenčních elektronů od atomů kovu. Kladné ionty kovů kmitají kolem rovnovážných poloh v krystalové mříži kovu a vedení elektrického proudu se neúčastní. Pro kovové krystalické látky se elektrony nacházejí v periodickém potenciálovém poli (proto je nelze považovat za zcela volné), periodicita tohoto pole odpovídá periodicitě krystalové mříže kovu. Vedení proudu v kovech (a pevných látkách obecně) lze vysvětlit zonální teorií pevných látek.

Zonální struktura pevných látek je spojena se vznikem vodivostní zóny VOZ, valenční zóny VAZ a zaplněné zóny vnitřních elektronů VNZ, dále pak se vznikem zakázané zóny ZZ-1 mezi VOZ a VAZ a zakázané zóny ZZ-2 mezi VAZ a VNZ. Pro kovy se VOZ a VAZ překrývají, pro polovodiče je zakázaná zóna ZZ-1 úzká, pro izolanty je naopak zakázaná zóna ZZ-1 široká. Proto se slabě poutané valenční elektrony (jako součást VAZ) v kovu stávají téměř volnými elektrony (jako součást VOZ) a jejich energie je kvantována v rámci periodického potenciálového pole celého krystalu. Kovy mají elektronovou vodivost, při průchodu proudu v kovu nenastávají chemické změny. Vznik iontů a téměř volných elektronů v kovu je důsledkem kvantově mechanických přechodů, nikoliv procesu ionizace.

Z hlediska typu vodivosti a možných chemických změn je odlišná situace u látek, které mají iontovou vodivost. **Mezi látky s iontovou vodivostí patří elektrolyty** (elektrolyty jsou většinou kapalné látky). U elektrolytů vznikají ionty procesem disociace molekul. Např. u roztoku NaCl vnikají molekuly vody mezi ionty mřížky, uvolňují pevnou heteropolární vazbu v neutrální molekule NaCl a vzniká kladný iont Na⁺ a záporný Cl⁻. Děj, který v elektrolytech průchodem proudu nastává, se nazývá elektrolýzou. Zákonitosti elektrolýzy objevil v r. 1833 Faraday a popsal je dvěma zákony - ukázal, že elektrolýza je vlastně chemický rozklad elektrolytu elektrickým proudem. Vznik iontů v elektrolytech je důsledkem procesu disociace, nikoliv procesu ionizace.

Plyny jsou za normálních okolností nevodivé - jsou velmi dobrými izolanty. Vodivými se stávají procesem ionizace. **Ionizace plynů** je vznik volných elektronů a kladných iontů v plynu v důsledku rozštěpení neutrální molekuly nebo atomu na kladný iont a elektron. Ionizace je vyvolávána různými způsoby pomocí prostředků ionizace. Děj opačný k ionizaci se nazývá rekombinace. **Prostředky a způsoby ionizace** lze popsat následujícím přehledem:

a) Vysoká teplota může být příčinou ionizace nárazem. V důsledku vysoké kinetické energie molekul plynu může být při vzájemných srážkách způsobena ionizace nárazem

b) Elektrické pole může být příčinou ionizace nárazem, jestliže již v plynu existují ionty. Existující ionty mohou být elektrickým polem urychleny do té míry, že při srážce s molekulou či atomem způsobí ionizaci nárazem

c) Korpuskulární záření (tj. jaderná i nejaderná záření látkových částic) může být ionizátorem, který několika různými způsoby vyvolá ionizaci plynu. Nabité i nenabité částice těchto záření mohou při srážkách s molekulou či atomem plynu způsobit ionizaci nárazem. Jaderná i nejaderná záření tvořená nabitými částicemi pak vedle ionizace nárazem mohou ionizovat přímo neutrální molekuly, atomy a další mikroobjekty během celé dráhy svého průletu plynem nebo i jiným prostředím v důsledku např. elektromagnetické interakce s elektronovými obaly. Jaderná záření tvořená nenabitými částicemi mohou vedle ionizace nárazem ionizovat nepřímo. Při interakci nenabitých částic jaderného nebo nejaderného záření s molekulami či atomy plynu nebo i s mikroobjekty jiných prostředí mohou vznikat sekundární nabité částice, které jsou již schopny přímé ionizace

d) Elektromagnetické záření jaderného či nejaderného původu se rovněž může stát ionizátorem vyvolávajícím ionizaci plynu. Ionizace částic plynu nebo i jiného prostředí může nastat absorpcí fotonu např. ultrafialového záření, rentgenového záření či gama záření nebo procesem nepřímé ionizace, který byl popsán již u korpuskulárních záření.

Obecně lze ionizaci prostředí vymezit jako přeměnu původních elektricky neutrálních mikroobjektů prostředí na elektricky nabité částice. Mezi ionizaci prostředí není zařazován vznik iontů v kovech jako důsledek kvantově mechanických přechodů a vznik iontů v elektrolytech jako důsledek disociace molekul. Elektricky nabitými částicemi vzniklými ionizací jsou většinou ionty a elektrony, proto byl tento proces nazván ionizací.

Prostředky ionizace jsou ionizátory a příčiny ionizace. Ionizátorem mohou být korpuskulární nebo elektromagnetická záření, příčinami ionizace může být vysoká teplota nebo elektrické pole. Ionizátory lze nazvat ionizujícími zářeními.

Způsobem ionizace může být ionizace nárazem látkovou částicí (vznik např. páru iont, elektron), ionizace absorpcí fotonu (opět např. vznik páru iont, elektron), přímá ionizace korpuskulárním zářením nabitých částic (vznik obrovského počtu párů např. iont, elektron) a nepřímá ionizace korpuskulárním zářením nenabitých částic nebo elektromagnetickým zářením (opět vznik např. obrovského počtu párů iont, elektron).

Radiologie jako vědní směr byla z hlediska medicínské praxe zkráceně definována jako klinický obor založený na diagnostickém a terapeutickém využití ionizujícího záření, tj. klinický obor vycházející z ionizujícího záření a jeho aplikací v medicíně (v této zkratce je implicitně skryto i využití neionizujícího záření a mechanického ultrazvukového vlnění). Proto je potřebné popsat celý proces radiologického využití ionizujícího záření. To znamená stručně popsat vedle zdrojů ionizujícího záření, interakce ionizujícího záření s prostředím a měření ionizujícího záření také fyzikální základy radiodiagnostiky a radioterapie a fyzikální základy dílčích radiodiagnostických a radioterapeutických postupů.

13.2. Přehled ionizujících a neionizujících záření a vlnění používaných v radiologii

Schematický a jen orientační přehled obsahuje pro každý druh záření či vlnění údaje o vlnové délce a frekvenci, o přírodním a umělém zdroji, o způsobu detekce a o zařazení do příslušné oblasti radiologie. U elektromagnetických záření bylo využito spektra elektromagnetických záření podle 11.kap., odst.11.4.2. U korpuskulárních záření nejsou uvedeny typy látkových částic, z této příčiny je uveden podle (B35a) a (B35b) jen obecný vzorec pro de Broglieovu vlnovou délku a frekvenci příslušné pravděpodobnostní vlny.

Schematický přehled záření a vlnění používaných v radiologii je uveden v následující tabulce Tab.7:
a) Gama záření (nepřímo ionizující záření, ionizace absorpcí fotonu)	
Vlnová délka: Přírodní zdroj: Umělý zdroj: Detekce: Oblast radiologie:	10 ⁻¹³ – 10 ⁻¹² m Frekvence: 10 ²⁰ – 10 ²¹ Hz Přechody v jádře atomu Urychlovače, radioizotopy Plynové, jiskrové, scintilační detektory Nukleární medicína
b) Rentgenové záření (nepřímo ionizující záření, ionizace absorpcí fotonu)	
Vlnová délka: Přírodní zdroj: Umělý zdroj: Detekce: Oblast radiologie:	10 ⁻¹⁰ m Frekvence: 10 ¹⁸ Hz Přechody v obalu atomu Rentgenka Plynové, krystalové, scintilační, fotochemické detektory Rentgenová diagnostika (rentgen, výpočetní tomografie), Rentgenová terapie
c) Infračervené záření (neionizující záření)	
Vlnová délka: Přírodní zdroj: Umělý zdroj: Detekce: Oblast radiologie:	10-5 mFrekvence: 1013 HzVibrace a rotace molekulFrekvence: 1013 HzTělesa s teplotou vyšší než 0 KRadiotermometry, termokameryTermografieFrekvence: 1013 Hz
d) Rádiové vlny (neionizující záření)	
Vlnová délka: Přírodní zdroj: Umělý zdroj: Detekce: Oblast radiologie:	10 ⁰ – 10 ⁴ m Frekvence: 10 ⁴ – 10 ⁸ Hz Pohyb téměř volných elektronů Vysílač vysokofrekvenčního elektromagnetického signálu Přijímač vysokofrekvenčního elektromagnetického signálu Nukleární magnetická rezonance
e) Ultrazvukové vlny (mechanické vlnění)	
Vlnová délka: Přírodní zdroj: Umělý zdroj: Detekce: Oblast radiologie:	10 ⁻³ m Frekvence: 10 ⁶ – 10 ⁷ Hz Chvění těles Magnetostrikční a piezoelektrický oscilátor Magnetostrikční a piezoelektrický oscilátor Sonografie
f) Korpuskulární záření (přímo a nepřímo ionizující záření, ionizace nárazem)	
Vlnová délka: de Br Přírodní zdroj: Umělý zdroj: Detekce: Oblast radiologie:	oglieova vlnová délka $\lambda = h/mv$ Frekvence: $v = mc^2/h$ Přirozeně radioaktivní prvky Uměle radioaktivní prvky, urychlovače Plynové, jiskrové, krystalové, scintilační detektory Nukleární medicína, radioterapie

 Tab. 7 Přehled ionizujících a neionizujících záření používaných v radiologii

14. Zdroje ionizujícího záření a interakce ionizujícího záření s prostředím

14.1. Popis zdrojů

a) Přírodní zdroje

Přírodními zdroji jsou vedle kosmického záření především přirozeně radioaktivní prvky (viz 12.kap., odst.12.2.). Ozáření (viz 12.kap., odst.12.3.) z přírodních zdrojů je většinou kladeno mimo rámec ochrany před zářením.

Přirozeně radioaktivní prvky lze členit na prvky s vysokými protonovými čísly Z (viz rozpadové radioaktivní řady končící stabilními izotopy olova, kap.12, odst.12.2.), v přírodě dále existují přirozeně radioaktivní prvky s nižším Z (např. negativní beta rozpad izotopu draslíku $^{40}_{19}$ K nebo záchyt elektronu týmž izotopem draslíku) a konečně také v důsledku působení neutronové složky kosmického záření lehké přirozeně radioaktivní prvky (např. jádra tritia $^{3}_{1}$ H jsou nestabilní s negativním beta rozpadem).

Fyzikální popis alfa, beta a gama rozpadu (přeměny) přirozeně radioaktivních prvků byl uveden v 12.kap., odst.12.2., včetně posunů v hodnotách nukleonových čísel A a protonových čísel Z při transmutaci mateřského prvku na prvek dceřinný. Rovněž zde byl odvozen rozpadový (přeměnový) zákon (B57), zavedena rozpadová konstanta λ a poločas rozpadu T (viz Dodatek 5, Příklad 14).

b) Umělé zdroje

Ozáření lidí vyšetřovaných nebo léčených pomocí zdrojů ionizujícího záření je v podstatě jediným ozářením obyvatel z umělých zdrojů. Stručný výčet umělých zdrojů ionizujícího záření je následující:

b1) Rentgenka

Rentgenka je zdrojem rentgenového záření. Převažuje pro diagnostiku důležitější brzdné rentgenové záření se spojitým spektrem, využití charakteristického rentgenového záření je spíše v chemii a fyzice při rentgenové strukturální analýze. Princip rentgenky je popsán principem vzniku brzdného rentgenového záření prostřednictvím obráceného fotoelektrického jevu (viz 11.kap., odst.11.4.3., vztah (B54)) a principem vzniku charakteristického rentgenového záření prostřednictvím jetodů mezi stacionárními kvantovými stavy v obalu atomu (viz 9.kap., odst.9.3.).

b2) Cyklotron, betatron (kruhový urychlovač)

Cyklotron lze použít jako zdroj kladně nabitých částic (především ${}_{1}^{1}p$, ${}_{2}^{4}\alpha$, ionty). Výhodou jsou přesně definované dávky (viz 12.kap., odst.12.3.) a také velmi výrazně prostorově ohraničené předání energetického maxima až na konci dráhy i hluboko umístěným nádorům.

Cyklotron a jeho protonový svazek s energií řádově desítky MeV lze použít také jako zdroj neutronů. Ve speciálních prostorách pak beryliové terče ozářené protony produkují neutrony (viz jaderné reakce, 12.kap., odst. 12.6.), které jsou často úspěšně aplikovány na specificky umístěné nádory. Zajímavou možností je jaderná reakce dopadajících neutronů s jádry bóru (např. v nádorech mozku se zachycují sloučeniny bóru), při které vznikají alfa

částice (vzhledem ke krátkému doletu alfa částic by alfa terapie z povrchu těla nebyla pro hlouběji uložená nádorová ložiska možná).

Další typ kruhového urychlovače - betatron lze použít jako zdroj záporně nabitých částic. Urychlené relativistické elektrony mohou získat energii až 300 MeV, tato energie je spojena s dosažením hmotnosti za pohybu (viz (B48)) odpovídající přibližně 600 klidových hmotností.

Princip kruhového urychlovače byl popsán v 8.kap., odst.8.3. V tomto odstavci byl odvozen pohybový zákon pro působení homogenního magnetického pole na nabitou částici. V 12.kap., odst.12.5. pak bylo upozorněno na rezonanční podmínku pro cyklotrony a na další typy kruhových urychlovačů (viz Dodatek 5, Příklady 4 až 7).

b3) Lineární urychlovač

Lineární urychlovač lze použít jako zdroj nabitých částic. Používá se také k produkci vysokoenergetických elektronů.

Princip klasického lineárního urychlovače byl popsán v 8.kap., odst.8.3. V tomto odstavci byl odvozen pohybový zákon pro působící příčné homogenní elektrické pole. Působení podélného homogenního elektrického pole lze popsat např. změnou počátečních podmínek - místo intenzity \vec{E} (0,*E*,0) kolmé na směr pohybu klasického náboje v ose x by byla vzata intenzita \vec{E} (*E*,0,0) rovnoběžná s osou x (viz Dodatek 5, Příklady 2 a 3).

Princip relativistického lineárního urychlovače byl popsán v 11.kap., odst.11.5., včetně předložení některých kvantitativních dat. Princip lineárních urychlovačů iontů byl i s některými technickými a kvantitativními údaji stručně vyložen v 12.kap., odst.12.5.

b4) Generátory krátkodobých nuklidů

Generátory krátkodobých nuklidů se používají jako zdroje gama záření. Produkují radionuklidy s krátkým poločasem rozpadu (viz 12.kap., odst.12.2.), které se používají ke značení radiofarmak. Pracují na principu přeměny mateřského prvku s dlouhým poločasem rozpadu na dceřinný prvek s krátkým poločasem rozpadu (viz rozpadový zákon, 12.kap., odst.12.2.). Nejčastěji používaným generátorem je generátor techneciový.

Vedle technických parametrů např. generátorů krátkodobých nuklidů je podstatný fyzikální základ výroby umělých radionuklidů. Pokroky ve výrobě umělých radionuklidů jsou tak velké, že lze v podstatě získat každý izotop - fyzikálním základem výroby jsou jaderné reakce. Přehled jaderných reakcí pro potřeby radiologie vychází z 12.kap., odst.12.6.

Následný stručný přehled jaderných reakcí udává vedle částice ostřelující původní terčové jádro také vzniklou výslednou částici, která je vedle transmutovaného jádra produktem jaderné reakce:

a) Ostřelování terčových jader protony \Rightarrow typy jaderných reakcí (p, α), (p, γ), (p,n)

- b) Ostřelování terčových jader deuterony (s kladným nábojem) ⇒ typy jaderných reakcí (d,α), (d,n), (d,p)
- c) Ostřelování terčových jader rychlými alfa částicemi \Rightarrow typy jaderných reakcí (α ,p), (α ,n)
- d) Ostřelování terčových jader elektrony nebo ionty urychlenými urychlovači
- e) Ostřelování terčových jader pomalými neutrony ⇒ pohlcení neutronu jádrem bez následné emise nebo s možnými typy jaderných reakcí (n,α), (n,p)
- f) Fotojaderné reakce (interakce jádra s gama zářením) \Rightarrow typy jaderných reakcí (γ ,n), (γ ,p), (γ , α), (γ ,2n). Nejčastěji se vyskytuje typ (γ ,n), jako příklad může být vzat nukleární fotoelektrický jev ${}_{1}^{2}H + {}_{0}^{0}\gamma = {}_{1}^{1}p + {}_{0}^{1}n$.

b5) Jaderný reaktor

Jaderný reaktor je používán jako mohutný zdroj neutronového záření (viz 12.kap., odst.12.6.). Pomocí toku neutronu pak vzniká řada radioaktivních izotopů potřebných pro radiodiagnostiku i radioterapii (většina produktů vzniklá tímto způsobem nachází své využití právě v radiologii).

14.2. Popis interakcí

Ionizující záření předává (ať již ve smyslu ztráty nebo ve smyslu cílené dávky) energii při průchodu absorbujícím prostředím. Ztráty nebo dávky energie závisejí na druhu ionizujícího záření a na fyzikálních vlastnostech absorbujícího prostředí. Výčet interakcí bude strukturován podle typu absorbujícího prostředí.

a) Interakce ionizujícího záření s obaly atomů

Jelikož např. interakce neutronů s obalem atomů prostředí jsou zanedbatelné, lze fyzikální podstatu jednotlivých typů interakcí ionizujících záření s obalem atomů modelově vyložit na příkladech alfa, beta a gama záření prostřednictvím 9.kap., odstavce 9.1., 9.2., 9.3., 10.kap., odst.10.2., 11.kap., odst.11.4. a 12.kap., odst.12.2. Výčet typů interakcí ionizujícího záření s obaly atomů, podložený pochopením fyzikální podstaty, je pak následující:

a1) Excitace

Excitace je přechod do excitovaného stacionárního stavu s návratem do základního stacionárního stavu za desetimiliontiny sekundy a s vyzářením fotonu elektromagnetického záření (viz 9.kap., odst.9.1., odst.9.2., odst.9.3.)

a2) Ionizace

Ionizace je "vyražení" elektronu z obalu atomu, vznik iontového páru "kladný iont, elektron" (viz 13.kap., odst.13.1.). Při vzniku jednoho iontového páru jde o ionizaci nárazem nebo o pohlcení fotonu. Při vzniku obrovského počtu iontových párů během doletu částice ionizujícího záření je celková ionizace rovna součtu **primární ionizace** (počet iontových párů vytvořený ionizující částicí) a **sekundární ionizace** (elektrony uvolněné ionizací mohou samy ionizovat a vytvářet další iontové páry). Počet vzniklých iontových párů vztažený na jednotku dráhy charakterizuje specifickou ionizaci jako úbytek energie nabité částice.

a3) Rozptyl

Ionizující částice ztrácí (případně i získává) energii elektromagnetickou interakcí s obalem atomu se současným zakřivením původní lineární dráhy ionizující částice (viz 8.kap., odst.8.1. a odst.8.2.).

a4) Brzdné elektromagnetické záření

Nabité částice ionizujícího záření při zrychleném (zpomaleném) pohybu vyzařují brzdné elektromagnetické záření (viz 8.kap., odst.8.1., 11.kap., odst.11.4., 12.kap., odst.12.2.).

b) Interakce ionizujícího záření s jádry atomů

Podstatou této interakce je účinná "srážka" ionizující částice s dostatečně velkou energií s terčovým jádrem původního prvku. Terčová jádra se dělí na lehká s nukleonovým číslem menším než 30, střední a těžká s nukleonovým číslem větším než 80. S tímto dělením úzce souvisí také charakterizování terčové částice jako určité plochy zvané účinný průřez

interakce (viz 12.kap. odst.12.3.). Účinný průřez interakce je schopen vyjádřit pravděpodobnost, že ostřelující částice ionizujícího záření bude jistým způsobem interagovat s terčovou částicí (viz 12.kap. odst.12.3.). Důsledkem je vyvolání jaderné reakce, jejímž výsledkem je transmutované stabilní nebo radioaktivní jádro a emise látkové nebo polní částice (viz 9.kap., odst.9.4., 12.kap., odst.12.6.).

Vedle účinného průřezu interakce (viz vztahy (B59) a (B60)) hrají roli příslušné typy jaderných reakcí popisujících přeměnu původních jader prostředí ostřelujícími částicemi (neutrony, fotony gama záření, kladně nabitými částicemi - alfa částicemi, deuterony, protony). Produktem jaderné reakce je vedle transmutovaného jádra také případná emitovaná částice. Typologie a popis jaderných reakcí byly podány v 14.kap., odst.14.1. nebo také v 12.kap., odst.12.6.

c) Interakce ionizujícího záření s krystalovou mříží

Průvodním jevem této interakce je zahřátí materiálu prostředí (např. anody rentgenky) v důsledku předání části energie primárního elektronu krystalové mříži materiálu anody. Zbývající část energie elektronu umožňuje vznik charakteristického rentgenového záření na základě excitace a deexcitace elektronů v obalu atomů materiálu anody. Nárůstem vnitřní energie U krystalové mříže dochází k zvýšení teploty materiálu anody (viz 2.kap., odst.2.1., 6.kap., odst.6.2., viz Dodatek 3, Příklad 6).

Dalším průvodním jevem této interakce je zahřátí materiálu prostředí (např. anody rentgenové lampy) **při ionizaci atomů** materiálu anody primárními elektrony. Vzniklé sekundární elektrony dále ionizují atomy materiálu anody - část energie se přitom předává krystalové mříži materiálu anody, narůstá vnitřní energie *U* krystalové mříže a dochází k zvýšení teploty anody (viz 2.kap., odst.2.1., viz 6.kap., odst.6.2., <u>viz Dodatek 3, Příklad 6</u>).

Podle 6.kap., odst.6.2. lze krystalovou mříž např. materiálu anody rentgenové lampy považovat za makrosystém fononů, který lze popsat pomocí Einsteinova modelu krystalu. Einstein zavedl model krystalu tvořeného jednoatomovými molekulami, v němž všechny atomy kmitají se stejnou frekvencí ω . Kmity každého atomu lze považovat za kmity 3 harmonických oscilátorů, užitím kvantové mechaniky harmonického oscilátoru (viz 11.kap., odst.11.1.) a užitím vztahu (A33) lze pak střední hodnotu vnitřní energie \overline{U} krystalu zapsat ve tvaru

$$\overline{U} = 3 N \left(\frac{\hbar \omega}{2} + \frac{\hbar \omega}{\exp(\beta \hbar \omega) - 1} \right).$$

Pro vysoké teploty T je $\beta \hbar \omega \ll 1$ ($\beta = 1/kT$). Pak výraz pro vnitřní energii U přechází při zanedbání prvního členu v závorce v obvyklou aplikaci ekvipartičního teorému z klasické teorie měrných tepelných kapacit U = 3NkT, $C_V = 3Nk$ (podrobněji viz Dodatek 3, <u>Příklad 6</u>).

Odtud pramení zahřívání např. materiálu anody rentgenky při nárůstu vnitřní energie U krystalové mříže v důsledku interakcí ionizujícího záření s krystalovou mříží.

d) Účinky ionizujícího záření v biologickém prostředí

Dávka ionizujícího záření absorbovaná biologickým prostředím vyvolává časově uspořádaný sled účinků:

- fyzikální účinky (fyzikální typy interakcí spojené s přenosem energie, doba uskutečnění interakce v řádu biliontin sekundy limitována rychlostí polních částic),

- fyzikálně-chemické účinky (vlastní procesy excitací a ionizací s přenosem energii na úrovni molekulárních struktur s dobou trvání miliardtin sekundy),

- chemické účinky (primární ovlivňování jednoduchých biologických struktur s dobou trvání miliontin sekundy),

- **biologické účinky** (ovlivnění a reakce biologických struktur od nejjednodušší buněčné úrovně až k úrovni celého organizmu s dobou trvání sekundy až roky).

Ionizující záření v biologickém prostředí má účinky **užitečné a škodlivé**. **Užitečné účinky** jsou spojeny s principy vyšetřovacích metod v radiologii a s principy léčby ionizujícím zářením. Např. při radionuklidové terapii (při aplikaci radiofarmaka) nebo při rentgenové terapii jsou užitečné účinky spojeny s poškozením nebo destrukcí nádorové tkáně. Radioaktivní farmakon je chemická látka, jejíž některé molekuly obsahují radioaktivní atomy, a současně splňují kritéria farmaka podle Lékopisu. Při diagnostických metodách in vivo (radioaktivní farmakon podáváno do organizmu) nebo při rentgenové diagnostice jsou užitečné účinky ionizujícího záření spojeny se zevní detekcí radioaktivního záření (po interakci s organizmem) s cílem dobrat se spolehlivé diagnózy.

Škodlivé účinky ionizujícího záření v biologickém prostředí jsou dány patogenesí poškození biologických struktur. Škodlivé účinky lze dělit na přímé (absorpce dávky s např. možným rozpadem zasažené buňky) a na nepřímé (např. radiolýza vody při absorpci dávky vede k tvorbě agresivních volných radikálů s možností následného poškození důležitých molekul). Formy poškození mohou mít stochastický charakter a deterministický charakter. Stochastický charakter se projevuje vznikem pravděpodobnosti vyvolání patologických změn v organizmu - somatických (nebezpečí vzniku nádoru) nebo dědičných (postižení potomků ozářeného jedince). Deterministický charakter se projevuje vznikem akutní nemoci z ozáření při jednorázové dávce nebo chronické nemoci z ozáření po účincích malých opakovaných dávek. Ochrana před ionizujícím zářením může mít charakter biologický (zvyšování odolnosti), chemický (podávání radioprotektivních látek) a fyzikální (respektování tří základních faktorů - vzdálenost, zkrácení času, princip stínění).

Jelikož interakce ionizujícího záření s biologickým prostředím spočívá v předávání energie (ať již ve smyslu ztráty nebo ve smyslu cílené dávky) při průchodu absorbujícím prostředím, je základním zákonem fyzikálního popisu interakcí absorpční zákon (viz 12.kap., odst.12.2., vztah (B58), <u>viz Dodatek 5, Příklad 15</u>). **Tři základní faktory fyzikální ochrany před ionizujícím zářením jsou vzdálenost, zkrácení času a stínění**. Z hlediska stínění je ochrana před alfa zářením jednoduchá - vzhledem k doletu *D* několik desítek µm stačí běžný oděv. Ochrana před beta zářením (dolet *D* v měkkých tkáních je několik mm) je spojena se stíněním lehkými např. hliníkovými materiály (vůči doletu beta částic) v kombinaci s několika centimetrovou vrstvou olova (pro odstínění brzdného rentgenového záření vznikajícího ve stínícím hliníku). Pro ochranu před gama zářením je již potřebné používat materiály s vysokým protonovým číslem (olovo, ocel, beton s vhodnými příměsemi).

15. Měření ionizujícího záření

15.1. Veličiny a jednotky ionizujícího záření

a) Veličiny a jednotky ionizujícího záření z hlediska parametrů zdroje

Veličiny a jednotky z hlediska parametrů zdroje lze uvést v následujícím přehledu:

- Aktivita zářiče A $A = \lambda . n$, jednotka Bq, (viz 12.kap., odst. 12.3., vztah (B59))

- **Rozpadová konstanta** λ , poločas rozpadu T (viz 12.kap., odst.12.2., vztah (B58)). Vedle fyzikálního poločasu rozpadu T lze zavést biologický poločas rozpadu T_b jako čas, za který se z organismu vyloučí právě polovina jednorázově dodaného uměle radioaktivního prvku. Pak lze také vztahem

$$\frac{1}{T_{ef}} = \frac{1}{T} + \frac{1}{T_{h}}$$

zavést tzv. efektivní poločas rozpadu.

- Emise zdroje E jako počet částic emitovaných ze zdroje za 1 s. Jednotkou emise zdroje E je s⁻¹.

b) Veličiny a jednotky ionizujícího záření z hlediska interakce s prostředím

Veličiny a jednotky z hlediska interakcí s prostředím lze uvést v následujícím přehledu:

- Intenzita *I* ionizujícího záření, Pohlcená dávka *D*, Expozice (ozáření) *X*, Dávkový ekvivalent *H*, Koeficient absorpce μ , Polotloušťka absorbující látky *a*, Účinný průřez σ interakce, Dolet ionizující látkové částice *D* (viz 12.kap., odst.12.2., odst.12.3.).

- **Kerma** s jednotkou J.kg⁻¹ jako veličina charakterizující nepřímo ionizující záření (elektromagnetické záření fotonů, korpuskulární záření neutronů) jako součet počátečních kinetických energií nabitých částic vzniklých interakcemi částic nepřímo ionizujícího záření v prostředí o jednotkové hmotnosti.

15.2. Detekce a dozimetrie ionizujícího záření

Detekce ionizujícího záření (zjišťování existence ionizujícího záření) a dozimetrie ionizujících záření (měření veličin ionizujícího záření) byly popsány ve 12.kap., odst.12.4. Fyzikálním základem detekce a dozimetrie ionizujícího záření je přeměna energie ionizujícího záření na registrovatelné formy energie. Členění detektorů, dozimetrů a jejich kombinací s výpočetní technikou a potřebnou elektronikou podle způsobu přeměny energie ionizujícího záření je následující (výčet zařízení si nečiní nároky na úplnost):

a) Zařízení založená na ionizačním principu spojeném s vedením proudu v plynech, včetně výbojů v plynech:

Ionizační komůrka s vhodným elektrometrickým systémem např. v podobě tužkových dozimetrů,

Proporcionální počítač, Geigerův-Müllerův počítač, jiskrový počítač,

Vhodně upravené ionizační komůrky pro detekci neutronového záření.

b) Zařízení založená na excitačním principu spojeném s vedením proudu v pevných látkách nebo s fluorescenční či termoluminiscenční přeměnou energie:

Krystalové detektory (<u>excitační princip</u> spojený s vedením proudu většinou v krystalech polovodičů s vlastní nebo příměsovou vodivostí např. u krystalových počítačů a <u>excitačně</u> termoluminiscenční princip např. u anorganických krystalů prstových dozimetrů),

Scintilační detektor (excitačně-fluorescenční princip, tj. scintilační princip),

Rentgenový prosvěcovací štít (<u>excitačně-fluorescenční princip</u> v podobě skiaskopického pozorování rentgenového obrazu).

c) Zařízení založená na fotochemickém principu spojeném s přeměnou energie pomocí fotografických metod:

Filmový dozimetr (fotochemický princip na základě fotografických metod),

Rentgenový film (<u>fotochemický princip</u> na základě fotografických metod v podobě skiagrafického snímkování).

d) Kombinovaná zařízení využívající několika způsobů přeměny energie a spojená s výpočetní technikou (umožňující např. Fourierovské matematické rekonstrukce) a potřebnou elektronikou:

Zařízení pro měření aktivity látek (např. scintilační studnové detektory),

<u>Zařízení pro měření aktivity v organizmu</u> (např. soupravy pro zevní detekci a systémy celotělové detekce),

Zařízení pro planární zobrazení orgánu pomocí zevní detekce (např. pohybový scintigraf a scintilační kamera),

Zařízení pro prostorové zobrazení orgánu pomocí zevní detekce - např. přístroje pro emisní počítačovou tomografii (ECT) v podobě SPECT (použitým zdrojem je zdroj gama záření) a v podobě PET (použitým zdrojem je zdroj pozitronového záření), přístroje pro výpočetní tomografii, přístroje pro nukleární magnetickou rezonanci.

16. Fyzikální popis radiodiagnostiky a radioterapie

Fyzikální základy radiodiagnostiky a radioterapie jsou spojeny z hlediska radiologie s užitečnými účinky ionizujícího záření v biologickém prostředí. Příkladem může být radionuklidová terapie po aplikaci radiofarmaka nebo rentgenová terapie, kdy jsou užitečné účinky spojeny s poškozením nebo destrukcí nádorové tkáně (viz 14.kap., odst.14.2., bod d)).

Fyzikální základy radiodiagnostiky budou popsány prostřednictvím rentgenové a radionuklidové diagnostiky, obdobně fyzikální základy radioterapie budou popsány prostřednictvím rentgenové a radionuklidové terapie.

Shrnující popisy budou obsahovat:

- vystižení fyzikální podstaty,
- používané zdroje ionizujícího záření,
- druh interakce ionizujícího záření s prostředím,
- u radiodiagnostiky také charakteristiku detekce a dozimetrie.

16.1. Popis radiodiagnostiky

a) Fyzikální popis rentgenové diagnostiky

Vystižení fyzikální podstaty:

Fotony rentgenového záření pronikají všemi prostředími a jsou těmito prostředími v různé míře absorbovány - na tomto principu je založena rentgenová diagnostika. Schopnost absorpce je vyjádřena absorpčním zákonem (B58) a koeficient absorpce μ závisí na průměrném protonovém čísle absorbujícího prostředí u živého organismu a frekvenci rentgenového záření (u měkkého rentgenového záření absorbuje kost 4 krát více než voda, u tvrdého rentgenového záření již jen 2 krát více).

Zdroj:

Zdrojem rentgenového záření je rentgenka v podobě skleněné a vysoce evakuované Coolidgeovy lampy. Diagnosticky využité rentgenové záření vychází výstupním okénkem v krytu rentgenky. Pro diagnostiku má význam brzdné rentgenové záření.

Druh interakce:

Interakce rentgenového záření jsou spojeny s absorpcí způsobenou fotoelektrickým jevem a Comptonovým jevem (s rostoucí frekvencí rentgenového záření roste podíl Comptonova jevu).

Charakteristika detekce a dozimetrie:

Při detekci a dozimetrii rentgenového záření se uplatňuje obvyklý princip přeměny energie rentgenového záření na registrovatelné formy energie. Rentgenový obraz po průchodu prostředím je znázorňován na principu excitačně fluorescenčním prostřednictvím skiaskopického prosvěcování nebo na principu fotochemickém prostřednictvím skiagrafického snímkování. S výpočetní tomografií jsou spojena zařízení umožňující (s využitím matematické rekonstrukce údajů o absorpci rentgenového záření) prostorové zobrazení orgánu.

b) Fyzikální popis radionuklidové diagnostiky

Vystižení fyzikální podstaty:

Radionuklidová diagnostika se dělí na metody in vivo (radioaktivní farmakon jako otevřený zářič je přímo podáno do živého organizmu), metody in vitro (pomocí radioaktivních látek je zpracován odebraný vzorek biologického materiálu). Následně je pak proměřována radioaktivita akumulovaná uvnitř organizmu nebo radioaktivita odebraného biologického vzorku. Z hlediska radionuklidové diagnostiky jsou pak sledovány především procesy distribuce radioaktivního farmaka v různých tkáních a prostorech a procesy aktivního transportu radioaktivního farmaka v rámci jednotlivých orgánů. Jak indikace distribuce, tak i indikace kinetiky různých látek mají v radiologii řadu odborných podob.

Zdroj:

Zdrojem radionuklidů pro značení radioaktivního farmaka (časté značení farmaka gama nebo pozitivními beta zářiči) jsou např. radionuklidové generátory, které pracují podle rozpadového zákona (B57) na principu přeměny mateřského radioaktivního prvku s dlouhým poločasem rozpadu T na dceřinný radioaktivní prvek s krátkým poločasem rozpadu. Nejčastější technickou podobou je generátor techneciový. Většina radionuklidů pro lékařské použití je produkována v jaderném reaktoru, některé radionuklidy také prostřednictvím cyklotronu.

Druh interakce:

Z hlediska interakce krátkodobých otevřených zářičů in vivo s biologickým prostředím znamenají diagnostické aplikace vždy velmi nízkou radiační zátěž pro živý organizmus.

Charakteristika detekce a dozimetrie:

Detekce a dozimetrie při radionuklidové diagnostice je založena na scintilačním principu v režimu jednoduché zevní detekce nebo v režimu zobrazujícím distribuci radioaktivního zářiče prostřednictvím složitějších energetických přeměn (např. soupravy pro zevní detekci nebo scintigrafické zobrazovací systémy). U tomografických scintigrafických systémů je pak možný přechod od planárního zobrazování k zobrazování prostorovému.

16.2. Popis radioterapie

a) Fyzikální popis rentgenové terapie

Vystižení fyzikální podstaty:

Fyzikální základ rentgenové terapie spočívá v dodání tak velkého množství energie do nádorového ložiska, aby toto množství bylo biologicky účinné ve smyslu poškození či destrukce nádorové tkáně a ve smyslu minimálního poškození okolních zdravých tkání.

<u>Zdroj:</u>

Zdrojem terapeutického rentgenového záření je rentgenka. Z hlediska hloubky umístění a rozsahu nádoru a také podle radiosenzitivity (tj. citlivosti) okolní tkáně i samotného nádoru je volena energie terapeutického rentgenového záření. Podle těchto parametrů lze použít zdroje pro povrchovou, polohloubkovou a vysokovoltážní rentgenovou terapii.

Druh interakce:

Interakce rentgenového záření jsou opět spojeny s absorpcí způsobenou fotoelektrickým jevem a Comptonovým jevem (s rostoucí frekvencí rentgenového záření roste podíl Comptonova jevu) a jsou důležitým vodítkem pro volbu zdroje terapeutického rentgenového záření.

b) Fyzikální popis radionuklidové terapie

Vystižení fyzikálního základu:

Fyzikální základ radionuklidové terapie je identický s cílem rentgenové terapie - dodat tak velké množství energie do nádorového ložiska, aby toto množství bylo biologicky účinné ve smyslu poškození či destrukce tkáně a ve smyslu minimálního poškození okolních zdravých tkání. Možnosti léčby radioaktivním zářením vydávaným radionuklidem jsou opět spojeny s hloubkou umístění a rozsahem nádorů a s radiosenzitivitou okolní tkáně a nádoru samotného na použité radioaktivní záření.

<u>Zdroj:</u>

Zdrojem vhodného ionizujícího záření může být zdroj kladně nabitých částic (např. cyklotron), zdroj záporně nabitých částic (např. lineární urychlovač nebo betatron), zdroj nepřímo ionizujících látkových částic (např. radionuklidy vyprodukované jaderným reaktorem nebo cyklotron s protonovým svazkem a s jeho transformací na neutronové záření), zdroj nepřímo ionizujících gama fotonů (např. generátory radionuklidů, radionuklidy vyprodukované jaderným reaktorem nebo vhodné gama zářiče). Volba zdroje záleží také na onkologickém komplexním pojetí léčby.

Druh interakce:

Interakce terapeutického ionizujícího záření s biologickou tkání je spojena např. s radiosenzitivitou nádorů na ionizující záření - při velké citlivosti lze volit zevní ozáření na základě stanovení optimální hodnoty a rozložení absorbované dávky, při málo radiosenzitivních nádorech je možné vydat se cestou brachyterapie se zavedením uzavřeného zářiče (radioforu) negativního beta záření přímo do nádorového ložiska. Z hlediska interakce s biologickým prostředím je pak nezbytné uzavření zářiče do kovového pouzdra, které propouští jen záření vhodné pro léčebný účinek.

17. Fyzikální popis zobrazovacích postupů

Popis jednotlivých zobrazovacích postupů bude mít **přehledový charakter** a následující členění:

Vystižení fyzikální podstaty a cílů, použité zdroje záření a vlnění, druh interakce s prostředím, charakteristika detekce a dozimetrie, odkazy na fyzikální metodologický základ a na dílčí fyzikální základy.

17.1. Nukleární medicína

Fyzikální podstatou nukleární medicíny je umělá radioaktivita - otevřené radioaktivní zářiče vyzařují v důsledku jaderných přeměn a jaderných deexcitací (tj. v důsledku umělé radioaktivity) jak korpuskulární záření, tak i záření elektromagnetické.

Cílem nukleární medicíny je využití otevřených radioaktivních zářičů (radioaktivních farmak značených vhodnými radionuklidy) při diagnostickém zobrazování, v radioterapii a v lékařském výzkumu. V rámci vyšetřovacích metod jsou vyšetřovanému podávány do organizmu radioaktivní farmaka a pak je proměřována radioaktivita přímo v pacientovi (in vivo) nebo radioaktivita odebraných biologických vzorků zpracovaných radioaktivními látkami (in vitro).

Zdroje ionizujícího záření, interakce s biologickým prostředím a detekce a dozimetrie potřebná v rámci nukleární medicíny byly popsány v 13.kap. až 16.kap.

Potřebným fyzikálním metodologickým základem jsou 7.kap. "Klasická mechanika", 9.kap. "Kvantová mechanika" a 10.kap. "Relativistická mechanika".

Dílčí fyzikální základy nukleární medicíny lze charakterizovat následujícími pojmy:

a) foton (11.kap., odst.11.3. "Vlnově korpuskulární dualismus fotonu")

b) **makrosystém fotonů** (2.kap., odst.2.2. "Makrosystémy volných částic při zachování diskrétních hodnot energie", 3.kap., odst.3.4. "Podstata kvaziklasického statistického přístupu", 6.kap., odst.6.1. "Záření černého tělesa")

c) elektromagnetické záření (11.kap., odst.11.4. "Elektromagnetické záření")

d) elektromagnetické vlnění (8.kap., odst.8.5. "Elektromagnetické vlnění")

e) vlnově korpuskulární dualismus látkové částice ((9.kap., odst.9.1. "Postulátová výstavba kvantové mechaniky", 11.kap., odst.11.4.3. "Kvantová optika")

f) korpuskulární záření (9.kap., odst.9.1. "Postulátová výstavba kvantové mechaniky")

g) jádro a jeho parametry (12.kap., odst.12.1. "Stavba jádra")

h) přirozená a umělá radioaktivita (12.kap., odst.12.2. "Jaderné záření")

i) rozpadový a absorpční zákon (12.kap., odst.12.2. "Jaderné záření")

j) **kvantová mechanika jádra** (9.kap., odst.9.2. "Hlavní metoda kvantové mechaniky pro stacionární stavy", odst.9.4. "Aplikace hlavní metody - slupkový model jádra")

17.2. Rentgen

Fyzikální podstatou rentgenové diagnostiky a rentgenové terapie je vyzařování brzdného rentgenového záření a charakteristického rentgenového záření. V důsledku coulombovské interakce s elektrostatickým polem atomů anody rentgenky ztratí volný elektron pohybující se v rentgence část své energie a hmotnosti - objeví se fotony brzdného rentgenového záření se spojitým spektrem. V důsledku předání části energie a hmotnosti volných elektronů dopadajících z rentgenky na vnitřní elektrony obalu atomů anody rentgenky se objeví excitace atomového obalu přechodem vnitřních elektronů do vyšších kvantových energetických stavů - při následující deexcitaci jsou vyzářeny fotony charakteristického rentgenového záření s diskrétním čárovým spektrem.

Fotony rentgenového záření pronikají všemi prostředími a jsou těmito prostředími v různé míře absorbovány - cílem rentgenové diagnostiky je využít různé míry absorpce a vytvořit rentgenové obrazy biologického prostředí, kterým prošlo rentgenové záření. Cíl rentgenové terapie spočívá v destrukci nádorového ložiska prostřednictvím fotonů rentgenového záření.

Zdroje ionizujícího záření, interakce s biologickým prostředím a potřebná detekce a dozimetrie v rámci rentgenové diagnostiky a rentgenové terapie byly popsány v 13.kap. až 16.kap.

Potřebným fyzikálním metodologickým základem jsou 7.kap. "Klasická mechanika", 9.kap. "Kvantová mechanika" a 10.kap. "Relativistická mechanika".

Dílčí fyzikální základy rentgenové diagnostiky a rentgenové terapie lze charakterizovat následujícími pojmy:

a) foton (11.kap., odst.11.2. "Vlnově korpuskulární dualismus fotonu")

b) **makrosystém fotonů** (2.kap., odst.2.2. "Makrosystémy volných částic při zachování diskrétních hodnot energie", 6.kap., odst.6.1. "Záření černého tělesa")

c) **makrosystém fononů** (2.kap., odst.2.2. "Makrosystémy volných částic při zachování diskrétních hodnot energie", 6.kap., odst.6.2. "Kmity krystalové mříže")

d) elektromagnetické záření (11.kap., odst.11.4. "Elektromagnetické záření")

e) elektromagnetické vlnění (8.kap., odst.8.5. "Elektromagnetické vlnění")

f) **obal atomu a jeho parametry** (9.kap., odst.9.2. "Hlavní metoda kvantové mechaniky pro stacionární stavy", odst.9.3. "Aplikace hlavní metody - atom vodíku")

g) **brzdné a charakteristické rentgenové záření** (11.kap., odst.11.4.3. "Kvantová optika", 9.kap., odst.9.3. "Aplikace hlavní metody - atom vodíku")

h) absorpční zákon (12.kap., odst.12.2. "Jaderné záření")

17.3. Termografie

V modelovém přiblížení vychází fyzikální podstata termografie ze záření černého tělesa (černé těleso je těleso, které pohltí veškeré elektromagnetické záření dopadající na povrch černého tělesa - příkladem dobrého přiblížení černému tělesu je např. Slunce). V pozemských podmínkách je modelem záření černého tělesa elektromagnetické záření v dutině s dobře absorbujícími stěnami a malým otvorem v dutině. Každé záření, který dopadne zvnějšku do otvoru dutiny, bude po mnohonásobném odrazu od stěn dutiny zcela pohlceno. Stěny dutiny jsou udržovány na konstantní teplotě T a počet absorpčních a emisních procesů fotonů elektromagnetického záření (spojených např. s kvantovými přechody mezi vibračními energetickými stavy atomů krystalové mříže stěny dutiny) je v rovnováze. Z malého otvoru dutiny bude pak vycházet záření absolutně černého tělesa.

Zákony záření černého tělesa jsou: Planckův vyzařovací zákon (platí pro všechny délky), Wienův-Paschenův počet frekvence а vlnové zákon (platí pro malý vysokofrekvenčních fotonů), **Rayleighův-Jeansův** zákon (platí pro velký počet nízkofrekvenčních fotonů), Stefanův-Boltzmannův zákon (celková intenzita vyzařování jako energie, která projde jednotkovou plochou za 1 s pro všechny vlnové délky, je úměrná čtvrté mocnině teploty T, tj. T^4), Wienův posunovací zákon (s rostoucí teplotou T se maximální monochromatická intenzita vyzařování jako maximální energie, která projde jednotkovou plochou za 1 s pro určitou vlnovou délku, posouvá ke kratším vlnovým délkám). Veličiny popisující záření černého tělesa jsou obvyklé termodynamické funkce makrosystému ve stavu termodynamické rovnováhy.

V modelovém přiblížení daném zářením černého tělesa vyzařuje povrch každého tělesa s teplotou T vyšší než je teplota absolutní nuly do prostoru elektromagnetické záření např. z oblasti neionizujícího infračerveného záření, jehož vlastnosti souvisejí s teplotou T povrchu

(viz Dodatek 3, Příklad 7). Cílem termografie je měření teplot a znázornění rozložení teplot na povrchu zkoumaného objektu.

Detekce a měření příslušného infračerveného záření jsou spojeny s bezkontaktní termografií (radiotermometry a termokamery jsou nejen schopny změřit teplotu, ale také znázornit rozložení teplot na povrchu sledovaného objektu, včetně transformace termoradiačního spektra do viditelné oblasti elektromagnetického spektra) a s kontaktní termografií (využití optických vlastností např. tekutých krystalů, barva vrstvy tekutých krystalů je indikátorem teploty).

Další údaje o termografii jsou uvedeny v 13.kap., odst.13.2. **Potřebným fyzikálním metodologickým základem** jsou 7.kap. "Klasická mechanika", 9.kap. "Kvantová mechanika" a 10.kap. "Relativistická mechanika".

Dílčí fyzikální základy termografie lze charakterizovat následujícími pojmy:

a) foton (11.kap., odst.11.3. "Vlnově korpuskulární dualismus fotonu")

b) **makrosystém fotonů** (2.kap., odst.2.2. "Makrosystémy volných částic při zachování diskrétních hodnot energie", 6.kap., odst.6.1. "Záření černého tělesa")

c) zákony záření černého tělesa (2.kap., odst.2.2. "Makrosystémy volných částic při zachování diskrétních hodnot energie", 3.kap. "Kvaziklasický statistický přístup", 4.kap. "Termodynamické funkce makrosystému", 6.kap., odst.6.1. "Záření černého tělesa")

d) **makrosystém fononů** (2.kap., odst.2.2. "Makrosystémy volných částic při zachování diskrétních hodnot energie", 6.kap., odst.6.2. "Kmity krystalové mříže")

e) **kvantové aplikace elektromagnetického pole** (11.kap., odst.11.1., odst.11.2. "Kvantová teorie volného elektromagnetického pole")

f) elektromagnetické záření (11.kap., odst.11.4. "Elektromagnetické záření")

g) elektromagnetické vlnění (8.kap., odst.8.5. "Elektromagnetické vlnění")

17.4. Nukleární magnetická rezonance

Fyzikální a technická podstata magnetické rezonance bude popsána v 18. kapitole. Cílem nukleární magnetické rezonance je zobrazovací metoda založená na sledování změn v chování buněk různých tkání při působení silného magnetického pole \vec{B} . Výhodou metody je, že vyšetřovaný není vystaven ionizujícímu záření. Používá se strukturní a funkční magnetická rezonance. V rámci strukturní magnetické rezonance lze rozeznat "Obrazy vážené relaxačním časem vektoru podélné tkáňové magnetizace", "Obrazy vážené podle hustoty protonů". Při funkční magnetické rezonanci jsou detekovány změny zpětných signálů v závislosti na neuronální aktivitě - tím je možné vizualizovat anatomické struktury mozku z hlediska jejich funkčnosti.

Zdroje neionizujícího záření, interakce s biologickým prostředím a potřebná detekce a dozimetrie v rámci nukleární magnetické rezonance byly popsány v 13.kap. až 16.kap.

Potřebný fyzikální metodologický základ nukleární magnetické rezonance vychází ze 7.kap. "Klasická mechanika", 9.kap. "Kvantová mechanika" a 10.kap. "Relativistická mechanika".

Dílčí fyzikální základy pro zobrazovací metodu "magnetická rezonance" lze charakterizovat následujícími pojmy:

a) kvantová parametrizace pravděpodobnostních oblaků (viz 9.kap. "Kvantová mechanika")

b) obecná pohybová rovnice pro vlnění (viz 7.kap. "Klasická mechanika")

c) pohybová rovnice pro elektromagnetické vlnění (viz 8.kap. "Klasické aplikace elektromagnetického pole")

d) **elektromagnetické impulsy rádiových vln** (viz 8.kap., odst.8.4. "Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole", 11.kap., odst.11.4.2. "Elektromagnetické spektrum")

e) makrosystém fermionů (protonů) a makrosystém bosonů (fotonů) (viz 2.kap. "Typologie makrosystémů")

f) vlnově korpuskulární dualismus fotonu (viz 11.kap., odst.11.3. "Vlnově korpuskulární dualismus fotonu")

g) vlnově korpuskulární dualismus látkové částice (viz 9.kap., odst.9.1. "Postulátová výstavba kvantové mechaniky")

17.5. Sonografie

Fyzikální podstatou sonografie (ultrazvukových zobrazovacích metod) jsou vlastnosti speciálního typu mechanických vln - podélných ultrazvukových vln. Ultrazvukové vlny jsou dostatečně krátké (při frekvencích větších než 10⁶ Hz používaných v medicínských aplikacích a při rychlostech řádově tisíce metrů v kapalných a pevných látkách jsou vlnové délky podélného ultrazvukového vlnění řádově mm), proto se šíří prakticky přímočaře a odrážejí se podle rovnosti úhlu dopadu a úhlu odrazu. Značně se zeslabují ve vzduchu a v plynech, podstatně méně v kapalinách a pevných látkách. S využitím Dopplerova jevu lze z rozdílu frekvence ultrazvukové vlny dopadající na pohybující se rozhraní a odražené od pohybujícího se rozhraní zjistit rychlost pohybu rozhraní.

Cílem sonografie je především echografické zobrazení planárních struktur měkkých tkání a na principu Dopplerova jevu měření rychlosti pohybujících struktur (např. měření rychlosti toku krve).

Zdrojem i detektorem ultrazvuku jsou magnetostrikční a piezoelektrické oscilátory. K buzení ultrazvukových vln se používá jevu magnetostrikčního nebo piezoelektrického (viz 7.kap., odst.7.5.3.). V medicínských aplikacích je nejčastěji využíváno piezoelektrického jevu.

Interakce ultrazvukového vlnění s prostředím vede jednak k zeslabování intenzity ultrazvuku podle absorpčního zákona (B58), jednak k obvyklým vlnovým jevům (reflexe, refrakce, difrakce) na rozhraní dvou prostředí. Zatímco zeslabení intenzity je třeba kompenzovat speciálními zesilovači, rozdělení energie ultrazvuku na rozhraní dvou prostředí na část odraženou a část prošlou je naopak využito k echografii. Pro určení poměru energie odražené a prošlé jednotkovou plochou za 1 s se využívá akustický vlnový odpor Z (akustická impedance), který lze odvodit ze vztahu pro intenzitu ultrazvuku a vlnové rovnice (B21) ve tvaru pro ultrazvukové vlnění.

Další údaje o sonografii jsou uvedeny v 13.kap., odst.13.2. "Přehled ionizujících a neionizujících záření a vlnění používaných v radiologii". **Potřebným fyzikálním metodologickým základem** jsou 7.kap. "Klasická mechanika", 9.kap. "Kvantová mechanika" a 10.kap. "Relativistická mechanika".

Dílčí fyzikální základy sonografie lze charakterizovat následujícími pojmy:

a) **obecná pohybová rovnice a pohybový zákon** (7.kap., odst.7.2. "Formalismy klasické mechaniky")

b) mechanický oscilátor (7.kap., odst.7.4. "Mechanický kmitavý pohyb oscilátoru")

c) pohybová rovnice a pohybový zákon mechanického vlnění (7.kap., odst.7.5. "Mechanické vlnění")

d) zvuk, ultrazvuk ((7.kap., odst.7.5. "Mechanické vlnění")

e) **krystal piezoelektrického oscilátoru** (6.kap., odst.6.2. "Kmity krystalové mříže", 8.kap., odst.8.4. "Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole")

18. Fyzikální základy magnetické rezonance

Magnetická rezonance je zobrazovací metoda založená na sledování změn v chování buněk různých tkání při působení silného magnetického pole \vec{B} . Fyzikální a technická podstata magnetické rezonance musí vystihnout, jak působí silné magnetické pole na lidské tělo a jak lze tohoto působení technicky využít při zobrazování.

18.1. Fyzikální podstata

Fyzikální podstata magnetické rezonance vychází z původní **Rabiovy metody magnetické jaderné rezonance** (viz 9.kap., odst.9.4.) a je založena na **dvou parametrech tvaru "pravděpodobnostních oblaků" protonů** (viz 9.kap., odst.9.1., odst.9.4.). Zaměření na protony při zkoumání parametrů pravděpodobnostních oblaků je dáno faktem, že lidské tělo je tvořeno ze 60 % vodou. Proto v magnetické rezonanci velmi průkazně vystupují jádra atomů vodíku, tj. protony.

První parametr je dán vlastními hodnotami operátoru \hat{S}_z (viz (B37) a B38)) z-ové složky S_z spinového momentu hybnosti \vec{S} protonu (viz 9.kap., odst.9.3.). Tyto dvě vlastní hodnoty umožňují prostorovou orientaci paralelně nebo antiparalelně s orientací vektoru magnetické indukce \vec{B} magnetického pole (směr vektoru \vec{B} nechť je identický se směrem osy z souřadnicové soustavy). Antiparalelní orientace je energeticky náročnější - proto se větší část protonů z makrosystému protonů atomů vodíku ¹₁H orientuje paralelně, vzniká nenulový spinový magnetický moment hybnosti a tím i nenulový magnetický moment $\vec{\mu}_s$ (viz (B41) a (B42)). S vektorem $\vec{\mu}_s$ vztaženým na jednotku objemu je spojen vektor podélné tkáňové magnetizace.

Druhý parametr je spojen s vlastními hodnotami operátoru \hat{b}_z z-ové složky b_z orbitálního momentu hybnosti \vec{b} protonu (opět viz (B37) a (B38) a 9.kap., odst.9.3.). Jelikož z-ová složka b_z a složky x-ová b_x a y-ová b_y nejsou současně měřitelné, bylo nezbytné kvantovat vedle velikosti také přípustné směry orbitálního momentu hybnosti b (z-ová složka b_z je současně měřitelná jen se čtvercem orbitálního momentu hybnosti b^2). Tento způsob prostorového kvantování směru orbitálního momentu hybnosti \vec{b} byl spojen s přípustnými hodnotami z-ové složky bz a byl vyjádřen prostřednictvím periodického děje konaného s úhlovou frekvencí Ω. Snaha o vyvinutí klasické analogie nakonec vedla k představě, že vektor orbitálního momentu hybnosti \vec{b} opisuje s frekvencí Ω kužel - koná precesní pohyb (viz (B44)). Podle vztahu (B44) je tato Larmorova úhlová frekvence přímo úměrná velikosti vektoru magnetické indukce \vec{B} , konstantou přímé úměrnosti je gyromagnetický poměr. Pro daný proton je nenulový orbitální moment hybnosti \vec{b} spojen s dalším magnetickým momentem (viz (B41) a (B42)), který je kolmý na směr vektoru magnetické indukce B. Pro celý makrosystém protonů např. atomů vodíku ¹₁H je vzhledem k jejich náhodné distribuci v rovině kolmé na směr \vec{B} výsledný magnetický moment $\vec{\mu}$ roven nulovému vektoru. Opět ve vazbě na jednotku objemu je s magnetickým momentem $\vec{\mu}$ spojen vektor příčné tkáňové magnetizace.

Fyzikální podstata magnetické rezonance (vyjádřená vektory podélné a příčné tkáňové magnetizace) vychází z parametrizace tvaru "oblaku pravděpodobnosti" pomocí kvantových čísel spojených se z-ovými složkami S_z a b_z spinového a orbitálního momentu hybnosti. Tato kvantová parametrizace umožňuje nepoužívat častá rčení "protony neustále rotují kolem své vlastní osy a tento pohyb je označován jako spin" nebo "protony umístěné v magnetickém poli konají kromě svého původního rotačního pohybu (spinu) ještě pohyb precesní (po plášti rotačního kužele)".

18.2. Fyzikální základy technického využití

Technická podstata magnetické rezonance je tedy spojena s působením silného magnetického pole \vec{B} , které vede ke vzniku vektorů podélné (nenulový vektor) a příčné (nulový vektor) tkáňové magnetizace. Rozhodující jsou pak následné elektromagnetické impulsy odpovídající elektromagnetickým rádiovým vlnám (viz 8.kap., odst.8.5.) s úhlovou frekvencí rovnající se Larmorově frekvenci Ω . Vzhledem k rovnosti frekvencí je oprávněn název "magnetická rezonance". Fotony elektromagnetických vln jsou absorbovány protony, které jsou excitovány do vyšších energetických stavů. V důsledku energetické excitace se zvýší počet protonů s vektory podélné tkáňové magnetizace, které budou mít antiparalelní orientaci vůči vektoru \vec{B} (zmenší se výsledný magnetizace u makrosystému protonů již nebude nulová (objeví se výsledný magnetický moment $\vec{\mu}$ odlišný od nulového vektoru). K urychlení procesu magnetické rezonance se používá ke změnám orientace výsledného magnetického momentu $\vec{\mu}$ přídavné gradientní pole (tím se nahrazuje režim "spin-echo sekvence" režimem "gradient-echo sekvence").

Po ukončení elektromagnetického impulsu rádiových vln se bude makrosystém protonů vracet do původního stavu, tj. v relaxačním čase T_1 se obnoví magnetický moment $\vec{\mu}_s$ a v příčném relaxačním čase T_2 zanikne magnetický moment $\vec{\mu}$. Při návratu do původního stavu předá makrosystém protonů nadbytečnou energii do strukturní mřížky tkáně a tkáň vyšle zpětný signál. Časy mezi elektromagnetickými impulsy se mění tak, aby se změny relaxačních časů T_1 a T_2 promítly do rozdílů ve stupních šedi při zobrazení v rámci strukturní magnetické rezonance.

D. DODATKY

Dodatek 1 Potřebné matematické znalosti pro aplikaci na radiologii

1. Systém elementárních funkcí

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

2. Diferenciální počet

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

3. Integrální počet

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

4. Vektorový počet

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

5. Analytická geometrie

- a) Analytická geometrie přímky
- b) Analytická geometrie kuželoseček

Příklady:

<u>Příklad 1</u> Vypočítejte úplné diferenciály funkcí a) f(a,b,c), b) $L(q_j, \dot{q}_j, t)$ (j=1,2,...,n)c) $g(x,y,z) = x^2 \sin y - z^3 \cos x$

Řešení a) $df = \left(\frac{\partial f}{\partial a}\right)_{b,c} da + \left(\frac{\partial f}{\partial b}\right)_{a,c} db + \left(\frac{\partial f}{\partial c}\right)_{b,a} dc$ (konstantnost zbývajících proměnných

se v zápisu úplného diferenciálu u parciální derivace často vynechává)

b)
$$dL = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_{j}} dq_{j} + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{j}} d\dot{q}_{j} + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

c)
$$dg = (2x\sin y + z^3\sin x) dx + x^2\cos y dy - 3z^2\cos x dz$$

<u>Příklad 2</u> Vypočítejte úplný diferenciál funkce a) $L[q_j(t), \dot{q}_j(t), t]$ (j=1,2,...,n), b) získaný výsledek převed te na úplnou derivaci funkce *L* podle času

$$\check{\text{Rešen}}(a) \quad dL = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_{j}} \frac{\partial q_{j}}{\partial t} dt + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{j}} \frac{\partial \dot{q}_{j}}{\partial t} dt + \frac{\partial L}{\partial t} dt$$

b)
$$\frac{\mathrm{d}L}{\mathrm{d}t} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_{j}} \frac{\partial q_{j}}{\partial t} + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{j}} \frac{\partial \dot{q}_{j}}{\partial t} + \frac{\partial L}{\partial t}$$

- **<u>Příklad 3</u>** Nechť Lagrangeova funkce *L* není explicitní funkcí času, tj. $L(q_j, \dot{q}_j)$ (*j*=1,2,...,*n*). Ukažte, že pak je Hamiltonova funkce *H* (B6) pohybovým integrálem Lagrangeových rovnic 2.druhu (B7)
- Řešení Výsledek řešení v Příkladu 2, b) lze přepsat ve tvaru

$$\frac{dL}{dt} = \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial q_{j}} \frac{\partial q_{j}}{\partial t} + \sum_{j=1}^{n} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{j}} \frac{\partial \dot{q}_{j}}{\partial t} \cdot \text{Užitím (B7) lze provést úpravu}$$
$$\frac{dL}{dt} = \sum_{j=1}^{n} \frac{d}{dt} \left(\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{j}} \dot{q}_{j} \right). \qquad \text{Užitím (B8) a (B6) lze provést úpravu}$$
$$\frac{dH}{dt} = \frac{d}{dt} \left(\sum_{j=1}^{n} p_{j} \dot{q}_{j} - L \right) = 0. \qquad \text{Odtud plyne konstantnost funkce } H.$$

Dodatek 2 Procvičení statistické fyziky

Pokuste se vyložit obsah poznatků zahrnutých do dané skupiny poznatků. Spolupracujte s příslušnou kapitolou, odstavcem a modelem struktury poznatků. Budete-li spokojeni se svými odpověďmi, přistupte k další skupině. Pořadí poznatků ve skupině má logickou návaznost.

Skupina č.1 (1.kap., odst.1.1., model - Příloha A2)

Statistický přístup, Nestatistický přístup, Makrosystém, Statistická fyzika, Fenomenologická termodynamika, Statistická termodynamika, Nepoužitelnost nestatistického přístupu ke zkoumání makrosystémů, Východiska statistického přístupu

Skupina č.2 (1.kap., odst.1.2., model - Příloha A2)

Stav fyzikálního objektu, Stavové parametry, Stavy rovnovážné a nerovnovážné, Termodynamický stav, Stav termodynamické rovnováhy STR, Stav termodynamické nerovnováhy STN, Statistický pohyb, Termodynamický proces, Přirozený a nepřirozený termodynamický proces, Vratný a nevratný termodynamický proces, Přirozený termodynamický proces a ideální vratný termodynamický proces VTP, První postulát termodynamiky a relaxační doba, Zaměření statistického přístupu na zkoumání STR a VTP

Skupina č.3 (1.kap., odst.1.3., model - Příloha A2)

Statistický soubor, Nezávislé a identické makrosystémy, Rovnovážný statistický soubor, Mikrokanonický statistický soubor MSS, Metodika č.3, Kanonický statistický soubor KSS, Metodika č.2, Grandkanonický statistický soubor GSS, Metodika č.1

Skupina č.4 (1.kap., odst.1.4., model - Příloha A2)

Tolmanova hypotéza, Vnitřní energie $U_{\lambda} \lambda$ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR, Počet částic N_{λ} daného druhu λ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR, Termicky homogenní makrosystém, Jednoduchý makrosystém, Druhý postulát termodynamiky, Sdělení "STR je charakterizován energií"

Skupina č.5 (1.kap., Souhrn 1., model - Příloha A2)

Vstupní podmínka α , Vstupní podmínka β , Vstupní podmínka γ

Skupina č.6 (2.kap., odst.2.1., odst.2.2., model - Příloha A2)

Makrosystém volných částic, Makrosystém vázaných částic, λ -tý stav termodynamické rovnováhy STR a jeho ν -té energetické hladiny, Rozlišitelné a nerozlišitelné částice, Maxwellův-Boltzmannův plyn MBP, Fermiho plyn FP, Boseho plyn BP, Teplota degenerace, Podmínka degenerace

Skupina č.7 (2.kap., odst.2.3., model - Příloha A2)

Spojité hodnoty energie - klasický přístup, Diskrétní hodnoty energie - kvantový přístup, Klasický plyn, Kvantový plyn Fermiho nebo Boseho, Rovnovážná kvantová rozdělovací funkce $\hat{\rho}$ a pravděpodobnost P_{λ} , Rovnovážná klasická rozdělovací funkce ρ a pravděpodobnost $dP = \rho \, d\Phi$, Kvantová souborová střední hodnota, Klasická souborová střední hodnota

Skupina č.8 (2.kap., Souhrn 2, model - Příloha A2)

Jednostranné kritérium a) zanedbání vzájemné interakce, Dvojstranné kritérium b) nerozlišitelnosti nebo rozlišitelnosti částic, Dvojstranné kritérium c) diskrétnosti nebo spojitosti hodnot energie

Skupina č.9 (3.kap., odst.3.1., model - Příloha A2)

Nerelativistický výraz pro energii ε_{ν} jedné částice v ν -té energetické hladině, Relativistický výraz pro energii ε_{ν} jedné částice v ν -té energetické hladině, Ultrarelativistický výraz pro energii ε_{ν} jedné částice v ν -té energetické hladině

Skupina č.10 (3.kap., odst.3.2., odst.3.3., model - Příloha A2)

Váhový faktor Γ_{ν} *v*-té energetické hladiny, Váhový faktor Γ_{ν} pro Maxwellův-Boltzmannův plyn MBP, Váhový faktor Γ_{ν} pro Fermiho plyn FP, Váhový faktor Γ_{ν} pro Boseho plyn BP, Vystižení rozdílu mezi makrosystémem rozlišitelných a nerozlišitelných částic, Stirlingův vzorec, Váhový faktor Γ termodynamického stavu, Hodnota entropie a stav termodynamické rovnováhy STR, Entropie jako míra neuspořádanosti makrosystému, Boltzmannova rovnice a entropie ve statistické termodynamice, Úplný diferenciál entropie a entropie ve fenomenologické termodynamice

Skupina č.11 (3.kap., odst.3.4., model - Příloha A2)

Spojení klasických a kvantových předpokladů, Kvaziklasický statistický přístup, Počet kvantových stavů d Γ v elementu fázového prostoru d Φ , Počet kvaziklasických stavů $\Delta\Gamma$ v energetické vrstvě o šířce ΔU pro celý makrosystém, Počet kvaziklasických stavů $\Delta\Gamma$ v energetické vrstvě o šířce $\Delta \varepsilon$ pro částici makrosystému, Rovnovážná kvaziklasická rozdělovací funkce ρ' a pravděpodobnost d $P = \rho' d\Gamma$, Algoritmus kvaziklasického statistického přístupu

Skupina č.12 (3.kap., Souhrn 3, model - Příloha A2)

Integrující role kvaziklasického statistického přístupu, Integrační faktor A - relativistický statistický přístup, Integrační faktor B - váhový faktor pro energetickou hladinu a pro obecný termodynamický stav, Integrační faktor C - obrysový algoritmus kvaziklasického statistického přístupu

Skupina č.13 (4.kap., odst.4.1., odst.4.2., odst.4.3., model - Příloha A4)

Členění termodynamických funkcí, Předpoklady pro vymezování termodynamických funkcí, První postulát termodynamiky, Druhý postulát termodynamiky - stavové rovnice, Rovnovážná stavová rovnice a vratný termodynamický proces VTP, První věta termodynamická, Druhá věta termodynamická - slovní formulace, Druhá věta termodynamická - zákon růstu entropie, Třetí věta termodynamická

Skupina č.14 (4.kap., odst.4.4., model - Příloha A4)

Zavedení termodynamických potenciálů U,F,G,H v rámci kanonického statistického souboru KSS, Zavedení chemického potenciálu μ a grandkanonického potenciálu Ω v rámci grandkanonického statistického souboru GSS, Termodynamické potenciály a stav termodynamické rovnováhy STR

Skupina č.15 (4.kap., Souhrn 4, model - Příloha A4)

Tři skupiny termodynamických funkcí potřebných pro zpracování metodiky č.1 (GSS) a metodiky č.2 (KSS)

Skupina č.16 (5.kap., odst.5.1., model - Příloha A4)

Přirozený logaritmus pravděpodobnosti λ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR jako lineární funkce energie U_{λ} a počtu částic N_{λ} , Normování pravděpodobnosti - zavedení velkého stavového součtu s vazbou na grandkanonický potenciál Ω , Odvození Fermiho-Diracova rozdělení, Odvození Boseho-Einsteinova rozdělení, Odvození Maxwellova-Boltzmannova rozdělení, Kvaziklasická podoba odvozených rozdělení, Algoritmus metodiky č.1 (GSS)

Skupina č.17 (5.kap., odst.5.2., model - Příloha A4)

Přirozený logaritmus pravděpodobnosti λ -tého stavu termodynamické rovnováhy STR jako lineární funkce energie U_{λ} , Normování pravděpodobnosti - zavedení malého stavového součtu s vazbou na volnou energii F, Malý stavový součet pro jednu volnou částici, Translační a strukturní složka malého stavového součtu, Kvaziklasická úprava translačního stavového součtu pro jednu volnou částici, Kvaziklasická úprava strukturního stavového součtu pro jednu volnou částici, Algoritmus metodiky č.2 (KSS)

Skupina č.18 (5.kap., Souhrn 5, model - Příloha A4)

Exaktní algoritmy metodik č.1 (GSS) a č.2 (KSS) jako předpoklad ilustrací konkrétních makrosystémů

Skupina č.19 (6.kap., odst.6.1., odst.6.2., odst.6.3., Souhrn 6, model - Příloha A4)

Záření černého tělesa jako makrosystém fotonů - aplikace metodiky č.1 (GSS), Kmity krystalické mříže jako makrosystém fononů - aplikace metodiky č.1 (GSS), Odvození stavové rovnice ideálních plynů - aplikace metodiky č.2 (KSS), Univerzální platnost stavové rovnice ideálních plynů, Výčet dalších konkrétních makrosystémů.

Dodatek 3 Řešené příklady ze statistické fyziky

<u>**Příklad 1**</u> Nechť fiktivní makrosystém "FMS" je tvořen 4 volnými částicemi a,b,c,dMaxwellova-Boltzmannova plynu MBP. Makrosystém "FMS" rozděluje své čtyři částice jednoduchým způsobem - buď mohou být v diskrétních *v*-tých energetických hladinách v 1.polovině nebo v 2.polovině makrosystému "FMS".

1. Určete všechny λ -té makrostavy makrosystému "FMS".

2. Charakterizujte makrostavy váhovým faktorem Γ z Boltzmannovy rovnice (A12)

3. Charakterizujte makrostavy entropií *S* užitím Boltzmannovy rovnice (A12)

4. Zapište formálně vztah pro vnitřní energii U_{λ} λ -tého makrostavu a navrhněte, který z λ -tých makrostavů má nejblíže ke stavu termodynamické rovnováhy STR, a jaká podmínka by měla platit pro vnitřní energii U_{λ} stavu termodynamické rovnováhy STR.

Řešení 1 Výčet λ -tých makrostavů (4,0), (3,1), (2,2), (1,3), (0,4) Výsledek Makrosystém "FMS" má pět makrostavů λ =0,1,2,3,4 Řešení 2 Výčet počtu způsobů, kterými lze realizovat jednotlivé makrostavy $\lambda = 0 \Longrightarrow (abcd, 0)$ $\lambda = 1 \Longrightarrow (abc,d), (abd,c), (acd,b), (bcd,a)$ $\lambda = 2 \Longrightarrow (ab,cd), (ac,bd), (ad,bc), (bc,ad), (bd,ac), (cd,ab)$ $\lambda = 3 \Longrightarrow (d, abc), (c, abd), (b, acd), (a, bcd)$ $\lambda = 4 \Longrightarrow (0, abcd)$ **Výsledek** Váhové faktory jednotlivých makrostavů λ =0,1,2,3,4 jsou postupně $\Gamma_0=1, \Gamma_1=4, \Gamma_2=6, \Gamma_3=4, \Gamma_4=1$ Řešení 3 $S_0 = k \ln 1$, $S_1 = k \ln 4$, $S_2 = k \ln 6$, $S_3 = k \ln 4$, $S_4 = k \ln 1$ **Výsledek** $S_0=0$, $S_1=1,37 k$, $S_2=1,79 k$, $S_3=1,37 k$, $S_4=0$ (*k*-Boltzmannova konstanta) Řešení 4 Stav STR je stav s maximální entropií (s maximální mírou neuspořádanosti)

Vnitřní energie U_{λ} je dána vztahem (A2) ve tvaru $U_{\lambda} = \sum_{\nu=1}^{4} N_{\nu} \varepsilon_{\nu}$

Výsledek Stavu STR se nejvíce blíží λ -tý makrostav pro λ =2 s entropií S_2 =1,79 k J.K⁻¹. Vnitřní energie U_{λ} pro λ =2 by měla nabývat svého minima.

<u>**Příklad 2</u>** Termodynamické potenciály F=F(T,V), H=H(S,p), G=G(T,p), U=U(S,V) budou zkoumány v rámci kanonického statistického souboru KSS (počet částic makrosystémů tvořících KSS se nemění)</u>

1. Pojmenujte termodynamické potenciály

2. Napište úplné diferenciály termodynamických potenciálů

3. Pomocí vztahů (A19), (A20), (A21) a (A22) identifikujte význam parciálních derivací v jednotlivých úplných diferenciálech.

Řešení 1, výsledek Volná energie F, entalpie H, Gibbsův potenciál G, vnitřní energie U

Řešení 2 Způsob zápisu úplného diferenciálu **Výsledek** $dF = \frac{\partial F}{\partial T} dT + \frac{\partial F}{\partial V} dV$, $dH = \frac{\partial H}{\partial S} dS + \frac{\partial H}{\partial p} dp$, $dG = \frac{\partial G}{\partial T} dT + \frac{\partial G}{\partial p} dp$, $dU = \frac{\partial U}{\partial S} dS + \frac{\partial U}{\partial V} dV$

Řešení 3Srovnání zápisů úplných diferenciálů se vztahy (A19), (A20), (A21) a (A22)VýsledekdF = -S dT - p dV, dH = T dS + V dp, dG = -S dT + V dp, dU = T dS - p dV.

<u>Příklad 3</u> Termodynamické potenciály U=U(S,V,N), F=F(T,V,N) a $\Omega=\Omega(T,V,\mu)$ budou zkoumány v rámci grandkanonického statistického souboru GSS (počet částic makrosystémů tvořících GSS se mění).

1. Pojmenujte termodynamické potenciály

2. Napište úplné diferenciály termodynamických potenciálů

3. Pomocí vztahů (A23) a (A25) identifikujte význam parciálních derivací v jednotlivých úplných diferenciálech

4. Pomocí vztahů (A23) a (A25) ukažte způsob výpočtu chemického potenciálu μ a počtu částic *N* ve stavu termodynamické rovnováhy STR.

Řešení 1, výsledek Vnitřní energie U, volná energie F, grandkanonický potenciál Ω

Řešení 2 Způsob zápisu úplného diferenciálu **Výsledek** $dU = \frac{\partial U}{\partial S} dS + \frac{\partial U}{\partial V} dV + \frac{\partial U}{\partial N} dN$, $dF = \frac{\partial F}{\partial T} dT + \frac{\partial F}{\partial V} dV + \frac{\partial F}{\partial N} dN$, $d\Omega = \frac{\partial \Omega}{\partial T} dT + \frac{\partial \Omega}{\partial V} dV + \frac{\partial \Omega}{\partial \mu} d\mu$

Řešení 3 Srovnání zápisů úplných diferenciálů se vztahy (A23) a (A25) Výsledek $dU = T dS - p dV + \mu dN$, $dF = -S dT - p dV + \mu dN$, $d\Omega = -S dT - p dV - N d\mu$

Řešení 4 Výběr potřebných významů parciálních derivací

Výsledek $\mu = \left(\frac{\partial U}{\partial N}\right)_{S,V}, \quad N = -\left(\frac{\partial \Omega}{\partial \mu}\right)_{T,V}$ (viz vztahy (A23) a (A27)).

<u>**Příklad 4</u>** Vzhledem k aditivnosti grandkanonického potenciálu Ω (viz (A28)) zaveď te pro makrosystém volných částic (λ -tý termodynamický stav složen z *v*-tých energetických hladin podle vztahu (A2)) vztah pro počet částic N_v daného druhu v *v*-té energetické hladině.</u>

Řešení Podle (A28) je Ω =ΣΩ_ν, podle (A2) je N_λ=Σ N_ν, dosazení do (A27)
Výsledek N_ν = -
$$\left(\frac{\partial \Omega_{\nu}}{\partial \mu}\right)_{T,V}$$
 (viz vztah (A29)).

<u>Příklad 5</u> V rámci grandkanonického statistického souboru GSS byla odvozena rovnovážná kvantová rozdělující funkce $\hat{\rho}$, jejíž hodnoty P_{λ} (viz (A16)) přidělují pravděpodobnosti λ -tým termodynamickým stavům makrosystémů tvořících GSS. Při normování pravděpodobností P_{λ} k 1 ($\Sigma P_{\lambda} = 1$) byl zaveden pro *v*-tou energetickou hladinu λ -tého termodynamického stavu (viz vztah (A2)) velký stavový součet (A30)

$$\Xi_{V} = \sum_{N_{V}} \exp\left[\beta\left(\mu - \varepsilon_{V}\right) N_{V}\right]$$

spojený s grandkanonickým potenciálem Ω_{ν} pro ν -tou energetickou hladinu vztahem (A31)

 $\Omega_V = -kT \ln \Xi_V$ ($\beta = 1/kT$ je statistický analogon teploty).

Pro makrosystém bosonů odvod'te užitím (A29)

$$N_{\nu} = -\left(\frac{\partial \Omega_{\nu}}{\partial \mu}\right)_{T}$$

Boseho-Einsteinovo rozdělení (A33) pro střední počet částic $\overline{N_{v}}$ v v-té energetické hladině

$$\overline{N_{\nu}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} - 1}.$$

Řešení a) Pro Boseho plyn BP neplatí Pauliho vylučovací princip $\Rightarrow N_v = 1, 2, ...$

b) $\Xi_{\nu} = \sum_{N_{\nu}=0}^{\infty} \exp \left[\beta \left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right) N_{\nu}\right] \Rightarrow$ kvocient q nekonečné geometrické řady je

 $q = \exp \beta (\mu - \varepsilon_{\nu}) \Rightarrow$ součet řady je $\Xi_{\nu} = a_1 / (1 - q) = [1 - \exp \beta (\mu - \varepsilon_{\nu})]^{-1}$

c)
$$N_{\nu} = -\left(\frac{\partial \Omega_{\nu}}{\partial \mu}\right)_{T,\nu} = kT \left[1 - \exp\beta\left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right)\right] (-1) \left[1 - \exp\beta\left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right)\right]^{-2} \left[-\exp\beta\left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right)\right] \beta =$$

= $\exp\beta\left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right) \cdot \left[1 - \exp\beta\left(\mu - \varepsilon_{\nu}\right)\right]^{-1} = \frac{1}{e^{\beta\left(\varepsilon_{\nu} - \mu\right)} - 1}$.

Výsledek Známé Boseho-Einsteinovo rozdělení bylo odvozeno ve tvaru (A33) $\overline{N_{\nu}} = \frac{1}{e^{\beta(\varepsilon_{\nu} - \mu)} - 1}$ s podmínkou pro chemický potenciál $\mu \le 0$. Není-li

počet bosonů makrosystému předem dán, musí platit $\mu = 0$.

<u>Příklad 6</u> Při interakcích elektronů s krystalovou mříží anody rentgenky se souběžně se vznikem brzdného a charakteristického rentgenového záření zahřívá materiál anody. Jestliže podle 6.kap., odst.6.2. bude vyjádřena vnitřní energie krystalové mříže vztahem $U = 3N.N_{\omega} \hbar \omega$ (*N* - počet kmitajících atomů krystalové mříže nahrazen celkem 3*N* oscilátory, $N_{\omega}\hbar \omega$ - energie kmitání každého z 3*N* oscilátorů, N_{ω} - kvantové číslo, soubor hodnot kvantových čísel N_{ω} pro všechny oscilátory - vytváří makrosystém fononů) ukažte, že s nárůstem vnitřní energie *U* se zahřívá materiál anody rentgenky.

Řešení a) Fonony jsou bosony, počet bosonů N_{ω} v energetické hladině $\hbar \omega$ je dán Boseho-Einsteinovým rozdělením (A33)

$$N_{\omega} = \frac{1}{e^{\beta \left(\varepsilon_{v} - \mu\right)} - 1}, \text{ kde } \varepsilon_{v} = \hbar \omega, \mu = 0, \beta = 1/kT. \text{ Odtud } N_{\omega} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$$

b) Vnitřní energie *U* krystalové mříže je dána vztahem U = 3N. $\frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$

c) Taylorův rozvoj funkce e^x má podobu $e^x = 1 + x + x^2 / 2! + x^3 / 3! + \dots$. Ve zkoumaném případě je $x = \beta \hbar \omega \ll 1$. Lze tedy Taylorův rozvoj nahradit součtem prvních dvou členů $e^x = 1 + x$. Po dosazení do vztahu pro vnitřní energii U lze získat U = 3NkT

Výsledek S růstem vnitřní energie U vzrůstá teplota T materiálu anody.

<u>Příklad 7</u> Při měření teploty a zjišťování míst se stejnými teplotami na povrchu zářících černých těles se vychází ze Stefanova-Boltzmannova zákona

$$E = \int_{0}^{\infty} E_{\lambda} d\lambda = \sigma T^{4}$$
, kde $E_{\lambda} d\lambda$ je energie vyzářená černým tělesem za 1 s jednotkovou

plochou na intervalu vlnových délek d λ . Výraz $E_{\lambda}d\lambda$ je spojen s hustotou energie záření u_{λ} (energie připadající pro vlnovou délku λ na jednotku objemu) vztahem $u_{\lambda} d\lambda = u_{\omega} d\omega = konst. E_{\lambda}d\lambda$. Odvoď te užitím kvaziklasického přístupu (viz 3.kap.) Planckův vyzařovací zákon (který je cestou k Stefanovu-Boltzmannovu zákonu)

$$E_{\lambda} d\lambda = \frac{c_1 d\lambda}{\lambda^5 \begin{pmatrix} c_2 \\ e & \lambda T \\ e & -1 \end{pmatrix}} \quad (c_1 \text{ a } c_2 \text{ jsou konstanty}).$$

Řešení a) $u_{\omega} d\omega = N_{\omega} \hbar \omega d\Gamma(\omega)$. $\frac{1}{V}$, kde $\hbar \omega$ je energie fotonu, N_{ω} je počet fotonů s energií $\hbar \omega$, $d\Gamma(\omega)$ je počet úhlových frekvencí (počet energetických stavů) na intervalu úhlových frekvencí $d\omega$ (interval odpovídá intervalu vlnových délek $d\lambda$) a V je objem, v němž se záření černého tělesa nachází

b) Podle (A13) je počet kvaziklasických stavů $d\Gamma = \frac{g \, d\Phi}{h^3}$, kde g je faktor degenerace (pro fotony g = 2), $d\Phi = dp_x \, dp_y \, dp_z \, dx \, dy \, dz$ je šestirozměrný element objemu fázového prostoru Φ

c) Obvyklý třírozměrný element objemu dV = dx dy dz , integrál $\int dV = V$, odtud pro počet kvaziklasických stavů $d\Gamma = \frac{2V dp_x dp_y dp_z}{h^3}$

d) Po zavedení sférických souřadnic p, φ, \mathcal{G} (viz 9.kap., odst.9.3.) lze napsat

$$dp_x dp_y dp_z = p^2 \sin \theta \, d\theta \, d\phi \, dp, \text{ integrály } \int_0^{\pi} \sin \theta \, d\theta = \begin{bmatrix} -\cos \theta \end{bmatrix} = 2 \text{ a } \int_0^{2\pi} d\phi = 2\pi$$

umožňují upravit vztah pro počet kvaziklasických stavů na tvar $d\Gamma = \frac{2V4\pi p^2 dp}{h^3}$ ($h = 2\pi\hbar$)

e) Hybnost fotonu $p = h\nu/c = \hbar \omega/c$, odtud derivace $dp/d\omega = \hbar/c$. Upravený tvar pro počet kvaziklasických stavů bude mít nyní podobu $d\Gamma_{\omega} = \frac{V\omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3}$

f) Počet fotonů v energetickém stavu $\hbar \omega$ je dán Boseho-Einsteinovým rozdělením (A33) ve tvaru $N_{\omega} = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1}$ (viz Příklad 6)

g) Z bodu a) řešení tohoto příkladu plyne

$$u_{\omega} d\omega = \frac{1}{e^{\beta \hbar \omega} - 1} \hbar \omega \cdot \frac{V \omega^2 d\omega}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{V} = \frac{\hbar \omega^3 d\omega}{\pi^2 c^3 \left(e^{\beta \hbar \omega} - 1\right)}$$

h) $u_{\omega} d\omega = u_{\lambda} d\lambda$, $\lambda = 2\pi c / \omega$, derivace $d\omega / d\lambda = -2\pi c / \lambda^2$. Odtud s použitím bodu g) řešení $u_{\lambda} d\lambda = \frac{konst. d\lambda}{\lambda^5 \left(e^{\frac{c_2}{\lambda T}} - 1 \right)}$, kde c_2 je již konstanta uvedená v Planckově

vyzařovacím zákonu

i) Podle zadání příkladu je $u_{\lambda} d\lambda = u_{\omega} d\omega = konst. E_{\lambda} d\lambda$, odtud okamžitě plyne hledaný tvar Planckova vyzařovacího zákona

Výsledek Po dosazení za $E_{\lambda}d\lambda$ do $E = \int_{0}^{\infty} E_{\lambda}d\lambda$ již lze odvodit Stefanův-Boltzmannův zákon $E = \sigma T^{4}$ (viz využití např. v termografii).

Dodatek 4 Procvičení nestatistické fyziky

Pokuste se vyložit obsah poznatků zahrnutých do dané skupiny poznatků. Spolupracujte s příslušnou kapitolou, odstavcem a modelem struktury poznatků. Budete-li spokojeni se svými odpověďmi, přistupte k další skupině. Pořadí poznatků ve skupině má logickou návaznost.

Skupina č.1 (7.kap., odst.7.1., odst.7.2., odst.7.3., model - Příloha B2)

Mechanický pohyb, Hmotný bod, Souřadnicová vztažná soustava, Polohový vektor, Kinematika, Dynamika, Newtonovský formalismus, Síla

Lagrangeovský formalismus, Hamiltonovský formalismus, Pohybová rovnice, Pohybový zákon, Lagrangeova funkce *L*, Hamiltonova funkce *H*

Zákon zachování energie, Zákon zachování hybnosti, Zákon zachování momentu hybnosti, Dráhový a časový účinek síly, Sedm pohybových integrálů

Skupina č.2 (7.kap., odst.7.4., odst.7.5., odst.7.6., model - Příloha B2)

Obecný a periodický pohyb kmitavý, Harmonický pohyb kmitavý, Pohybová rovnice harmonického pohybu kmitavého, Pohybový zákon harmonického pohybu kmitavého, Skládání harmonických kmitů, Lissajousovy obrazce, Pohybová rovnice a pohybový zákon pro tlumené a nucené kmity, Podmínka rezonance

Druhy vlnění, Interference vlnění, Vlnová délka, Pohybová rovnice (vlnová rovnice) a pohybový zákon (vlnová funkce) pro harmonické vlnění, Zvuk a ultrazvuk

Částice kontinua, Modely kontinua a zkoumání pohybových stavů kontinua, Obecná rovnice rovnováhy a obecná pohybová rovnice kontinua, Aplikace na Pascalovu dokonalou a Newtonovu vazkou tekutinu, Hydrostatický tlak

Skupina č.3 (8.kap., odst.8.1., odst.8.2., model - Příloha B2)

Dvě podmínky pro elektromagnetické pole a elektromagnetické záření jako klasický nestatistický fyzikální objekt, Přechod k elektromagnetické vlně reprezentující intenzitu makroskopického elektrického pole a magnetickou indukci makroskopického magnetického pole

Vzájemné působení elektromagnetického pole a náboje, Formulace lagrangeovského a hamiltonovského formalismu pro elektromagnetické pole

Skupina č.4 (8.kap., odst.8.3., model - Příloha B2)

Lagrangeova funkce pro pohyb klasického náboje v konstantním elektromagnetickém poli, Pohybové rovnice náboje, Elektromagnetická síla působící na náboj, Pohyb klasického náboje v příčném a podélném homogenním elektrickém poli, Pohyb klasického náboje v homogenním magnetickém poli

Skupina č.5 (8.kap., odst.8.4., odst.8.5., model - Příloha B2)

Maxwellova teorie elektromagnetického pole, Zřídla a víry silových polí, Zřídla a víry elektrického a magnetického pole, Zápis soustavy Maxwellových rovnic, Soustava Maxwellových rovnic pro statickou, stacionární, kvazistacionární a nestacionární teorii elektromagnetického pole, Zákon zachování energie v elektromagnetickém poli, Potenciály

elektromagnetického pole, Soustava Maxwellových rovnic pro elektromagnetické pole jako klasický a nestatisticky pojatý fyzikální objekt

Symbolický vektor "nabla" a operátory div a rot, Operátor grad, Operátorový vztah pro rot rot, D'Alembertův operátor, Nehomogenní vlnová rovnice pro potenciály pole, Odvození vlnové rovnice pro volné elektromagnetické pole, Důkaz existence monochromatického elektromagnetického vlnění, Rychlost šíření elektromagnetických vln

Skupina č.6 (9.kap., odst.9.1., odst.9.2., model - Příloha B4)

Diracův princip absolutní malosti, Princip korespondence, Princip komplementarity a princip neurčitosti, Pravděpodobnostní oblak, Vlnově korpuskulární dualismus látkové částice, Pohyb v kvantové mechanice, Interpretační postuláty I1 až I3, Vztah kvantového stavu a vlnové funkce, Vlnová funkce a tvar pravděpodobnostního oblaku, Vztah fyzikální veličiny a operátoru, Vlastní rovnice operátoru, Úplné soubory vlastních hodnot a vlastních funkcí operátoru, Úplný soubor kvantových čísel a tvar pravděpodobnostního oblaku, Úplný soubor operátorů, Úplné měření, Nestacionární Schrödingerova rovnice, Stacionární Schrödingerova rovnice, Princip totožnosti a Pauliho vylučovací princip, Důkaz existence fermionů a bosonů, Pohyb ve statistické termodynamice

Stacionární a nestacionární kvantové stavy mikroobjektů a tvar pravděpodobnostního oblaku, Algoritmus hlavní metody kvantové mechaniky pro stacionární stavy

Skupina č.7 (9.kap., odst.9.3., model - Příloha B4)

Atom vodíku - vymezení problému, Atom vodíku - úplný soubor operátorů a veličin, Atom vodíku - soustava vlastních rovnic operátorů, Atom vodíku - řešení soustavy vlastních rovnic, Atom vodíku - tvary "pravděpodobnostních oblaků", Interpretace kvantových čísel, Larmorova precese, Výběrová pravidla pro dovolené přechody

Skupina č.8 (9.kap., odst.9.4., odst.9.5., model - Příloha B4)

Kapkový a slupkový model jádra, Slupkový model jádra - vymezení problému, Slupkový model jádra - Hamiltonův operátor, Slupkový model jádra - stacionární Schrödingerova rovnice, Rabiova metoda magnetické jaderné rezonance, Poločasy rozpadu nepatrně odlišných izotopů

Heteropolární a homopolární molekuly, Homopolární vazba molekuly vody, Molekula vody - struktura obalu atomu kyslíku, Molekula vody - směrové hustoty pravděpodobnosti, Prostorová struktura molekuly vody, Přiblížení valenční vazby, Přiblížení molekulového orbitu

Skupina č.9 (10.kap., odst.10.1., odst.10.2., model - Příloha B6)

Nepřímá pozorovatelnost relativistických objektů, Podmínky relativističnosti jevů, Struktura speciální teorie relativity, Struktura obecné teorie relativity

Relativistická dynamika - relativistická jednorozměrná pohybová rovnice, Hmotnost za pohybu, Einsteinův vztah pro celkovou energii.

Skupina č.10 (11.kap., odst.11.1., odst.11.2., modely - Příloha A4, Příloha B2, Příloha B4)

Klasická podoba elektromagnetického pole, Kvantová teorie volného monochromatického elektromagnetického pole - rozklad na soustavu kvantových lineárních

harmonických oscilátorů, Operátor kreace a anihilace, Operátory sekundárního kvantování, Elektromagnetické pole jako kvantově mechanická soustava fotonů, Kvantová teorie volného polychromatického elektromagnetického pole, Vlnově korpuskulární dualismus elektromagnetického pole v nestatistické a statistické fyzice

Skupina č.11 (11.kap., odst.11.3., modely - Příloha B4, Příloha B6)

Vlnový balík jako model fotonu, Spektrální funkce vlnového balíku, "Gaussián" a pravděpodobnostní podoba vlnového balíku, Vlnová stránka fotonu, Korpuskulární stránka fotonu, Vlnově korpuskulární dualismus fotonu, kvantově mechanické soustavy fotonů a makrosystém fotonů

Skupina č.12 (11.kap., odst.11.4., modely - Příloha B4, Příloha B6)

Klasická a kvantová podoba elektromagnetického záření, Členění optiky na vlnovou, geometrickou a kvantovou, Elektromagnetické spektrum, Kvantová optika, Fotoelektrický a obrácený fotoelektrický jev, Rentgenové záření, Comptonův jev, Anihilační a obrácený anihilační jev

Skupina č.13 (11.kap., odst.11.5., modely - Příloha B2, Příloha B6)

Relativistický elektron v elektrostatickém poli - jednorozměrná relativistická pohybová rovnice, První integrace pohybové rovnice, Druhá integrace pohybové rovnice - relativistický pohybový zákon (hyperbolická závislost na čase), Nedosažitelnost rychlosti světla, Lineární a kruhové urychlovače

Skupina č.14 (12.kap., odst.12.1., modely - Příloha B2, Příloha B4, Příloha B6)

Modely a složení jádra, Koeficient stěsnání jádra, Hmotnostní defekt a vazební energie, Poloměr jádra, Potenciální energie jaderných sil krátkého dosahu a elektrostatických sil neomezeného dosahu - poloměr jádra, Spin jádra

Skupina č.15 (12.kap., odst.12.2., odst.12.6., modely - Příloha B2, Příloha B4, Příloha B6)

Jaderné záření - přirozená a umělá radioaktivita, Přirozeně radioaktivní záření, Rozpadový zákon a jeho aplikace, Poločas rozpadu, Absorpční zákon a jeho aplikace, Polotloušťka příslušné látky

Zákony zachování při jaderných reakcích, Typy jaderných reakcí, Štěpení jader, Štěpná řetězová reakce

Skupina č.16 (12.kap., odst.12.3., odst.12.4., odst.12.5., modely - Příloha B2, Příloha B4, Příloha B6)

Veličiny a jednotky jaderného záření - aktivita zářiče, intenzita jaderného záření, pohlcená dávka, expozice, dávkový ekvivalent, účinný průřez interakce, dolet ionizující částice

Ionizační komůrky, Voltampérová charakteristika ionizační komůrky a popis jejích oblastí, Plynové počítače částic, Další typy počítačů částic

Dráhové detektory, Teoretický základ lineárních a kruhových urychlovačů, Klasické a relativistické urychlovače, Typy urychlovačů.

Dodatek 5 Řešené příklady z nestatistické fyziky

<u>**Příklad 1**</u> Dosazením Lagrangeovy funkce *L* pro konstantní a homogenní elektromagnetické pole ve tvaru (B22)

$$L = T - U = \frac{1}{2} mv^{2} + Q \vec{E}\vec{r} + \frac{Q}{2} \vec{B}(\vec{r} \times \vec{v})$$

do Lagrangeových rovnic 2.druhu (B7)

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{\partial L}{\partial \dot{q}_{j}} - \frac{\partial L}{\partial q_{j}} = 0$$

odvoď te tvar Lagrangeových rovnic 2. druhu pro tento typ elektromagnetického pole a srovnejte získaný výsledek se vztahem (B23). Ze získaného tvaru odvoď te výrazy pro elektrickou a magnetickou sílu.

Řešení

a)
$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^{2} + \dot{y}^{2} + \dot{z}^{2}) + Q(E_{x}x + E_{y}y + E_{z}z) + \frac{Q}{2}(B_{x}(y\dot{z} - \dot{y}z) + B_{y}(z\dot{x} - \dot{z}x) + B_{z}(x\dot{y} - \dot{x}y))$$

b)
$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{j}} = m\ddot{x} + \frac{Q}{2}(B_{y}\dot{z} - B_{z}\dot{y}), \quad \frac{\partial L}{\partial x} = QE_{x} + \frac{Q}{2}(B_{z}\dot{y} - B_{y}\dot{z})$$

c)
$$\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_{j}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \implies m\ddot{x} = QE_{x} + Q(B_{z}\dot{y} - B_{y}\dot{z}), \quad \text{kde } \dot{y}B_{z} - \dot{z}B_{y} = (\vec{v} \times \vec{B})_{x}$$

Výsledek 1 $m\ddot{\vec{r}} = Q.\vec{E} + Q(\vec{v} \times \vec{B})$, tj. odvozen tvar (B23) Lagrangeových rovnic 2.druhu

Výsledek 2 Zákon síly (B5)
$$\vec{F} = m \ddot{\vec{r}} \implies \vec{F_{elmg}} = \vec{F_{el}} + \vec{F_{mg}} = Q. \vec{E} + Q (\vec{v} \times \vec{B})$$

<u>Příklad 2</u> Pro příčné homogenní elektrické pole $\vec{E}(0,E,0)$ (mezi deskami kondenzátoru vzdálenými od sebe *d*) nalezněte pohybový zákon (B2) pro klasický elektron s nábojem Q = -e. Počáteční podmínky jsou $\vec{r} = \vec{r}(0,0,0)$, $\vec{v} = \vec{v}(v_0,0,0)$, počátek souřadnicové soustavy je vzdálen *h* od záporné desky kondenzátoru. Určete místo pro otvor v kladné desce kondenzátoru, aby elektron mohl projít touto deskou (vyjděte z pohybové rovnice (B23) - viz Příklad 1).

Řešení

a) Z (B23) plyne $m\ddot{x}=0, \ m\ddot{y}=-e.E, \ m\ddot{z}=0$ b) První integrace $\dot{x}=v_0, \dot{y}=\frac{-eEt}{m}, \dot{z}=0$ c) Druhá integrace $x=v_0 t, y=-\frac{eE}{2m}t^2, z=0$ Výsledek 1 Pohybový zákon (B2) ve tvaru $\vec{r}(t)=v_0 t\vec{i}+\left(-\frac{eE}{2m}t^2\right)\vec{j}+0.\vec{k}$ Výsledek 2 Parabola $y=-\frac{eE}{2mv_0^2}x^2$, místo A pro otvor A $[x=\sqrt{(h-d)\frac{2mv_0^2}{eE}}, y=d-h].$ **<u>Příklad 3</u>** Pro podélné homogenní elektrické pole $\vec{E}(E,0,0)$ nalezněte pohybový zákon (B2) pro elektron s nábojem Q = -e. Počáteční podmínky jsou $\vec{r} = \vec{r}(0,0,0)$, $\vec{v} = \vec{v}(v_0,0,0)$. Použijte vztah (B23) a popište průběh urychlování klasického elektronu.

Řešení

a) Z (B23) v Příkladu 1 plyne $m \ddot{x} = -eE$, $m \ddot{y} = 0$, $m \ddot{z} = 0$ b) První integrace $\dot{x} = \frac{-eEt}{m} + v_0$, $\dot{y} = 0$, $\dot{z} = 0$ c) Druhá integrace $x = -\frac{eE}{2m}t^2 + v_0t$, y = 0, z = 0

Výsledek 1 Pohybový zákon (B2) ve tvaru $\vec{r}(t) = \left(-\frac{eE}{2m}t^2 + v_0t\right)\vec{i} + 0.\vec{j} + 0.\vec{k}$ **Výsledek 2** V čase $t = \frac{mv_0}{eE}$ se elektron zastaví ve vzdálenosti $x = \frac{mv_0^2}{2eE}$. Pak začne být urychlován ve směru záporné poloosy osy x se zrychlením $\frac{eE}{m}$.

<u>**Příklad 4</u>** Pro homogenní magnetické pole $\vec{B}(0,0,B)$ nalezněte tvar Lagrangeovy funkce (B22) $L = \frac{1}{2} mv^2 + Q\vec{E}\vec{r} + \frac{Q}{2} \vec{B}(\vec{r} \times \vec{v})$.</u>

Řešení

a) $\vec{E}(0,0,0), \ \vec{B}(0,0,B), \ \vec{r} \times \vec{v} = (y\dot{z} - \dot{y}z)\vec{i} + (z\dot{x} - \dot{z}x)\vec{j} + (x\dot{y} - \dot{x}y)\vec{k}$ b) $\vec{E}.\vec{r} = 0, \ \vec{B}(\vec{r} \times \vec{v}) = B(x\dot{y} - \dot{x}y), \ v^2 = \dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2$

Výsledek

$$L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^{2} + \dot{y}^{2} + \dot{z}^{2}) + \frac{Q}{2}B(x\dot{y} - \dot{x}y)$$

<u>Příklad 5</u> Pro homogenní magnetické pole $\vec{B}(0,0,B)$ a jeho Lagrangeovu funkci $L = \frac{1}{2}m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2) + \frac{Q}{2} B(x\dot{y} - \dot{x}y)$ (viz Příklad 4) nalezněte tvary Lagrangeových rovnic dosazením *L* do tvaru (B7) $\frac{d}{dt} \frac{\partial L}{\partial \dot{q}_j} - \frac{\partial L}{\partial q_j} = 0$.

Řešení

 $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{x}} - \frac{\partial L}{\partial x} = 0 \implies \frac{d}{dt}\left(m\dot{x} - \frac{Q}{2}By\right) - \frac{Q}{2}B\dot{y} = 0 \implies m\ddot{x} - QB\dot{y} = 0 \implies \ddot{x} = \omega\,\dot{y}, \omega = \frac{QB}{m}$ $\frac{d}{dt}\frac{\partial L}{\partial \dot{y}} - \frac{\partial L}{\partial y} = 0 \implies \frac{d}{dt}\left(m\dot{y} + \frac{Q}{2}Bx\right) + \frac{Q}{2}B\dot{x} = 0 \implies m\ddot{y} + QB\dot{x} = 0 \implies \ddot{y} = -\omega\,\dot{x}, \omega = \frac{QB}{m}$ $V\dot{y}sledek$ Tvary hledaných pohybových rovnic jsou $\ddot{x} = \omega\,\dot{y}, \ \ddot{y} = -\omega\,\dot{x}, \ \ddot{z} = 0.$

<u>Příklad 6</u> Pro homogenní magnetické pole $\vec{B}(0,0,B)$ a jeho Lagrangeovy rovnice 2. druhu $\ddot{x} = \omega \dot{y}, \quad \ddot{y} = -\omega \dot{x}, \quad \omega = \frac{QB}{m}$ (viz Příklad 5) nalezněte pohybový zákon pro klasický proton s nábojem Q = e. Zaveď te komplexní proměnnou $\alpha = x + iy$ a použijte Eulerův vztah $\exp(-ik) = \cos k - i \sin k$. Počáteční podmínky jsou $\vec{r} = \vec{r}(0,0,0), \quad \vec{v} = \vec{v}(0,v_0,0)$.

Řešení

a) Sečtení $\ddot{x} = \omega \dot{y}$, $i\ddot{y} = -i\omega \dot{x} \Rightarrow \ddot{x} + i\ddot{y} = \omega(\dot{y} - i\dot{x}) \Rightarrow \ddot{x} + i\ddot{y} = \frac{\omega}{i}(\dot{x} + i\dot{y}) \Rightarrow \ddot{\alpha} = -i\omega \dot{\alpha}$ b) První integrace $\frac{d\dot{\alpha}}{\dot{\alpha}} = -i\omega dt \Rightarrow \ln \dot{\alpha} = i\omega t + \ln C \Rightarrow \dot{\alpha} = C.e^{-i\omega t} \Rightarrow \dot{\alpha} = iv_0 e^{-i\omega t}$ c) Eulerův vztah $e^{-i\omega t} = \cos \omega t - i\sin \omega t \Rightarrow iv_0 e^{-i\omega t} = v_0 \sin \omega t + iv_0 \cos \omega t \Rightarrow$ $\Rightarrow \dot{x} = v_0 \sin \omega t, \quad \dot{y} = v_0 \cos \omega t$

d) Druhá integrace $x = -\frac{v_0}{\omega} \cos \omega t + C_1$, $y = \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t + C_2 \Rightarrow x = -\frac{v_0}{\omega} \cos \omega t + \frac{v_0}{\omega}$, $y = \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t$

Výsledek

Pohybový zákon (B2) má tvar $\vec{r} = \left(-\frac{v_0}{\omega} \cos \omega t + \frac{v_0}{\omega}\right) \vec{i} + \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t \vec{j} + 0 \vec{k}$.

<u>Příklad 7</u> Pohybový zákon pro klasický proton s počátečními podmínkami $\vec{r} = \vec{r}(0,0,0)$, $\vec{v} = \vec{v}(0,v_0,0)$ má v homogenním magnetickém poli $\vec{B}(0,0,B)$ tvar odvozený v Příkladě 6 $\vec{r} = (-\frac{v_0}{\omega} \cos \omega t + \frac{v_0}{\omega}) \vec{i} + \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t \vec{j} + 0 \vec{k}$, kde $\omega = \frac{QB}{m}$. Nalezněte tvar dráhy protonu a zapište rezonanční podmínku pro případný cyklotron použitý k urychlování protonu.

Řešení

$$x = -\frac{v_0}{\omega} \cos \omega t + \frac{v_0}{\omega}, \ y = \frac{v_0}{\omega} \sin \omega t \Rightarrow (x - \frac{v_0}{\omega})^2 + y^2 = \frac{v_0^2}{\omega^2}$$

Výsledek 1 Dráhou protonu je kružnice se středem $S\left[\frac{v_0}{\omega},0\right]$ a s poloměrem $r = \frac{v_0}{\omega}$ Výsledek 2 Úhlová frekvence oběhu po kružnici je $\omega = \frac{QB}{m}$, frekvence $v = \frac{QB}{2\pi m}$. Střídavé napětí na duantech cyklotronu by mělo splňovat uvedenou rezonanční podmínku. **<u>Příklad 8</u>** Dokažte pro elektrostatické pole $\vec{E} = \frac{\vec{F}}{q} = \frac{1}{4\pi \varepsilon_0} \frac{Q}{r^3} \vec{r}$ (\vec{r} je polohový vektor s počátečním bodem v místě bodového náboje Q, který pole vytváří, a s koncovým bodem v místě bodového zkušebního náboje q, síla \vec{F} je dána Coulombovým zákonem), že je nezřídlové (tj. div $\vec{E} = 0$) ve všech místech $|\vec{r}| \neq 0$.

Řešení

a) Podle (B26) je div
$$\vec{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z}$$

b) $E_x = \frac{1}{4\pi \varepsilon_0} \frac{Q}{\left(\sqrt{x^2 + y^2 + z^2}\right)^3} x = \frac{Q}{4\pi \varepsilon_0} x \cdot (x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2}$
c) $\frac{\partial E_x}{\partial x} = \frac{Q}{4\pi \varepsilon_0} \left[(x^2 + y^2 + z^2)^{-3/2} - \frac{3}{2} x (x^2 + y^2 + z^2)^{-5/2} \cdot 2x \right] = \frac{Q}{4\pi \varepsilon_0} \left(\frac{1}{r^3} - \frac{3x^2}{r^5} \right)$
d) div $\vec{E} = \frac{Q}{4\pi \varepsilon_0} \left(\frac{3}{r^3} - \frac{3x^2 + 3y^2 + 3z^2}{r^5} \right) = 0$

Výsledek Ve všech místech $|\vec{r}| \neq 0$ je div $\vec{E} = 0$. To je v souladu s Maxwellovou rovnicí (B27) div $\vec{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}$ pro zřídla elektrického pole (zřídlo je jen v místě bodového náboje Q, tj. v místě $|\vec{r}| = 0$).

Příklad 9 Dokažte, že z vlastní rovnice (B38) Hamiltonova operátoru $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$ pro nerelativistickou volnou částici pohybující se v ose x s hybností p_x a se stacionárním stavem reprezentovaným vlnovou funkcí $\psi = \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - p_x x)\right]$ vyplývá obvyklá hodnota energie volné částice $E = T = \frac{p_x^2}{2m} = \frac{1}{2}mv_x^2$ (Laplaceův operátor Δ definován (B20), energie E ® operátorem \hat{H} podle (B37)).

Řešení

- a) Pro zkoumaný jednorozměrný případ je Laplaceův operátor podle (B20) dán instrukcí $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2}$, stacionární Schrödingerova rovnice má podle (B38) tvar $\hat{H} \psi = E \psi$
- b) Levá strana Schrödingerovy rovnice má tvar $\hat{H} \psi = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (Et p_x x)\right] \right\}$ c) První derivace $\frac{\partial}{\partial x} \left\{ \exp\left[-\frac{i}{\hbar} (Et - p_x x)\right] \right\} = \psi \cdot \frac{i}{\hbar} p_x$, druhá derivace $\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p_x^2}{\hbar^2} \psi$

d) Srovnání levé a pravé strany $\hat{H} \psi = E \psi$ vede k závěru $E = \frac{p_x}{2m}$

Výsledek

Hamiltonův operátor \hat{H} pro volnou částici skutečně dává prostřednictvím stacionární Schrödingerovy rovnice obvyklou hodnotu energie $E = T = \frac{1}{2} m v_x^2$.

<u>Příklad 10</u> Radiální hustota pravděpodobnosti elektronu je pro stav n=2, l=1 (hodnoty hlavního a vedlejšího kvantového čísla pro elektron vázaný v obalu atomu vodíku) dána tvarem $P_r = konst.r^4.\exp((\frac{-r}{a}))$, kde *a* je Bohrův poloměr a *r* vzdálenost elektronu od jádra. Dokažte, že s největší pravděpodobností se elektron vyskytuje ve vzdálenosti r = 4a (viz 9.kap., odst.9.3.).

Řešení

a)
$$\frac{dP_r}{dr} = konst.4r^3 \exp\left(\frac{-r}{a}\right) - konst. \frac{r^4}{a} \exp\left(\frac{-r}{a}\right)$$

b) Podmínka pro extrémy $\frac{dP_r}{dr} = 0 \implies 4r^3 - \frac{r^4}{a} = 0$
c) Řešení podmínky pro extrémy $r^3 \left(\frac{r}{a} - 4\right) = 0 \implies r_1 = 0, r_2 = 4a$

Výsledek

Kořen rovnice $r_1 = 0$ odpovídá minimu pravděpodobnosti $P_r (P_r = 0)$ Kořen rovnice $r_2 = 4a$ je hledanou vzdáleností, v níž je pravděpodobnost maximální.

<u>Příklad 11</u> Směrová hustota pravděpodobnosti elektronu je pro stav l = 1, m = 0 (hodnoty vedlejšího a magnetického kvantového čísla elektronu vázaného v obalu atomu vodíku) dána tvarem $P_s = konst. \cos^2 \vartheta$ (ϑ je sférická souřadnice - viz 9.kap., odst.9.3.). Dokažte, že bude-li osa z zvolena v nákresu jako svislá osa, bude graf směrové pravděpodobnosti P_s dán vzhledem k definici sférické souřadnice ϑ (úhlová vzdálenost polohového vektoru elektronu od osy z) "stojatou osmičkou" (viz Obr. 4).

Řešení

a) $\frac{\mathrm{d}P_s}{\mathrm{d}\mathcal{G}} = -\mathrm{konst.}2.\mathrm{cos}\,\mathcal{G}\,\mathrm{sin}\,\mathcal{G}$

b) Podmínka pro extrémy $\frac{dP_s}{dg} = 0 \implies \cos g \sin g = 0$

c) Řešení podmínky pro extrémy: minima pro $\mathcal{G} = 90^{\circ}$, 270°, maxima pro $\mathcal{G} = 0^{\circ}$, 180°

Výsledek Graf směrové pravděpodobnosti lze nazvat "stojatou osmičkou".

<u>**Příklad 12</u>** Dokažte, že tvar (A4) a (B50) pro energii volné částice $\varepsilon = \sqrt{m_0^2 c^4 + p^2 c^2}$ je identický s Einsteinovým vztahem (B49) $E = mc^2$ (za hybnost p dosaď te relativistickou jednorozměrnou hybnost p = mv s užitím vztahu (B48)). **Řešení**</u>

a)
$$\varepsilon = \sqrt{m_0^2 c^4 + m^2 v^2 c^2}$$
, $m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}$
b) $\varepsilon = \sqrt{m_0^2 c^4 + \frac{m_0^2 v^2 c^4}{c^2 - v^2}} = \sqrt{m_0^2 c^4 \left(\frac{c^2 - v^2 + v^2}{c^2 - v^2}\right)}$
c) $\varepsilon = \frac{m_0 c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = mc^2$

Výsledek Vztahy (A4), (B50) a vztah (B49) jsou při použití relativistické hybnosti identické.

<u>Příklad 13</u> Užitím diferenciálního počtu dokažte, že spektrální funkce $f(k) = \frac{1}{\sigma_k \sqrt{2\pi}} \exp\left(-\frac{(k-k_0)^2}{2\sigma_k^2}\right)$ pro zavedení "Gaussiánu" jako pravděpodobnostního popisu fotonu (viz 11.kap., odst.11.3.) má v zjednodušené podobě $f(x) = \exp(-x^2)$ tvar Gaussovy křivky.

Řešení

a)
$$\frac{df}{dx} = -2x \exp(-x^2), \ \frac{d^2 f}{dx^2} = -2 \exp(-x^2) + 4x^2 \exp(-x^2)$$

b) Extrémy $\frac{df}{dx} = 0 \Rightarrow E[0,1]$, Růst $\frac{df}{dx} > 0 \Rightarrow x \in (-\infty,0)$, Pokles $\frac{df}{dx} < 0 \Rightarrow x \in (0,\infty)$

c) Inflexe
$$\frac{d^2 f}{dx^2} = 0 \Rightarrow 2x^2 - 1 = 0 \Rightarrow I_1 \left[\frac{\sqrt{2}}{2}, \exp(-\frac{1}{2}) \right], I_2 \left[-\frac{\sqrt{2}}{2}, \exp(-\frac{1}{2}) \right]$$

Konvexe
$$\frac{d^2 f}{dx^2} > 0 \implies 2x^2 - 1 > 0 \implies x \in (-\infty, -\frac{\sqrt{2}}{2}) \cup (\frac{\sqrt{2}}{2}, \infty)$$

Konkávnost $\frac{d^2 f}{dx^2} < 0 \implies 2x^2 - 1 < 0 \implies x \in \left(-\frac{\sqrt{2}}{2}, \frac{\sqrt{2}}{2}\right)$

d) $\lim_{x \to \pm \infty} f(x) = 0$
Výsledek Grafem je typická "zvonová" Gaussova křivka, postupující uzavřený "zvon-Gaussián" si lze představit jako vhodný nástroj pro pravděpodobnostní popis vlnového balíku. Vlnový balík je modelem fotonu.

<u>Příklad 14</u> Odvoď te rozpadový zákon (B57) $n = n_0 \exp(-\lambda t) = n_0 \exp(-\frac{\ln 2}{T} t)$. Zjistěte, za jaký čas se tři čtvrtiny mateřských jader přemění v jádra dceřinná.

Řešení

- a) Dle 12.kap., odst.12.2. $\lambda dt = -\frac{dn}{n}$, v čase t = 0 byl počet mateřských jader n_0
- b) Integrací $\int \lambda \, dt = \int \frac{dn}{n}$ lze získat ln $n = -\lambda t + C$, kde C je integrační konstanta
- c) Úpravou $n = \exp(-\lambda t) \exp C$, z počátečních podmínek plyne exp $C = n_0$
- d) Do tvaru $n = n_0 \exp(-\lambda t)$ bude zaveden poločas rozpadu $T(t = T \Rightarrow n = n_0 / 2)$, tj.

$$\frac{n_0}{2} = n_0 \exp(-\lambda T)$$
, odtud $\lambda = \frac{\ln 2}{T}$

Výsledek 1 Tvary rozpadového zákona jsou $n = n_0 \exp(-\lambda t) = n_0 \exp(-\frac{\ln 2}{T} t)$

Výsledek 2 $n = \frac{n_0}{4} \Rightarrow \frac{1}{4} = \exp(-\frac{\ln 2}{T}t) \Rightarrow \ln 2^{-2} = -\frac{\ln 2}{T}t \Rightarrow t = 2T$

Za čas 2T se tři čtvrtiny mateřských jader přemění v jádra dceřinná.

<u>**Příklad 15</u>** Zjistěte, kolik částic z původního počtu bude pohlceno na tloušťce x = 0,42 a absorbujícího materiálu, je-li *a* polotloušťka příslušné látky.</u>

Řešení

a) Dle (B58) je absorpční zákon $n = n_0 \exp(-\mu x) = n_0 \exp\left(-\frac{\ln 2}{a}x\right)$

b) $n = n_0 \exp(-\ln 2 \cdot 0.42) = n_0 \exp(-0.29) \doteq 0.74 n_0$

Výsledek

Na tloušťce x = 0,42 a příslušné látky bude pohlcena asi $\frac{1}{4}$ částic dopadajícího záření.

Dodatek 6 Procvičení ionizujícího záření a jeho aplikací v radiologii

Pokuste se vyložit obsah poznatků zahrnutých do dané skupiny poznatků. Spolupracujte s příslušnou kapitolou a vypsanými odstavci kapitoly. Budete-li spokojeni se svými odpověďmi, přistupte k další skupině. Pořadí poznatků ve skupině má logickou návaznost.

Skupina č.1 (13.kap., odst.13.1., odst.13.2.)

Pojem ionizace prostředí, Prostředky ionizace - ionizátory a příčiny vyvolávající ionizaci nárazem, Způsoby ionizace, Přímá a nepřímá ionizace

Gama záření, Rentgenové záření, Infračervené záření, Rádiové vlny, Ultrazvukové vlny, Korpuskulární záření

Skupina č.2 (12.kap., odst.12.2., odst.12.3., 14.kap., odst.14.1., 15.kap., odst.15.1.)

Přehled přírodních zdrojů, Přírodní zdroje a jejich fyzikální popis, Teorie alfa rozpadu (tunelový jev), Přehled umělých zdrojů, Veličiny a jednotky fyzikálního popisu zdrojů, Fyzikální principy umělých zdrojů

Skupina č.3 (12.kap., odst.12.2., odst.12.3., odst.12.6., 14.kap., odst.14.2., 15.kap., odst.15.1.)

Výčet interakcí (s obalem atomu, s jádrem atomu, s krystalovou mříží, s biologickým prostředím), Škodlivé a užitečné účinky ionizujícího záření, Zákony, veličiny a jednotky fyzikálního popisu interakcí, Fyzikální popis interakcí, Účinný průřez interakce, Krystalová mříž jako makrosystém fononů - zahřívání materiálů, Ochrana před ionizujícím zářením

Skupina č.4 (12.kap., odst.12.4., odst.12.5., 15.kap., odst.15.2.)

Pozorování drah částic ionizujícího záření, Měřící zařízení založená na ionizačním principu, Měřící zařízení založená na excitačním principu ve spojení s luminiscenčním principem a s vedením proudu v pevných látkách, Měřící zařízení založená na fotochemickém principu, Měřící zařízení založená na kombinovaných přeměnách energie

Skupina č.5 (16.kap., odst.16.1., odst.16.2.)

Fyzikální popis rentgenové diagnostiky, Fyzikální popis radionuklidové diagnostiky, Fyzikální popis rentgenové terapie, Fyzikální popis radionuklidové terapie

Skupina č.6 (17.kap., odst.17.1. až odst.17.5., 18.kap.)

Fyzikální popis nukleární medicíny, Fyzikální popis rentgenu, Fyzikální popis termografie, Fyzikální popis sonografie, Fyzikální podstata nukleární magnetické rezonance, Fyzikální základy technického využití nukleární magnetické rezonance.

Dodatek 7 Friedmannovy modely, relativistická kosmologie s kosmologickou konstantou

První část Dodatku 7 (v rámci kapitoly 10.3.) Friedmannovy modely

10.3.1. Obecná teorie relativity a kosmologie

Klasická mechanika vychází z absolutního prostoru 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.

Speciální teorie relativity formuluje Einsteinův speciální princip relativity - všechny inerciální vztažné soustavy jsou rovnoprávné a pro formulaci všech fyzikálních zákonů rovnocenné. Galileiho transformace byla nahrazena transformací Lorentzovou. Lorentzova transformace také znamenala přechod k tenzorům n-tého řádu s 4^n složkami. Euklidův prostor byl ve speciální teorii relativity nahrazen čtyřrozměrným Minkowského prostoročasem tvořeným množinou světobodů o čtyřech souřadnicích.

Obecná teorie relativity vyšla z obecného principu relativity - inerciální i neinerciální vztažné soustavy jsou pro formulaci obecných fyzikálních zákonů zcela rovnocenné. Současně prokázala rovnost setrvačné a tíhové hmotnosti a na tomto základě zformulovala princip ekvivalence - gravitační síla není lokálně rozeznatelná od setrvačné síly. Mezi významné aplikace obecné teorie relativity patří kosmologický pohyb vesmíru jako celku. S takto pojatou relativistickou kosmologií jsou spojeny např. snadno vysvětlitelné a snadno odvoditelné Hubbleův zákon a Friedmannovy modely vesmíru.

10.3.2. Hubbleův zákon a jeho tvary

V roce 1929 dal E. P. Hubble do souvislosti vzdálenosti galaxií s jejich rudými posuvy a ukázal, že vzdálenější galaxie se od nás vzdalují rychleji. Znamená to, že vesmír se rozpíná. Již v roce 1912 V. M. Slipher měřil rychlosti galaxií z rudého posuvu absorpčních čar jejich spekter. Hubble změřil vzdálenosti hrstky galaxií pomocí pravidelně proměnných hvězd cefeid, které objevil i v galaxiích mimo Mléčnou dráhu. Tím měl Hubble k dispozici dva seznamy – údaje o rudých posuvech a údaje o vzdálenostech – to vyústilo ve formulaci Hubbleova zákona. Později (80tá léta minulého století) se ukázalo, že ve všech směrech vytvářejí galaxie vláknitou strukturu velkých proluk a velkých stěn o rozměrech 100 megaparseků – počátkem devadesátých let se ukázalo, že na této rozměrové škále se nehomogenity začínají vyrovnávat. Bylo dosaženo rozměrů a vzdáleností, kde končí struktury a začíná homogenita. V tom je smysl Hubbleova zákona o rozpínání vesmíru (model – gumička s knoflíky, gumičku natáhneme na dvojnásobek, knoflíky budou od sebe vzdáleny dvakrát více – pro daný knoflík se vzdálenější knoflíky pohybují rychleji).

Hubbleův zákon má tvar v = H.r (platí spíše pro rychlost v a vzdálenost r kup galaxií), kde H je Hubbleova konstanta. Tato skutečnost je významná, je-li měřena rychlost galaxií v kupách galaxií. Všechny galaxie jsou prakticky stejně daleko a mají i stejný kosmologický rudý posuv. Navíc se jednotlivé galaxie pohybují individuálními rychlostmi k pozorovateli nebo od pozorovatele. Tyto individuální rychlosti jsou dány jejich vlastním pohybem v lokálním gravitačním poli a odhalují množství hmoty ve vesmíru – touto cestou byla poprvé detekována existence temné hmoty ve vesmíru – kvantitativní míra gravitačních efektů kupy galaxií vyplývající z "viditelné" hmoty nebyla dostatečná k vysvětlení individuálních rychlostí galaxií v dané kupě galaxií.

Hubbleův zákon v=H.r je upravován pomocí nerelativistického Dopplerova principu. Nerelativistický Dopplerův princip má ve tvaru $\frac{v}{c} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda}$ (pro malé rudé posuvy $\Delta \lambda$ udává rychlost světla *c* násobená $\frac{\Delta \lambda}{\lambda}$ rychlost vzdalování). Při vzdalování objektu rychlostí *v* se posouvají vlnové délky směrem k vyšším hodnotám o velikost $\Delta \lambda$ ($\Delta \lambda$ je rovno rozdílu pozorovaná vlnová délka – vyslaná vlnová délka). Z analogie s viditelnou složkou spektra elektromagnetického záření je pak hovořeno o "rudém" posuvu. Rudý posuv neříká, jak rychle se galaxie pohybuje prostorem, ale je mírou expanze vesmíru, která se odehrála během cesty světla od galaxie k pozorovateli. Dosazením lze obdržet tvar Hubbleova zákona $H.r = c. \frac{\Delta \lambda}{\lambda} = c.z$, kde grafem závislosti cz = f(r) je přímka, jejíž směrnice je dána Hubbleovou konstantou *H*.

Odvození nerelativistického Dopplerova principu

Zdroj Z se vzdaluje od pozorovatele P rychlostí v. Elektromagnetické záření, vysílané zdrojem Z, se šíří rychlostí světla c a má frekvenci f. Za čas t zdroj Z vyšle počet vln n = f.t a vzdálí se od pozorovatele P o dráhu v.t. Vlnová délka λ 'skutečného vlnění vycházejícího z pohyblivého zdroje Z bude dána poměrem dráhy c.t + v.t a počtu vln n, který na této dráze je. Bude tedy platit

$$\lambda = \frac{ct + vt}{ft} = \frac{c}{f} + \frac{v}{f} = \frac{c}{f} \left(1 + \frac{v}{c}\right) = \lambda \left(1 + \frac{v}{c}\right). \text{ Odtud již plyne vztah } \frac{v}{c} = \frac{\Delta \lambda}{\lambda}.$$

Konec odvození.

Vzdálenost *r* v Hubbleově zákonu $H.r = c. \frac{\Delta \lambda}{\lambda} = c.z$ se často vyjadřuje pomocí vztahu mezi absolutní velikostí *M* vesmírného objektu (např. hvězdy) a jeho zdánlivou velikostí *m*, tj. vztahem $M = m + 5 - 5 \log r$. Na základě pozorování se objevují odchylky od linearity při rozpínání – při zpomalování rozpínání lze zavést parametr decelerace *q*, při zrychlování rozpínání naopak parametr akcelerace *q*.

Odvození vztahu $M = m + 5 - 5 \log r$

Starověká astronomie zavedla hrubé rozdělení hvězd podle osvětlení oka nebo přístroje do původně šesti zdánlivých hvězdných velikostí *m*. Osvětlení *E* (množství světelné energie dopadající na jednotku plochy za jednotku času) je přitom dáno podílem svítivosti *I* (veličina soustavy SI) zdroje světla a čtvercem vzdálenosti *r* zkoumaného zdroje:

$$E = \frac{I}{r^2}$$

Veličina "magnituda m" pro zdánlivou hvězdnou velikost vychází z Weberova-Fechnerova psychofyzikálního zákona – mění-li se fyzikální podněty působící na lidské smysly řadou geometrickou, jejich vnímání se mění řadou aritmetickou. Magnituda je proto logaritmická veličina, u které platí, že 1 magnituda rozdílu osvětlení odpovídá osvětlením v poměru 2,512:1 (tzv. Pogsonův poměr). Tento poměr byl zvolen tak, že hvězdy lišící se o 5 magnitud osvětlují oko nebo přístroj v poměru 1:100 – tím se zhruba dodržuje starověký význam magnitudy. Je třeba upozornit, že v souladu s tímto historickým významem znamená vyšší magnituda nižší zdánlivou hvězdnou velikost hvězdy.

Rozdíl zdánlivých hvězdných velikostí dvou hvězd $m_1 - m_2$ je pak dán tzv. Pogsonovou rovnicí (symbol "log" označuje jako obvykle dekadický logaritmus)

$$m_1 - m_2 = -2,5 \log(E_1/E_2).$$

Po dosazení za $E_1/E_2 = 1$: 2,512 vyjde rozdíl $m_1 - m_2$ skutečně roven 1 magnitudě.

Lidské oko v teoretickém případě dokonale tmavého pozadí je schopno registrovat hvězdy maximálně 8. až 9. magnitudy. V praxi jsou okem bez dalekohledu viditelné objekty o hvězdné velikosti asi 6. magnitudy. Nejslabší hvězdy viditelné Hubbleovým vesmírným dalekohledem mají hvězdnou velikost 30. magnitudy.

Vedle skutečné svítivosti hvězdy, dané jejími fyzikálními vlastnostmi, má na hodnotu hvězdné velikosti vliv také její vzdálenost *r* od Země. Proto se kromě zdánlivé hvězdné velikosti m zavádí také absolutní hvězdná velikost *M* jako hvězdná velikost, kterou by hvězda měla ve vzdálenosti 10 parseků. Parsek (značka jednotky pc) je jednotka vzdálenosti, používaná v astronomii. Jeden parsek je vzdálenost, z níž má 1 astronomická jednotka (1 AU jako střední vzdálenost Země od Slunce) úhlový rozměr jedné vteřiny. Jeden parsek vyjádřen v jiných jednotkách vzdálenosti (např světelného roku sr) je přibližně roven 1 pc \approx 3,262 sr \approx 206 265 AU \approx 3,086.10¹³ km. Vztah mezi absolutní hvězdnou velikostí M a zdánlivou hvězdnou velikostí m lze nalézt pomocí Pogsonovy rovnice $m_1 - m_2 = -2,5 \log(E_1/E_2)$ a vztahu $E = \frac{I}{r^2}$. Po dosazení do Pogsonovy rovnice lze obdržet

$$M - m = -2,5 \log \frac{I/100}{I/r^2} = -2,5 \log \frac{r^2}{100}$$
. Odtud již plyne hledaný vztah $M = m - 5 + 5 \log r$.

Konec odvození.

10.3.3. Přesnost měření vzdáleností v astronomii – supernovy typu Ia

Dnešní hodnota Hubbleovy konstanty je 70 ± 7 km.s⁻¹.Mpc⁻¹. Přesnost měření v astronomii je dána existencí "standardních vesmírných svíček". Nejlepšími kandidáty na měření vesmírných vzdáleností jsou supernovy typu Ia, které vznikají termonukleární explozí bílých trpaslíků. Jsou přibližně 100 000 krát zářivější než proměnné hvězdy cefeidy. Na rozdíl od cefeid však neopakují svůj světelný cyklus. Jsou jednosměrnou cestou k sebedestrukci – v současnosti však existují standardní světelné křivky, které umožňují extrapolovat ty části křivky, které nebyly pozorovány.

Supernovy typu Ia představují zařízení na měření obrovských vesmírných vzdáleností. Jejich vzdálenost (a tedy i vzdálenost galaxie, v níž se vyskytují) lze přesně stanovit z pozorovaného osvětlení (z pozorované jasnosti). Bílí trpaslíci, kteří jsou součástí těsných binárních soustav (známá binární soustava Sírius A a Sírius B, v níž je Sírius B také bílým trpaslíkem, není těsnou binární soustavu), přejímají hmotu. Bílý trpaslík pak může překročit Chandrasekhárovu mez a vybuchnout jako supernova typu Ia. Supernova typu Ia je vlastně termonukleární exploze, "vybuchující jaderná bomba" o hmotnosti hvězdy. Při překročení Chandrasekharovy meze se začne slučovat uhlík a kyslík s uvolňováním tepla – to jadernou fúzi ještě urychlí. Většina hmoty bílého trpaslíka je přeměněna na železo, přičemž je uvolněno takové množství energie, že vybuchnuvší bílý trpaslík září celé týdny jako 4 miliardy Sluncí.

Supernova Ia nemá ve spektru vodík (to představuje důkaz jejího vzniku z původní hvězdy, která se stala nejen bílým trpaslíkem, ale i součástí těsné binární soutavy). Trvá jim zhruba 20 dní než dosáhnou maxima jasnosti, pak během 2 týdnů pohasnou na polovinu a pak každý den ztrácejí na jasnosti 1% - světelná křivka je napájena rozpadem radioaktivních prvků v blízkosti železa (nikl se rozpadá s poločasem rozpadu T = 6,1 dne na kobalt a kobalt s T = 77,1 dne na stabilní železo). Světelná křivka supernovy typu Ia tak představuje nukleárně poháněné hodiny – vše to potvrzuje rozbor spekter, množství kobaltu Co se snižuje,

železa Fe přibývá. Supernovy Ia jsou zodpovědné za veškeré zásoby železa v zemském jádře i na zemském povrchu (tj. např. i v lidské krvi). Po výbuchu zůstane žhavý, na železo bohatý oblak, který vysílá rentgenové záření. Z měření zdánlivé velikosti *m* supernov typu Ia lze přesně určit vzdálenost ve vesmíru – všechny vznikají překročením Chandrasekharovy meze.

Poznámka: Supernovy typu II (přibližný popis vzniku neutronové hvězdy))

Vedle supernov typu I existují také supernovy typu II. Pro úplnost bude i tento typ supernov popsán (i když netvoří "standardní vesmírné svíčky"). Hvězdy s hmotností např. 8 krát větší než hmotnost Slunce (Chandrasekharova mez je již překročena u původní hvězdy a závěrečným vývojovým stádiem již není bílý trpaslík, nýbrž neutronová hvězda) nekončí termonukleární explozí na základě jaderného slučování (jak je tomu u bílého trpaslíka, který je součástí těsné binární soustavy), ale energie výbuchu pochází z gravitačního kolapsu.

Např. hvězdy 10 krát hmotnější než Slunce mají na začátku 10 krát více paliva, ale spotřebovávají ho 10 000 krát rychleji (září 10 000 krát jasněji než Slunce) a zásoby jaderné energie se spotřebují za dobu 1000 krát kratší (místo 10 miliard let slunečního života mají k dispozici jen 10 milionů let). Odpadem počátečního vodíkového jaderného spalování je podobně jako u Slunce hélium, "popelem" ze slučování vodíku v hélium je uhlík a kyslík, slučováním kyslíku u těchto např. 10 krát hmotnějších hvězd než Slunce vznikají prvky okolo křemíku a jadernou fúzí křemíku proces termonukleárního slučování končí u železa (slučováním železa již nevzniká energie záření a tlak záření nemůže kompenzovat gravitační kolaps).

Při gravitačním smršťování se gravitace přeměňuje na teplo, teplota jádra stoupá, energie odchází jen ve prostřednictvím neutrin, která nepřispívají ke kompenzujícímu tlaku proti váze vnějších vrstev materiálu. Při teplotě 3 miliardy Kelvinů se železná jádra začínají rozbíjet na lehčí (přitom je energie spotřebována, nikoliv produkována), jádro hvězdy zhruba o velikosti Země a hmotnosti 2 Sluncí se během 1s zhroutí rychlostí až 0,33 c. Kolabující vnitřek hvězdy dosáhne hustoty atomových jader (stává se neutronovou hvězdou) a jaderné síly prudce zastaví kolaps.

Toto náhlé zbrzdění "pádu" (jakoby náraz rozjetého vlaku do skály) vyvolá mohutnou rázovou vlnu postupující ven, která spolu s proudem neutrin odmrští do okolního prostoru vnější vrstvy hvězdy – zrodí se supernova typu II. Většina energie odchází ve formě neutrin (ta vznikají asi 100 km od centra kolapsu), jen 1% je dáno vlastním pohybem explodující hvězdy a jen 1/10000 energie připadá na světlo, které na výbuch hvězdy upozorní.

Horký plyn vně neutronové hvězdy je místem, kde se mohou syntetizovat z železa jádra zlata, ze zlata jádra olova a z olova jádra uranu – prvky těžší než železo jsou ve vesmíru vzácné, neboť vznikají jen v tomto speciálním prostředí. Odvrhované vyhořelé vnější obálky obsahují vodík, ale také velké množství kyslíku (zdroj kyslíkových atomů, které se staly součástí např. atmosféry Země) i dalších středně těžkých prvků. (tyto procesy byly poprvé popsány F. Zwickym a W. Baadem po roce 1930).

Např. 23.2.1987 dorazilo na Zemi záření supernovy typu II 1987A z Velkého Magellanova mračna, která někdy před 165 000 lety vybuchla. K Zemi dorazila neutrina, prošla jí (Země je pro neutrina "průhledná"), jen detektor (podzemní nádrž s 6000 tunami vysoce čisté vody vybudovaná v solném dolu původně k měření neutrin pro jiné účely) zachytil spršku neutrin z kolapsu jádra této supernovy. Zbytkem po kolapsu jádra je tzv. pulsar – rychle rotující neutronová hvězda. Pulsar na místě supernovy 1987A dosud nebyl identifikován. Např. pulsar v Krabí mlhovině, pozůstatek po supernově z r.1064, rotuje 33 krát za 1s.

10.3.4. Robertsonova metrika

Podle obecné teorie relativity je prostoročas zakřiven zdroji gravitačního pole (jiná pole, částice, tělesa a další fyzikální objekty). Metriku zakřiveného prostoročasu jako čtverec intervalu "vzdálenosti" mezi dvěma blízkými světobody lze získat pomocí složek metrického tenzoru g_{ij} . V plochém, nezakřiveném prostoročase, spojeném s metrikou Minkowského prostoročasu $ds^2 = dx_1^2 + dx_2^2 + dx_3^2 + dx_4^2$ mají složky metrického tenzoru g_{ij} konstantní hodnoty.

Např. kosmologický pohyb vesmíru jako celku může vycházet z podtřídy modelů FRWL vyplývajících z Friedmannovy-Robertsonovy-Walkerovy-Lemaîtrovy metriky, která je buzena ideální kosmickou tekutinou s tlakem p=0, kosmologickou konstantou $\Lambda=0$ a indexy křivosti k = 1,0,-1 (tyto indexy křivosti souvisejí se skalární křivostí, kterou lze získat z Ricciho tenzoru R_{ij} , jenž je součástí Einsteinovy gravitační rovnice). Tato podtřída expandujících vesmírů vede při k=1 k uzavřenému vesmíru, při k=0 k Einsteinovu-de Sitterovu vesmíru a při k=-1 k otevřenému vesmíru.

Robertsonovu metriku lze získat intuitivním zobecněním metriky Minkowského prostoročasu jako čtverec intervalu "vzdálenosti" mezi dvěma blízkými světobody a lze ji pak zapsat ve tvaru

$$ds^2 = c^2 dt^2 - R^2(t) (dx^2 + dy^2 + dz^2) = c^2 dt^2 - R^2(t) dr^2$$
, v němž

- ds^2 je vzdálenost dvou bodů ve čtyřrozměrném prostoročase, R(t) udává nestatičnost vesmíru jako parametr expanze (někdy se hovoří o poloměru uzavřeného sférického vesmíru) – jde o vzdálenost 3-rozměrného podprostoru od jeho středu ve 4-rozměrném kontinuu (ve 4-rozměrné kosmické tekutině).

- \dot{R} představuje rychlost rozpínání, \ddot{R} představuje zrychlení rozpínání, může jít o akceleraci nebo o deceleraci

- dr je geometrická (prostorová) vzdálenost mezi 2 body uvnitř slupky samotné

- Jestliže *R*(*t*) roste, roste také d*r*, v Hubbleově zákonu lze používat místo *r* také *R*

10.3.5. Friedmannovy rovnice a Einsteinova gravitační rovnice

Po nahrazení g_{ij} v Einsteinově gravitační rovnici (která ve slabých gravitačních polích přechází v Newtonův gravitační zákon) z Robertsonovy metriky, na základě působení pouze přitažlivých gravitačních sil (expanze vesmíru je gravitačními silami zpožďována), při

zanedbání tlaku *p* kosmologické tekutiny - plynu (předpoklad velmi od sebe vzdálených galaxií jako částic kosmologického plynu o hustotě ρ , kdy lze tlak *p* zanedbat), při použití dokonalého kosmologického principu (homogenní a izotropní vesmír) a při zanedbání kosmologické konstanty Λ lze obdržet dvě Friedmannovy (Alexander Friedmann, ruský meteorolog, 1922) rovnice (B50a) a (B50b) ve tvaru

(B50a)
$$\frac{\dot{R}^2}{R^2} + 2\frac{\ddot{R}}{R} = -\frac{kc^2}{R^2},$$

(B50b) $\frac{\dot{R}^2}{R^2} - \frac{8\pi\kappa\rho}{3} = -\frac{kc^2}{R^2},$

v nichž konstanta k nabývá hodnot k = +1, 0, -1.

Bude-li využita jen homogenita a izotropnost vesmíru, pak lze pro složky tenzoru energie a hybnosti T_{ij} v Einsteinově gravitační rovnici napsat vztahy $T_{44} = \rho c^2$, $T_{11} = T_{22} = T_{33} = -p$ (tlak *p* a hustota ρ jsou funkcemi pouze času), a Friedmannovy rovnice lze odvodit ve tvaru

$$(B50a')\left(\frac{\dot{R}}{R}\right)^{2} + 2\frac{\ddot{R}}{R} + \frac{kc^{2}}{R^{2}} - \Lambda c^{2} = -\frac{8\pi\kappa}{c^{4}}p, \text{ kde } \kappa \text{ je Newtonova gravitační konstanta,}$$

$$(B50b') \quad 3\left(\frac{\dot{R}}{R}\right)^{2} + \frac{3kc^{2}}{R^{2}} - \Lambda c^{2} = \frac{8\pi\kappa\rho}{c^{2}}.$$

Friedmannovy rovnice (B50a') a (B50b') spolu souvisejí identitou

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\rho c^2 R^3\right) = -p \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(R^3\right).$$

Friedmannovy rovnice (B50a'), (B50b') společně se stavovou rovnicí $p = f(\rho)$ kosmologické tekutiny umožňují určit *R*, *p*, ρ jako funkci času, tj. umožňují určit evoluci vesmíru.

10.3.6. Odvození Friedmannových rovnic

Předpoklady odvození

a) Budou uvažovány galaxie tak vzdálené, že lze použít dokonalý kosmologický princip daný homogenní a izotropní expanzí. Pak $r(t) = r_0 R(t)$ ukazuje, že stav po čase *t* je podobný stavu původnímu a R(t) hraje roli koeficientu podobnosti (význam parametru expanze R(t)).

b) Souhrn galaxií si lze pak představit jako plyn, jehož částicemi jsou galaxie. Vzhledem ke vzdálenosti galaxií bude zanedbáván tlak plynu o hustotě ρ .

c) Lokálně bude vycházeno z Newtonovy teorie gravitace a bude zvolena taková koule, aby hmota o hmotnosti M byla přenesena k povrchu koule. Uvnitř koule lze pak hovořit o euklidovském prostoru.

d) V Newtonově gravitačním zákonu bude zavedeno znaménko – na základě existence přitažlivé gravitační síly (je předpokládána decelerace expanze, gravitační síly zpožďují expanzi). Předpoklad "decelerace" ovlivňuje odvozování tvarů Friedmannových rovnic.

Na základě předpokladů a), b), c), d) z Newtonova gravitačního zákonu pak plyne

$$\ddot{r} = \frac{-\kappa M}{r^2} \Rightarrow \dot{r}\ddot{r} = -\kappa M \frac{\dot{r}}{r^2} \Rightarrow \frac{d}{dt} \left(\frac{\dot{r}^2}{2}\right) = \frac{d}{dt} \left(\frac{\kappa M}{r}\right) \Rightarrow \dot{r}^2 = \frac{2\kappa M}{r} + K_1, \text{ kde } K_1 \text{ je integrační}$$

konstanta.

Vzhledem ke vztahům $r(t) = r_0 R(t)$ a vztahu $\dot{r} = r_0 \dot{R}$ lze napsat výraz $\frac{\dot{r}}{r} = \frac{R}{R}$ a po dosazení za hmotnost $M = \frac{4}{3}\pi\rho r^3$ lze obdržet

$$\frac{\dot{r}^2}{r^2} = \frac{8}{3}\pi\kappa\rho + \frac{K_1}{r^2} \Longrightarrow \frac{\dot{R}^2}{R^2} = \frac{8}{3}\pi\kappa\rho + \frac{K_1}{r_0^2R^2}$$

Po přepsání konstanty K_1 do tvaru $\frac{K_1}{r_0^2} = -Kc^2$ lze již získat Friedmannovu rovnici $\dot{R}^2 = 8\pi\kappa c - kc^2$

(B50b)
$$\frac{R}{R^2} - \frac{8\pi k\rho}{3} = -\frac{kc}{R^2}$$

Opět s využitím Newtonova gravitačního zákona

$$\ddot{r} = \frac{-\kappa M}{r^2}$$

a vztahu $r(t) = r_0 R(t)$ lze obdržet

$$r_0\ddot{R} = \frac{-\kappa \frac{4}{3}\pi\rho r_0^3 R^3}{r_0^2 R^2} \Longrightarrow 2\frac{\ddot{R}}{R} = \frac{-\kappa \frac{8}{3}\pi\rho r_0^3 R^3}{r_0^3 R^3} = \frac{-8\pi\kappa\rho}{3}.$$

Odtud již plyne po dosazení do (B50b) za $\frac{-8\pi\kappa\rho}{3}$ tvar Friedmannovy rovnice (B50a)

$$\frac{\dot{R}^2}{R^2} + 2\frac{\ddot{R}}{R} = -\frac{kc^2}{R^2}$$

Jelikož Friedmannovy rovnice byly odvozovány za předpokladu působení jen přitažlivých gravitačních sil, tvary těchto rovnic by měly potvrdit, že rozpínání vesmíru deceleruje. Odečtením tvarů (B50a) a (B50b) lze skutečně obdržet

$$\ddot{R} = -\frac{4\pi\kappa\rho R}{3} \Longrightarrow \ddot{R} < 0.$$

Pokud ve vesmíru existuje jen "přitažlivá hmota", rozpínání vesmíru skutečně deceleruje.

10.3.7. Výsledky Friedmannových modelů v případě decelerace rychlosti expanze

a) Úprava Hubbleova zákona

- Hubbleův zákon v = H.r bude používán ve tvaru v = H.R (R je již dříve zavedený parametr expanze a a po jeho použití v Hubbleově zákonu bude pro rychlost expanze v kup galaxií platit $\dot{R} = v$)

- Odtud plyne
$$\dot{R} = HR \Rightarrow \frac{\dot{R}}{R} = H$$
. Vztah $\frac{\dot{R}}{R} = H$ bude označen

(B50c)
$$\frac{R}{R} = H$$

- Po provedení derivace podle času

$$\frac{\ddot{R}R - \dot{R}^2}{R^2} = 0 \Longrightarrow \frac{\ddot{R}}{R} = \frac{\dot{R}^2}{R^2} \Longrightarrow \frac{\ddot{R}}{R} = H^2$$

- Vzhledem k již odvozenému vztahu $\ddot{R} = -\frac{4\pi\kappa\rho R}{3} \Rightarrow \ddot{R} < 0$ lze zavést deceleraci – q a získat vztah

(B50d)
$$\frac{\ddot{R}}{R} = -qH^2$$

Při uvažování akcelerace q expanze vesmíru by bylo možné použít vztah $\frac{R}{R} = qH^2$.

b) Friedmannovy modely vesmíru

- R(t) je vzdálenost 3-rozměrného podprostoru od středu 4-rozměrného kontinua (od středu 4-rozměrné kosmické tekutiny), proto $\frac{k}{R^2}$ udává zakřivení (křivost) pro všechny s časem proměnné modely

- Pro *k*=1 jde o uzavřený, konečný, eliptický vesmír s konstantním pozitivním zakřivením $\frac{1}{R^2}$ (analogie dvojrozměrně pojatého povrchu koule)

- Pro k=0 jde o plochý, nekonečný, třírozměrný, euklidovský vesmír

- Pro k= -1 jde o nekonečný, otevřený, hyperbolický vesmír s negativním zakřivením $\frac{-1}{R^2}$ (analogie dvojrozměrně pojaté sedlové plochy)

- S využitím vztahů (B50c)
$$\frac{\dot{R}}{R} = H \text{ a (B50b)} \frac{\dot{R}^2}{R^2} - \frac{8\pi\kappa\rho}{3} = -\frac{kc^2}{R^2}$$
 lze získat
 $\frac{k}{R^2} = \frac{8\pi\kappa\rho}{3c^2} - \frac{H^2}{c^2}$, kde $\frac{8\pi\kappa}{3c^2} = 6.10^{-28}$

- Na vztazích 6.10⁻²⁸ ρ a $\frac{H^2}{c^2}$ závisí znaménko k a tím také model vesmíru

Odečtením Friedmannových rovnic (B50a) a (B50b) (odvozených za předpokladu decelerace) byl již dříve získán vztah

$$\ddot{R} = -\frac{4\pi\kappa\rho R}{3}$$

S použitím vztahu (B50d) lze pak obdržet

 $\frac{4\pi\kappa\rho}{3} = qH^2$. S použitím vztahu (B50c) $\frac{\dot{R}}{R} = H$ a dosazením do (B50b) $\frac{\dot{R}^2}{R^2} - \frac{8\pi\kappa\rho}{3} = -\frac{kc^2}{R^2}$ lze získat

 $H^2 - 2qH^2 = -\frac{kc^2}{R^2} \Rightarrow H^2(2q-1) = \frac{kc^2}{R^2}$. Odtud plyne závislost typu Friedmannova modelu na parametru decelerace q:

Je-li
$$q > \frac{1}{2}$$
, pak je křivost $\frac{k}{R^2} > 0$ a jde o eliptický vesmír
Je-li $q = \frac{1}{2}$, pak je křivost $\frac{k}{R^2} = 0$ a jde o euklidovský vesmír
Je-li $q < \frac{1}{2}$, pak je křivost $\frac{k}{R^2} < 0$ a jde o hyperbolický vesmír

c) Oscilující (eliptický) Friedmannův model v případě decelerace – q

- Nechť do Friedmannovy rovnice (B50b) $\frac{\dot{R}^2}{R^2} - \frac{8\pi\kappa\rho}{3} = -\frac{kc^2}{R^2}$ je zavedena průměrná hustota $\rho = konst. \frac{M}{R^3}$

- Po dosazení lze obdržet

$$\dot{R}^2 = \frac{konst}{R} - kc^2 > 0.$$

Odtud plyne vztah

$$\frac{konst}{R} > kc^2$$

- Pro eliptický vesmír s indexem křivosti k = 1 lze získat $\frac{konst}{R} > c^2$. Odtud je zřejmé, že parametr expanze R nemůže překročit kritickou hodnotu R_{krit} . Po dosažení R_{krit} by mělo nastat smršťování až k maximální hustotě ρ_{max} s možným dalším rozpínáním. Eliptický Friedmannův vesmír (často nazývaný Riemannovým vesmírem) je oscilujícím vesmírem s nekonečnou sérií cyklů expanze a kontrakce.

Druhá část Dodatku 7 (v rámci kapitoly 10.4.) Relativistická kosmologie s kosmologickou konstantou (populární výklad)

10.4.1. Význam inflační expanze

V současné době přijímaná vědecká teorie o původu a vývoji vesmíru vychází ze sledu tří na sebe navazujících vývojových kosmologických scénářů. První vývojový kosmologický scénář lze nazvat jako "Teorii všeho (Theory of everything - TOE)". Základním rysem tohoto scénáře je existence spojené obecné interakce a jeho trvání od počátku rozpínání vesmíru (počátek vesmíru je populárně nazýván "Velký třesk") až do času 10⁻⁴³ s. Zbývající dva vývojové kosmologické scénáře vycházejí ze střídání standardního a inflačního rozpínání vesmíru. Druhý scénář trval od časového okamžiku 10⁻⁴³ s do okamžiku 10⁻³⁴ s a nese název "standardně-inflační vesmír". Třetí scénář trvá od okamžiku 10⁻³⁴ s až do současnosti a nese název "poinflační standardní vesmír". Současnost lze zhruba vystihnout 15 miliardami let, které uplynuly od počátku rozpínání. Během **prvního scénáře TOE** nebyla symetrie vesmíru narušena. Během **druhého scénáře standardně-inflačního vesmíru** došlo k dvojímu narušení symetrie. Oddělila se gravitační interakce a byly vytvořeny podmínky pro oddělování silné interakce. Během **třetího scénáře poinflačního standardního vesmíru** se definitivně rozpadla původně obecná interakce na pět dílčích interakcí a vznikl současný obraz vesmíru.

Pro existenci inflační expanze jsou k dispozici také experimentální poznatky. V roce 1965 bylo pomocí antény, která měla původně sloužit v telekomunikačních družicích, nalezeno A.Penziasem a B.Wilsonem elektromagnetické záření se spektrem, které obvykle vysílají tmavé objekty o teplotě 2,72 K. Toto kosmické mikrovlnné reliktní záření jako pozůstatek velkého třesku v současnosti homogenně zaplňuje celý vesmír - má bez ohledu na směr, jímž byla natočena anténa, vždy stejnou teplotu, a k jeho zachycení jsou potřebné rádiové antény V konkrétních číslech - v každém m³ vesmíru je asi 400.10⁶ mikrovlnných fotonů. V době jejich vyslání byl vesmír mnohokrát menší s teplotou mnohokrát vyšší, hustota hmotnosti byla asi 10⁹ krát větší.

Stejná teplota ze všech směrů nahrává inflačnímu období vesmíru. Kdysi byl vesmír tak malý, že fotony mohly ustavit jednotnou teplotu. Poté se díky **hmotě s temnou energii** ukryté v prázdném prostoru nesmírným způsobem exponenciálně zvětšil (inflace skončila asi 10⁻³⁴ s po velkém třesku) – tím se oblasti kdysi provázané dostaly mimo vzájemný kontakt. Pak uplynulo asi 4.10¹⁷ s (Hubbleův čas přibližně kolem 13,6 miliard let jako převrácená hodnota současné hodnoty 70 km.s⁻¹.Mpc⁻¹ Hubbleovy konstanty) – dnes lze spatřit části vesmíru vzdálené od nás miliardy světelných let. Když se tyto oblasti po 14 miliardách let znovu shledávají, mají stejnou teplotu, protože před nástupem inflace byly ve vzájemném kontaktu.

Fyzikální mechanismus inflace může být dán jedním z velice plodných postupů kvantové fyziky – úvahami o vlastnostech prázdného prostoru. S vakuovým stavem prázdného prostoru je spojena jistá energie – v obecné teorii relativity by se tato energie vakua projevovala jako "záporný tlak" akcelerující kosmickou expanzi (v roce 1979, A.Guth navrhl, že vesmír s nenulovou hodnotou energie vakua mohl vést k modelu exponenciální expanze vesmíru během prvních 10^{-34} s - vzhledem k tomu, co dělá s penězi měnová inflace, říká se tomuto modelu inflační kosmologie). Inflace umožňuje spočítat charakter hustotních nehomogenit vesmíru (vzhledem ke kvantovému principu neurčitosti) – tyto fluktuace hustoty energie by měly zanechat otisk v mikrovlnném reliktním záření – ukázalo se, že teplota pozadí ve skutečnosti ukazuje malé odchylky od průměrné hodnoty (družice COBE – Cosmic Background Explorer – v r.1992 tyto fluktuace předpověděné inflací potvrdila).

Experimentální fakt svědčící ve prospěch "velkého třesku" a tří na sebe navazujících vývojových kosmologických scénářů poskytuje hélium. Koncem prvních minut po velkém třesku teplota poklesla a nejjednodušší jádra zůstávala stabilní (přestaly je rozbíjet protony s vysokými energiemi) – každý proton s volným elektronem vytvořil deuterium, deuterium se pak slučovalo na hélium. Při teplotě slučování deuteria na hélium je možné vypočítat množství neutronů a tím i množství hélia, které vzniklo v expandujícím velkém třesku. Výpočty udávají hodnotu 25% veškeré běžné hmoty – a to je skutečně v současnosti pozorováno. Dokonce i první generace hvězd získala hélium z velkého třesku. Velká energetická mezera mezi héliem a lithiem zapříčiňuje, že až nitra hvězd byla schopna syntetizovat uhlík, kyslík, železo, zlato. T.zn., že uhlík, kyslík, železo, zlato jsou dědictvím po předchozích generacích hvězd, kdežto hélium pochází přímo z velkého třesku.

Odtud plyne obraz: Zhruba před 14 miliardami let nastal velký třesk, inflace, chladnutí a zformování hélia, po rekombinaci jader a elektronů převážily atomy vodíku a zprůhlednění vesmíru, gravitace začala formovat zhuštěniny, zrodila se první generace hvězd a galaxie, jaderné reakce v nitrech hvězd pak vytvořily další prvky periodické tabulky.

10.4.2. Hustota vesmíru, Friedmannovy modely vesmíru, inflace a kosmologická konstanta

Bude-li Ω označen podíl průměrné hustoty vesmíru k hustotě kritické (která odděluje Friedmannův hyperbolický model věčně se rozpínajícího vesmíru od Friedmannova eliptického modelu s jeho opětovným kolapsem v daleké budoucnosti), pak lze analýzu hodnot Ω popsat následujícím způsobem:

a) Vesmír je téměř prázdný, jeho hmotu lze zanedbat. Pak se Ω blíží k 0 a po počátku expanze nebude jeho následné rozpínání příliš decelerováno. Kosmická expanze bude navždy pokračovat a její rychlost nebude ani decelerovat, ani akcelerovat. Takový vesmír by se řídil přesně Hubbleovým zákonem.

b) Vesmír s Ω menším než 1. Stále bude hovořeno jen o vlivu hmoty, nikoliv kosmologické konstanty v Einsteinově gravitační rovnici. Friedmannova řešení rovnic obecné teorie relativity ukazují, že gravitace bude rychlost expanze decelerovat. Přestože se rozpínání neustále zpomaluje, bude se takový vesmír rozpínat věčně ("hyperbolická" Lobačevského geometrie připomínající sedlo).

c) Vesmír s Ω větším než 1. Opět bude hovořeno jen o vlivu hmoty, nikoliv kosmologické konstanty v Einsteinově gravitační rovnici. Friedmannova řešení rovnic obecné teorie relativity ukazují, že gravitace bude rychlost expanze decelerovat. Rozpínání se bude neustále zpomalovat, zastaví se a bude nahrazeno smršťováním vesmíru. Eliptický Friedmannův vesmír (často nazývaný Riemannovým vesmírem – "eliptická" Reimannova geometrie připomínající povrch koule) je oscilujícím vesmírem s nekonečnou sérií cyklů expanze a kontrakce.

d) Určení kritické hustoty vesmíru – jednou z možností bylo stanovit průměrný počet galaxií v krychlovém megaparsecu a vynásobit ho hmotností každé galaxie. To vedlo k hodnotě $\Omega = 0,3 \pm 0,1$. Odtud by vyplývala platnost věčně expandujícího vesmíru s jeho neustálou decelerací rychlosti expanze. Zdá se, že bez kosmologické konstanty v Einsteinově gravitační rovnici varianty Ω =1 (plochý vesmír, rovnoběžky se neprotínají) nebo Ω >1 (eliptický vesmír se sférickou Riemannovou geometrií) jako Friedmannovy modely s "běžnou" hmotou nefungují.

Inflace však předpovídá hodnotu Ω =1. Ale nejlepší odhady z hmotnosti galaxií (F.Zwicky) udávají $\Omega = 0,3 \pm 0,1$. Součet hmotností všech zářících hvězd je dokonce jen $\Omega = 0,005$. Odtud se vyvozuje, že hmota s přitažlivou gravitací (gravitující hmota) v galaktických kupách a nejspíše v celém vesmíru je temná hmota, kterou nelze vidět.

Temnou hmotu však netvoří neutrony, protony a elektrony, z nichž se skládají např. lidské organismy (pak ovšem lidské organismy nejsou tvořeny z materiálu většiny vesmíru). Vhodnou formou temné hmoty by mohla být neutrina – ale ty mají velmi malou klidovou hmotnost. Temnou hmotou by mohlo být něco jako neutrino, ale s mnohem větší hmotností a neinteragující pomocí silné ani elektromagnetické síly. Proto byly tyto částice hypoteticky označeny jako Weakly Interacting Masive Particles – WIMP – a měly by být všude. Jsou navrhovány aparatury na zachycování WIMP.

Pro temnou gravitující hmotu, která umožňuje deceleraci rychlosti expanze, lze zavést označení koeficientu Ω pomocí indexu m, tj. Ω_m . Pro hmotu s temnou energií, která by umožnila akceleraci rychlosti expanze (jak se to již stalo v období inflační expanze), lze zavést označení koeficientu Ω pomocí indexu Λ , tj. Ω_{Λ} .

Stáří vesmíru jen s gravitující hmotou Ω_m by bylo menší než je stáří nejstarších hvězd v kulových hvězdokupách. Hranici dnešních pozorování představuje obraz tzv. Hubbleova hlubokého pole (Hubble Deep Field) z r.1995. Mnoho hodin pozorování jediného malého místa na severní obloze Hubbleovým kosmickým teleskopem shromáždilo dostatek světla, aby byl sestaven obrázek dosud nejhlubší minulosti vesmíru – téměř vše, co bylo zachyceno, jsou galaxie (galaxie v popředí překrývají další). Hubbleovo hluboké pole je vrcholem toho, co lze zobrazit dnešní technologií a poskytuje informace z doby 2 miliardy let po velkém třesku (při stáří vesmíru 14 miliard let, jsou tedy nejstarší zachycené fotony Hubbleovým kosmickým teleskopem staré 12 miliard let). Stáří vesmíru jen s gravitující hmotou Ω_m by ovšem bylo asi jen 10^{10} let.

Řešit tento problém poskytuje kosmologická konstanta Λ , kterou dodatečně zavedl Einstein do své gravitační rovnice (Friedmannovy modely byly odvozeny z Einsteinovy gravitační rovnice bez později zavedené kosmologické konstanty Λ). Kosmologická konstanta Λ v Einsteinově gravitační rovnici v současnosti vyjadřuje vnitřní expanzní charakter samotného prostoročasu (spojený s hmotou s temnou energií Ω_{Λ}), jenž je protiváhou gravitační přitažlivosti dosud známé i neznámé gravitující hmoty Ω_m (převládá-li gravitační přitažlivost, rychlost expanze vesmíru deceleruje, převládá-li efekt způsobený kosmologickou konstantou Λ , rychlost expanze vesmíru akceleruje). Einstein sice kosmologickou konstantu v r.1931 ze své gravitační rovnice vypustil (E.P.Hubble a A.Friedmann ukázali, že se vesmír rozpíná, a kosmologická konstanta Λ byla původně zavedena k zajištění statičnosti vesmíru – jako kompenzace gravitační přitažlivosti). V současnosti se její význam s objevem akcelerace rychlosti expanze vesmíru obnovil

Hmotnost Ω_{Λ} příslušející hmotě s temnou energií by mohla společně dát s hmotností Ω_m hledané a inflací předpověděné $\Omega=1$. Pak by vesmíru dominovaly vlastnosti prázdného prostoru, v němž je "ukryta" hmota s temnou energií a s hmotností Ω_{Λ} .

10.4.3. Pracovní verze dnešního obrazu vesmíru

Teprve supernovy typu Ia s velkým rudým posuvem $z = \Delta \lambda / \lambda$ (tj. supernovy velmi vzdálené) umožnily jako vynikající zařízení na měření obrovských vesmírných vzdáleností zjistit kolem r.2001 dvěma týmům amerických vědců, že nežijeme ani ve statickém vesmíru (jak po tom prahl Einstein, aby mohl vyloučit ze své gravitační rovnice kosmologickou konstantu Λ), ani ve vesmíru rozpínajícím se způsobem, který stanovili E.P.Hubble a A.Friedmann (rychlost expanze deceleruje) – expanze vesmíru naopak akceleruje. Akcelerace je připisována hmotě s temnou energií a s hmotností Ω_{Λ} , která se projevuje navenek působícím tlakem (v nejjednodušším případě by "temnou energií" mohla být kosmologická konstanta Λ). "Hmota s temnou energií" je tou složkou v bilanci hmoty-energie, která dává do souladu stáří vesmírných objektů se současnou rychlostí rozpínání vesmíru.

Vesmír ovládaný "temnou energií" ukazuje na současné hluboké neznalosti mikroskopických vlastností prázdného prostoru a chování samotného vesmíru. Žádné fyzikální teorie a laboratorní experimenty nepředpovídají existenci takového množství hmoty s temnou energií a s hmotností Ω_{Λ} (tj. není známa cesta, jak detekovat energii a tlak samotného prázdného prostoru pomocí laboratorních experimentů), jak to ukazují astronomická pozorování. Velká část astronomie aplikuje známé fyzikální zákony na astronomické jevy, ale některá astronomická pozorování odhalují zcela fundamentální vlastnosti světa – nejzákladnější pravidla chování hmoty a energie, která nelze otestovat na Zemi pomocí řízeného experimentu.

Pracovní verze dnešního obrazu vesmíru by mohla být popsána ve světle výše uvedených zjištění následujícím způsobem:

a) Neutrina, protony, neutrony, elektrony, další známé elementární částice, fyzikální pole, prvky a jejich sloučeniny vytvářejí v současnosti (asi 14 miliard let po velkém třesku) známou a "viditelnou část" gravitující hmoty označenou Ω_{m1} ($\Omega_{m1} = 0.005$)

b) Weakly Interacting Masive Particles (WIMPs) vytvářejí v současnosti (asi 14 miliard let po velkém třesku) dosud neznámou a "neviditelnou část" gravitující hmoty označenou Ω_{m2} ($\Omega_{m2} = 0,3$)

c) Hmota s temnou energii ukrytá v prázdném prostoru (ve vakuu) charakterizuje vnitřní "negravitující" expanzní charakter samotného prostoročasu a vytváří v současnosti (asi 14 miliard let po velkém třesku) hmotu označenou Ω_{Λ} ($\Omega_{\Lambda} = 0.6 - 0.7$)

d) Po velkém třesku trvajícím 10^{-43} s (první vývojový kosmologický scénář "TOE") prošel vesmír inflační fází trvající 10^{-35} s - 10^{-34} s (během druhého vývojového kosmologického scénáře "standardně-inflačního vesmíru" Ω_{Λ} převažovala nad $\Omega_{\rm m}$ - $\Omega_{\rm m}$ se ještě nevytvořila a rychlost expanze vesmíru "inflačně" akcelerovala)

e) Během třetího vývojového kosmologického scénáře "poinflačního standardního vesmíru" v rámci první etapy (která mohla trvat např. 10 miliard let) Ω_m převažovala nad Ω_Λ (rychlost expanze vesmíru decelerovala)

f) Během třetího vývojového kosmologického scénáře "poinflačního standardního vesmíru" v rámci druhé etapy (která mohla trvat např. 4 miliardy let a zřejmě na základě astronomických pozorování trvá dosud) opět začala Ω_{Λ} převažovat nad Ω_m (rychlost expanze vesmíru v současnosti akceleruje).

STRUKTURA FYZIKY

Fyzikální objekt – členění 19, 37

- podstata 20-23, 37

– vývoj 23-27, 37

Členění fyzikálních objektů – členění podle počtu 19, 37, 38

– členění podle velikosti 19, 38

- makrosystém jako statisticky pojatý objekt 19, 37, 38, 42-43, 46-48, 72, 82, 88
- mikroobjekt, makroobjekt a megaobjekt jako nestatisticky pojaté objekty 19, 37

Podstata fyzikálního objektu – struktura fyzikálního objektu a její prvky 20-23

- stavební prvky (stavební částice) 20-23

– nositel silového působení (výměnná částice) 20-23

- látková částice, polní částice 20-23, 119-120, 120-123, 180-183, 183-186
- interakce látky a pole 20-23, 29, 119-120, 120-123, 175-177, 180-183, 183-186
- fermion, boson 20-23, 46-48, 82-84, 84-86, 90-91, 138-140

- struktury fyzikálního objektu jako interakce s malým dosahem 20-23

- fundamentální silná interakce 20-23
- zbytková silná interakce 20-23, 152-155, 186-188,
- slabá interakce 20-23, 188-191
- struktury fyzikálního objektu jako interakce s nekonečným dosahem 20-23
- elektromagnetická interakce 20-23,119-120, 120-122, 175-177, 180-183, 183-186
- gravitační interakce 20-23, 36, 97-98, 98-100, 157-160

Fermion – kvark (tři generace kvarků) 20-23

– lepton (tři generace leptonů) 20-23

- fermionový hadron (baryon) 20-23
- Boson gluon 20-23
 - foton 20-23
 - intermediální boson 20-23
 - bosonový hadron (meson) 20-23

Vývoj fyzikálního objektu - unitární interakce 23-27

- grandunifikační a gravitační interakce 23-27
- gravitační, silná a elektroslabá interakce 23-27
- pět dílčích interakcí v současnosti 23-27, 37

Vývojový scénář – TOE (Theory of everything) 23-27

- standardně inflační vesmír 23-27
- poinflační standardní vesmír 23-27
- Vlastnosti fyzikálního objektu stav 27-28, 37, 38

– změna stavu jako pohyb fyzikálního objektu 27-28, 37, 38

Stav fyzikálního objektu - určen souborem stavových parametrů vnitřních a vnějších 27-28, 37, 38

- termodynamický stav 27-28, 37, 38, 40-42
- pohybový stav 27-28, 37, 94
- rovnovážný stav 27-28, 37, 40-42
- nerovnovážný stav 27-28, 37, 40-42

Termodynamický stav – určen souborem všech vnitřních a skupiny vnějších stavových parametrů 27-28, 40-42 Pohybový stav – určen souborem vnějších parametrů vztažených k pohybu objektu jako celku 27-28, 37 Rovnovážný stav – určující stavové parametry nejsou funkcemi času 27-28, 37

Rovnovážný stav makrosystému – stav termodynamické rovnováhy 27-28, 40-42 Rovnovážný pohybový stav fyzikálního objektu – statický stav 27-28, 37, 125-127

– stacionární stav 27-28, 37, 125-127, 136-138

Nerovnovážný stav – určující stavové parametry jsou funkcemi času 27-28, 37

Nerovnovážný stav makrosystému – stav termodynamické nerovnováhy 27-28, 37, 40-42

Nerovnovážný pohybový stav fyzikálního objektu – kvazistacionární stav 27-28, 37, 10-12

– nestacionární stav 27-28, 37, 125-127, 136-138

 $\frac{1}{2} = \frac{1}{2} = \frac{1}$

Změna stavu fyzikálního objektu – pohyb fyzikálního objektu 27-28, 37, 40-42 Změna termodynamického stavu – statistický (termodynamický, neuspořádaný) pohyb 27-28, 37, 40-42 Změna pohybového stavu – nestatistický (uspořádaný) pohyb 27-28, 37 Změna stavu fyzikálního objektu – konkrétní forma pohybu fyzikálního objektu 28-29, 37 Změna stavu makrosystému - konkrétní formy pohybu makrosystémů 28-29, 37 Změna pohybového stavu fyzikálního objektu – konkrétní formy pohybu mikroobjektů 28-29, 37 - konkrétní formy pohybu makroobjektů 28-29, 37 - konkrétní formy pohybu megaobjektů 28-29, 37 Fyzika - předmět zkoumání 29, 37 - metody zkoumání 29, 37 - model struktury fyziky 37 Metody zkoumání fyziky – statistický přístup (statistická fyzika) 29-30, 37, 38-40 – nestatistický přístup (nestatistická fyzika) 29-30, 37, 38-40 - klasická dimenze 30-31, 37 - kvantová dimenze 30-31, 37 - relativistická dimenze 30-31, 37 Klasická dimenze – klasická statistická fyzika 30, 31-32, 37 - klasická nestatistická fyzika 30, 32-34, 37 Kvantová dimenze - kvantová statistická fyzika 30, 31-32, 37 – kvantová nestatistická fyzika 30, 34-36, 387 Relativistická dimenze – relativistická statistická fyzika 30, 31-32, 37 - relativistická nestatistická fyzika 30, 36, 37 Statistická fyzika – kvaziklasický statistický přístup 32, 37 – klasický a kvantový statistický soubor 31-32, 48-50 - klasická a kvantová rozdělovací funkce 31-32, 48-50 - klasická a kvantová souborová střední hodnota (statistický analogon) 31-32, 48-50 - zahrnutí relativistické dimenze v rámci kvaziklasického statistického přístupu 31-32, 51 Kvantové statistické analogony – střední počty nerozlišitelných a rozlišitelných částic 31-32, 73, 74, 75 Nestatistická fyzika – dynamická pohybová rovnice jako popis příčin změny pohybového stavu 29-30, 96-98,107 kinematický pohybový zákon jako popis pohybového stavu 29-30, 96-98, 132-134 – klasická pohybová rovnice a klasický pohybový zákon 32-34, 96-98 - kvantová pohybová rovnice a kvantový pohybový zákon 34-36, 138-140 - relativistická pohybová rovnice a relativistický pohybový zákon 36, 160-164 STATISTICKÁ FYZIKA Statistický fyzikální objekt - termický a homogenní makrosystém 38-42, 45, 55, 56 Termodynamický stav - zkoumání stavu termodynamické rovnováhy 38-42, 45 Změna termodynamického stavu - zkoumání vratného termodynamického procesu 38-42, 43, 45 Stav termodynamické rovnováhy – popis energií a počtem částic 38-42, 43, 44, 45, 62, 72, 77 Vratný termodynamický proces – popis změnou energie a změnou počtu částic 38-42, 43, 44, 45, 72 Statistický soubor - soubor identických a nezávislých makrosystémů 42-43, 45 - mikrokanonický, kanonický a grandkanonický statistický soubor 42-43, 45, 72, 77 Makrosystém volných částic 46, 50 Maxwellův-Boltzmannův plyn, Fermiho plyn, Boseho plyn 46-48, 50 Degenerovaný a nedegenerovaný Fermiho a Boseho plyn 46-48, 50, 157 Mawellův-Boltzmannův plyn a nedegenerovaný Fermiho a Boseho plyn 46-48, 50 Klasický plyn, kvantový plyn 48-49, 50 Rozdělovací funkce – klasická (fázová hustota, hodnoty klasické rozdělovací funkce) 48-49, 50 - kvantová (matice hustoty, hodnoty kvantové rozdělovací funkce) 48-49, 50 - kvaziklasická (hodnoty kvaziklasické rozdělovací funkce) 59-60, 61 Souborová střední hodnota – klasická 48-49, 50 - kvantová 48-49, 50 Kvaziklasický statistický přístup – relativistická dimenze statistického přístupu 51, 61 - kvantování fázového prostoru 58, 61, 77, 79, 82-84, 84-86 - váhový faktor, Boltzmannova rovnice 51-58, 61 - výpočet počtu stavů termodynamické rovnováhy 58-59, 61, 77, 82-84, 84-88 Termodynamické postuláty 43-45, 62-64, 71 Termodynamické funkce – souborové střední hodnoty (statistické analogony) 62, 71 – statistický smysl termodynamických zákonů 62-66, 71 - členění na stavové parametry, stavové rovnice, věty termodynamické 62, 71 Termodynamické potenciály – vnitřní energie, volná energie, entalpie, Gibbsův potenciál 66-68, 71, 77-79 - chemický potenciál, grandkanonický potenciál 68-70, 71, 72-75 Grandkanonický statistický soubor – kvantová rozdělovací funkce, velký stavový součet 72-73, 81 - kvantové statistické analogony 72-73, 81

– metodika č.1 77, 81, 82-84, 84-86

Statistický analogon - pro střední počet fermionů (Fermiho-Diracovo rozdělení) 31-32, 73-74, 81

- pro střední počet bosonů (Boseho-Einsteinovo rozdělení) 31-32, 74-75, 81

- pro střední počet rozlišitelných částic (Maxwellovo-Boltzmannovo rozdělení) 31-32, 75, 81

- kvaziklasické statistické analogony pro střední počet částic 77, 81

Kanonický statistický soubor - kvantová rozdělovací funkce, malý stavový součet 77-79, 81

- malý stavový součet jedné volné částice 79-80, 81
- kvantové statistické analogony 77-79, 81
- kvaziklasická úprava malého stavového součtu jedné volné částice 79-80, 81
- metodika č.2 80, 81, 86-87

Aplikace metodiky č.1 – záření černého tělesa 82-84, 88

- kmity krystalové mříže 84-86, 88
- Aplikace metodiky č.2 statistický smysl stavové rovnice ideálního plynu 86-87, 88

KLASICKÁ FYZIKA

Klasický objekt - hmotný bod, částice 32-34, 94-96, 101, 204, 205-207

- těleso 32-34, 94-96, 204, 205-207
 - částice kontinua 32-34, 109-111, 204, 205-207
 - oscilátor 101-106, 204, 205-207
 - soustava hmotných bodů, částic kontinua nebo těles 94-96, 109-111, 205-207
 - soustava uspořádaně kmitajících oscilátorů 106-109, 204, 205-207
 - uspořádaný tok částic 32-34, 166-167, 205-207

Klasická pohybová rovnice – aplikace D'Alembertova principu, Hamiltonova principu 204, 205-206

- Hamiltonova-Jacobiho rovnice 204Lagrangeovy rovnice 96-98, 117-123, 204, 205-206
- Hamiltonovy kanonické rovnice 96-98, 204, 205-206
- Fulerovy dynamické rovnice 204, 205-206
- 2. Newtonův zákon 96-98, 160, 204, 205-206
- -2. Newtonuv Zakon 90-98, 100, 204, 203-200
- obecná pohybová rovnice kontinua 109-117, 204, 205-206
- pro modely kontinua 109-113, 204, 205-206
- integrály pohybových rovnic jako zákony zachování 98-101, 127-128
- nehomogenní vlnová rovnice 127-128
- homogenní vlnová rovnice 106-108, 128-131
 pro monochromatické volné elektromagnetické pole 117-131, 164-167
- = pro monochi officiate ke volte elektromagneticke pole

Klasická rovnice rovnováhy – aplikace principu virtuálních prací 204, 205-206

– obecná rovnice rovnováhy pro kontinuum 113-117, 204, 205-206

Klasický pohybový zákon – pohybový zákon např. v kvadraturách 204, 205-206

- trajektorie v konfiguračním prostoru 204, 205-206
- trajektorie ve fázovém prostoru 204, 205-206
- Eulerovy kinematické rovnice 204, 205-206
- polohový vektor jako funkce času 96-98, 120-123, 183-186, 204, 205-206
- vlnová funkce 101-106, 106-108, 128-131

Klasický formalismus - d'alembertovský formalismus 113-117, 204, 205-206

- lagrangeovský formalismus 96-98, 119-120, 120-121, 122-123, 204, 205-206
 - hamiltonovský formalismus 96-98, 204, 205-206
 - newtonovský formalismus 96-98, 119-120, 120-121, 204, 205-206
 - Maxwellovy rovnice pro elektromagnetické pole 123-128

KVANTOVÁ FYZIKA

Kvantový objekt – objekt odrážející vlnově korpuskulární dualismus 30, 132-134, 207, 208, 209-211

Vlnově korpuskulární dualismus – látkové částice (částice s distribucí výskytu) 34, 132-134, 207, 208, 209-211 – fotonu (vlnový balík) 34-35, 171-174

– soustavy částic (překrývání pravděpodobnostních oblaků) 32-35, 138-140

Pravděpodobnostní oblak – distribuce výskytu u látkové částice 32-34, 132-136, 207, 208, 209-211

– distribuce vlnových čísel (Gaussián) u fotonu 32-35, 171-174, 209-211

Tvar pravděpodobnostního oblaku – stacionární stav kvantového objektu 32-35, 131-138, 207-211

– určen konkrétním souborem kvantových čísel 134-141,143-152,153,207-211

- určen konkrétní jednotkovou hodnotou obsazovacího čísla 167-171
- Změna tvaru pravděpodobnostního oblaku nestacionární stavy kvantového objektu 32-35, 136-138, 207-211
 - změna souboru kvantových čísel 136-138, 207-211
 - přesun jednotkové hodnoty obsazovacího čísla 167-171

Překrývání pravděpodobnostních oblaků - stacionární stav soustavy kvantových objektů 32-35, 207-211 - nerozlišitelnost látkových částic 32-35, 138-141, 207-211 – nerozlišitelnost fotonů 32-35 Změna v překrývání pravděpodobnostních oblaků – nestacionární stavy soustavy kvantových objektů 32-35 – změna v souborech kvantových čísel 32-35, 148-152 - změna v hodnotách obsazovacích čísel 32-35, 167-171 Operátory - reprezentující fyzikální veličiny 32-35, 134-136, 207-211 – nereprezentující fyzikální veličiny 136-138, 207-211 - komutátor operátorů 134-136, 142 – přehled některých operátorů 134-136 Komutátor operátorů – aplikace dvou operátorů minus aplikace operátorů v opačném pořadí 134-136, 142, 150 Operátor energie (Hamiltonův operátor) 134-136, 141-142, 152-155, 164-171, 207-211 časové změny dynamické veličiny (popis "úplné časové derivace" operátoru) 32-36 časové změny stavu (popis časového vývoje kvantového stavu) 136-138 transpozice částic (popis změny stavu při záměně částic) 138-140 Operátor - primární kvantování 32-35, 134-138, 207-211 Operátory primárního kvantování – operátory v Schrödingerově reperezentaci 32-35 - operátory v Heisenbergově reprezentaci 32-35 - operátory v Diracově reprezentaci 32-35 - Hamiltonův operátor v příslušné reprezentaci 134-136, 141-142, 152-155 Operátor - sekundární kvantování 32-35, 168-170, 207-211 Operátory sekundárního kvantování - operátory v reprezentaci obsazovacích čísel 32-35, 168-170 - operátory kreace a anihilace, operátory počtu fotonů 32-35, 168-170 - operátor elektromagnetického pole 32-35, 168-171 - Hamiltonův operátor v příslušné reprezentaci 32-35, 168-171 Operátor - vlastní rovnice 32-35, 134-136, 142-143, 152-155, 207-211 Vlastní rovnice operátoru - systém vlastních hodnot 32-35, 134-136, 142-143, 152-155, 207-211 - systém vlastních funkcí 32-35, 134-136, 143-148, 207-211 Vlastní hodnoty operátoru - hodnoty fyzikální veličiny reprezentované operátorem 32-35, 134-136, 207-211 - degenerace vlastní hodnoty 51-52, 52-54, 82-84, 150 Vlastní funkce operátoru - reprezentuje stacionární stav kvantového objektu 32-35, 134-136, 143-148, 207-211 Vlnová funkce časové změny stavu – reprezentuje nestacionární stavy 32-35, 134-136, 136-138, 207-211 – superpozice funkcí ze systému vlastních funkcí 134-136 Vlastní funkce operátoru transpozice - symetrické funkce bosonů 138-140 - antisymetrické funkce fermionů 138-140 Vlastní rovnice Hamiltonova operátoru – kvantová nerelativistická rovnice rovnováhy 136-138 - stacionární Schrödingerova rovnice 136-138,142-143,152-155,207-211 - v reprezentaci obsazovacích čísel 168-171 Stacionární stav soustavy - např. elektronů (popis stacionární Schrödingerovou rovnicí) 32-35, 152-157 - fotonů (popis hodnotami obsazovacích čísel) 168-171 Aplikace operátoru časové změny --nalezení vlnové funkce reprezentující změnu stavu s časem 136-138,207-211 - kvantová nerelativistická pohybová rovnice 32-36, 136-138 Aplikace operátoru časové změny dynamické veličiny – pohybové Hamiltonovy kvantové rovnice 32-36 – pohybové Newtonovy kvantové rovnice 32-36 Nestacionární stavy soustavy elektronů - popis nestacionární Schrödingerovou rovnicí 32-35, 136-138, 207-211 Nestacionární stavy soustavy fotonů - popis změnami v hodnotách obsazovacích čísel 32-35, 168-171 **RELATIVISTICKÁ FYZIKA** Relativistický objekt - gravitační pole a jeho vliv na geometrii prostoročasu 211-214 – látkové částice a tělesa, kontinuum a jejich vliv na geometrii prostoročasu 211-214 - elektromagnetické pole a jeho vliv na geometrii prostoročasu 211-214 Geometrie prostoročasu - Euklidova metrika 155-160, 211-214 - Minkowského metrika 155-160, 211-214 - Friedmannova-Robertsonova-Walkerova-Lemaîtrova (FRWL) metrika 28, 36 – Robertsonova metrika 255-268 Model prostoročasu – absolutní prostor a absolutní čas a Galileův princip relativity 155-160, 211-214 Minkowského plochý prostoročas a speciální princip relativity 155-160, 211-214 - Riemannův zakřivený prostor a obecný princip relativity 155-160, 211-214

– závislost prostoru a času na rozložení a pohybu relativistických objektů 30, 36
 Relativistický stav gravitačního pole a geometrie prostoročasu – popis složkami metrického tenzoru 36
 Relativistický stav látkových a polních objektů – popis složkami tenzoru energie a hybnosti 36

Časový vývoj stavu gravitačního pole s dalšími objekty – popis Einsteinovou gravitační rovnicí 36, 211-214 Časový vývoj homogenního a izotropního vesmíru – expandující podtřída modelů FRWL 26-27, 28 Model vesmíru – uzavřený vesmír jako druh modelu FRWL 28

- Einsteinův-de Sitterův vesmír jako druh modelu FRWL 28
- otevřený vesmír jako druh modelu FRWL 28
- Friedmannovy modely vesmíru 255-268

Časový vývoj stavu diskrétních galaktických struktur – vývoj malých poruch metriky prostoročasu 28 Relativistická pohybová rovnice – rovnice geodetiky látkové částice v prostoročase 36

- rovnice světelné geodetiky fotonu v prostoročase 36
- invariance vůči Lorentzově transformaci 155-160, 211-214
- invariance vůči transformaci neinerciálních vztažných soustav 211-214

Nerelativistická pohybová rovnice – invariance vůči Galileově transformaci 155-160, 211-214 Relativistická dynamika – invariance vůči transformaci neinerciálních soustav, princip ekvivalence 211-214

– Einsteinův vztah pro energii, klidová hmotnost a hmotnost za pohybu 155-160 Relativistická kinematika – kontrakce délek, dilatace času 211-214

nematika – kontrakce delek, dilatace casu 211-214

– Einsteinův vztah pro skládání rychlostí 211-214

Časový vývoj homogenního a izotropního vesmíru – expandující podtřída modelů FRWL 47-48, 49

Časový vývoj stavu diskrétních galaktických struktur – vývoj malých poruch metriky prostoročasu 49 Časový vývoj stavu gravitačního pole s dalšími objekty – popis Einsteinovou gravitační rovnicí 57, 229-232 Einsteinova gravitační rovnice 185-194, 229-232

Friedmannovy rovnice 185-194, 195-198

Hmota vesmíru - viditelná gravitující hmota (index m1) 255-268

- temná gravitující hmota (index m2) 255-268
- hmota s temnou energií ("antigravitující" hmota index Λ) 255-268
- podíl "Ω" jako podíl průměrné a kritické hustoty vesmíru 255-268
- $-\text{ podíly ,,}\Omega_{m}$ ",, Ω_{m1} ",, Ω_{m2} ",, Ω_{Λ} " 255-268
- průměrná hustota vesmíru, kritická hustota vesmíru 255-268

Hubbleův zákon a jeho tvary 255-268

- Kosmologická konstanta A 36, 212, 213, 255-268
- Obecná teorie relativity a kosmologie 255, 256
- Obecná teorie relativity a kvantová mechanika teorie strun, twistorová teorie 212, 213

Rychlost expanze vesmíru – akcelerace rychlosti expanze 255-268

- decelerace rychlosti expanze 255-268
- de Sitterova expanze 255-268
- Friedmannova expanze 255-268

Význam standardně inflačního vesmíru jako význam inflační expanze 255-268

RADIOLOGICKÁ FYZIKA

Struktura radiologie a její fyzikální složka 16-19 Ionizace prostředí – prostředky a způsoby ionizace 215-217 Ionizující a jaderné záření 188-194, 215-217 Stavba atomového jádra 186-188 Stavba atomového obalu 141-152 Elektromagnetické spektrum 177-180

Korpuskulární záření 134, 215-217

Přehled ionizujícího a neionizujícího záření a vlnění používaného v radiologii 216-217

- Přirozená radioaktivita 188-191
- Umělá radioaktivita 188-191
- Rozpadový zákon 191-193
- Klasický elektron v elektrickém poli 120-123
- Relativistický elektron v elektrickém poli 183-186
- Elektron v magnetickém poli 120-123

Pozorování a urychlování nabitých částic ionizujícího záření 199-200

- Lineární urychlovače 120-122, 219
- Kruhové urychlovače 122-123, 218
- Přehled zdrojů ionizujícího záření 218-220
- Absorpční zákon 193-194
- Fotoelektrický a obrácený fotoelektrický jev 180-183
- Comptonův jev 180-183
- Anihilační a obrácený anihilační jev 180-183
- Jaderné reakce (transmutace prvků) 200-203, 220-221

Přehled interakcí ionizujícího záření s prostředím 220-223 Aktivita jaderného záření 194-198, 223 Intenzita jaderného záření 194-198, 223 Specifická ionizace 194-198, 223 Pohlcená dávka jaderného záření 194-198, 223 Ekvivalentní dávka jaderného záření 194-198, 223 Účinný průřez jaderné reakce 194-198, 223 Dolet ionizující částice 194-198, 223 Přehled veličin a jednotek ionizujícího záření 223 Voltampérová charakteristika ionizační komůrky 198-199 Další typy počítačů jaderných částic 198-199 Principy detekce a dozimetrie ionizujícího záření 223-225 Přehled zařízení pro detekci a dozimetrii ionizujícího záření 223-225 Radiodiagnostika - fyzikální popis 225-226 Radioterapie – fyzikální popis 226-227 Nukleární medicína - fyzikální popis 228 Rentgen - fyzikální popis 228-229 Termografie - fyzikální popis 229-230 Nukleární magnetická rezonance - fyzikální popis 230-231 Sonografie - fyzikální popis 108-109, 231-232 Magnetická rezonance – fyzikální podstata 232-233 Magnetická rezonance - fyzikální základy technického využití 233-234

Bibliography (the monographs)

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Analytical-Synthetic Modelling of Cognitive Structures (volume 1: New structural methods and their application).* Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, London 2001 ISBN 80-85456-77-X

Tarabek,P., Zaskodny,P.: Analytical-Synthetic Modelling of Cognitive Structures (volume 2: Didactic communication and educational sciences). Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, New York 2002 ISBN 80-85456-77-X

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Structure, Formation and Design of Textbook (volume* 1: *Theoretical basis)*. Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, London 2003 ISBN 80-85456-09-5

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Structure, Formation and Design of Textbook (volume 2: Theory and practice).* Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, London 2004 ISBN 80-85456-09-5

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Modern Science and Textbook Creation (volume 1: Projection of scientific systems)*. Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, Frankfurt a.M. 2005 ISBN 80-85456-12-3

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Modern Science and Textbook Creation (volume 2: Modern tendencies in textbook creation).* Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, Frankfurt a.M. 2006 ISBN 80-85456-12-3

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Educational and Didactic Communication* 2007 Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, Frankfurt a.M. 2008 Vol.1-Progression ISBN 978-80-89160-46-4

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Educational and Didactic Communication* 2007 Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, Frankfurt a.M. 2008 Vol.1-Theory, Vol 2-Methods, Vol.3-Applications ISBN 978-80-89160-56-3

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Educational and Didactic Communication* 2008 Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, Frankfurt a.M. 2009 ISBN 978-80-89160-62-4

Tarabek, P., Zaskodny, P.: *Educational and Didactic Communication* 2009 Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, 2010 ISBN 978-80-89160-69-3 Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Educational and Didactic Communication* 2010 Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, 2011 ISBN 978-80-87160-78-5

Tarabek,P., Zaskodny,P.: *Educational and Didactic Communication* 2011 Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, 2012 ISBN 978-80-87160-93-8

Zaskodny,P.: *Educational and Didactic Communication* 2012, Vol.1: *Educational Data Mining and Its Application* Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, 2013, www.csrggroup.org ISBN 978-80-89160-97-6

Zaskodny,P. etal.: *Educational and Didactic Communication* 2013, Vol.1: *Application of Quantitative Research Degrees* Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, 2014, www.csrggroup.org ISBN 978-80-8166-000-9

Zaskodny,P. etal.: *Educational and Didactic Communication* 2014, Vol.1: *Algorithms as Significant Result of Data Mining Approach* Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, 2015, www.csrggroup.org ISBN 978-80-8166-004-7

Zaskodny,P.: *Educational and Didactic Communication* 2015, Vol.1: *Curriculum Research and Development in Physics Education* Educational Publisher Didaktis Ltd., Bratislava, 2015, www.csrggroup.org ISBN 978-80-8166-014-6

Bibliography (the books)

Záškodný,P.: Survey of Principles of Theoretical Physics (with Application to Radiology) (in Czech). Didaktis, Bratislava, Slovak Republic 2005 ISBN 80-89160-25-5

Záškodný,P.: Survey of Principles of Theoretical Physics (with Application to Radiology) (in English). Avenira, Switzerland, Algoritmus, Ostrava, Czech Republic 2006 (in English) ISBN 80-902491-9-1

Záškodný,P.: Curricular Process in Physics (in Czech). Avenira, Switzerland, Curriculum, Prague, Czech Republic 2009 (in Czech, first edition) ISBN 978-80-902491-0-3

Záškodný,P.: Curricular Process in Physics (in Czech). Avenira, Switzerland, Curriculum, Prague, Czech Republic 2015 (in Czech, in English, second edition) www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-04-0 Záškodný,P. et al.: Fundamentals of Statistics (in Czech). Curriculum, Prague, Czech Republic 2016, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-12-5

Pavlát, V., Záškodný, P.: From Financial Derivatives to Option Hedging. Curriculum, Prague, Czech Republic 2016, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-11-8

Záškodný,P.: The Principles of Probability and Statistics (monolingual and bilingual version) Curriculum, Prague, Czech Republic 2017, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-15-6 (bilingual Czech-English version) ISBN 978-80-87894-14-9 (monolingual English version)

Záškodný,P., Procházka,P.: Survey of Principles of Theoretical Physics (with Application to Radiology) (in English). Second Edition. Curriculum: Prague, Czech Republic 2014, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-02-6

Záškodný,P., Záškodná,H.: Metodologie vědeckého výzkumu. Curriculum: Prague, Czech Republic 2016, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-08-8

Záškodný,P.: Curriculum Research and Development in Physics Education (in English). Curriculum, Prague: Czech Republic 2015, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-09-5

Záškodný, P., Patočka, J., Líbal, L., Záškodná, H.: Selected Chapters of Science History. Curriculum: Prague, Czech Republic 2017, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN978-80-87894-16-5

CONSTANTS

Avogadro's constant	NA
Speed of light in a vacuum	С
Permittivity of vacuum	\mathcal{E}_0
Permeability of vacuum	μ_0
Electron rest mass	m_0
Proton rest mass	m_0
Planck constant	h
Planck constant	ħ
Proton charge	е
Boltzmann constant	k
Gravitational constant	K
Bohr radius	а
Gas constant	R

IMPORTANT PHYSICAL CONSTANTS

$6.0221.10^{23}$	mol ⁻¹
$2.9979.10^8$	m.s ⁻¹
8.8542.10 ⁻¹²	F.m ⁻¹
1.2566.10-6	$H.m^{-1}$
9.1095.10 ⁻³¹	kg
1.6726.10 ⁻²⁷	kg
6.6262.10 ⁻³⁴	J.s
1.0546.10 ⁻³⁴	J.s
1.6022.10 ⁻¹⁹	С
1.3807.10 ⁻²³	J.K ⁻¹
6.6720.10 ⁻¹¹	$N.m^2.kg^{-2}$
5.2918.10 ⁻¹¹	m
8.3145	$J.K^{-1}.mol^{-1}$

IMPORTANT CONVERSION FACTORS

1 atomic mass unit	m_u
1 electron volt	eV
1 joule	J
1 angstrom	Å

$1.66.10^{-27} \\ 1.60.10^{-19} \\ 6.24.10^{18}$	kg J eV
10-10	m

Author

Assoc.Prof. RNDr. Přemysl Záškodný, Ph.D.

Assoc.Prof. RNDr. Přemysl Záškodný,Ph.D., graduated from the Mathematical-Physics Faculty of Charles University, Ph.D. in the physics education, and docent (assoc. professor) of physics education. As a university teacher, he is affiliated to the University of South Bohemia in České Budějovice and to the University of Finance and Administration in Prague.

He is active in scientific work in cooperation with the International Institute of Informatics and Systemics in U.S.A., and the Curriculum Studies Research Group in Slovakia. In his scientific work, aimed at science and statistics education, he deals with structuring and modelling physics and statistics knowledge and systems of knowledge and also data mining and curricular process.

In addition to support from his faculty and university, the projects granted to the author by the Avenira Foundation in Switzerland and the University of South Bohemia in Czech Republic has brought a considerable contribution to the results achieved.

The conception of the last books "Survey of Principles of Theoretical Physics", "Curricular Process in Physics", "Fundamentals of Statistics" (with co-authors), "From Financial Derivatives to Option Hedging" (with co-author), "The Principles of Probability and Statistics" (monolingual and bilingual version), "Curriculum Research and Development in Physics Education", "Selected Chapters of Science History" (with co-authors) and last monographs "Educational and Didactic Communication 2008, 2009, 2010, 2011, 2012, 2013, 2014, 2015, 2016" are based on the scientific work of the author. Some of the further works published by the author are quoted in the bibliography.

Assoc.Prof. RNDr. Přemysl Záškodný, Ph.D. is active as general chair of international e-conferences OEDM-SERM 2011 and OEDM-SERM 2012 (Optimization, Education and Data Mining in Science, Engineering and Risk Management). The OEDM-SERM 2013-2014 was successfully finished. The OEDM-SERM 2015-2016 has been realized also.

Reviewers

The Reviewers Professional CV can be found within books

Záškodný,P.: Survey of Principles of Theoretical Physics (with Application to Radiology) (in Czech). Didaktis, Bratislava, Slovak Republic 2005 ISBN 80-89160-25-5

Záškodný,P.: Survey of Principles of Theoretical Physics (with Application to Radiology) (in English). Avenira, Switzerland, Algoritmus, Ostrava, Czech Republic 2006 (in English) ISBN 80-902491-9-1

Záškodný,P., Procházka,P.: Survey of Principles of Theoretical Physics (with Application to Radiology) (in English). Second Edition. Curriculum: Prague, Czech Republic 2014, www.csrggroup.org, online catalogue of NKP ISBN 978-80-87894-02-6