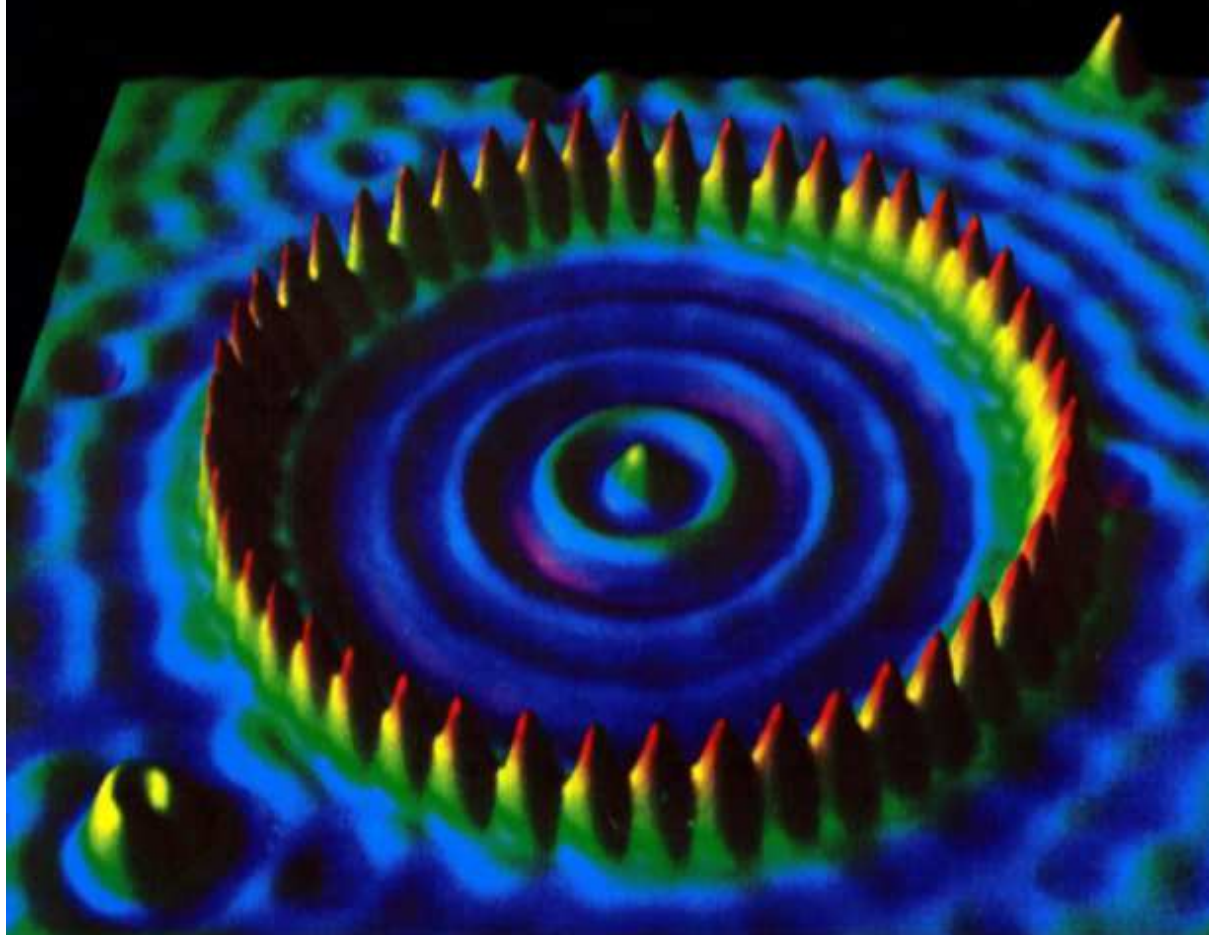


*D. J. Zevistian*



# Úvod do teorie pole

aneb o původu přírodních sil

David J. Zevistian

# Úvod do teorie pole



**Obsah**

	Předmluva	
1)	Matematický úvod do čtvrté dimenze	4
2)	Nekvantový pohled na fyzikální pole	43
3)	Úvod do kvantové mechaniky	173
4)	Pokročilé metody kvantové mechaniky	432
5)	Druhé kvantování	704
6)	Kvantová teorie pole	748
7)	Matematický úvod do unitární teorie pole	835
8)	Symetrie	909
9)	Supersymetrie	1057
10)	Smyčková kvantová gravitace	1271
11)	Úvod do stacionární teorie Cytoprostoru	1369
12)	Úvod do nestacionární teorie Cytoprostoru	1565
13)	Úvod do Fraktální teorie Universa	1758

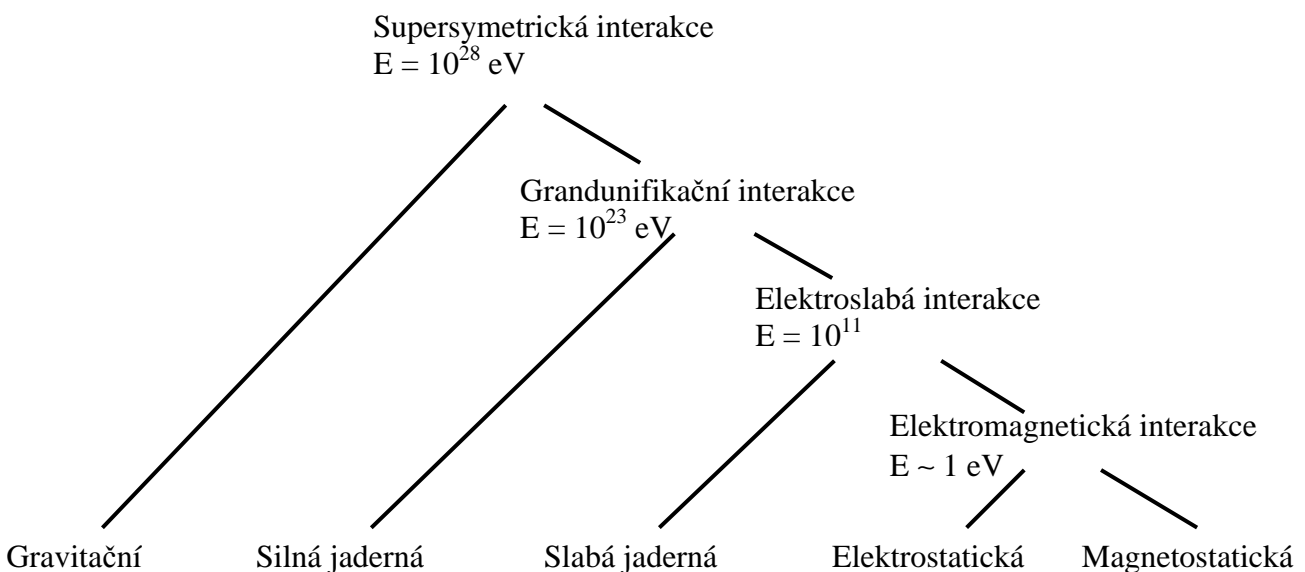
## Předmluva

Hovoříme-li ve fyzice o polích, máme zpravidla na mysli síly, jimiž částice hmoty navzájem interagují.

Příroda disponuje celkem 9 druhy interakcí, z nichž ovšem některé nejsou nezávislé, jak je ukázáno ve schématu 1.

Některé interakce se projevují teprve při vysokých energiích, sloučením dvou jiných interakcí do jedné jediné interakce, jež nese nové vlastnosti.

Schéma 1



Jak je patrné ze schématu 1, lze tímto způsobem postupně sjednocovat všechny druhy interakcí.

**Elektrostatickou (ES)** a **magnetostatickou (MS)** sílu se podařilo formálně sloučit již J. C. Maxwellovi v šedesátých letech 19. století.

Došlo tak k objevu **elektromagnetické (EM)** interakce.

Zcela jednotný popis elektrických a magnetických jevů však nabídl až o 40 let později Albert Einstein ve své speciální teorii relativity.

V téže době také Einstein položil základy kvantové teorie elektromagnetického pole.

Více než 100 let po Maxwellově objevu elektromagnetického pole se podařil podobný husarský kousek trojici Amerických fyziků:

S. Weinbergovi, A. Salamovi a S. Glashowovi, kteří roku 1968

představili světu sjednocenou teorii elektromagnetické a **slabé jaderné** (WN) interakce.

Tak byla objevena **elektroslabá** (EW) síla.

Teorie byla později ještě podrobněji propracována C. N. Yangem, R. L. Millsem, P. Higgsem a G. Van T'hoofem a roku 1983 plně experimentálně potvrzena na urychlovači LHC v Ženevském CERNu, při energiích řádově  $10^{11}$  eV.

Úspěchy teorie elektroslabých sil přirozeně vedly k pokusům o ještě jednotnější popis fyzikálních interakcí.

V polovině sedmdesátých let 20. století proto vznikla teorie velkého sjednocení (GUT) pokoušející se sloučit elektroslabou interakci s interakcí silnou jadernou (SN), jež drží pohromadě kvarky, v jednu jedinou sílu, která dostala název **grandunifikační**.

Předpovědi této teorie jsou bohužel soudobými technickými prostředky neverifikovatelné, neboť k velkému sjednocení přírodních sil by dle teorie mělo dojít až při energiích okolo  $10^{23}$  elektronvoltů.

Nejtvrdším oříškem jehož rozlousknutí nyní čekalo teoretické fyziky, byl úplně jednotný popis všech přírodních sil, včetně gravitace.

Více než 20 let se gravitace urputně bránila tvrdým nájezdům teoretiků usilujících vehementně o její kvantování, a odhodlaných použít k tomu všech prostředků jež skýtala matematika konce 20. století.

Teprve na sklonku 90. let 20. století gravitace, tak jak jsme ji doposud znali z Einsteinovy obecné teorie relativity, náporu teoretiků podlehla a se ctí Alberta Einsteina hodnou navždy opustila hlavní jeviště teoretické fyziky, kde kralovala bezmála jedno století.

Její místo nyní zaujala zbrusu nová **teorie superstrun**.

Stalo se tak ovšem za cenu přidání dalších sedmi rozměrů ke stávajícím čtyřem dimenzím OTR.

Hlavní zásluhy na rozvoji této nové fyzikální teorie mají Američan Edward Witten a Čech Petr Hořava.

Při energii  $10^{28}$  eV dochází v této teorii ke sjednocení kvantové gravitace s grandunifikační interakcí za vzniku tzv. **supergravitace**, neboli **supersymetrické interakce** (SUSY).

Objasnění mechanismů tohoto supersjednocení přírodních sil a zákonů patří bezesporu k vůbec největším výtvorům lidského génia, jaký zřejmě nemá v celých dosavadních dějinách naší civilizace obdoby.

V této knize si klademe za cíl ukázat, že teorie cytoprostoru, pojednávaná v posledních 3 kapitolách, v sobě elegantním způsobem zahrnuje základní principy a přístupy obou současných konkurenčních kvantových teorií gravitace – M teorie (tzv. membránové teorie, která je zobecněním teorie strun) a teorie smyčkové kvantové gravitace. Ba co víc, dokonce umožňuje v mnoha ohledech jejich formální zjednodušení a zároveň prohloubení.

Řadě zde figurujících fyzikálních jevů, dává cytoprostor zcela nový, dosud netušený význam a mnohé z nich navíc dovede odvodit a vysvětlit jednodušším a názornějším způsobem.

Začněme však od píky a věnujme se postupně všem fyzikálním interakcím až do jejich úplného sjednocení.

Čtenář nám snad odpustí přílišnou stručnost, jíž se zde dopustíme především ze dvou důvodů: zaprvé, dnes již existuje řada zevrubných odborných publikací na toto téma, takže ti zainteresovanější mají přístup k informacím plně otevřen, a zadruhé, soudobé znalosti v této oblasti jsou již natolik rozsáhlé, že by vydaly na menší knihovnu a naším cílem není toliko opakování známých faktů alébrž učinění nějakého toho krůčku vpřed za poznáním přírody a jejích zákonů.

**Kniha vyžaduje od čtenáře plné zvládnutí 4 semestrů matematické analýzy a 2 semestrů lineární algebry. Základní matematický vhled do fyzikální problematiky kterou se zde budeme zabývat, lze získat ze třídílné učebnice matematiky, jíž jsme pro vás přichystali na [http://radioterapie.gypy.sk/teorie\\_pole/matematika.html](http://radioterapie.gypy.sk/teorie_pole/matematika.html)**

**Další potřebné matematické znalosti si čtenář průběžně osvojí během studia textu této knihy, v celé řadě odstavců věnovaných aplikované matematice, mezi něž patří i kapitola první.**

## Matematický úvod do čtvrté dimenze

Pro formulaci zákonů popisujících fyzikální entity zvané pole se klasický trojrozměrný popis nehodí.

Úspěchu je možno dosáhnout teprve tehdy, vyjádříme-li prostorové a časové souvislosti mezi událostmi a objekty geometrickými vztahy ve čtyřrozměrném prostoročase, kde úlohu čtvrté souřadnice zaujímá čas. Prostorové souřadnice a komponenty veličin v prostoročase budeme nadále označovat latinskými indexy  $i, j, k, \dots, m, n, \dots$ , které nabývají hodnot 0, 1, 2, 3; např.  $x^i \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3)$ .

Čistě prostorové souřadnice a komponenty budeme opatřovat řeckými indexy  $\alpha, \beta, \dots, \mu, \nu, \dots$ , probíhajícími hodnoty 1, 2, 3; např.  $x^\alpha = (x^1, x^2, x^3)$ .

Při zápisu algebraických operací s těmito indexovými veličinami je velmi výhodné využívat **Einsteinova sumačního pravidla**, tj. provádět sumaci přes každý index jenž se vyskytuje v součinu právě dvakrát, za současného vynechání sumačního symbolu; např.

$$\sum_{i=0}^3 A^i A_i = A^0 A_0 + A^1 A_1 + A^2 A_2 + A^3 A_3 \equiv A^i A_i .$$

V kontextu s obecnou definicí vektorů v  $n$ -rozměrném vektorovém prostoru se pod čtyřvektorem  $A^i$  rozumí soubor čtyř veličin  $A^0, A^1, A^2, A^3$ , které se při Lorentzových transformacích prostoročasových souřadnicích transformují stejně jako souřadnice  $x^i$ :

$$A'^i = a^i A^k = \frac{\partial x'^i}{\partial x^k} \cdot A_k . \quad ( 1.1 )$$

Kromě uvedených komponent čtyřvektorů  $A^i$  s indexy nahoře, zvaných **kontravariantní**, se zavádějí rovněž tzv. **kovariantní** složky  $A_i$  s indexy dole, a to pomocí vztahu

$$A_i \equiv \eta_{ik} A^k , \quad ( 1.2 )$$

kde  $\eta_{ik}$  je tzv. **Minkowského metrický tenzor** reprezentovaný maticovým operátorem

$$\hat{\eta} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.3)$$

Lze snadno ukázat, že kovariantní a kontravariantní složky se transformují navzájem **kontrgradientně**, tzn.

$$A'_i = \frac{\partial x^k}{\partial x'^i} \cdot A_k. \quad (1.4)$$

Pod skalárním součinem dvou čtyřvektorů **A**, **B**, se rozumí algebraický výraz

$$\begin{aligned} A^i B_i &= A^0 B_0 + A^1 B_1 + A^2 B_2 + A^3 B_3 = \eta_{ik} A^i B^k = \\ &= -A^0 B^0 + A^1 B^1 + A^2 B^2 + A^3 B^3 = A_i B^i, \end{aligned} \quad (1.5)$$

což je skalár invariantní vzhledem k transformacím souřadnic.

Kvadrát velikosti daného čtyřvektoru **A** se definuje jako jeho skalární součin se sebou samým, tj.

$$A^2 \equiv A^i A_i = -(A^0)^2 + (A^1)^2 + (A^2)^2 + (A^3)^2. \quad (1.6)$$

Podle znaménka čtverce čtyřvektoru se prostoročasové čtyřvektory rozdělují do tří skupin:  $A^i A_i < 0$  – vektor časového typu,

$A^i A_i = 0$  – nulový, čili izotropní vektor,

$A^i A_i > 0$  – vektor prostorového typu.

Tři prostorové složky  $A^1, A^2, A^3$  čtyřvektoru  $A^i$  tvoří vzhledem k transformacím čistě prostorových souřadnic trojrozměrný vektor **A**.

Soubor komponent čtyřvektoru lze tedy symbolicky psát jako  $A^i = (A^0, \mathbf{A})$ .



Takové rozložení čtyřvektoru na prostorovou a časovou složku lze provést v každé inerciální soustavě, mění se však samozřejmě při Lorentzových transformacích.

Čtverec čtyřvektoru  $A^i$  je potom

$$A^i A_i = -(A^0)^2 + A^2. \quad (1.7)$$

Pro vektor  $A^i$  časového typu lze vždy nalézt takovou souřadnou soustavu  $\Sigma'$ , v níž prostorový vektor  $\mathbf{A}' = 0$ .

Jest to soustava jejíž časová osa má směr čtyřvektoru  $A^i$ .

Podobně pro každý vektor  $B^i$  prostorového typu lze vždy nalézt soustavu  $\Sigma'$ , v níž je jeho časová komponenta  $B'^0 = 0$ .

Aritmetické operace mezi složitějšími strukturami – tenzory, které v prostoročase zavádíme, se řídí běžnými pravidly tenzorové algebry.

Pomocí tenzorového součinu vznikají tenzory vyšších řádů.

Např. součin tenzoru druhého řádu  $A^{ij}$  a tenzoru prvního řádu, tj. čtyřvektoru  $B^k$  vzniká tenzor třetího řádu  $T^{ijk} = A^{ij} B^k$ .

Analogicky pro smíšené tenzory.

Naopak pomocí operace kontrakce tenzoru, spočívající v sumaci přes dvojici indexů v daném tenzoru, vznikají tenzory řádu o dva nižšího.

Např. z tenzoru čtvrtého řádu  $A^{iklm}$  vznikne kontrakcí tenzor druhého řádu  $A^{ik} = A^{ikl}_l$ , a kontrakcí tenzoru druhého řádu  $A^{ik}$  získáme skalár  $A = A^i_i = A^0_0 + A^1_1 + A^2_2 + A^3_3$ , který se nazývá **stopou tenzoru**  $A^{ik}$  a označuje

$$A = tr A^{ik}. \quad (1.8)$$

Mezi tenzory druhého řádu zaujímají zvláštní postavení tzv. **izotropní tenzory**, jejichž komponenty jsou neměnné ve všech souřadných soustavách STR.

Mezi izotropní tenzory patří rovněž i známý Kroneckerův tenzor

$$\delta_k^i = \begin{cases} 1 & \text{pro } i = k \\ 0 & \text{pro } i \neq k \end{cases} \quad (1.9)$$

jehož stopa

$$\text{tr} \delta_k^i = \delta_i^i = 4. \quad (1.10)$$

pro každý vektor  $A^i$  je

$$\delta_k^i A^i = A^k. \quad (1.11)$$



Leopold Kronecker (1823 – 1891)

Kroneckerův tenzor má tedy charakter jednotkového čtyřtenzoru druhého řádu reprezentovaného maticovým operátorem

$$\hat{\mathbf{E}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (1.12)$$

**Kontravariantním čtyřtenzorem  $r$ -tého řádu** se rozumí soubor  $4^r$  veličin  $T^{i_1, i_2, \dots, i_r}$ , které se při transformaci souřadnicové soustavy  $x^i \rightarrow x'^i = a^i_k x^k$  transformují jako součin  $r$  souřadnic  $x^i$ :

$$T'^{i_1, i_2, \dots, i_r} = a_{k_1}^{i_1} \cdot a_{k_2}^{i_2} \cdot \dots \cdot T^{k_1, k_2, \dots, k_r}. \quad (1.13)$$

Analogicky kovariantní a smíšené tenzory.

Souvislost mezi kovariantními a kontravariantními složkami tenzorů, tj. „zvedání a spouštění“ indexů, se uskutečňuje přes metrický tenzor, tj. ve STR přes Minkowského tenzor  $\eta_{ik}$ .  
Např.

$$T_{ik} = \eta_{im} T_k^m = \eta_{il} \eta_{kl} T^{lm}. \quad (1.14)$$

Při použité Minkowského metrice platí jednoduché pravidlo: při zvedání a spouštění prostorových indexů (1, 2, 3) se hodnoty komponent tenzoru nemění, při zvedání a spouštění časového indexu (0) se mění znaménko této složky.

Máme-li skalární, vektorové či tenzorové veličiny definovány ve všech bodech dané oblasti prostoročasu, hovoříme o skalárních, vektorových a tenzorových polích.

Diferenciální operátor  $\frac{\partial}{\partial x^i}$  budeme kvůli zjednodušení zápisu označovat indexem za čárkou:  $,_i$ .

Čtyřgradientem skalárního pole  $\varphi = \varphi(x^i)$  budeme rozumět čtyřvektor, jehož kovariantní složky jsou

$$\varphi_{,i} \equiv \frac{\partial \varphi}{\partial x^i} = \left( -\frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t}, \text{grad } \varphi \right). \quad (1.15)$$

Čtyřdivergencí vektorového pole  $A^i = A^i(x^k)$  rozumíme skalární pole

$$A^i_{,i} \equiv \frac{\partial A^i}{\partial x^i} = \frac{\partial A^0}{\partial t} + \text{div } \mathbf{A}. \quad (1.16)$$

Analogicky, čtyřdivergencí tenzorového pole  $T^{ik}$  je vektorové pole

$$T^{ik}_{,k} \equiv \frac{\partial T^{ik}}{\partial x^k} = T^i. \quad (1.17)$$

Diferenciální operátor  $\frac{\partial}{\partial x^i}$  je zobecněním Hamiltonova operátoru nabra:

$$\nabla = \mathbf{i} \frac{\partial}{\partial x} + \mathbf{j} \frac{\partial}{\partial y} + \mathbf{k} \frac{\partial}{\partial z}. \quad (1.18)$$

Prostorovým zobecněním Laplaceova diferenciálního operátoru delta:

$$\Delta = \nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \quad (1.19)$$

je D'Alembertův operátor

$$\square = \eta^{ik} \frac{\partial}{\partial x^i} \frac{\partial}{\partial x^k} = -\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}. \quad (1.20)$$

tedy

$$\square \varphi = \varphi^{,i}_{,i} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \varphi}{\partial z^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2}. \quad (1.21)$$



Jean-Baptiste le Rond d'Alembert (1717 – 1783)

Gaussova věta vektorové analýzy v trojrozměrném eukleidovském prostoru

$$\int_V \operatorname{div} \mathbf{A} \, dV = \oint_S \mathbf{A} \, d\mathbf{S}, \quad (1.22)$$

podle níž je integrál divergence vektoru přes daný objem  $V$  roven toku tohoto vektoru přes uzavřenou plochu  $S = \partial V$  ohraničující tento objem, se ve čtyřrozměrném prostoročase zobecňuje na tvar

$$\int_V A^i{}_{,i} d\Omega = \oint_o A^i dS_i, \quad (1.23)$$

kde

$$d\Omega = dx^0 dx^1 dx^2 dx^3 = c \cdot t \cdot dV \quad (1.24)$$

je element čtyřobjemu v prostoročase a  $dS^i$  jsou složky čtyřvektoru elementu hyperplochy  $\varphi = \partial\Omega$  ohraničující čtyřobjem  $\Omega$  přes který se integruje na levé straně

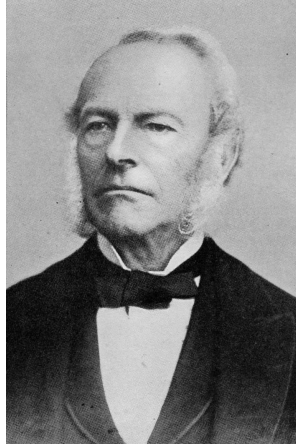
$$\begin{aligned} dS^0 &= dx^1 dx^2 dx^3 = dV \\ dS^1 &= dx^0 dx^2 dx^3 \\ dS^2 &= dx^0 dx^1 dx^3 \\ dS^3 &= dx^0 dx^1 dx^2. \end{aligned} \quad (1.25)$$



**Johann Carl Friedrich Gauss (1777 – 1855)**

Vztah mezi křivkovým integrálem vektoru přes uzavřenou křivku  $C$  a plošným integrálem přes plochu  $S$  ohraničenou křivkou  $C$  je v trojrozměrné vektorové analýze dán Stokesovou větou

$$\oint_C \mathbf{A} d\mathbf{l} = \int_S \text{rot } \mathbf{A} d\mathbf{S}. \quad (1.26)$$



Sir George Gabriel Stokes (1819 – 1903)

Integrál podél uzavřené čtyřrozměrné křivky  $C$  převádíme na integrál přes hyperplochu  $\sigma$  ohraničenou touto křivkou obecně tak, že  $dx^i$  nahradíme  $dS^{ik} \cdot \frac{\partial}{\partial x^i}$ .

Přímé zobecnění Stokesovy věty pro křivkový integrál čtyřvektoru  $A^i$  pak zní:

$$\oint_C A_i dx^i = \int_\sigma A_{i,k} dS^{ki} = \frac{1}{2} \int_\sigma (A_{k,i} - A_{i,k}) dS^{ik}, \quad (1.27)$$

přičemž komponenty antisymetrického tenzoru plochy

$$dS^{ik} = dx^i dx'^k - dx^k dx'^i \quad (1.28)$$

udávají projekce plošného elementu braného jako rovnoběžník se stranami  $dx^i$  a  $dx'^i$ , do souřadnicových rovin.

Analogicky je tomu pro tenzory vyšších řádů.

V inerciální vztažné soustavě  $\tilde{\Sigma}$  v kartézských souřadnicích  $\tilde{x}^i$  má element prostoročasového intervalu tvar

$$ds^2 = \eta_{ik} d\tilde{x}^i d\tilde{x}^k. \quad (1.29)$$

Přejdeme-li k libovolné soustavě prostoročasových souřadnic  $\tilde{x}^i$  v obecně neinerciální vztažné soustavě  $\Sigma$  pomocí transformace

$$x^i = x^i(\tilde{x}^k), \quad (1.30)$$

bude v těchto nových souřadnicích  $x^i$  prostoročasový interval mít tvar

$$ds^2 = g_{ik}(x^j) \cdot dx^i dx^k, \quad (1.31)$$

kde

$$g_{ik}(x^j) = \frac{\partial \tilde{x}^l}{\partial x^i} \frac{\partial \tilde{x}^m}{\partial x^k} \eta_{lm}. \quad (1.32)$$

jelikož vztažné soustavy  $\tilde{\Sigma}$  a  $\Sigma$  se vzhledem k sobě pohybují se zrychlením, transformace  $\Sigma \rightarrow \tilde{\Sigma}$  nebude pevnou Lorentzovou transformací a veličiny  $\frac{\partial \tilde{x}^m}{\partial x^k}$  budou obecně funkcemi místa a času.

Neinerciální vztažné systémy jsou z matematického hlediska vlastně soustavami křivočarých prostoročasových souřadnic.

Místo konstant  $\eta_{ik}$  se zde objevují nové veličiny  $g_{ik}(x^j)$ , jejichž funkční závislost na souřadnicích  $x_j$  charakterizuje vztah soustavy  $\Sigma$  s novými souřadnicemi  $x^j$  k původní inerciální soustavě  $\tilde{\Sigma}$  s kartézskými souřadnicemi  $\tilde{x}^j$ .

Protože veličiny  $g_{ik}$  udávají předpis jak pomocí rozdílů souřadnic měřit skutečné vzdálenosti v prostoročase, nazývají se v diferenciální geometrii metrickým tenzorem.

Rovnice pohybu volné testovací částice v inerciální soustavě  $\tilde{\Sigma}$ :

$$\frac{d^2 \tilde{x}^i}{ds^2} = 0, \quad (1.33)$$

vyjádřená v obecné vztažné soustavě  $\Sigma$ , tj. v křivočarých prostoročasových souřadnicích  $x^i$  má tvar

$$\frac{d^2 x^i}{d\tau^2} + \frac{\partial x^i}{\partial \tilde{x}^m} \frac{\partial^2 \tilde{x}^m}{\partial x^k \partial x^l} \frac{dx^k}{d\tau} \frac{dx^l}{d\tau} = 0. \quad (1.34)$$

Ta to rovnice je invariantní vzhledem k libovolné transformaci souřadnic  $x^i \rightarrow x'^i$ .

Rovnice pohybu volné hmotné částice při použití obecných křivočarých prostoročasových souřadnic  $x^i$ , tj. v obecně neinerciální vztažné soustavě má tedy tvar tzv. **rovnice geodetiky**:

$$\frac{d^2 x^i}{d\tau^2} + \Gamma_{kl}^i \frac{dx^k}{d\tau} \frac{dx^l}{d\tau} = 0, \quad (1.35)$$

kde

$$\Gamma_{kl}^i = \frac{1}{2} g^{im} \left( \frac{\partial g_{mk}}{\partial x^l} + \frac{\partial g_{ml}}{\partial x^k} - \frac{\partial g_{kl}}{\partial x^m} \right) \quad (1.36)$$

jsou tzv. **Christoffelovy koeficienty afinní konexe**.



Elwin Bruno Christoffel (1829 – 1900)

Tyto veličiny, popisující působení zdánlivých setrvačných sil na pohyb testovací částice, obsahují složky metrického tenzoru a jeho derivace. Vidíme tedy, že pomocí veličin  $g_{ik}$ , tj. pomocí metriky, lze zachytit i zdánlivé síly působící na hmotná tělesa v neinerciálních vztažných soustavách  $\Sigma$ .

Fyzikální zákony jsou vyjádřeny diferenciálními rovnicemi mezi vektorovými a tenzorovými poli v prostoročase.



Obyčejná parciální derivace vektorového pole  $A^i$  podle souřadnic  $x^k$

$$A^i{}_{,k} \equiv \frac{\partial A^i}{\partial x^k} \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\Delta x^k \rightarrow 0} \frac{A^i(x^k + \Delta x^k) - A^i(x^k)}{\Delta x^k} \quad (1.37)$$

je obvykle mírou toho, jak se vektorové pole  $A^i$  mění s místem, tj. od bodu o souřadnicích  $x^k$  k sousednímu bodu o souřadnicích  $x^k + \Delta x^k$ .

Při použití křivočarých souřadnic pro objektivní porovnání vektorů a tenzorů zadaných v různých bodech prostoročasu však nelze bezprostředně použít jejich složky počítané vzhledem k lokální bázi, neboť ta se může v zakřiveném prostoročase měnit bod od bodu.

Složky vektorových a tenzorových polí se za použití křivočarých souřadnic mění se změnou polohy v prostoročase ze dvou důvodů.

Jednak z důvodu již zmíněné prostoročasové proměnlivosti vektorové báze vzhledem k níž jsou složky vektorů a tenzorů stanovovány, a jednak též proto, že daná pole se skutečně fyzikálně mění s místem.

Obyčejná parciální derivace (1.37) zde pak již nevyjadřuje objektivní změny vektorových a tenzorových polí, neboť např. i konstantní vektorové pole bude mít v křivočarých souřadnicích proměnné složky a tedy nenulové parciální derivace svých komponent.

Kromě toho se  $A^i{}_{,k}$  netransformuje jako tenzor, neboť je rozdílem vektorů  $A^i$  v různých bodech, kde mohou být různé transformační koeficienty.

Z toho důvodu je nutno použít patřičnou konexi: nejprve vektory přenést paralelně do jednoho společného bodu a pak teprve porovnávat jejich komponenty.

Při paralelním přenosu vektoru se jeho složky v kartézské soustavě souřadnic nemění.

Za použití křivočaré souřadné soustavy se však při paralelním přenosu vektoru  $A^i$  z bodu o souřadnicích  $x^k$  do blízkého bodu  $x^k + \Delta x^k$  změní složky tohoto vektoru o

$$\delta A^i = -\Gamma_{kl}^i A^l \Delta x^k. \quad (1.38)$$

Je zřejmé, že Christoffelovy koeficienty  $\Gamma_{kl}^i$  nemohou tvořit tenzor, neboť přechodem z kartézské soustavy, kde jsou všechny rovny nule, ke křivočaré soustavě se stávají nenulovými, a naopak, při nenulových  $\Gamma_{kl}^i$

Lze všechny složky anulovat přechodem ke kartézské soustavě v daném bodě.

Z předpokladu, aby se  $\delta A^i$  v zákonu paralelního přenosu ( 1.38 ) transformovali jako vektor plyne transformační vztah pro koeficienty afinní konexe:

$$\Gamma_{kl}^{ri} = \frac{\partial x'^i}{\partial x^q} \frac{\partial x^r}{\partial x'^r} \frac{\partial x^s}{\partial x'^l} \Gamma_{rs}^q + \frac{\partial x'^i}{\partial x^q} \frac{\partial^2 x^q}{\partial x'^k \partial x'^l}. \quad ( 1.39 )$$

Z toho je patrné, že koeficienty konexe se chovají jako tenzory pouze při lineárních transformacích souřadnic.

Výsledné složky vektoru  $A^i(x^k)$  přeneseného paralelně do bodu  $x^k + \Delta x^k$  budou

$$A^i(x^k \rightarrow x^k + \Delta x^k) = A^i(x^k) + \delta A^i. \quad ( 1.40 )$$

Z požadavku invariance pravidel tenzorové algebry s paralelním přenosem plyne na základě ( 1.38 ) zákon pro paralelní přenos obecného tenzoru  $T_{rs\dots}^{ij\dots}$  :

$$\begin{aligned} \delta T_{rs\dots}^{ij\dots} = & -\Gamma_{mn}^i T_{rs\dots}^{mj\dots} \Delta x^n - \Gamma_{mn}^j T_{rs\dots}^{im\dots} \Delta x^n - \dots + \\ & + \Gamma_{rn}^m T_{ms\dots}^{ij\dots} \Delta x^n + \Gamma_{sn}^m T_{rm\dots}^{ij\dots} \Delta x^n + \dots \end{aligned} \quad ( 1.41 )$$

Oprava parciální derivace ( 1.37 ) na změnu vektorové báze způsobenou křivočarostí souřadnic pak spočívá v tom, že se při derivování nejprve provede paralelní přenos vektoru  $A^i(x^k + \Delta x^k)$  z bodu  $x^k + \Delta x^k$  zpět do bodu  $x^k$  a pak se teprve provede příslušná limita:

$$\begin{aligned} A^i{}_{;k} & \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\Delta x^k \rightarrow 0} \frac{A^i(x^k + \Delta x^k \rightarrow x^k) - A^i(x^k)}{\Delta x^k} = \\ & = \lim_{\Delta x^k \rightarrow 0} \frac{A^i(x^k + \Delta x^k) + \Gamma_{km}^i A^m - A^i(x^k)}{\Delta x^k}. \end{aligned} \quad ( 1.42 )$$

Tím je dosaženo toho, že se bere rozdíl komponent vektorů počítaných v jediném bodě  $x^k$  a tedy vztahovaných k téže bázi.

Tato tzv. **Christoffelova kovariantní derivace**, tj. parciální derivace opravená na konexi, již vyjadřuje skutečné změny fyzikálních veličin (proměnnost vektorových a tenzorových polí) a má tenzorové transformační vlastnosti.

Podle ( 1.37 ) a ( 1.42 ) je Christoffelova kovariantní derivace vektoru  $A^i$  rovna

$$A^i{}_{;k} = \frac{\partial A^i}{\partial x^k} + \Gamma_{km}^i A^m = A^i{}_{,k} + \Gamma_{km}^i A^m, \quad ( 1.43 )$$

a podobně

$$A_{i;k} = \frac{\partial A_i}{\partial x^k} - \Gamma_{ik}^m A_m = A_{i,k} - \Gamma_{ik}^m A_m. \quad ( 1.44 )$$

Nahradíme-li v ( 1.42 ) vektor  $A^i$  obecným tenzorem  $T_{rs\dots}^{ij\dots}$ , dostaneme na základě zákona paralelního přenosu ( 1.41 ) obecné pravidlo pro kovariantní derivování tenzorů:

$$T_{rs\dots;w}^{ij\dots} = T_{rs\dots,w}^{ij\dots} + \Gamma_{wm}^i T_{rs\dots}^{mj\dots} + \Gamma_{wm}^j T_{rs\dots}^{im\dots} + \dots - \Gamma_{rw}^m T_{ms\dots}^{ij\dots} - \Gamma_{sw}^m T_{rm\dots}^{ij\dots} - \dots. \quad ( 1.45 )$$

Je pozoruhodné, že i kovariantní derivace splňuje Leibnizovo pravidlo pro derivování součinu:

$$\left( t_{j\dots}^{i\dots} \cdot u_{m\dots}^{l\dots} \right)_{;k} = t_{j\dots;k}^{i\dots} \cdot u_{m\dots}^{l\dots} + t_{m\dots}^{i\dots} \cdot u_{m\dots;k}^{l\dots}. \quad ( 1.46 )$$

Obdobná je situace při derivování vektorových a tenzorových polí podél křivky  $C$  zadané parametricky, rovnicí

$$x^k = x^k(\lambda), \quad ( 1.47 )$$

tj. při derivování polí dle parametru  $\lambda$ .



Gottfried Wilhelm von Leibniz (1646 – 1716)

Aby tato derivace vyjadřovala skutečné změny vektorového pole podél křivky  $C$ , musíme ji rovněž opravit na konexi, čímž vznikne tzv. **totální derivace** vektoru  $A^i$  podél křivky  $C$ : [ $x^k = x^k(\lambda)$ ]:

$$\begin{aligned}
 \left. \frac{DA^i(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda_0} &\stackrel{\text{def}}{=} \lim_{\lambda \rightarrow \lambda_0} \frac{A^i(\lambda) - A^i(\lambda_0)}{\lambda - \lambda_0} = \\
 &= \lim_{\lambda \rightarrow \lambda_0} \frac{A^i(\lambda) - A^i(\lambda_0)}{\lambda - \lambda_0} + \Gamma_{kl}^i x^j(\lambda_0) \cdot A^k(\lambda_0) \left. \frac{dx^l}{d\lambda} \right|_{\lambda_0} = \\
 &= \left. \frac{dA^i(\lambda)}{d\lambda} \right|_{\lambda_0} + \Gamma_{kl}^i x^j(\lambda_0) \cdot A^k(\lambda_0) \left. \frac{dx^l}{d\lambda} \right|_{\lambda_0}, \quad (1.48)
 \end{aligned}$$

přičemž  $A^i(\lambda) \equiv A^i(x^k(\lambda))$  jsou složky vektoru  $A^i$  v bodě  $x^k$  na křivce  $C$  daném hodnotou parametru  $\lambda$ .

Je-li vektorové pole  $A^i$  definované nejen na křivce  $C$  ale i v okolním prostoru, je vztah mezi totální a kovariantní derivací následující:

$$\frac{DA^i}{d\lambda} = A^i_{;k} + \Gamma_{kl}^i A^l \frac{dx^k}{d\lambda} = A^i_{;k} \frac{dx^k}{d\lambda}, \quad (1.49)$$

kde pro jednoduchost již není explicitně vyznačeno, že se počítá v bodě křivky  $C$  o parametru  $\lambda = \lambda_0$ .

Analogicky pro totální derivace tenzorů vyšších řádů.

Snadno lze odvodit důležitou rovnici

$$g_{ik;l} = g^{ik}{}_{;l} = 0, \quad (1.50)$$

která říká, že metrický tenzor je kovariantně konstantní, takže např. nezáleží na tom, zda zvedáme a spouštíme tenzorové indexy před nebo po provedení kovariantní derivace.

Složky koeficientů konexe  $\Gamma^i_{kl}$  a metrického tenzoru  $g_{ik}$  závisejí na souřadnicové soustavě a na první pohled na nich nepoznáme, zda odpovídají rovinnému prostoru v němž jsou použity křivočaré souřadnice, nebo prostoru zakřivenému.

Rozbor vlastností paralelního přenosu však umožňuje nalézt obecné kritérium plochosti prostoru a stanovit kvantitativně míru jeho zakřivení. Pod nezakřiveným prostorem rozumíme obecně takový prostor, v němž lze metrickou formu patřičnou transformací souřadnic převést na tvar

$$ds^2 = \sum K_i \cdot (d\tilde{x}^i)^2, \quad (1.51)$$

kde jednotlivé konstantní koeficienty  $K_i$  mohou nabývat hodnot 1 resp. -1.

Kritériem nezakřivenosti prostoru je tedy možnost zavedení globální kartézské nebo pseudokartézské souřadné soustavy.

Máme-li v plochém prostoru zavedenou takovou kartézskou soustavu souřadnic, pak vektor přenesený paralelně z jednoho bodu do druhého nemění své komponenty.

V křivočaré soustavě se komponenty vektoru při paralelním přenosu mění, avšak z existence kartézské souřadnicové soustavy plyne, že v rovinném prostoru paralelní přenos nezávisí na cestě po níž se realizuje.

Změny složek závisejí pouze na počátečním a koncovém bodě.

Přeneseme-li tedy vektor podél libovolné uzavřené křivky, pak po návratu do výchozího bodu budou splývat složky přeneseného a původního vektoru.

Afinní konexe mající tuto vlastnost se nazývá **integrabilní**.

Při symetrické konexi je integrabilita afinní konexe nutnou a postačující podmínkou k tomu, aby byl prostor rovinný.

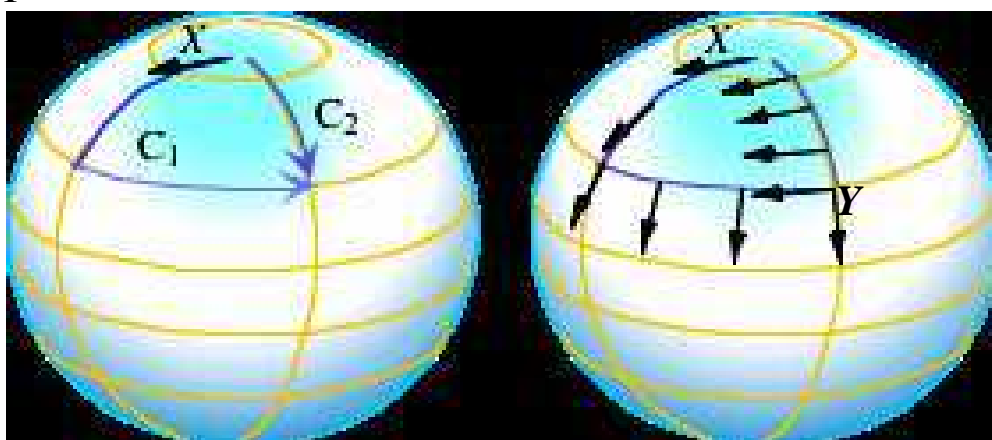
V obecném případě však jsou  $\Gamma^i_{kl}$  funkcemi souřadnic a paralelní přenos bude záviset na dráze.

Konexe již nebude integrabilní:

$$A_{C_1}^i \equiv \int_{A \hat{C}_1}^B \Gamma_{kl}^i A^k dx^l \neq \int_{A \hat{C}_2}^B \Gamma_{kl}^i A^k dx^l \equiv A_{C_2}^i, \quad (1.52)$$

kde  $A_{C_1}^i$  jsou složky vektoru  $A^i$  přeneseného paralelně z bodu A do bodu B podél křivky  $C_1$  a  $A_{C_2}^i$  je výsledek přenosu mezi těmito body křivky  $C_2$ .

Obr. 1.1



V zakřiveném prostoru (např. na kulové ploše) výsledek paralelního přenosu vektoru z daného bodu X do bodu Y závisí na cestě, po níž se přenos uskutečňuje. Tato neintegrabilita afinní konexe v zakřiveném prostoru způsobuje, že vektor přenesený paralelně podél uzavřené křivky  $C$  se po návratu zpět do výchozího bodu bude lišit od původního vektoru.

Provedeme-li v tomto případě paralelní přenos podél uzavřené křivky, vrátíme se do výchozího bodu obecně s jiným vektorem.

Velikost tohoto přeneseného vektoru bude podle vztahu metriky a konexe v Riemannově prostoru stejná, změní se však jeho směr.

Odchylka tohoto přeneseného vektoru od vektoru původního, vztažená na jednotku plochy obklopené uzavřenou křivkou  $C$  podél níž se přenos prováděl, je pak mírou neintegrability konexe, tj. charakterizuje rozdílnost geometrie uvažovaného prostoru od eukleidovosti čili stupeň jeho zakřivení.

Změna vektoru při paralelním přenosu vektoru  $A$  podél uzavřené křivky  $C$  je

$$A^i = -\oint_C \Gamma_{kl}^i A^k dx^l . \quad ( 1.53 )$$



**Georg Friedrich Bernhard Riemann (1826 – 1866)**

Tento křivkový integrál obecně nelze převést na plošný integrál pomocí Stokesovy věty, neboť hodnoty složek vektoru  $A^i$  v bodech příslušné plochy uvnitř křivky  $C$  nelze jednoznačně určit.

Závisí totiž na cestě, po které při rozšiřování vektorového pole s vektorem  $A^i$  k danému bodu přicházíme.

Jestliže je však křivka  $C$  infinitesimální, v limitním přechodu se tato nejednoznačnost neuplatní.

Příslušná chyba bude až druhého řádu.

Proměnnost vektorového pole  $A^i$  s tímto místem je jen díky konexi, takže

$$\frac{\partial A^i}{\partial x^l} = -\Gamma_{kl}^i A^k , \quad ( 1.54 )$$

a Stokesova věta dává

$$\begin{aligned}
\Delta A^i &= -\frac{1}{2} \int \left[ \frac{\partial(\Gamma_{km}^i A^k)}{\partial x^l} - \frac{\partial(\Gamma_{kl}^i A^k)}{\partial x^m} \right] dS^{lm} = \\
&= -\frac{1}{2} \left[ \frac{\partial \Gamma_{km}^i}{\partial x^l} - \frac{\partial \Gamma_{kl}^i}{\partial x^m} + \Gamma_{nl}^i \Gamma_{km}^n - \Gamma_{mn}^i \Gamma_{kl}^n \right] \cdot A^k \Delta S^{lm} = \quad (1.55) \\
&= -\frac{1}{2} R_{klm}^i A^k \Delta S^{lm},
\end{aligned}$$

kde  $\Delta S^{lm}$  je tenzor plochy ohraničené nekonečně malou uzavřenou křivkou  $C$ .

Tenzor  $R_{klm}^i$ , který kvantifikuje neintegrabilitu afinní konexe, tj. zakřivenost daného prostoru se nazývá **Riemannův – Christoffelův tenzor křivosti**.

V plochem prostoru je vždy možno zvolit takovou kartézskou soustavu souřadnic, v níž jsou všechny složky  $\Gamma_{kl}^i$  nulové, a proto je zde tenzor křivosti rovněž nulový.

Díky tenzorovému charakteru  $R_{klm}^i$  to platí i v každé jiné (třeba křivočaré) soustavě souřadnic.

Obráceně, jestliže je tenzor křivosti všude nulový, je paralelní přenos jednoznačný a nezávislý na cestě, takže lokálně kartézskou soustavu zavedenou v jednom bodě lze paralelně přenést a rozšířit do všech ostatních bodů, tj. zkonstruovat globální kartézskou soustavu – prostor je rovinný.

Rovnice

$$R_{klm}^i = 0 \quad (1.56)$$

je tedy obecným kritériem eukleidovosti resp. pseudoeukleidovosti libovolného prostoru popsaného tenzorovými poli  $\Gamma_{kl}^i$  popř.  $g_{ik}$ .

Z (1.55) plynou pro tenzor křivosti následující vztahy:

$$R_{klm}^i = -R_{lkm}^i, \quad (1.57)$$

$$R_{klm}^i + R_{mkl}^i + R_{lmk}^i = 0, \quad (1.58)$$

$$R_{iklm} = g_{ij} R_{klm}^j = -R_{kilm} = -R_{iklm} = R_{lmik}. \quad (1.59)$$





Eukleidés z Megary (325 – 260 př. n. l.)

Podle posledního vztahu jsou ty komponenty tenzoru křivosti, jež mají  $i = k$  nebo  $l = m$  rovny nule.

Tenzor 4. řádu v  $N$ -rozměrném prostoru má obecně celkem  $N^4$  složek, což ve čtyřrozměrném prostoru dá 256 složek.

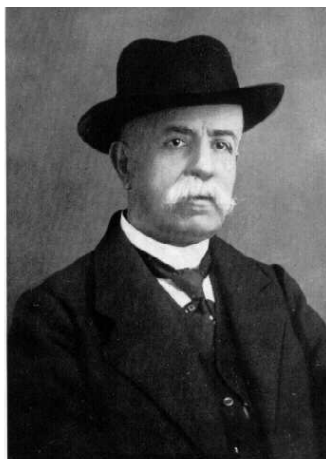
Vzhledem k algebraickým identitám ( 1.57 ), ( 1.58 ), ( 1.59 ) však počet algebraicky nezávislých složek tenzoru křivosti činí pouze

$$\frac{N^2(N^2 - 1)}{12} = 20 \quad ( 1.60 )$$

Kontrakcí tenzoru  $R^i_{klm}$  v indexech  $i, l$  což je jediná kontrakce dávající nenulový výsledek, dostaneme tzv. **Ricciho tenzor křivosti**

$$R_{ik} \stackrel{\text{def}}{=} R^m_{imk} = g^{ml} R_{mil}, \quad ( 1.61 )$$

který je symetrický.



Gregorio Ricci-Curbastro (1853 – 1925)

Další kontrakcí získáme invariant zvaný skalární křivost daného prostoru:

$$R \stackrel{\text{def}}{=} g^{ik} R_{ik} = g^{il} g^{km} R_{mil} . \quad ( 1.62 )$$

Kromě algebraických symetrií splňuje tenzor křivosti též důležité tzv. **Bianchiho diferenciální identity**:

$$R^i_{klm;j} + R^i_{kjl;m} + R^i_{kmj;l} = 0 . \quad ( 1.63 )$$



Luigi Bianchi (1856 – 1928)

Kontrakcí této rovnice v indexech  $i$  a  $l$  a vynásobením  $g^{jk}$  dostaneme, vzhledem ke kovariantní konstantnosti metrického tenzoru

$$g^{jk}_{;n} = 0 \quad \left( R_l^j - \delta_l^j \cdot \frac{R}{2} \right)_{;j} = 0 , \quad ( 1.64 )$$

což lze zapsat ve tvaru

$$G^{ik}_{;k} = 0 , \quad ( 1.65 )$$

kde

$$G_{ik} \stackrel{\text{def}}{=} R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} \cdot R \quad ( 1.66 )$$

je tzv. **Einsteinův tenzor křivosti**.

Tenzor křivosti figuruje ve všech jevech, při nichž se uplatňuje zakřivení prostoročasu.

V plochem prostoru jsou druhé parciální derivace vektorů podle souřadnic komutativní.

$$A^i_{,k,l} = A^i_{,l,k} \quad (1.67)$$

a stejně tak i derivace kovariantní:

$$A^i_{;k;l} = A^i_{;l;k}. \quad (1.68)$$

V obecném případě však podle (1.45) platí

$$A^i_{;k;l} - A^i_{;l;k} = \left( \frac{\partial \Gamma^i_{ml}}{\partial x^k} - \frac{\partial \Gamma^i_{mk}}{\partial x^l} + \Gamma^i_{nk} \Gamma^n_{ml} - \Gamma^i_{nl} \Gamma^n_{mk} \right) A^m = R^i_{mkl} A^m, \quad (1.69)$$

takže kovariantní derivace jsou obecně nekomutativní a mírou této nekomutativity je tenzor křivosti  $R^i_{klm}$ .

dosud jsme byli svědky toho, že lze konstruovat tenzory s libovolným počtem indexů nahoře i dole.

nyň se zaměříme na možnosti zavedení „polovičních“ indexů, abychom veličinu transformující se jako vektor mohli získat coby součin dvou elementárnějších objektů, podobně, jako lze získat tenzor druhého řádu tenzorovým násobením dvou vektorů.

Tyto objekty nazýváme **spinory**.

Ze složek reálného čtyřvektoru  $A^i$  lze sestavit čtyři kombinace:

$$\begin{aligned} A^{0\bar{0}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x^0 + x^3), & A^{0\bar{1}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x^1 + x^2 i) \\ A^{1\bar{0}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x^1 - x^3 i), & A^{1\bar{1}} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(x^0 - x), \end{aligned} \quad (1.70)$$

které však již nejsou reálné, ale splňují rovnost

$$A^{a\bar{b}} = \overline{A^{b\bar{a}}}, \quad (1.71)$$

kde indexy  $a, b$  nabývají hodnot 0, 1 a indexy  $\bar{a}, \bar{b}$  hodnot  $\bar{0}, \bar{1}$ .

Existuje-li nějaký spinor  $S^{abcd\bar{e}\bar{f}\bar{g}}$ , potom existuje též spinor  $S^{def\bar{g}\bar{a}\bar{b}\bar{c}}$ , který má komplexně sdružené složky.

Spinor se stejným počtem pruhovaných a nepruhovaných indexů splňuje určitou podmínku reálnosti, analogickou podmínce pro vektor.

Např.

$$S^{00010\bar{1}\bar{0}\bar{1}\bar{0}\bar{1}} = S^{10101\bar{0}\bar{0}\bar{0}\bar{1}\bar{0}}, \quad (1.72)$$

příčemž

$$S^{00011\bar{0}\bar{0}\bar{0}\bar{1}\bar{1}} \in \mathbb{R} \quad (1.73)$$

Čtverec délky čtyřvektoru ( 1.7 ) lze potom psát coby dvojnásobek determinantu matice se složkami ( 70 ):

$$A^2 = A^i A_i = \eta_{ik} A^i A^k = -2 \cdot \begin{vmatrix} A^{0\bar{0}} & A^{0\bar{1}} \\ A^{1\bar{0}} & A^{1\bar{1}} \end{vmatrix}. \quad (1.74)$$

Přechod od starých souřadnic k novým lze realizovat na grupě  $SL(2, \mathbb{C})$  namísto Lorentzovy grupy  $SO(1,3)$ , jež je s ní izomorfní.

Mějmež tedy soubor čtyř komplexních čísel  $t_a^a$ , což je matice přechodu od nečárkované báze k čárkované:

$$S^a = t_a^a S^{a'}, \quad (1.75)$$

umožňující výpočet souřadnic v nečárkované bázi z těch v bázi čárkované.

Dále pod  $t_{\bar{a}}^{\bar{a}}$  mějme na mysli komplexně sdružená čísla.

Potom lze vyjádřit libovolný spinor (s horními indexy) v nečárkované bázi.

Např. vektor

$$A^{a\bar{b}} = t_a^a t_{\bar{b}}^{\bar{b}'} A^{a'\bar{b}'}. \quad (1.76)$$

Použitím antisymetrických spinorů se dvěma indexy dole

$$\varepsilon_{ab} = -\varepsilon_{ba}, \quad \varepsilon_{\bar{a}\bar{b}} = -\varepsilon_{\bar{b}\bar{a}}, \quad \varepsilon_{01} = -\varepsilon_{\bar{0}\bar{1}} = -1 \quad (1.77)$$

lze čtverec délky čtyřvektoru ( 1.7 ) psát jako

$$\varepsilon_{ab}\varepsilon_{\bar{a}\bar{b}}A^{a\bar{a}}A^{b\bar{b}}, \quad (1.78)$$

přičemž  $a$  a  $\bar{a}$  či  $b$  a  $\bar{b}$  zde spolu nijak nesouvisejí.

Podmínka pro invarianci  $\varepsilon^{ab}$  vůči transformaci ( 1.78 ) je právě podmínkou pro unimodularitu transformační matice, tj.:

$$\varepsilon^{ab} = t_{a'}^a t_{b'}^b \varepsilon^{a'b'}. \quad (1.79)$$

Můžeme se přesvědčit, že podmínku ( 1.71 ) bude splňovat vektor  $i$  po transformaci, splňoval-li ji před ní (a stejně tak pro víceindexové spinory).

Navíc, jako obdobu zvedání a spouštění indexů pomocí  $\eta_{ik}$

$$A_i = \eta_{ik} A^k \quad (1.80)$$

budeme spouštět a zvedat indexy pomocí  $\varepsilon_{ab}$ .

Je zde ovšem třeba dbát na pořadí indexů, neboť  $\varepsilon_{ab}$  je antisymetrický:

$$\lambda_b = \varepsilon^a{}_{ab} \lambda^a, \quad \lambda^c = \varepsilon^{cd} \lambda_d. \quad (1.81)$$

Obdobně pro víceindexové spinory (ostatní indexy beze změny) a pro pruhované indexy.

Nyní si budeme všímat jen případu spinoru, symetrického vůči permutacím ve dvou skupinách indexů.

Není obtížné násobným provedením následujících úvah rozložit spinor na součiny  $\varepsilon$  symbolů a spinorů symetrických vůči záměně nějakých dvou indexů, dále na součiny  $\varepsilon$  a spinorů symetrických vůči permutacím ve dvou skupinách, z nichž jednou je právě ona dvojice, atd.

Náš případ bude ukazovat to, co se dá fyzikálně popsat jako skládání impulsmomentů.

Mějmež kupř. dva různé spinory  $A_{(i)abc}$ ,  $B_{(i)defg}$  symetrické vůči všem permutacím indexů.

V takovém případě závisí pouze na tom, kolik indexů z množiny  $\{a, b, c\}$  resp.  $\{d, e, f, g\}$  je jednička.

Pokud má spinor  $k$  spinorových indexů, můžeme mezi nimi najít 0 až  $k$  jedniček a tedy obsahuje  $k + 1$  nezávislých složek.

Částici popisované takovým spinorem připisujeme  $s = \frac{k}{2}$ .

$k + 1 = 2s + 1$  složek bude odpovídat amplitudám pravděpodobnosti, že se částice nachází ve stavu s průmětem spinu do osy  $z$ :

$$s_z = -s, -s + 1, \dots, s - 1, \dots, s. \quad (1.82)$$

Spinor  $S_{abc,defg}$  symetrický vůči permutacím v obou skupinách

$$S_{abc,defg} = S_{bac,defg} = S_{abc,edfg} = \dots, \quad (1.83)$$

který si lze představit např. jako nějakou sumu

$$S_{abc,defg} = \sum_i A_{abc} B_{defg}, \quad (1.84)$$

lze rozložit způsobem

$$S_{abc,defg} = \text{sym}_{abd} \text{sym}_{defg} \left( S_{abcdefg}^{7/2} + S_{abdef^{\epsilon}cg}^{5/2} + S_{ade^{\epsilon}bf^{\epsilon}cg}^{3/2} + S_{d^{\epsilon}ae^{\epsilon}bf^{\epsilon}cg}^{1/2} \right), \quad (1.85)$$

kde čísla  $7/2, \dots, 1/2$  znamenají polovinu počtu indexů, tj. spin.

Spinory  $S_{abcdefg}^{7/2}$  lze spočítat zpětně jako např.

$$S_{abcdefg}^{5/2} = k \cdot \text{sym}_{abdef} S_{abc,defg^{\epsilon}}^{cg}, \quad (1.86)$$

ovšem kombinatorickou konstantu  $k$  není lehké spočítat.

Fyzikálně se věc vykládá tak, že dvě částice A, B se spiny  $s_a, s_b$  (v našem případě  $3/2$  a  $2$ ) mohou spolu vytvořit částici se spinem z intervalu

$$s_a + s_b, s_a + s_b - 1, s_a + s_b - 2, \dots, |s_a - s_b|. \quad (1.87)$$

Zaměřme se nyní na Lorentzovy transformace, fixující navíc jakýkoliv vektor ve směru toku času, tedy i vektor

$$V^{a\bar{b}} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (1.88)$$

délky  $\sqrt{2}$  tj.

$$V^i = (\sqrt{2}, 0, 0, 0). \quad (1.89)$$

pomocí něhož lze přepočítávat horní nepruhované indexy na dolní pruhované a naopak:

$$S^a = V^{a\bar{b}} S_{\bar{b}}, \quad S^{\bar{b}} = S_a V^{a\bar{b}}. \quad (1.90)$$

Ve vzorci (71) pro invarianci  $V^{a\bar{b}}$  napsaném jako

$$V^{a\bar{b}} = t_{a'}^a V^{a'\bar{b}'} \bar{t}_{\bar{b}'}^{\bar{b}} = V^{a'\bar{b}'}, \quad (1.91)$$

kde  $t_{\bar{b}'}^{\bar{b}}$  zde znamená  $t_{\bar{b}'}^{\bar{b}} = \overline{t_{b'}^b}$ , lze interpretovat  $\hat{\mathbf{V}}$  jako jednotkovou matici, a tak navíc o matici přechodu  $t$ , o níž již víme, že je unimodulární, můžeme říci, že je také unitární ( $tt^* = \hat{\mathbf{E}}$ ).

Takové transformace jednoduše tvoří podgrupu  $SU(2)$  grupy  $SL(2, \mathbb{C})$ .

Pro matice z této podgrupy

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \gamma & \delta \end{pmatrix}, \quad (1.92)$$

tedy platí  $\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{A}}^* = \hat{\mathbf{E}}$  z čehož mimo jiné plyne

$$\alpha\bar{\gamma} + \beta\bar{\delta} = 0. \quad (1.93)$$

Navíc má být determinant jednotkový

$$1 = \alpha\delta - \beta\gamma = -\frac{\alpha\bar{\alpha}\gamma}{\beta} - \beta\gamma = -\frac{\gamma}{\beta}(\alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta}), \quad (1.94)$$

ale protože  $\alpha\bar{\alpha} + \beta\bar{\beta} = 1$  máme výsledné  $\gamma = -\bar{\beta}$  a odtud také  $\delta = \bar{\alpha}$ .  
Matici (1.92) tedy můžeme psát ve tvaru

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ -\bar{\beta} & \bar{\alpha} \end{pmatrix}. \quad (1.95)$$

tím dostáváme množinu matic izomorfní tělesu kvaternionů.

Všimněme si, že označíme-li  $Q^{JJ}$  komplexní matici  $2n \times 2n$  vzniklou z kvaternionické matice  $\hat{\mathbf{Q}}$  rozepsáním

$$\alpha + \beta i + \gamma j + \delta k \mapsto \begin{pmatrix} \alpha + \beta i & \gamma + \delta i \\ -\gamma + \delta i & \alpha - \beta i \end{pmatrix}, \quad (1.96)$$

pak platí rovnost

$$(Q^*)^{JJ} = (Q^{JJ})^*, \quad (1.97)$$

kde pod adjungovanou maticí míníme matici transponovanou a kvaternionicky sdruženou:

$$(\alpha + \beta i + \gamma j + \delta k)^* = \alpha - \beta i - \gamma j - \delta k. \quad (1.98)$$

Symplektická grupa  $Sp(2n)$  mající dimenzi  $n \cdot (2n + 1)$  obsahující komplexní unitární symplektické matice rozměru  $2n \times 2n$ , tj. matice splňující rovnosti



$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{A}}^* = \hat{\mathbf{E}}, \quad (1.99)$$

$$\hat{\mathbf{A}}\hat{\mathbf{K}}\hat{\mathbf{A}}^T = \hat{\mathbf{K}}, \quad (1.100)$$

kde  $\hat{\mathbf{K}}$  je nějaká regulární antisymetrická matice (antisymetrická matice lichého rozměru je vždy singulární, proto  $2n$ ), tedy není ničím jiným, nežli grupou unitárních matic  $n \times n$  nad tělesem  $\mathbb{H}$  všech kvaternionů, což je důvod proč ji někteří zapisují též jako  $Sp(n)$ , či  $U(n, \mathbb{H})$ .

Za matici  $\hat{\mathbf{K}}$  z (1.100) bereme komplexní matici  $2n \times 2n$ , která je nulová kromě „tlusté“ diagonály tvořené  $n$  bloky typu  $2 \times 2$ , tvaru

$$\begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}. \quad (1.101)$$

Snad neušlo vaší pozornosti, že při rotaci o  $2\pi$  se změní spinory s lichým počtem indexů na opačné, a teprve při rotaci o  $4\pi$  se vrátí na původní hodnotu.

Komplexní čísla můžeme znázornit buď v Gaussově rovině, nebo, přidáme-li bod v nekonečnu, na tzv. **Riemannově sféře**.

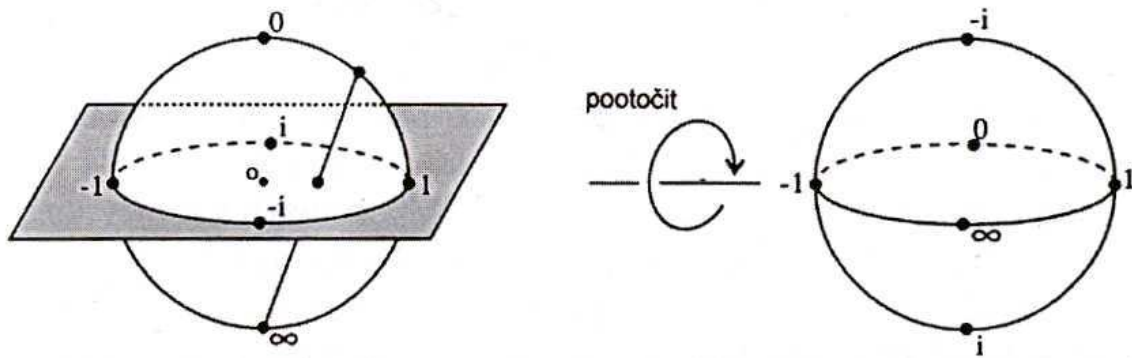
Sféru lze projektovat na rovinu spolu s bodem v nekonečnu.

Vezměme rovinu procházející rovníkem sféry a spojíme každý bod na sféře s jižním pólem.

Bod, ve kterém tato přímka protne rovinu, je odpovídajícím bodem na Gaussově rovině.

Poznamenejme, že v tomto zobrazení se severní pól promítá do počátku, jižní pól do nekonečna a reálná osa je zobrazena na vertikální kružnici procházející severním a jižním pólem.

Obr. 1.2

Riemannova sféra reprezentující komplexní čísla spolu s  $\infty$ .

Sférou můžeme pootočit tak, že reálná čísla budou odpovídat rovníku. Budiž dále dána funkce  $f(x)$  reálné proměnné  $x$  nabývající komplexních hodnot.

Jak bylo řečeno výše, můžeme ji chápat jako funkci definovanou na rovníku.

Výhoda tohoto pohledu spočívá v tom, že existuje přirozené kritérium, které říká, zda je  $f$  složena z pozitivních či negativních frekvencí:  $f(x)$  se skládá z pozitivních frekvencí, jestliže může být prodloužena do holomorfní funkce na severní polokouli Riemannovy sféry.

Obdobně,  $f(x)$  se skládá z negativních frekvencí jestliže může být prodloužena do holomorfní funkce na jižní hemisféře.

Vlnová funkce částice se spinem  $1/2$  může být v lineární superpozici stavů „nahoru“ a „dolů“

$$w|\uparrow\rangle + z|\downarrow\rangle. \quad (1.102)$$

Tento stav může být reprezentován bodem  $\frac{z}{w}$  na Riemannově sféře

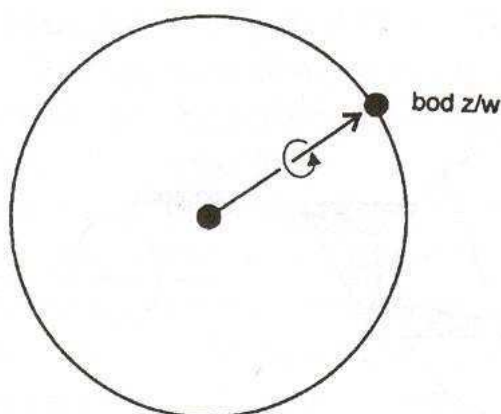
odpovídající bodu, kde osa spinu směřující z počátku kladným směrem protíná sféru (pro vyšší spiny existuje komplikovanější konstrukce nalezená v roce 1932 Majoranou).



Ettore Majorana (1906 – 1938)

To spojuje komplexní amplitudy kvantové mechaniky s prostoročasnou strukturou OTR.

Obr. 1.3



Prostor směrů spinu pro částici spinu  $1/2$  je Riemannova sféra poměrů amplitud  $w$  (spin nahoru) a  $z$  (spin dolů).

Představme si nyní pozorovatele nacházejícího se v bodě  $P$  prostoročasu a pozorujícího hvězdy.

Pokud by nyní druhý pozorovatel prolétl bodem  $P$  ve stejný okamžik, ale s nenulovou relativní rychlostí vzhledem k prvnímu, pak by díky relativistické aberaci zobrazil hvězdy na odlišná místa na sféře.

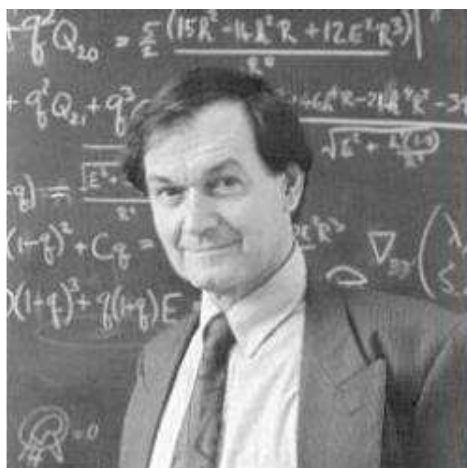
Tato odlišná umístění bodů na sféře jsou spojena speciální transformací zvanou **Möbiova transformace**.

Tyto transformace tvoří přesně grupu transformací zachovávajících komplexní strukturu Riemannovy sféry.



**August Ferdinand Möbius (1790 – 1868)**

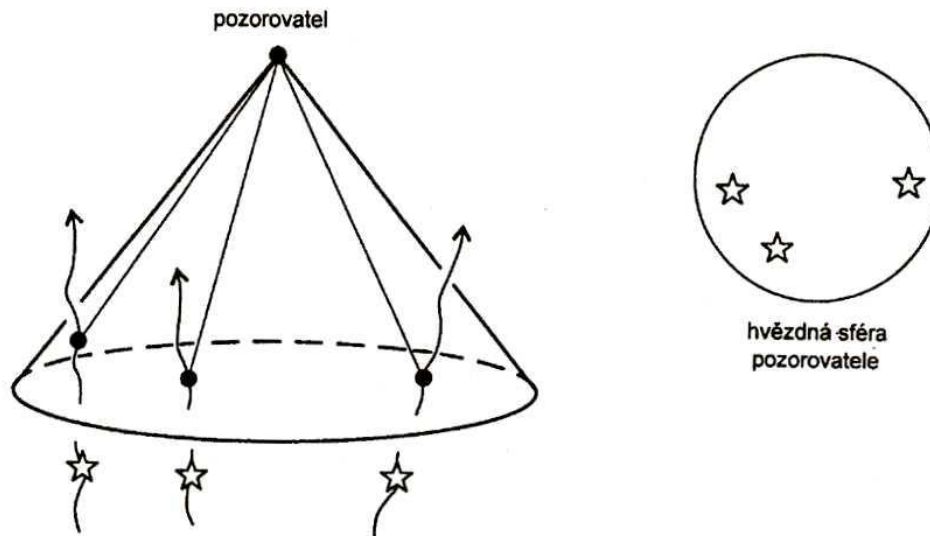
Proto je prostor světelných paprsků procházejících prostoročasovým bodem, tj. tzv. **Penroseův twistorový prostor**, přirozeným způsobem ekvivalentní Riemannově sféře.



**Roger Penrose (1931)**

Nezákladnější grupa symetrií ve fyzice spojující pozorovatele pohybující se různými rychlostmi – **vlastní Lorentzova grupa** – tak může být realizována jako grupa automorfismů nejjednodušší komplexně jednodimenzionální variety, Riemannovy sféry.

Obr. 1.4



Nebeská sféra pozorovatele je v relativistické teorii přirozeně reprezentovaná Riemannovou sférou.

Základní myšlenkou twistorové teorie je využití souvislosti mezi kvantovou mechanikou a prostoročasovou strukturou, jak je zachycena v Riemannově sféře, rozšířením naznačeného postupu na celý prostoročas.

Celé paprsky světla vystupují v teorii jako základní stavební kameny dokonce fundamentálnější, než prostoročasové body.

V tomto smyslu se zde prostoročas považuje za odvozený pojem a twistorový prostor chápeme jako prostor základní.

Tyto dva prostory jsou spojeny korespondencí, která reprezentuje světelné paprsky v prostoročase jako body v twistorovém prostoru. Bod prostoročasu se tak stává Riemannovou sférou v twistorovém prostoru.

Prozatím jsme popsali twistorový prostor jako reálně pětidimenzionální, a proto se nejedná o komplexní prostor (komplexní prostory jsou vždy reálně sudědimenzionální).

Pokud chápeme světelné paprsky jako historie fotonů, musíme vzít v úvahu též energii fotonů a jejich helicitu, která může být pravotočivá nebo levotočivá.

Jedná se sice o objekty trochu složitější než pouhé světelné paprsky, ale díky tomu dostáváme komplexní projektivní třídídimenzionální (šest reálných dimenzí) prostor  $\mathbf{CP}_3 \equiv \mathbf{PT}$  čili tzv. **projektivní twistorový prostor**.

Jeho pětidimenzionální podprostor **PN** rozštěpuje prostor **PT** na levotočivou **PT<sup>-</sup>** a pravotočivou **PT<sup>+</sup>** polovinu.

Body v prostoročase jsou dány čtyřmi reálnými čísly a projektivní twistorový prostor může být popsán poměry čtyř komplexních čísel. Jestliže světelný paprsek reprezentovaný twistorem  $(Z_0, Z_1, Z_2, Z_3)$  prochází prostoročasným bodem  $(x_0, x_1, x_2, x_3)$ , pak je splněna incidenční podmínka

$$\begin{pmatrix} Z_0 \\ Z_1 \end{pmatrix} = \frac{i}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} x_0 + x_3 & x_1 + ix_2 \\ x_1 - ix_2 & x_0 - x_3 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z_2 \\ Z_3 \end{pmatrix}. \quad (1.103)$$

kteřá tvoří základ korespondence prostoročasové a twistorové struktury. Bod v twistorovém prostoru je definován dvěma spinory

$$\omega^a = \begin{pmatrix} \omega^0 \\ \omega^1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z^0 \\ Z^1 \end{pmatrix}, \quad (1.104)$$

$$\pi_{\bar{a}} = \begin{pmatrix} \pi_{\bar{0}} \\ \pi_{\bar{1}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z^2 \\ Z^3 \end{pmatrix}. \quad (1.105)$$

Incidenční podmínka ( 1.103 ) tak dostává tvar

$$\omega = ix\pi. \quad (1.106)$$

Povšimněme si, že při posunu počátku

$$\mathbf{r} \mapsto \mathbf{r} - \mathbf{Q}, \quad (1.107)$$

dostaneme

$$\omega^a \mapsto \omega^a - iQ^{a\bar{a}} \pi_{\bar{a}}, \quad (1.108)$$

zatímco  $\pi_{\bar{a}}$  zůstává nezměněno.

Twistor reprezentuje čtyři komponenty impulsu  $\mathbf{p}$  (z nichž tři jsou nezávislé) a šest komponent impulsmomentu  $\mathbf{b}$  (z nichž jsou nezávislé čtyři) částice nulové hmoty.

Výrazy pro ně mají tvar

$$p_{a\bar{a}} = i\bar{\pi}_a \pi_{\bar{a}} , \quad (1.109)$$

$$b^{a\bar{a}b\bar{b}} = i\omega^{(a} \bar{\pi}^{b)} \varepsilon^{\bar{a}\bar{b}} - i\varepsilon^{ab} \bar{\omega}^{(\bar{a}} \pi^{\bar{b})} , \quad (1.110)$$

kde závorky označují symetrizaci.

Tyto vztahy zahrnují skutečnost, že čtyřhybnost  $\mathbf{p}$  je nulový, do budoucnosti orientovaný vektor, a že **Pauliho – Lubanského spinový vektor** (Józef Kazimierz Lubański (1914 - 1946)) je dán čtyřhybností násobenou helicitou  $s$ .

Tyto veličiny určují twistorové proměnné  $(\omega^a, \pi_{\bar{a}})$  až na celkový fázový faktor twistoru.

Helicita může být vyjádřena jako

$$s = \frac{1}{2} Z^\alpha \bar{Z}_\alpha , \quad (1.111)$$

kde komplexní sdružení twistoru  $Z^\alpha = (\omega^a, \pi_{\bar{a}})$  je duálním twistorem  $\bar{Z}^\alpha = (\bar{\pi}_a, \bar{\omega}^{\bar{a}})$ .

Povšimněme si, že komplexní sdružení prohazuje proužkované indexy a zaměňuje twistory za jejich duály.

$s > 0$  odpovídá pravotočivým částicím a jde tedy o již zmíněnou horní polovinu twistorového prostoru  $\mathbf{PT}^+$ .

$s < 0$  obdobně odpovídá levotočivým částicím, tj. dolní polovině  $\mathbf{PT}^-$ .

V případě  $s = 0$  dostáváme skutečné světelné paprsky.

Rovnice určující prostor  $\mathbf{PN}$  světelných paprsků je tedy

$$Z^\alpha \bar{Z}_\alpha = \omega^a \bar{\pi}_a + \pi_{\bar{a}} \bar{\omega}^{\bar{a}} = 0 . \quad (1.112)$$

Twistorovou vlnovou funkcí definujeme komplexní funkci  $f(Z^\alpha)$  na twistorovém prostoru.

Ne každá funkce  $f(Z^\alpha)$  je a priori vlnovou funkcí, jelikož twistor  $Z^\alpha$  obsahuje jak informace o poloze, tak informace o hybnosti a oba tyto údaje nemohou zároveň vystupovat jako argumenty vlnové funkce. Poloha a hybnost jsou nekomutující proměnné.

Komutační relace v twistorovém prostoru mají tvar

$$[Z^\alpha, \bar{Z}_\beta] = \hbar \delta_\beta^\alpha, \quad [Z^\alpha, Z^\beta] = 0, \quad [\bar{Z}_\alpha, \bar{Z}_\beta] = 0. \quad (1.113)$$

$Z^\alpha$  a  $\bar{Z}_\alpha$  jsou tak kanonicky sdružené proměnné a vlnová funkce musí být funkcí pouze jedné z nich.

Vlnová funkce tedy musí být holomorfní či antiholomorfní funkcí twistoru  $Z^\alpha$ .

Musíme nyní zkontrolovat, jak výše uvedené vztahy závisí na uspořádání operátorů.

Ukazuje se, že výrazy pro impuls a pro impulsmoment jsou na uspořádání operátorů nezávislé, a jsou tedy kanonicky určené.

Oproti tomu výraz pro helicitu závisí na uspořádání a my musíme vybrat správnou definici.

Ta je dána symetrickou formou součinu, tj.

$$s = \frac{1}{4} (Z^\alpha \bar{Z}_\alpha + \bar{Z}_\alpha Z^\alpha), \quad (1.114)$$

což v holomorfní reprezentaci vlnové funkce můžeme přepsat ve tvaru

$$s = -\frac{\hbar}{2} \left( 2 + Z^\alpha \frac{\partial}{\partial Z^\alpha} \right), \quad (1.115)$$

kde  $Z^\alpha \frac{\partial}{\partial Z^\alpha}$  je tzv. **stupeň nehomogenity v  $Z^\alpha$** .

Vlnovou funkci můžeme rozložit do vlastních stavů operátoru helicity  $s$ . Těmi jsou vlnové funkce s přesně definovaným stupněm homogenity. Např. bezspinová částice s nulovou helicitou má twistorovou vlnovou funkci se stupněm homogenity -2.



Levotočivá částice spinu  $1/2$  má helicitu  $\hbar/2$ , a její twistorová vlnová funkce má proto stupeň homogenity  $-1$ , zatímco pravotočivá verze této částice bude mít vlnovou funkci se stupněm homogenity  $-3$ .

Mohli bychom se domnívat, že symetrii lze obnovit záměnou  $Z^\alpha \leftrightarrow \bar{Z}_\alpha$ , převrácením tabulky stupňů homogenity a použitím  $Z^\alpha$  pro jednu helicitu a  $\bar{Z}_\alpha$  pro druhou.

Ale stejně jako nelze v klasické kvantové mechanice volně směřovat polohovou a hybnostní reprezentaci, nemůžeme směřovat ani holomorfní a antiholomorfní reprezentace  $Z^\alpha$  a  $\bar{Z}_\alpha$ .

Musíme zvolit jednu z nich.

Nyní bychom rádi dostali prostoročasový popis vlnové funkce  $f(Z)$ . Ten je dán křivkovým integrálem

$$\phi_{\bar{a} \dots \bar{g}}(\mathbf{x}) = \int_{\omega=ix\pi} \left( \pi_{\bar{a}} \cdot \dots \cdot \pi_{\bar{g}} \right) f(Z^\alpha) \pi_{\bar{e}} d\pi^{\bar{e}}, \quad (1.116)$$

nebo

$$\phi_{a \dots g}(\mathbf{x}) = \int_{\omega=ix\pi} \left( \frac{\partial}{\partial \omega^a} \cdot \dots \cdot \frac{\partial}{\partial \omega^c} \right) f(Z^\alpha) \pi_{\bar{e}} d\pi^{\bar{e}}, \quad (1.117)$$

kde integrování probíhá přes cestu zahrnující twistory  $Z^\alpha$  splňující spolu s  $\mathbf{x}$  podmínku ( 1.103 ) a počet členů  $\pi$  či  $\frac{\partial}{\partial \omega}$  závisí na spinu a helicitě pole.

Tato rovnice definuje prostoročasové pole  $\phi_{\dots}(x)$ , které automaticky splňuje rovnice pole částice nulové hmoty.

Podmínka holomorfnosti vlnové funkce je tedy ekvivalentní všem nepřehledným rovnicím pole pro částici s nulovou hmotou.

Přesněji řečeno, pro lineární pole v plochém prostoru či limitu malých energií Einsteinova gravitačního pole.

Geometricky tvoří prostoročasový bod  $\mathbf{x}$   $\mathbf{CP}_1$ -přímku (která je Riemannovou sférou) v twistorovém prostoru.

Tato přímka musí protnout oblast, kde je funkce  $f(Z)$  definována.

Přitom  $f(Z)$  není v oblasti definována všude.

Má singulární body které obíhala cesta integrování v ( 1.116 ) resp. ( 1.117 ).

Matematicky přesně řečeno, twistorová vlnová funkce je prvkem kohomologie.

To lépe pochopíme, uvážíme-li systém otevřených okolí oblasti twistorového prostoru, která nás zajímá.

Twistorová funkce pak musí být definována na průnicích dvojic těchto otevřených množin. Říkáme, že je prvkem tzv. **první sheafové kohomologie**.

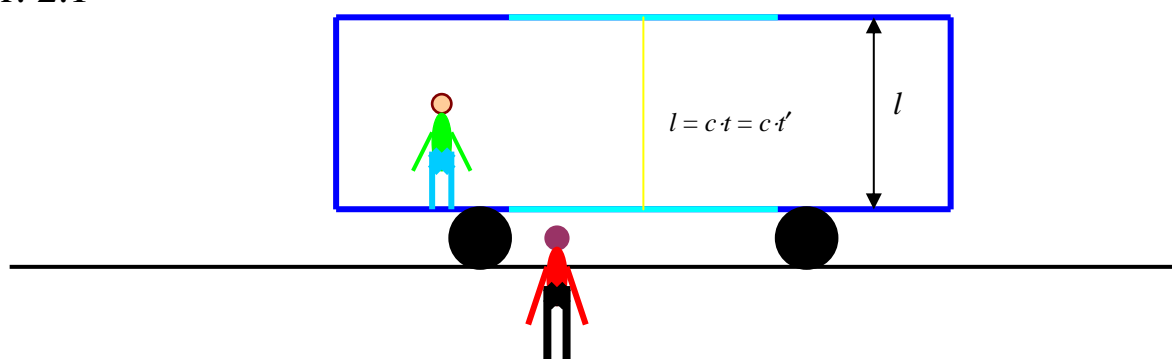
## Nekvantový pohled na fyzikální pole



Albert Einstein (1879 – 1955)

Uvažujme nyní myšlenkový experiment, v němž uvnitř vlakového vagónu kmitá foton mezi dvěma planparalelními zrcadly, vzájemně vzdálenými  $l$ , z nichž jedno je umístěno např. na stropě vagónu a druhé na podlaze, viz obr. 2.1.

Obr. 2.1



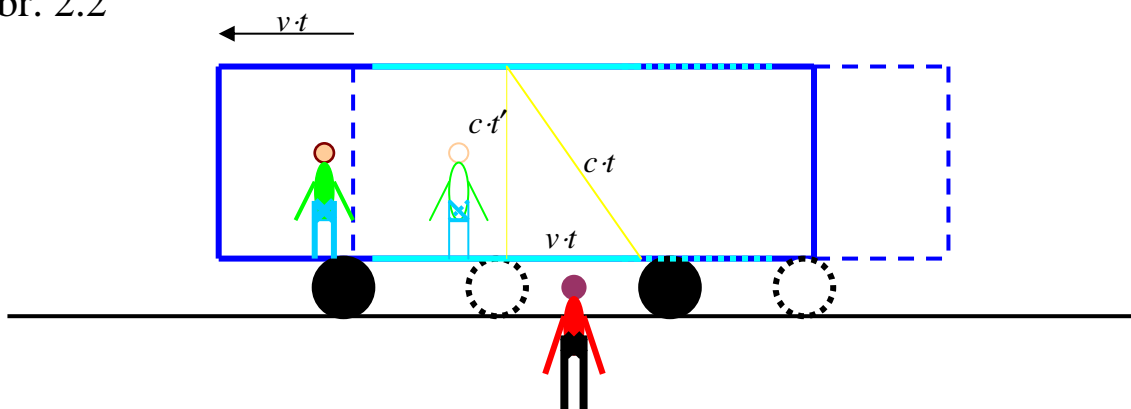
Bude-li vagón v klidu, bude pozorovatel uvnitř vagónu pozorovat totéž, co pozorovatel stojící venku na peróně.

Trajektorie paprsku je v tomto případě pro každého z pozorovatelů svislou úsečkou, která se tudíž jeví oběma pozorovatelům stejně dlouhá a proto ji světlo překoná z hlediska každého z pozorovatelů za stejný čas

$$t = \frac{l}{c} . \quad ( 2.1 )$$

Jakmile se dá vagón do rovnoměrného přímočarého pohybu, celá situace se radikálně změní, viz obr. 2.2.

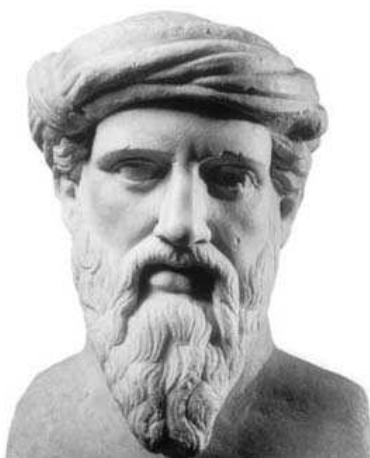
Obr. 2.2



Trajektorie paprsku bude i nyní vzhledem k pozorovateli uvnitř vagónu svislou úsečkou délky  $l$ , neboť pohyb vagónu nemůže mít žádný vliv na fyzikální procesy v inerciální soustavě s ním spojené. Vůči pozorovateli stojícímu na peróně se však paprsek již nebude pohybovat svisle.

Označíme-li jednotlivé trajektorie dle obr. 2.2, potom doba, kterou fotonu potrvá pohyb po delší trajektorii, bude dána dle Pythagorovy věty vztahem

$$c^2 \cdot t'^2 = c^2 \cdot t^2 - v^2 \cdot t^2 . \quad (2.2)$$



Pythagoras ze Samu (570 – 490 př. n. l)

Odtud plyne

$$t' = t \sqrt{\frac{c^2 - v^2}{c^2}} = t \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} . \quad (2.3)$$

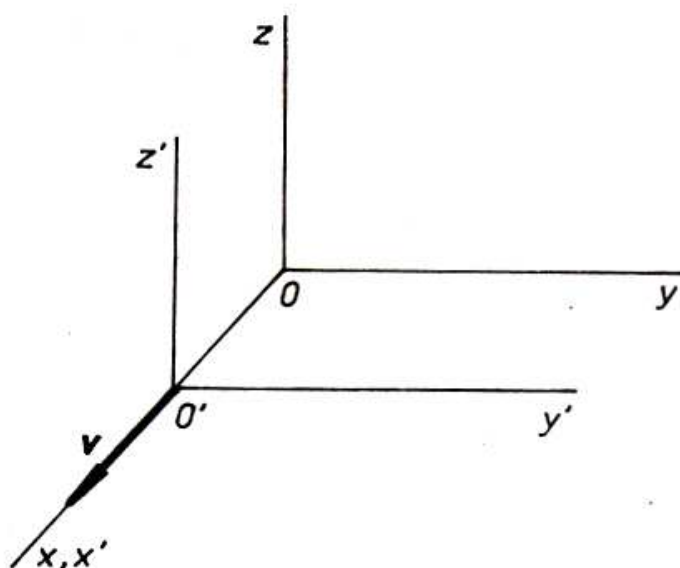
Pro zobecnění tohoto výsledku uvažujme dvojici inerciálních soustav  $\Sigma$ ,  $\Sigma'$  podle obr. 2.3.

Nechť v počátku soustavy  $\Sigma$  je umístěn zdroj schopný vysílat světelný signál všemi směry.

Signál vyslaný v okamžiku  $t = 0$ , kdy počátky obou soustav splývají, urazí za dobu  $t$  v libovolném směru vzdálenost

$$r = (x^2 + y^2 + z^2)^{1/2} = ct . \quad (2.4)$$

Obr. 2.3



**Vzájemný pohyb dvou inerciálních kartézských soustav souřadnic**

V okamžiku  $t$  může být tento signál zachycen ve všech bodech kulové plochy poloměru  $r$ .

Einsteinův princip relativity žádá, aby i v čárkované soustavě se signál šířil izotropně rychlostí  $c$ .

Pro vzdálenost  $r'$  musí tedy platit

$$r' = (x'^2 + y'^2 + z'^2)^{1/2} = ct'. \quad (2.5)$$

Princip relativity tedy požaduje, aby vztahy ( 2.4 ) a ( 2.5 ) byly invariantní vůči transformaci prostorových i časových souřadnic mezi oběma soustavami, tj. aby platilo

$$c^2t^2 - r^2 = c^2t'^2 - r'^2. \quad (2.6)$$

Uvedenému požadavku vyhovuje Lorentzova transformace, kterou pro případ soustavy na obr. 2.3 můžeme zapsat ve tvaru

$$x' = \gamma(x - vt); \quad y' = y; \quad z' = z; \quad t' = \gamma\left(t - \frac{\beta}{c} \cdot x\right), \quad (2.7)$$

kde

$$\beta = \frac{v}{c}, \quad \gamma = (1 - \beta^2)^{-1/2}. \quad (2.8)$$

Zavedeme-li polohové vektory  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ,  $\mathbf{r}' = (x', y', z')$  určující polohu libovolného bodu v příslušné soustavě, můžeme Lorentzovu transformaci ( 2.7 ) zapsat ve vektorovém tvaru

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + \mathbf{v} \left[ \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}}{v^2} (\gamma - 1) - \gamma t \right]; \quad t' = \gamma \left[ t - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \right], \quad (2.9)$$

kde  $\mathbf{v} = (v, 0, 0)$ .

Inverzní transformaci, vyjadřující souřadnice v soustavě  $\Sigma$  pomocí souřadnic v soustavě  $\Sigma'$ , získáme vzájemnou záměnou čárkovaných a nečárkovaných veličin, přičemž pokládáme  $v' = -v$ .

Vektorový tvar ( 2.9 ) Lorentzovy transformace zůstane v platnosti i v obecnějším případě, kdy se dvě soustavy  $\Sigma$ ,  $\Sigma'$  s vzájemně rovnoběžnými stejnojmennými osami pohybují vůči sobě libovolně orientovanou rychlostí  $\mathbf{v}(v_x, v_y, v_z)$ .

Při malých rychlostech, kdy můžeme zanedbat veličiny druhého řádu  $\beta^2$  ve srovnání s jednotkou, můžeme klást  $\gamma = 1$  a Lorentzovy transformace:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} - \mathbf{v} \cdot t \quad ; \quad t' = t - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{v}}{c^2}. \quad (2.10)$$

Připomeňme si některé základní důsledky plynoucí z Lorentzovy transformace.

Mějmež dvě události, z nichž jedna probíhá v okamžiku  $t_1$  v bodě  $(x_1, y_1, z_1)$ , druhá v okamžiku  $t_2$  v bodě  $(x_2, y_2, z_2)$  (vzhledem k soustavě  $\Sigma$ ).

Označme postupně

$$\Delta x = x_2 - x_1; \quad \Delta y = y_2 - y_1; \quad \Delta z = z_2 - z_1; \quad \Delta t = t_2 - t_1. \quad (2.11)$$

Přejdeme-li nyní k soustavě  $\Sigma'$ , najdeme z Lorentzovy transformace

$$\Delta x' = \gamma(\Delta x - v \cdot \Delta t); \quad \Delta y' = \Delta y; \quad \Delta z' = \Delta z; \quad \Delta t' = \gamma \left( \Delta t - \frac{\beta}{c} \Delta x \right). \quad (2.12)$$

Pro prostorovou vzdálenost dostaneme s použitím ( 2.12 )

$$\begin{aligned} \Delta l' &= \left[ (\Delta x')^2 + (\Delta y')^2 + (\Delta z')^2 \right]^{1/2} = \\ &= \left[ (\Delta l)^2 + (\Delta x)^2 (\gamma^2 - 1) - 2v\gamma \cdot \Delta x \cdot \Delta t + \gamma^2 v^2 (\Delta t)^2 \right]^{1/2}. \end{aligned} \quad (2.13)$$

Ze vztahů ( 2.12 ), ( 2.13 ) je zřejmé, že bude-li časový interval  $\Delta t = 0$ , tj. uvažované události budou v soustavě  $\Sigma$  současné, bude interval  $\Delta t'$  obecně různý od nuly v závislosti na prostorovém intervalu  $\Delta x$ .

Podobně, bude-li např.  $\Delta l = 0$ , tj. obě události budou v soustavě  $\Sigma$  souměstné, nemusí tomu tak být v soustavě  $\Sigma'$ , neboť obecně  $\Delta l' \neq 0$ . Předpokládejme, že uvažované události se týkají jedné částice a spojíme počátek soustavy  $\Sigma'$  s touto částicí.

Soustava  $\Sigma'$  se pak nazývá vlastní (klidovou) soustavou této částice.

Aby soustava  $\Sigma'$  zůstala inerciální, předpokládejme, že se částice pohybuje vůči inerciální soustavě  $\Sigma$  rovnoměrně a přímočaře rychlostí  $v$  ve směru osy  $x$ .

Potom  $\Delta l' = 0$ ,  $\Delta x' = 0$ ,  $\Delta x = v \cdot \Delta t$  a z ( 2.12 ) plyne

$$\Delta t' = \frac{\Delta t}{\gamma}. \quad (2.14)$$

Veličinu  $t'$  nazveme vlastním časem částice a označíme  $\tau$ .

Položíme-li v okamžiku splnutí obou počátků  $\tau = t = 0$ , můžeme psát

$$\tau = \frac{t}{\gamma} = t \cdot \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{1/2}. \quad (2.15)$$

Vlastní čas částice tedy plyne pomaleji, než čas v laboratorní soustavě  $\Sigma$ .

Tento výsledek můžeme zobecnit i na nerovnoměrný pohyb částice rychlostí  $\mathbf{v}(t)$ .

V každém nekonečně malém časovém intervalu můžeme totiž předpokládat, že rychlost částice je konstantní, a spojit s částicí okamžitou klidovou inerciální soustavu souřadnic.

Potom platí

$$d\tau = dt \cdot \left[1 - \frac{v^2(t)}{c^2}\right]^{\frac{1}{2}} \quad (2.16)$$

a pro konečný časový interval

$$\Delta\tau = \int_{t_1}^{t_2} \left[1 - \frac{v^2(t)}{c^2}\right]^{\frac{1}{2}} dt. \quad (2.17)$$



Uvažujme nyní těleso konečného objemu a spojíme soustavu  $\Sigma'$  s tímto tělesem.

Budeme srovnávat podélný rozměr tělesa v obou soustavách:

$$l = x_2 - x_1 \quad ; \quad l_0 = l' = x'_2 - x'_1. \quad (2.18)$$

Veličinu  $l_0$  nazveme vlastní délkou tělesa.

Problém vzniká pouze s určením vzdálenosti  $l$  koncových bodů pohybujícího se tělesa.

Souřadnice těchto bodů musíme totiž určovat současně.

Musí tedy být  $\Delta t = 0$  a podle (2.12)  $\Delta x' = \gamma \cdot \Delta x$ ,

$$l_0 = \gamma \cdot l = l \cdot \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.19)$$

nebo, pro obecný nerovnoměrný pohyb tělesa

$$dl = \left[1 - \frac{v^2(t)}{c^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \cdot v(t) dt \quad (2.20)$$

$$\Delta l = \int_{t_1}^{t_2} \left[1 - \frac{v^2(t)}{c^2}\right]^{-\frac{1}{2}} \cdot v(t) dt. \quad (2.21)$$

Rozměr ve směru pohybu tělesa je tedy kratší než jeho vlastní délka. Protože příčné rozměry tělesa zůstávají beze změny, mění se povrch a objem tělesa pouze v závislosti na podélném rozměru.

Z Lorentzovy transformace plynou důležité vztahy pro skládání rychlostí částic.

Protože rychlost částice v soustavě  $\Sigma$  resp.  $\Sigma'$  lze vyjádřit jako

$$\mathbf{u} = \frac{d\mathbf{r}}{dt} \quad ; \quad \mathbf{u}' = \frac{d\mathbf{r}'}{dt'}, \quad (2.22)$$

dostaneme přímým výpočtem z ( 2.19 )

$$\mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u} + \mathbf{v} \cdot \left[ \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{v^2} (\gamma - 1) - \gamma \right]}{\gamma \cdot \left( 1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \right)}, \quad ( 2.23 )$$

nebo ve složkách

$$u'_x = \frac{u_x - v}{1 - \frac{u_x v}{c^2}} ; \quad u'_y = \frac{u_y}{\gamma \cdot \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)} ; \quad u'_z = \frac{u_z}{\gamma \cdot \left( 1 - \frac{u_x v}{c^2} \right)}. \quad ( 2.24 )$$

v případě pomalé Lorentzovy transformace můžeme psát

$$\mathbf{u}' = \frac{\mathbf{u} - \mathbf{v}}{1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2}}. \quad ( 2.25 )$$

V klasické dynamice je definována hybnost  $\mathbf{p}$  částice jako součin její hmotnosti  $m_0$  a rychlosti  $\mathbf{u}$  v dané inerciální soustavě  $\Sigma$ :

$$\mathbf{p} = m_0 \cdot \mathbf{u}. \quad ( 2.26 )$$

První věta impulsová je vyjádřena vztahem

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}. \quad ( 2.27 )$$

Hmotnost  $m_0$  je přitom považována za invariant.

Aby mohl být vztah ( 2.27 ) zachován i v relativistické dynamice, je třeba zobecnit definici pojmu hybnosti  $\mathbf{p}$  vztahem

$$\mathbf{p} = \frac{m_0 \cdot \mathbf{u}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} = m \cdot \mathbf{u}. \quad (2.28)$$

Veličina  $m_0$  je zde opět invariantní vůči Lorentzově transformaci a nazývá se vlastní či klidovou hmotností.

Veličina

$$m = \frac{m_0}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \quad (2.29)$$

je relativistická hmotnost částice.

S využitím ( 2.28 ) lze vyjádřit kinetickou energii částice jakožto míru práce vykonané silou  $\mathbf{F}$  ve směru  $ds$  po dráze  $\mathbf{s}$ , vztahem:

$$\begin{aligned} T &= \int_0^r \mathbf{F} \, d\mathbf{r} = \int_0^r \frac{d\mathbf{p}}{dt} \, d\mathbf{r} = \int_0^{m \cdot u} \mathbf{u} \, d\mathbf{p} = \int_0^{m \cdot u} \mathbf{u} \, d \frac{m_0 \cdot \mathbf{u}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} = \\ &= \int_0^u \mathbf{u} \cdot \frac{d}{du} \frac{m_0 \cdot \mathbf{u}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \, du = \frac{m_0 \cdot u^2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - \int_0^u \frac{m_0 \cdot \mathbf{u}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} \, du = \\ &= \frac{m_0 \cdot u^2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - m_0 \cdot \int_0^u \frac{\mathbf{u} \cdot d\mathbf{u}}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} = \frac{m_0 \cdot u^2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - m_0 c \cdot \int_0^u \frac{\mathbf{u} \cdot d\mathbf{u}}{\sqrt{c^2 - u^2}} = \\ &= \frac{m_0 \cdot u^2 c}{\sqrt{c^2 - u^2}} + m_0 c \sqrt{c^2 - u^2} - m_0 c^2 = m_0 \left( \frac{u^2 c}{\sqrt{c^2 - u^2}} + c \sqrt{c^2 - u^2} \right) - m_0 c^2 = \\ &= m_0 c^2 \left[ \frac{u^2 + (c^2 - u^2)}{c \sqrt{c^2 - u^2}} \right] - m_0 c^2 = \frac{m_0 \cdot c^2}{\sqrt{1 - \frac{u^2}{c^2}}} - m_0 c^2 = mc^2 - m_0 c^2. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Rovnici ( 2.30 ) přepíšeme do tvaru

$$E = mc^2 = T + m_0c^2 = T + E_0 = m_0c^2 + \frac{1}{2}m_0u^2 + \frac{3}{8}m_0\frac{u^4}{c^2} + \dots, \quad (2.31)$$

kde  $E_0$  je tzv. klidová energie tělesa.

Pomocí ( 2.28 ) a ( 2.31 ) zapíšeme rozdíl

$$E^2 - p^2c^2 = m_0^2c^2 \cdot \frac{c^2 - u^2}{1 - \frac{u^2}{c^2}} = m_0^2c^4. \quad (2.32)$$

Vidíme, že tento výraz je relativistický invariant.

Přejdeme-li tedy do soustavy  $\Sigma'$ , musí platit

$$\frac{E^2}{c^2} - p^2 = \frac{E'^2}{c^2} - p'^2. \quad (2.33)$$

Porovnáme nyní výraz ( 2.33 ) s obdobným vztahem ( 2.6 ) pro kinetický invariant  $c^2t^2 - r^2$ .

Vidíme, že pro složky vektoru  $\mathbf{p}$  a energii  $E$  musí platit rovněž Lorentzova transformace, jako pro složky polohového vektoru  $\mathbf{r}$  a čas  $t$ .

Přiřadíme  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{p}$ ,  $\mathbf{r}' \rightarrow \mathbf{p}'$ ,  $\mathbf{t} \rightarrow \frac{E}{c^2}$ ,  $t' \rightarrow \frac{E'}{c^2}$ , a analogicky ( 2.9 )

zapíšeme Lorentzovu transformaci pro hybnost ve vektorovém tvaru jako

$$\mathbf{p}' = \mathbf{p} + \mathbf{v} \cdot \left[ \frac{\mathbf{p} \cdot \mathbf{v}}{v^2} (\gamma - 1) - \gamma \frac{E}{c^2} \right]. \quad (2.34)$$

Odtud již snadno najdeme transformační vztahy pro sílu  $\mathbf{F}$  při přechodu mezi soustavami  $\Sigma$  a  $\Sigma'$ .

Uvážíme-li, že

$$\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}, \quad \mathbf{F}' = \frac{d\mathbf{p}'}{dt'}, \quad \frac{d}{dt'} = \frac{dt}{dt'} \frac{d}{dt} = \gamma \frac{d}{dt}, \quad \mathbf{u} = \frac{d\mathbf{r}}{dt}, \quad \mathbf{F} \cdot \mathbf{u} = \frac{dE}{dt}, \quad (2.35)$$

dostaneme

$$\mathbf{F}' = \frac{\mathbf{F} + \mathbf{v} \left[ \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}}{v^2} (\gamma - 1) - \frac{\gamma}{c^2} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}) \right]}{\gamma \left( 1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \right)}. \quad (2.36)$$

Pro případ pomalé Lorentzovy transformace se výraz (2.36) zjednoduší na

$$\mathbf{F}' = \frac{\mathbf{F} - \frac{1}{c^2} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{u}) \cdot \mathbf{v}}{1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2}}. \quad (2.37)$$

Prozkoumáme nyní vzájemné silové působení dvou bodových nábojů v situaci, kdy se oba pohybují různým způsobem vůči inerciální pozorovací soustavě  $\Sigma$ .

Omezíme se na rovnoměrný přímočarý pohyb jednoho z nábojů  $Q_1$ , a to nejprve rychlostí  $u \ll c$ , kdy můžeme použít pomalé Lorentzovy transformace.

Zkušební náboj  $Q_2$  nechť se pohybuje libovolným způsobem okamžitou rychlostí  $\mathbf{v}$ .

Přejdeme nyní k jiné inerciální soustavě souřadnic  $\Sigma'$ , jejíž stejnojmenné osy jsou rovnoběžné s osami soustavy  $\Sigma$  a která se pohybuje vůči soustavě  $\Sigma$  rychlostí  $\mathbf{u}$ .

V soustavě  $\Sigma'$  je tedy náboj  $Q_1$  nehybný a vytváří elektrostatické pole v souladu s Coulombovým zákonem.

Na náboj  $Q_2$  pohybující se v této soustavě rychlostí  $\mathbf{v}$  působí Coulombova síla

$$\mathbf{F}' = \frac{Q_2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q_1}{|\mathbf{r}'_{Q_2} - \mathbf{r}'_{Q_1}|^3} (\mathbf{r}'_{Q_2} - \mathbf{r}'_{Q_1}), \quad (2.38)$$

kde  $\mathbf{r}'_{Q_2}$  a  $\mathbf{r}'_{Q_1}$  jsou polohové vektory nábojů  $Q_2$  a  $Q_1$  v soustavě  $\Sigma'$ .



Charles-Augustin de Coulomb (1736 – 1806)

Abychom nyní vyjádřili sílu působící ze strany náboje  $Q_1$  na náboj  $Q_2$  v původní, laboratorní soustavě  $\Sigma$ , použijeme pomalé transformace síly (2.37) a podle zavedeného označení zde nahradíme  $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{u}$ ,  $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v}$ .

$$\mathbf{F}' = \frac{\mathbf{F} - \frac{1}{c^2} (\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}) \cdot \mathbf{u}}{1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2}}. \quad (2.39)$$

Pro zpětnou transformaci dostáváme

$$\mathbf{F} = \frac{\mathbf{F}' - \frac{1}{c^2} (\mathbf{F}' \cdot \mathbf{v}') \cdot \mathbf{u}'}{1 - \frac{\mathbf{u}' \cdot \mathbf{v}'}{c^2}}, \quad (2.40)$$

kde ovšem  $\mathbf{u}' = -\mathbf{u}$ .

Abychom přešli na pravé straně ( 2.40 ) k rychlostem částic  $\mathbf{u}$  a  $\mathbf{v}$  uvnitř laboratorní soustavy, použijeme pomalé transformace rychlostí ( 2.25 ), opět se záměnou  $\mathbf{v} \rightarrow \mathbf{u}$  ,  $\mathbf{u} \rightarrow \mathbf{v}$  ,  $\mathbf{u}' \rightarrow \mathbf{v}'$  :

$$\mathbf{v}' = \frac{\mathbf{v} - \mathbf{u}}{1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2}} . \quad ( 2.41 )$$

Po dosazení do ( 2.40 ), zanedbání veličin řádu  $\frac{u^2}{c^2}$  a úpravě najdeme

$$\begin{aligned} \mathbf{F} &= \left[ \mathbf{F}' + \frac{1}{c^2} \left( \mathbf{F}' \cdot \frac{\mathbf{v} - \mathbf{u}}{1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2}} \right) \cdot \mathbf{u} \right] \cdot \left[ 1 + \frac{\mathbf{u}(\mathbf{v} - \mathbf{u})}{c^2 \left( 1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \right)} \right]^{-1} = \\ &= \mathbf{F}' \left( 1 - \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \right) + \frac{\mathbf{F}' \cdot \mathbf{v}}{c^2} \cdot \mathbf{u} = \mathbf{F}' + \frac{1}{c^2} [\mathbf{u}(\mathbf{F}' \cdot \mathbf{v}) - \mathbf{F}'(\mathbf{u} \cdot \mathbf{v})] = \quad ( 2.42 ) \\ &= \mathbf{F}' + \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times (\mathbf{u} \times \mathbf{F}') . \end{aligned}$$

Dosadíme nyní za  $\mathbf{F}'$  Coulombovu sílu ( 2.38 ).

Rozdíl polohových vektorů upravíme pomocí pomalých Lorentzových transformací ( 2.10 ).

Při tom předpokládáme, že v soustavě  $\Sigma'$ , kde náboj  $Q_1$  vytváří statické pole, určujeme polohu obou nábojů současně ( $t'_{Q_1} = t'_{Q_2}$ ).

S přesností na veličiny řádu  $\frac{u^2}{c^2}$  tedy máme

$$\mathbf{R}' = \mathbf{r}'_{Q_2} - \mathbf{r}'_{Q_1} = \mathbf{r}_{Q_2} - \mathbf{r}_{Q_1} - \mathbf{u}(t_{Q_2} - t_{Q_1}) = \mathbf{R} - \frac{u^2}{c^2} \mathbf{R}' = \mathbf{R} . \quad ( 2.43 )$$

Konečný výsledek pro sílu  $\mathbf{F}$  mezi dvěma bodovými pohybujícími se náboji dostáváme tedy ve tvaru

$$\mathbf{F} = Q_2 \left[ \frac{Q_1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{R}}{R^3} + \mathbf{v} \times (\mathbf{u} \times \mathbf{R}) \frac{Q_1}{4\pi\epsilon_0 c^2 R^3} \right]. \quad (2.44)$$

Všimněme si nejdříve prvního členu na pravé straně ( 2.44 ), který vyjadřuje tu část síly  $\mathbf{F}$ , jež nezávisí na rychlosti  $\mathbf{v}$  náboje  $Q_2$ . Tento člen určuje rovněž i sílu působící na náboj  $Q_2$ , je-li jeho rychlost  $\mathbf{v}$  vůči laboratorní soustavě nulová, jakožto výsledek působení elektrického pole vytvářeného pohybujícím se nábojem  $Q_1$ . Pro jeho intenzitu podle ( 2.44 ) dostáváme

$$\mathbf{E}_0(\mathbf{r}_{Q_2}) = \frac{\mathbf{F}}{Q_2} = \frac{Q_1}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{R}}{R^3}. \quad (2.45)$$

Pole  $\mathbf{E}_0$  nelze ztotožňovat se statickým Coulombovým polem, neboť v časové závislosti polohového vektoru  $\mathbf{R}$  je implicitně obsažena i časová závislost  $\mathbf{E}_0$ .

Z tvaru ( 2.45 ) je zřejmé, že pro pole  $\mathbf{E}_0$  platí v každém okamžiku Gaussův zákon.

Tedy pro každou uzavřenou plochu  $S$  klidovou vůči soustavě  $\Sigma$ , obklopující v daném okamžiku náboj  $Q$ , platí

$$\oint_S \mathbf{E}_0 \cdot d\mathbf{S} = \frac{Q_1}{\epsilon_0}. \quad (2.46)$$

V případech, kdy lze zavést objemovou hustotu náboje, platí rovněž diferenciální tvar

$$\operatorname{div} \mathbf{E}_0 = \frac{\rho_0}{\epsilon_0}. \quad (2.47)$$

Z tvaru ( 2.45 ) rovněž vyplývá, že pole  $E_0$  je v každém okamžiku potenciálové, tj. v každém bodě platí

$$\operatorname{rot} \mathbf{E}_0 = 0. \quad (2.48)$$



Na druhé straně z jeho časové závislosti plyne, že nabitá částice, která v něm vykoná pohyb po uzavřené dráze konečnou rychlostí, může obecně vykonat nenulovou práci.

Použitím označení podle ( 2.45 ) lze vztah ( 2.44 ) přepsat do přehlednějšího tvaru

$$\mathbf{F} = Q_2 \left[ \mathbf{E}_0 + \frac{1}{c^2} \cdot \mathbf{v} \times (\mathbf{u} \times \mathbf{E}_0) \right]. \quad ( 2.49 )$$

Druhý člen napravo reprezentuje nový typ silového působení mezi pohybujícími se náboji, které závisí na rychlosti  $\mathbf{v}$  zkušebního náboje  $Q_2$ .

Zavedeme-li nový typ vektorového pole

$$\mathbf{B}_0(\mathbf{r}_{Q_2}) = \frac{1}{c^2} (\mathbf{u} \times \mathbf{E}_0), \quad ( 2.50 )$$

Dostaneme namísto ( 2.49 ) tvar

$$\mathbf{F} = Q_2 (\mathbf{E}_0 + \mathbf{v} \times \mathbf{B}_0), \quad ( 2.51 )$$

známý jako **Lorentzova síla**.

Veličina  $\mathbf{B}_0$  Charakterizuje tzv. magnetické pole a nazývá se magnetickou indukcí.

Podobně jako pole elektrické, můžeme i magnetické pole charakterizovat indukčními čarami, které mají tu vlastnost, že vektor magnetické indukce v daném bodě leží ve směru tečny k indukční čáře jdoucí tímto bodem a jeho orientace souhlasí se směrem orientace indukční čáry.

Hustotu toku indukčních čar je možno normovat tak, aby se rovnala velikosti vektoru magnetické indukce.

Vypočteme-li  $\text{div } \mathbf{B}_0$  z ( 2.50 ) dostaneme vzhledem k ( 2.48 )

$$\text{div } \mathbf{B}_0 = \frac{1}{c^2} \text{div } (\mathbf{u} \times \mathbf{E}_0) = \frac{1}{c^2} (\mathbf{E}_0 \cdot \text{rot } \mathbf{u} - \mathbf{u} \cdot \text{rot } \mathbf{E}_0) = 0. \quad ( 2.52 )$$

Znamená to, že magnetické indukční čáry nemají zdroje a musí se buď uzavírat samy do sebe, nebo začínat a končit v nekonečnu.

Takové pole nazýváme solenoidálním.

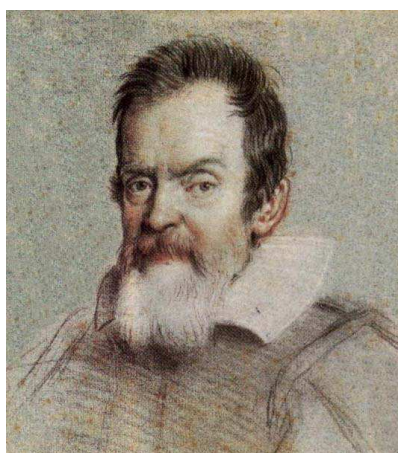
Jak ukázal P. A. M. Dirac, relativistická kvantová mechanika připouští možnost existence tzv. magnetických monopolů, tj. magnetických nábojů které jsou zdrojem indukčních čar.

Jejich existence však nebyla dosud experimentálně potvrzena.

Aplikujeme-li operaci rotace na definiční vztah ( 2.50 ), zjistíme s ohledem na ( 2.47 ), že *rot*  $\mathbf{B}_0$  je obecně různá od nuly, tj. magnetické pole není potenciální.

Při celkovém hodnocení získaných výsledků tedy vidíme, že při malé rychlosti, kdy můžeme zanedbat faktor  $\frac{u^2}{c^2}$  proti jedničce, vede použití

Lorentzovy transformace v případě elektrického pole ke stejnému výsledku, jako použití klasické Galileiho transformace, podle níž  $\mathbf{F} = \mathbf{F}'$ .



Galileo Galilei (1564 – 1642)

Na druhé straně však i při těchto malých rychlostech má použití Lorentzovy transformace za následek objevení se nového členu reprezentujícího působení magnetického pole, ve výrazu ( 2.51 ) pro sílu.

Uvažujme nyní případ, kdy se náboj  $Q_1$  pohybuje libovolnou rychlostí  $u < c$ .

Zabývejme se nejprve pouze elektrostatickou interakcí, tj. působením pohybujícího se náboje  $Q_1$  na nehybný zkušební náboj  $Q_2$ .

K tomuto účelu použijeme jednoduchý myšlenkový experiment využívající efektu relativistické kontrakce délek.

Mějme pro určitost dvě inerciální souřadné soustavy  $\Sigma$  a  $\Sigma'$ , přičemž  $\Sigma'$  se vůči laboratorní soustavě  $\Sigma$  pohybuje rychlostí  $v$  ve směru osy  $x$  (viz obr. 2.3).

Mějme nyní rozlehlý deskový kondenzátor nehybný v soustavě  $\Sigma'$  s rovinami desek rovnoběžnými s rovinou  $x', y'$ .

V soustavě  $\Sigma'$  bude mezi deskami kondenzátoru existovat homogenní elektrické pole ve směru osy  $z'$  o velikosti

$$E' = \frac{\sigma'}{\varepsilon_0}, \quad (2.53)$$

kde  $\sigma'$  je plošná hustota náboje na deskách kondenzátoru.

Přejdeme-li nyní do soustavy  $\Sigma$ , bude se zde kondenzátor pohybovat rychlostí  $v$  a jeho rozměry ve směru osy  $x$  se zkrátí faktorem  $\gamma^{-1}$ .

V témže poměru se tedy zmenší plocha desek kondenzátoru, a protože celkový náboj na deskách kondenzátoru zůstává neměnný, vzroste hustota náboje z  $\sigma'$  na

$$\sigma = \sigma' \cdot \gamma. \quad (2.54)$$

Vzniká samozřejmě otázka, zda i v laboratorní soustavě souřadnic zůstane zachován směr siločar pole rovnoběžný s osou  $z$ .

Symetrie pohybu připouští eventuální vznik podélné složky pole ve směru osy  $x$ .

Avšak vzhledem k tomu, že pole uvnitř kondenzátoru je superpozicí polí dvou opačně nabitých rovinných desek, lze očekávat, že by se takové případné podélné složky pole vzájemně vykompenzovaly.

Tedy i v soustavě  $\Sigma$  budeme mít homogenní pole ve směru osy  $z$  o

$$\text{velikosti } E = \frac{\sigma}{\varepsilon_0}.$$

Díky lorentzovské kontrakci desek tedy siločáry pole zhoustnou a máme

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}' \cdot \gamma. \quad (2.55)$$

Budeme-li nyní orientovat desky kondenzátoru rovnoběžně s rovinou  $x', z'$  uvidíme, že tatáž změna nastane i s vektorem intenzity pole orientovaným ve směru osy  $y'$ .

Naproti tomu, budou-li desky kondenzátoru orientovány rovnoběžně s rovinou  $y', z'$ , projeví se v laboratorní soustavě  $\Sigma$  zkrácení délek jako sblížení desek kondenzátoru a tato změna nemá vliv na hustotu siločar pole, a tedy ani na vektor jeho intenzity ve směru osy  $x$ .

Tímto názorným způsobem jsme dospěli k závěru, že mezi složkami elektrostatického pole a složkami elektrického pole nábojů pohybujících se ve směru osy  $x$  rovnoměrně libovolnou rychlostí  $v$  platí transformační vztahy

$$E_x = E'_x \quad ; \quad E_y = \gamma \cdot E'_y \quad ; \quad E_z = \gamma \cdot E'_z. \quad (2.56)$$

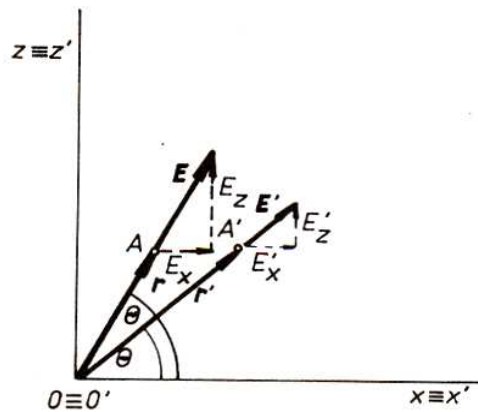
Mějme nyní bodový náboj  $Q$  pohybující se rovnoměrně rychlostí  $\mathbf{u}$ .

S tímto nábojem spojíme počátek inerciální soustavy souřadnic pohybující se podle obr. 2.3 a osu  $x$  namíříme ve směru  $\mathbf{u} = \mathbf{v}$ .

Protože elektrické pole tohoto náboje bude zřejmě osově symetrické vzhledem k ose  $x$ , budeme vyšetřovat pouze jeho složky v rovině  $x, z$ . Vzhledem k rovnoměrnému pohybu náboje  $Q$  je lhostejné, ve kterém okamžiku budeme pole vyšetřovat.

Můžeme proto s výhodou zvolit okamžik  $t = t' = 0$ , kdy počátky obou soustav  $\Sigma$  a  $\Sigma'$  vzájemně splývají (viz obr. 2.4).

Obr. 2.4



K výpočtu intenzity elektrického pole bodového náboje pohybujícího se rovnoměrně libovolnou rychlostí

Přitom můžeme použít zjednodušené Lorentzovy transformace ( 2.7 ), kde položíme  $t = 0$ , kdy nám počátky obou soustav splývají. V soustavě  $\Sigma'$  vytváří náboj statické Coulombovo pole o složkách

$$E_x = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\cos \Theta'}{r'^2} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{x'}{r'^3} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma \cdot x}{r'^3}, \quad (2.57)$$

$$E'_z = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\sin \Theta'}{r'^2} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{z'}{r'^3} = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{z}{r'^3}.$$

Pro složky  $E_x, E_z$  pak podle ( 2.56 ) a ( 2.57 ) platí

$$E_x = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma \cdot x}{r'^3}, \quad (2.58)$$

$$E_z = \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\gamma \cdot z}{r'^3},$$

čili

$$\frac{E_z}{E_x} = \frac{z}{x}. \quad (2.59)$$

Získáme tak důležitý poznatek, že elektrické pole přímočaře se pohybujícího bodového náboje zůstává radiální a že jeho siločáry leží v přímkách procházejících tímto nábojem.

Zbývá určit rozložení hustoty těchto siločar v prostoru, neboli velikost vektoru  $\mathbf{E}$ .

Po jednoduché matematické úpravě a substituci  $\frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \rightarrow k$  dostáváme

$$\begin{aligned} E^2 &= k^2 \gamma^2 \frac{x^2 + z^2}{r'^6} = k^2 \gamma^2 \frac{x^2 + z^2}{\left[(\gamma \cdot x)^2 + z^2\right]^3} = \frac{k^2}{\gamma^4} \frac{x^2 + z^2}{\left(x^2 + z^2 - \beta^2 \cdot z^2\right)^3} = \\ &= k^2 \frac{(1 - \beta^2)^2}{\left(x^2 + z^2\right)^2 \left(1 - \frac{\beta^2 \cdot z^2}{x^2 + z^2}\right)^3} = k^2 \frac{(1 - \beta^2)^2}{r^4 (1 - \beta^2 \cdot \sin^2 \Theta)^3}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

Směr siločar je přitom vyjádřen úhlem  $\Theta$  pro nějž platí

$$\operatorname{tg} \Theta = \frac{z}{x} = \gamma \frac{z'}{x'} = \gamma \cdot \operatorname{tg} \Theta'. \quad (2.61)$$

Siločáry se tedy v prostoru natáčejí jako pevné tyčky.

Vektor intenzity elektrického pole  $\mathbf{E}$  můžeme tedy podle (2.60) napsat jako

$$\mathbf{E} = \frac{1 - \beta}{(1 - \beta^2 \cdot \sin^2 \Theta)^{3/2}} \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{r}}{r^3}, \quad (2.62)$$

anebo v případě obecné polohy náboje  $Q$  jako

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}_q) = \frac{1 - \beta}{(1 - \beta^2 \cdot \sin^2 \Theta)^{3/2}} \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{R}}{R^3}, \quad (2.63)$$

kde vektor průvodiče  $\mathbf{R} = \mathbf{r}_q - \mathbf{r}_Q$ ,  $\mathbf{r}_Q$  je polohový vektor bodu, v němž elektrické pole určujeme pomocí zkušební náboje  $q$ .

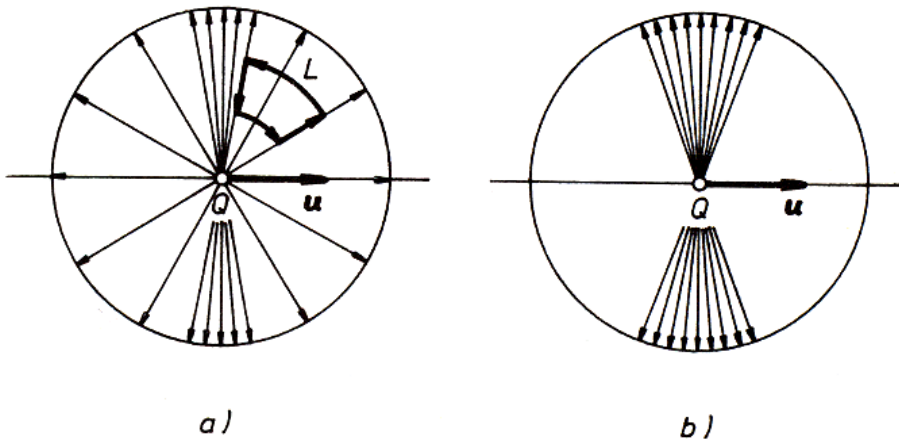
Náboj, který se pohybuje libovolnou relativistickou rychlostí, vytváří tedy elektrické pole, které se liší od pole  $\mathbf{E}_0$  daného ( 2.45 ) faktorem

$$\Gamma = \frac{1 - \beta}{(1 - \beta^2 \cdot \sin^2 \Theta)^{3/2}} = \frac{1 - \beta^2}{\left[ 1 - \left( \frac{\mathbf{u} \times \frac{\mathbf{R}}{R}}{c} \right)^2 \right]^{3/2}}, \quad ( 2.64 )$$

zvaným **Heavisideův faktor**.

Pole  $\mathbf{E} = \Gamma \cdot \mathbf{E}_0$  narozdíl od pole  $\mathbf{E}_0$  pomalu se pohybujícího náboje, již tedy není sféricky symetrické, ale závisí kromě vzdálenosti též na úhlu, jež svírá průvodič se směrem pohybu náboje, viz obr. 2.5.

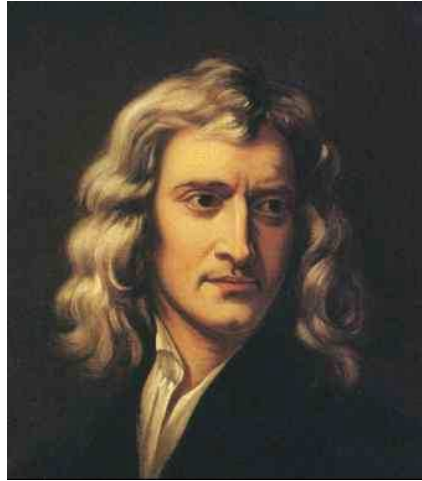
Obr. 2.5



Siločáry elektrického pole bodového relativistického a) a ultrarelativistického b) náboje

Čím více se blíží rychlost nabitě částice rychlosti světla, tím více se siločáry zhušťují ve směru kolmém ke směru pohybu.

Porovnáme-li nyní výše diskutované případy působení nehybného náboje na pohyblivý a naopak, zjistíme, že zde není splněn třetí Newtonův zákon.



Isaac Newton (1643 – 1727)

Nehybný náboj totiž působí na pohyblivý silou  $\mathbf{F} = \mathbf{E}(\mathbf{r}) \cdot q$ , kde pole  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  je Coulombovo, zatímco pohybující se náboj působí na nehybný náboj silou téhož tvaru, v němž však obecně vystupuje pole ( 2.63 ). Jen při malých rychlostech přechází toto pole na tvar ( 2.45 ).

Porušení Newtonova třetího zákona je důsledkem relativity současnosti měření obou sil v soustavách, jež se vůči sobě navzájem pohybují.

Přestože elektrické pole pohybujícího se náboje nemá již siločáry rozloženy středově symetricky a nemá tedy coulombovský tvar, měl by v důsledku invariance velikosti náboje vůči pohybu, zůstat nadále v platnosti Gaussův zákon ( 2.46 ).

Přesvědčme se o tom.

Budeme nejprve uvažovat Gaussovu plochu ve tvaru kulové plochy  $S_k$  poloměru  $r_0$  nehybné v soustavě  $\Sigma$ , v okamžiku, kdy se náboj  $Q$  nachází v jejím středu  $C$ .

Vektor  $\mathbf{E}$  má v tomto případě stále směr normály ke kulové ploše, takže pro celkový tok intenzity platí

$$\phi = \oint_{S_k} \mathbf{E} \, d\mathbf{S} = \oint_{S_k} E \, dS, \quad ( 2.65 )$$

kam za  $\mathbf{E}$  musíme dosadit ( 2.62 ).

Pro výpočet integrálu zavedeme sférické souřadnice  $r, \Theta, \varphi$ , vztažené ke středu koule.



Souřadnice  $r$  představuje vzdálenost od středu  $C$ , úhel  $\Theta$  je úhlem, který svírá průvodič se směrem pohybu náboje (osou  $x$ ) a úhel  $\varphi$  je polární úhel v rovině kolmé ke směru pohybu a procházející středem  $C$ .

Vzhledem k osové symetrii úlohy intenzita pole na úhlu  $\varphi$  nezávisí a je funkcí pouze souřadnic  $r$  a  $\Theta$ .

Máme tedy

$$\begin{aligned}
 \phi &= \oint_{S_k} \mathbf{E} \, d\mathbf{S} = \int_{S_k} \Gamma \frac{Q}{4\pi\epsilon_0 r_0^2} r_0^2 \sin \Theta \, d\Theta d\varphi = \\
 &= \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \frac{(1-\beta^2) \sin \Theta}{(1-\beta^2 \sin^2 \Theta)^{3/2}} d\Theta = \\
 &= \frac{Q}{2\epsilon_0} \int_0^\pi \Gamma \sin \Theta \, d\Theta \stackrel{\cos \Theta \mapsto t}{=} \frac{Q}{2\epsilon_0} \int_{-1}^1 \frac{\sqrt{1-t^2} (1-\beta^2)}{(1-\beta^2 + \beta^2 t^2)^{3/2}} dt = \quad (2.66) \\
 &= \frac{Q}{2\epsilon_0} \frac{1}{\beta} \left[ \frac{\beta^2 t}{1-\beta^2(1-t^2)} \right]_{-1}^1 = \frac{Q}{\epsilon_0}.
 \end{aligned}$$

Uvažujme nyní případ, kdy se pohybuje jak náboj  $Q$ , tak i zkušební náboj  $q$ , a to různými konstantními rychlostmi.

Použijeme-li namísto pomalých Lorentzových transformací ( 2.37 ), ( 2.25 ) přesné transformace ( 2.23 ) a ( 2.23 ), dostaneme jako výsledek opět sílu tvaru ( 2.49 ) resp. ( 2.51 ), tedy Lorentzovu sílu.

$$\mathbf{F} = q \left[ \mathbf{E} + \frac{1}{c^2} \cdot \mathbf{v} \times (\mathbf{u} \times \mathbf{E}) \right] = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}). \quad (2.67)$$

Na místě elektrického pole zde však již nevystupuje pole Coulombova typu ( 2.45 ) nýbrž elektrické pole náboje  $Q$  pohybujícího se libovolnou konstantní rychlostí  $\mathbf{u}$  ( 2.63 ).

$$\mathbf{E} = \Gamma \mathbf{E}_0 = \Gamma \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Q}{R^3} \mathbf{R}. \quad (2.68)$$

Vztah mezi elektrickým a magnetickým polem typu ( 2.50 ) se přitom ukazuje být obecně platným, a platí tedy

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c^2} (\mathbf{u} \times \mathbf{E}). \quad (2.69)$$

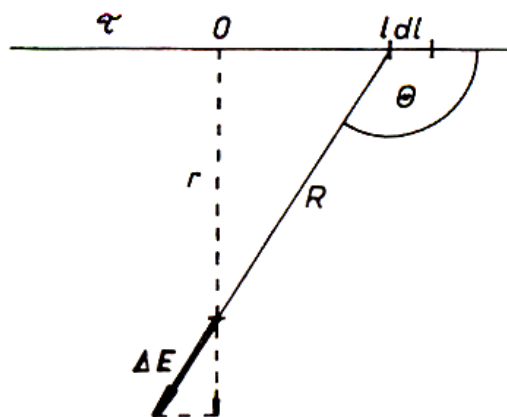
Vztahů ( 2.68 ), ( 2.69 ) použijeme k výpočtu elektrického a magnetického pole nekonečně dlouhého homogenního paprsku nábojů pohybujících se rychlostí  $u$ .

Zavedeme-li lineární hustotu náboje  $\tau$  v tomto paprsku, můžeme použít vztahu ( 2.68 ) pro vyjádření příspěvku  $\Delta \mathbf{E}$  k celkovému poli v daném bodě, který vzbudí krátký úsek paprsku nesoucí náboj  $\Delta Q = \tau \cdot \Delta l$ :

$$\Delta \mathbf{E} = \Gamma \frac{\tau}{4\pi\epsilon_0} \frac{\mathbf{R}}{R^3} \Delta l. \quad (2.70)$$

Celkovou intenzitu  $\mathbf{E}$  pak dostaneme integrací přes celou délku paprsku. Přitom opět stačí uvažovat pouze projekce do směru kolmého k paprsku.

Obr. 2.6



K odvození intenzity elektrického pole přímého nábojového paprsku

Podle obr. 2.6 máme

$$l = -r \cdot \cotg \Theta, \quad dl = \frac{r}{\sin^2 \Theta} d\Theta, \quad R = \frac{r}{\sin \Theta}, \quad (2.71)$$

a tedy s použitím ( 2.66 )

$$E = \frac{\tau}{4\pi\epsilon_0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\Gamma \cdot \sin \Theta}{R^2} dl = \frac{\tau}{4\pi\epsilon_0} \int_0^{\pi} \Gamma \cdot \sin \Theta d\Theta = \frac{\tau}{2\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.72)$$

Obdobným způsobem bychom mohli vypočít i magnetickou indukci. Uvážíme-li však, že rychlost jednotlivých elementů  $\mathbf{u}$  je vždy rovna intenzitě  $\mathbf{E}$ , můžeme použít vztahu ( 2.69 ), a tak získat přímo

$$B = \frac{\mu_0}{2\pi} \frac{u\tau}{r}. \quad (2.73)$$

Nábojový paprsek vytváří tedy stacionární elektrické a magnetické pole. Intenzita elektrického pole je totožná s intenzitou elektrostatického pole nabitě přímky při téže lineární hustotě náboje. Magnetické pole má směr kolmý k rovině paprsku a průvodiče do daného bodu.

Uvažujme nyní dvojici nekonečně dlouhých rovnoběžných nábojových paprsků o vzájemné vzdálenosti  $r$ , s lineárními nábojovými hustotami  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  a rychlostmi  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$ .

Na nábojový element  $\tau_2 \cdot \Delta l$  druhého paprsku bude působit elektrická síla  $\mathbf{E} \cdot \tau_2 \cdot \Delta l$ , kde  $\mathbf{E}$  je intenzita elektrického pole podle ( 2.72 ).

Na jednotku délky druhého paprsku bude tedy působit elektrická síla  $f_e$  :

$$f_e = \frac{\tau_1 \tau_2}{2\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.74)$$

Podobně lze spočítat podle ( 2.67 ) i magnetickou sílu, použijeme-li pro magnetickou indukci v místě druhého paprsku výsledek ( 2.73 ). Jelikož vektor  $\mathbf{B}$  je kolmý na společnou rovinu obou paprsků, bude mít magnetická síla  $f_m$  působící na jednotku délky druhého paprsku velikost

$$f_m = \frac{\mu_0}{2\pi} \frac{|\tau_1 u_1| \cdot |\tau_2 u_2|}{r} \quad ( 2.75 )$$

a oba paprsky se budou přitahovat nebo odpuzovat touto silou v závislosti na souhlasnosti znaménka součinů  $\tau_1 u_1$ ,  $\tau_2 u_2$  .

Například, budou-li mít oba paprsky souhlasná znamení nábojů i souhlasnou orientaci rychlostí  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$ , bude elektrická síla paprsky odpuzovat a magnetická síla je bude přitahovat.

Velikost obou typů sil je v poměru

$$\frac{f_m}{f_e} = \frac{u_1 u_2}{c^2} . \quad ( 2.76 )$$

není bez zajímavosti, že výraz pro celkovou sílu působící mezi dvěma paprsky lze získat bez zavádění pojmu magnetického pole, pouze jako důsledek relativistického efektu kontrakce délek.

Mějme pro určitost opět souhlasné znaménko  $\tau_1$ ,  $\tau_2$  a souhlasný směr rychlostí  $\mathbf{u}_1$ ,  $\mathbf{u}_2$  a zvolme směr odpudivé síly jako kladný.

Přejdeme do soustavy  $\Sigma'$  pohybující se spolu s náboji druhého paprsku rychlostí  $\mathbf{u}_2$  .

V této soustavě působí na druhý paprsek zřejmě pouze elektrické síly a platí

$$f'_e = \frac{\tau'_1 \tau'_2}{2\pi \epsilon_0 r} , \quad ( 2.77 )$$

kde  $\tau'_1$ ,  $\tau'_2$  jsou lineární hustoty nábojů v soustavě  $\Sigma'$  .

Přejdeme nyní zpět do laboratorní soustavy. Pro příčnou složku síly připadající na jednotku délky v podélném směru přitom platí  $f = f'$  .

Zbývá přetransformovat lineární hustoty náboje  $\tau_1'$ ,  $\tau_2'$  do laboratorní soustavy.

Můžeme k tomu použít vztahů analogických ( 2.54 ), který však platí pouze pro přechod mezi laboratorní soustavou  $\Sigma$  a klidovou soustavou  $\Sigma'$ .

Podle tohoto vztahu  $\tau_2' = \tau_2 / \gamma_2$ .

Náboje prvního paprsku se obecně pohybují v obou soustavách a to rychlostmi  $\mathbf{u}_1$  a  $\mathbf{u}_1'$ .

Musíme proto přejít nejprve od klidové soustavy prvního paprsku  $\Sigma''$  ( $\tau_1'' = \tau_1 / \gamma_1$ ) a odtud do soustavy  $\Sigma'$ , kde  $\tau_1' = \tau_1'' \gamma_1' = \tau_1 \gamma_1' / \gamma_1$ .

Výsledná síla na jednotku délky druhého paprsku v laboratorní soustavě je tedy

$$f = f_e' = \frac{\tau_1' \tau_2'}{2\pi\epsilon_0 r} = \frac{\tau_1 \tau_2}{2\pi\epsilon_0 r} \frac{\gamma_1'}{\gamma_1 \gamma_2}. \quad ( 2.78 )$$

Dosadíme-li

$$\gamma_1 = \left(1 - \frac{u_1^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad \gamma_2 = \left(1 - \frac{u_2^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad \gamma_1' = \left(1 - \frac{u_1'^2}{c^2}\right)^{-\frac{1}{2}}, \quad ( 2.79 )$$

dostaneme po úpravě

$$f = \frac{\tau_1 \tau_2}{2\pi\epsilon_0 r} \left(1 - \frac{u_1 u_1}{c^2}\right). \quad ( 2.80 )$$

První člen zde odpovídá elektrické síle ( 2.74 ), druhý magnetické síle ( 2.75 ).

Z ( 2.76 ) je zřejmé, že magnetické síly mezi nábojovými paprsky v případě pomalu se pohybujících nábojů  $u_1 \ll c$ ,  $u_2 \ll c$  představují jen malou relativistickou opravu k silám elektrickým.

Můžeme si však představit složitější struktury, v nichž budou převládat síly magnetické.

Uvažujme například kladné a záporné náboje téže velikosti s lineární hustotou  $\tau$  rovnoměrně rozložené na přímce.

Jsou-li oba druhy náboje v klidu, bude tato přímka elektricky neutrální.

Představme si nyní, že náboje jednoho znaménka, např. záporné, se začnou pohybovat rychlostí  $\mathbf{u}$ .

Podle zákona o kontrakci délek vzroste lineární hustota záporných nábojů na  $-\gamma\tau$  a přímka se stane nabitou s hustotou  $\tau(1 - \gamma)$ .

Máme-li nyní dvě takové, pro jednoduchost identické rovnoběžné přímky ve vzdálenosti  $r$ , budou na sebe působit elektrickou silou

$$f_e = \frac{\tau^2(1-\gamma)^2}{2\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.81)$$

Abychom určili celkovou sílu působící na jednotku délky druhé přímky, musíme určit zvlášť sílu působící na kladné a záporné náboje. Na kladné náboje působí zřejmě síla

$$f = \frac{\tau^2(1-\gamma)}{2\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.82)$$

Přejdeme-li do klidové soustavy záporných nábojů druhé přímky, zjistíme, že na ně působí ze strany první přímky táž síla.

Výsledná celková síla na jednotku délky druhé přímky bude, jak víme, táž i v laboratorní soustavě, takže dostáváme

$$f = 2 \frac{\tau^2(1-\gamma)}{2\pi\epsilon_0 r}. \quad (2.83)$$

Srovnáním ( 2.82 ) a ( 2.83 ) zjistíme, že celková přitažlivá síla ( 2.83 ) je mnohem větší než nepatrná odpudivá síla elektrická ( 2.82 ).

V prvním přiblížení je celková síla  $f$  silou magnetickou:

$$f = \frac{\tau^2}{\pi\epsilon_0 r} \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1-\beta^2}} \right) \approx -\frac{\mu_0}{2\pi} \frac{u^2 \tau^2}{r} = -\frac{\mu_0}{2\pi} \frac{I^2}{r}. \quad (2.84)$$

Mějme nyní rovinu nabitou s plošnou hustotou náboje  $\sigma$ , přičemž všechny náboje se pohybují touž konstantní rychlostí  $\mathbf{u}$ .

Rovinu lze rozdělit na úzké přímé proužky šířky  $\Delta l$  rovnoběžné se směrem pohybu nábojů.



André-Marie Ampère (1775 – 1836)

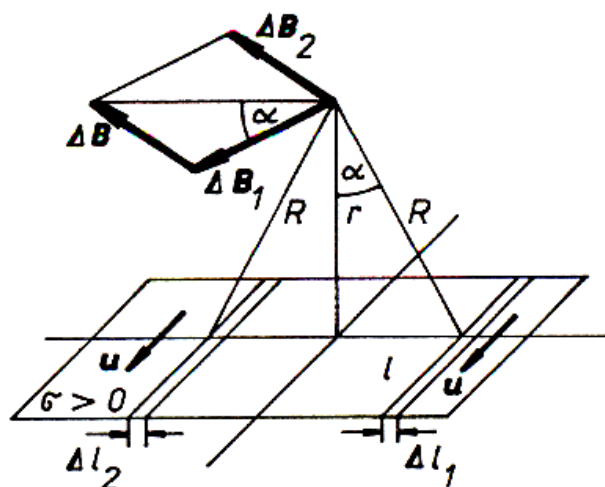
Každý takový proužek můžeme považovat za přímý nábojový paprsek o lineární hustotě  $\tau = \sigma \Delta l$  a pole jím vytvořené popsat coby pole nábojového paprsku, dle předchozích příkladů.

Superpozicí elektrického pole těchto nábojových paprsků zjistíme, že elektrické pole této roviny je konstantní, kolmé k rovině a rovnou

$$E = \frac{\sigma}{2\epsilon_0}. \quad (2.85)$$

Určíme nyní magnetické pole této roviny. Můžeme například uvažovat vždy dvojice proužků symetricky umístěných vůči patě kolmice spuštěné z daného bodu mimo rovinu a zjistíme, že příspěvek k magnetickému poli od takové dvojice je rovnoběžný s rovinou (viz obr. 2.7).

Obr. 2.7



K odvození magnetické indukce plošného rovinného proudu

Z téhož obrázku najdeme vztahy

$$l = r \cdot \tan \alpha,$$

$$dl = \frac{r \cdot d\alpha}{\cos^2 \alpha},$$

$$R = \frac{r}{\cos \alpha},$$

( 2.86 )

$$\Delta B = 2 \cos \alpha \cdot \frac{\mu_0 \sigma u}{2\pi R} \Delta l.$$

Integrováním pak zjistíme výsledné magnetické pole:

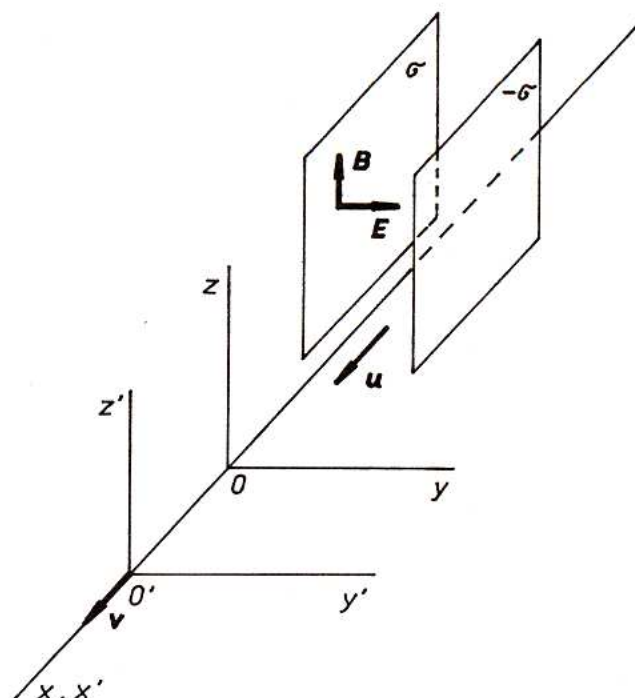
$$B \frac{\mu_0 \sigma u}{\pi} \int_0^{\pi/2} d\alpha = \frac{\mu_0 \sigma u}{\pi}.$$

( 2.87 )

Podívejme se nyní, jak se transformují složky elektrického a magnetického pole při přechodu od jedné inerciální soustavy ke druhé. Použijme opět naši představu pohyblivého kondenzátoru z jedné z předchozích úloh, znázorněnou na obr. 2.8.



Obr. 2.8



K odvození transformačních vztahů pro složky intenzity elektrického pole a magnetické indukce

Předpokládejme, že kondenzátor se pohybuje ve směru osy  $x$  konstantní rychlostí  $\mathbf{u}$  v soustavě  $\Sigma$ , resp.  $\mathbf{u}'$  v soustavě  $\Sigma'$ . Můžeme jej tedy považovat za soustavu dvou rovin tvořených nábojovými paprsky s opačným znaménkem náboje. Budeme-li v soustavě  $\Sigma$  superponovat elektrická pole ( 2.78 ) a magnetická pole ( 2.87 ) těchto dvou rovin, zjistíme, že vektor intenzity elektrického pole  $\mathbf{E}$  je orientován ve směru osy  $y$  a má velikost

$$E = \frac{\sigma}{\epsilon_0}, \quad (2.88)$$

vektor magnetické indukce  $\mathbf{B}$  je orientován ve směru osy  $z$  a má velikost

$$B = \mu_0 \sigma u. \quad (2.89)$$

Stejný obraz ovšem budeme pozorovat i v soustavě  $\Sigma'$ , pouze s tím rozdílem, že musíme dosadit čárkované hodnoty  $\sigma'$ ,  $u'$ . Podle relativistického zákona skládání rychlostí ( 2.24 ) dostaneme

$$u' = \frac{u - v}{1 - \frac{uv}{c^2}}, \quad \beta'_u = \frac{\beta_u - \beta}{1 - \beta_u \beta}, \quad (2.90)$$

$$\text{kde } \beta = \frac{v}{c}, \quad \beta_u = \frac{u}{c}, \quad \beta'_u = \frac{u'}{c}.$$

Abychom určili  $\sigma'$ , musíme nejprve přejít ze soustavy  $\Sigma$  do klidové soustavy kondenzátoru  $\Sigma''$  (pohybující se vůči laboratorní soustavě rychlostí  $u$ ) a najít zde  $\sigma'' = \frac{\sigma}{\gamma_u}$ .

Z této soustavy pak přejdeme do soustavy  $\Sigma'$ , kde bude

$$\begin{aligned} \sigma' &= \frac{\gamma'_u \cdot \sigma}{\gamma_u} = \frac{\sigma}{\gamma_u} \frac{1}{\sqrt{1 - \beta'^2_u}} = \frac{\sigma}{\gamma_u} \frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{\beta_u - \beta}{1 - \beta_u \beta}\right)^2}} = \\ &= \frac{\sigma}{\gamma_u} \frac{1 - \beta_u \beta}{\sqrt{(1 - \beta^2)(1 - \beta_u^2)}} = \sigma \gamma (1 - \beta_u \beta). \end{aligned} \quad (2.91)$$

Potom

$$E'_y = \frac{\sigma'}{\varepsilon_0} = \gamma \left( \frac{\sigma}{\varepsilon_0} \frac{\beta_u \beta \sigma}{\varepsilon_0} \right) = \gamma \left( E_y - \beta c \frac{\mu_0 \sigma u}{c^2 \varepsilon_0 \mu_0} \right) = \gamma (E_y - \beta c B_z). \quad (2.92)$$

a

$$\begin{aligned}
B'_z &= \mu_0 \sigma' u' = \mu_0 \sigma \gamma c (\beta_u - \beta) = \gamma (\mu_0 \sigma u - \mu_0 \sigma v) = \\
&= \gamma \left( B_z - \frac{\sigma}{\epsilon_0} \frac{\beta}{c} \right) = \gamma \left( B_z - \frac{\beta}{c} E_y \right). \tag{2.93}
\end{aligned}$$

kdybychom nyní orientovali myšlený kondenzátor rovnoběžně s rovinou  $x, y$ , našli bychom vztahy mezi  $z$ -ovými složkami elektrického pole a  $y$ -ovými složkami magnetického pole. Podobně bychom z tohoto myšlenkového experimentu mohli usoudit, že složky  $E_x$  a  $B_x$  se při transformaci nemění. Dostáváme tedy následující obecné transformační rovnice pro složky elektrického a magnetického pole:

$$\begin{aligned}
E'_x &= E_x, & E'_y &= \gamma (E_y - \beta c B_z), & E'_z &= \gamma (E_z + \beta c B_y), \\
B'_x &= B_x, & B'_y &= \gamma \left( B_y + \frac{\beta}{c} E_z \right), & B'_z &= \gamma \left( B_z - \frac{\beta}{c} E_y \right), \tag{2.94}
\end{aligned}$$

které, jak si později ukážeme, jsou složkami jediného antisymetrického čtyřtenzoru  $\mathbf{F}_{ik}$ , zvaného **tenzor elektromagnetického pole**.

Vidíme, že složky elektrického a magnetického pole jsou zde nerozlučně spjaty transformačními vztahy.

Předpokládáme-li, že v soustavě  $\Sigma'$  jsou náboje v klidu, bude  $\mathbf{B}' = 0$  a z (2.94) nám vyplynou transformace (2.56) jako zvláštní případ. Z transformačních vztahů (2.94) dále plyne, že je-li v soustavě  $\Sigma$  pole čistě elektrické ( $2.\mathbf{B} = 0$ ), objeví se v soustavě  $\Sigma'$  magnetické pole o složkách

$$B'_x = 0, \quad B'_y = \frac{\beta}{c} E'_z, \quad B'_z = -\frac{\beta}{c} E'_y, \tag{2.95}$$

neboli, psáno vektorově

$$\mathbf{B}' = \frac{1}{c^2} \mathbf{v}' \times \mathbf{E}'. \tag{2.96}$$

Analogicky, je-li v soustavě  $\Sigma$  pole čistě magnetické (  $\mathbf{E} = 0$  ), bude v soustavě  $\Sigma'$

$$E'_x = 0, \quad E'_y = -\beta c B'_z, \quad E'_z = \beta c B'_y, \quad (2.97)$$

čili

$$\mathbf{E}' = -\mathbf{v}' \times \mathbf{B}'. \quad (2.98)$$

Pro malé rychlosti  $v \ll c$  můžeme položit  $\gamma = 1$  a transformační vztahy ( 2.94 ) zjednodušit na

$$\mathbf{E}' = \mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}, \quad \mathbf{B}' = \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \mathbf{v} \times \mathbf{E}. \quad (2.99)$$

Pomocí obecných transformací ( 2.94 ) se lze přesvědčit, že existují určité kombinace vektorů  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  a  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$ , které se při transformaci mezi dvěma inerciálními soustavami nemění.

Takové veličiny nazýváme invarianty elektromagnetického pole.

Jsou to

$$\Pi = \mathbf{E} \cdot \mathbf{B}, \quad (2.100)$$

$$\Sigma = B^2 - \frac{1}{c^2} E^2. \quad (2.101)$$

Ze vztahu ( 2.100 ) zejména plyne, že jsou-li vektory  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  v nějaké inerciální soustavě navzájem kolmé, zachovají si tuto vlastnost ve všech inerciálních soustavách.

Vyšetříme nyní obecné vlastnosti elektrického a magnetického pole jako jsou jejich rotace a divergence.

Dospějeme tak k úplnému systému rovnic popisujících vlastnosti tzv. elektromagnetického pole, tj. sjednoceného elektrického a magnetického pole.

Pro elektrické pole náboje pohybujícího se libovolnou, tedy i ultrarelativistickou rychlostí, jsme si ověřili platnost Gaussova zákona.

Pokud lze zavést objemovou hustotu náboje  $\rho$ , můžeme tento zákon vyjádřit opět i v diferenciálním tvaru

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon_0}. \quad (2.102)$$

Přesně vzato, pro divergenci pole  $\mathbf{E}$  bychom měli psát

$$\operatorname{div}\mathbf{E} = \operatorname{div}(\Gamma\mathbf{E}_0) = \mathbf{E}_0 \cdot \operatorname{grad}\Gamma + \Gamma \cdot \operatorname{div}\mathbf{E}_0. \quad (2.103)$$

Snadno se však přesvědčíme, že  $\mathbf{E}_0 \cdot \operatorname{grad}\Gamma = 0$  a objemové hustoty náboje zavedené ( 2.47 ) a ( 2.102 ) se liší normovacím koeficientem  $\Gamma$ :

$$\rho = \Gamma\rho_0. \quad (2.104)$$

Otázkou je, zda pole  $\mathbf{E}$  zůstává potenciální, tj. zda pro ně platí vztah ( 2.48 ).

Již pouhým pohledem na rozložení siločar na obr 2.5a snadno usoudíme, že toto pole potenciální není.

Bude-li se totiž nabitá částice pohybovat v tomto poli po uzavřené dráze  $l$ , vyznačené na obrázku, bude přitom vykonána nenulová práce, neboť k práci budou přispívat pouze radiální úseky této dráhy, přičemž hustota siločar a tedy i intenzita pole je na obou těchto úsecích různá.

Přímým výpočtem dostáváme

$$\operatorname{rot}\mathbf{E} = \operatorname{rot}(\Gamma\mathbf{E}_0) = \operatorname{grad}\Gamma \times \mathbf{E}_0 + \Gamma \cdot \operatorname{rot}\mathbf{E}_0 = \operatorname{grad}\Gamma \times \mathbf{E}_0. \quad (2.105)$$

Vypočteme

$$\text{grad}\Gamma = \frac{d\Gamma}{d\Theta} \text{grad}\Theta = \frac{d\Gamma}{d\Theta} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{R})\mathbf{R} - R^2\mathbf{u}}{R^3 u \cdot \sin\Theta}, \quad (2.106)$$

neboť

$$\cos\Theta = \frac{\mathbf{u} \cdot \mathbf{R}}{uR}, \quad \text{grad}(\cos\Theta) = -\sin\Theta \cdot \text{grad}\Theta. \quad (2.107)$$

Potom

$$\text{rot}\mathbf{E} = \frac{d\Gamma}{d\Theta} \frac{(\mathbf{u} \cdot \mathbf{R})\mathbf{R} - R^2\mathbf{u}}{R^2 u \cdot \sin\Theta} \times \mathbf{E}_0 = -\frac{d\Gamma}{d\Theta} \frac{c^2}{R \cdot u \cdot \sin\Theta} \mathbf{B}_0, \quad (2.108)$$

viz ( 2.67 ).

Vidíme, že vektor  $\text{rot}\mathbf{E}$  je obecně nulový a rovnoběžný s vektorem magnetické indukce  $\mathbf{B} = \Gamma\mathbf{B}_0$ .

Výraz na pravé straně ( 2.108 ) lze vyjádřit jako parciální časovou derivaci magnetického pole  $-\frac{\partial\mathbf{B}}{\partial t}$ .

Dokažme si to: elektrické a magnetické pole pohybujícího se náboje určíme v bodě o polohovém vektoru  $\mathbf{r}_q$ .

Budeme-li tento bod fixovat v prostoru, potom časová závislost pole v tomto bodě bude dána časovou závislostí vektoru

$$\mathbf{R}(t): \quad f[\mathbf{R}(t)] = f[\mathbf{r}_q - \mathbf{r}_Q(t)]. \quad (2.109)$$

Parciální časovou derivaci pole pak můžeme vyjádřit jako

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \left( \frac{d\mathbf{R}}{dt} \text{grad} \right) f = - \left( \frac{d\mathbf{r}_Q}{dt} \text{grad} \right) f = -(\mathbf{u} \cdot \text{grad}) f \quad (2.110)$$

Použijeme-li tento výsledek, můžeme psát

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -(\mathbf{u} \cdot \text{grad}) \mathbf{B} = -\mathbf{B}_0 (\mathbf{u} \cdot \text{grad} \Gamma) - (\mathbf{u} \cdot \text{grad}) \mathbf{B}_0 \quad (2.111)$$

První člen na pravé straně upravíme podle ( 2.106 ) na

$$-\mathbf{B}_0 (\mathbf{u} \cdot \text{grad} \Gamma) = -\mathbf{B}_0 \frac{d\Gamma}{d\Theta} \frac{u^2 R^2 \cos^2 \Theta - u^2 R^2}{R^3 u \cdot \sin \Theta} = \mathbf{B}_0 \frac{d\Gamma}{d\Theta} \frac{u}{R} \sin \Theta. \quad (2.112)$$

K úpravě druhého členu ( 2.111 ) použijeme vztahu

$$(\mathbf{a} \cdot \text{grad})(\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b} \times (\mathbf{a} \cdot \text{grad}) \mathbf{c} - \mathbf{c} \times (\mathbf{a} \cdot \text{grad}) \mathbf{b}. \quad (2.113)$$

Dostaneme

$$\begin{aligned} -\Gamma (\mathbf{u} \cdot \text{grad}) \mathbf{B}_0 &= -\frac{\Gamma}{c^2} (\mathbf{u} \cdot \text{grad})(\mathbf{u} \times \mathbf{E}_0) = -\frac{\Gamma}{c^2} \mathbf{u} \times (\mathbf{u} \cdot \text{grad}) \mathbf{E}_0 = \\ &= \frac{\Gamma}{c^2} \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \mathbf{u} \times (\mathbf{u} \cdot \text{grad}) \frac{\mathbf{R}}{R^3} = \\ &= -\frac{\Gamma}{c^2} \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \mathbf{u} \times \left( \frac{\mathbf{u}}{R^3} - \frac{3\mathbf{R}(\mathbf{u} \cdot \mathbf{R})}{R^5} \right) = \\ &= \frac{\Gamma}{c^2} \frac{Q}{4\pi\epsilon_0} \frac{3u \cdot \cos \Theta}{R^4} (\mathbf{u} \times \mathbf{R}) = \mathbf{B}_0 \frac{3\Gamma u}{R} \cos \Theta. \end{aligned} \quad (2.114)$$

Snadno spočteme

$$\frac{d\Gamma}{d\Theta} = 3\Gamma \frac{\beta^2 \sin \Theta \cos \Theta}{1 - \beta^2 \sin^2 \Theta} \quad (2.115)$$

a spojením výsledků ( 2.112 ) a ( 2.114 ) s ( 2.111 ) najdeme

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = \frac{u}{R} \left( \frac{d\Gamma}{d\Theta} \sin \Theta + 3\Gamma \cos \Theta \right) \mathbf{B}_0 = \frac{d\Gamma}{d\Theta} \frac{c^2}{R \cdot u \cdot \sin \Theta} \mathbf{B}_0. \quad (2.116)$$

Porovnáním ( 2.116 ) s ( 2.108 ) získáme Faradayův zákon elektromagnetické indukce:

$$\operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}. \quad (2.117)$$

Všimněme si nyní vlastností magnetického pole  $\mathbf{B}$ .



Michael Faraday (1791 – 1867)

Pro jeho divergenci dostáváme

$$\begin{aligned} c^2 \operatorname{div} \mathbf{B} &= \operatorname{div}(\mathbf{u} \times \mathbf{E}) = \mathbf{E} \operatorname{rot} \mathbf{u} - \mathbf{u} \operatorname{rot} \mathbf{E} = \\ &= -\mathbf{u} \operatorname{rot} \mathbf{E} = \mathbf{u} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial t}(\mathbf{u} \times \mathbf{B}) = 0, \end{aligned} \quad (2.118)$$

neboť vektory  $\mathbf{u}$  a  $\mathbf{B}$  jsou vždy kolmé.  
Konečně se budeme zajímat o rotaci  $\mathbf{B}$ .  
Dostáváme

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{B} &= \frac{1}{c^2} \operatorname{rot}(\mathbf{u} \times \mathbf{E}) = \\ &= \frac{1}{c^2} [\mathbf{u} \operatorname{div} \mathbf{E} - \mathbf{E} \operatorname{div} \mathbf{u} + (\mathbf{E} \operatorname{grad}) \mathbf{u} - (\mathbf{u} \operatorname{grad}) \mathbf{E}] = \quad (2.119) \\ &= \frac{1}{c^2 \varepsilon_0} \rho \mathbf{u} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \mu_0 \rho \mathbf{u} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}. \end{aligned}$$



kde konstanta  $\mu_0 = \frac{1}{c^2 \epsilon_0}$  je permeabilita vakua.

Představme si nyní soustavu nábojů, které se pohybují v soustavě  $\Sigma$  rovnoměrnými a přímočarými pohyby libovolnými rychlostmi.

Pole vytvářené touto soustavou nábojů můžeme vyjádřit coby superpozici polí jednotlivých bodových nábojů.

Podle výše získaných výsledků vyhovují výsledná vektorová pole systému rovnic

$$\text{rot } \mathbf{B} = \mu_0 \rho \mathbf{u} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad (2.120)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = \frac{\rho}{\epsilon_0} \quad (2.121)$$

$$\text{rot } \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.122)$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0, \quad (2.123)$$

popisujících obecné vlastnosti tzv. elektromagnetického pole.

Jak ukázali M. Faraday a J. C. Maxwell, platí tyto rovnice i pro případ nábojů pohybujících se zcela obecně, tj. též se zrychlením.

Vyjádríme-li nyní soustavu ( 2.120 ) – ( 2.123 ) tzv. **Maxwellových rovnic v Gaussově soustavě jednotek**, mnohé výpočty se nám tím poněkud zjednoduší:

$$\text{rot } \mathbf{B} - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = \frac{4\pi}{c} \cdot \mathbf{j} \quad (2.124)$$

$$\text{div } \mathbf{E} = 4\pi\rho \quad (2.125)$$

$$\text{rot } \mathbf{E} + \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = 0 \quad (2.126)$$

$$\text{div } \mathbf{B} = 0. \quad (2.127)$$

První dvojice Maxwellových rovnic popisuje generování elektrického a magnetického pole svými zdroji, tj. hustotou elektrického náboje  $\rho$  a proudy  $\mathbf{j}$  vystupujícími na pravé straně.

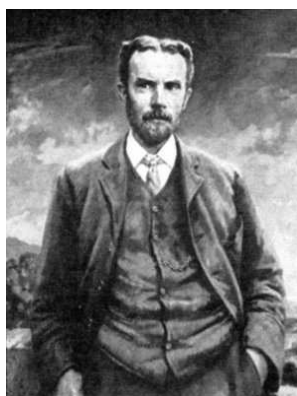
Druhá dvojice vyjadřuje další vnitřní vlastnosti pole.

Z rovnic ( 2.124 ) a ( 2.126 ) je vidět, že elektrické a magnetické pole mohou svou časovou proměnností vzájemně generovat jedno druhé.

### Tvůrci klasické elektrodynamiky



**J.C. Maxwell (1831-1879)**



**O. Heaviside (1850-1925)**



**H. Hertz (1857-1894)**

Provedeme-li divergenci první Maxwellovy rovnice a časovou derivaci druhé Maxwellovy rovnice, pak sečtením obou takto upravených rovnic obdržíme rovnici kontinuity

$$\operatorname{div} \mathbf{j} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0 . \quad ( 2.128 )$$

Aby byly Maxwellovy rovnice splnitelné, musí být vyhověno rovnici kontinuity.

Jinými slovy, elektrické náboje kolem sebe budí elektrické a magnetické pole tak, aby se samy zachovávaly.

Rovnice ( 2.125 ), ( 2.127 ) neobsahují časové derivace a mají proto charakter okrajových podmínek.

Zbývající dvě rovnice ( 2.124 ), ( 2.126 ), které lze divergováním převést na tvar

$$\frac{\partial}{\partial t}(\operatorname{div} \mathbf{E} - 4\pi\rho) = -4\pi\left(\operatorname{div} \mathbf{j} + \frac{\partial\rho}{\partial t}\right) = 0 \quad (2.129)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \operatorname{div} \mathbf{B} = -c \cdot \operatorname{div} \operatorname{rot} \mathbf{E} \equiv 0, \quad (2.130)$$

pak zaručují, že jsou-li počáteční podmínky ( 2.125 ), ( 2.127 ) splněny v nějakém čase  $t = 0$ , zůstávají splněny neustále ve všech časech.

V teorii pole je výhodné kromě vektorů intenzit daného pole zavést též potenciály pole, což jsou veličiny, jejichž diferenciální formy udávají příslušné intenzity.

V elektrostati lze intenzitu elektrického pole  $\mathbf{E}$  vyjádřit jako  $\mathbf{E} = -\operatorname{grad} \varphi$ , čímž je identicky splněna Maxwellova rovnice  $\operatorname{rot} \mathbf{E} = 0$ .

V magnetismu platí rovnice  $\operatorname{div} \mathbf{B} = 0$ , takže musí existovat vektorové pole  $\mathbf{A}$  takové, že  $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$ .

Z druhé dvojice Maxwellových rovnic tedy plyne, že pro obecné elektromagnetické pole lze psát

$$\mathbf{E} = -\operatorname{grad} \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (2.131)$$

$$\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}, \quad (2.132)$$

čímž jsou obě poslední Maxwellovy rovnice splněny identicky.

Protože intenzity polí závisejí pouze na derivacích potenciálů, nejsou tyto potenciály určeny jednoznačně.

Daným polím  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  mohou odpovídat různé hodnoty potenciálů – k  $\mathbf{A}$  lze přičíst libovolný konstantní vektor a k  $\varphi$  libovolný skalár aniž se změní hodnoty intenzit  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$ .

Obecně, magnetické pole  $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$  se nezmění, jestliže k  $\mathbf{A}$  přičteme gradient libovolné funkce  $f$  ( $\operatorname{rot} \operatorname{grad} f \equiv 0$ ).

Aby se přitom nezměnilo ani pole  $\mathbf{E}$  je zároveň třeba k potenciálu  $\varphi$  přidat člen  $-\frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}$ .

Provedeme-li tedy kalibrační transformaci potenciálů

$$\mathbf{A} \rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \text{grad } f, \quad (2.133)$$

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{1}{c} \frac{\partial f}{\partial t}, \quad (2.134)$$

kde  $f(r, t)$  je libovolná skalární funkce místa a času, příslušné elektromagnetické pole se nezmění.

Tato určitá svoboda ve volbě potenciálů umožňuje provést jejich kalibraci tak, aby to bylo co nejvýhodnější pro řešení daného problému.

Maxwellovy rovnice ( 2.124 ), ( 2.125 ) vyjádřené dosazením z ( 2.133 ), ( 2.134 ) mají obecně značně složitý tvar:

$$\Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \cdot \mathbf{j} + \text{grad} \left( \text{grad } \mathbf{A} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial \varphi}{\partial t} \right), \quad (2.135)$$

$$\Delta \varphi = -4\pi\rho - \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \text{grad } \mathbf{A}. \quad (2.136)$$

Tyto rovnice se značně zjednoduší, předepíše-li se pro potenciály tzv. Lorenzova kalibrační podmínka

$$\text{grad } \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = 0. \quad (2.137)$$

Tato podmínka může být splněna funkcí  $f$  vyhovující rovnici

$$\Delta f - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 f}{\partial t^2} = \text{div } \mathbf{A} + \frac{1}{c} \frac{\partial \varphi}{\partial t}. \quad (2.138)$$

Při této kalibraci nabývají Maxwellovy rovnice vyjádřené pomocí potenciálů separovaný a symetrický tvar D'Alembertových rovnic

$$\square \mathbf{A} \equiv \Delta \mathbf{A} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = \frac{4\pi}{c} \mathbf{j} , \quad (2.139)$$

$$\square \varphi \equiv \Delta \varphi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial t^2} = -\frac{4\pi}{c} \rho . \quad (2.140)$$

Obecné řešení těchto rovnic je tvaru tzv. retardovaných potenciálů:

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \int \frac{\rho\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' + \varphi_0 , \quad (2.141)$$

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \int \frac{j\left(\mathbf{r}', t - \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}\right)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV' + \mathbf{A}_0 , \quad (2.142)$$

kde  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  je polohový vektor bodu, v němž stanovujeme potenciály,  $\mathbf{r}' = (x', y', z')$  je polohový vektor objemového elementu  $dV' = dx' dy' dz'$  při integraci hustoty náboje a proudu.

$\varphi_0$  a  $\mathbf{A}_0$  popisují vnější pole působící na soustavu.

Vztahy ( 2.141 ) a ( 2.142 ) ukazují, že v daném místě  $\mathbf{r}$  a v daném čase  $t$  je pole určeno nikoliv okamžitým rozložením náboje a proudu

v prostoru, nýbrž rozložením retardovaným vždy o čas  $t = \frac{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}{c}$ ,

který je potřeba k překonání vzdálenosti  $R = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$  rychlostí  $c$ .

Napíšeme-li Maxwellovy rovnice ( 2.124 ), ( 2.126 ) pro prostorovou oblast, kde  $\mathbf{j} = 0$ ,  $\rho = 0$ , pak jejich parciální derivací podle času a dosazením ze zbývajících dvou Maxwellových rovnic získáme D'Alembertovy rovnice

$$\Delta \mathbf{E} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.143)$$

$$\Delta \mathbf{B} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0,$$

analogické rovnicím ( 2.139 ), ( 2.140 ) pro potenciály, pouze tentokrát bez přítomnosti elektrických nábojů.

Jelikož tyto rovnice mají nenulová řešení, může elektromagnetické pole existovat i samostatně, bez přímé vazby na elektromagnetické náboje a jejich proudy.

Budeme-li hledat partikulární řešení závislá pouze na jedné souřadnici  $x$  a na čase  $t$ , zjednoduší se rovnice ( 2.143 ) na

$$\frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{E}}{\partial t^2} = 0, \quad (2.144)$$

$$\frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial x^2} - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \mathbf{B}}{\partial t^2} = 0.$$

Řešením je každá funkce tvaru

$$\mathbf{E} = \mathbf{E} \left( x, t - \frac{x}{c} \right), \quad (2.145)$$

$$\mathbf{B} = \mathbf{B} \left( x, t - \frac{x}{c} \right).$$

Stejná hodnota pole  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$ , jaká je v bodě o souřadnici  $x_0$  v čase  $t_0$ , bude ve všech bodech, jejichž souřadnice a čas splňují rovnici

$$x - x_0 = c \cdot ( 2t - t_0 ).$$

Jedná se tedy o vlnění šířící se ve směru osy  $x$  fázovou rychlostí  $c$ . Z Maxwellových rovnic tak plyne existence **elektromagnetických vln** šířících se prostorem rychlostí světla.

Tento poznatek přivedl Maxwella k názoru, že světlo je zřejmě elektromagnetické vlnění o velmi krátké vlnové délce.

Tím se Maxwellovi podařilo sjednotit do ucelené teorie nejen jevy elektrické a magnetické, ale zahrnout sem i jevy optické.

V rovinné vlně šířící se ve směru osy  $x$  jsou všechny veličiny

funkcemi pouze  $t - \frac{x}{c}$ .

Je-li  $\mathbf{E} = \mathbf{E}\left(t - \frac{x}{c}\right)$ , pak z Maxwellových rovnic ( 2.124 ) a ( 2.126 )

pro  $\rho = 0$ ,  $\mathbf{j} = 0$ , plyne

$$\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} = -\text{rot } \mathbf{E} = \frac{\mathbf{n}_0}{c} \times \frac{d\mathbf{E}}{d\left(t - \frac{x}{c}\right)} = \mathbf{n}_0 \times \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad ( 2.146 )$$

takže vztah mezi elektrickým a magnetickým polem v elektromagnetické vlně je

$$\mathbf{B} = \mathbf{n}_0 \times \mathbf{E}, \quad ( 2.147 )$$

kde  $\mathbf{n}_0$  je jednotkový vektor ve směru šíření vlny.

Vektory elektrického a magnetického pole jsou tedy neustále kolmé jak navzájem, tak i ke směru šíření vln – elektromagnetické vlny jsou příčné.

Protože  $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ , stačí pro popis rovinné vlny pouze vektorový potenciál  $\mathbf{A}$ , pomocí něhož se pole  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  stanoví vztahy

$$\mathbf{B} = \frac{1}{c} \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{n}_0 \right), \quad ( 2.148 )$$

$$\mathbf{E} = \frac{1}{c} \left[ \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \times \mathbf{n}_0 \right) \times \mathbf{n}_0 \right]. \quad ( 2.149 )$$

Nejjednodušší případ elektromagnetické vlny je vlna monochromatická, v níž je pole v každém bodě jednoduchou harmonickou funkcí času.

$$\mathbf{A}(t)_{r=\text{konst.}} = \mathbf{A}_0(\mathbf{r}) \cdot \cos(\omega t + \alpha(\mathbf{r})) . \quad (2.150)$$

V rovinné monochromatické vlně bude pole harmonickou funkcí argumentu  $t - \frac{x}{c}$  :

$$\mathbf{A} = \mathbf{A}_0 \cdot \cos\left(\omega\left(t - \frac{x}{c}\right) + \alpha\right) , \quad (2.151)$$

kde  $\mathbf{A}_0$  a  $\alpha$  nezávisí na  $t$  ani na  $x$ .  
Zavedením vlnového vektoru

$$\mathbf{k} = \frac{\omega}{c} \cdot \mathbf{n}_0 \quad (2.152)$$

lze rovinnou vlnu vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{A}(r, t) = \mathbf{A}_0 \cos(\omega t - \mathbf{k}\mathbf{r} + \alpha) \quad (2.153)$$

platném pro libovolný směr šíření vlny.  
V komplexním tvaru má vztah ( 2.153 ) podobu

$$\mathbf{A} = \text{Re}\left[\widehat{\mathbf{A}}_0 \cdot e^{i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}\right] , \quad (2.154)$$

kde  $\widehat{\mathbf{A}} = \mathbf{A}_0 \cdot e^{i\alpha}$ .

Při pootočení souřadnicové soustavy o úhel  $\zeta$  kolem  $\mathbf{n}_0$  se pole v rovinné elektromagnetické vlně bude transformovat podle zákona

$$\widehat{\mathbf{A}} \rightarrow \widehat{\mathbf{A}}' = e^{i\zeta} \cdot \widehat{\mathbf{A}} . \quad (2.155)$$



elektromagnetická vlna je tedy invariantní vzhledem k pootočení o úhel  $\zeta_0 = 2\pi$ .

Tomu odpovídá hodnota spinu elektromagnetického pole

$$s = \frac{2\pi}{\zeta_0} = 1. \quad (2.156)$$

Jednoduchými úvahami o práci potřebné k rozmístění nábojů do požadované konfigurace lze ukázat, že elektrostatickou energii soustavy  $N$  nabitých těles

$$\varepsilon_e = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N q_a \varphi_a = \frac{1}{2} \int \rho \varphi dV = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{E}^2 dV \quad (2.157)$$

lze vyjádřit pomocí integrálu intenzity jejich společného pole, takže elektrickému poli lze přisoudit energii rozloženou s hustotou

$$W_e = \frac{1}{8\pi} \mathbf{E}^2 \quad (2.158)$$

v prostoru.

Podobně, úvahy o práci potřebné k indukovaní elektrických proudů v soustavě elektrických obvodů ukazují, že energie takovéto soustavy vodičů

$$\varepsilon_e = \frac{1}{2} \sum_{a=1}^N I_a \phi_a = \frac{1}{2} \int \mathbf{A} \cdot \mathbf{j} dV = \frac{1}{8\pi} \int \mathbf{B}^2 dV \quad (2.159)$$

je dána objemovým integrálem vektoru indukce  $\mathbf{B}$  buzeného magnetického pole a můžeme ji považovat za energii tohoto magnetického pole rozloženou v prostoru s hustotou

$$W_m = \frac{1}{8\pi} \mathbf{B}^2. \quad (2.160)$$

Hustota energie v elektromagnetickém poli se pak rovná součtu hustot odpovídajících elektrické a magnetické složce:

$$W_{em} = W_e + W_m = \frac{1}{8\pi}(\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2). \quad (2.161)$$

Elektromagnetické pole samotné musí tedy obsahovat energii a hybnost, která může proudit i prázdným prostorem a konat práci na elektrických nábojích, tj. měnit se na jiné formy energie.

Elektromagnetické pole není tedy jen prostor, v němž působí elektrické a magnetické síly, ale je samostatnou fyzikální entitou – specifickou formou hmoty.

Skalárním vynásobením rovnice ( 2.124 ) polem  $\mathbf{E}$  a rovnice ( 2.126 ) polem  $\mathbf{B}$  a jejich sečtením získáme po úpravě rovnici

$$\frac{\partial}{\partial t} \left( \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2}{8} \right) = -\operatorname{div} \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) - \mathbf{j} \cdot \mathbf{E}. \quad (2.162)$$

Integrace přes nějakou zvolenou prostorovou oblast  $V$  pak po aplikaci Gaussovy věty dává

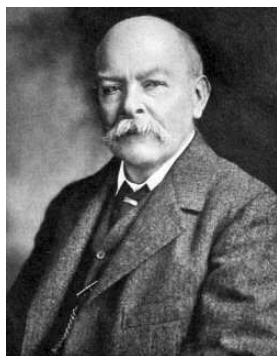
$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_V \frac{\mathbf{E}^2 + \mathbf{B}^2}{8} dV = \int_V \rho \mathbf{v} \cdot \mathbf{E} dV + \oint_S \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) \cdot d\mathbf{S}. \quad (2.163)$$

Rovnice ( 2.163 ) vyjadřuje zákon zachování energie v elektromagnetickém poli: **Elektromagnetická energie obsažená v prostorové oblasti  $V$  se zmenšuje jednak o mechanickou práci vykonanou elektrickými silami na nábojích uvnitř oblasti  $V$ , a jednak o energii vyzářenou polem ven z oblasti  $V$  skrze ohraničující plochu  $S = \partial V$ .**

Rovnici ( 2.163 ) je rovněž možno zapsat ve tvaru

$$\frac{d}{dt}(\varepsilon_{elmag} + \varepsilon_{kin})_V = -\oint_S \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) d\mathbf{S} = -\oint_S \mathbf{P} d\mathbf{S} \quad (2.164)$$

z něhož vidíme, že úbytek celkové energie elektromagnetického pole a nabitých částic v objemu  $V$  za jednotku času je roven celkovému toku tzv. **Poyntingova vektoru  $\mathbf{P}$**  plochou  $S$  obklopující oblast  $V$ .



John Henry Poynting (1852 – 1914)

Rovnice ( 2.164 ) vyjadřuje zákon zachování součtu celkové energie elektromagnetického pole a kinetické energie všech nábojů.

Podobně lze ukázat, že elektromagnetické pole má hybnost danou integrálem

$$\mathbf{p} = \frac{1}{c} \int_V \mathbf{P} dV. \quad (2.165)$$

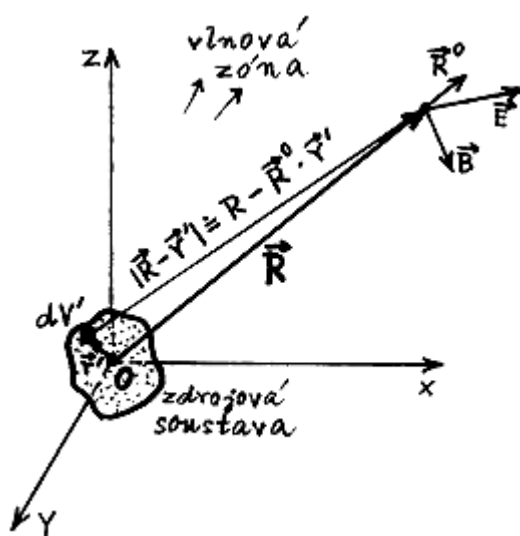
Proud energie v rovinné elektromagnetické vlně je vzhledem k ( 2.147 ) a ( 2.161) roven

$$\mathbf{P} = \frac{c}{4\pi} E^2 \cdot \mathbf{n}_0 \equiv \frac{c}{4\pi} B^2 \cdot \mathbf{n}_0 = c \cdot W_{em} \cdot \mathbf{n}_0, \quad (2.166)$$

z čehož je rovněž patrné, že se pole ve vlně šíří rychlostí světla.

Mějme soustavu pohybujících se elektrických nábojů soustředěnou v nějaké omezené prostorové oblasti (viz obr. 2.9)

Obr. 2.9



Pole buzené soustavou pohybujících se elektrických nábojů je dáno nikoliv okamžitým, ale retardovaným rozložením a pohybem nábojů.

Umístíme-li počátek souřadnic kamsi do nitra této soustavy nábojů, pak při studiu pole ve velkých vzdálenostech  $R \gg L$ , kde  $L$  je charakteristický rozměr soustavy, budou všechna místa zdrojové soustavy přibližně ve stejné vzdálenosti  $R$ , jako je počátek souřadnic. Vzdálenost  $|R - r'|$  jednotlivých míst  $r'$  zdroje od vyšetřovaného vzdáleného bodu  $R$  jsou přibližně stejné a rovny

$$|R - r'| \approx R - R_0 \cdot r', \quad (2.167)$$

kde  $R_0$  je jednotkový vektor směřující od počátku  $\sigma$  do vyšetřovaného bodu, takže retardované potenciály lze pro velké vzdálenosti od zdroje psát ve tvaru

$$\varphi(R, t) = \frac{1}{R} \int \rho \left( r', t - \frac{R}{c} + \frac{R_0 \cdot r'}{c} \right) dV', \quad (2.168)$$

$$\mathbf{A}(R, t) = \frac{1}{c \cdot R} \int \mathbf{j} \left( r', t - \frac{R}{c} + \frac{R_0 \cdot r'}{c} \right) dV'. \quad (2.169)$$

Retardační čas se tedy skládá ze dvou různých částí.

První část  $\frac{R}{c}$  určuje vnější retardaci, tj. dobu potřebnou k tomu, aby změny v elektromagnetickém poli překonaly vzdálenost od počátku souřadnic (tj. od zdrojové soustavy), do vzdáleného pozorovacího bodu. Druhá část rovná  $-\frac{R_0 \cdot r'}{c}$  charakterizuje vnitřní retardaci, tj.

dobu šíření rozruchu v poli v rámci zdrojové soustavy.

V případě, že rozložení náboje v soustavě se mění dostatečně pomalu, lze vnitřní retardaci zanedbat.

K tomu stačí, aby charakteristická doba  $T$  za kterou se rozložení

náboje zdatelně změní, splňovala podmínku  $T \gg \frac{L}{c}$ .

Jelikož  $c \cdot T = \lambda$  je vlnová délka elektromagnetické vlny vyzařované soustavou, lze podmínku zanedbatelnosti vnitřní retardace napsat též ve tvaru  $L \ll \lambda$  tj. rozměry soustavy musejí být malé ve srovnání s délkou vyzařovaných vln.

Charakteristická doba změny rozložení nábojů souvisí s průměrnou rychlostí nábojů vztahem

$$T \approx \frac{L}{v}, \quad (2.170)$$

takže k zanedbání retardace je třeba, aby byla splněna podmínka  $v \ll c$ .

Při zanedbání vnitřní retardace jsou potenciály ve velkých vzdálenostech od zdrojové soustavy rovny

$$\varphi(R, t) = \frac{1}{R} \int \rho \left( r', t - \frac{R}{c} \right) dV', \quad (2.171)$$

$$\mathbf{A}(R, t) = \frac{1}{R \cdot c} \int \mathbf{j} \left( r', t - \frac{R}{c} \right) dV'. \quad (2.172)$$

Ve vlnové zóně, tj. ve vzdálenostech velkých jak ve srovnání s rozměry zdrojové soustavy, tak s délkou vyzařovaných vln je možno v rámci malých oblastí prostoru považovat proměnnou složku pole za rovinnou vlnu.

Stačí zde tedy stanovit vektorový potenciál

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \frac{1}{R \cdot c} \int \rho v dV' = \frac{1}{R \cdot c} \sum_{i=1}^N q_i v_i = \frac{1}{R \cdot c} \frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N q_i r'_i = \\ &= \frac{1}{R \cdot c} \dot{\mathbf{d}} \left( t - \frac{R}{c} \right), \end{aligned} \quad (2.173)$$

kde  $\mathbf{d} \equiv \sum q_i r_i$  je dipólový moment soustavy v čase  $t - \frac{R}{c}$ .

Elektrické a magnetické pole je pak podle ( 2.147 ) rovno

$$\mathbf{E}(R, t) = \frac{1}{c^2 R} \left[ (\ddot{\mathbf{d}} \times \mathbf{R}_0) \times \mathbf{R}_0 \right], \quad (2.174)$$

$$\mathbf{B}(R, t) = \frac{1}{c^2 R} (\ddot{\mathbf{d}} \times \mathbf{R}_0), \quad (2.175)$$

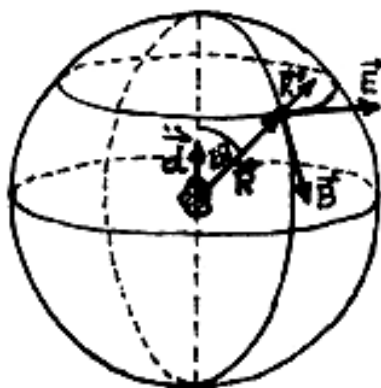
kde dipólový moment  $\mathbf{d}$  se opět bere v okamžiku  $t - \frac{R}{c}$ .

Tok elektromagnetické energie ve vlnové zóně, tj. intenzita elektromagnetického záření, je vyjádřena Poyntingovým vektorem podle ( 2.166 ).

Použijeme-li polárních souřadnic podle obr. 2.10, můžeme jej přepsat ve tvaru

$$\mathbf{P} = \frac{c}{4\pi} (\mathbf{E} \times \mathbf{B}) = \frac{1}{4\pi c^3 R^2} (\ddot{\mathbf{d}} \times \mathbf{R}_0)^2 = \frac{\dot{\mathbf{d}}^2}{4\pi c^3 R^2} \mathbf{R}_0 \sin^2 \vartheta. \quad (2.176)$$

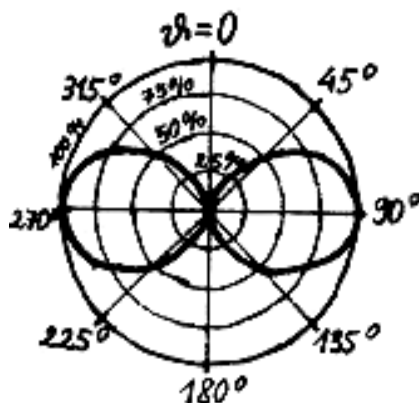
Obr. 2.10



Ve velké vzdálenosti od zdrojové soustavy (ve vlnové zóně) je proměnná složka pole dána druhou časovou derivací dipólového momentu soustavy  $\mathbf{d}''$  a má charakter elektromagnetických vln odnášejících pohybovou energii zdroje do prostoru.

Úhlové rozdělení intenzity záření elektrického dipólu je dáno koeficientem  $\sin^2 \vartheta$ , viz směrový diagram na obr. 2.11.

Obr. 2.11



Směrový diagram vyzařování elektrického dipólu.

Celkový výkon vyzařovaný soustavou je pak dán tokem energie přes celou sférickou plochu  $R = \text{konst.}$ :

$$I = \oint_{R=\text{konst.}} \mathbf{P} d\mathbf{S} = \int_0^\pi \frac{\ddot{\mathbf{d}}^2 \sin^2 \vartheta}{4\pi c^3 R^2} 2\pi R^2 \sin^2 \vartheta d\vartheta = \frac{2\ddot{\mathbf{d}}^2}{3c^3}. \quad (2.177)$$

V případě, že zdrojová soustava sestává pouze z jednoho zrychleně se pohybujícího náboje  $q$ , je

$$\ddot{\mathbf{d}} = q \cdot \ddot{\mathbf{r}} = q \cdot \mathbf{a}, \quad (2.178)$$

a vyzařovaný výkon je roven

$$I = \frac{2q^2}{3c^3} a^2. \quad (2.179)$$

Vztahy ( 2.173 ) až ( 2.177 ) pro pole záření ostrovní soustavy elektrických nábojů ve vlnové zóně byly získány v aproximaci prvního řádu v poměru  $\frac{L}{\lambda}$  (členy vyšších řádů byly zanedbány), což vedlo k uplatnění pouze dipólového momentu soustavy.

V obecném případě je však třeba vzít v úvahu i další členy v rozvoji potenciálu podle mocnin  $\frac{L}{\lambda}$ , což vede k tomu, že celková intenzita

elektromagnetického záření soustavy pohybujících se nábojů je dána časovými derivacemi jednotlivých multipólových momentů rozložení náboje.

Kromě dipólového momentu se na záření obvykle nejvíce podílí kvadrupólový moment

$$\mathbf{K}_{\alpha\beta} = \int \rho \cdot (3x_\alpha x_\beta - \delta_{\alpha\beta} r^2) dV \quad (2.180)$$

a popř. magnetický dipólový moment

$$\mathbf{m} = \frac{1}{2c} \rho (\mathbf{r} \times \mathbf{v}) dV, \quad (2.181)$$

které k záření přispívají podle vztahu



$$\mathbf{I} = \frac{2}{3c^3} \ddot{\mathbf{d}}^2 + \frac{1}{180c^5} \ddot{\mathbf{K}}_{\alpha\beta}^2 + \frac{2}{3c^3} \ddot{\mathbf{m}}^2. \quad (2.182)$$

jestliže vlastnosti zdrojové soustavy jsou takové, že  $\ddot{\mathbf{d}} = 0$ , jako je tomu např. v soustavě tvořené tělesy se stejným specifickým nábojem  $\frac{q}{m}$ , dipólové záření nevzniká a uplatní se pouze záření vyšších multipólů způsobené členy vyššího řádu v rozvoji potenciálu podle mocnin  $\frac{L}{\lambda}$ .

Elektrodynamika tak dospívá k obecnému závěru, že při každém zrychleném pohybu elektrických nábojů dochází k vyzařování elektromagnetických vln, které odnášejí část jejich kinetické energie do prostoru. Ve skutečnosti je však dipólový moment vždy tvořen vázanou soustavou nabitých částic, která se chová jako harmonický oscilátor. Nenulovost druhé derivace dipólového momentu je tak postačující podmínkou nenulovosti rovněž i vyšších derivací. Jak si ukážeme dále (viz vztah (2.187)), k vyzařování elektromagnetických vln nedochází při rovnoměrně zrychleném, ale až při nerovnoměrně zrychleném pohybu náboje (ve smyslu nenulové třetí časové derivace dráhy). Velikostí zrychlení  $a$  ve vztahu (2.179) je tedy vždy potřeba rozumět právě toto (uvědomme si rovněž, že velikost zrychlení nerovnoměrně zrychleného pohybu nemusí být nutně funkcí času). Analýza elektromagnetického pole v malých vzdálenostech od zdrojové soustavy ukázala, že uvnitř a v blízkosti zdrojové soustavy se vytváří určitá malá proměnná složka elektrického pole s fází odlišnou od hlavní proměnné složky.

V aproximaci třetího řádu je tento člen roven

$$\mathbf{E}_{re} = \frac{2}{3c^3} \ddot{\mathbf{d}}. \quad (2.183)$$

Ve zdrojové soustavě bude na každý náboj  $q$  působit určitá dodatečná reaktivní síla

$$\mathbf{F}_{re} = q \cdot \mathbf{E}_{re} \quad (2.184)$$

konající za jednotku času práci  $\mathbf{F}_{re} \cdot \mathbf{v}$ , takže celková práce vykonaná tímto polem na všechny náboje soustavy vychází

$$A_{re} = \frac{2}{3c^3} \ddot{\mathbf{d}} \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{v}_i = \frac{2}{3c^3} \ddot{\mathbf{d}} \cdot \dot{\mathbf{d}}, \quad (2.185)$$

což při zprůměrnování podle času dává

$$A_{re} = -\frac{2}{3c^3} \dot{\mathbf{d}}^2. \quad (2.186)$$

Je vidět, že tato přídatná složka pole způsobuje příslušné brždění pohybů ve zdroji zpětnou reakcí vyzařovaných vln, a to v plné energetické shodě se vztahem ( 2.177 ) získaným analýzou pole ve vzdálené vlnové zóně.

Pohybovou rovnici nabitě částice v elektromagnetickém poli pod vlivem Lorentzovy síly ( 2.67 ) je tudíž třeba doplnit o brzdící účinek elektromagnetického vyzařování:

$$\mathbf{F} = q \left( \mathbf{E} + \frac{1}{c} (\mathbf{v} \times \mathbf{B}) + \frac{2q}{3c^3} \cdot \frac{d^2 \mathbf{v}}{dt^2} \right). \quad (2.187)$$

Kromě rychlosti šíření a vlnové povahy elektromagnetického záření plyne z D'Alembertových rovnic ( 2.139 ), ( 2.140 ), že co do transformačních vlastností se veličina  $\varphi$  chová jako časová a veličina  $\mathbf{A}^\mu = (\mathbf{A})$  jako prostorové složky čtyřvektoru

$$A^k = (\varphi, \mathbf{A}), \quad (2.188)$$

který se nazývá čtyřpotenciál a umožňuje přepsat D'Alembertovy rovnice do čtyřrozměrného tvaru a sloučit je tak do jediné prostoročasové rovnice

$$\square A^k \equiv \frac{\partial^2 A^k}{\partial x^m \partial x_m} = -\frac{4\pi}{c} j^k \quad (2.189)$$

kde

$$j^k = \rho \frac{dx^k}{dt} \equiv (c \cdot \rho, \mathbf{j}), \quad (2.190)$$

neboť  $x^0 = c \cdot t$  je tzv. **čtyřproud**.

S jeho pomocí lze rovnici kontinuity ( 2.128 ) přepsat do čtyřrozměrného tvaru:

$$\frac{\partial j^k}{\partial x^k} = 0 \equiv j^k{}_{,k} = 0. \quad (2.191)$$

Lorenzova kalibrační podmínka ve čtyřrozměrném tvaru zní

$$\frac{\partial A^k}{\partial x^k} \equiv A^k{}_{,k} = 0, \quad (2.192)$$

tj. čtyřpotenciál je volen tak, aby jeho čtyřdivergence byla rovna nule. Ze vztahů ( 2.131 ), ( 2.132 ) vidíme, že složky vektorů  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  lze interpretovat coby komponenty antisymetrického čtyřtenzoru

$$F_{ik} = \frac{\partial A_k}{\partial x^i} - \frac{\partial A_i}{\partial x^k} = \begin{pmatrix} 0 & E_x & E_y & E_z \\ -E_x & 0 & -B_z & B_y \\ -E_y & B_z & 0 & -B_x \\ -E_z & -B_y & B_x & 0 \end{pmatrix} \quad (2.193)$$

nazývaného **tenzor elektromagnetického pole**.

Elektromagnetické pole ve čtyřrozměrném prostoročase je tímto tenzorem úplně popsáno.

Lorenzovy pohybové rovnice nabité hmotné částice v elektromagnetickém poli ( 2.67 ) lze interpretovat jako prostorové složky čtyřrozměrné rovnice pohybu nabité částice

$$m \frac{dv^i}{dt} = \frac{q}{c} F^{ik} v_k, \quad (2.194)$$

jejíž časová komponenta popisuje změny energie částice v důsledku práce vykonané elektromagnetickými silami.

První dvojici Maxwellových rovnic lze pomocí  $F_{ik}$  sjednotit do jediné čtyřrozměrné rovnice

$$\frac{\partial F^{ik}}{\partial x^k} \equiv F^{ik}{}_{,k} = -\frac{4\pi}{c} j^i \quad (2.195)$$

popisující buzení elektromagnetického pole čtyřproudem  $j^i$ .

Podobně druhou dvojici Maxwellových rovnic lze zapsat jako jedinou rovnici pro složky tenzoru elektromagnetického pole:

$$\frac{\partial F_{ik}}{\partial x^m} + \frac{\partial F_{km}}{\partial x^i} + \frac{\partial F_{mi}}{\partial x^k} = 0. \quad (2.196)$$

Vztahy vyjadřující v klasické elektrodynamice hustotu proudu energie a hybnosti v elektromagnetickém poli lze shrnout pomocí **tenzoru energie – hybnosti elektromagnetického pole**

$$T_{elmag.}^{ik} = -\frac{1}{4\pi} F_m^i F^{km} + \frac{1}{16\pi} F_{lm} F^{lm}. \quad (2.197)$$

Po dosazení hodnot  $F^{ik}$  z ( 2.193 ) je zřejmé, že  $T_{elmag.}^{00}$  je roven hustotě energie elektromagnetického pole ( 2.161 ), a komponenty  $T^{0\alpha}$  jsou rovny složkám Poyntingova vektoru ( 2.166 ).

Prostorové složky tenzoru energie – hybnosti elektromagnetického pole:

$$T_{elmag.}^{\alpha\beta} = \sigma_{\alpha\beta} = \frac{1}{4\pi} \left[ \frac{1}{2} (E^2 + B^2) \delta_{\alpha\beta} - E_\alpha E_\beta - B_\alpha B_\beta \right], \quad (2.198)$$

kde  $\delta_{\alpha\beta}$  je Kroneckerův tenzor, tvoří trojrozměrný, tzv. **Maxwellův tenzor napětí**.

Tenzor energie – hybnosti, který úplně popisuje rozložení a pohyb energie a hybnosti v dané fyzikální soustavě, má obecně následující strukturu:

$$\begin{aligned} T^{ik} &= \begin{pmatrix} \textit{Hustota energie} & \textit{Hustota proudu energie} \\ \textit{Hustota proudu energie} & \textit{hustota proudu hybnosti} \end{pmatrix} = \\ &= \begin{pmatrix} \frac{\partial E}{\partial t} & \frac{\textit{hustota hybnosti}}{c} \\ \frac{\textit{hustota hybnosti}}{c} & \textit{Tenzor napětí} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{\partial E}{\partial t} & \frac{\mathbf{v} \partial E}{c \partial t} \\ \frac{\mathbf{v} \partial E}{c \partial t} & \sigma_{ik} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.199)$$

Označíme-li hustotu energie  $W$ , je lokální zákon zachování energie vyjádřen rovnicí kontinuity

$$\frac{\partial W}{\partial t} + \textit{div}(\mathbf{v} \cdot W) = 0. \quad (2.200)$$

Díky univerzálnímu vztahu ( 2.32 ) mezi energií, hmotností a

hybností, je hustota rozložení hybnosti  $\mathbf{P} = \frac{d\mathbf{p}}{dV}$  dána hustotou proudu energie  $\mathbf{v} \cdot W$

$$\mathbf{P} = \frac{\mathbf{v} \cdot W}{c}. \quad (2.201)$$

Pro nekoherentní prach platí

$$\mathbf{P} = \mathbf{v} \cdot \rho. \quad (2.202)$$

Lokální zákon zachování hybnosti pak může být napsán ve tvaru

$$\frac{\partial P^\alpha}{\partial t} + \operatorname{div}(v \cdot P^\alpha) = 0. \quad (2.203)$$

Ve čtyřrozměrném prostoročase je pohyb částice reprezentován její světočárou, jíž lze popsat parametrickou rovnicí

$$x^i = x^i(\lambda) \quad (2.204)$$

kde  $\lambda$  je vhodný parametr, za nějž nejčastěji dosazujeme invariantní veličiny jako je vlastní čas  $\tau$  nebo přímo délka světočáry daná prostoročasovým intervalem  $s$ .

Minkowského metriku v diferenciálním tvaru můžeme zapsat jako

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + dx^2 + dy^2 + dz^2. \quad (2.205)$$

Zavedeme-li označení  $x^0 \equiv c \cdot t$ ,  $x^1 \equiv x$ ,  $x^2 \equiv y$ ,  $x^3 \equiv z$ , nabude Minkowského metrika tvar

$$ds^2 = (dx^0)^2 + (dx^1)^2 + (dx^2)^2 + (dx^3)^2, \quad (2.206)$$

který je speciálním případem obecné kvadratické formy

$$ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k = \eta_{ik} dx^i dx^k, \quad (2.207)$$

v níž má metrický tenzor  $g_{ik}$  speciální tvar

$$g_{ik} = \eta_{ik} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.208)$$

Tenzor  $\eta_{ik}$  je tzv. **Minkowského metrický tenzor**.



**Herman Minkowski (1864 – 1909)**

Přechod od inerciální soustavy  $\Sigma$  se souřadnicemi  $x^i$  k soustavě  $\Sigma'$  se souřadnicemi  $x'^i$  musí být lineární transformací prostorových souřadnic

$$x'^i = \sum_{k=0}^3 a_k^i x^k + b^i = a_k^i x^k + b^i, \quad (2.209)$$

kde  $a_k^i; b^i$  jsou konstanty nezávislé na  $x$ .

Jedině tak může být splněn speciální princip relativity zajišťující rovnoprávnost všech inerciálních soustav.

Aby byl splněn princip stálé rychlosti světla, musí tato transformace dále vyhovovat podmínce

$$s^2 = \eta_{ik} x^i x^k = \eta_{ik} x'^i x'^k = s'^2 \quad (2.210)$$

invariance intervalu.

Transformace (2.209), vyhovující podmínce (2.210), jsou čtyřrozměrným vyjádřením obecných Lorenzových transformací mezi inerciálními soustavami  $\Sigma$  a  $\Sigma'$ .

Měříme-li souřadnice a čas takovým způsobem, že při  $t = t' = 0$  počátky kartézských souřadnic v obou soustavách  $\Sigma$  a  $\Sigma'$  splývají, potom jsou  $b^i = 0$ .

Tehdy hovoříme o tzv. **homogenních Lorenzových transformacích**

$$x'^i = a_k^i x^k. \quad (2.211)$$

Transformační vztah ( 2.209 ) obsahuje celkem  $4 \cdot 4 = 16$  zdánlivě nezávislých koeficientů  $a_k^i$ .

Dosažením transformačního vztahu ( 2.211 ) a ( 2.210 ) však dostaneme podmínku

$$\eta_{ik} = \eta_{lm} a_i^l a_k^m, \quad (2.212)$$

Která tyto koeficienty svazuje deseti rovnicemi, vzhledem k symetrii v indexech  $i, k$ .

Zůstává tak pouze 6 nezávislých transformačních koeficientů, které odpovídají třem parametrům udávajícím směr os  $x', y', z'$  a třem komponentám vektoru rychlosti pohybu soustavy  $\Sigma'$  vůči  $\Sigma$ .

Množina všech homogenních Lorentzových transformací ( 2.211 ) tvoří spojitou šestiparametrickou **Lorentzovu grupu**.

Množina všech Nehomogenních Lorentzových transformací ( 2.209 ), které vzniknou z homogenních transformací přidáním čtyř transformací posuvu počátku prostoročasových souřadnic  $x'^i \mapsto x'^i + b^i$ , tvoří  $6 + 4 = 10$  – ti parametrickou **Poincarého grupu**.

V případě speciální Lorentzovy transformace přejde vztah ( 2.211 ) v ( 2.7 ) potažmo ( 2.12 ), takže koeficienty  $a_k^i$  mají hodnoty

$$a_k^i = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & \gamma \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ -\beta\gamma & 0 & 0 & \gamma \end{pmatrix}. \quad (2.213)$$

Souřadnice  $x^i \equiv (x^0, x^1, x^2, x^3)$  dané události jsou komponentami polohového čtyřvektoru příslušného světobodu v prostoročase. Čtverec délky tohoto čtyřvektoru, tj. interval mezi počátkem  $(0, 0, 0, 0)$  a daným světobodem  $(x^0, x^1, x^2, x^3)$ :



$$x^2 = (-x^0)^2 + (x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2 = \eta_{ik} x^i x^k, \quad (2.214)$$

je veličina invariantní vůči Lorenzovým transformacím.

Vektory rychlosti  $\mathbf{v} = \frac{d\mathbf{x}}{dt}$  a zrychlení  $\mathbf{a} = \frac{d\mathbf{v}}{dt} = \frac{d^2\mathbf{x}}{dt^2}$  hrají důležitou úlohu v klasické mechanice, takže je užitečné zavést jejich čtyřrozměrné analogie v mechanice relativistické.

Přímým zobecněním vzniklá veličina  $\frac{dx^i}{dt}$  se nehodí, neboť to není čtyřvektor ( $dt$  není relativistický invariant).

Invariantní mírou času je vlastní čas  $\tau$ , takže jako **čtyřrychlost** je přirozené definovat čtyřvektor

$$u^i = \frac{dx^i}{d\tau} = c \frac{dx^i}{ds}. \quad (2.215)$$

Vzhledem ke vztahu (2.16) mezi  $d\tau$  a  $dt$  lze složky čtyřrychlosti vyjádřit pomocí obyčejné rychlosti  $\mathbf{v}$  ve tvaru

$$u^i = (c \cdot \gamma, \mathbf{v} \cdot \gamma). \quad (2.216)$$

Při rychlosti  $v \ll c$ , přechází prostorová část čtyřrychlosti v obyčejnou rychlost.

Ze vztahu  $dx^i dx_i = c^2 d\tau^2$  snadno plyne

$$u^i u_i = c^2. \quad (2.217)$$

Z geometrického hlediska je čtyřvektor  $c \cdot u^i$  jednotlivým tečným vektorem ke světočáře dané částice.

**Čtyřzrychlení** částice se definuje jako

$$a^i = \frac{du^i}{d\tau} = \frac{d^2 x^i}{d\tau^2} = c^2 \frac{d^2 x^i}{ds^2}. \quad (2.218)$$

Z derivace vztahu ( 2.217 ) podle  $\tau$  dostaneme

$$a^i \cdot u_i = 0, \quad ( 2.219 )$$

Takže čtyřvektor rychlosti a zrychlení v prostoročase jsou navzájem ortogonální.

Rovnoměrný a přímočarý pohyb volné částice, je ve čtyřrozměrném tvaru vyjádřen rovnicí

$$a^i \equiv \frac{d^2 x^i}{d\tau^2} = 0 \quad ( 2.220 )$$

popisující přímkovou světočáru.

Čtyřrozměrným zobecněním hybnosti klasické mechaniky, je čtyřvektor

$$p^i = m_0 \cdot u^i \quad ( 2.221 )$$

zvaný **čtyřhybnost**.

Dosazením složek  $u^i$  z ( 2.216 ) dostaneme

$$p^0 = m_0 \cdot c \cdot \gamma = p^\mu \quad (\mu = 1, 2, 3). \quad ( 2.222 )$$

Prostorová část je tedy rovna relativistické hybnosti

$$\mathbf{p} = m\mathbf{v} = m_0 \cdot \mathbf{v} \cdot \gamma, \quad ( 2.223 )$$

zatímco časová komponenta je

$$p^0 = \frac{E}{c}.$$

Komponenty čtyřhybnosti lze proto zapsat jako

$$p^i = \left( \frac{E}{c}, \mathbf{p} \right). \quad (2.224)$$

z prostoročasového hlediska jsou tedy energie a hybnost částice složkami jediného **čtyřvektoru energie – hybnosti**, jednoznačně charakterizujícího pohybový stav částice.

Čtverec čtyřhybnosti

$$p^i p_i = (m_0 u^i)(m_0 u^i) = m_0^2 c^2 \quad (2.225)$$

je podle ( 2.221 ) roven

$$p^i p_i = \frac{E^2}{c^2} - p^2, \quad (2.226)$$

což vede ke vztahu ( 2.32 ).

Čtyřvektor síly, čili **čtyřsíla**, se definuje jako časová změna čtyřhybnosti částice

$$F^i \stackrel{\text{def}}{=} \frac{dp^i}{d\tau} = m_0 \frac{du^i}{d\tau}. \quad (2.227)$$

S obyčejným trojrozměrným vektorem síly  $\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$  souvisí

komponenty čtyřsíly vztahem

$$F^i = \left( \frac{\mathbf{F} \cdot \mathbf{v}}{c^2} \gamma, \mathbf{F} \cdot \boldsymbol{\gamma} \right). \quad (2.228)$$

Mezi čtyřsílou a čtyřhybností platí vztah

$$f^i \cdot u^i = 0, \quad (2.229)$$

tj. čtyřsíla je v prostoročase kolmá k čtyřrychlosti.

Newtonova pohybová rovnice  $\mathbf{F} = \frac{d\mathbf{p}}{dt}$  má ve čtyřrozměrném zobecnění tvar

$$F^i = \frac{dp^i}{d\tau}. \quad (2.230)$$

Prostorová část této rovnice popisuje změnu hybnosti a časová komponenta změnu energie částice pod vlivem působící síly. Stejně, jako jsme výše sjednotili energii a hybnost do jediného čtyřvektoru energie – hybnosti, můžeme nyní rovnice zachování (2.200), (2.203) sloučit do jediné tenzorové rovnice

$$\frac{\partial T^{ik}}{\partial x^k} \equiv T^{ik}{}_{,k} = 0, \quad (2.231)$$

kde **tenzor energie – hybnosti** bude mít tvar

$$T^{ik} = W \cdot \begin{pmatrix} 1 & \frac{v^1}{c} & \frac{v^2}{c} & \frac{v^3}{c} \\ \frac{v^1}{c} & \frac{v^1 v^1}{c^2} & \frac{v^2 v^1}{c^2} & \frac{v^3 v^1}{c^2} \\ \frac{v^2}{c} & \frac{v^1 v^2}{c^2} & \frac{v^2 v^2}{c^2} & \frac{v^3 v^2}{c^2} \\ \frac{v^3}{c} & \frac{v^1 v^3}{c^2} & \frac{v^2 v^3}{c^2} & \frac{v^3 v^3}{c^2} \end{pmatrix}. \quad (2.232)$$

Fyzikální význam jednotlivých komponent tenzoru energie – hybnosti je tedy následující:

$T^{00}$  = hustota energie (~ hmotnosti)

$T^{\alpha 0}$  =  $\alpha$ -složka proudu energie, tj.  $\alpha$ -složka hustoty hybnosti

$T^{\alpha\beta}$  =  $\alpha$ -složka hustoty  $\beta$ -složky hybnosti, tj.  $\alpha$ -složka síly působící na daný objemový element přes jednotkovou plošku s normálovým vektorem  $\mathbf{n}_\beta$ .

Rozepsáním tenzorového zákona zachování ( 2.231 ) ve složkách a separací prostorových a časových derivací dostaneme rovnice

$$\frac{1}{c} \frac{\partial T^{00}}{\partial t} + \frac{\partial T^{0\alpha}}{\partial x^\alpha} = 0 ; \quad \frac{1}{c} \frac{\partial T^{\alpha 0}}{\partial t} + \frac{\partial T^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta} = 0 . \quad ( 2.233 )$$

Jejich integrací přes libovolnou prostorovou oblast  $V$

$$\frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_V T^{00} dV + \int_V \frac{\partial T^{0\alpha}}{\partial x^\alpha} dV = 0 ; \quad \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \int_V T^{\alpha 0} dV + \int_V \frac{\partial T^{\alpha\beta}}{\partial x^\beta} dV = 0 \quad ( 2.234 )$$

a po úpravě pomocí Gaussovy věty, obdržíme rovnice

$$-\frac{\partial}{\partial t} \int_V T^{00} dV = c \cdot \oint_S T^{0\alpha} dS ; \quad -\frac{\partial}{\partial t} \int_V T^{\alpha 0} dV = c \cdot \oint_S T^{\alpha\beta} dS , \quad ( 2.235 )$$

kde integrály na pravé straně se berou přes uzavřenou plochu  $S = \partial V$  obklopující objem  $V$ .

Podle první z těchto rovnic je rychlost změny energie obsažené v objemu  $V$  rovna toku energie přes uzavřenou plochu  $S$  ohraničující tento objem.

Podobně druhá rovnice říká, že změna hybnosti v objemu  $V$  za jednotku času je rovna proudu hybnosti přes ohraničující plochu  $S$ .

Rovnice ( 2.235 ) tedy vyjadřují zákon zachování energie a hybnosti v integrálním tvaru.

Obecně, celková čtyřhybnost  $p^i$  je pomocí tenzoru energie – hybnosti vyjádřena integrálem

$$p^i = \frac{1}{c} \int T^{ik} dS_k \quad ( 2.236 )$$

přes uzavřenou plochu zahrnující celý trojrozměrný prostor.

Rovnice ( 2.231 ) je pak ekvivalentní tvrzení, že tato čtyřhybnost se zachovává.

Trojrozměrný vektor momentu hybnosti  $\mathbf{B}$  klasické mechaniky definovaný jako

$$\mathbf{B} = \mathbf{r} \times \mathbf{p}, \quad (2.237)$$

se v STR nahrazuje obecnějším **čtyřtenzorem momentu hybnosti**

$$B^{ik} = x^i p^k - x^k p^i. \quad (2.238)$$

Je to antisymetrický tenzor, jehož prostorové složky jsou rovny složkám trojrozměrného vektoru  $\mathbf{B}$ .

Pro kontinuum je

$$B^{ik} = \int (x^i dp^k - x^k dp^i) = \frac{1}{c} \int (x^i T^{km} - x^k T^{im}) dS_m. \quad (2.239)$$

Aby byl splněn zákon zachování momentu hybnosti  $B^{ik}_{,k} = 0$ , musí být

$$(x^i T^{km} - x^k T^{im})_{,m} = 0. \quad (2.240)$$

Kromě zákona (2.231) je k tomu zapotřebí, aby tenzor energie – hybnosti byl symetrický, tj.

$$T^{ik} = T^{ki}. \quad (2.241)$$

Nejjednodušším typem kontinua je soubor vzájemně neinteragujících částic označovaný jako koherentní prach.

Hustota čtyřhybnosti částic v takové soustavě činí  $\rho \cdot u^i$ , takže

$$T^{0\alpha} = \rho \cdot c^2 \cdot u^\alpha \quad (\alpha = 1, 2, 3). \quad (2.242)$$

Hustota energie je

$$T^{00} = \rho \cdot c^2 \quad (2.243)$$

a hustota proudu hybnosti

$$T^{\alpha\beta} = \rho \cdot c \frac{dx}{d\tau} \frac{dx}{d\tau}. \quad (2.244)$$

Tenzor energie – hybnosti koherentního prachu tedy je

$$T^{ik} = \rho \cdot u^i \cdot u^k. \quad (2.245)$$

Použijeme-li při sledování ideální kapaliny vztažnou soustavu, v níž se uvažovaný objemový element nepohybuje, bude platit Pascallův zákon, podle něhož je tlak  $P$  stejný ve všech směrech.

V takové vztažné soustavě bude tenzor napětí roven

$$\sigma^{\alpha\beta} = P \cdot \delta^{\alpha\beta} = T^{\alpha\beta}. \quad (2.246)$$

Hustota hybnosti je zde  $T^{0\alpha} = 0$ , takže tenzor energie – hybnosti v klidové vztažné soustavě má tvar

$$T^{ik} = \begin{pmatrix} \rho \cdot c^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & P & 0 & 0 \\ 0 & 0 & P & 0 \\ 0 & 0 & 0 & P \end{pmatrix}. \quad (2.247)$$



**Blaise Pascal (1623 – 1662)**

Po transformaci do obecné vztažné soustavy, v níž se daný objemový element pohybuje čtyřrychlostí  $u^i$ , bude tenzor energie – hybnosti ideální kapaliny dán vztahem

$$T^{ik} = (P + W)u^i u^k + P \cdot \eta^{ik} \quad (2.248)$$

resp.

$$T^{ik} = (P + W)u^i u_k + P \cdot \delta_k^i. \quad (2.249)$$

Koncepci tenzoru energie – hybnosti je výhodné zachovat i v případě, kdy se nejedná o skutečné kontinuum.

Sestává-li vyšetřovaná soustava z  $N$  bodových částic o hmotnostech  $m_a$  ( $a = 1, 2, \dots, N$ ), které se pohybují čtyřrychlostmi  $u_a^i$ , pak tenzor energie – hybnosti můžeme definovat jako

$$T^{ik}(t, x^\alpha) = \sum_{a=1}^N m_a \frac{dx_a^i}{d\tau} \frac{dx_a^k}{dt} \delta^3(x - x_a(t)) = \sum_{a=1}^N p_a^k \frac{dx_a^k}{dt} \delta^3(x - x_a), \quad (2.250)$$

kde  $\delta^3(x)$  je trojrozměrná Diracova delta – funkce.

Z hlediska inerciální vztažné soustavy STR se jeví prostor třírozměrný a má eukleidovskou geometrii.

Avšak v Minkowského pseudoeukleidovském prostoročase STR se v neinericiálních vztažných soustavách stává geometrie trojrozměrného prostoru obecně neeukleidovskou.

Snadno to lze demonstrovat na příkladu rotující vztažné soustavy diskutovaném v 10. kapitole.

V rovinném Minkowského prostoročase STR je pole fiktivních setrvačných sil vznikajících v neinericiálních vztažných soustavách popsáno metrickým tenzorem  $g_{ik}$ , který pak vystupuje v obecně invariantních fyzikálních zákonech.

Rozdíl mezi polem zdánlivých setrvačných sil a skutečným gravitačním polem je jen v tom, že v prvním případě je prostoročas plochý a vhodnou transformací se lze vždy vrátit ke globální inerciální soustavě, zatímco v druhém případě nikoliv.



To je však rozdíl pouze globální, lokálně žádný rozdíl neexistuje. A protože fyzikální zákony mají lokální charakter, lze soudit, že i skutečné gravitační pole je v libovolné vztažné soustavě plně určeno metrickým tenzorem prostoročasu  $g_{ik}$ .

Pomocí principu ekvivalence lze zobecnit všechny fyzikální zákony STR na zakřivený prostoročas OTR.

To ovšem vyžaduje rozdělit prostoročas na dostatečně malé oblasti, v rámci nichž lze gravitační pole považovat za homogenní.

Pro každou takovou oblast zavést lokálně inerciální vztažnou soustavu a podle principu ekvivalence v ní použít zákony STR.

Vhodnou transformací prostoročasových souřadnic pak v těchto zákonech přejít k příslušné neinerciální vztažné soustavě, v níž vzniklé fiktivní síly budou lokálně totožné se skutečnými gravitačními silami v daném místě a spojit takto získané lokální informace v globální celek.

Problém stanovení vlivu gravitace na fyzikální děje se nám tak rozloží na řadu lokálních problémů, které lze na základě principu ekvivalence řešit v rámci STR.

Tento obecný postup si nyní můžeme demonstrovat na jednoduchých příkladech.

Mějme testovací částici hmotnosti  $m$  pohybující se v daném gravitačním poli, která se v okamžiku  $\tau$  nachází ve světobodě  $P$ .

Zavedeme-li v tomto bodě lokálně inerciální vztažnou soustavu  $\tilde{S}$  s kartézskými prostoročasovými souřadnicemi  $\tilde{x}^i$  souvisejícími s vlastním časem  $\tau$  testovací částice vztahem

$$d\tau^2 = -\frac{1}{c^2} \eta_{ik} d\tilde{x}^k, \quad (2.251)$$

bude v této soustavě v okamžiku  $\tau$  v okolí testovací částice stav beztlíže a lokálně zde tedy bude platit STR.

Rovnice pohybu testovací částice v této lokálně inerciální soustavě proto budou

$$\frac{d^2 \tilde{x}^i(\tau)}{d\tau^2} = 0. \quad (2.252)$$

Přejdeme-li od soustavy  $\tilde{S}$  k obecné neinerciální vztažné soustavě  $S$  s prostoročasovými souřadnicemi  $x^i$  souvisejícími s vlastním časem vztahem

$$ds^2 = -c^2 d\tau^2 = g_{ik} dx^i dx^k; \quad g_{ik}(x^j) = \eta_{lm} \frac{d\tilde{x}^l}{dx^i} \frac{d\tilde{x}^m}{dx^k}, \quad (2.253)$$

pohybová rovnice ( 2.252 ) se přetransformuje na tvar

$$\frac{d^2 x^i}{d\tau^2} + \Gamma_{kl}^i \frac{dx^k}{d\tau} \frac{dx^l}{d\tau} = 0, \quad (2.254)$$

kde

$$\Gamma_{kl}^i = \frac{1}{2} g^{im} \left( \frac{\partial g_{mx}}{\partial x^l} + \frac{\partial g_{ml}}{\partial x^k} + \frac{\partial g_{kl}}{\partial x^m} \right). \quad (2.255)$$

Stejnou proceduru můžeme udělat v každém bodě světočáry testovací částice a vždy obdržíme rovnici tvaru ( 2.255 ).

Rovnice ( 2.255 ) je tedy obecnou rovnicí pohybu testovací částice v zakřiveném prostoročase, která je kovariantní vzhledem k libovolné transformaci prostoročasových souřadnic.

Jako druhý příklad si vezměme diferenciální zákon zachování energie a hybnosti, který má ve STR tvar

$$T^{ik}_{,k} \equiv \frac{\partial T^{ik}}{\partial x^k} = 0. \quad (2.256)$$

Stejný tvar bude mít i v každé lokálně inerciální vztažné soustavě  $\tilde{S}$  v gravitačním poli:

$$\frac{\partial T^{ik}(\tilde{x})}{\partial \tilde{x}^k} = 0. \quad (2.257)$$

Po transformaci do obecné (neinerciální) vztažné soustavy  $S$  tento zákon nabude kovariantní tvar

$$\frac{\partial T^{ik}}{\partial x^k} + \Gamma_{mk}^i T^{mk} + \Gamma_{mk}^k T^{im} = 0, \quad (2.258)$$

který představuje formulaci zákona zachování energie a hybnosti v zakřiveném prostoročase.

Z těchto dvou příkladů již můžeme vyvodit obecné zákonitosti.

Podle principu ekvivalence jsou fyzikální zákony v gravitačním poli lokálně identické, jako fyzikální zákony v neinerciálních vztažných soustavách bez gravitace.

Neinerciální vztažná soustava je pak po matematické stránce ekvivalentní křivočaré soustavě prostoročasových souřadnic.

Zobecnění fyzikálních zákonů na přítomnost zakřiveného prostoročasu bude tedy spočívat v jejich přepsání do obecných křivočarých souřadnic.

Rozdíl oproti rovinnému prostoročasu STR je pak jen v tom, že plochý prostoročas dovoluje vrátit se vhodnou transformací vždy zpět k zákonům STR v kartézských souřadnicích globální inerciální soustavy, zatímco pro zakřivený prostoročas to možné není.

Globální inerciální soustavy zde neexistují, existují pouze křivočaré souřadnice.

Zobecnění fyzikálních zákonů STR na zakřivený prostoročas spočívá v tom, že obyčejné parciální derivace podle souřadnic jsou nahrazeny derivacemi kovariantními, což se zkráceně formuluje jako pravidlo „čárky změnit na středníky“.

Krom toho Minkowského tenzor  $\eta_{ik}$  přechází v obecný metrický tenzor  $g_{ik}$ .

Uvažujme částici s nulovou klidovou hmotností, pohybující se rychlostí  $c$ .

Její pohyb bude v lokální inerciální soustavě dán rovnicemi

$$\frac{d^2 \tilde{x}^i}{d\lambda^2} = 0, \quad (2.259)$$

$$ds^2 = c^2 d\tau^2 = \eta_{ik} d\tilde{x}^i d\tilde{x}^k = 0,$$

kde  $\lambda$  je afinní parametr nahrazující vlastní čas  $\tau$ , jenž zde není použitelný, neboť je roven nule.

V obecném zakřiveném prostoročase má rovnice šíření světla tvar

$$\frac{d^2 x^i}{d\lambda^2} + \Gamma_{kl}^i \frac{dx^i}{d\lambda} \frac{dx^k}{d\lambda} = 0,$$

$$\frac{ds^2}{d\lambda} = g_{ik} \frac{dx^i}{d\lambda} \frac{dx^k}{d\lambda} = 0, \quad (2.260)$$

$$ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k = 0.$$

Světločáry, po kterých se volně pohybují fotony se v OTR nazývají izotropními, čili nulovými geodetikami, neboť vlastní čas  $d\tau$  a čtyřvzdálenost  $ds$  jsou podél nich rovny nule.

Tenzor elektromagnetického pole ( 2.193 ) bude mít v zakřiveném prostoročase tvar

$$F_{ik} = A_{k;i} - A_{i;k}. \quad (2.261)$$

Snadno lze však ukázat, že platí

$$A_{k;i} - A_{i;k} = A_{k,i} - A_{i,k}. \quad (2.262)$$

Podobně i první dvojice Maxwellových rovnic si zachovává svůj původní tvar:

$$F_{ik;l} + F_{li;k} + F_{kl;i} = F_{ik;l} + F_{li;k} + F_{kl;i} = 0. \quad (2.263)$$

Nahradíme-li v Lorentzově rovnici pohybu nabitě testovací částice v elektromagnetickém poli

$$mc \frac{du^i}{d\tau} = \frac{q}{c} F^{ik} u_k \quad (2.264)$$

derivaci  $\frac{du^i}{d\tau}$  absolutní derivací, dostaneme rovnici pohybu testovací částice v elektromagnetickém a gravitačním poli ve tvaru

$$mc \left( \frac{du^i}{ds} + \Gamma_{kl}^i u^k u^l \right) \equiv mc \frac{Du^i}{ds} = \frac{q}{c} F^{ik} u_k. \quad (2.265)$$

Rovnice kontinuity  $j^i_{;i} = 0$  bude mít v zakřiveném prostoročase obecný tvar

$$j^i_{;i} = 0, \quad (2.266)$$

a druhá část Maxwellových rovnic  $F^{ik}_{;k} = -\frac{4\pi}{c} j^i$  se v gravitačním poli zobecní na tvar

$$F^{ik}_{;k} = -\frac{4\pi}{c} j^i. \quad (2.267)$$

Čtyřvektor proudové hustoty je ve STR definován jako

$$j^i = \rho \frac{dx^i}{dt}, \quad (2.268)$$

kde  $\rho = \frac{dQ}{dV}$  je hustota rozložení náboje v prostoru.

Po transformaci do křivočarých souřadnic přechází element objemu  $dV$  v  $\sqrt{\gamma} \cdot dV$ , kde  $\gamma$  je determinant prostorového metrického tenzoru

$$\gamma_{\alpha\beta} \text{ a } dV = dx^1 + dx^2 + dx^3.$$

Čtyřproud v obecných rovnicích ( 2.266 ) a ( 2.267 ) bude dán výrazem

$$j^i = \frac{\rho \cdot c}{\sqrt{g_{00}}} \frac{dx^i}{dx^0}. \quad ( 2.269 )$$

Pro ujasnění vlivu gravitace na elektromagnetické jevy je zajímavé rozepsat rovnice ( 2.263 ) a ( 2.267 ) v trojrozměrném tvaru.

Zavedeme-li veličiny

$$E_\alpha \equiv F_{0\alpha}, \quad D^\alpha \equiv \sqrt{g_{00}} \cdot F^{0\alpha}, \quad B_{\alpha\beta} \equiv F_{\alpha\beta}, \quad H^{\alpha\beta} \equiv \sqrt{g_{00}} \cdot F^{\alpha\beta}, \quad ( 2.270 )$$

budou v nich mít rovnice ( 2.263 ) a ( 2.267 ) po separaci prostorových a časových složek tvar

$$\begin{aligned} \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial x^\gamma} + \frac{\partial B_{\gamma\alpha}}{\partial x^\beta} + \frac{\partial B_{\beta\gamma}}{\partial x^\alpha} &= 0, \\ \frac{\partial B_{\alpha\beta}}{\partial x^0} + \frac{\partial E_\alpha}{\partial x^\beta} - \frac{\partial E_\beta}{\partial x^\alpha} &= 0; \end{aligned} \quad ( 2.271 )$$

$$\begin{aligned} \gamma^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x^\alpha} (\gamma^{1/2} \cdot D^\alpha) &= 4\pi\rho, \\ \gamma^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x^\beta} (\gamma^{1/2} \cdot H^\alpha) + \gamma^{-1/2} \frac{\partial}{\partial x^0} (\gamma^{1/2} \cdot D^\alpha) &= -4\pi\rho \frac{dx^\alpha}{dx^0}. \end{aligned} \quad ( 2.272 )$$

Jestliže je gravitační pole statické, dají se tyto rovnice přepsat v běžné trojrozměrné vektorové symbolice

$$\mathbf{D} = \frac{\mathbf{E}}{g_{00}^{1/2}} \quad ; \quad \mathbf{B} = \frac{\mathbf{H}}{g_{00}^{1/2}}$$

$$\operatorname{div} \mathbf{B} = 0 \quad ; \quad \operatorname{rot} \mathbf{E} = -\frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t} \quad (2.273)$$

$$\operatorname{div} \mathbf{D} = 4\pi\rho \quad ; \quad \operatorname{rot} \mathbf{H} = \frac{1}{c} \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} + \frac{4\pi}{c} \mathbf{j},$$

kde vektor intenzity magnetického pole  $\mathbf{H}$  má složky

$$H_{\alpha} = -\frac{1}{2} \gamma^{1/2} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} H^{\beta\gamma}, \quad (2.274)$$

a vektor magnetické indukce  $\mathbf{B}$  má složky

$$B^{\alpha} = -\frac{1}{2} \gamma^{-1/2} \varepsilon^{\alpha\beta\gamma} B_{\beta\gamma}. \quad (2.275)$$

Pohlédneme-li na rovnice ( 2.273 ) z hlediska negravitační fyziky, ihned shledáme, že mají tvar Maxwellových rovnic elektromagnetického pole v látkovém prostředí s permitivitou a permeabilitou

$$\varepsilon = \mu = \frac{1}{\sqrt{-g_{00}}} = \frac{1}{\left(1 + \frac{2\varphi}{c}\right)^{\frac{1}{2}}}. \quad (2.276)$$

Zakřivený prostoročas má tedy na elektromagnetické pole podobný vliv jako elektricky a magneticky měkké látkové prostředí.

Elektromagnetické vlnění, které je řešením Maxwellových rovnic, se tedy bude v nehomogenním gravitačním poli šířit nerovnoměrně a křivočaře, stejně jako je tomu i v případě rovnice nulové geodetiky ( 2.260 ) popisující pro změnu pohyb fotonů hmotnosti

$$m = \frac{\hbar\omega}{c^2}. \quad (2.277)$$

Díky univerzálnosti gravitační interakce zde neexistuje žádná disperze.

V silných nehomogenních gravitačních polích lze tudíž očekávat zajímavé optické jevy (jako např. gravitační čočky), podobné těm, které vznikají v opticky nehomogenních látkových prostředích.

Zbývá ještě vyjasnit vztahy mezi prostoročasovými intervaly událostí v prostoročase a jejich souřadnicemi  $x^i$  v obecné vztažné soustavě  $S$ . Vydeme z výrazu pro invariantní prostoročasový interval

$$ds^2 = -c^2 d\tau^2 = g_{ik} dx^i dx^k \quad (2.278)$$

a zavedeme inerciální vztažnou soustavu  $\tilde{S}$  takovou, že je momentálně v klidu vůči vztažné soustavě  $S$  v daném bodě.

Potom jak délky infinitesimálních měřících tyčí, tak i časové intervaly budou stejné v soustavě  $S$  i  $\tilde{S}$ .

V lokálně inerciální soustavě  $\tilde{S}$  se souřadnicemi  $\tilde{x}^i$  je

$$ds^2 = -c^2 d\tau^2 = \eta_{ik} dx^i dx^k = -(dx^0)^2 + d\tilde{x}^\alpha d\tilde{x}_\alpha. \quad (2.279)$$

Vztah mezi časovou souřadnicí  $x^0$  a vlastním časem  $\tau'$  snadno určíme, vezmeme-li dvě události, které z hlediska referenční soustavy  $S$  nastaly krátce po sobě v tomtéž místě.

Interval mezi těmito událostmi je pak (2.278), a protože  $dx^\alpha = 0$ , je

$$ds^2 = -c^2 d\tau^2 = g_{00} (dx^0)^2, \quad (2.280)$$

tj.

$$d\tau = \frac{1}{c} \sqrt{-g_{00}} dx^0, \quad (2.281)$$



což můžeme pro slabá gravitační pole přepsat ve tvaru

$$d\tau = \frac{dx^0}{c} \left( 1 + \frac{2\varphi}{c^2} \right)^{\frac{1}{2}} = \left( 1 + \frac{\varphi}{c^2} \right) dt. \quad (2.282)$$

Pro získání vztahu mezi skutečnými délkami a prostorovými souřadnicemi  $x^\alpha$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ), musíme výraz pro délku elementární měřicí tyče v klidové lokálně inerciální soustavě  $\tilde{S}$

$$dl^2 = \sum_{\alpha=1}^3 (dx^\alpha)^2 = d\tilde{x}^\alpha d\tilde{x}_\alpha \quad (2.283)$$

přetransformovat do obecné (neinerciální) soustavy  $S$ .

Pro vlastní délku nekonečně krátké měřicí tyče pak dostáváme vztah

$$dl^2 = \left( g_{\alpha\beta} - \frac{g_{0\alpha}g_{0\beta}}{g_{00}} \right) dx^\alpha dx^\beta = \gamma_{\alpha\beta} dx^\alpha dx^\beta, \quad (2.284)$$

kde

$$g_{ik} = \eta_{lm} \frac{\partial \tilde{x}^l}{\partial x^i} \frac{\partial \tilde{x}^m}{\partial x^k} = \frac{\partial \tilde{x}^\alpha}{\partial x^i} \frac{\partial \tilde{x}_\alpha}{\partial x^k} - \frac{\partial \tilde{x}^0}{\partial x^i} \frac{\partial \tilde{x}^0}{\partial x^k} \quad (2.285)$$

a

$$g_{00} = \left( \frac{\partial \tilde{x}^0}{\partial x^0} \right)^2, \quad (2.286)$$

$$g_{0\alpha} = \frac{\partial \tilde{x}^\gamma}{\partial x^0} \frac{\partial \tilde{x}_\gamma}{\partial x^\alpha} - \frac{\partial \tilde{x}^0}{\partial x^0} \frac{\partial \tilde{x}^0}{\partial x^\alpha},$$

$$g_{\alpha\beta} = \frac{\partial \tilde{x}^\gamma}{\partial x^\alpha} \frac{\partial \tilde{x}_\gamma}{\partial x^\beta} - \frac{\partial \tilde{x}^0}{\partial x^\alpha} \frac{\partial \tilde{x}^0}{\partial x^\beta}.$$

Pro interval vlastního času pak dostáváme

$$d\tilde{x}^0 = \frac{\partial x^0}{\partial x^k} dx^k ,$$

$$d\tilde{x}^\alpha = \frac{\partial x^\alpha}{\partial x^\beta} dx^\beta , \quad ( 2.287 )$$

$$\frac{\partial x^\alpha}{\partial x^0} = 0 ,$$

tj.

$$(d\tau)^2 = -\frac{1}{c^2} g_{00} (dx^0)^2 , \quad ( 2.288 )$$

ve shodě s ( 2.281 ).

Výraz  $\left( g_{\alpha\beta} - \frac{g_{0\alpha}g_{0\beta}}{g_{00}} \right)$  tedy udává metriku neinerciální vztažné

soustavy v třírozměrném prostoru, tj. trojrozměrnou metriku  $\gamma_{\alpha\beta}$  indukovanou metrikou prostoročasu  $g_{ik}$ .

Oddělením prostorových členů v identitě  $g_{ik} g^{ik} = 0$  lze odvodit vztahy mezi metrikou prostoru a prostoročasu:

$$\gamma^{\alpha\beta} = -g^{\alpha\beta} , \quad ( 2.289 )$$

$$g_{00}\mathcal{V} = -g ,$$

kde  $g$  je determinant sestavený z  $g_{ik}$  a  $\mathcal{V}$  je determinant ze složek  $\gamma_{\alpha\beta}$ .

Aby byla vztažná soustava odpovídající metrickému tenzoru  $g_{ik}$  fyzikálně realizovatelná, musí být trojrozměrná metrická forma ( 2.284 ) pozitivně definitní, a podle ( 2.281 ) musí též platit  $g_{00} < 0$ .

Tyto, tzv. Hilbertovy podmínky vyjadřujeme pomocí determinantů a subdeterminantů metrického tenzoru takto:

$$\begin{vmatrix} g_{00} & g_{01} \\ g_{10} & g_{11} \end{vmatrix} < 0 \quad , \quad \begin{vmatrix} g_{00} & g_{01} & g_{02} \\ g_{10} & g_{11} & g_{12} \\ g_{20} & g_{21} & g_{22} \end{vmatrix} > 0 \quad , \quad g < 0 \quad . \quad ( 2.290 )$$

Existuje-li vztažná soustava, v níž složky metrického tenzoru  $g_{ik}$  nezávisí na časové souřadnici  $x^0$ , nazývá se příslušné gravitační pole stacionární.

Pokud ve stacionárním poli navíc existuje vztažná soustava, v níž všechny smíšené komponenty metrického tenzoru  $g_{0\alpha}$  jsou rovny nule, jedná se o statické gravitační pole, ve kterém jsou oba toky času ekvivalentní.

Z gravitačního zákona plyne, že statická gravitační pole jsou buzena statickým rozložením hmoty, avšak gravitační pole sféricky symetrického tělesa ve vakuu je statické i tehdy, když toto těleso radiálně pulzuje, jak si ukážeme později.

Stacionární gravitační pole může být v praxi buzeno pouze kompaktním izolovaným tělesem, neboť v soustavě několika volných těles způsobí jejich gravitační interakce vzájemné pohyby, takže výsledné gravitační pole bude proměnné.

Příkladem stacionárního pole je gravitační pole okolo axiálně symetrického tělesa, rovnoměrně rotujícího kolem své osy.

Toto pole však není statické, neboť oba směry toku času zde nejsou ekvivalentní.

Při obrácení šipky času se mění znaménko úhlové rychlosti rotace tělesa.

Uveďme si ještě jeden významný důsledek vztahu mezi intervalovým a vlastním souřadnicovým časem, kterým je již zmíněný gravitační rudý posuv.

Dle vztahu ( 2.281 ) budou ve dvou místech s různým gravitačním potenciálem témuž intervalu souřadnicového času odpovídat různé intervaly vlastního času.

Nechť ve stacionárním gravitačním poli se v bodě  $P_1$  nachází zdroj světla, který vyše dva světelné impulsy oddělené intervalem  $\Delta\tau(P_1)$  vlastního času.

Souřadnicový časový interval mezi těmito událostmi pak bude

$$\Delta t(P_1) = \frac{1}{c} \cdot \Delta x^0(P_1) = \frac{\Delta \tau(P_1)}{\sqrt{-g_{00}(P_1)}}. \quad (2.291)$$

Tyto světelné signály se šíří prostorem a budou zachyceny pozorovatelem v bodě  $P_2$ .

Protože ve stacionárním gravitačním poli složky metrického tenzoru nezávisí na časové souřadnici, bude interval souřadnicového času  $\Delta t(P_2)$  mezi okamžiky přijetí obou impulsů pozorovatelem  $P_2$  stejný, jako v bodě vyslání  $P_1$ , tj.

$$\Delta t(P_2) = \Delta t(P_1). \quad (2.292)$$

Protože

$$\Delta \tau(P_2) = \Delta t(P_2) \sqrt{-g_{00}(P_2)}, \quad (2.293)$$

bude

$$\frac{\Delta \tau(P_2)}{\Delta \tau(P_1)} = \left[ \frac{g_{00}(P_2)}{g_{00}(P_1)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.294)$$

Stejně tak, bude-li v bodě  $P_1$  probíhat periodický proces vyzařování světelných vln, pak počet těchto kmitů za jednotku souřadnicového času bude stejný ve všech bodech trajektorie šířícího se záření a poměr mezi periodami  $T(P_1)$  a  $T(P_2)$  záření v místech  $P_1$  a  $P_2$  bude dán opět vztahem (2.294).

Poměr frekvencí proto bude

$$\frac{\omega(P_2)}{\omega(P_1)} = \left[ \frac{g_{00}(P_1)}{g_{00}(P_2)} \right]^{\frac{1}{2}}. \quad (2.295)$$

Ve slabém gravitačním poli je

$$g_{00}(P) \approx -\left(1 + \frac{2\varphi(P)}{c^2}\right), \quad (2.296)$$

takže platí

$$\frac{\omega(P_2)}{\omega(P_1)} = \left[ \frac{1 + \frac{2\varphi(P_1)}{c^2}}{1 + \frac{2\varphi(P_2)}{c^2}} \right]^{\frac{1}{2}} \approx 1 + \frac{1}{c^2} [\varphi(P_2) - \varphi(P_1)], \quad (2.297)$$

neboli

$$\frac{\Delta\omega}{\omega} = \frac{\omega(P_2) - \omega(P_1)}{\omega(P_1)} \approx \frac{\varphi(P_2) - \varphi(P_1)}{c^2} = \frac{\Delta\varphi}{c^2}. \quad (2.298)$$

Gravitační pole je projevem geometrie prostoročasu ovlivňované univerzálně veškerou hmotou ~ energií.

Bude tedy přirozené jej popsat obecnou rovnicí tvaru

$$\boxed{\text{Objekt popisující geometrii prostoročasu}} = \boxed{\text{Objekt popisující distribuci energie ~ hmoty.}}, \quad (2.299)$$

přičemž pro slabá gravitační pole musí dávat správnou newtonovskou limitu, tj. Poissonovu rovnici

$$\Delta\varphi = 4\pi\rho G \quad (2.300)$$

s potenciálem  $\varphi$  souvisejícím s metrickým tenzorem vztahem

$$g_{00} = -\left(1 + \frac{2\varphi}{c^2}\right), \quad (2.301)$$

kde

$$\frac{d^2 x^\alpha}{dt^2} - \frac{c^2}{2} \frac{\partial h_{00}}{\partial x^\alpha} = 0 \quad (2.302)$$

a

$$h_{00} = -\frac{2\varphi}{c^2}. \quad (2.303)$$

V tomto případě tenzor  $g_{ik}$  nezávisí na  $x_0$ ,  $g_{0\alpha} = 1$  ( $\alpha = 1, 2, 3$ ) a existuje vztažná soustava, v níž může být metrický tenzor rozložen na

$$g_{ik}(x) = \eta + h_{ik}(x), \quad |h_{ik}| \ll 1. \quad (2.304)$$

Objektem, který vyčerpávajícím způsobem a nezávisle na konkrétní struktuře popisuje distribuci a pohyb hmoty a energie ve fyzikální soustavě je tenzor energie-hybnosti  $T_{ik}$ .

Označíme-li levou stranu (2.299), popisující geometrii prostoročasu jako  $G_{ik}$ , dostaneme rovnice gravitačního pole ve tvaru

$$G_{ik} = K \cdot T_{ik}, \quad (2.305)$$

kde  $K$  je nějaká konstanta, kterou je třeba určit.

K tomu je třeba přesněji specifikovat veličinu  $G_{ik}$  tím, že na ni budeme klást několik rozumných fyzikálních požadavků:

- 1)  $G_{ik}$  musí být symetrický tenzor 2. řádu, aby byl konzistentní s  $T_{ik}$ .
- 2)  $G_{ik}$  je objekt popisující gravitační pole a tedy geometrii prostoročasu. Měl by být proto sestaven z metrického tenzoru  $g_{ik}$  a tenzoru křivosti  $R^i_{klm}$ .

- 3) Z důvodu lokálního zachování energie a hybnosti zdroje musí být kovariantní čtyřdivergence  $G^{ik}_{;k} = 0$ .
- 4) V rovinném prostoročase musí být  $G_{ik} \rightarrow 0$ .
- 5)  $G_{ik}$  je lineární funkcí tenzoru křivosti, takže obsahuje derivace metrického tenzoru  $g_{ik}$  jen do druhého řádu, přičemž tyto druhé derivace jsou obsaženy lineárně (tj. aby  $G_{ik}$  byl lineární v  $\frac{\partial^2 g_{ik}}{\partial x^i \partial x^k}$  s koeficienty které jsou funkcemi pouze  $g_{ik}$ , nikoliv jeho prvních derivací).

Podmínky 1 – 5 umožňují jednoznačné nalezení veličiny  $G_{ik}$ .

Z diferenciální geometrie plyne, že veličina vyhovující podmínkám 1, 2 a 5 musí mít tvar

$$G_{ik} = A \cdot R_{ik} + B \cdot g_{ik} R + C \cdot g_{ik}, \quad (2.306)$$

kde  $A, B, C$ , jsou konstanty.

Dle požadavku 4, musí být  $C \rightarrow 0$ , přesněji

$$C = \Lambda \approx 2 \cdot 10^{-57} \text{ cm}^{-2}, \quad (2.307)$$

což je tzv. kosmologická konstanta.

Vzhledem k její nepatrné hodnotě ji prozatím můžeme pro zjednodušení položit rovnu nule, později se k ní však ještě vrátíme.

Z požadavku 3 vzhledem k Bianchiho identitám ( 1.63 ), ( 1.65 ) plyne

$$B = -\frac{A}{2}, \quad (2.308)$$

čili

$$A \cdot \left( R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R \right) = K \cdot T_{ik}. \quad (2.309)$$

Konstantu  $A$  je možno zahrnout do konstanty  $K$ , položíme-li

$$k \equiv \frac{K}{A}. \quad (2.310)$$

Tím dostáváme  $G_{ik}$ , čili tzv. **Einsteinův tenzor** ve tvaru

$$G_{ik} \equiv R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R = k \cdot T_{ik}. \quad (2.311)$$

Konstantu  $k$  snadno určíme z požadavku, aby pro slabá pole přešly obecné rovnice v Newtonův gravitační zákon.

Nejprve provedeme v rovnicích ( 2.311 ) limitní přechod k nerelativistické mechanice tím, že budeme uvažovat gravitační pole slabé, s čímž souvisí též nízké rychlosti objektů v tomto poli.

Jako zdroj gravitačního pole použijeme nejjednodušší klasický model nestrukturované hmoty – nekoherentní prach popsáný tenzorem energie – hybnosti

$$T^{ik} = \rho \cdot c^2 \cdot V^i V^k. \quad (2.312)$$

Za předpokladu malých rychlostí můžeme položit  $V^i = (1, 0, 0, 0)$ , takže nenulová komponenta  $T^{ik}$  bude pouze

$$T^{00} = \rho \cdot c^2. \quad (2.313)$$

Jednoduchou algebraickou úpravou rovnic ( 2.311 ) dostaneme tvar

$$R^{ik} = k \cdot \left( T^{ik} - \frac{1}{2} g^{ik} T \right), \quad (2.314)$$

který se nám v případě ( 2.313 ) redukuje na jedinou rovnici

$$R^{00} = \frac{1}{2} k \cdot \rho \cdot c^2, \quad (2.315)$$



neboť ostatní rovnice jsou v naší aproximaci rovny nule.

$R^{00}$  vypočítáme ze vztahu ( 1.55 ), přičemž s ohledem na slabost pole členy druhého řádu vypustíme.

Dostaneme tak

$$R^{00} = \frac{\partial \Gamma_{00}^{\alpha}}{\partial x^{\alpha}}, \quad (2.316)$$

což použitím vztahu ( 2.296 ) platného pro slabá pole dává

$$R^{00} \approx \frac{1}{c^2} \Delta \varphi. \quad (2.317)$$

Položíme-li pak

$$k = \frac{8\pi G}{c^4}, \quad (2.318)$$

získáme Poissonovu rovnici pole ( 2.300 ) ve tvaru

$$\Delta \varphi = \frac{1}{2} k \cdot \rho \cdot c^4 = 4\pi G \rho. \quad (2.319)$$

Její řešení bude

$$\varphi = -G \int \frac{\rho \cdot dV}{R}, \quad (2.320)$$

což je Newtonův zákon jako speciální případ Einsteinových gravitačních rovnic pro velmi slabá gravitační pole.

Nyní již nám nic nebrání zapsat hledané rovnice gravitačního pole:

$$G_{ik} \equiv R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R = \frac{8\pi G}{c^4} T_{ik}. \quad (2.321)$$

Kontrakcí metrickým tenzorem  $g_{ik}$  dostaneme

$$R - 2R = T \frac{8\pi G}{c^4}, \quad (2.322)$$

čímž rovnice gravitačního pole obdržíme též v ekvivalentním tvaru

$$R_{ik} = \frac{8\pi G}{c^4} \left( T_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} T \right), \quad (2.323)$$

kde  $T \equiv T_i^i$ .

Tato soustava nelineárních parciálních diferenciálních rovnic druhého řádu pro složky metrického tenzoru  $g_{ik}$  plně určuje prostoročasuovou distribuci metrického tenzoru, tj. prostorové rozložení a časovou evoluci gravitačního pole buzeného soustavou zdrojů popsanou tenzorem energie – hybnosti  $T_{ik}$ .

Kovariantní čtyřdivergence levé strany  $G_{ik}$  je identicky rovna nule. Je to důsledek Bianchiho identit ( 1.63 ), ( 1.65 ), pro tenzor křivosti, tj. projevem geometricko – topologického principu „hranice hranice je rovna nule“.

V našem případě se jedná o orientovanou dvojrozměrnou hranici trojrozměrné hranice čtyřrozměrné oblasti prostoročasu.

Z gravitačních rovnic ( 2.321 ) tedy přirozeně plyne lokální zákon zachování energie a hybnosti zdroje ve tvaru

$$T^{ik}{}_{;k} = 0, \quad (2.324)$$

jakožto důsledek obecné komplementarity mezi zdrojem a jím buzeným polem jež má takové vlastnosti, z nichž automaticky plynou zákony zachování tohoto zdroje.

Zdroj kolem sebe vytváří pole právě tak, aby se sám zachovával.

Tento zákon zachování vede k rovnicím pohybu zdrojové soustavy popsané příslušným tenzorem energie – hybnosti.

Gravitační rovnice tedy určují nejen gravitační pole pro dané rozložení hmoty, ale určují i pohyb hmotných zdrojů. Na rozdíl od všech ostatních teorií pole není v OTR nutno zvlášť zvenčí postulovat pohybové rovnice zkušebních částic v daném gravitačním poli. Tyto rovnice pohybu se dají získat jako důsledek rovnic pole. Např. pro elektromagnetické pole z Maxwellových rovnic

$$F^{ik}{}_{;k} = \frac{4\pi j^i}{c} \text{ identicky plyne díky antisymetrii tenzoru}$$

elektromagnetického pole  $F_{ik}$  vztah  $j^i{}_{;i} = 0$ , což je rovnice kontinuity proudu, čili zákon zachování elektrického náboje.

Maxwellovy rovnice tak omezují svobodu zdrojů pouze po stránce elektrické, zatímco Einsteinovy rovnice postihují všechny formy pohybu zdrojů.

Gravitace a mechanika jsou zde vzájemně sjednoceny na rozdíl od Newtonovy teorie, kde jsou zcela nezávislé.

Podobně, máme-li volné elektromagnetické pole ve vakuu, pak z Einsteinových rovnic, na jejichž pravé straně bude vystupovat tenzor energie – hybnosti elektromagnetického pole:

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R = 2F_{il}F_k{}^l - \frac{1}{2} g_{ik} F_{lm}F^{lm} \quad (2.325)$$

plynou i Maxwellovy rovnice tohoto volného elektromagnetického pole  $F^{ik}{}_{;k} = 0$ . Přitom  $R = 0$  a  $R^m R^k = \delta_i^k \left( \frac{1}{4} R_{lm} R^{lm} \right)$ .

Einsteinovy a Maxwellovy rovnice se tak dají sloučit do jediné soustavy rovnic 4. řádu (Misnerovy – Wheelerovy rovnice), která v geometrickém tvaru obsahuje jak Maxwellovu elektrodynamiku (bez nábojů) v zakřiveném prostoročase, tak i Einsteinovy rovnice udávající zakřivení prostoročasu tímto elektromagnetickým polem. Elektromagnetické pole zanechává na geometrii prostoročasu charakteristické stopy, z nichž jej lze poznat a jejichž chováním je určeno.



**Charles W. Misner (1932)**

Elektromagnetické pole, které je určeno výrazem obsahujícím odmocniny Ricciho tenzoru křivosti  $R_{ik}$  lze tedy plně popsat pomocí pouze gravitačních veličin – složek metrického tenzoru.

Maxwellovy rovnice jsou pak dány vztahem mezi Ricciho křivostí a rychlostí, s jakou se mění.

Zákony elektrodynamiky tak nabývají čistě geometrický charakter.

Dostáváme tak velice zajímavý popis, v němž elektromagnetické pole je projevem prázdného zakřivovaného prostoročasu.

Naneštěstí však, jak později ukázal Witten, při integraci Misnerových – Wheelerových rovnic mohou příslušné Cauchyovy okrajové podmínky odpovídat současně více než jednomu maxwellovskému poli. Uvedená metoda geometrického popisu elektrodynamiky se tím stává nejednoznačnou.



**Baron Augustin-Louis Cauchy (1789 – 1857)**

Uvažujme nyní dvě částice, z nichž jedna je umístěna v bodě  $x^i$  (tu budeme považovat za vztažnou) a druhá v blízkém bodě  $x^i + \varepsilon^i$  kde  $\varepsilon^i$  je čtyřvektor prostoročasové odlehlosti těchto dvou testovacích částic. Jestliže nyní tyto částice necháme spolu volně padat v gravitačním poli, budou se pohybovat po světočárách  $x^i(\lambda)$ ,  $x^i(\lambda) + \varepsilon^i(\lambda)$ , kde čtyřvektor  $\varepsilon^i(\lambda)$  spojuje body obou trajektorií se stejným  $\lambda$ . Kovariantní derivaci jejich odchylky, tj. deviaci obou geodetik snadno odvodíme s použitím vztahu ( 1.48 ) pro kovariantní derivaci vektoru podél křivky.

Hledaná rovnice deviace geodetik pak bude

$$\frac{D^2 \varepsilon^i}{d\lambda^2} - R^i_{klm} \frac{dx^k}{d\lambda} \frac{dx^m}{d\lambda} \varepsilon^l = 0. \quad ( 2.326 )$$

Vidíme, že geodetiky dvou těles padajících vedle sebe v nehomogenním gravitačním poli se budou vůči sobě obecně odchylovat, přičemž vzájemné zrychlení obou částic  $\frac{D^2 \varepsilon^i}{d\lambda^2}$  je úměrné tenzoru křivosti  $R^i_{klm}$ .

Složky tenzoru křivosti tedy popisují gradienty gravitačních sil – **slapové síly**.

V rovinném prostoročase jsou všechny složky tenzoru křivosti nulové, takže k deviaci geodetik nedochází.

Abychom nyní získali úplnější obraz o vlivu gravitace na pohyb hmoty, přejdeme od dvou geodetik k celé soustavě takových geodetik, zaplňujících jistou oblast prostoročasu.

Do každého bodu prostoru v této oblasti dosadíme hmotnou částici a necháme ji volně padat zakřiveným prostoročasem, přičemž zaznamenáváme její světočáru.

Každým bodem prostoročasu v uvažované oblasti bude potom procházet některá z těchto geodetik.

Stanovíme-li pro každou geodetiku v každém jejím bodě jednotkový tečný vektor  $V^i$ , dostáváme pro kongruenci geodetik celé pole tečných vektorů  $V^i(x^k)$ .

Divergence, respektive konvergence  $C$  geodetik v dané oblasti je dána kovariantní čtyřdivergencí vektorového pole  $V^i$ :

$$C = V^i_{;i} . \quad ( 2.327 )$$

Konvergence kongruence geodetik časového typu se řídí důležitou **Raychaudhuriho diferenciální rovnicí**

$$\frac{d}{ds} C = R_{ik} V^i V^k + 2\sigma^2 + \frac{1}{3} C^2 , \quad ( 2.328 )$$

kde  $\delta$  popisuje vzájemný „skluz“ geodetik.



**Amal Kumar Raychaudhuri (1923 – 2005)**

V případě, že by kongruence geodetik rotovala, bude na pravé straně ( 2.328 ) ještě člen  $-2\omega^2$ .

Pro konvergenci izotropních geodetik platí analogická rovnice

$$\frac{d}{d\lambda} C = R_{ik} V^i V^k + 2\sigma^2 + \frac{1}{2} C^2 , \quad ( 2.329 )$$

Kde  $V^i$  jsou izotropní tečné vektory.

Poslední dva členy na pravých stranách rovnic ( 2.328 ), ( 2.329 ) jsou nezáporné, takže o výsledném znaménku změn konvergence rozhoduje člen  $R^{ik} V^i V^k$ .

Aby i tento člen byl nezáporný, musí být dle Einsteinových rovnic ( 2.323 ) gravitační pole buzeno tenzorem energie – hybnosti splňujícím nerovnost

$$\left( T_{ik} - \frac{1}{2} T \cdot g_{ik} \right) V^i V^k \geq 0 \quad (2.330)$$

pro všechny  $V^i$  časového typu, resp. nerovnost

$$T_{ik} V^i V^k \geq 0 \quad (2.331)$$

pro izotropní vektory  $V^i$  (pro něž je  $g_{ik} V^i V^k = 0$ ).

Pro  $T^{ik}$  ideální kapaliny je to splněno tehdy, jestliže hustota a tlak splňují relace

$$\rho \geq 0 \quad ; \quad \rho + p_\alpha \geq 0 \quad (2.332)$$

resp.

$$\rho \geq 0 \quad ; \quad \rho + \sum_{\alpha} p_{\alpha} \geq 0. \quad (2.333)$$

ukazuje se, že energetická podmínka ( 2.330 ) je splněna pro všechny dosud známé formy hmoty, neboť hustota energie je nezáporná a k narušení energetické podmínky by bylo třeba velkého záporného tlaku  $p$ .

V reálném vesmíru je však zřejmě splněna ještě o něco silnější podmínka tzv. **energodynamance**.

Pro každý vektor  $V_i$  časového typu je

$$T^{ik} V_i V_k \geq 0 \quad (2.334)$$

a vektor  $T^{ik} V_k$  je časového nebo izotropního typu, takže lokální hustota energie je vždy nezáporná a navíc lokální proud energie se realizuje pouze na plášti nebo uvnitř světelného kuželu.

Energie tedy dominuje nad všemi ostatními složkami tenzoru energie – hybnosti, tj. platí

$$T^{00} \geq |T^{ik}|. \quad (2.335)$$

Pro  $T^{ik}$  ideální kapaliny je to splněno tehdy, když

$$\rho \geq 0 \quad ; \quad -\rho \leq p_\alpha \leq \rho \quad (\alpha = 1, 2, 3), \quad (2.336)$$

tj. když tlak nepřevyšuje hustotu energie (rychlost zvuku nepřevyšuje rychlost světla).

Člen  $R_{ik}V^iV^k$  v rovnicích ( 2.328 ), ( 2.329 ) je tedy při splnění rozumných energetických podmínek ( 2.330 ) rovněž nezáporný, takže pro rychlost změny konvergence geodetik platí nerovnost

$$\frac{d}{ds}C \geq \frac{1}{3}C^2 \geq 0. \quad (2.337)$$

Podle níž konvergence monotónně roste podél kongruence geodetik. Pokud jsou tedy splněny energetické podmínky pro tenzor energie – hybnosti takové, aby podle Einsteinových rovnic bylo

$$R_{ik}V^iV^k \geq 0 \quad (2.338)$$

pro každý vektor  $V^i$  časového resp. izotropního typu, má gravitace přitažlivý charakter a na geodetiky časového resp. izotropního typu fokusující účinek.

Einsteinovy rovnice gravitačního pole byly do značné míry zkonstruovány podle vzoru Maxwellových rovnic elektrodynamiky. Při sledování analogií mezi gravitací a elektrodynamikou se vynoří základní otázky: Jakou rychlostí se šíří gravitační interakce? Existuje gravitační analogie elektromagnetických vln? Jakým způsobem gravitace zprostředkovává přenos energie?

Mějme izolovanou hmotnou soustavu popsanou tenzorem energie - hybnosti  $T^{ik}$  v asymptoticky rovinném prostoročase.

Souřadnicovou soustavu zvolíme tak, aby ve velikých vzdálenostech od hmotného zdroje spojitě přecházela v asymptotickou inerciální (Lorenzovu) soustavu.



Složky metrického tenzoru budeme vyšetřovat ve tvaru

$$g_{ik} = \eta_{ik} + h_{ik} \quad (2.339)$$

kde

$$\eta_{ik} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.340)$$

je Minkowského metrika a

$$h_{ik} \stackrel{\text{def}}{=} g_{ik} - \eta_{ik} \quad (2.341)$$

jsou odchylky od této metriky.

Definujeme-li si veličiny

$$h_{ik} \stackrel{\text{def}}{=} h_i^i = h_{ik} \eta^{ik}, \quad \psi_{ik} \stackrel{\text{def}}{=} h_{ik} - \frac{1}{2} \eta_{ik} h \quad (2.342)$$

a souřadnice zvolíme tak, aby  $\psi_{ik}$  všude vyhovovalo kalibračním podmínkám  $\psi_{i;k}^k = 0$ , můžeme Einsteinovy rovnice vyjádřit pomocí  $\psi^{ik}$

$$\psi^{ik}{}_{,lm} \eta^{lm} = -16\pi (T^{ik} + t^{ik}), \quad (2.343)$$

kde  $t^{ik}$  jsou veličiny druhého a vyššího řádu v  $\psi^{ik}$ .

Řešení takto linearizovaných Einsteinových rovnic lze vyjádřit podobně jako v elektrodynamice, formou retardovaných integrálů

$$\psi^{ik}(t, x^\alpha) = \frac{4G}{c^4} \iiint \frac{[T^{ik} + t^{ik}]_{\left(t-\frac{R}{c}, x'^\alpha\right)}}{R} d^3 x'^\alpha, \quad (2.344)$$

kde

$$R = \sqrt{\sum_{t^{ik}} (x^\alpha - x'^\alpha)^2} . \quad ( 2.345 )$$

Pokud je  $t^{ik} \neq 0$ , je vztah ( 2.344 ) vlastně integrální rovnicí, neboť  $t^{ik}$  je funkcí  $\psi^{ik}$ .

Pro slabá pole však v aproximaci linearizované teorie není pseudotenzor  $t^{ik}$  přítomen.

Vztah ( 2.344 ) ukazuje, že výsledné gravitační pole není určeno okamžitým rozložením hmoty ~ energie, neboť změny v gravitačním poli se šíří rychlostí  $c$ , což se dalo očekávat již při odvozování OTR z STR, v níž hraje rychlost světla rozhodující úlohu pro strukturu prostoročasu.

V dostatečně velikých vzdálenostech od zdrojové soustavy bude gravitační pole již značně slabé, takže ve vztahu ( 2.339 ) bude  $|h_{ik}| \ll 1$ .

Předpokládejme nyní, že prostoročas je takřka rovinný s Minkowského metrikou, jen slabě deformovanou gravitačním polem vyjádřeným veličinami  $h_{ik}$ .

Tedy budou všechny nelineární efekty zpětného vlivu pole na metriku zanedbatelně malé.

Takovéto gravitační pole pak můžeme vyšetřovat coby nezávislé pole, na pozadí Minkowského prostoročasu podobně, jako např. pole elektromagnetické.

Při vhodných kalibračních podmínkách platí pro slabá pole linearizované Einsteinovy rovnice ( 2.343 ).

Pro vakuum je pak

$$\square \psi_{ik} = 0 \quad ( 2.346 )$$

což je rovnice popisující gravitační vlny šířící se rychlostí světla. Nejjednodušší řešení linearizovaných gravitačních rovnic ve vakuu

$$\psi_{lm} = \text{Re} \left( A_{lm} \cdot e^{i k_r \cdot x^r} \right) \quad (2.347)$$

popisuje rovinnou monochromatickou vlnu s amplitudou  $A_{lm}$  a vlnovým vektorem  $k_r$ .

Z rovnice ( 2.343 ) plynou vztahy

$$k_r k^r = 0 \quad , \quad A_{lm} k^m = 0, \quad (2.348)$$

podle nichž  $\mathbf{k}$  je izotropní vektor kolmý k  $\mathbf{A}$ .

Z toho tedy vychází, že gravitační vlny jsou příčné vlny s frekvencí

$$\omega = k^0 = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}, \quad (2.349)$$

šířící se rychlostí světla ve směru  $\mathbf{k}$ .

Harmonická řešení ( 2.347 ) tvoří úplnou bázi funkcí  $\psi$  a libovolné řešení vlnových rovnic může být složeno jako superpozice těchto řešení.

Lorentzovy podmínky snižují počet veličin  $\psi_{ik}$  z deseti na šest nezávislých komponent.

Lorentzovy podmínky jsou invariantní vůči transformaci

$$\psi_{ik} \rightarrow \psi_{ik} + f_{i,k} + f_{k,i}, \quad (2.350)$$

kde  $f_i$  jsou čtyři libovolné funkce splňující podmínky

$$f_{i,l}{}^l = 0 \quad , \quad |\psi_{ik}| \ll 1. \quad (2.351)$$

Vhodnou volbou  $f_i$  pak mohou být veličiny  $\psi_{ik}$  redukovány na pouhé dvě nezávislé složky odpovídající dvěma stavům polarizace.

Pro monochromatickou rovinnou vlnu ( 2.347 ) lze vybrat kalibrační funkce  $f_i$  tak, aby bylo

$$\psi_{i0} = 0 \quad , \quad \psi_{\alpha\alpha} = 0. \quad (2.352)$$

Potom bude

$$h_{ik} = \psi_{ik} \quad , \quad h_{i0} = 0 \quad , \quad h_{\alpha\alpha} = 0. \quad (2.353)$$

Tato velmi výhodná kalibrace se nazývá **příčná s nulovou stopou** a označujeme ji zkratkou TT (Transversal Traceless).

V TT-kalibraci mají složky tenzoru křivosti s komponentami  $h_{ik}$  velmi jednoduchou souvislost:

$$R_{\alpha 0 \beta 0} = R_{\alpha 0 0 \beta} = -R_{\alpha 0 0 \beta} = -R_{0 \alpha \beta 0} = -\frac{1}{2} h_{\alpha\beta, 00} = -\frac{1}{2c^2} \frac{\partial^2 h_{\alpha\beta}}{\partial t^2}. \quad (2.354)$$

Pakliže se rovinná vlna šíří ve směru osy  $x$ , je popsána tenzorem

$$h_{ik} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & h_{yy} & h_{zz} \\ 0 & 0 & h_{yz} & -h_{yy} \end{pmatrix}. \quad (2.355)$$

Nenulové jsou zde tedy jen 2 složky  $h_{ik}$  :

$$h_{yy} = -h_{zz} = \operatorname{Re}\left(A_+ \cdot e^{-i\omega(t-x)}\right) \quad , \quad h_{yz} = -h_{zy} = \operatorname{Re}\left(A_x \cdot e^{-i\omega(t-x)}\right). \quad (2.356)$$

Při přechodu k novému souřadnému systému  $S'$  pootočenému kolem osy šíření gravitačních vln  $z$  o úhel  $\vartheta$ , tj. při transformaci

$$t' = t, \quad x' = x \cdot \cos \vartheta + y \cdot \sin \vartheta, \quad y' = y \cdot \cos \vartheta - x \cdot \sin \vartheta, \quad z' = z, \quad (2.357)$$

se jednotlivé vektory polarizace gravitační vlny transformují podle vztahu

$$\mathbf{e}'_+ = \mathbf{e}_+ \cdot \cos(2\vartheta) + \mathbf{e}_x \cdot \sin(2\vartheta), \quad \mathbf{e}'_x = -\mathbf{e}_+ \cdot \sin(2\vartheta) + \mathbf{e}_x \cdot \cos(2\vartheta).$$

( 2.358 )

jestliže se rovinná vlna  $\psi$  při pootočení o úhel  $\vartheta$  kolem směru šíření transformuje podle zákona

$$\psi' = \psi \cdot e^{i \cdot s \cdot \vartheta}, \quad ( 2.359 )$$

tj. zůstává-li invariantní při pootočení o úhel  $\vartheta = \frac{2\pi}{s}$  kolem osy šíření,

pak  $s$  je spin kvanta přiřazeného této vlně.

Pro gravitační vlny vychází tento úhel invariance  $\vartheta = \pi$ , čemuž odpovídá spin  $s = 2$ .

To je spin nesený hypotetickým gravitačním kvantem – **gravitonem**. Gravitační vlny přenášejí hmotnost ~ energii a proto jsou jednak ovlivňovány gravitačním polem, jímž procházejí, a jednak spolupůsobí jako zdroj gravitace, tj. přispívají k celkové křivosti prostoročasu.

Říkáme, že gravitační vlny nejsou gravitačně neutrální.

Podobně, ani elektromagnetické vlny nejsou gravitačně neutrální, avšak jsou elektromagneticky neutrální – nenabitě, tj. neovlivnitelné elektrickým a magnetickým polem, ani jiným elektromagnetickým polem.

Lokálně lze gravitační vlny považovat za rozruch v geometrii prostoročasu šířící se rychlostí  $c$ , vyvolaný nějakým nerovnoměrným pohybem hmoty, a šířící se rovinným prostoročasem, aniž je třeba brát zřetel na interakci s celkovým zakřivením prostoročasu, na jehož pozadí se vlny šíří a na nelineární interakce mezi nimi navzájem.

Globálně však zakřivení prostoročasu způsobené rozložením ostatní hmoty bude vytvářet frekvenční posuv gravitačních vln a měnit směr jejich šíření.

K tomuto globálnímu zakřivení přitom bude přispívat i energie nesená samotnými gravitačními vlnami.

Při šíření gravitačních vln budou tedy vznikat charakteristické nelineární efekty.

Např. dvě gravitační vlny se budou vzájemně rozptylovat.

Abychom mohli odlišit vlnící se část křivosti prostoročasu od globální křivosti pozadí způsobené přítomností hmotných těles, musí být

střední délka gravitačních vln mnohem menší než charakteristický poloměr křivosti prostoročasu, na jehož pozadí se vlny šíří

$$\lambda \ll R. \quad (2.360)$$

Místní křivost ve vlně může být přitom podstatně větší, než globální křivost prostoročasu.

Odlišení pozadí od vln je umožněno nikoliv rozdílem v zakřivení, ale rozdílností měřítek, v nichž se zakřivení periodicky mění.

Jak si ukážeme dále, samotné gravitační vlny vyvolávají dle

Einsteinových rovnic též globální zakřivení prostoročasu úměrné  $A/\lambda$ . Proto ke splnění základní podmínky krátkovlnné aproximace (2.360) je nutné, aby též amplituda  $A$  gravitačních vln byla malá.

Prostoročas vyhovující podmínce (2.360) lze potom analyzovat jednak z hlediska lokálních měřítek, a jednak z hlediska globálních vlastností prostoročasu.

Příslušná metoda analýzy gravitačních vln v krátkovlnné aproximaci se nazývá **Isaacsonův formalismus**.

Metrický tenzor pak můžeme rozepsat jako

$$g_{ik} = g_{ik}^{\text{glob}} + h_{ik}, \quad (2.361)$$

kde  $g_{ik}^{\text{glob}}$  je globální metrika prostoročasu, na jehož pozadí se vlny  $h_{ik}$  šíří.



**Richard A. Isaacson (1937)**

Podobně též tenzor křivosti  $R_{ik}$  lze rozložit v řadu podle malého bezrozměrného parametru  $\lambda/R \ll 1$ .

$$R_{ik} = R_{ik}^{glob} + R_{ik}^{(1)} + R_{ik}^{(2)} + F\left(\frac{\lambda}{R}\right)^3, \quad (2.362)$$

kde  $R_{ik}^{glob}$  je globální křivost pozadí, monotónní v rozsahu většího množství vlnových délek,

$$R_{ik}^{(1)} = \frac{1}{2} \left( -h_{;ik} - h_{ik;l}{}^l + h_{lk;i}{}^l + h_{li;k}{}^l \right) \quad (2.363)$$

je vlnící se část křivosti prostoročasu, která je lineární v  $\lambda/R$  a

$$R_{ik}^{(2)} = \frac{1}{2} \left[ \frac{1}{2} h_{lm;i} h^{lm}{}_{;k} + h^{lm} \left( h_{lm;ik} + h_{ik;lm} - h_{li;km} - h_{lk;im} \right) + h_k{}^{l;m} \left( h_{li;m} - h_{mi;l} \right) - \left( h_{;m}{}^{lm} - h_{;m}{}^{ml} \right) \right] \quad (2.364)$$

je část tenzoru křivosti kvadratická v  $\lambda/R$ .

Spouštění a zvedání indexů, stejně jako kovariantní derivování se zde všude provádí podle metriky  $g_{ik}^{glob}$ .

Obecné vakuové rovnice pole  $R_{ik} = 0$  mohou pak být rozděleny na části a analyzovány jednak z hlediska lokálního, a jednak z hlediska globálního.

V oblastech srovnatelných s vlnovou délkou  $\lambda$  gravitačních vln, kde se globální zakřivení prostoročasu přímo neuplatňuje, musí být

$$R_{ik}^{(1)} = 0. \quad (2.365)$$

Pomocí veličin

$$\psi_{ik} \stackrel{\text{def}}{=} h_{ik} - \frac{1}{2} h \cdot g_{ik}^{glob}, \quad (2.366)$$

volbou vhodné kalibrace, v níž je

$$\psi_{i;k}^k = 0 \quad (2.367)$$

a vynecháním členů vyšších řádů můžeme rovnici přepsat ve tvaru

$$\psi_{ik;l}{}^l + 2R_{likm}^{\text{glob}} \psi^{lm} = 0, \quad (2.368)$$

což je rovnice šíření gravitačních vln v zakřiveném prostoročase, analogická rovnici šíření elektromagnetických vln v geometrické optice.

Rovnice říká, že gravitační vlny se šíří podél izotropních geodetik.

$$k_i k^j = 0 \quad , \quad k_{i;j} k^j = 0 \quad (2.369)$$

jsou křivky kolmé k plochám konstantní fáze, které jsou dány rovnicí izotropních geodetik a představují tzv. **gravitační paprsky**.

Vektor polarizace je kolmý k paprskům a přenáší se podél nich paralelním přenosem.

Amplituda  $A$  vlny s vlnovým vektorem  $\mathbf{k}$  tvoří **diabatický invariant**

$$\left( A^2 \cdot k^\alpha \right)_{;\alpha} = 0, \quad (2.370)$$

vyjadřující zákon zachování počtu gravitonů při šíření gravitačního záření v prostoročase, jehož globální křivost se mění pomalu ve srovnání s frekvencí vln.

Optické efekty, jako je rudý posuv, či zakřivování paprsků v gravitačním poli, tedy platí i pro gravitační vlny.

Při globálním přístupu provádíme zprůměrnování všech veličin přes oblast o rozměrech několikanásobku vlnové délky, abychom oddělili globální křivost prostoročasu od lokálních fluktuací v gravitačních vlnách, které se tím zahladí:

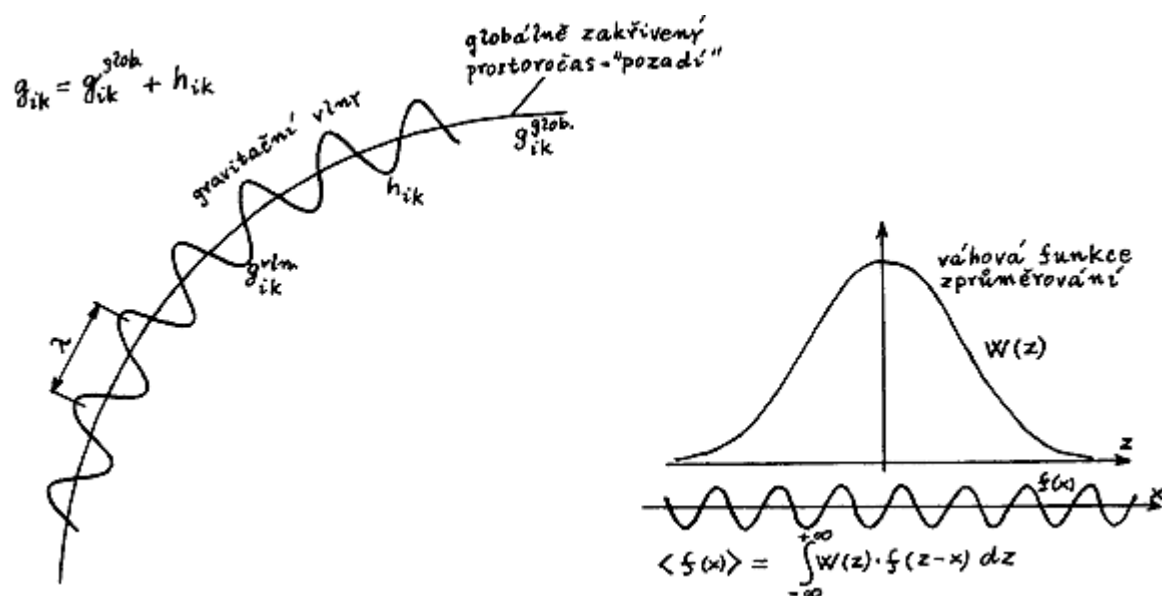


$$\langle R_{ik}^{(1)} \rangle = 0, \quad (2.371)$$

zatímco globální křivost prostoročasu se prakticky nezmění

$$\langle R_{ik}^{\text{glob}} \rangle \approx R_{ik}^{\text{glob}}. \quad (2.372)$$

Obr. 2.12



V Isaacsonově krátkovlnné aproximaci lze odlišit globální zakřivení prostoročasu ("pozadí") od lokálních fluktuací gravitačních vln, pokud je vlnová délka mnohem menší než charakteristický poloměr křivosti prostoročasu. Tato separace se provádí pomocí zprůměrování přes oblast o několika vlnových délkách za použití vhodné normované váhové funkce  $W(z)$  konvergující k nule s rostoucí vzdáleností.

Ke středování použijeme vhodné normované váhové funkce konvergující k nule s rostoucí vzdáleností (s rostoucím počtem vlnových délek), a paralelního přenosu do vyšetřovaného místa podél vhodné geodetiky v metrice  $g_{ik}^{\text{glob}}$ .

Rovnice pole pak budou

$$R_{ik}^{\text{glob}} + \langle R_{ik}^{(2)} \rangle = 0, \quad (2.373)$$

což lze upravit na tvar Einsteinových rovnic

$$G_{ik}^{\text{glob}} \equiv R_{ik}^{\text{glob}} - \frac{1}{2} R^{\text{glob}} g_{ik}^{\text{glob}} = \frac{8\pi G}{c^4} T^{\text{vln}}, \quad (2.374)$$

kde zdroj na pravé straně

$$T_{ik}^{\text{vln}} = -\frac{c^4}{8\pi G} \left( \langle R_{ik}^{(2)} \rangle - \frac{1}{2} g_{ik}^{\text{glob}} \langle R^{(2)} \rangle \right) \quad (2.375)$$

je tzv. **Isacsonův tenzor** efektivní rozprostřené energie~hybnosti gravitačních vln.

Rovnice ( 2.374 ) popisují, jak gravitační vlny při svém šíření globálně zakřivují prostoročas.

$T_{ik}^{\text{vln}}$  tedy můžeme interpretovat jako tenzor energie~hybnosti gravitačních vln šířících se prostoročasem  $g_{ik}^{\text{glob}}$ , pro který z rovnic ( 2.374 ) plynou běžné zákony zachování

$$T_{\text{vln};k}^{ik} = 0. \quad (2.376)$$

Zbylé členy vyšších řádů v rovnici  $R_{ik} = 0$  popisují shora zmíněné nelineární efekty, jako jsou interakce vln se sebou samými, apod. Šíří-li se prostoročasem elektromagnetické či gravitační vlny, budí tedy kolem sebe gravitační pole, tj. zakřivují prostoročas, v němž se šíří, což samozřejmě nezůstává bez zpětného vlivu na jejich pohyb. Dle OTR mohou velmi mohutné gravitační či elektromagnetické vlny vytvořit ve svém okolí natolik silné gravitační pole, že jím budou nuceny trvale obíhat po uzavřených drahách.

Vytvoří si tak kolem sebe jakýsi gravitační vlnovod ze zakřivené geometrie prostoročasu, v němž trvale cirkulují.

Takovýto útvar nazýváme elektromagnetický, resp. gravitační **geon**. Jestliže bude geon celkové hmoty  $M$  sféricky symetrický, bude vzbuzovat sféricky symetrické gravitační pole a prostoročasná metrika bude mít tvar **warpové bubliny**:

$$ds^2 = -g_{tt}c^2 dt^2 + g_{rr} dr^2 + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2). \quad (2.377)$$

Radiální složka metrického tenzoru má tvar

$$g_{rr} = \frac{1}{1 - \frac{2G \cdot m(r)}{r \cdot c^2}}, \quad (2.378)$$

kde  $m(r)$  je hmotnost-energie obsažená uvnitř koule o poloměru  $r$ .  
Časová složka vně geonu má tvar

$$g_{tt} = 1 - \frac{2GM}{r \cdot c^2}, \quad (2.379)$$

uvnitř geonu má pak hodnotu

$$g_{tt} = \frac{1}{9}. \quad (2.380)$$

Čas tedy plyne uvnitř geonu třikrát pomaleji než daleko od geonu. Pro vzdáleného pozorovatele bude geon vykazovat gravitační účinky jako běžná hmota.

Na oběžnou dráhu okolo geonu lze např. navést družici.

V případě elektromagnetického geonu se nelze vcelku čemu divit, neboť již z STR plyne, že elektromagnetické vlny přenášejí energii a tedy i hmotu.

Gravitační geon je však tvořen pouze vlněním gravitačního pole, tj. vlněním geometrie prázdného prostoročasu.

Vlnící se křivost prázdného prostoročasu se tedy z dálky může jevit jako hmotný útvar.

Gravitační geon je tak názorným příkladem hmoty utvořené doslova z prázdného prostoročasu pouhým vlněním jeho křivosti.

Z toho důvodu je geon důležitým útvarem z hlediska unitární teorie pole.

Geon je však jen extrémním případem konstrukce hmotného objektu z geometrie prostoročasu.

Ve skutečnosti je každá gravitační vlna takovouto hmotou bez hmoty složenou z vakua chápaného v obvyklém smyslu.

To, jak se i v prázdném prostoru bez obvyklých hmotných zdrojů objevuje jakási efektivní hmota mající globální gravitační účinky, je podobné situaci, z elektrodynamiky, kdy se i ve vakuu bez nábojů a proudů pro nestacionární elektromagnetické pole objevuje Maxwellův posuvný proud

$$\frac{1}{4\pi} \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} \quad ( 2.381 )$$

mající magnetické účinky stejné jako skutečný proud elektrických nábojů.

Podle analogie s elektrodynamikou lze očekávat, že gravitační vlny se budou vyzařovat při nerovnoměrném pohybu těles, kdy dochází k časovým změnám buzeného gravitačního pole.

Nejobvyklejším zdrojem radiace v elektrodynamice je záření elektrického dipólu, jehož intenzita ( 2.177 ) je dána druhou derivací dipólového momentu

$$\mathbf{d} = \sum_{n=1}^N q_n \mathbf{r}_n \quad ( 2.382 )$$

soustavy  $N$  elektrických nábojů  $q_n$  podle času.

V gravitaci úlohu elektrického dipólového momentu hraje dipólový moment

$$\mathbf{d} = \sum_{n=1}^N m_n \mathbf{r}_n \quad ( 2.383 )$$

rozložení hmoty v soustavě  $N$  částic  $m_n$  .

První časová derivace tohoto dipólového momentu

$$\dot{\mathbf{d}} = \sum_{n=1}^N m_n \dot{\mathbf{r}}_n \equiv \mathbf{p} \quad (2.384)$$

je rovna celkové hybnosti soustavy, takže jeho druhá derivace bude rovna nule díky zákonu zachování hybnosti.

Ukazuje se tedy, že dipólové gravitační záření nemůže existovat.

Gravitační záření musí mít nejméně kvadrupólový charakter.

Souvisí to s teorémem nauky o spinu záření, podle něhož je multipolarita záření, jež se může vyzařovat

$$m \geq 2s, \quad (2.385)$$

kde  $s$  je spin daného pole.

Pro elektromagnetické pole se spinem  $s = 1$  je záření nejméně dipólové, pro gravitační pole se spinem  $s = 2$  je nejméně kvadrupólové.

Za zdroj gravitačních vln můžeme tudíž považovat obecně každou fyzikální soustavu s časově proměnnou distribucí hmoty  $\rho(t, x^\alpha)$ .

Je-li pohyb hmoty ve zdroji pomalý vzhledem k rychlosti světla, je-li dále zdroj malý ve srovnání s délkou vyzařovaných vln a pole v něm je slabé, pak celkové množství energie gravitačně vyzářené soustavou za jednotku času bude dáno známou kvadrupólovou formulí

$$\frac{dE}{dt} = -\frac{G}{45c^5} \ddot{K}_{\alpha\beta}^2, \quad (2.386)$$

kde tečky značí derivaci podle času  $t$  a

$$K_{\alpha\beta}(t) = \int \rho(t, x) (3x_\alpha x_\beta - \delta_{\alpha\beta} x_\gamma x^\gamma) dV \quad (2.387)$$

je tenzor kvadrupólového momentu rozložení hmoty ve zdroji.

Intenzita záření ve směru jednotkového vektoru  $\mathbf{n}$  dle elementu prostorového úhlu  $d\Omega$  je dána vztahem

$$dL = \frac{G}{36\pi c^5} \left[ \frac{1}{4} (\ddot{K}_{\alpha\beta} n^\alpha n^\beta)^2 + \frac{1}{2} (\ddot{K}_{\alpha\beta}^2 - \ddot{K}_{\alpha\beta} \ddot{K}_{\alpha\gamma} n^\beta n^\gamma) \right] d\Omega. \quad (2.388)$$

Pro vyzařování gravitačních vln je tedy důležitý pouze kvadrupólový moment zdroje, jenž se musí měnit s časem, zatímco monopólový a dipólový moment k vyzařování nepřispívají.

Nejjednodušším laboratorním zdrojem gravitačních vln je tyč rotující kolem kolmé osy úhlovou rychlostí  $\omega$ .

Dle vztahu ( 2.386 ) bude takováto rotující tyč gravitačně vyzařovat energii

$$\frac{dE}{dt} = \frac{32G}{5c^5} I^2 \omega^6. \quad (2.389)$$

Takřka polovina všech hvězd je součástí binárních nebo vícenásobných hvězdných systémů.

Máme-li dvě tělesa o hmotnostech  $m_1$  a  $m_2$ , která na sebe vzájemně působí gravitačními silami a obíhají po kruhových drahách poloměru  $r$  okolo společného těžiště úhlovou rychlostí  $\omega$ , bude tato soustava dle vztahu ( 2.386 ) monochromatickým gravitačním zářičem o výkonu

$$\frac{dE}{dt} = \frac{32G}{5c^5} \left( \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 r^4 \omega^6 \quad (2.390)$$

Při obíhání po eliptické dráze s hlavní poloosou  $a$  a excentricitě  $e$  je gravitačně vyzařovaný výkon dán obecnějším vztahem

$$\frac{dE}{dt} = \frac{32G}{5c^5} \frac{m_1^2 m_2^2}{m_1 + m_2} a^{-5} f(e) \quad (2.391)$$

kde funkce

$$f(e) = \left( 1 + \frac{73}{24} e^2 + \frac{37}{96} e^4 \right) (1 - e^2)^{\frac{7}{2}} \quad (2.392)$$

zachycuje rostoucí vliv výstřednosti na intenzitu záření.

Při eliptickém pohybu obsahují vyzařované gravitační vlny nejen druhou harmonickou frekvence oběžného pohybu, jak je tomu při kruhovém obíhání, ale i vyšší harmonické.

Přítom intenzita vyzařování je nejvyšší v perihéliu, kde jsou si obě tělesa nejblíže a zrychlení zde dosahuje svého maxima.

To vede k postupnému zmenšování excentricity a eliptický pohyb se postupně mění v pohyb po kružnici.

Účinnost gravitačního vyzařování energie si můžeme demonstrovat na příkladu ocelové tyče o průměru 1 m a délce 20 m, tj. s celkovou hmotností takřka 500 tun, která rotuje okolo svého těžiště rychlostí cca 4 otáček za sekundu limitovanou pevností materiálu.

Takto extrémně silný umělý gravitační zářič, který je na samé hranici technických možností lidstva, by měl dle vztahu ( 2.389 ) gravitační zářivý výkon pouhých  $W = 2 \cdot 10^{-29} \text{ W}$ .

Existují však astrofyzikální jevy, při nichž dochází k vyzařování daleko mohutnějších gravitačních výkonů.

Soustava dvou černých děr o hmotnostech řádově srovnatelných s hmotností Slunce, obíhajících okolo společného těžiště v těsné blízkosti, by dokonce gravitačně vyzařovala výkon téměř  $10^{47} \text{ W}$ .

Kinetická energie obou objektů by se tímto velmi rychle vyzářila, což by vedlo ke kvaziperiodickému pohybu s postupným hroucením objektů do společného těžiště a následným splynutím v jediný celek. Dle principu ekvivalence lokální působení gravitačních vln na jedinou izolovanou bodovou částici neexistuje.

Proto opět vezmeme dvě blízké testovací částice  $A$  a  $B$  a budeme sledovat periodické změny vzdálenosti mezi nimi způsobené kmitající křivostí prostoročasu.

Částici  $A$  budeme považovat za vztažnou a spojíme s ní referenční soustavu, která bude lokálně inerciální podél celé světočáry částice  $A$ . Vektor  $\mathcal{E}^i$  z rovnice derivace deviace geodetik zde bude odpovídat souřadnici  $x_B^i$  částice  $B$ , takže

$$\frac{D^2 x_B^i}{d\tau'^2} + R_{klm}^i \frac{dx_A^k}{d\tau'} x_B^l \frac{dx_A^m}{d\tau'} = 0. \quad ( 2.393 )$$

Jelikož pracujeme v lokálně inerciální kartézské soustavě spojené s částicí  $A$  budou absolutní derivace přecházet v obyčejné derivace a souřadnicový čas  $t$  splývá s vlastním časem  $\tau$  s přesností prvního řádu.

Vzhledem k ( 2.354 ) pak rovnice deviace nabývá jednoduchý tvar

$$\frac{d^2 x_B^\alpha}{dt^2} + R_{0\beta 0}^\alpha x_B^\beta = \frac{1}{2c^2} \frac{\partial^2 h_\beta^\alpha}{\partial t^2} x_B^\beta. \quad ( 2.394 )$$

Jestliže v čase  $t = 0$  bylo  $h_{\alpha\beta} = 0$  a částice byly vůči sobě v klidu, můžeme integrací rovnice dospět ke vztahu

$$x_B^\alpha(t) \approx x_B^\alpha(0) \left[ \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2} h_{\alpha\beta}(t, x_A^\gamma = 0) \right] \quad ( 2.395 )$$

vyjadřující oscilace polohy částice  $B$  vzhledem k částici  $A$  působené gravitační vlnou.

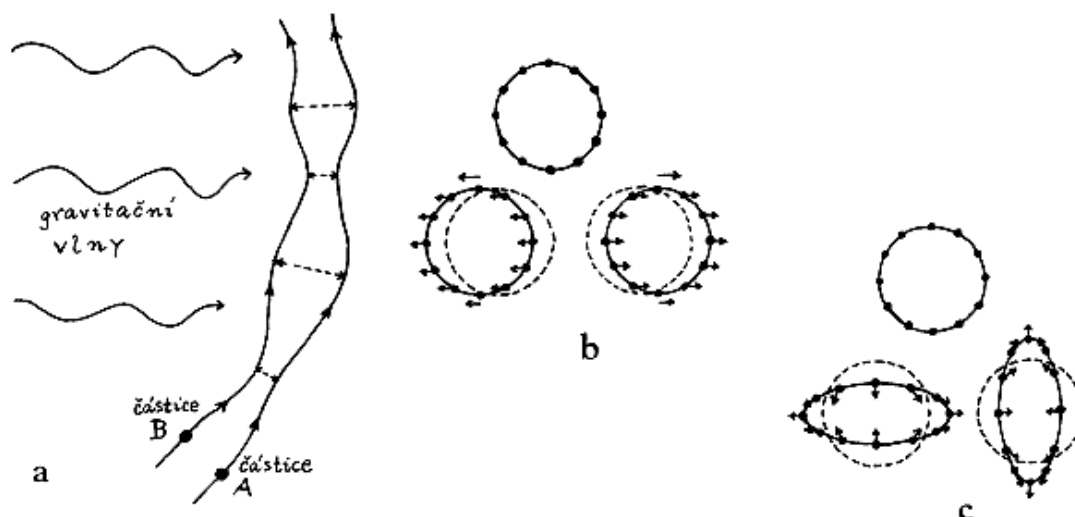
Přitom oscilace vykazují pouze ty komponenty  $x_B^\alpha(t)$ , jež jsou kolmé k vektoru šíření rovinné vlny  $k^\alpha$ , což je očekávaný výsledek vzhledem ke ( 2.347 ). Jestliže však sledované testovací částice nejsou volné, ale interagují spolu negravitačními silami, je třeba rovnici ( 2.326 ) nahradit rovnicí

$$\frac{D^2 \varepsilon^i}{d\tau'^2} + R_{klm}^i \frac{dx^k}{d\tau'} \frac{dx^m}{d\tau'} \varepsilon^i = \frac{1}{m} F^i{}_{;k} \varepsilon^k, \quad ( 2.396 )$$

kde  $F^i$  je čtyřsila popisující negravitační (v praxi vždy elektromagnetickou) interakci sledovaných částic.

Obr. 2.13





- a) Světlocáry dvou volně padajících částic A a B se vlivem gravitačních vln periodicky vzdalují a přibližují.
- b) Působení (lineárně polarizované) rovinné elektromagnetické vlny dopadající kolmo k nákrese na soustavu testovacích nabitých částic umístěných na kružnici vede k periodickým posunům celého kruhu testovacích částic ve směru závislém na polarizaci vlny.
- c) Působení rovinné gravitační vlny dopadající kolmo na kruhově uspořádanou soustavu hmotných testovacích částic způsobuje periodické deformace tohoto uspořádání do elipsy střídavě ve dvou kolmých směrech daných polarizací vlny.

Rozdíl v chování rovnic ( 2.326 ) a ( 2.396 ) je oním faktorem, jenž umožňuje získávat z gravitačních vln energii a tím je detekovat. Nebýt tohoto rozdílu, pak by otázka existence gravitačních vln samotných, byla otázkou spíše filozofickou, než fyzikální.

O existenci gravitační energie tedy není pochyb.

Snahy, o nalezení vyhovujících vztahů pro lokalizaci gravitační energie nevedly zprvu ke kýženým výsledkům, neboť v jakkoli silném gravitačním poli lze v každém bodě použitím lokálně inerciální vztažné soustavy, kde  $\Gamma_{kl}^i = 0$ , anulovat všechny složky pseudotenzoru energie-hybnosti gravitačního pole  $t^{ik}$ .

Je tudíž principiálně nemožné, zavést hustotu energie gravitačního pole, nezávislou na volbě souřadnicové soustavy, a to i v případě, kdy je celková energie definována jednoznačně.

Jestliže jeden hmotný systém působí rozruch v gravitačním poli, který se šíří k druhému systému a předá mu jistou energii, vynoří se otázka, kde se nalézá energie a hybnost v časovém intervalu mezi jejím vysláním jedním systémem a jejím přijetím systémem druhým.

Zobecněním lokálního diferenciálního zákona zachování energie a hybnosti, známého ze STR, na přítomnost gravitačního pole, dostaneme dle principu ekvivalence tenzorový vztah

$$T^{ik}_{;k} = \frac{1}{\sqrt{-g}} \frac{\partial(\sqrt{-g} \cdot T^{ik})}{\partial x^k} + \Gamma^i_{mk} T^{mk} = 0, \quad (2.397)$$

který však již žádný lokální zákon zachování nevyjadřuje, neboť vlivem přítomnosti druhého členu není možný přechod mezi plošnými integrálními toky a objemovými integrály s použitím Gaussovy věty, jako je tomu ve STR.

Tam totiž stačí obklopit sledovanou soustavu myšlenou uzavřenou plochou  $S$  a přechodem od objemových integrálů k integrálům plošným s použitím Gaussovy věty a diferenciálního zákona zachování, dostaneme zákony zachování energie a hybnosti v integrálním tvaru:

$$\frac{dp^i}{dt} = - \oint_S T^{i\alpha} d^2 S_\alpha, \quad (2.398)$$

kde  $d^2 S_\alpha$  jsou složky normálového vektoru elementu plochy.

Pro izolovanou soustavu je na pravé straně ( 2.398 ) nula, takže  $p^i = \text{const.}$

V zakřiveném prostoročase OTR však, jak vidno, žádné takovéto zákony zachování energie a hybnosti izolovaných hmotných soustav neplatí.

Je to dáno tím, že se musí zachovávat nejen energie a hybnost zdrojů gravitačního pole, ale též energie a hybnost samotného gravitačního pole, které však nejsou zahrnuty do  $T^{ik}$ .

Křivost prostoročasu je totiž jistým specifickým příspěvkem k energii a hybnosti celé hmotné soustavy.

Je zřejmé, že přenáší-li gravitační pole energii, hybnost a moment hybnosti, musí mít tytéž charakteristiky hmoty (integrály pohybu) jejichž přenos zprostředkovává, stejně jako je tomu u běžných látkových prostředí.

Jak jsme však viděli, nemá smysl hovořit o lokalizaci energie gravitačního pole v prostoru, tj. o tom, zda v daném bodě je nebo není jisté množství gravitační energie.

Lokalizace gravitační energie není možná.

Energie gravitačního pole je jevem globálním a nikoli lokálním, což je plně v souladu s principem ekvivalence, podle něhož lze v libovolném místě prostoru zavést lokálně inerciální soustavu, tj. lokálně odstranit gravitační pole a s ním i lokální gravitační energii.

Lokální gravitační energie nefiguruje jako zdroj na pravé straně Einsteinových rovnic.

Nezakřivuje tedy prostoročas, nemá váhu a není nijak měřitelná.

Rozumné fyzikální vlastnosti má gravitační energie pouze v nelokálním smyslu.

Zákony zachování energie, hybnosti a momentu hybnosti jsou důsledkem homogenity času a homogenity a izotropie prostoru.

V tomto smyslu pojmy energie, hybnost a moment hybnosti souvisejí se symetrickou strukturou prostoročasu.

Za přítomnosti gravitačního pole však prostoročas obecně žádné symetrie nemá, takže lze očekávat vážné potíže se zákony zachování.

Zákon zachování energie a hybnosti si ponechává platnost pouze v lokálně inerciální vztažné soustavě, nelokalizovatelnost gravitační energie pak odpovídá nelokálnímu charakteru gravitace jako takové.

Každou úlohu v OTR lze však v principu řešit pomocí Einsteinových rovnic bez nutnosti použití zákonů zachování.

Koncepce gravitační síly a gravitační energie jsou jen způsobem interpretace křivosti prostoročasu prostřednictvím pojmů, na něž jsme zvyklí v rovinném prostoročase negravitační fyziky.

S lokálními symetriemi, a tím i s lokalizací gravitační energie se v OTR musíme rozloučit.

Energie a hybnost jsou však natolik zásadní a pro praxi důležité pojmy, že by jejich úplná ztráta byla dosti nepříjemná.

Naštěstí se vyskytují i případy, kdy existují určité globální symetrie prostoročasu (např. sférická, axiální, rovinná, apod.), jež nám umožňují zachovat alespoň pojem celkové energie.

Má-li prostoročas některé z těchto symetrií, vyjádřených příslušnými Killingovými vektory  $\xi_k$ , pak lze sestavit vektor

$$p^i = T^{ik} \xi_k, \quad (2.399)$$

pro který díky Killingovým rovnicím platí vztah

$$p^i{}_{;i} = T^{ik} \xi_{k;i} = \frac{1}{2} T^{ik} (\xi_{k;i} + \xi_{i;k}) = 0 \quad (2.400)$$

vyjadřující zákon zachování  $p^i$ .



Wilhelm Karl Joseph Killing (1847 – 1923)

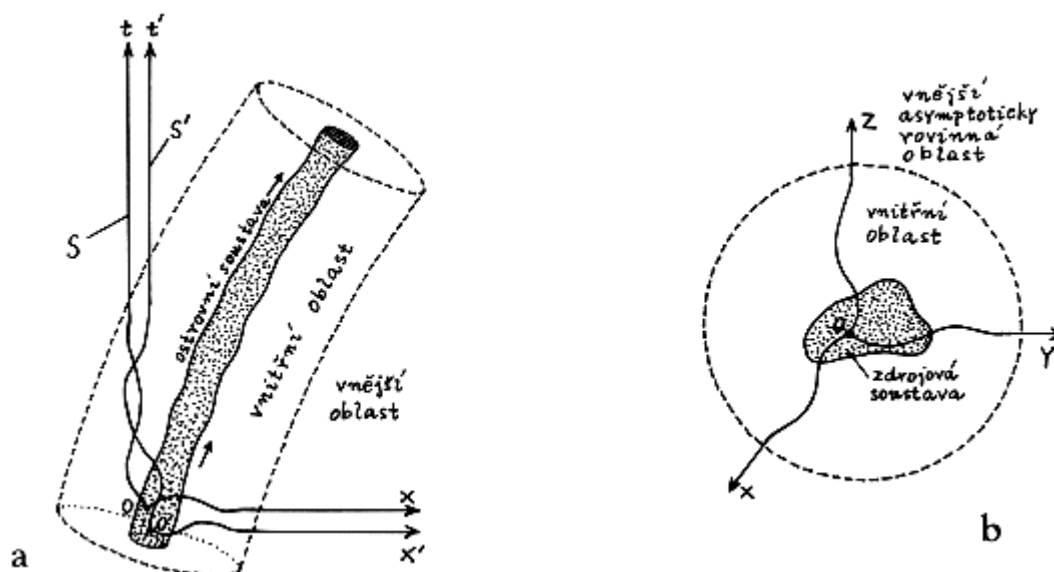
V závislosti na tom, je-li Killingův vektor  $\xi_k$  časového, resp. prostorového typu, vyjadřuje vztah ( 2.400 ) zákon zachování energie, resp. hybnosti.

Zásadní význam však mají i situace, kdy vyšetřovaná soustava je prostorově omezená a v dostatečně veliké vzdálenosti od ní se prostoročas stává rovinným.

Jedná se o tzv. **asymptotické symetrie** kdy je možno celkovou energii a hybnost soustavy dát do souvislosti s invariancí vůči časovým a prostorovým posuvům vzhledem k pozorovateli v nekonečnu.

V asymptoticky plochém prostoru můžeme kolem ostrovní zdrojové soustavy vymezit natolik velkou prostorovou oblast, aby vně ní bylo gravitační pole zanedbatelné.

Obr. 2.14



Prostoročas (a) a prostor (b) kolem ostrovní fyzikální soustavy si můžeme rozdělit na tři části:

1. Oblast vlastního zdroje (tečkovaně), kde kromě silných gravitačních polí je  $T^{ik} \neq 0$ .
2. Blízká (ale vakuová) "vnitřní" oblast, kde gravitační pole a zakřivení prostoročasu může být ještě silné.
3. Vzdálená asymptoticky rovinná vnější oblast, kde gravitační pole je velmi slabé (prostoročas téměř plochý) a kde lze zavést asymptoticky inerciální vztažnou soustavu. Použijeme-li v ostrovní soustavě asymptoticky Galileovské vztažné soustavy, dostaneme jednoznačný výraz pro celkovou energii-hybnost  $P^i$  soustavy, který se zachovává, je nezávislý na volbě souřadnicové soustavy ve vnitřní oblasti a chová se jako čtyřvektor vzhledem k asymptoticky Lorentzovým transformacím.

Pro výpočet energie a hybnosti pole je pak třeba vzít souřadnou soustavu s počátkem v blízkosti zdroje, která by ve vnější asymptoticky rovinné oblasti prostoročasu přecházela v galileiovskou soustavu, v níž

$$\lim_{r \rightarrow \infty} g_{ik}(r) \rightarrow \eta_{ik} + \lim_{r \rightarrow \infty} \left( \frac{1}{r} \right), \quad (2.401)$$

tj.

$$g_{ik}(\infty) = \eta_{ik}. \quad (2.402)$$

Ve vnitřní oblasti může být souřadná soustava zvolena libovolně, aniž to ovlivní  $p^i$ .

Celková energie a hybnost je invariantní vůči takovým transformacím souřadnic

$$x^i \rightarrow x'^i = x^i + \varepsilon^i(x), \quad (2.403)$$

jež jsou asymptoticky identické, tj.

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \varepsilon^i(x) = 0, \quad (2.404)$$

což přímo plyne ze zákona zachování pro  $p^i$ .

Vezměme nyní dvě souřadné soustavy  $\Sigma$  a  $\Sigma'$  rozdílné ve vnitřní oblasti, avšak přecházející asymptoticky v tutéž Galileiho soustavu  $\Sigma$ . Pro porovnání hodnot  $p^i$  a  $p'^i$  v těchto dvou soustavách v časových okamžicích  $t$  a  $t'$  je nutno zavést další pomocnou souřadnicovou soustavu  $\Sigma''$ , která ve vnitřní oblasti v okamžiku  $t$  splývá se souřadnou soustavou  $S$  a v okamžiku  $t'$  splývá se soustavou  $\Sigma'$ .

Ve vnější oblasti se  $\Sigma''$  nemění a splývá stále s toutéž soustavou  $\Sigma$ . Díky zákonu zachování (2.400) jsou veličiny  $p^i$  v každé vztažené soustavě konstantní a časově nezávislé, bude proto platit rovnost  $p^i(t) = p''^i(t) = p''^i(t') = p'^i(t')$ , což přímo plyne i ze známého Einsteinova integrálu pro celkovou energii soustavy uvnitř uzavřené plochy  $S$ , aplikovaného na uzavřenou plochu ležící v asymptotické oblasti (neboť žádné transformace měnící souřadnice pouze uvnitř ohraničené prostorové oblasti nemohou ovlivnit globální hodnoty těchto integrálů přes vzdálené plochy):

$$E \equiv p^0 = \frac{c^4}{16\pi G} (h_{\alpha\beta, \alpha} - h_{\alpha\alpha, \beta}) dS_\beta, \quad (2.405)$$

což vyjádřeno pomocí  $g_{ik} = \eta^{ik} + h_S^{ik}$  dává

$$p^0 = \frac{c^4}{16\pi G} (g_{\alpha\beta, \alpha} - g_{\alpha\alpha, \beta}) dS_\beta. \quad (2.406)$$

Pro stanovení celkové energie, hybnosti a momentu hybnosti každé konečné soustavy tedy stačí znát asymptotické chování metriky ve velkých vzdálenostech.

Celková energie a hybnost ostrovní soustavy se tak nejen zachovává, ale je též nezávislá na volbě souřadné soustavy, pakliže tato asymptoticky přechází v danou galileiovskou soustavu.

Protože se  $t^{ik}$  chová vzhledem k lineárním transformacím jako tenzor, tvoří složky  $p^i$  čtyřvektor vzhledem k lineárním transformacím převádějícím jednu asymptoticky galileiovskou vztažnou soustavu v druhou.

V dostatečně velikých vzdálenostech od statické ostrovní soustavy se vliv detailů v rozložení hmoty na gravitační pole postupně stírá a pole tam lze považovat za sféricky symetrické s přibližně

**Schwarzschildovskou metrikou**, kterou lze pro  $r \rightarrow \infty$  psát v tzv. **asymptotickém tvaru**

$$ds^2 \approx -c^2 \left( 1 + \frac{2\varphi}{c^2} \right) dt^2 + \left( 1 - \frac{2\varphi}{c^2} \right) (dx^2 + dy^2 + dz^2). \quad (2.407)$$



**Karl Schwarzschild (1873 – 1916)**

Pro statické pole lze navíc zanedbat retardaci a řešení (446) má tvar

$$\psi_{00} = -\frac{4\varphi}{c^4}, \quad \psi_{0\alpha} = \psi_{0\beta} = 0, \quad (2.408)$$

kde

$$\varphi(t, x^\alpha) = -G \iiint \frac{T_{00}(t, x'^\alpha)}{R} dx' dy' dz' \quad (2.409)$$

je obyčejný Newtonův potenciál.

Metrický tenzor tak nabývá jednoduchého tvaru

$$g_{ik} = \begin{pmatrix} -\left(1 + \frac{2\varphi}{c^2}\right) & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 - \frac{2\varphi}{c^2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 - \frac{2\varphi}{c^2} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 - \frac{2\varphi}{c^2} \end{pmatrix}. \quad (2.410)$$

Ve vzdálenostech  $r$  podstatně větších, než rozměry zdroje lze přibližně položit  $R \approx r$  a metriku ( 2.407 ) lze vyjádřit pomocí celkové hmotnosti

$$M = \iiint T_{00} d^3x, \quad (2.411)$$

zdrojové soustavy

$$ds^2 \approx -c^2 \left(1 + \frac{2GM}{rc^2}\right) dt^2 + \left(1 - \frac{2GM}{rc^2}\right) (dx^2 + dy^2 + dz^2). \quad (2.412)$$

Dosazením příslušných komponent metrického tenzoru ( 2.410 ) do vztahu ( 2.406 ) a integrací přes sféru poloměru  $r$  dostaneme výsledek

$$p^0 = Mc^2. \quad (2.413)$$



Abychom si ukázali reálnou existenci energie gravitačního pole a zároveň hlouběji pronikli do specifické povahy gravitační energie, vraťme se ještě k otázce vyzařování a přenosu energie gravitačními vlnami.

V gravitační vlně nelze lokalizovat energii a hybnost do oblasti menší než délka vlny.

Nelze tedy určit, jak velká energie je obsažena v různých oblastech gravitační vlny.

Jak ovšem plyne z Isaacsonova formalismu, v oblasti několika vlnových délek lze již velmi přesně určit množství přenášené energie – hybnosti.

Zakřivování prostoročasu účinkem energie nesené gravitačními vlnami popisují rovnice ( 2.374 ).

Pokud se nenacházíme ve vakuu, a kromě gravitačních vln jsou přítomna hmotná tělesa a negravitační pole popsána sumárním tenzorem energie – hybnosti  $T_H^{ik}$ , budou mít rovnice ( 2.374 ) tvar

$$G_{\text{glob}}^{ik} \equiv R_{\text{glob}}^{ik} - \frac{1}{2} R_{\text{glob}} g_{\text{glob}}^{ik} = \frac{8\pi G}{c^4} (T_H^{ik} + T_{\text{vln}}^{ik}). \quad ( 2.414 )$$

Pro stanovení energie gravitačních vln lze též poněkud oslabit základní požadavek asymptotické eukleidovosti metriky, neboť stačí vyšetřovat konečný objem podstatně převyšující délku vln.

Zdroj gravitačního záření pochopitelně ztrácí kinetickou energii přesně s toutéž rychlostí, s jakou je energie odnášena vyzařovanou gravitací.

Analýza zpětné reakce vyzařovaných gravitačních vln na zdrojovou soustavu ukázala, že uvnitř a v blízkosti zdroje se vytváří určitá malá proměnná složka prostoročasové křivosti s fází odlišnou od hlavní proměnné složky.

Tento přídatný člen způsobuje ve zdroji brzdící síly.

Výpočty ukazují, že hlavní část této přídatné složky lze při vhodné kalibraci vyjádřit ve tvaru

$$h_{00}^{\text{re}} = -\frac{2G}{15c^5} \frac{d^5 K_{\alpha\beta}}{dt^5} x^\alpha x^\beta. \quad ( 2.415 )$$

Příslušné brždění zpětnou reakcí vyzařovaných gravitačních vln lze tedy v hlavních rysech popsat pomocí vhodné modifikace Newtonova potenciálu  $\varphi^{\text{new}}$

$$\varphi = \varphi^{\text{new}} + \varphi^{\text{re}}, \quad (2.416)$$

kde

$$\varphi^{\text{re}} \equiv -\frac{1}{2}h_{00}^{\text{re}} = \frac{G}{15c^5} \frac{d^5 K_{\alpha\beta}}{dt^5} x^\alpha x^\beta \quad (2.417)$$

je potenciál brzdné síly způsobené reakcí záření. Zrychlení každé částice v potenciálu  $\varphi$  bude

$$a_\alpha = \frac{d^2 x_\alpha}{dt^2} = -\varphi_{,\alpha} = -\varphi_{,\alpha}^{\text{new}} - \varphi_{,\alpha}^{\text{re}} \quad (2.418)$$

a brzdná síla působící na částici hmotnosti  $m$  bude

$$F_\alpha = \varphi_{,\alpha}^{\text{re}} \cdot m. \quad (2.419)$$

Tato brzdná síla povede uvnitř zdroje ke ztrátě energie

$$\frac{dE}{dt} = \int \rho \cdot a_\alpha v_\alpha dV = - \int \rho \cdot \varphi_{,\alpha}^{\text{re}} v_\alpha dV, \quad (2.420)$$

kde  $v_\alpha$  je rychlost příslušného elementu  $\rho dV$ .

Průměrná rychlost, se kterou se vlivem brždění zpětnou reakcí záření bude zmenšovat energie zdrojové soustavy pak je

$$\left\langle \frac{dE}{dt} \right\rangle = \left\langle - \int \rho \cdot \varphi_{,\alpha}^{\text{re}} v_\alpha dV \right\rangle = \frac{G}{45c^5} \left\langle \left( \frac{d^3 K_{\alpha\beta}}{dt^3} \right)^2 \right\rangle = - \frac{G}{45c^5} \ddot{K}_{\alpha\beta}^2. \quad (2.421)$$

Zdroj tedy ztrácí kinetickou energii skutečně stejnou rychlostí, s jakou je energie odnášena gravitačními vlnami.

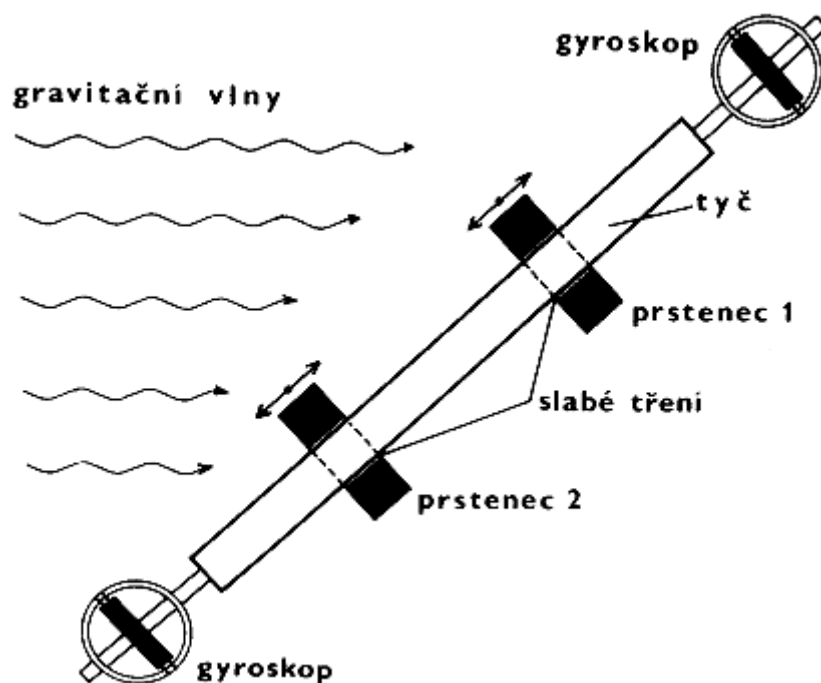
Dalším aspektem studia vlastností gravitační energie je zkoumání podmínek, za nichž mohou gravitační síly konat práci a přeměňovat tak gravitační energii v jiné druhy energie.

Jedním z takových gravitačních motorů je např. soustava rotující Země + obíhající Měsíc, která každou sekundu předá prostřednictvím svého gravitačního pole světovému oceánu řádově  $10^{11}$  J své kinetické energie, jež se projevuje mořským přílivem.

Gravitační energie se zde přeměňuje na mechanickou a tepelnou energii oceánských vod, která může být posléze člověkem přeměněna na další druhy energie – např. elektrickou.

Celý proces však probíhá hluboko uvnitř induktivní zóny, soustavy, takže veškeré efekty retardace a konečné rychlosti gravitačního působení se vzhledem k poměrně malé periodě nikterak neprojeví – přenos energie lze popsat i v rámci Newtonovy teorie.

Co se týče gravitačních vln, navrhl již v 50. letech minulého století H. Bondi velmi jednoduchý a názorný myšlenkový experiment, jehož uspořádání vidíme na obr. 2.15.



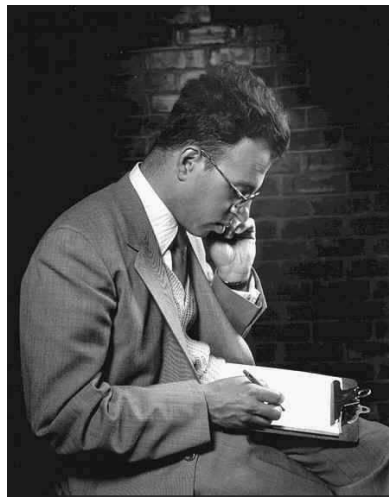
Obr. 2.15: Jednoduché uspořádání pro přeměnu energie gravitačních vln na teplo.

Na hladké tyči se mohou s minimálním třením pohybovat dva hmotné prstence.

Gyroskopy na koncích tyče zamezují její lokální rotaci.

Celý systém se pohybuje volně v prostoru a gravitační vlny v důsledku deviace geodetik posunují prstence po tyči střídavě k sobě a od sebe.

Vlivem tření prstenců o tyč se takto část energie gravitačních vln přeměňuje na teplo, jež lze z tyče odebírat.



**Sir Hermann Bondi (1919 – 2005)**

První reálně zkonstruované detektory gravitačních vln využívaly namísto třecích prstenců piezoelektrických snímačů.

Nejmodernější zařízení současnosti LIGO, používá k detekci gravitačních vln soustavu dvou na sebe kolmých obřích laserových interferometrů, každý v délce 4 kilometrů.



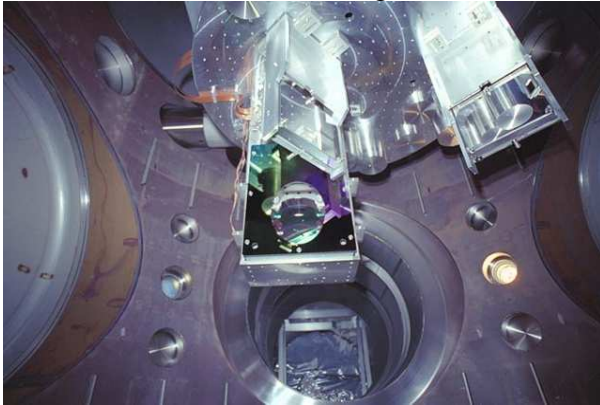
Obr. 2.16.: LIGO - dosud největší gravitační anténa světa



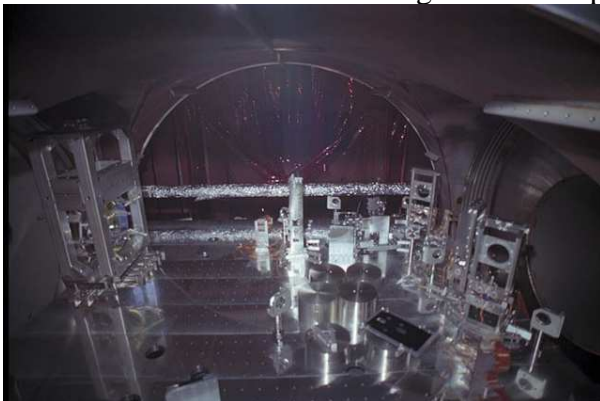
Ligo – detailní pohled na centrální budovu



Ligo – detail centrální části interferometru



Ligo – vnitřní optika interferometru



Ligo – detail detekční aparatury interferometru

Projekt vznikl ve spolupráci univerzit Caltech (California Institute of Technology) a MIT (Massachusetts Institute of Technology). Jde o dvojici zařízení vzdálených 3200 km. První z nich se nachází v Hanfordu ve státě Washington a za jeho provoz je zodpovědná univerzita Caltech. Druhá stavba je v Livingstonu ve státě Luisiana a provoz řídí MIT. Dva interferometry existují proto, aby mohla být detekce gravitačních vln potvrzena koincencí ze dvou nezávislých zdrojů.

Zvětšovat dále rozměry ramen je však neschůdné, zejména s ohledem na cenu vakuového systému. Zcela principiální omezení klade také všudypřítomná seismická aktivita, která naprosto znemožňuje detekci gravitačních vln frekvencí menších než 1 Hz pozemskými detektory. Nezbyvá, než začít uvažovat o stavbě interferometru v kosmickém prostoru. Právě to je cílem velmi ambiciózního projektu **LISA** (Laser Interferometer Space Antenna), jenž se rodí ve spolupráci evropské a americké kosmické agentury ESA a NASA. Projekt předpokládá vytvoření detektoru ve tvaru pomyslného rovnostranného trojúhelníku o stranách kolem 5 milionů kilometrů tvořeného družicemi umístěnými v jeho vrcholech. Vzájemná vzdálenost družic by se neustále interferometricky proměřovala. Celá soustava by obíhala kolem Slunce ve vzdálenosti 1AU, tj. sledovala by dráhu Země, ale tak, aby úhel Země-Slunce-detektor byl zhruba  $20^\circ$ .



**Christian Andreas Doppler (1803 – 1852)**

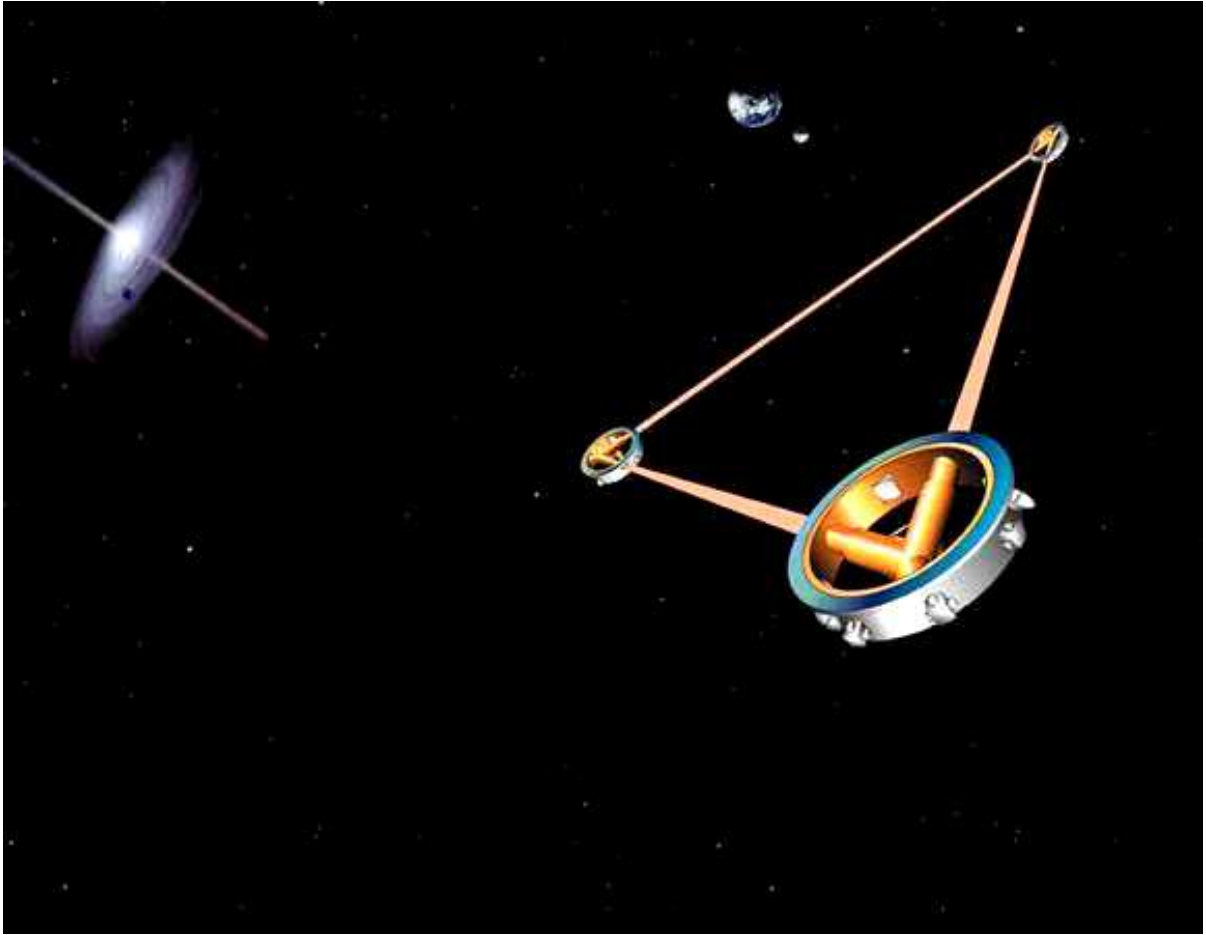
Každá z družic bude obíhat po své specifické dráze s vhodně zvolenou excentricitou, sklonem k ekliptice a uzlovou přímkou, takže trojúhelníková konfigurace zůstane s velkou přesností konstantní a bude svírat s rovinou ekliptiky úhel  $60^\circ$ . Rovina detektoru se přitom bude stáčet (s periodou jednoho roku). S využitím Dopplerova efektu proto bude možné dosti přesně stanovit polohy případných zdrojů na obloze, úhlové rozlišení pro nejsilnější zdroje by mohlo být dokonce lepší než úhlová minuta.

Aby se vyloučily negravitační vlivy, bude použita technika aktivního udržování na "bezsilové trajektorii" známá z geodetických družic.

Uvnitř každé družice se bude nacházet naprosto volně se pohybující testovací těleso, pravděpodobně krychle o stranách 4 cm vyrobená ze speciální slitiny platiny a zlata s nulovou magnetickou susceptibilitou. Vlastní družice bude korigovat svůj pohyb tak, aby poloha krychle vznášející se ve vakuové titanové dutině uvnitř sondy zůstávala konstantní. Zmíněná krychle bude tvořit vlastní srdce družice. Paprsek emitovaný laserem se bude odrážet od zrcadlové stěny testovací krychle a poté bude prostřednictvím Cassegrainova teleskopu (Laurent Cassegrain (1629 – 1693)) o průměru 30 cm vyslán do příslušného ramene. Na jeho konci se odrazí od testovací krychle druhé družice, zesílí jejím laserem beze změny fáze a odešle zpět. Po dalším odrazu na první krychli se smíchá s částí vyslaného světla a interference bude zaznamenána detektorem. Signál bude porovnán s analogickými signály z dalších dvou ramen a předán na Zemi prostřednictvím telemetrie.

Hlavní předností LISA budou především obrovské rozměry interferometru a naprostá nepřítomnost seismického rušení. Díky tomu se LISA stane opravdu robustním detektorem gravitačních vln, který na rozdíl od svých pozemských kolegů bude pracovat v režimu, kdy signál bude až o mnoho řádů převyšovat šum. Především se však otevře naprosto nové, nízkofrekvenční gravitační okno do vesmíru. Právě v oblasti 1 Hz až  $10^{-4}$  Hz vydává gravitační záření celá řada extrémně zajímavých astrofyzikálních zdrojů, především kompaktních binárních systémů v naší Galaxii a velmi hmotných černých děr v galaxiích vzdálených. LISA, vybraná jako jedna z budoucích klíčových vědeckých misí Evropské kosmické agentury ESA s plánovanou realizací po roce 2010, nám poodhalí roušku jejich tajemství.





Obr. 2.17:: Kosmická gravitační anténa LISA plánovaná na příští desetiletí



Obr. 2.18:: Detail detekční aparatury interferometru LISA

## Specifické vlastnosti gravitační energie

Integrální zákon zachování energie a hybnosti ( 2.398 ) přejde po zahrnutí gravitačního záření na tvar

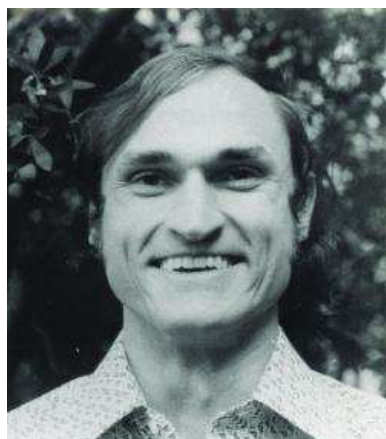
$$\frac{dp_i}{dt} = -\oint_S (T_H^{i\alpha} + T_{\text{vln}}^{i\alpha}) d^2 S_\alpha, \quad ( 2.422 )$$

kde  $S$  leží v asymptoticky rovinném prostoročase a tedy ve vlnové zóně soustavy.

Rovnice ( 2.422 ) říkají, že rychlost změny energie a hybnosti soustavy je rovna proudu, kterým je přes uzavřenou plochu obklopující zdrojovou soustavu přenášena energie a hybnost látkovým prostředím, negravitačními poli a gravitačním vlněním.

Při analýze chování každé fyzikální soustavy v asymptoticky rovinném prostoročase tedy můžeme s výhodou použít běžných zákonů zachování energie a hybnosti, přičemž ovšem musíme započítat i energii odnášenou, popř. přinášenou gravitačními vlnami. V průběhu vývoje zůstávala dlouhou dobu otevřená otázka o znaménku gravitační energie a celkové energie fyzikální soustavy vůbec.

O číselné hodnotě a znaménku celkové energie bylo rozhodnuto až na základě analýzy rovnic pole provedené na přelomu sedmdesátých a osmdesátých let minulého století Schoenem, Yauem a Wittenem, kteří dokázali, že celková energie gravitačního pole a zdrojové soustavy s kladným tenzorem energie – hybnosti je kladná, jak to odpovídá základním fyzikálním požadavkům. Ve srovnání s klasickou fyzikou dochází v OTR k jisté degradaci pojmu energie.



**Richard Melvin Schoen (1950) Shing-Tung Yau (1949) Edward Witten (1951)**

Byli jsme svědky toho, že hustota energie ztrácí lokální význam, takže klasická představa energie jako určité substance spojitě a jednoznačně rozložené v prostoru, zde ztrácí opodstatnění. Navíc i celková energie může být definována pouze při splnění speciálních geometrických a topologických předpokladů. Pouze v asymptoticky rovinném prostoročase s eukleidovskou topologií mají veličiny globální energie a hybnosti ostrovní fyzikální soustavy jasně definovaný význam.

Neexistuje-li asymptoticky plochá oblast prostoročasu, neexistuje ani invariance vzhledem k prostoročasovým translacím, k níž by bylo možno vztáhnout energii a hybnost.

Energie, jež je v klasické fyzice fundamentálním pojmem a základním atributem hmoty, se v OTR stává řadovou veličinou obecně bez názorného fyzikálního významu, která za jistých speciálních podmínek popisuje díky svému zákonu zachování, některé vlastnosti hmoty.

Degradace pojmu energie, jak víme, úzce souvisí s revizí pojmů prostoru a času, které OTR svrhla z trůnu absolutnosti a neměnnosti a učinila z nich dynamické prvky těsně související s rozložením a pohybem hmoty.

Existují v zásadě dvě protichůdná stanoviska ke vztahu lokálních a globálních fyzikálních zákonů. První přístup, kterého jsme se až dosud přidržovali, spočívá v tom, že se snažíme globální vlastnosti prostoročasu odvozovat na základě znalosti lokálních fyzikálních zákonů – jejich extrapolací a syntézou.

Druhý přístup naopak vychází z představy, že lokální fyzikální zákony mají svůj původ v globální struktuře okolního vesmíru, nebo jsou

alespoň okolní geometrickou strukturou prostoročasu, tj. rozložením hmot v něm ovlivňovány. Tento názor souvisí s **Machovým principem**.

Dle Machova principu jsou vlastnosti prostoročasu určené rozložením a pohybem vesmírné hmoty~energie. Rozložení hmoty ve vesmíru určuje lokální inerciální soustavu každého tělesa.



Ernst Mach (1838 – 1916)

Zajímavý přístup k Machovu principu vypracoval J. A. Wheeler, který používá Machova principu k získání okrajových podmínek pro Einsteinovy rovnice jako určitý kosmologický selekční princip. Ve Wheelerově interpretaci je geometrie prostoročasu určena distribucí hmoty~energie na počáteční hyperploše prostorového typu. Machův princip v této aplikaci pak vede k požadavku, aby vesmír byl uzavřený – geometrie prostoročasu v minulosti, přítomnosti i budoucnosti, a tím i setrvačné vlastnosti všech částic, jsou poté určeny zadáním trojrozměrné geometrie uzavřeného prostoru ve dvou blízkých časových okamžicích a zadáním hustoty rozložení a proudu energie a hybnosti.

## Úvod do kvantové mechaniky

Představa mikročástic, coby drobných kuliček analogických běžným objektům známým z makrosvěta, začíná selhávat již zhruba při Planckových hmotnostech ( $10^{-8}$  kg). Při ještě menších hmotách částic se začíná stále výrazněji projevovat jejich vlnová podstata. Již v roce 1905 ukázal Albert Einstein, že fotoelektrický jev (o kterém zde budeme ještě podrobněji hovořit) je vysvětlitelný pouze za předpokladu, že elektromagnetické záření má mimo obvyklých vlnových, zároveň i korpuskulární vlastnosti. Postuloval tak částici světla, která byla později nazvána **foton**.

Energie fotonu o frekvenci  $\nu$  je dána jednoduchým Einsteinovým vztahem

$$E = \nu \cdot h, \quad (3.1)$$

za který Einstein obdržel Nobelovu cenu v roce 1921.



Albert Einstein (1879 – 1955)

Vidíme tedy, že energie fotonu je přímo úměrná jeho frekvenci, kde konstantou úměrnosti je přitom **Planckova konstanta**  $h \approx 6 \cdot 10^{-34}$  J·s, která vyplynula z ještě dřívějších úvah Maxe Plancka (psal se rok 1900) o vlastnostech vyzařování absolutně černého tělesa (viz podrobněji v kapitole 11).



**Max Karl Ernst Ludwig Planck (1858 – 1947)**

V kvantové mechanice je obvyklé pracovat nikoli s frekvencemi, ale s tzv. **úhlovými frekvencemi**

$$\omega = 2\pi\nu . \quad (3.2)$$

V této symbolice má pak Einsteinova formule ( 3.1 ) obvyklejší tvar

$$E = \omega \cdot \hbar , \quad (3.3)$$

kde  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  je tzv. **redukovaná Planckova konstanta** která je

považována za skutečně elementární kvantum **akce** (veličiny dané součinem energie a času).

Protože mezi frekvencí a vlnovou délkou platí jednoduchý převodní vztah

$$\nu = \frac{c}{\lambda} , \quad (3.4)$$

kde  $c$  je rychlost postupu vlnění, dostáváme pro energii fotonu alternativní vyjádření

$$E = \frac{c \cdot h}{\lambda} = m \cdot c^2 . \quad (3.5)$$

Počátkem 20. let minulého století navrhl francouzský fyzik Louis de Broglie, že by formule ( 3.5 ) měla platit zcela obecně nejen pro fotony, ale i pro všechny ostatní částice.

Z rovnosti ( 3.5 ) okamžitě plyne de Broglieův vztah mezi hybností částice  $p$  a její vlnovou délkou  $\lambda$  :

$$\lambda = \frac{h}{mu} = \frac{h}{p}, \quad ( 3.6 )$$

kde  $u$  nyní značí obecně rychlost částice.



**Louis Victor Pierre Raymond vévoda de Broglie (1892 – 1987)**

De Broglieova hypotéza byla skutečně experimentálně potvrzena v experimentech s elektrony a dalšími částicemi, které po průchodu dvěma úzkými štěrbinami vzájemně interferovaly, jako by se vskutku jednalo o vlnění o vlnové délce  $\lambda$  .

Jestliže jsou částice zároveň vlněním, pak musí být popsány obecnou vlnovou funkcí:

$$\psi = A \exp \left[ -i\omega \left( t - \frac{x}{u} \right) \right]. \quad ( 3.7 )$$

Dosadíme-li do tohoto obecného výrazu  $2\pi\nu$  za  $\omega$  a  $\lambda\nu$  za  $u$ , dostaneme vlnovou funkci zcela konkrétní částice:

$$\psi = A \exp \left[ -2\pi i \left( \nu t - \frac{x}{\lambda} \right) \right], \quad (3.8)$$

neboli z de Broglieova vztahu

$$\psi = A \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]. \quad (3.9)$$

Výraz ( 3.9 ) je matematickým vyjádřením vlnového ekvivalentu volné částice s celkovou energií  $E$  a hybností  $p$ , pohybující se ve směru  $+x$ .

Jestliže částice podléhá nejrůznějším omezením, jakým je např. dutina rezonátoru, potřebujeme znát základní diferenciální rovnici, pro funkci  $\psi$  v takovémto omezujícím prostředí.

Derivujeme li ( 3.9 ) dvakrát podle  $x$  a jedenkrát podle  $t$ , dostaneme

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} = -\frac{p^2}{\hbar^2} \psi \quad (3.10)$$

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -\frac{iE}{\hbar} \psi,$$

Odtud

$$p^2 \psi = -\hbar^2 \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2}, \quad (3.11)$$

$$E\psi = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t}. \quad (3.12)$$

Při nerelativistických rychlostech (malých ve srovnání s rychlostí světla) je celková energie  $E$  částice prostým součtem její energie kinetické a potenciální energie  $V$ , která je obecně funkcí polohy  $x$  a času  $t$ :

$$E = \frac{p^2}{2m} + V. \quad (3.13)$$



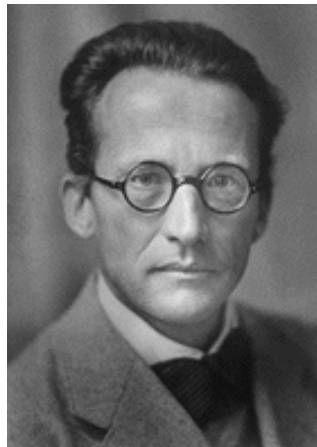
Vynásobením této rovnice vlnovou funkcí  $\psi$  částice máme

$$E\psi = \frac{p^2\psi}{2m} + V\psi . \quad (3.14)$$

Dosazením výrazů ( 3.11 ) a ( 3.12 ) do ( 3.14 ) obdržíme hledanou diferenciální rovnici :

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - V\psi . \quad (3.15)$$

Tuto základní pohybovou rovnici kvantové mechaniky odvodil Erwin Schrödinger v roce 1925, který je tak právem považován za rok zrodu kvantové mechaniky.



**Erwin Rudolf Josef Alexander Schrödinger (1887 – 1961)**

Protože reálný prostoročas je čtyřrozměrný, přičemž jeden rozměr připadá na čas a zbylé 3 na prostor, je potřeba zobecnit Schrödingerovu rovnici na trojrozměrný tvar:

$$\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi - V\psi , \quad (3.16)$$

kde Laplaceův operátor  $\nabla^2$  je tvaru

$$\nabla^2 \equiv \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \equiv \Delta . \quad (3.17)$$



Pierre-Simon, markýz de Laplace (1749 – 1827)

Pro naše účely nám prozatím kvůli zjednodušení výkladu postačí Schrödingerova rovnice v jednorozměrném tvaru ( 3.15 ).

Napíšeme si nyní rovnici k ní komplexně sdruženou:

$$i\hbar \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} - V\psi^* . \quad (3.18)$$

Nejprve vynásobíme ( 3.15 ) funkcí  $\psi^*$  a ( 3.18 ) funkcí  $\psi$ :

$$-i\hbar \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} \right) - \psi^* V\psi , \quad (3.19)$$

$$i\hbar \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) - \psi V\psi^* . \quad (3.20)$$

Nyní odečteme ( 3.20 ) od ( 3.19 ) a dostaneme vztah

$$i\hbar \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} + \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial t} \right) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} - \psi \frac{\partial^2 \psi^*}{\partial x^2} \right) , \quad (3.21)$$

který lze podle věty o derivaci součinu zjednodušit na

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\psi^* \psi) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right). \quad (3.22)$$

Vynásobením faktorem  $-\frac{i}{\hbar}$  a integrací této rovnice máme

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \psi^* \psi \, dx = \frac{i\hbar}{2m} \int_{x_1}^{x_2} \frac{\partial}{\partial x} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) = \frac{i\hbar}{2m} \left[ \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right]_{x_1}^{x_2}. \quad (3.23)$$

Veličina na levé straně, označuje časovou změnu absolutní hodnoty kvadrátu vlnové funkce v nějaké oblasti vymezené body  $x_1, x_2$ .

Absolutní hodnota kvadrátu vlnové funkce je (na rozdíl od samotné vlnové funkce) reálnou veličinou a má tedy přímý fyzikální význam – jedná se o veličinu pozorovatelnou.

Jak ukázal Max Born roku 1927, její fyzikální význam je v tom, že určuje hustotu pravděpodobnosti nalezení částice (kvanta energie) v daném místě a v daném čase.



Max Born (1882 – 1970)

Samotná veličina

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} \psi^* \psi \, dx \equiv \frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 \, dx = S_1 - S_2 \quad (3.24)$$

nám popisuje tzv. **zákon zachování pravděpodobnosti** mezi přítokem ( $S_1$ ) a výtokem ( $S_2$ ) pravděpodobnosti do oblasti vymezené body  $x_1, x_2$ .

Veličina

$$S = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} - \psi \frac{\partial \psi^*}{\partial x} \right) \quad (3.25)$$

se tedy nazývá **tok pravděpodobnosti**.

Mějmež volnou částici s energií  $E$  a hybností  $p$ .

Vlnová funkce této částice je dána vztahem (3.9) a funkce k ní komplexně sdružená bude

$$\psi^* = A^* \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (Et - px) \right]. \quad (3.26)$$

Máme tedy

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial x} &= \frac{ip}{\hbar} A \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (Et - px) \right] = \frac{ip}{\hbar} \psi \\ \frac{\partial \psi^*}{\partial x} &= \frac{ip}{\hbar} A^* \exp \left[ \frac{i}{\hbar} (Et - px) \right] = -\frac{ip}{\hbar} \psi^*, \end{aligned} \quad (3.27)$$

takže z definice (3.25) dostáváme pro tok pravděpodobnosti

$$S = -\frac{i\hbar}{2m} \left( \frac{ip}{\hbar} \psi^* \psi + \frac{ip}{\hbar} \psi^* \psi \right) = \frac{p}{m} \psi^* \psi = |\psi|^2 u, \quad (3.28)$$

neboť  $\frac{p}{m} = u$  je rychlost částice. Tok pravděpodobnosti je u volné

částice tedy prostým součinem hustoty její pravděpodobnosti a její rychlosti.

Zákon zachování pravděpodobnosti v tomto případě zní:

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_{x_1}^{x_2} |\psi|^2 dx = |\psi|_{x_1}^2 \cdot u_1 - |\psi|_{x_2}^2 \cdot u_2 . \quad ( 3.29 )$$

Kvantová mechanika tak koncem 20. let minulého století dospěla k překvapivému zjištění: ačkoliv Schrödingerova rovnice popisuje časový vývoj vlnové funkce zcela deterministicky (stejně jako Newtonova klasická mechanika popisuje deterministicky časový vývoj vlny na vodní hladině), sama vlnová funkce nemá vůbec žádný fyzikální význam. Teprve kvadrát její absolutní hodnoty je pozorovatelnou veličinou. Určuje však pouze prostorovou distribuci hustoty pravděpodobnosti nalezení částice (kvanta energie) v určité oblasti prostoru, v závislosti na čase. Teprve v okamžiku měření, kdy je částice skutečně nalezena v některém bodě prostoru, přestanou se projevovat její vlnové vlastnosti a naopak se projeví její vlastnosti korpuskulární. Tehdy hovoříme o tzv. **kolapsu vlnové funkce**. Přestože tedy před aktem měření nemůžeme o částici říci nic určitějšího, než co nám dovoluje kvadrát absolutní hodnoty vlnové funkce, lze stanovit střední hodnotu kterékoli její polohy, tj. oblast, v níž bude daná částice nejpravděpodobněji nalezena. V matematice odpovídá střední hodnota běžnému aritmetickému průměru:

$$\langle x \rangle = \frac{\sum_i N_i x_i}{\sum_i N_i} , \quad ( 3.30 )$$

kde  $N$  je četnost. Zabýváme-li se jedinou částicí, má četnost význam pravděpodobnosti  $P_i$  výskytu částice v okolí  $dx$  bodu  $x_i$ . Tato pravděpodobnost je

$$P_i = |\psi_i|^2 dx , \quad ( 3.31 )$$

kde  $\psi_i$  je vlnová funkce částice vypočtená v bodě  $x_i$ . Provedením této substituce a záměnou sumace integrací (přechodem od diskrétního

sčítání ke spojitému) vidíme, že střední hodnota polohy jedné částice je

$$\langle x \rangle = \frac{\int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx}{\int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dx} . \quad ( 3.32 )$$

Jmenovatel odpovídá pravděpodobnosti výskytu částice kdekoli ve vesmíru a je tedy roven jedné. Proto je

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x |\psi|^2 dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \psi dx . \quad ( 3.33 )$$

Stejný postup, jaký jsme právě odvodili, lze použít k výpočtu střední hodnoty nejen polohy, ale libovolné další kvantové veličiny.

Postup výpočtu  $\langle p \rangle$  a  $\langle E \rangle$  je možno získat derivováním vlnové funkce ( 3.9 ) volné částice podle  $x$  a  $t$  . Pro energii je výsledkem formule ( 3.12 ), kterou je možno zapsat rovněž v ekvivalentním tvaru

$$E\psi = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi . \quad ( 3.34 )$$

Pro hybnost dostáváme

$$p\psi = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi . \quad ( 3.35 )$$

Srovnáním levých a pravých stran ( 3.34 ), ( 3.35 ) dospíváme k dalšímu překvapivému závěru: dynamické veličině  $p$  odpovídá v kvantové mechanice diferenciální operátor

$$\hat{p} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \quad ( 3.36 )$$

a podobně dynamické veličině  $E$  odpovídá diferenciální operátor

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} . \quad ( 3.37 )$$

Operátory nám říkají, jakou operaci máme provést s následující funkcí (značíme je obvykle stříškou kvůli odlišení od matic a vektorů).

Pro operátor  $\hat{T}$  kinetické energie odtud plyne

$$\hat{T} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = \frac{1}{2m} \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right)^2 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} . \quad ( 3.38 )$$

Pro operátor  $\hat{H}$  celkové energie částice (nazývaný též Hamiltonův operátor – zkráceně **hamiltonián**) tedy máme rovnost

$$\hat{H} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V , \quad ( 3.39 )$$

která, po vynásobení obou stran vlnovou funkcí  $\psi$  zjevně vede na Schrödingerovu rovnici.



Sir William Rowan Hamilton (1805 – 1865)

Nalezených operátorů hybnosti a energie můžeme nyní využít k nalezení středních hodnot hybnosti a energie částice:

$$\langle p \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{p} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left( \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial x} dx, \quad (3.40)$$

$$\langle E \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{E} \psi dx = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right) \psi dx = i\hbar \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx. \quad (3.41)$$

klíčový výraz  $\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \hat{G}(x, p) \psi dx$  se obvykle označuje zkráceným symbolem  $\langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle$  nazývaným **Diracův bracket** (z anglického výrazu označujícího závorku), přičemž vektor  $|\psi\rangle$  označujeme jako **ketvektor**, zatímco vektor k němu komplexně sdružený  $\langle \psi |$  jako **bravektor**. Diracův bracket je z matematického hlediska skalárním součinem dvou navzájem komplexně sdružených vektorů (vlnových funkcí) v tzv. **Hilbertově prostoru** (nekonečněrozměrném komplexním prostoru funkcí, na němž je definován skalární součin riemannovskou integrací).



David Hilbert (1862 - 1943)

Obecně tak pro střední hodnotu nějaké kvantové veličiny  $G$  můžeme psát

$$\langle G(x, p) \rangle = \langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle. \quad (3.42)$$



**Střední odchylce** veličiny  $g$ , která je klasicky definována vztahem  $\Delta g = g - \langle g \rangle$ , odpovídá v kvantové mechanice ekvivalentní operátorové vyjádření

$$\Delta \hat{G} = \hat{G} - \langle g \rangle \hat{1}. \quad (3.43)$$

Dosazením ( 3.43 ) do ( 3.42 ) dostaneme její střední hodnotu

$$\langle \Delta \hat{G} \rangle = \langle \psi | \Delta \hat{G} | \psi \rangle = 0. \quad (3.44)$$

**Variance** veličiny  $g$ , definovaná vztahem  $\langle g \rangle^2 = \langle g^2 \rangle - \langle g \rangle^2$ , je v kvantové mechanice vyjádřena operátorovým vztahem

$$\langle \psi | \Delta \hat{G}^2 | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{G}^2 | \psi \rangle - \langle \psi | \hat{G} | \psi \rangle^2. \quad (3.45)$$

Druhou odmocninu z variance označujeme jako **střední kvadratickou odchylku**.

## Volná částice

### *Fázová a grupová rychlost*

Je zřejmé, že de Broglieho vlny nelze vyjádřit jednoduchým vzorcem ( 3.9 ), který popisuje nekonečnou řadu vln se stejnou amplitudou  $A_0$ . Místo toho očekáváme, že vlnové reprezentaci pohybující se volné částice bude odpovídat vlnové klubko, kde vytvářející vlny mají amplitudy, jež se mění s pravděpodobností výskytu částice. Jak známo, vlnové klubko lze získat superpozicí nejméně dvou vln, jež se vzájemně liší svojí vlnovou délkou. Závisí-li fázová rychlost těchto vln na vlnové délce, nepostupují obě vlny stejnou rychlostí a vlnové klubko má rychlost odlišnou od rychlosti jednotlivých generujících vln. Předpokládejme, že vlnové klubko je generováno dvěma vlnami, jež mají stejnou amplitudu  $A_0$ , ale liší se o  $d\omega$  v úhlové frekvenci a o  $dk$  ve vlnovém čísle. Generující vlny tak můžeme zapsat jako

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A_0 \cos(\omega t - kx), \\ \psi_1 &= A_0 \cos[(\omega t + d\omega)t - (k + dk)x].\end{aligned}\tag{3.46}$$

Pro vlnové klubko tak s pomocí známých identit

$$\begin{aligned}\cos \alpha + \cos \beta &= 2 \cos \frac{1}{2}(\alpha + \beta) \cos \frac{1}{2}(\alpha - \beta), \\ \cos(-\vartheta) &= \cos(\vartheta),\end{aligned}\tag{3.47}$$

dostaneme

$$\psi = \psi_1 + \psi_2 = 2A_0 \cos \frac{1}{2}[(2\omega + d\omega)t - (2k + dk)] \cos \frac{1}{2}(d\omega t - dkx).\tag{3.48}$$

Jelikož  $d\omega$  a  $dk$  můžeme ve srovnání s  $\omega$  a  $k$  zanedbat, můžeme vlnovou funkci (3.48) přibližně vyjádřit jako

$$\psi = 2A_0 \cos(\omega t - kx) \cos \frac{1}{2}(d\omega t - dkx),\tag{3.49}$$

což představuje vlnu s úhlovou frekvencí  $\omega$  a vlnovým číslem  $k$ , která je modulována vlnou s kruhovou frekvencí  $\frac{d\omega}{2}$  a vlnovým číslem  $\frac{dk}{2}$ .

Fázová rychlost je

$$w = \frac{\omega}{k},\tag{3.50}$$

kdežto grupová rychlost (rychlost pohybu vlnového klubka) je

$$u = \frac{d\omega}{dk}.\tag{3.51}$$

Úhlová frekvence a vlnové číslo de Broglieho vlny, příslušející částici s klidovou hmotou  $m_0$ , která se pohybuje rychlostí  $v$ , je

$$\omega = 2\pi\nu = \frac{mc^2}{\hbar} = \frac{m_0c^2}{\hbar\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}},$$

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{mv}{\hbar} = \frac{m_0v}{\hbar\sqrt{1-\frac{v^2}{c^2}}}.$$
( 3.52 )

Fázová rychlost  $w$  této částice je tedy

$$w = \frac{\omega}{k} = \frac{c^2}{v},$$
( 3.53 )

což pro částici s  $m_0 > 0$  nejenže převyšuje rychlost částice samotné, ale dokonce i rychlost světla. Fázová rychlost  $w$  de Broglieho vln nemá sama o sobě přímý fyzikální význam

Naproti tomu grupová rychlost  $u$  de Broglieho vlnového klubka spojeného s částicí vychází

$$u = \frac{d\omega}{dk} = \frac{dv}{dk} = \frac{\frac{m_0v}{\hbar\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{3}{2}}}}{\frac{m_0}{\hbar\left(1-\frac{v^2}{c^2}\right)^{\frac{3}{2}}}} = v.$$
( 3.54 )

De Broglieho vlnové klubko, spojené s pohybující se částicí, se pohybuje touž rychlostí, jako částice.

### *Gaussovské vlnové klubko*

Nyní budeme diskutovat případ řešení jednorozměrné Schrödingerovy rovnice pro volnou částici, které lze psát v  $t = 0$  ve tvaru tzv.

#### **gaussovského vlnového klubka**

$$\psi(x, 0) = \frac{1}{(\pi d^2)^{1/4}} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{2d^2}\right), \quad (3.55)$$

kde  $d$  je kladné reálné číslo. Snadno lze ověřit, že tato vlnová funkce splňuje normovací podmínku

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi(x, 0)|^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi d^2}} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(x-a)^2}{d^2}\right) dx = 1, \quad (3.56)$$

kde  $|x - a| = d$  udává vzdálenost od středu vlnového klubka, pro níž hustota pravděpodobnosti klesne na hodnotu  $1/e$  ve srovnání s její amplitudou.

Obr. 3.1



Snadno vypočteme střední hodnotu vlnové funkce ( 3.55 ):

$$\langle x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x, 0) x \psi(x, 0) dx = a, \quad (3.57)$$

kteřá je dle očekávání totožná s polohou středu vlnového klubka. Podobně snadno lze vypočíst i

$$\langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x^2 \psi(x,0) dx = \frac{d^2}{2} + a^2. \quad (3.58)$$

Odtud pak dostáváme střední kvadratickou odchylku souřadnice

$$\begin{aligned} \langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) (x - \langle x \rangle)^2 \psi(x,0) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) (x^2 - 2x\langle x \rangle + \langle x \rangle^2) \psi(x,0) dx = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x^2 \psi(x,0) dx - 2\langle x \rangle \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) x \psi(x,0) dx + \\ &= \langle x \rangle^2 \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) \psi(x,0) dx = \langle x^2 \rangle - \langle x \rangle^2 = \frac{d^2}{2}. \end{aligned} \quad (3.59)$$

podobný výpočet můžeme provést i pro operátor impulsu. Nejdříve dostaneme

$$\langle \hat{p} \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x,0) dx = 0, \quad (3.60)$$

kde integrál vyšel roven nule, neboť integrovaná funkce je lichá. Dále vypočteme

$$\langle \hat{p}^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x,0) i \frac{d^2}{dx^2} \psi(x,0) dx = \frac{\hbar^2}{2d^2}. \quad (3.61)$$

Pro střední kvadratickou odchylku impulsu odtud plyne

$$\langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle = \langle \hat{p}^2 \rangle - \langle \hat{p} \rangle^2 = \frac{\hbar^2}{2d^2}. \quad (3.62)$$

Pro vlnové klubko ( 3.55 ) vychází tedy nenulová střední kvadratická odchylka jak souřadnice, tak i impulsu. Při měřeních na kvantověmechanickém souboru daném touto vlnovou funkcí tedy nedostáváme ostré hodnoty souřadnice a impulsu, nýbrž hodnoty, jejichž distribuce pravděpodobnosti závisí na volbě parametru  $d$ . Je zřejmé, že čím je částice přesněji lokalizována v tzv. **souřadnicovém prostoru**, tím nepřesněji je lokalizována v **impulsovém prostoru** (tzn. tím nepřesněji je určen její impuls) a naopak. Součin kvadratických odchylek zůstává konstantní:

$$\langle (x - \langle x \rangle)^2 \rangle \langle (\hat{p} - \langle \hat{p} \rangle)^2 \rangle = \frac{\hbar^2}{4}, \quad (3.63)$$

odkud po odmocnění máme

$$\langle x - \langle x \rangle \rangle \langle \hat{p} - \langle \hat{p} \rangle \rangle = \frac{\hbar}{2}. \quad (3.64)$$

Je zřejmé, že obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice pro jednorozměrný pohyb volné částice lze psát ve tvaru superpozice řešení ( 3.9 )

$$\psi(x, t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} c(p) \exp \frac{p^2 t - px}{2m i \hbar} dp, \quad (3.65)$$

kde  $c(p)$  je komplexní koeficient rozvoje do rovinných vln závislý na  $p$ . Z tohoto výrazu je patrné, že funkce  $c(p)$  je Fourierovým obrazem funkce  $\psi(x, 0)$ , který lze určit pomocí inverzní Fourierovy transformace

$$c(p) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int_{-\infty}^{\infty} \psi(x,0) \exp \frac{px}{i\hbar} dx. \quad (3.66)$$



Jean Baptiste Joseph Fourier (1768 – 1830)

Dosazením ( 3.66 ) a ( 3.55 ) do ( 3.65 ) získáme hledaný výraz pro jednorozměrnou vlnovou funkci volné částice

$$\psi(x,t) = \frac{1}{2\hbar\pi^{\frac{5}{4}}d^{\frac{1}{2}}} \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left(\frac{px}{i\hbar} - \frac{(x-a)^2}{2d^2}\right) dx \exp \frac{\frac{p^2}{2m}t - px}{i\hbar} dp. \quad (3.67)$$

## Princip neurčitosti

Pozoruhodnou vlastností kvantového světa je jeho nekumutativita. Spočtěme si pro jednoduchost střední hodnotu součinu operátorů hybnosti a polohy:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{p}\hat{x} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} (x\psi) dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left( x \frac{\partial \psi}{\partial x} + \psi \frac{\partial x}{\partial x} \right) dx = \\
&= \frac{\hbar}{i} \left( \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi dx \right) = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx + \frac{\hbar}{i}, \quad (3.68) \\
\langle \hat{x}\hat{p} \rangle &= \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x} \psi dx = \frac{\hbar}{i} \int_{-\infty}^{\infty} \psi^* x \frac{\partial \psi}{\partial x} dx.
\end{aligned}$$

Odkud plyne nerovnost

$$\langle \hat{p}\hat{x} \rangle - \langle \hat{x}\hat{p} \rangle = \frac{\hbar}{i} \neq 0. \quad (3.69)$$

Definujme algebraickou strukturu zvanou **komutátor**:

$$[\hat{p}; \hat{x}] = \langle \hat{p}\hat{x} \rangle - \langle \hat{x}\hat{p} \rangle. \quad (3.70)$$

Relaci ( 3.69 ) pak můžeme zapsat v obvyklejším tvaru

$$[\hat{p}; \hat{x}] = \frac{\hbar}{i} \neq 0. \quad (3.71)$$

Říkáme, že operátor polohy a hybnosti spolu vzájemně nekomutují. To je vlastnost, která v klasické mechanice nemá obdoby a naopak je zcela běžnou v mechanice kvantové.

Předpokládejme, že máme dvě nekomutující proměnné  $A, B$ . Potom

$$[\hat{A}, \hat{B}] = i\hat{C}. \quad (3.72)$$

Spočítejme střední kvadratické chyby měření. Pro součin jejich kvadrátů (variancí) platí



$$\begin{aligned}
(\Delta a_{kv})^2 (\Delta b_{kv})^2 &= \langle \psi | (\Delta \hat{A})^2 | \psi \rangle \langle \psi | (\Delta \hat{B})^2 | \psi \rangle = \langle \Delta \hat{A} \psi | \Delta \hat{A} \psi \rangle \langle \Delta \hat{B} \psi | \Delta \hat{B} \psi \rangle = \\
&= \|\Delta \hat{A} \psi\|^2 \|\Delta \hat{B} \psi\|^2 \geq \left| \langle \Delta \hat{A} \psi | \Delta \hat{B} \psi \rangle \right|^2 = \left| \langle \psi | \Delta \hat{A} \Delta \hat{B} | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \langle \psi | \frac{1}{2} (\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} + \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) + \frac{1}{2} (\Delta \hat{A} \Delta \hat{B} - \Delta \hat{B} \Delta \hat{A}) | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle \psi | \{ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} \} | \psi \rangle + \frac{1}{2} \langle \psi | [ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} ] | \psi \rangle \right|^2 \geq \\
&\geq \left| \frac{1}{2} \langle \psi | [ \Delta \hat{A}, \Delta \hat{B} ] | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle \psi | [ \hat{A} - \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle, \hat{B} - \langle \psi | \hat{B} | \psi \rangle ] | \psi \rangle \right|^2 = \\
&= \left| \frac{1}{2} \langle \psi | [ \hat{A}, \hat{B} ] | \psi \rangle \right|^2 = \left| \frac{1}{2} \langle \psi | i \hat{C} | \psi \rangle \right|^2
\end{aligned} \tag{3.73}$$

Po odmocnění dostáváme

$$\Delta a_{kv} \Delta b_{kv} \geq \frac{1}{2} \left| \langle \psi | \hat{C} | \psi \rangle \right|. \tag{3.74}$$

Dosadíme-li sem např. výsledek ( 3.71 ), máme  $\hat{C} = \hbar \hat{1}$  a tedy

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2} \left| \langle \psi | \hat{1} | \psi \rangle \right| = \frac{\hbar}{2}. \tag{3.75}$$

Pozorovatelné důsledky nekomutativity některých operátorů tedy spočívají v tom, že jim odpovídající veličiny nelze měřit současně s neomezenou přesností.

Matematicky tento princip poprvé formuloval německý fyzik Werner Heisenberg v roce 1928.



Werner Heisenberg (1901 – 1976)

**Heisenbergův princip neurčitosti**, jak se tento poznatek nazývá, tedy říká, že součin přesnosti, s jakou měříme např. hybnost částice a současně její polohu, bude vždy větší, než polovina redukované Planckovy konstanty. Změříme-li tedy např. hybnost s přesností na 34 desetinných míst (řád Planckovy konstanty), bude již neurčitost její polohy v řádu metrů. A naopak, změříme-li velice přesně polohu, rozmaže se nám informace o hybnosti.

Heisenbergovy relace neurčitosti platí mezi všemi veličinami, jejichž operátory spolu vzájemně nekomutují. Platí tedy např. i mezi energií a časem:

$$\Delta E \Delta t \geq \frac{\hbar}{2}, \quad (3.76)$$

o čemž se snadno přesvědčíme, pokud dosadíme odpovídající operátory do (3.72).

### Bezčasová Schrödingerova rovnice – stacionární stavy

Všimněme si nyní, že jednorozměrnou vlnovou funkci  $\Psi$  můžeme upravit do tvaru

$$\Psi = A \cdot \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(Et - px)\right] = A \cdot \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \exp\left(\frac{ipx}{\hbar}\right) \equiv \psi \cdot \exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right) \quad (3.77)$$

v němž je  $\Psi$  součinem časově závislé funkce  $\exp\left(-\frac{iEt}{\hbar}\right)$  a funkce polohy  $\psi$ .

Ve skutečnosti mají všechny vlny v konzervativních silových polích časovou závislost tohoto tvaru.

Dosadíme-li nyní  $\Psi$  do Schrödingerovy rovnice ( 3.15 ) a zapůsobíme na ni odpovídajícími diferenciálními operátory (derivujeme co jde derivovat), obdržíme po jednoduchých úpravách rovnici

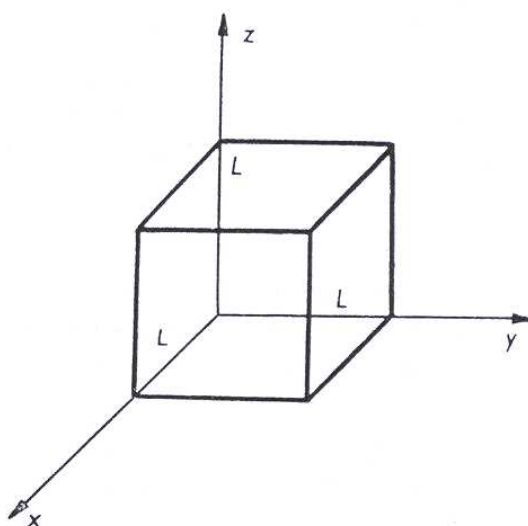
$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = V\psi , \quad ( 3.78 )$$

což je tzv. **stacionární vlnová rovnice**. Její trojrozměrný tvar je

$$\nabla^2 \psi + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi = V\psi . \quad ( 3.79 )$$

Řešme nyní tuto rovnici pro nitro krychlové dutiny, kde je na  $\psi$  kladena hraniční podmínka  $\psi = 0$  všude na stěnách dutiny.

Obr. 3.2



Rovnice ( 3.79 ) obsahuje všechny tři souřadnice  $x, y, z$ . Abychom našli řešení, musíme ji nejprve separovat na tři nezávislé rovnice, z nichž každá obsahuje jen jednu souřadnici.

Předpokládejme proto, že vlnová funkce  $\psi(x, y, z)$  je ve skutečnosti součinem tří funkcí  $\psi_x(x)$ ,  $\psi_y(y)$ ,  $\psi_z(z)$ , jež závisí vždy jen na jedné proměnné  $x$ ,  $y$ , resp.  $z$ , tj.

$$\psi(x, y, z) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \cdot \psi_z(z) . \quad (3.80)$$

Tento předpoklad je rozumný, neboť obsahuje jen nezávislost změny  $\psi$  s každou souřadnicí na změnách  $\psi$  s ostatními souřadnicemi.

Parciální derivace funkce ( 3.80 ) jsou

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= \psi_y \psi_z \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} , \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} &= \psi_x \psi_z \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} , \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} &= \psi_x \psi_y \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} . \end{aligned} \quad (3.81)$$

Dosadíme-li nyní tyto parciální derivace spolu s  $\psi = \psi_x \psi_y \psi_z$  do ( 3.79 ), dostaneme

$$\psi_y \psi_z \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} + \psi_x \psi_z \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} + \psi_x \psi_y \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} + \frac{2mE}{\hbar^2} \psi_x \psi_y \psi_z = 0 . \quad (3.82)$$

Dělením této rovnice vlnovou funkcí ( 3.80 ) a uspořádáním členů máme

$$\frac{1}{\psi_x} \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} + \frac{1}{\psi_y} \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} + \frac{1}{\psi_z} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} = -\frac{2mE}{\hbar^2} . \quad (3.83)$$

Každý člen na levé straně rovnice ( 3.83 ) je funkcí jiné proměnné a pravá strana je konstanta nezávislá na hodnotách  $x$ ,  $y$ ,  $z$ .

Každý člen nalevo se tudíž musí rovnat samostatně konstantě, což lze vyjádřit vztahy

$$\frac{1}{\psi_x} \frac{d^2 \psi_x}{dx^2} = -k_x^2, \quad (3.84)$$

$$\frac{1}{\psi_y} \frac{d^2 \psi_y}{dy^2} = -k_y^2, \quad (3.85)$$

$$\frac{1}{\psi_z} \frac{d^2 \psi_z}{dz^2} = -k_z^2, \quad (3.86)$$

kde konstanty  $k$  jsou ve skutečnosti složkami vlnového vektoru  $\mathbf{k}$  stojaté vlny uvnitř krychlové dutiny, které musí splňovat podmínku

$$k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \frac{\omega^2}{c^2} = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3.87)$$

Rovnice ( 3.84 ), ( 3.85 ), ( 3.86 ) mohou mít jen sinová a kosinová řešení.

Okrajové podmínky kladené na  $\psi$  požadují, aby bylo  $\psi = 0$  na stěnách dutiny, tj. v místech, kde je  $x, y, z$  rovno 0 nebo  $L$ .

Těmto okrajovým podmínkám vyhovuje jen funkce sinus, neboť jen ona se rovná v počátku 0.

Nyní již tedy můžeme zapsat hledanou vlnovou funkci  $\psi$  ve tvaru

$$\psi(x, y, z) = \psi_x \psi_y \psi_z = A \cdot \sin(k_x x) \cdot \sin(k_y y) \cdot \sin(k_z z). \quad (3.88)$$

Volbou funkce sinus jsme zatím zajistili, aby bylo  $\psi = 0$  v počátku.

Nyní musíme určit velikosti  $k_x, k_y, k_z$  komponent vlnového vektoru tak, aby  $\psi = 0$  i při  $x, y, z = L$ .

Tyto, tzv. **vlastní hodnoty** vlnové funkce  $\psi$ , získáme z druhé okrajové podmínky, coby

$$\begin{aligned} k_x \cdot L &= \pi \cdot n_x; & n_x &\in \mathbf{N}, \\ k_y \cdot L &= \pi \cdot n_y; & n_y &\in \mathbf{N}, \\ k_z \cdot L &= \pi \cdot n_z; & n_z &\in \mathbf{N}. \end{aligned} \quad (3.89)$$

Toto můžeme napsat též ekvivalentním způsobem z pomoci vlnového čísla  $k$  pro nějž platí

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \pi^2 \left( \frac{n_x^2}{L^2} + \frac{n_y^2}{L^2} + \frac{n_z^2}{L^2} \right); \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbf{N}. \quad (3.90)$$

Vlnové funkce uvnitř dutiny jsou pak dány výrazem

$$\psi = A \cdot \sin \frac{n_x \pi \cdot x}{L} \cdot \sin \frac{n_y \pi \cdot y}{L} \cdot \sin \frac{n_z \pi \cdot z}{L}; \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbf{N}. \quad (3.91)$$

a možné energie jsou

$$E = (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} \quad (3.92)$$

Hodnoty vlnového čísla  $k$  tvoří jednoduchou posloupnost jak jsme zvyklí v jednorozměrném případě.

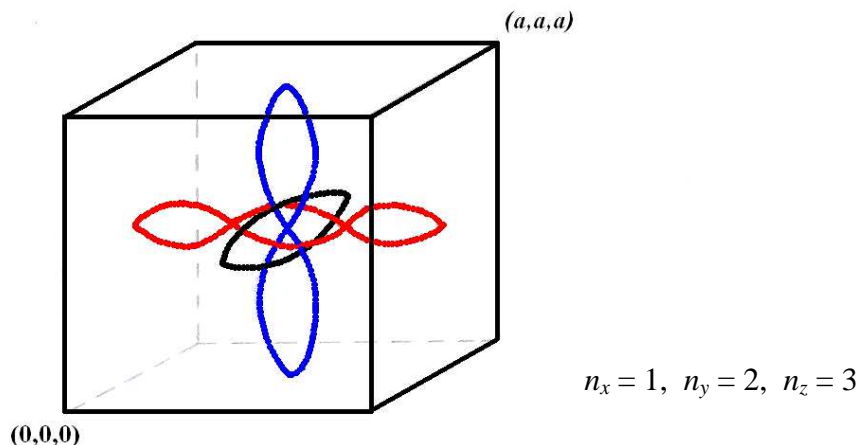
Může se stát, že i více než jedna stojatá vlna má tutéž hodnotu  $k$ , a tudíž stejnou frekvenci a stejnou energii. Tuto skutečnost použil dánský fyzik Niels Bohr pro popis energetických hladin elektronů v atomu vodíku.



**Niels Henrik David Bohr (1885 – 1962)**

Mají-li dvě nebo více stojatých vln společnou frekvenci, nazýváme je **degenerovanými stojatými vlnami**.

Obr. 3.3



V dutině je stupeň degenerace tím větší, čím větší má dutina stupeň symetrie.

V našem případě krychlové dutiny je vůbec největší.

K tomu, aby v krychlové dutině o straně  $L$  existoval mód ( 3.88 ), musí délka každé komponenty jeho vlnového vektoru být rovna celočíselnému násobku hodnoty  $\pi/L$ .

Módy můžeme znázornit zobrazením bodů  $(k_x, k_y, k_z)$  v třírozměrném prostoru.

V případě obecně obdélníkové dutiny o stranách délky  $L_x, L_y, L_z$ , můžeme ( 3.90 ) okamžitě zobecnit

$$k^2 = k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 = \pi^2 \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right); \quad n_x, n_y, n_z \in \mathbf{N} \quad ( 3.93 )$$

odkud pro možné energie plyne

$$E = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left( \frac{n_x^2}{L_x^2} + \frac{n_y^2}{L_y^2} + \frac{n_z^2}{L_z^2} \right). \quad ( 3.94 )$$

## Lineární harmonický oscilátor

Harmonickým oscilátorem rozumíme systém, jehož potenciální energie je kvadratickou funkcí souřadnic. V nejjednodušším jednorozměrném případě si jej lze představit jako pohyb bodu pod vlivem síly, která je přímo úměrná vzdálenosti bodu od rovnovážné polohy a má opačný směr, tedy

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = -k(x - x_0). \quad (3.95)$$

Řešením je harmonická funkce

$$x = x_0 + x_{\max} \sin(\omega t + \varphi). \quad (3.96)$$

Zpětným dosazením ( 3.96 ) do rovnice ( 3.95 ) zjistíme, že

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (3.97)$$

Pro kinetickou energii odtud dostáváme (s vědomím že  $v_0 = 0$ )

$$\begin{aligned} E &= \int_{x_0}^x F dx = m \int_{x_0}^x \frac{d^2 x}{dt^2} dx = \int_{x_0}^x \frac{dv}{dt} dx = \int_{v_0}^v \frac{dx}{dt} dv = \int_{v_0}^v v dv = \\ &= \frac{1}{2} m v^2 = \frac{1}{2} m \left( \frac{dx}{dt} \right)^2 = \frac{1}{2} k x_{\max}^2 \cos^2(\omega t + \varphi), \end{aligned} \quad (3.98)$$

a pro energii potenciální



$$\begin{aligned}
V &= \int_{x_0}^x -F \, dx = k \int_{x_0}^x (x - x_0) \, dx = k \left[ \frac{x^2}{2} - x_0 x \right]_{x_0}^x = \\
&= k \left( \frac{x^2}{2} - x_0 x - \frac{x_0^2}{2} + x_0^2 \right) = \frac{k}{2} (x^2 - 2x_0 x + x_0^2) = \frac{k}{2} (x - x_0)^2 = \\
&= \frac{1}{2} k x_{\max}^2 \sin^2 (\omega t + \varphi).
\end{aligned}
\tag{3.99}$$

Celková energie harmonického oscilátoru tedy bude

$$W = E + V = \frac{1}{2} k x_{\max}^2 (\sin^2 (\omega t + \varphi) + \cos^2 (\omega t + \varphi)) = \frac{1}{2} m \omega^2 x_{\max}^2,
\tag{3.100}$$

a pro celkový hamiltonián kvantového oscilátoru odtud plyne

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2 = \frac{\hbar^2}{2m} \Delta + \frac{1}{2} m \omega^2 \hat{x}^2.
\tag{3.101}$$

Zavedeme-li hermitovské operátory

$$\hat{x}' = \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{x}, \quad \hat{p}' = \left( \frac{1}{m\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{p},
\tag{3.102}$$

upravíme ( 3.101 ) na tvar

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \hbar \omega (\hat{p}'^2 + \hat{x}'^2).
\tag{3.103}$$

Operátory  $\hat{x}'$  a  $\hat{p}'$  splňují komutační relace

$$\begin{aligned}
[\hat{x}', \hat{p}'] &= -[\hat{p}', \hat{x}'] = -\left[ \left( \frac{1}{m\hbar\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{p}, \left( \frac{m\omega}{\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{x} \right] = \\
&= -\left[ \left( \frac{m\omega}{m\omega\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{p}\hat{x} - \left( \frac{m\omega}{m\omega\hbar^2} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{x}\hat{p} \right] = -\frac{1}{\hbar}(\hat{p}\hat{x} - \hat{x}\hat{p}) = \\
&= -\frac{1}{\hbar}[\hat{p}, \hat{x}] = i.
\end{aligned} \tag{3.104}$$

Zavedeme-li nyní dvojici vzájemně adjungovaných operátorů

$$\hat{a}^- = \frac{1}{2}(\hat{x}' + i\hat{p}'), \quad \hat{a}^+ = \frac{1}{2}(\hat{x}' - i\hat{p}'), \tag{3.105}$$

které splňují komutační relaci

$$\begin{aligned}
[\hat{a}^-, \hat{a}^+] &= \frac{1}{2}[(\hat{x}' + i\hat{p}')(\hat{x}' - i\hat{p}') - (\hat{x}' - i\hat{p}')(\hat{x}' + i\hat{p}')] = \\
&= \frac{1}{2}[(\hat{x}'^2 + i\hat{p}'\hat{x}' - \hat{x}'i\hat{p}' + \hat{p}'^2) - (\hat{x}'^2 + \hat{x}'i\hat{p}' - i\hat{p}'\hat{x}' + \hat{p}'^2)] = \\
&= \frac{1}{2}[\hat{x}'^2 + i[\hat{p}', \hat{x}'] + \hat{p}'^2 - (\hat{x}'^2 + i[\hat{x}', \hat{p}'] + \hat{p}'^2)] = \\
&= \frac{i}{2}(-2[\hat{p}', \hat{x}']) = -i^2 = 1,
\end{aligned} \tag{3.106}$$

můžeme psát hamiltonián ( 3.103 ) ve tvaru

$$\hat{H} = \frac{1}{2}\hbar\omega(\hat{a}^-\hat{a}^+ + \hat{a}^+\hat{a}^-) = \frac{1}{2}\hbar\omega\{\hat{a}^-, \hat{a}^+\}, \tag{3.107}$$

kde veličinu  $\{A, B\} = (AB + BA)$  nazýváme **antikomutátor**.

Vytvoříme-li dále operátor

$$\hat{N} = \hat{a}^+\hat{a}^-, \tag{3.108}$$

zjednoduší se nám ( 3.107 ) na

$$\hat{H} = \hbar\omega \left( \hat{N} + \frac{1}{2} \right). \quad ( 3.109 )$$

Úloha nalezení vlastních hodnot energie lineárního harmonického oscilátoru se nám tím převedla na úlohu nalézt spektrum, operátoru  $\hat{N}$

$$\hat{N}|\psi_n\rangle = n|\psi_n\rangle. \quad ( 3.110 )$$

V kvantové mechanice bývá často zvykem vynechávat stále se opakující symbol  $\psi$  vlnové funkce v zápisu stavových vektorů a nahrazovat jej pouze indexy. Rovnici ( 3.110 ) tak budeme v dalším psát stručněji jako

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle. \quad ( 3.111 )$$

Vlastní vektory operátoru  $\hat{N}$  předpokládáme normované, takže

$$\langle n|n\rangle = 1. \quad ( 3.112 )$$

Vynásobením rovnice ( 3.111 ) zleva bravektorem  $\langle n|$  dostaneme

$$\langle n|\hat{N}|n\rangle = n. \quad ( 3.113 )$$

Protože kreační a anihilační operátor jsou vzájemně hermitovsky sdružené, můžeme tento vztah přepsat do tvaru

$$\langle \hat{a}^- n | \hat{a}^- n \rangle = n, \quad ( 3.114 )$$

neboť  $\langle \hat{a}^- | = \hat{a}^+$ ,  $| \hat{a}^- \rangle = \hat{a}^-$ .

Podle vlastností skalárního součinu je však skalární součin mezi dvěma stejnými stavy reálný a větší nebo roven nule, kde nula nastává

tehdy a jen tehdy, je-li stavový vektor nulový. Odtud plyne pozorování, že

$$n \geq 0. \quad (3.115)$$

Vynásobíme nyní rovnici ( 3.111 ) anihilačním operátorem zleva

$$\hat{a}^- \hat{a}^+ \hat{a}^- |n\rangle = n \hat{a}^- |n\rangle \quad (3.116)$$

a použijeme komutační relaci ( 306 )

$$(\hat{a}^+ \hat{a}^- + \hat{a}^- \hat{a}^+ - \hat{a}^+ \hat{a}^-) |a^- n\rangle = (\hat{a}^+ \hat{a}^- + 1) |a^- n\rangle = n |a^- n\rangle. \quad (3.117)$$

Po převedení jedničky na pravou stranu dostaneme

$$\hat{N} |\hat{a}^- n\rangle = (n-1) |\hat{a}^- n\rangle, \quad (3.118)$$

kde  $|\hat{a}^- n\rangle$  označuje stav vzniklý působením operátoru  $\hat{a}^-$  na stav  $|n\rangle$ . Odtud vyplývá, že jestliže stav  $|n\rangle$  odpovídá vlastní hodnotě  $n$ , potom stav  $|\hat{a}^- n\rangle$  odpovídá vlastní hodnotě  $n - 1$ .

Podobně bychom dokázali platnost formule

$$\hat{N} |\hat{a}^+ n\rangle = (n+1) |\hat{a}^+ n\rangle, \quad (3.119)$$

podle níž stav  $|\hat{a}^+ n\rangle$  odpovídá vlastní hodnotě  $n + 1$ .

Můžeme tedy zkonstruovat posloupnost vlastních vektorů

$$|(\hat{a}^-)^1 n\rangle, |(\hat{a}^-)^2 n\rangle, \dots, |(\hat{a}^-)^p n\rangle \quad (3.120)$$

odpovídajících vlastním hodnotám

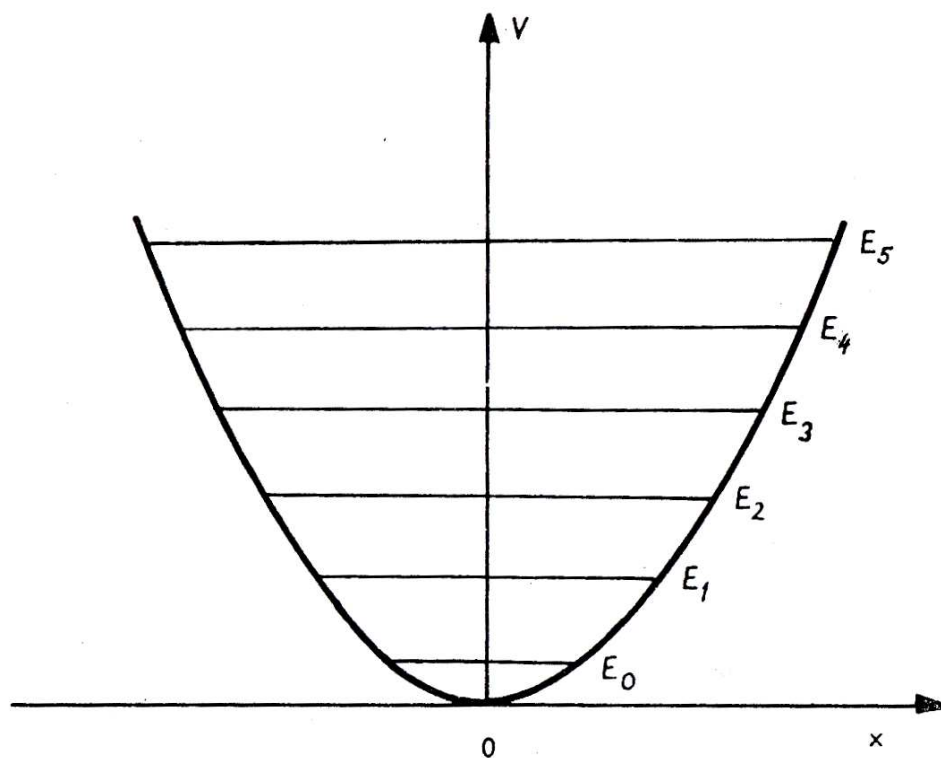
$$n-1, n-2, \dots, n-p. \quad (3.121)$$

Jak plyne z ( 3.115 ), je  $\hat{N}$  pozitivně definitní operátor, neboť jeho vlastní hodnoty jsou reálné a nezáporné. Zároveň je vidět, že posloupnost ( 3.120 ) může mít jen konečný počet členů, přičemž působením anihilačního operátoru na vakuový stav  $|0\rangle$  se již nic nemění

$$\hat{a}^- |0\rangle = 0. \quad ( 3.122 )$$

Podobným způsobem bychom ukázali, že působením kreačního operátoru na vakuový stav lze vytvořit nekonečnou posloupnost navzájem ortogonálních vlastních vektorů operátoru  $\hat{N}$ , příslušejících vlastním hodnotám  $1, 2, \dots$ .

Obr. 3.4

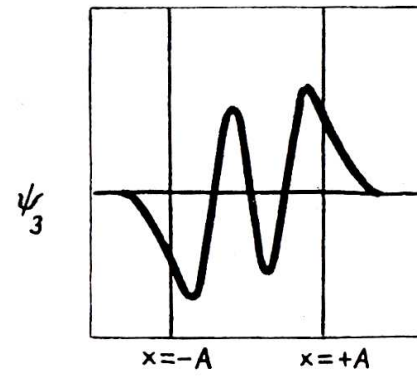
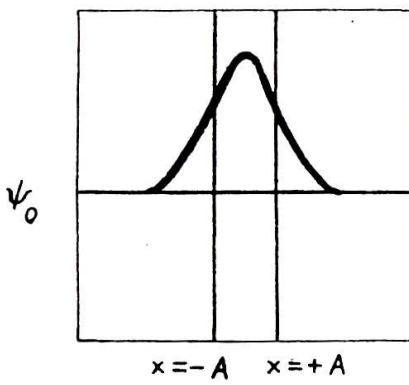
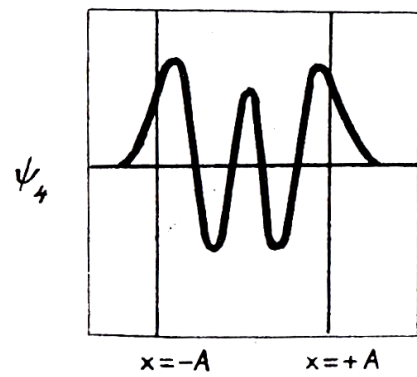
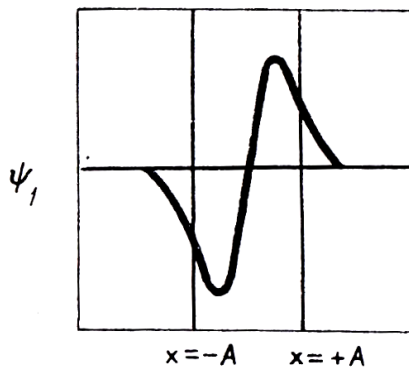
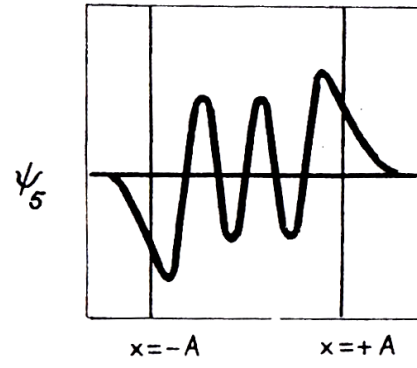
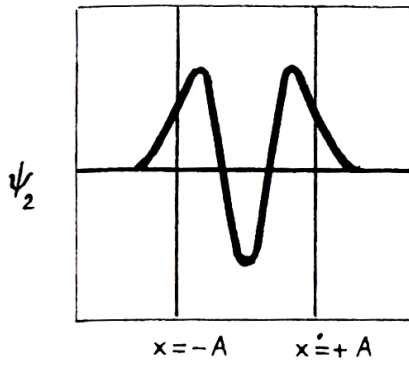


Z předchozí diskuse vyplývá, že vlastními hodnotami operátoru  $\hat{N}$  jsou všechna přirozená čísla včetně nuly.

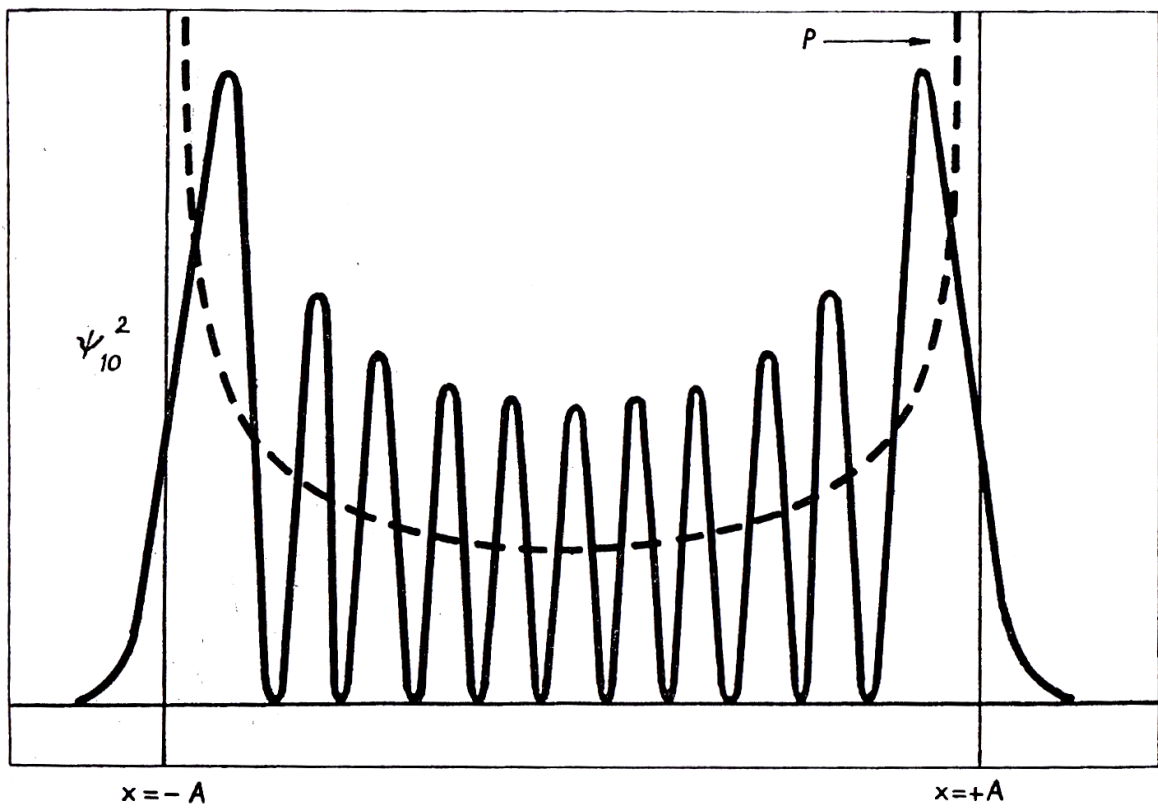
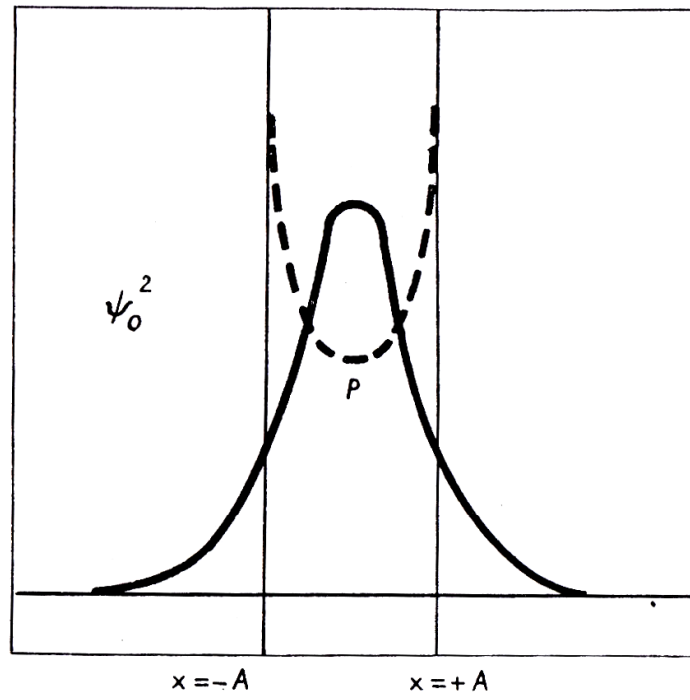
Pro vlastní hodnoty energie dostáváme z ( 3.109 ) vztah

$$E = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right). \quad ( 3.123 )$$

Obr. 3.5



Obr. 3.6



Protože operátor  $\hat{a}^-$  zmenšuje a operátor  $\hat{a}^+$  zvětšuje počet kvant  $\omega\hbar$  systému o jednotku, nazývají se příslušné operátory anihilační, resp. kreační. Operátor  $\hat{N}$  udává počet kvant  $n$  (obsazovací číslo) systému a nazývá se **operátorem počtu kvant**.

Vektor  $|\hat{a}^+n\rangle$  není obecně normovaný. Vzhledem k rovnicím ( 3.118 ) a ( 3.119 ) má normovaný stav tvar

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} \hat{a}^+ |n-1\rangle. \quad ( 3.124 )$$

Opakováním tohoto postupu obdržíme obecný výraz pro normované stavy  $|n\rangle$

$$|n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |0\rangle. \quad ( 3.125 )$$

## Impulsmoment

V klasické mechanice připisujeme hmotné částici impulsmoment  $\mathbf{l}$  definovaný vztahem

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = (yp_x - zp_y, zp_x - xp_z, xp_y - yp_x). \quad ( 3.126 )$$

V kvantové mechanice složkám impulsmomentu odpovídají operátory

$$\hat{\mathbf{l}} = \frac{\hbar}{i} (\hat{\mathbf{r}} \times \nabla), \quad ( 3.127 )$$

neboli po složkách



$$\begin{aligned}
\hat{l}_z &= \frac{\hbar}{i} \left( \hat{y} \frac{\partial}{\partial z} - \hat{z} \frac{\partial}{\partial y} \right), \\
\hat{l}_y &= \frac{\hbar}{i} \left( \hat{z} \frac{\partial}{\partial x} - \hat{x} \frac{\partial}{\partial z} \right), \\
\hat{l}_x &= \frac{\hbar}{i} \left( \hat{x} \frac{\partial}{\partial y} - \hat{y} \frac{\partial}{\partial x} \right).
\end{aligned} \tag{3.128}$$

Odvoďme nyní komutační relace pro komponenty impulsmomentu. Pro první 2 komponenty impulsmomentu platí:

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}_y] &= [\hat{y}\hat{p}_z - \hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x - \hat{x}\hat{p}_z] = \\
&= [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{y}\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{z}\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] = \\
&= \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}\hat{p}_x] + [\hat{y}, \hat{z}\hat{p}_x]\hat{p}_z - \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{x}\hat{p}_z] - [\hat{y}, \hat{x}\hat{p}_z]\hat{p}_z - \\
&\quad - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{z}\hat{p}_x] - [\hat{z}, \hat{z}\hat{p}_x]\hat{p}_y + \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{x}\hat{p}_z] + [\hat{z}, \hat{x}\hat{p}_z]\hat{p}_y = \\
&= \hat{y}\hat{z}[\hat{p}_z, \hat{p}_x] + \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{z}[\hat{y}, \hat{p}_x]\hat{p}_z + [\hat{y}, \hat{z}]\hat{p}_x\hat{p}_z - \\
&\quad - \hat{y}\hat{x}[\hat{p}_z, \hat{p}_z] - \hat{y}[\hat{p}_z, \hat{x}]\hat{p}_z - \hat{x}[\hat{y}, \hat{p}_z]\hat{p}_z - [\hat{y}, \hat{x}]\hat{p}_z\hat{p}_z - \\
&\quad - \hat{z}\hat{z}[\hat{p}_y, \hat{p}_x] - \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{z}]\hat{p}_x - \hat{z}[\hat{z}, \hat{p}_x]\hat{p}_y - [\hat{z}, \hat{z}]\hat{p}_x\hat{p}_y + \\
&\quad + \hat{z}\hat{x}[\hat{p}_y, \hat{p}_z] + \hat{z}[\hat{p}_y, \hat{x}]\hat{p}_z + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y + [\hat{z}, \hat{x}]\hat{p}_z\hat{p}_y = \\
&= -\hat{y}[\hat{p}_z, \hat{z}]\hat{p}_x + \hat{x}[\hat{z}, \hat{p}_z]\hat{p}_y = -i\hbar\hat{y}\hat{1}\hat{p}_x + i\hbar\hat{x}\hat{1}\hat{p}_y = \\
&= i\hbar(\hat{x}\hat{p}_y - \hat{y}\hat{p}_x) = i\hbar\hat{l}_z
\end{aligned} \tag{3.129}$$

Zcela analogicky se vypočtou zbylé dva komutátory ostatních složek impulsmomentu. Pro jednotlivé komutátory tedy platí.

$$[\hat{l}_i, \hat{l}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{l}_k. \tag{3.130}$$

Impulsmoment systému částic se definuje jako suma impulsmomentů jednotlivých částic

$$\hat{\mathbf{L}} = \sum_k \hat{\mathbf{l}}(k) = \sum_k [\hat{\mathbf{r}}(k) \times \hat{\mathbf{p}}(k)] = \sum_k \hat{\mathbf{r}}(k) \times \sum_k \hat{\mathbf{p}}(k) = \hat{\mathbf{X}} \times \hat{\mathbf{P}}. \quad (3.131)$$

Zcela analogickým způsobem jako pro impulsmoment jedné částice, se dokáže platnost komutačních relací ( 3.130 ) pro impulsmoment systému částic, tedy

$$[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{L}_k, \quad (3.132)$$

kde

$$\hat{L}_i = \sum_k \hat{l}_i(k). \quad (3.133)$$

V minulém odstavci jsme viděli, že všechny stavy lineárního harmonického oscilátoru lze získat opakovaným působením kreačního operátoru na základní, neboli vakuový stav  $|0\rangle$  oscilátoru.

Mějme nyní systém dvou nezávislých lineárních harmonických oscilátorů, jeden nechť je popsán operátory  $\hat{a}_1^-$ ,  $\hat{a}_1^+$ , druhý operátory  $\hat{a}_2^-$ ,  $\hat{a}_2^+$ .

Vzhledem k nezávislosti oscilátorů komutují operátory s indexem 1 s operátory s indexem 2.

Normovaný vlastní stav systému má podle ( 3.125 ) tvar

$$|n_1, n_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1! n_2!}} (\hat{a}_1^+)^{n_1} (\hat{a}_2^+)^{n_2} |0\rangle. \quad (3.134)$$

Definujme nyní operátory

$$\begin{aligned}
\hat{J}_x &= \frac{\hbar}{2}(a_1^+ a_2^- + a_2^+ a_1^-), \\
\hat{J}_y &= \frac{\hbar}{2i}(a_1^+ a_2^- - a_2^+ a_1^-), \\
\hat{J}_z &= \frac{\hbar}{2}(a_1^+ a_1^- - a_2^+ a_2^-),
\end{aligned} \tag{3.135}$$

a spočtěme jejich komutátory. Pro první dva operátory dostáváme

$$\begin{aligned}
& [\hat{J}_x, \hat{J}_y] = \\
&= -\frac{i\hbar^2}{4} \left[ (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-) (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-) - (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-) (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-) \right] = \\
&= -\frac{i\hbar^2}{4} \left[ (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 - \right. \\
&\quad \left. - (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 - \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 \right] = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-) = \frac{i\hbar^2}{4} [\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-, \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-] = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} \left\{ \hat{a}_1^+ [\hat{a}_2^-, \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-] + [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-] \hat{a}_2^- \right\} = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} \left\{ \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^+ [\hat{a}_2^-, \hat{a}_1^-] + \hat{a}_1^+ [\hat{a}_2^-, \hat{a}_2^+] \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+] \hat{a}_2^- + [\hat{a}_1^+, \hat{a}_2^+] \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \right\} = \\
&= \frac{i\hbar^2}{4} (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- - \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-) = i\hbar \hat{J}_z
\end{aligned} \tag{3.136}$$

Zcela analogicky se vypočtou zbylé dva komutátory. Pro jednotlivé komutátory dostáváme výsledek

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar \varepsilon_{ijk} \hat{J}_k, \tag{3.137}$$

shodný s komutačními relacemi pro operátory impulsmomentu. Systém dvou nezávislých harmonických oscilátorů lze tedy použít jako model impulsmomentu.

Definujme dále operátor  $\hat{N}$  jako

$$\hat{N} = \hat{N}_1 + \hat{N}_2 = a_1^+ a_1^- + a_2^+ a_2^-. \quad (3.138)$$

Jeho vlastní hodnoty jsou zřejmě  $n = n_1 + n_2$  a

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 &= \hat{J}_x^2 + J_y^2 + J_z^2 = \frac{\hbar^2}{4} \left[ (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 + 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 - \right. \\ &\quad \left. - (\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-)^2 + 2\hat{a}_2^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^- - (\hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-)^2 + (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^-)^2 - 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-)^2 \right] = \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left\{ 2 \left[ \hat{a}_1^+ (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^+ + 1) \hat{a}_1^- \right] + 2 \left[ \hat{a}_2^+ (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^+ + 1) \hat{a}_2^- \right] - \right. \\ &\quad \left. - 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^-)^2 + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-)^2 \right\} = \\ &= \frac{\hbar^2}{4} \left[ (\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^-)^2 + 2\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + (\hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-)^2 + 2(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^-) \right] = \\ &= \hbar^2 \left( \frac{\hat{N}^2}{4} + \frac{\hat{N}}{2} \right) = \hbar^2 \frac{\hat{N}}{2} \left( \frac{\hat{N}}{2} + 1 \right). \end{aligned} \quad (3.139)$$

Odtud plyne, že vlastní hodnoty  $\hat{J}^2$  jsou tvaru

$$\hbar^2 j(j+1), \quad (3.140)$$

kde  $j$  nabývá hodnot  $j = \frac{n}{2}$ .

Z (3.135) a (3.139) je vidět, že vlastní stav  $|n_1, n_2\rangle$  systému dvou nezávislých oscilátorů je také vlastním stavem operátorů  $\hat{J}^2$  a  $\hat{J}_z$

$$\hat{J}^2 |n_1, n_2\rangle = \hbar^2 \frac{n}{2} \left( \frac{n}{2} + 1 \right) |n_1, n_2\rangle, \quad (3.141)$$

$$\hat{J}_z |n_1, n_2\rangle = \frac{\hbar}{2} (n_1 - n_2) |n_1, n_2\rangle,$$

a odpovídá hodnotám

$$j = \frac{n_1 + n_2}{2}, \quad m = \frac{n_1 - n_2}{2}. \quad (3.142)$$

Proto můžeme ( 3.141 ) přepsat do obvyklejšího tvaru

$$\begin{aligned} \hat{J}^2 |j, m\rangle &= \hbar^2 j(j+1) |j, m\rangle, \\ \hat{J}_z |j, m\rangle &= \hbar m |j, m\rangle, \end{aligned} \quad (3.143)$$

Pro pevně zvolené  $n_1 + n_2$  existuje

$$n_1 + n_2 + 1 = 2j + 1 \quad (3.144)$$

různých možných hodnot  $m$ . Jsou to hodnoty

$$m = -j, -j+1, \dots, j-1, j. \quad (3.145)$$

Pro daný konkrétní případ impulsmomentu je buď

$$|m| = 0, 1, 2, \dots, j, \quad (3.146)$$

nebo

$$|m| = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \dots, j. \quad (3.147)$$

Jak uvidíme dále, první série hodnot platí pro orbitální moment  $l$ , druhá pro spinový moment  $s$  částice.

Z ( 3.142 ) plyne, že  $n_1 = j + m$ ,  $n_2 = j - m$  a z ( 3.134 ) dostáváme explicitní tvar vlastních vektorů operátorů  $\hat{J}^2$  a  $\hat{J}_z$ :

$$|j, m\rangle = \frac{(\hat{a}_1^+)^{j+m} (\hat{a}_2^+)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} |0\rangle. \quad (3.148)$$

Zavedeme nyní tzv. posunovací operátory:

$$\hat{J}_+ = \hbar \hat{a}_1^+ \hat{a}_2^-, \quad \hat{J}_- = \hbar \hat{a}_2^+ \hat{a}_1^-. \quad (3.149)$$

Snadno ověříme, že platí

$$\hat{J}_+ = \hat{J}_x + i\hat{J}_y, \quad \hat{J}_- = \hat{J}_x - i\hat{J}_y. \quad (3.150)$$

Spočteme-li komutátor

$$[\hat{J}_z, \hat{J}_\pm] = \hat{J}_z \hat{J}_x \pm i\hat{J}_z \hat{J}_y - \hat{J}_x \hat{J}_z \mp i\hat{J}_y \hat{J}_z = i\hbar \hat{J}_y \pm \hbar \hat{J}_x = \pm \hbar \hat{J}_\pm, \quad (3.151)$$

snadno odvodíme, že

$$\hat{J}_z \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hat{J}_\pm \hat{J}_z |j, m\rangle \pm \hbar \hat{J}_\pm |j, m\rangle = \hbar(m \pm 1) \hat{J}_\pm |j, m\rangle. \quad (3.152)$$

$\hat{J}_\pm |j, m\rangle$  je tedy vlastním vektorem  $\hat{J}_z$  s vlastní hodnotou  $\hbar(m \pm 1)$ .

Odtud je vidět, že posunovací operátory sklápějí vlastní vektory zetové komponenty impulsmomentu, takže platí

$$\hat{J}_\pm |j, m\rangle = C_m^\pm |j, m \pm 1\rangle, \quad (3.153)$$

kde  $C_m^\pm$  je konstanta úměrnosti, kterou bude nyní naším úkolem určit.

Za tímto účelem spočteme součiny posunovacích operátorů

$$\hat{J}_\mp \hat{J}_\pm = (\hat{J}_x \mp i\hat{J}_y)(\hat{J}_x \pm i\hat{J}_y) = \hat{J}_x^2 + \hat{J}_y^2 \pm i(\hat{J}_x \hat{J}_y - \hat{J}_y \hat{J}_x) = \hat{J}^2 - \hat{J}_z^2 \mp \hbar \hat{J}_z \quad (3.154)$$

odkud ihned plyne

$$|C_m^\pm|^2 = \langle j, m | \hat{J}_\mp \hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar^2 [j(j+1) - m(m \pm 1)] = \hbar^2 (j \mp m)(j \pm m + 1) \quad (3.155)$$

odkud

$$\hat{J}_\pm | j, m \rangle = \hbar \sqrt{(j \mp m)(j \pm m + 1)} | j, m \pm 1 \rangle. \quad (3.156)$$

Takto můžeme nalézt  $2j+1$  ortonormálních vektorů

$$|j, j\rangle, |j, j-1\rangle, \dots, |j, m\rangle, \dots, |j, -j\rangle, \quad (3.157)$$

kteřé jsou společnými vlastními vektory operátorů  $\hat{J}^2, \hat{J}_z$  a tvoří bázi podprostoru  $H^{(j)}$  Hilbertova prostoru.

### Maticová reprezentace impulsmomentu

$(2j + 1)$  – rozměrné matice  $\hat{\mathbf{J}}^{(j)}$  definované elementy

$$\left(\hat{\mathbf{J}}^{(j)}\right)_{m'm} \equiv \langle j, m' | \hat{\mathbf{J}} | j, m \rangle, \quad (3.158)$$

představují realizace operátorů  $\hat{\mathbf{J}}$  v charakteristickém podprostoru operátoru  $\hat{\mathbf{J}}^2$ .

Tyto matice pochopitelně vyhovují komutačním relacím (3.137) a platí

$$\hat{\mathbf{J}} | j, m \rangle = \sum_{m'=-j}^j \hat{\mathbf{J}}_{m'm}^{(j)} | j, m' \rangle. \quad (3.159)$$

Pro nejnižší možné hodnoty  $j$  mají matice  $\hat{\mathbf{J}}_k^{(j)}$  následující tvar (hodnota indexů  $m', m$  číslujících řádky a sloupce ubývá shora dolů a zleva doprava):

$$\hat{\mathbf{J}}_k^{(0)} = 0, \quad (3.160)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_k^{(1/2)} = \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}_k, \quad (3.161)$$

kde

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (3.162)$$

jsou tzv. Pauliho matice a

$$\hat{\mathbf{J}}_1^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\mathbf{J}}_2^{(1)} = \frac{\hbar}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad \hat{\mathbf{J}}_3^{(1)} = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (3.163)$$

Posunovací operátory ( 3.149 ) můžeme nahradit maticovými operátory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(0)} &= \hbar \left( C_{m'=0, m=0}^{\pm} \right) \delta_{m'(m\pm 1)}, \\ \hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(1/2)} &= \hbar \begin{pmatrix} C_{m'=\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}}^{\pm} & C_{m'=\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}}^{\pm} \\ C_{m'=-\frac{1}{2}, m=\frac{1}{2}}^{\pm} & C_{m'=-\frac{1}{2}, m=-\frac{1}{2}}^{\pm} \end{pmatrix} \delta_{m'(m\pm 1)}, \\ \hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(1)} &= \hbar \begin{pmatrix} C_{m'=1, m=1}^{\pm} & C_{m'=1, m=0}^{\pm} & C_{m'=1, m=-1}^{\pm} \\ C_{m'=0, m=1}^{\pm} & C_{m'=0, m=0}^{\pm} & C_{m'=0, m=-1}^{\pm} \\ C_{m'=-1, m=1}^{\pm} & C_{m'=-1, m=0}^{\pm} & C_{m'=-1, m=-1}^{\pm} \end{pmatrix} \delta_{m'(m\pm 1)}, \end{aligned} \quad (3.164)$$

kde hodnoty v jednotlivých polích jsou dány dosazením odpovídajících vlastních hodnot do vztahu ( 3.155 ). Máme tedy



$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{J}}_{\pm}^{(0)} &= 0, \\
\hat{\mathbf{J}}_{+}^{(1/2)} &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{J}}_{-}^{(1/2)} = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \\
\hat{\mathbf{J}}_{+}^{(1)} &= \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\mathbf{J}}_{-}^{(1)} = \hbar\sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.165}$$

### Částice v centrálním poli

V této kapitole bude již výhodné operovat ve sférických souřadnicích  $r, \vartheta, \varphi$ , kde platí známé převodní vztahy

$$\begin{aligned}
x &= r \sin \vartheta \cos \varphi, \\
y &= r \sin \vartheta \sin \varphi, \\
z &= r \cos \vartheta.
\end{aligned} \tag{3.166}$$

Laplaceův operátor  $\Delta = \nabla^2$  má v nich tvar

$$\Delta = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\Delta_{\vartheta, \varphi}}{r^2}, \tag{3.167}$$

kde  $\Delta_{\vartheta, \varphi}$  je tzv. úhlová část Laplaceova operátoru:

$$\Delta_{\vartheta, \varphi} = \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \tag{3.168}$$

Jednotlivé operátory impulsmomentu mají ve sférických souřadnicích tvar

$$\begin{aligned}
\hat{l}_x &= -\frac{\hbar}{i} \left( \sin \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\
\hat{l}_y &= \frac{\hbar}{i} \left( \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \vartheta} - \cot \vartheta \cos \varphi \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\
\hat{l}_z &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial \varphi}, \\
\hat{l}^2 &= -\hbar^2 \Delta_{\vartheta, \varphi}.
\end{aligned} \tag{3.169}$$

Hamiltonián částice v centrálním poli předpokládáme ve tvaru

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V(r), \tag{3.170}$$

což po dosazení z výše uvedených vztahů ve sférických souřadnicích dává

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\hat{l}^2}{2mr^2} + V(r). \tag{3.171}$$

Spočtěme nyní komutátory  $[\hat{l}_i, \hat{l}^2]$ . Např.

$$\begin{aligned}
[\hat{l}_x, \hat{l}^2] &= \hat{l}_x \hat{l}^2 - \hat{l}^2 \hat{l}_x = \hat{l}_x (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) - (\hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2) \hat{l}_x = \\
&= \hat{l}_x \hat{l}_x^2 + \hat{l}_x \hat{l}_y^2 + \hat{l}_x \hat{l}_z^2 - \hat{l}_x^2 \hat{l}_x - \hat{l}_y^2 \hat{l}_x - \hat{l}_z^2 \hat{l}_x = \hat{l}_x \hat{l}_y^2 - \hat{l}_y^2 \hat{l}_x + \hat{l}_x \hat{l}_z^2 - \hat{l}_z^2 \hat{l}_x = \\
&= \hat{l}_y (\hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x) + (\hat{l}_x \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_x) \hat{l}_y + \hat{l}_z (\hat{l}_x \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_x) + (\hat{l}_x \hat{l}_z - \hat{l}_z \hat{l}_x) \hat{l}_z = \\
&= \hat{l}_y [\hat{l}_x, \hat{l}_y] + [\hat{l}_x, \hat{l}_y] \hat{l}_y + \hat{l}_z [\hat{l}_x, \hat{l}_z] + [\hat{l}_x, \hat{l}_z] \hat{l}_z = \\
&= i\hbar (\hat{l}_y \hat{l}_z + \hat{l}_z \hat{l}_y - \hat{l}_z \hat{l}_y - \hat{l}_y \hat{l}_z) = 0.
\end{aligned} \tag{3.172}$$

Podobně se dokáže komutace ostatních dvou komponent impulsmomentu s kvadrátem celkového impulsmomentu. Platí tedy

$$\left[ \hat{l}_x, \hat{l}^2 \right] = \left[ \hat{l}_y, \hat{l}^2 \right] = \left[ \hat{l}_z, \hat{l}^2 \right] = 0. \quad (3.173)$$

Jelikož operátory  $\hat{l}^2, \hat{l}_x, \hat{l}_y, \hat{l}_z$  závisí jen na úhlech  $\vartheta$  a  $\varphi$  a derivacích podle nich, zatímco hamiltonián ( 3.171 ) závisí pouze na souřadnici  $r$ , derivacích podle ní a rovněž na kvadrátu impulsmomentu  $\hat{l}^2$  se kterým však ostatní komponenty impulsmomentu (jak jsme právě ukázali) komutují, vyplývají odtud další důležité komutační relace

$$\left[ \hat{l}^2, \hat{H} \right] = \left[ \hat{l}_x, \hat{H} \right] = \left[ \hat{l}_y, \hat{H} \right] = \left[ \hat{l}_z, \hat{H} \right] = 0. \quad (3.174)$$

Díky tomu, že  $\hat{l}_z, \hat{l}^2$  a  $\hat{H}$  navzájem komutují, existuje společný systém vlastních funkcí  $|l, m\rangle$  těchto operátorů.

Označme tyto hledané vlastní funkce  $|l, m\rangle \equiv Y_{l,m}(\vartheta, \varphi)$  a předpokládejme, že je lze vyjádřit jako součin dvou úhlových funkcí

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \Theta_{l,m}(\vartheta) \Phi_m(\varphi), \quad (3.175)$$

z nichž první je vlastní funkcí operátoru  $\hat{l}^2$  a druhá vlastní funkcí operátoru  $\hat{l}_z$ . Druhá rovnice ( 3.143 ) v polárních souřadnicích zní

$$-i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \Phi_m = \hbar m \Phi_m, \quad (3.176)$$

a její řešení je

$$\Phi_m(\varphi) = A e^{im\varphi}. \quad (3.177)$$

Z požadavku jednoznačnosti plyne, že  $\Phi$  musí být periodická s periodou  $2\pi$ , tj.

$$\Phi_m(\varphi + 2\pi) = \Phi_m(\varphi). \quad (3.178)$$

Jelikož

$$e^{im\varphi} = \cos(m\varphi) + i \sin(m\varphi), \quad (3.179)$$

musí být

$$\cos(m\varphi) = \cos(m\varphi + 2\pi), \quad \sin(m\varphi) = \sin(m\varphi + 2\pi). \quad (3.180)$$

Obě tyto rovnice jsou splněny pouze tehdy, když  $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  (což je ve shodě s (3.146)). Konstantu  $A$  určíme z normovací podmínky

$$\int_0^{2\pi} |\Phi_m(\varphi)|^2 d\varphi = 2\pi A^2 = 1, \quad (3.181)$$

odkud konečně

$$\Phi_m(\varphi) = \frac{e^{im\varphi}}{\sqrt{2\pi}}, \quad m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots \quad (3.182)$$

Víme již tedy, že

$$Y_{l,m}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \Theta_{l,m}(\vartheta) e^{im\varphi}. \quad (3.183)$$

Pro nalezení vlastní funkce operátoru  $l^2$  dosadíme jeho sférické vyjádření do první rovnice (3.143), což vede k rovnici

$$\frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \vartheta} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta_{l,m} = 0. \quad (3.184)$$

V této rovnici provedeme substituci

$$\xi = \cos \vartheta. \quad (3.185)$$

Diferenciál  $\xi$  je

$$\partial \xi = -\sin \vartheta \partial \vartheta. \quad (3.186)$$

V této nové proměnné má rovnice ( 3.184 ) tvar

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left( \sin^2 \vartheta \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \xi} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta_{l,m} = 0, \quad (3.187)$$

a vzhledem k tomu, že

$$\sin^2 \vartheta = 1 - \cos^2 \vartheta, \quad (3.188)$$

můžeme psát ( 3.187 ) jako

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left( (1 - \xi^2) \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \xi} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] \Theta_{l,m} = 0 \quad (3.189)$$

neboli

$$(1 - \xi^2) \frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{d\xi^2} - 2\xi \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \xi} + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1 - \xi^2} \right] \Theta_{l,m} = 0. \quad (3.190)$$

Tato rovnice má 2 singulární body  $\xi = \pm 1$ . Nejprve budeme diskutovat řešení v okolí bodu  $\xi = 1$ . Provedeme-li substituci

$$\begin{aligned} \chi &= \xi - 1, \\ d\chi &= d\xi \end{aligned} \quad (3.191)$$

dostaneme rovnici

$$\left[ 1 - (\chi + 1)^2 \right] \frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{d\chi^2} - 2(\chi + 1) \frac{\partial \Theta_{l,m}}{\partial \chi} + \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1 - (\chi + 1)^2} \right] \Theta_{l,m} = 0, \quad (3.192)$$

nebo, po vydělení celé rovnice výrazem  $1 - (\chi + 1)^2$

$$\frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{\partial \chi^2} - \frac{2(\chi+1)}{1-(\chi+1)^2} \frac{d\Theta_{l,m}}{d\chi} + \frac{1}{1-(\chi+1)^2} \left[ l(l+1) - \frac{m^2}{1-(\chi+1)^2} \right] \Theta_{l,m} = 0 \quad (3.193)$$

a po úpravě

$$\frac{\partial^2 \Theta_{l,m}}{\partial \chi^2} - \frac{2}{\chi} \frac{\chi+1}{\chi+2} \frac{d\Theta_{l,m}}{d\chi} + \left[ \frac{l(l+1)}{\chi(\chi+2)} - \frac{m^2}{\chi^2(\chi+2)^2} \right] \Theta_{l,m} = 0. \quad (3.194)$$

Nyní budeme hledat funkci  $\Theta_{l,m}$  ve tvaru mocninné řady

$$\Theta_{l,m} = \chi^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i \chi^i. \quad (3.195)$$

V okolí singulárního bodu  $\xi \rightarrow 1$  tj.  $\chi \rightarrow 0$  můžeme vzít  $\Theta_{l,m}$  ve tvaru

$$\Theta_{l,m} = a_0 \chi^\gamma. \quad (3.196)$$

Po dosazení tohoto vztahu do rovnice (3.194) a zanedbání členů řádu vyššího než  $\chi^{\gamma-2}$  dostaneme

$$\gamma(\gamma-1)\chi^{\gamma-2} - \gamma\chi^{\gamma-2} - \frac{m^2}{4}\chi^{\gamma-2} = 0 \quad (3.197)$$

nebo po úpravě

$$\left[ \gamma(\gamma-1) - \gamma - \frac{m^2}{4} \right] \chi^{\gamma-2} = 0. \quad (3.198)$$

Odtud vyplývá

$$\gamma = \pm \frac{m}{2}. \quad (3.199)$$

Abychom však dostali řešení které nediverguje pro  $\chi \rightarrow 0$ , je třeba vzít

$$\gamma = \frac{|m|}{2}. \quad (3.200)$$

Analogickým způsobem lze postupovat i pro  $\xi = -1$ , kdy lze provést substituci  $\chi = \xi + 1$  a výsledkem je opět rovnice ( 3.200 ).

$\Theta_{l,m}$  tedy můžeme hledat ve tvaru

$$\Theta_{l,m} = (1 - \xi)^{\frac{|m|}{2}} (1 + \xi)^{\frac{|m|}{2}} \eta(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \eta(\xi), \quad (3.201)$$

kde funkci  $\eta(\xi)$  lze vyjádřit ve tvaru mocninné řady

$$\eta = \sum_i^{\infty} b_i \xi^i. \quad (3.202)$$

Dosazením rovnice ( 3.201 ) do rovnice ( 3.189 ) obdržíme diferenciální rovnici pro funkci  $\eta$

$$(1 - \xi^2) \frac{\partial^2 \eta}{d\xi^2} - 2(|m| + 1) \xi \frac{\partial \eta}{\partial \xi} + [l(l+1) - |m| - m^2] \eta = 0. \quad (3.203)$$

Dosadíme-li nyní řadu ( 3.202 ) do této rovnice dostaneme rekurentní vztah mezi koeficienty  $b_i$

$$b_{i+2} = \frac{i(i-1) + 2(|m|+1)i - l(l+1) + |m| + |m|^2}{(i+2)(i+1)} b_i. \quad (3.204)$$

Pro veliká  $i$  se řada ( 3.202 ) chová jako geometrická řada s kvocientem  $\xi^2$ , jejíž součet je úměrný  $(1 - \xi^2)^{-1}$ .

Abychom však splnili požadavky kladené na vlnovou funkci  $\Theta_{l,m}$ , musíme předpokládat, že se řada ( 3.202 ) redukuje na polynom. To znamená, že existuje  $k$ , pro něž je koeficient  $b_{k+2} = 0$ . Musí proto platit

$$k(k-1) + 2(|m|+1)i - l(l+1) + |m| + |m|^2 = 0. \quad ( 3.205 )$$

Odtud je ihned vidět, že

$$l(l+1) = (k+|m|)(k+|m|+1), \quad k = 0, 1, 2, \dots, \quad ( 3.206 )$$

neboli

$$l = (k+|m|). \quad ( 3.207 )$$

Srovnáním ( 3.145 ), ( 3.146 ) a ( 3.207 ) je vidět, že nové vlastní číslo  $l$  může nabývat pouze hodnot

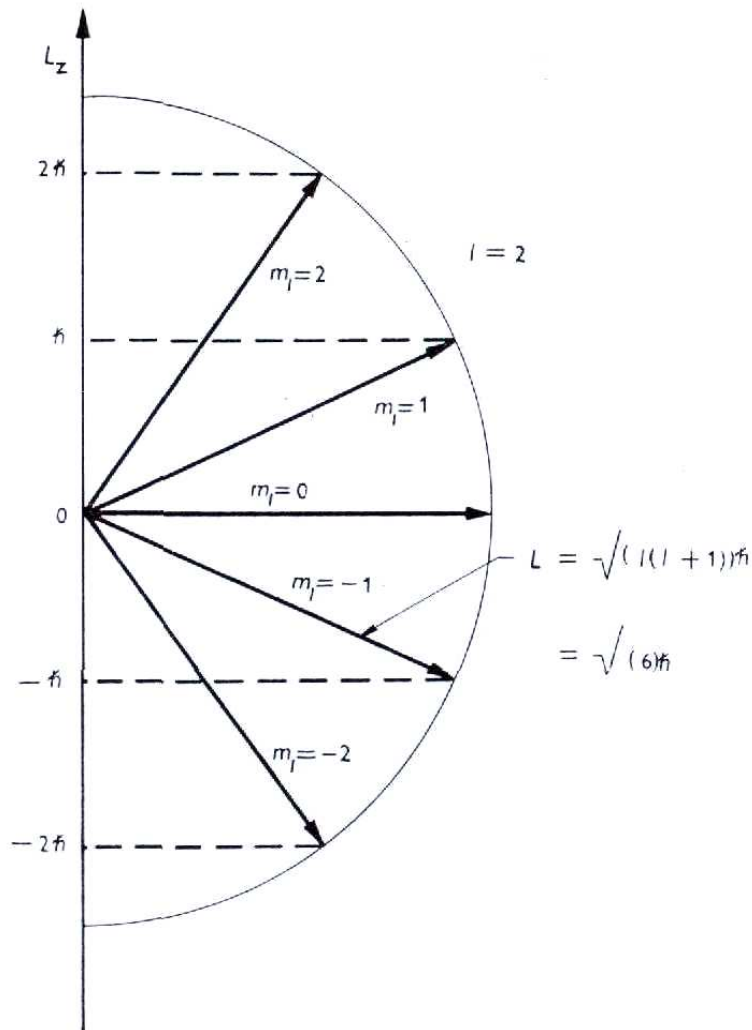
$$l = 0, 1, 2, \dots \quad ( 3.208 )$$

a současně platí

$$m = -l, -l+1, \dots, l-1, l. \quad ( 3.209 )$$



Obr. 3.7



Z matematického hlediska tvoří funkce  $\Theta_{l,m}$  takzvané **přidružené Legendreovy polynomy**  $P_l^m \equiv \Theta_{l,m}$ . Ty jsou definovány prostřednictvím **obyčejných Legendreových polynomů**

$$P_l(\xi) = \frac{1}{2^l l!} \frac{d^l}{d\xi^l} (\xi^2 - 1)^l \quad (3.210)$$

vztahem

$$P_l^m(\xi) = (1 - \xi^2)^{\frac{|m|}{2}} \frac{d^{|m|}}{d\xi^{|m|}} P_l(\xi). \quad (3.211)$$



Adrien-Marie Legendre (1752 – 1833)

Shrneme-li výsledky této kapitoly, vlastními funkcemi operátorů kvadrátu impulsmomentu a jeho  $z$ -ové komponenty jsou tzv. kulové funkce

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) = N_{l,m} P_l^m(\cos \vartheta) e^{im\varphi} \quad (3.212)$$

kde  $N_{jm}$  je normovací faktor

$$N_{lm} = \frac{(l - |m|)!(2l + 1)}{4\pi(l + |m|)!}. \quad (3.213)$$

Pro operátor kvadrátu impulsmomentu a jeho  $z$ -ové komponenty platí

$$\begin{aligned} \hat{l}^2 Y_{lm} &= \hbar^2 l(l + 1) Y_{lm}, & l &= 0, 1, 2, \dots \\ \hat{l}_z Y_{lm} &= \hbar m Y_{lm}, & m &= -l, \dots, l. \end{aligned} \quad (3.214)$$

## Atom vodíku



Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868 – 1951)

Vodíkový atom se skládá z protonu – částice s elektrickým nábojem  $+e$  – a z elektronu – částice s nábojem  $-e$ , která je 1836 krát lehčí než proton. Vzhledem k velikému rozdílu hmot obou částic můžeme proton prvním přiblížením považovat za nehybný, případné korekce na pohyb protonu se provedou jednoduchým nahrazením hmoty elektronu  $m_e$  za redukovanou hmotnost  $m_e'$ .

Trojrozměrná Schrödingerova rovnice pro pohyb elektronu v atomu vodíku tedy zní

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2}(E - V)\psi = 0, \quad (3.215)$$

kde potenciální energie je zde čistě elektrostatického charakteru:

$$V = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad (3.216)$$

Z důvodu závislosti na  $r$  bude tedy výhodné, vyjádřit tuto rovnici ve sférických souřadnicích. Po vynásobení obou stran výrazem  $r^2 \sin^2 \vartheta$  dostáváme parciální diferenciální rovnici pro elektronovou vlnovou funkci  $\psi$  v atomu vodíku ve tvaru

$$\begin{aligned} \sin^2 \vartheta \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \sin \vartheta \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} \right) + \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} + \\ + \frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) \psi = 0. \end{aligned} \quad (3.217)$$

Schrödingerovu rovnici atomu vodíku lze v této podobě snadno řešit metodou separace proměnných. Hledáme tedy řešení vlnové funkce  $\psi$  ve tvaru

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r)\Theta(\vartheta)\Phi(\varphi). \quad (3.218)$$

Funkce  $R(r)$  popisuje radiální průběh elektronové vlnové funkce  $\psi$  směrem od jádra při konstantním  $\vartheta$  a  $\varphi$ , funkce  $\Theta(\vartheta)$  závislost  $\psi$  na úhlu  $\vartheta$  podél poledníku koule se středem v jádru při konstantním  $r$  a  $\varphi$ , a konečně funkce  $\Phi(\varphi)$  závislost  $\psi$  na azimutálním úhlu  $\varphi$  podél rovnoběžky této koule při konstantním  $r$  a  $\vartheta$ . Odtud okamžitě vidíme, že

$$\begin{aligned} \frac{\partial \psi}{\partial r} &= \Theta\Phi \frac{\partial R}{\partial r}, \\ \frac{\partial \psi}{\partial \vartheta} &= R\Phi \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta}, \\ \frac{\partial^2 \psi}{\partial \varphi^2} &= R\Theta \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}, \end{aligned} \quad (3.219)$$

Dosadíme-li do rovnice ( 3.217 ) za  $\psi = R\Theta\Phi$  a zároveň tímto součinem celou rovnici podělíme, dostáváme tvar

$$\begin{aligned} \frac{\sin^2 \vartheta}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{\sin \vartheta}{\Theta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right) + \\ + \frac{2m_e r^2 \sin^2 \vartheta}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = -\frac{1}{\Phi} \frac{\partial^2 \Phi}{\partial \varphi^2}. \end{aligned} \quad (3.220)$$

Tato rovnice může být splněna pouze když se obě její strany rovnají téže konstantě, neboť jsou funkcemi různých proměnných.

Označíme-li tuto konstantu  $m_l^2$ , dostáváme na pravé straně ( 2.220 ) diferenciální rovnici pro funkci  $\Phi$  v podobě

$$-\frac{1}{\Phi} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} = m_l^2. \quad (3.221)$$

Dosadíme-li  $m_l^2$  za pravou stranu rovnice ( 3.220 ) a vydělíme celou rovnici funkcí  $\sin^2 \vartheta$ , dostáváme

$$\frac{1}{R} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) = \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{\partial \Theta}{\partial \vartheta} \right). \quad (3.222)$$

Opět jsme obdrželi rovnici, kde se na každé straně vyskytují jiné proměnné, takže se obě strany musí rovnat téže konstantě. Označme tentokrát tuto konstantu  $l(l+1)$ .

Zbývající 2 rovnice pro funkce  $\Theta$  a  $R$  tedy jsou

$$\begin{aligned} \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} - \frac{1}{\Theta \sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) &= l(l+1), \\ \frac{1}{R} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{2m_e r^2}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) &= l(l+1). \end{aligned} \quad (3.223)$$

Rovnice ( 3.221 ), ( 3.223 ) jednoduše upravíme do obvyklejšího tvaru

$$\begin{aligned} \frac{d^2\Phi}{d\varphi^2} + m_l^2 \Phi &= 0, \\ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{d}{d\vartheta} \left( \sin \vartheta \frac{d\Theta}{d\vartheta} \right) + \left[ l(l+1) - \frac{m_l^2}{\sin^2 \vartheta} \right] \Theta &= 0, \\ \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left( r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \left[ \frac{2m_e}{\hbar^2} \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + E \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R &= 0. \end{aligned} \quad (3.224)$$

První a druhá rovnice systému ( 3.224 ) jsou formálně shodné s rovnicemi ( 3.176 ) a ( 3.184 ) pro vlastní funkce  $\hat{l}_z$  a  $\hat{l}^2$ . Jejich řešení jsme již našli v předchozím odstavci. Zbývá tedy vyřešit třetí rovnici

( 3.224 ) pro radiální komponentu elektronové vlnové funkce atomu vodíku, která dle očekávání skrývá vlastní stavy třetího ze vzájemně komutujících operátorů – jejího hamiltoniánu.

Ten má pro jednoelektronové (tzv. vodíkpodobné) atomy tvar

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m_e} \Delta - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad ( 3.225 )$$

či ve sférických souřadnicích

$$\hat{H} = -\frac{\hbar}{2m_e} \left[ \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{\Delta_{\vartheta, \varphi}}{r^2} \right] - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}. \quad ( 3.226 )$$

Hledanou elektronovou vlnovou funkci  $\psi$  nyní můžeme vyjádřit jako součin již nalezeného řešení v podobě kulových funkcí – vlastních funkcí operátorů  $\hat{l}_z$  a  $\hat{l}^2$  – a dosud neznámého řešení pro radiální část vlnové funkce  $R$  :

$$\psi(r, \vartheta, \varphi) = R(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad ( 3.227 )$$

Použitím substituce

$$R(r) = \frac{u(r)}{r} \quad ( 3.228 )$$

se rovnice ( 3.226 ) upraví na jednodušší tvar (celou rovnici ( 3.226 ) jsme ještě vynásobili výrazem  $\frac{\hbar^2 r}{2m_e}$ )

$$-\frac{\hbar^2}{2m_e} \frac{d^2 u}{dr^2} + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2m_e r^2} u - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} u = Eu. \quad (3.229)$$

Abychom tuto rovnici dále zjednodušili, zavedeme nové bezrozměrné jednotky. Vzdálenost definujeme jako

$$\rho = \frac{r}{a_B}, \quad (3.230)$$

kde

$$a_B = \frac{4\pi\epsilon_0 \hbar^2}{m_e e^2} \quad (3.231)$$

je tzv. Bohrov poloměr.

Podobně definujeme energii pomocí bezrozměrné veličiny

$$\varepsilon = \frac{E}{Ry}, \quad (3.232)$$

kde jeden Rydberg je roven

$$Ry = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 (2a_B)} = \frac{m_e e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 \hbar^2}. \quad (3.233)$$

Jak se ukáže dále, Bohrov poloměr je vzdálenost od jádra, v níž je nejvyšší pravděpodobnost nalézt elektron v základním stavu atomu vodíku. Podobně je jeden Rydberg energií základního stavu atomu vodíku. Zavedené jednotky jsou proto z hlediska atomárního světa přirozené.



**Johannes Robert Rydberg (1854 – 1919)**

Při použití těchto proměnných se nám rovnice ( 3.229 ) dále zjednoduší na tvar

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \left( \varepsilon + \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) u = 0. \quad ( 3.234 )$$

Nejprve stanovíme asymptotické chování funkce  $u$  pro  $r \rightarrow \infty$ , tj.  $\rho \rightarrow \infty$ . V tomto případě přechází rovnice ( 3.234 ) na jednodušší rovnici

$$\frac{d^2u}{d\rho^2} + \varepsilon u = 0, \quad ( 3.235 )$$

jejíž řešením je funkce

$$u(\rho) = Ce^{-\alpha\rho}, \quad ( 3.236 )$$

kde  $C$  je konstanta a  $\alpha = \sqrt{-\varepsilon} = i\sqrt{\varepsilon}$ . Protože pro vázané stavy s energií  $E < 0$  je  $\varepsilon < 0$ , funkce  $u$  splňuje podmínku  $u \rightarrow 0$  pro  $\rho \rightarrow \infty$ . Řešení  $u$  na celém intervalu  $\rho \in (0; \infty)$  budeme hledat ve tvaru

$$u(\rho) = f(\rho)e^{-\alpha\rho}, \quad ( 3.237 )$$



kde  $f(\rho)$  je neznámá funkce. Dosazením tohoto předpokladu do rovnice ( 3.234 ) dostáváme diferenciální rovnici pro funkci  $f$ :

$$\frac{d^2 f}{d\rho^2} - 2\alpha \frac{df}{d\rho} + \left( \frac{2Z}{\rho} - \frac{l(l+1)}{\rho^2} \right) f = 0. \quad ( 3.238 )$$

To je ovšem rovnice formálně obdobná rovnici ( 3.194 ), takže i řešení provedeme obdobným způsobem.

Řešení budeme opět hledat ve tvaru mocninné řady

$$f(\rho) = \rho^\gamma \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^i, \quad ( 3.239 )$$

kde  $\gamma$  a  $a_i$  jsou dosud neurčené konstanty

V okolí singulárního bodu  $\rho \rightarrow 0$  můžeme vzít  $f$  ve tvaru

$$f(\rho) = a_0 \rho^\gamma. \quad ( 3.240 )$$

Po dosazení tohoto vztahu do rovnice ( 3.238 ) a zanedbání členů řádu vyššího než  $\rho^{\gamma-2}$  dostaneme

$$\gamma(\gamma-1) = l(l+1). \quad ( 3.241 )$$

Odtud vyplývá

$$\gamma = \begin{matrix} l+1 \\ -l \end{matrix}, \quad ( 3.242 )$$

druhý kořen však nevyhovuje, neboť pro něj při  $\rho \rightarrow 1$  funkce  $u$  diverguje. Máme tedy

$$f(\rho) = \rho^{l+1} \sum_{i=0}^{\infty} a_i \rho^i. \quad ( 3.243 )$$

Dosazením řady ( 3.243 ) do rovnice ( 3.238 ) dostaneme

$$\sum_{i=0}^{\infty} \rho^{i+l} \left\{ a_{i+1} \left[ (i+l+2)(i+l+1) - l(i+1) \right] + 2a_i \left[ Z - \alpha(i+l+1) \right] \right\} = 0$$

( 3.244 )

Požadavek platnosti této rovnice pro libovolná  $\rho$ , vede k rekurentnímu vztahu mezi koeficienty  $a_i$

$$a_{i+1} = \frac{2\alpha(i+l+1) - 2Z}{(i+l+2)(i+l+1) - l(l+1)} a_i .$$

( 3.245 )

Z požadavku aby radiální část vlnové funkce byla normovaná

$$\int_0^{\infty} |R(r)|^2 r^2 dr = 1,$$

( 3.246 )

kde  $r^2 dr$  je radiální část objemového elementu ve sférických souřadnicích, plyne, že musí jít radiální část vlnové funkce

$$R(\rho) = \frac{f(\rho) e^{-\alpha\rho}}{\rho}$$

( 3.247 )

pro  $\rho \rightarrow \infty$  k nule.

Pro veliká  $i$  se posloupnost ( 3.245 ) chová jako

$$a_{i+1} \approx \frac{2\alpha}{i} a_i ,$$

( 3.248 )

což vede na funkci

$$f = \rho^{l+1} e^{2\alpha\rho} .$$

( 3.249 )

Abychom však splnili požadavky kladené na vlnovou funkci  $R(\rho)$ , musíme předpokládat, že se řada ( 3.243 ) redukuje na polynom, tj. aby koeficienty  $a_i$  byly počínaje určitou hodnotou  $i$  již nulové. To znamená, že existuje  $i = n_r$ , pro něž je koeficient  $a_{i+1} = 0$ . Musí proto platit

$$2\alpha(n_r + l + 1) = 2Z, \quad n_r = 0, 1, 2, \dots \quad (3.250)$$

Namísto kvantovacího čísla  $n_r$  se zavádí tzv. **hlavní kvantové číslo**

$$n = n_r + l + 1, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.251)$$

Pro možné hodnoty energie pak dostáváme

$$\varepsilon = -\alpha^2 = -\frac{Z^2}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.252)$$

Vrátíme-li se k původním jednotkám, dostaneme kvantované hodnoty energie vázaných stacionárních stavů vodíku podobného atomu

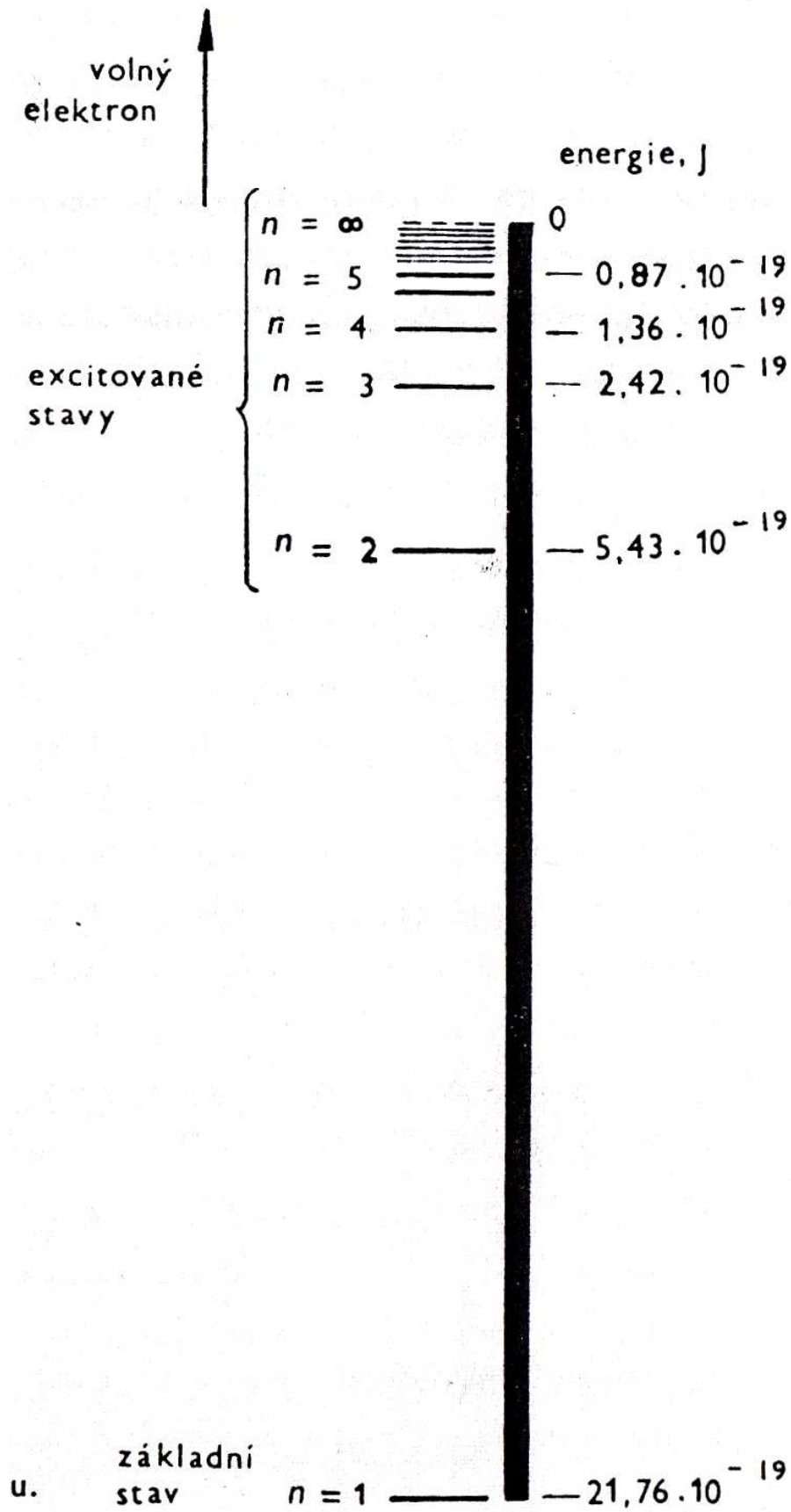
$$E_n = -\frac{1}{4\pi\varepsilon_0} \frac{Z^2 e^2}{2a_B} \frac{1}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (3.253)$$

Všimněme si, že z ( 3.251 ) okamžitě vyplývá pro možné hodnoty  $l$  již dříve nalezený vztah ( 3.208 ). Toto  $l$  nazýváme **orbitálním kvantovým číslem**. Třetí kvantové číslo určené vztahem ( 3.209 ) se nazývá **magnetickým kvantovým číslem**.

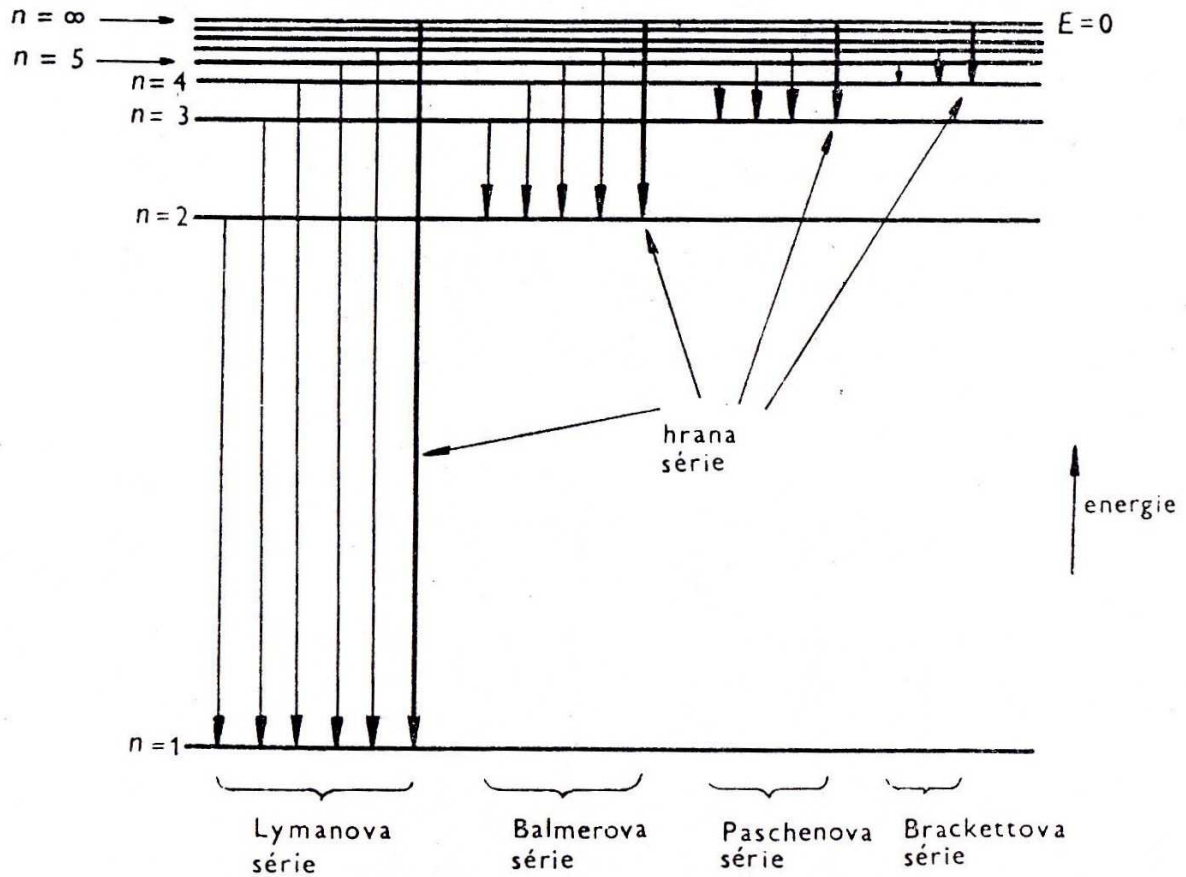
Pro každé  $l = 0, \dots, n - 1$  máme celkem  $2l + 1$  hodnot  $m = -l, \dots, l$ . Degenerace hladiny  $E_n$  je tudíž rovna

$$\sum_{l=0}^{n-1} (2l + 1) = n^2. \quad (3.254)$$

Obr. 3.8



Obr. 3.9



Použijeme-li kvantové číslo  $n$  a rovnici ( 3.250 ), můžeme přepsat rekurentní vztah ( 3.245 ) do tvaru

$$a_{i+1} = -\frac{2Z}{n} \frac{n-(i+l+1)}{(i+1)(2l+i+2)} a_i. \quad ( 3.255 )$$

Hodnota koeficientu  $a_0$  je dána normovací podmínkou ( 3.246 ). Po dosazení ( 3.255 ) do rovnice ( 3.243 ) dostaneme

$$f(\rho) = a_0 \rho^{l+1} \left[ 1 - \frac{n-l-1}{1!(2l+2)} \left( \frac{2Z\rho}{n} \right)^1 + \frac{(n-l-1)(n-l-2)}{2!(2l+2)(2l+3)} \left( \frac{2Z\rho}{n} \right)^2 + \dots \right. \\ \left. \dots + (-1)^{n-l-1} \frac{(n-l-1)(n-l-2)\dots 1}{(n-l-1)!(2l+2)(2l+3)\dots(n+l)} \left( \frac{2Z\rho}{n} \right)^{n-l-1} \right]. \quad ( 3.256 )$$

Normované radiální části vlnových funkcí lze zapsat ve tvaru

$$R_{nl}(\xi) = N_{nl} \xi^l L_{n+l}^{2l+1}(\xi) e^{-\frac{\xi}{2}} \quad (3.257)$$

kde

$$\xi = \frac{2Z\rho}{n} = \frac{2Zr}{na_B} \quad (3.258)$$

a

$$L_k^s(\xi) = \frac{d^s}{d\xi^s} L_k(\xi) \quad (3.259)$$

jsou tzv. *přidružené Laguerrovy polynomy* definované pomocí *obyčejných Laguerrových polynomů*

$$L_k(\xi) = e^\xi \frac{d^k}{d\xi^k} (\xi^k e^{-\xi}). \quad (3.260)$$



Edmond Nicolas Laguerre (1834 – 1886)

Normovací koeficient je roven

$$N_{lm} = \left\{ \left( \frac{2Z}{na_B} \right)^3 \frac{(n-l-1)!}{2n[(n+l)!]^3} \right\}^{\frac{1}{2}}. \quad (3.261)$$

Nalezli jsme tedy konečný tvar celkové vlnové funkce vázaných stavů vodíkového atomu.

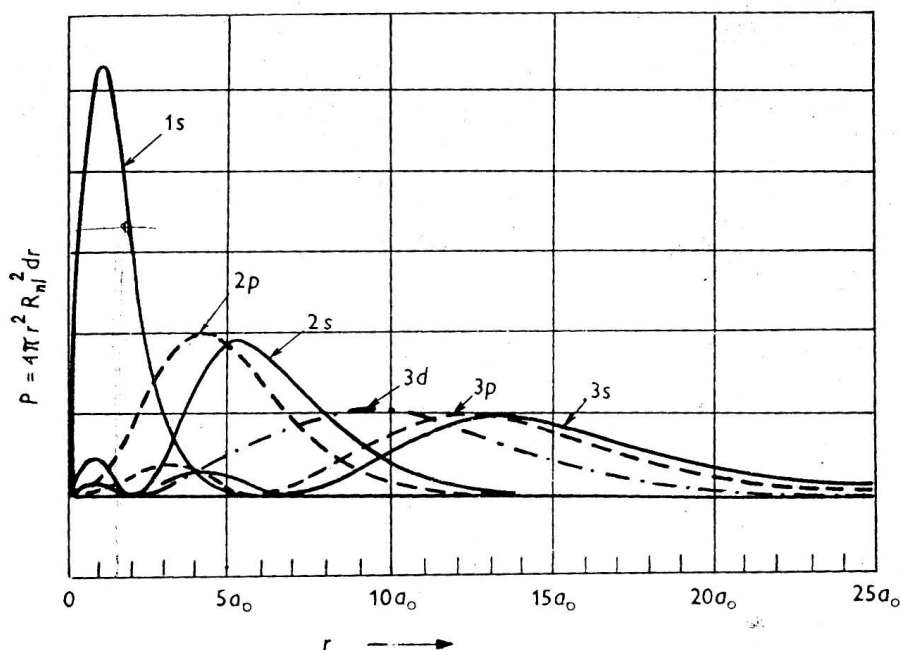
$$\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi) = R_{nl}(r) Y_{lm}(\vartheta, \varphi). \quad (3.262)$$

Historicky byly označovány kvantové stavy velikosti momentu hybnosti elektronu v obalu vodíkového atomu písmeny s, p, d, f podle následující tabulky

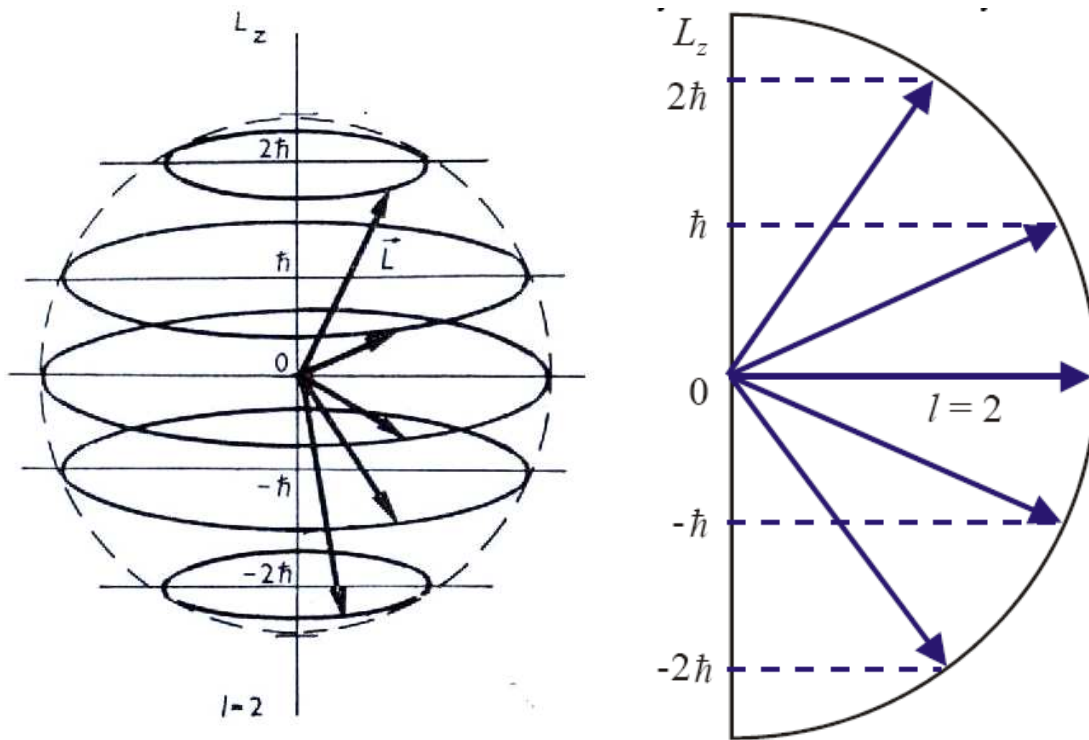
Tab. 3.1

Stav	$l$	$m$	$n$
s	0	0	1
p	1	-1,0,1	2
d	2	-2,-1,0,1,2	3
f	3	-3,-2,-1,0,1,2,3	4

Obr. 3.10



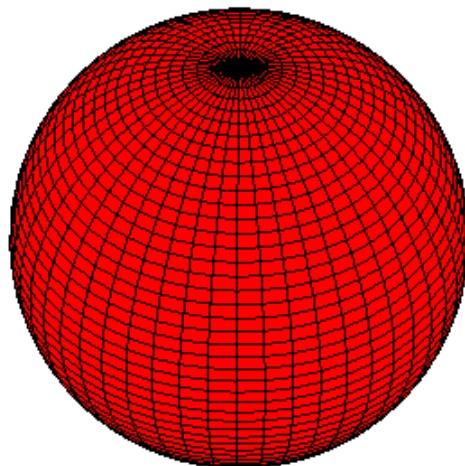
Obr. 3.11



Obr. 3.12

## Orbital s

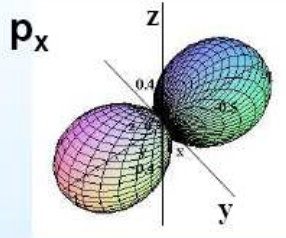
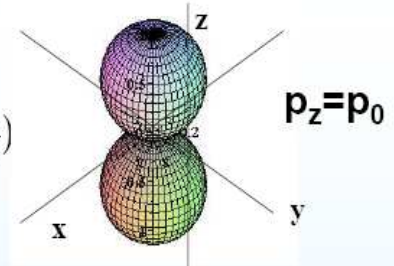
$$Y(s) = \frac{1}{2\sqrt{\pi}}$$





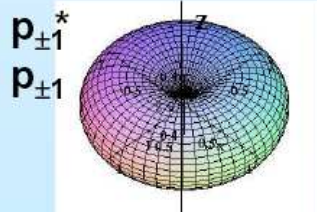
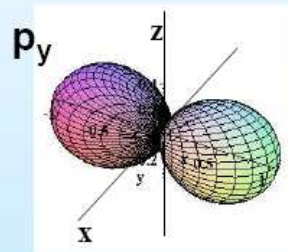
## Orbitaly p

$$Y(p_z) = Y(p_0) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \cos \theta = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{z}{r}\right)$$



$$Y(p_x) = \frac{Y(p_1) + Y(p_{-1})}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cos \varphi = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{x}{r}\right)$$

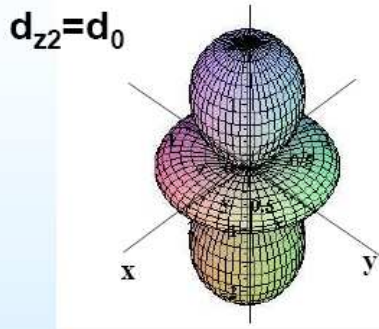
$$Y(p_y) = -i \frac{Y(p_1) - Y(p_{-1})}{\sqrt{2}} = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \sin \varphi = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \left(\frac{y}{r}\right)$$



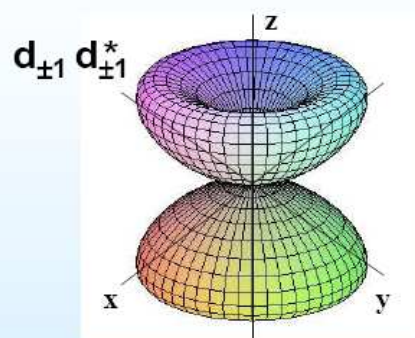
$$Y(p_{\pm 1}) = \frac{\sqrt{3}}{2\sqrt{\pi}} \sin \theta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

## Orbitaly d

$$Y(d_0) = \frac{\sqrt{5}}{4\sqrt{\pi}} (3 \cos^2 \theta - 1)$$

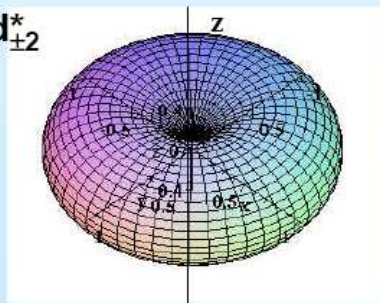


$$Y(d_{\pm 1}) = \frac{\sqrt{30}}{16\sqrt{\pi}} \sin 2\theta \cdot e^{\pm i\varphi}$$

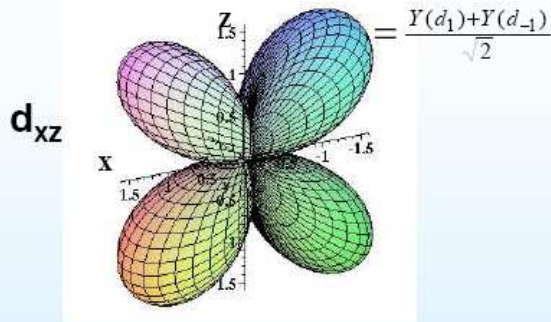


$$Y(d_{\pm 2}) = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \cdot e^{\pm i2\varphi}$$

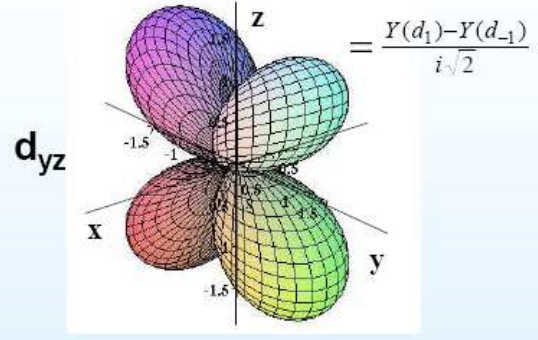
$d_{\pm 2} \ d_{\pm 2}^*$



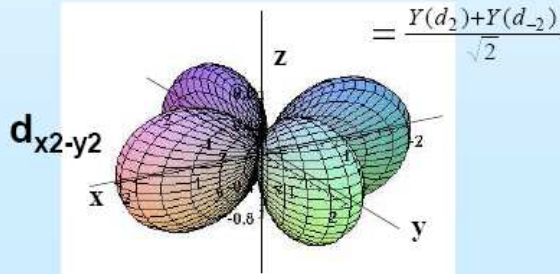
$$Y(d_{xz}) = \frac{\sqrt{30}}{16\sqrt{\pi}} \sin 2\theta \cos \varphi = \frac{\sqrt{30}}{8\sqrt{\pi}} \left( \frac{xz}{r^2} \right)$$



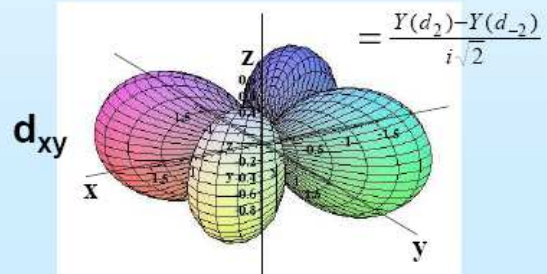
$$Y(d_{yz}) = \frac{\sqrt{30}}{16\sqrt{\pi}} \sin 2\theta \sin \varphi = \frac{\sqrt{30}}{8\sqrt{\pi}} \left( \frac{yz}{r^2} \right)$$



$$Y(d_{x^2-y^2}) = \frac{\sqrt{15}}{8\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \cdot \cos 2\varphi = \frac{\sqrt{15}}{4\sqrt{\pi}} \left( \frac{x^2-y^2}{r^2} \right)$$

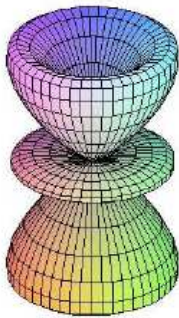


$$Y(d_{xy}) = \frac{\sqrt{15}}{8\sqrt{\pi}} \sin^2 \theta \cdot \sin 2\varphi = \frac{\sqrt{15}}{2\sqrt{\pi}} \left( \frac{xy}{r^2} \right)$$



## Orbitaly f

$$f_{\pm 1} f_{\pm 1}^*$$



$$f_{z^3} = f_0$$

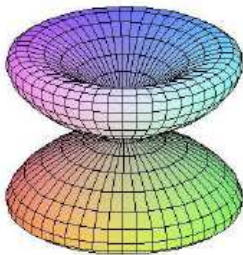


$$Y_{3,0} = 5 \cos^2 \theta - 3 \cos \theta = z(5z^2 - 3r^2)$$

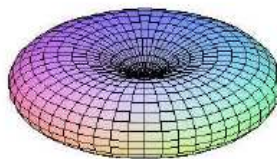
$$Y_{3,\pm 1} = \mp \sin \theta (5 \cos^2 \theta - 1) \cdot e^{\pm i\varphi} = \frac{(x \mp iy)(5z^2 - 3r^2)}{r^3}$$

$$Y_{3,\pm 2} = \sin^2 \theta \cos \theta \cdot e^{\pm 2i\varphi} = \frac{z(x \pm iy)^2}{r^3}$$

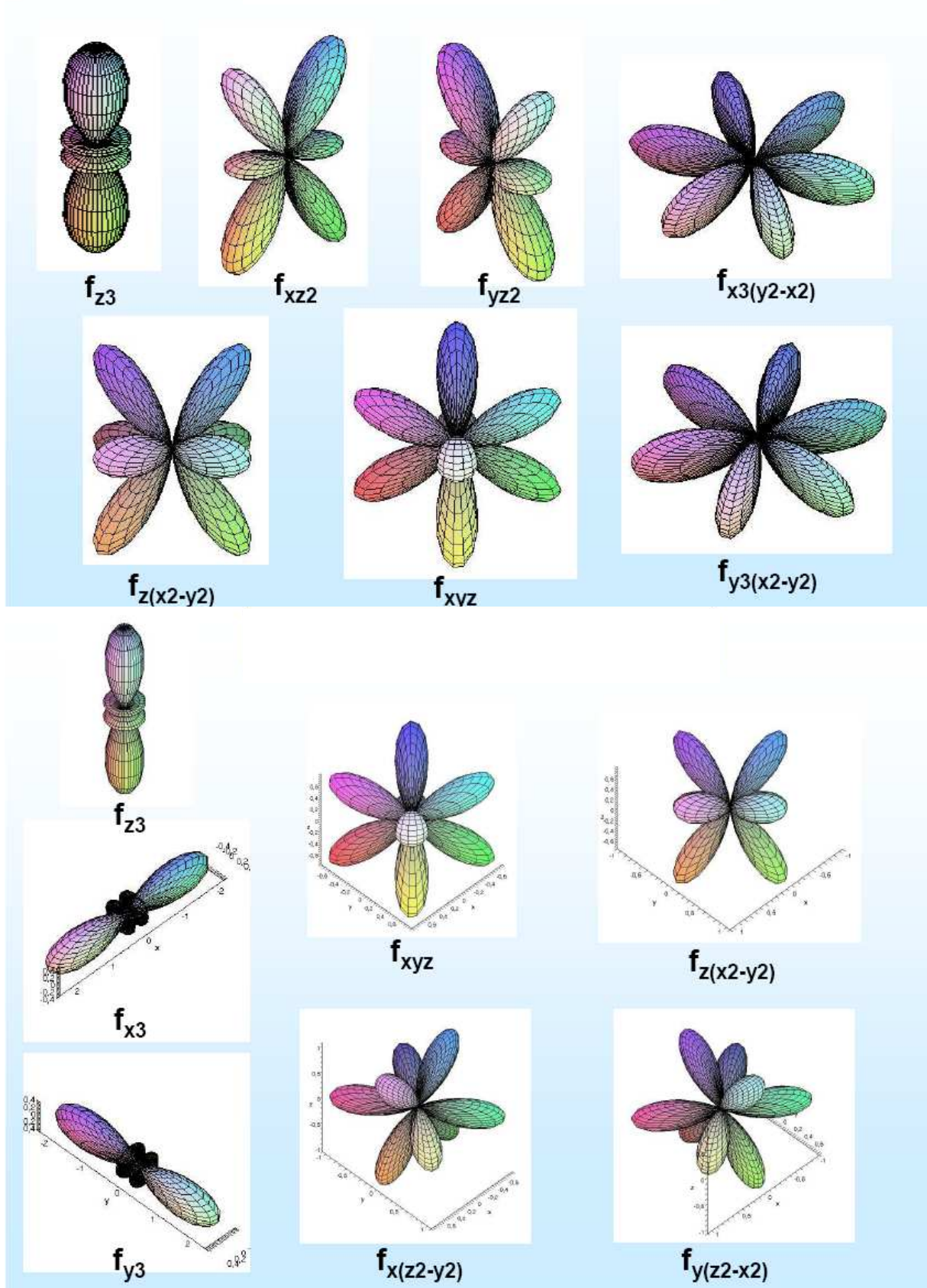
$$f_{\pm 2} f_{\pm 2}^*$$



$$f_{\pm 3} f_{\pm 3}^*$$



$$Y_{3,\pm 3} = \mp \sin^3 \theta \cos \theta \cdot e^{\pm 3i\varphi} = \mp \frac{(x \pm iy)^3}{r^3}$$



## Magnetický moment

Při pohybu elektronu v okolí jádra atomu vzniká podle klasické elektrodynamiky proudová smyčka a lze proto očekávat vznik odpovídajícího magnetického momentu. Pohybuje-li se elektron s nábojem  $q = -e$  v elektromagnetickém poli s vektorovým potenciálem  $\mathbf{A}$ , platí

$$(\hat{\mathbf{p}} + e\mathbf{A})^2 = -\hbar^2\Delta - 2ie\hbar\mathbf{A}\nabla - ie\hbar \operatorname{div} \mathbf{A} + e^2\mathbf{A}^2. \quad (3.263)$$

Pro konstantní magnetické pole  $\mathbf{B} = \operatorname{rot} \mathbf{A}$  mířící podél osy  $z$  můžeme vzít vektorový potenciál ve tvaru

$$\mathbf{A} = \frac{B}{2}(-y, x, 0). \quad (3.264)$$

Vynecháme-li pro slabá magnetická pole člen  $\mathbf{A}^2$  a uvědomíme-li si, že  $\operatorname{div} \mathbf{A} = 0$ , dostaneme hamoltonián pro vodíku podobný atom v uvažovaném magnetickém poli ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} - \frac{ie\hbar B}{2m_e}\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right) = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2m_e}\Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0}\frac{Ze^2}{r} + \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z. \end{aligned} \quad (3.265)$$

Dodatečnou potenciální energii odpovídající magnetickému poli můžeme vyjádřit ve tvaru součinu vektoru magnetické indukce s tzv. **operátorem magnetického momentu elektronu**:

$$-\mathbf{B}\hat{\boldsymbol{\mu}}^L = -B\hat{M}_z = \frac{eB}{2m_e}\hat{L}_z, \quad (3.266)$$

odkud

$$\hat{\mu}_z^L = -\frac{e}{2m_e} \hat{L}_z, \quad (3.267)$$

či obecněji

$$\hat{\mu}^L = -\frac{e}{2m_e} \hat{L}. \quad (3.268)$$

Pro stacionární stavy popsané funkcemi  $\psi_{nlm}$ , pro které je

$$\begin{aligned} \hat{L}_z \psi_{nlm} &= \hbar m_l \psi_{nlm} \\ \hat{L} \psi_{nlm} &= \hbar \sqrt{l(l+1)} \psi_{nlm} \end{aligned} \quad (3.269)$$

nabývá magnetický moment hodnot

$$\begin{aligned} \hat{\mu}_z^L &= -\frac{\hbar e}{2m_e} m_l = -\mu_B m_l, \\ \hat{\mu}^L &= -\frac{\hbar e}{2m_e} \sqrt{l(l+1)} = -\mu_B \sqrt{l(l+1)} \end{aligned} \quad (3.270)$$

ke  $\mu_B = \frac{\hbar e}{2m_e}$  je tzv. **Bohrův magneton**.

Dodatečná energie atomu vodíkového typu ve stavu popsaném funkcí  $\psi_{nlm}$  tedy závisí na magnetickém kvantovém čísle  $m_l$  jako

$$E_m = \mu_B m_l B, \quad m_l = -l, \dots, l. \quad (3.271)$$

Původní spektrální čára odpovídající přechodu mezi dvěma energetickými hladinami  $E_n$  se nám tak v magnetickém poli štěpí na 3 hladiny, což nazýváme **normální Zeemanův jev**.

## Spin

Existence vlastního vnitřního momentu hybnosti částic zvaného *spin* vyplynula v roce 1928 z Diracovy relativistické kvantové rovnice ( 8.99 ). Vztahy ( 3.146 ), ( 3.147 ) však naznačují, že i nerelativistická teorie impulsmomentu v sobě obsahuje prostor pro realizaci impulsmomentu v ještě jiné podobě, než jaká odpovídá orbitálnímu momentu částice daného pohybem celé částice v coulombickém poli jádra. Tomuto vlastnímu momentu hybnosti přísluší i vlastní magnetický moment  $\mu$  nabité částice. K popisu spinového momentu hybnosti se užívá spinové kvantové číslo  $s$ . To má u každé částice pevně danou hodnotu. U elektronu je to kupř.  $s = 1/2$ . Velikost  $S$  momentu hybnosti daného spinem pak souvisí se spinovým kvantovým číslem  $s$  vztahem

$$S = \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad ( 3.272 )$$

U elektronu nám kupř. vychází  $S = \hbar \sqrt{\frac{3}{4}}$ .

Prostorové kvantování spinu se popisuje spinovým magnetickým kvantovým číslem  $m_s$ .

Magnetické kvantové číslo udává směr vektoru  $\mathbf{S}$  tím, že určuje jeho složku ve směru vnějšího magnetického pole. Položíme-li směr vnějšího pole rovnoběžný s osou  $z$ , je složka spinu  $\mathbf{S}$  v tomto směru

$$S_z = m_s \hbar. \quad ( 3.273 )$$

Možné hodnoty  $m_s$  pro danou hodnotu  $s$  jsou

$$m_s = -s, -s+1, \dots, s-1, s. \quad ( 3.274 )$$

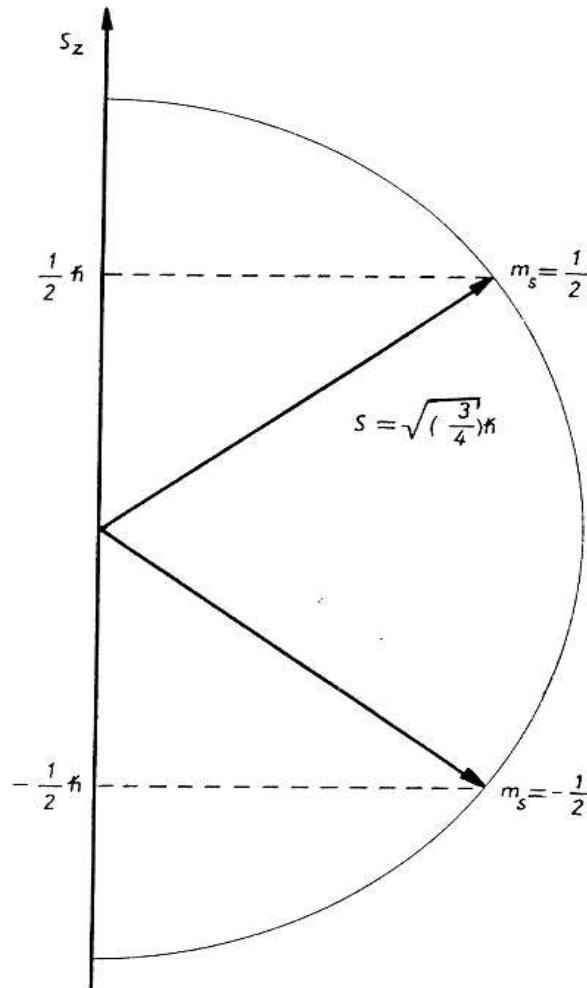
Takže počet možných orientací vektoru spinového momentu hybnosti je  $2s + 1$ .

Projekce spinu  $S_z$  částice se spinem  $s = 0$  tak nabývá jediné hodnoty  $S_z = 0$ . Tvoří tak skalární veličinu a proto o částicích se spinem 0 hovoříme jako o **skalárních** částicích a o polích s těmito částicemi spojených jako o skalárních polích.

Projekce spinu částice se spinem  $s = 1$  může nabývat 3 různých hodnot  $S_z = (-1, 0, 1)$ , které dohromady tvoří vektor. Proto o těchto částicích, jakož i polích s nimi spojených, hovoříme jako o částicích a polích **vektorových**.

Konečně projekce spinu částic s poločíselným spinem tvoří dohromady spinor (viz obr. 3.13 )

Obr. 3.13



V souvislosti s nimi pak hovoříme o **spinorových** částicích a polích. Magnetický moment charakterizující spin elektronu souvisí s jeho spinovým momentem hybnosti  $\hat{\mathbf{S}}$  vztahem

$$\hat{\boldsymbol{\mu}}^S = -\frac{e}{m_e} \hat{\mathbf{S}} = -2\mu_B \hat{\mathbf{S}} = \gamma \hat{\mathbf{S}}. \quad (3.275)$$

kde  $\gamma = -\frac{e}{m_e}$  je tzv. **gyromagnetický poměr**.

Možné hodnoty složky vektoru  $\mu_s$  podél libovolné osy, např. osy z, jsou tudíž omezeny na

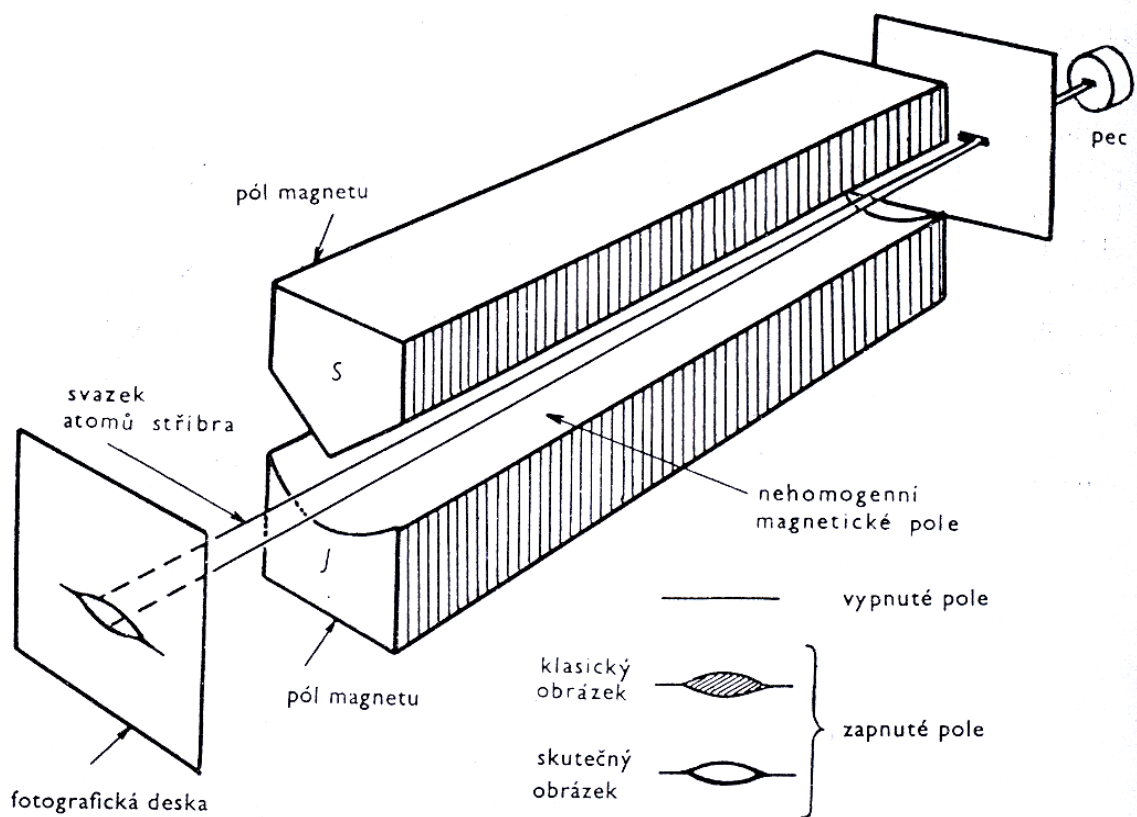
$$\hat{\mu}_z^S = \gamma \hbar m_s, \quad (3.276)$$

a pro celkový magnetický moment máme

$$\hat{\mu}^S = 2\mu_B \sqrt{s(s+1)} = \gamma \hbar \sqrt{s(s+1)}. \quad (3.277)$$

Prostorové kvantování poprvé přímo demonstrovali O. Stern a W. Gerlach v roce 1921 v experimentu znázorněném na následujícím obrázku:

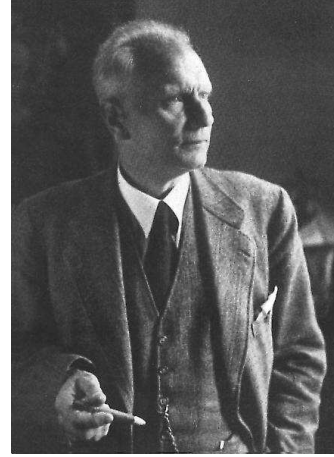
Obr. 3.14







Otto Stern (1888 - 1969)



Walter Gerlach (1889 - 1979)

Pouštěli svazek elektronů do nehomogenního magnetického pole, průřez svazku po průchodu polem zaznamenávala fotografická deska. Stern a Gerlach zjistili, že se počáteční svazek štěpí na dvě odlišné části, odpovídající dvěma odlišným orientacím spinu elektronu v magnetickém poli.

Spočtíme nyní vlastní funkce operátoru  $z$ -ové komponenty spinu

$$S_z \equiv \frac{\hbar}{2} \hat{\sigma}_z, \text{ odpovídající vlastním hodnotám } \pm \frac{\hbar}{2}:$$

$$\frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix} = \pm \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} s_1 \\ s_2 \end{pmatrix}. \quad (3.278)$$

Ihned vidíme, že hledanými vlastními vektory jsou stavy

$$\left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\uparrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \equiv |\downarrow\rangle \equiv \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad (3.279)$$

Kde první index v ketvektorech přísluší celkovému spinu  $\mathbf{S}$ , druhý pak jeho  $z$ -ové komponentě  $\mathbf{S}_z$ .

Pokud Hamiltonián obsahuje operátor spinu, píšeme vlnovou funkci ve tvaru obecné dvousložkové vlnové funkce

$$\psi = \begin{pmatrix} \psi_{\uparrow} \\ \psi_{\downarrow} \end{pmatrix}. \quad (3.280)$$

Hustota pravděpodobnosti nalezení částice v libovolném ze dvou spinových stavů je rovna

$$\langle \psi | \psi \rangle = |\psi_{\uparrow}|^2 + |\psi_{\downarrow}|^2. \quad (3.281)$$

Zavedeme nyní tzv. *spinovou funkci* předpisem

$$\eta(\zeta) = \begin{pmatrix} a \\ b \end{pmatrix} = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = a |\uparrow\rangle + b |\downarrow\rangle, \quad (3.282)$$

kde proměnná  $\zeta$  nabývá hodnot  $\pm \frac{1}{2}$ .

Spinové funkce tvoří zřejmě dvoudimenzionální vektorový prostor s bází  $\{|\uparrow\rangle; |\downarrow\rangle\}$ .

Vezmeme-li v úvahu (3.275), můžeme pro pohyb elektronu v konstantním magnetickém poli  $\mathbf{B}$  a skalárním potenciálu  $\varphi$  sestavit tzv. *Pauliho rovnici*:

$$i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} = \left[ \frac{(-i\hbar \nabla + e\mathbf{A})^2}{2m_e} - e\varphi + \frac{e}{m_e} \hat{\mathbf{S}}\mathbf{B} \right] \psi, \quad (3.283)$$

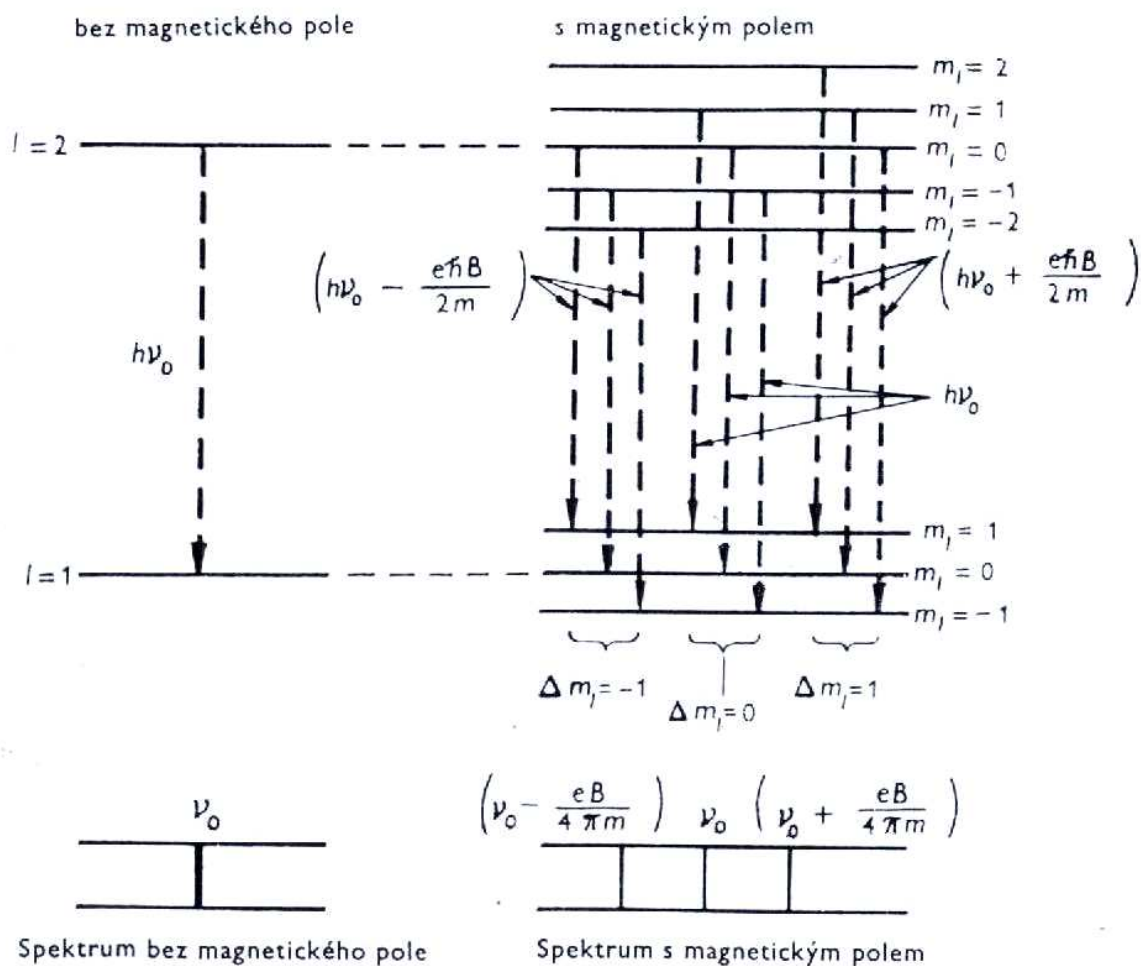
kde  $\psi$  je definována vztahem (3.280). Podle této rovnice závisí energie atomu vodíkového typu v magnetickém poli jak na jeho orbitálním momentu hybnosti, tak i na jeho spinu. To snadno pochopíme, přepíšeme-li vztah (3.271) kde namísto magnetického kvantového čísla dosadíme spinové magnetické číslo

$$E_s = 2\mu_B m_s B = -\gamma \hbar m_s B, \quad (3.284)$$

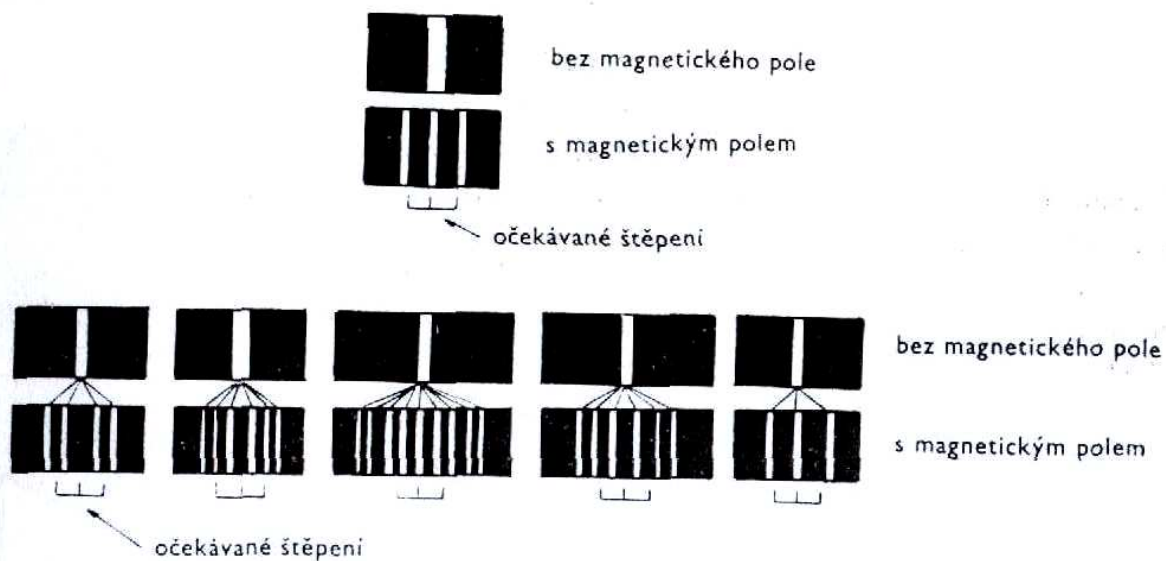
Specielně pro částice se spinem  $\frac{1}{2}$ , kde  $m_s = -\frac{1}{2}, \frac{1}{2}$ , tak platí

$$E_s = \pm \mu_B B.$$

Obr. 3.15



Obr. 3.16





Pieter Zeeman (1846 – 1943)

V případě působení malé poruchy na Zeemanův multiplet (může se jednat např. o poruchu ve formě časově proměnného pole) lze indukovat energetický přechod mezi sousedními hladinami multipletu. To je logicky spojeno s absorpcí či emisí kvanta

$$\Delta E = \hbar \omega_L = |\gamma| \hbar B, \quad (3.285)$$

kde

$$\omega_L = |\gamma| B \quad (3.286)$$

je tzv. *Larmorova frekvence* udávající zjevně podmínku pro frekvenci poruchy nutnou k tomu, aby porucha mohla indukovat přechody mezi sousedními hladinami Zeemanova multipletu.



Sir Joseph Larmor (1857 – 1942)

Obecným řešením je v tomto případě vlnová funkce

$$\chi(t) = a \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} e^{-i\omega_L t} + b \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} e^{i\omega_L t}, \quad (3.287)$$

kde  $a = \cos \frac{\vartheta}{2}$ ,  $b = \sin \frac{\vartheta}{2}$ , přičemž  $\vartheta$  je úhel sklopení magnetického momentu vzhledem k ose  $z$ , vyvolaný působením poruchy. Platí tedy

$$|a|^2 + |b|^2 = 1. \quad (3.288)$$

Pro vlnovou funkci odtud dostáváme

$$\chi(t) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix}. \quad (3.289)$$

Střední hodnoty projekce operátorů spinu do jednotlivých os pak budou

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_x \rangle &= \langle \chi | \hat{\sigma}_x | \chi \rangle = \left( \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} \left( \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \begin{pmatrix} \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \\ \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\ &= \frac{\hbar}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} (e^{2i\omega_L t} + e^{-2i\omega_L t}) = \frac{\hbar}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} 2 \cos(2\omega_L t) = \\ &= \frac{\hbar}{2} \sin \vartheta \cos(2\omega_L t), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{S}_y \rangle &= \langle \chi | \hat{\sigma}_y | \chi \rangle = \left( \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= \frac{\hbar}{2} \left( \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \begin{pmatrix} -i \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \\ i \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= i \frac{\hbar}{2} \cos \frac{\vartheta}{2} \sin \frac{\vartheta}{2} (e^{-2i\omega_L t} - e^{2i\omega_L t}) = \frac{\hbar}{2} \sin \vartheta \sin(2\omega_L t),
\end{aligned} \tag{3.291}$$

$$\begin{aligned}
\langle \hat{S}_z \rangle &= \langle \chi | \hat{\sigma}_z | \chi \rangle = \left( \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \frac{\hbar}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ \sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= \frac{\hbar}{2} \left( \cos \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t}, \sin \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \right) \begin{pmatrix} \cos \frac{\vartheta}{2} e^{-i\omega_L t} \\ -\sin \frac{\vartheta}{2} e^{i\omega_L t} \end{pmatrix} = \\
&= \frac{\hbar}{2} \cos^2 \frac{\vartheta}{2} - \sin^2 \frac{\vartheta}{2} = \frac{\hbar}{2} \cos \vartheta.
\end{aligned} \tag{3.292}$$

Předpokládejme nyní, že na gyromagnetickou částici působí kromě statického magnetického pole  $\mathbf{B}_0$  orientovaného ve směru osy  $z$ , ještě i časově proměnné pole  $\mathbf{B}_1$  konstantní amplitudy  $B_1$ , jehož vektor rotuje konstantní úhlovou frekvencí  $\omega$  v rovině  $x, y$ . Celkový vektor magnetické indukce pak bude

$$\mathbf{B} = (B_1 \cos \omega t, -B_1 \sin \omega t, B_0). \tag{3.293}$$

Celkový hamiltonián částice lze pak vyjádřit ve tvaru součtu

$$\hat{H} = -\gamma \mathbf{S} \mathbf{B} = -\frac{\hbar}{2} \gamma \hat{\mathbf{g}} \mathbf{B} = \hat{H}_0 + \hat{H}_1(t), \quad (3.294)$$

kde první člen je dán výrazem ( 3.284 ), druhý člen, popisující působení pole  $\mathbf{B}_1$  je tvaru

$$\begin{aligned} \hat{H}_1(t) &= -\hat{\boldsymbol{\mu}}^S \mathbf{B}_1 = -\gamma \hbar B_1 (\hat{S}_x \cos \omega t + \hat{S}_y \sin \omega t) = \\ &= -\frac{B_1 \gamma \hbar}{2} (\hat{S}_- e^{i\omega t} + \hat{S}_+ e^{-i\omega t}) = -\frac{B_1 \gamma \hbar^2}{2} \left[ e^{i\omega t} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + e^{-i\omega t} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \right] = \\ &= -\frac{B_1 \gamma \hbar^2}{2} \begin{pmatrix} 0 & e^{-i\omega t} \\ e^{i\omega t} & 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (3.295)$$

Dle nestacionární poruchové teorie (viz kapitola 4) je pravděpodobnost přechodu mezi stavy, charakterizovanými kvantovými čísly  $m'_s$  a  $m_s$  úměrná čtverci maticového elementu poruchy

$$P_{m'_s, m_s} \sim \left| \langle m'_s | \hat{H}_1 | m_s \rangle \right|^2. \quad (3.296)$$

Díky tvaru hamiltoniánu ( 3.295 ) je zřejmé, že nenulové budou pouze maticové elementy, pro něž bude  $m'_s = m_s \pm 1$ . Magnetické pole  $\mathbf{B}_1$  je tedy schopné indukovat energetické přechody pouze mezi sousedními hladinami Zeemanova multipletu. Při přechodu na hladinu s vyšší energií bude soustava energii absorbovat, při přechodu na hladinu s nižší energií bude energie emitována. Díky tomu, že maticové elementy ( 3.296 ) jsou symetrické, mají přechody v obou směrech stejnou pravděpodobnost.

Schrödingerovu rovnici pro gyromagnetickou částici v poli s hamiltoniánem ( 3.294 ) zapíšeme ve tvaru

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} &= -\frac{\hbar}{2} \gamma \hat{\mathbf{G}} \mathbf{B} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \\
&= -\frac{\hbar}{2} \gamma \left( \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right) \begin{pmatrix} B_1 \cos \omega t \\ -B_1 \sin \omega t \\ B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \\
&= -\frac{\hbar}{2} \gamma \left[ \begin{pmatrix} 0 & B_1 \cos \omega t \\ B_1 \cos \omega t & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & iB_1 \sin \omega t \\ -iB_1 \sin \omega t & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} B_0 & 0 \\ 0 & -B_0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix} = \\
&= -\frac{\hbar}{2} \gamma \begin{pmatrix} B_0 & B_1 (\cos \omega t + i \sin \omega t) \\ B_1 (\cos \omega t - i \sin \omega t) & B_0 \end{pmatrix} = \frac{\hbar}{2} \gamma \begin{pmatrix} B_0 & B_1 e^{i\omega t} \\ B_1 e^{-i\omega t} & B_0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \chi_1 \\ \chi_2 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{3.297}$$

To je však systém diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned}
i \frac{d\chi_1}{dt} &= -\frac{\gamma}{2} (B_0 \chi_1 + B_1 e^{i\omega t} \chi_2), \\
i \frac{d\chi_2}{dt} &= -\frac{\gamma}{2} (B_1 e^{-i\omega t} \chi_1 - B_0 \chi_2).
\end{aligned} \tag{3.298}$$

Řešení předpokládejme ve tvaru

$$\begin{aligned}
\chi_1(t) &= A_1 e^{i\lambda_1 t}, \\
\chi_2(t) &= A_2 e^{i\lambda_2 t},
\end{aligned} \tag{3.299}$$

tedy

$$\begin{aligned}
-A_1 \lambda_1 e^{i\lambda_1 t} &= -\omega_0 A_1 e^{i\lambda_1 t} - \omega_1 e^{i\omega t} A_2 e^{i\lambda_2 t}, \\
-A_2 \lambda_2 e^{i\lambda_2 t} &= \omega_0 A_2 e^{i\lambda_2 t} - \omega_1 e^{-i\omega t} A_1 e^{i\lambda_1 t}.
\end{aligned} \tag{3.300}$$

kde jsme označili

$$\begin{aligned}
\omega_0 &\equiv \frac{\gamma B_0}{2}, \\
\omega_1 &\equiv \frac{\gamma B_1}{2}.
\end{aligned} \tag{3.301}$$



První rovnici ( 3.300 ) vynásobíme faktorem  $e^{-i\lambda_1 t}$ , druhou faktorem  $e^{-i\lambda_2 t}$ . Po úpravě dostáváme

$$\begin{aligned} A_1 e^0 (\omega_0 - \lambda_1) &= -\omega_1 A_2 e^{it(\lambda_2 - \lambda_1 + \omega)}, \\ A_2 e^0 (\omega_0 + \lambda_2) &= \omega_1 A_1 e^{it(\lambda_1 - \lambda_2 - \omega)}. \end{aligned} \quad ( 3.302 )$$

Položíme-li

$$\left. \begin{aligned} \lambda_2 - \lambda_1 + \omega &= 0 \\ \lambda_1 - \lambda_2 - \omega &= 0 \end{aligned} \right\} \Rightarrow \lambda_2 = \lambda_1 - \omega, \quad ( 3.303 )$$

redukuje se soustava ( 3.302 ) na systém homogenních rovnic

$$\begin{aligned} (\omega_0 - \lambda_1) A_1 + \omega_1 A_2 &= 0, \\ \omega_1 A_1 - (\omega_0 + \lambda_1 - \omega) A_2 &= 0, \end{aligned} \quad ( 3.304 )$$

který má řešení pro

$$\begin{vmatrix} \omega_0 - \lambda_1 & \omega_1 \\ \omega_1 & \omega_0 + \lambda_1 - \omega \end{vmatrix} = 0, \quad ( 3.305 )$$

neboli

$$(\omega_0 - \lambda_1)(\omega - \lambda_1 - \omega_0) - \omega_1^2 = 0. \quad ( 3.306 )$$

To vede na kvadratickou rovnici

$$\lambda_1^2 - \omega \lambda_1 - \omega_0^2 + \omega \omega_0 - \omega_1^2 = 0 \quad ( 3.307 )$$

s řešením

$$\lambda_1^\pm = \frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2} - \omega_0\right)^2 + \omega_1^2}, \quad (3.308)$$

$$\lambda_2^\pm = -\frac{\omega}{2} \pm \sqrt{\left(\frac{\omega}{2} - \omega_0\right)^2 + \omega_1^2}.$$

Zpětným dosazením do ( 3.299 ) dostáváme

$$\chi_1(t) = A_1^+ e^{i\lambda_1^+ t} + A_1^- e^{i\lambda_1^- t}, \quad (3.309)$$

$$\chi_2(t) = A_2^+ e^{i\lambda_2^+ t} + A_2^- e^{i\lambda_2^- t}.$$

Zřejmě platí

$$A_2^+ = -A_2^- = A, \quad (3.309)$$

Položíme-li

$$\Omega \equiv \sqrt{\left(\frac{\omega}{2} - \omega_0\right)^2 + \omega_1^2}, \quad (3.310)$$

můžeme psát

$$\chi_2(t) = A e^{\frac{i\omega t}{2}} \left( e^{i\Omega t} - e^{-i\Omega t} \right) = 2iA e^{\frac{i\omega t}{2}} \sin(\Omega t). \quad (3.311)$$

Pro derivaci  $\chi_2(t)$  odtud máme

$$\begin{aligned} \frac{d\chi_2(t)}{dt} &= 2iA e^{\frac{i\omega t}{2}} \left( \Omega \cos \Omega t - \frac{i\omega t}{2} \sin \Omega t \right) = \\ &= i \frac{\gamma}{2} \left( B_1 e^{-i\omega t} \chi_1 - B_0 2iA e^{\frac{i\omega t}{2}} \sin(\Omega t) \right). \end{aligned} \quad (3.312)$$

Položíme-li  $t = 0$ , platí

$$\frac{d\chi_2(0)}{dt} = 2iA\Omega = i\frac{\gamma}{2}B_1\chi_1(0), \quad (3.313)$$

neboli

$$2A\Omega = \frac{\gamma}{2}B_1\chi_1(0) = \omega_1\chi_1(0) \quad (3.314)$$

odkud

$$|A|^2 = \frac{\omega_1^2 \chi_1(0)}{2 \left[ \left( \frac{\omega}{2} - \omega_0 \right)^2 + \omega_1^2 \right]}. \quad (3.315)$$

Okamžitě vidíme, že rezonance nastává pro  $\omega = 2\omega_0 = \omega_L$ .

Z hlediska velikosti spinu dělíme částice na tzv. *fermiony* a *bosony*. Zatímco bosony mají spin vždy celočíselný, fermiony mají spin poločíselný. Rozdílnost spinu u bosonů a fermionů je příčinou jejich zcela odlišného fyzikálního chování. Žádné jiné rodiny částic se od sebe neliší tolik, jako právě tyto 2 rodiny. Odlišnost spinu způsobuje, že pro fermiony platí tzv. *Pauliho vylučovací princip*, zatímco pro bosony nikoli.

### Pauliho princip

Předpokládejme 2 identické částice, z nichž jedna se nalézá v kvantovém stavu  $a$ , a druhá ve stavu  $b$ . Protože jsou obě dvě částice identické, neměla by se hustota pravděpodobnosti  $|\psi|^2$  tohoto systému nijak změnit při vzájemné záměně částic, tj. když částice ve stavu  $a$  nahradí částici ve stavu  $b$  a naopak. V symbolickém zápisu tedy požadujeme

$$|\psi(1,2)|^2 = |\psi(2,1)|^2. \quad (3.316)$$

Vlnová funkce reprezentující částice po záměně může být tedy buď symetrická

$$\psi(1,2) = \psi(2,1), \quad (3.317)$$

nebo antisymetrická

$$\psi(1,2) = -\psi(2,1) \quad (3.318)$$

je-li částice 1 ve stavu  $a$  a částice 2 ve stavu  $b$  je vlnová funkce tohoto systému

$$\psi_1 = \psi_a(1)\psi_b(2), \quad (3.319)$$

a je-li částice 2 ve stavu  $a$  a částice 1 ve stavu  $b$ , je vlnová funkce

$$\psi_2 = \psi_a(2)\psi_b(1). \quad (3.320)$$

Protože jsou obě částice ve skutečnosti nerozlišitelné, nemůžeme se nijak dozvědět, zda v daném okamžiku popisuje systém  $\psi_1$  nebo  $\psi_2$ . Pravděpodobnost obou dvou možností je stejná. Vhodným popisem systému je tedy superpozice (lineární kombinace) obou dvou funkcí, přičemž existují dvě takovéto možné kombinace:  
Symetrická

$$\psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) + \psi_a(2)\psi_b(1)], \quad (3.321)$$

antisymetrická

$$\psi_A = \frac{1}{\sqrt{2}} [\psi_a(1)\psi_b(2) - \psi_a(2)\psi_b(1)]. \quad (3.322)$$

Faktor před závorkami je nutný kvůli normování vlnové funkce.

Záměna částic 1 a 2 nemá vliv na  $\psi_S$ , kdežto u  $\psi_A$  obrací znaménko. Obě dvě funkce přitom splňují ( 3.316 ).



**Wolfgang Pauli (1900 – 1958)**

Mezi chováním částic v systémech se symetrickou vlnovou funkcí a v systémech jejichž vlnová funkce je antisymetrická, existuje řada významných rozdílů. Nejdůležitější je ten, že v prvním případě mohou obě částice 1, 2 existovat současně v téměř stavu  $a = b$ , kdežto položíme-li v druhém případě  $a = b$ , dostaneme  $\psi_A = 0$ , což vede k nulové hustotě pravděpodobnosti, že by takováto situace mohla nastat. Dá se ukázat, že všechny částice s poločíselným spinem (fermiony) jsou popsány antisymetrickou vlnovou funkcí ( 3.322 ), kdežto všechny částice se spinem rovným celému číslu (bosony) popisují symetrické vlnové funkce ( 3.321 ).

Pauliho vylučovací princip tedy říká, že nemohou existovat dva fermiony, jež by měly všechny kvantové náboje (kvantová čísla) úplně stejné (pozor, kvantovými čísly charakterizujícími částici může být i poloha a čas). Pokud se tedy mají 2 fermiony současně vyskytovat na téže energetické hladině v atomu, musí se navzájem lišit v dalších kvantových číslech. Shodují-li se v atomu vodíku pro dva elektrony kvantová čísla  $n, l, m$ , musí se vzájemně lišit jejich spinová kvantová čísla  $s$ . Naproti tomu, bosony jsou vůči sobě navzájem prakticky zcela netečné. V laserovém svazku může být vedle sebe nespočet bosonů v téměř kvantovém stavu a žádnému z nich to nevadí. Z tohoto pohledu se bosony jeví jako velmi „přátelské“ částice. Je to však pouhé zdání, neboť ve dvou vzájemně se křižujících laserových

paprscích procházejí jednotlivé bosony vzájemně skrz sebe, aniž by to mělo jakýkoli vliv na změnu jejich dráhy a chování.

Pokusme se naše předchozí úvahy zobecnit na systém  $N$  stejných částic popsaných společnou vlnovou funkcí  $\Psi$ .

Definujme tzv. *operátor permutace*:

$$\hat{P}_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & \cdots & i & \cdots & j & \cdots & N \\ 1 & \cdots & j & \cdots & i & \cdots & N \end{pmatrix} \quad (3.323)$$

působící na funkci  $N$  spinových proměnných podle vztahu

$$\Psi(1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) = \hat{P}_{ij} \Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N). \quad (3.324)$$

Obě dvě funkce opět popisují týž stav. Uvažujme fyzikální veličinu  $B$  systému  $N$  stejných částic, jíž přísluší operátor  $\hat{B}$ . Nechť  $|\varphi\rangle$  je vlastní vektor operátoru  $\hat{B}$  příslušející vlastní hodnotě  $b$ . Je-li systém ve stavu

$$\hat{P}|\varphi\rangle \equiv |\hat{P}\varphi\rangle, \quad (3.325)$$

pak vzhledem k nerozlišitelnosti částic musíme při měření  $B$  dostat týž výsledek:

$$\hat{B}|\varphi\rangle = b|\varphi\rangle \Rightarrow \hat{B}\hat{P}|\varphi\rangle = b|\hat{P}\varphi\rangle. \quad (3.326)$$

Vlastní vektory  $|\varphi\rangle$  a  $|\hat{P}\varphi\rangle$  hermitovského operátoru  $\hat{B}$  příslušejí téže vlastní hodnotě  $b$ . K tomu je nutnou a postačující podmínkou, aby pro libovolný permutační operátor  $\hat{P}$  platilo

$$[\hat{B}, \hat{P}] = 0. \quad (3.327)$$

Označíme-li stručně

$$\begin{aligned} (1, \dots, i, \dots, j, \dots, N) &\equiv (i, j), \\ (1, \dots, j, \dots, i, \dots, N) &\equiv (j, i), \end{aligned} \quad (3.328)$$

můžeme přepsat ( 3.324 ) do tvaru

$$\hat{P}_{ij} \Psi(i, j) = \Psi(j, i). \quad (3.329)$$

Protože ke každému permutačnímu operátoru  $\hat{P}$  existuje operátor inverzní  $\hat{P}^{-1}$ , můžeme ( 3.329 ) zapsat jako

$$\Psi(i, j) = \hat{P}_{ij}^{-1} \Psi(j, i). \quad (3.330)$$

V Diracově symbolice platí pro ( 3.329 ) a ( 3.330 ) vztahy

$$\langle \hat{P}_{ij} \Psi_1(i, j) | \Psi_2(i, j) \rangle = \langle \Psi_1(i, j) | \hat{P}_{ij}^* | \Psi_2(i, j) \rangle = \langle \Psi_1(j, i) | \hat{P}_{ij}^{-1} | \Psi_2(j, i) \rangle \quad (3.331)$$

odkud plyne unitarita operátoru  $\hat{P}$ :

$$P^* = P^{-1}. \quad (3.332)$$

Protože kvadrát unitárního operátoru je identita:

$$\hat{P}^2 \equiv \hat{P}^* \hat{P} = \hat{P}^{-1} \hat{P} = \hat{1}, \quad (3.333)$$

můžeme této skutečnosti využít k nalezení vlastních hodnot operátoru  $\hat{P}$ . Na charakteristickou rovnici

$$\hat{P}\Psi = \lambda\Psi \quad (3.334)$$

zapůsobíme operátorem  $\hat{P}$  a dostaneme

$$\Psi = \hat{P}\lambda\Psi = \lambda\hat{P}\Psi = \lambda^2\Psi, \quad (3.345)$$

odkud okamžitě plyne  $\lambda^2 = 1$  neboli  $\lambda = \pm 1$ . Vlastní funkce odpovídající vlastní hodnotě  $\lambda = 1$  se nazývá symetrická

$$\hat{P}_{ij} \Psi^S = \Psi^S, \quad (3.346)$$

vlastní funkce odpovídající vlastní hodnotě  $\lambda = -1$  se nazývá antisymetrická

$$\hat{P}_{ij} \Psi^A = -\Psi^A. \quad (3.347)$$

Poslední definici lze ve skutečnosti ještě více zobecnit s pomocí operátoru parity příslušné permutace  $\hat{\Pi} \equiv (-1)^p$ . Obecně pro antisymetrické vlnové funkce platí

$$\hat{P}_{ij} \Psi^A = (-1)^p \Psi^A. \quad (3.348)$$

Definujme projekční operátory zvané **symetrizátor** a **antisymetrizátor**.

$$\hat{S} = \frac{1}{N!} \sum_p \hat{P}_p, \quad (3.349)$$

$$\hat{A} = \frac{1}{N!} \sum_p (-1)^p \hat{P}_p.$$

Snadno ověříme, že platí

$$\hat{P}\hat{S} = \hat{S}\hat{P} = \hat{S}, \quad \hat{P}\hat{A} = \hat{A}\hat{P} = (-1)^p \hat{A}. \quad (3.350)$$

S pomocí těchto projektorů můžeme zapsat (3.327) ve tvaru

$$\hat{S}\Psi^S = \Psi^S, \quad \hat{A}\Psi^A = \Psi^A. \quad (3.351)$$



Necht'  $\{\psi_{k_i}(i)\}$  je množina jednočásticových stavů vzájemně neinteragujících částic. Ukážeme, jakým způsobem lze z nich konstruovat vlnovou funkci  $\Psi(1, \dots, i, \dots, j, \dots, N)$ . V partikulárním tvaru ji můžeme vyjádřit jako součin

$$\prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i), \quad (3.352)$$

avšak tato funkce sama ještě nevyhovuje symetrizačnímu postulátu. Je proto nutné vyprojektovat z ní symetrickou a antisymetrickou komponentu:

$$\begin{aligned} \Psi^S(1, \dots, N) &= \hat{S} \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) = \frac{1}{N!} \sum_p \hat{P}_p \left( \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) \right), \\ \Psi^A(1, \dots, N) &= \hat{A} \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) = \frac{1}{N!} \sum_p (-1)^p \hat{P}_p \left( \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) \right). \end{aligned} \quad (3.353)$$

Výraz na pravé straně druhé rovnice (3.353) však není nic jiného, než determinant matice. Příslušná normovaná vlnová funkce se nazývá **Slaterův determinant**:



John Clarke Slater (1900 – 1976)

$$\Psi^A(1, \dots, N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_p (-1)^p \hat{P}_p \left( \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) \right) =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(1) & \psi_{k_1}(2) & \cdots & \psi_{k_1}(N) \\ \psi_{k_2}(1) & \psi_{k_2}(2) & \cdots & \psi_{k_2}(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_N}(1) & \psi_{k_N}(2) & \cdots & \psi_{k_N}(N) \end{vmatrix}. \quad (3.354)$$

Transpozice dvou částic odpovídá záměně dvou sloupců Slaterova determinantu, v důsledku čehož mění determinant znaménko. Jsou-li mezi indexy  $k_i$  dva stejné, tj. jsou-li dvě částice v témže stavu, jsou dva řádky stejné a determinant je identicky roven nule. Tudíž i pravděpodobnost výskytu takového stavu je nulová. V systému stejných fermionů tedy nemohou být současně dvě částice v témže stavu. Dospíváme tak opět k Pauliho vylučovacímu principu, tentokrát v zobecněné podobě. Pro bosony však žádná analogie Pauliho principu neplatí.

Protože máme v kvantové mechanice dvě diametrálně odlišné rodiny částic, máme také dvě odlišné statistiky, jimiž popisujeme to, kterak částice „zabydlují“ jednotlivé energetické hladiny. Kvantová statistika popisující uspořádání bosonů se nazývá **Bose – Einsteinova statistika**, kvantová statistika popisující uspořádání fermionů se nazývá **Fermi – Diracova statistika**.



Enrico Fermi (1901 – 1954)



Satyendra Nath Bose (1894 – 1974)

Ve Fermi – Diracově statistice naproti tomu vykazuje každá energetická hladina stav nasycení, a energetické spektrum je diskrétní (čárové), neb jsou povoleny jen určité energetické hladiny, na kterých se částice spolu vzájemně snesou. Pro tyto částice platí Pauliho vylučovací princip, což se projevuje omezením rozdělovací funkce u nízkých energií (v jednom stavu může být nejvýše jeden fermion). Rozdělovací funkce určuje střední počet částic ve stavu s energií  $E$ :

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} + 1} \quad (3.355)$$

kde  $E_F$  je tzv. Fermiho energie.

Pro energie

$$E - E_F \gg k_B T \quad (3.356)$$

přechází Fermiovo – Diracovo rozdělení v klasické Maxwelllovo – Boltzmannovo rozdělení.



**Ludwig Eduard Boltzmann (1844 – 1906)**

Bose - Einsteinova statistika popisuje v podstatě klasický plyn obsahující vzájemně neinteragující částice. Tam obecně platí, že nejvíce částic je uspořádáno na nejnižších energiích, a jak energie v systému roste, zaujmají některé z nich energie vyšší.

Rozdělovací funkce má v tomto případě tvar

$$f_{BE}(E) = \frac{1}{e^{\frac{E-E_F}{k_B T}} - 1} \quad (3.357)$$

Pro energie

$$E - E_F \gg k_B T \quad (3.358)$$

opět přechází Boseho-Einsteinovo rozdělení v klasické Maxwelllovo-Boltzmannovo rozdělení.

Energetické uspořádání částic v Maxwelllově – Boltzmannově statistice v podstatě odpovídá statistickému rozdělení počtu částic v závislosti na jejich energii v ideálním plynu ohřátém na určitou teplotu  $T$  (tzv. Maxwelllovo – Boltzmannova rozdělení). Takovéto spektrum je spojité a vykazuje statistické maximum na energii

$$E = k_B T, \quad (3.359)$$

kde  $k$  je Boltzmannova konstanta.

Tak např. v atomu vodíku jsou energetické hladiny (slupky) K, L, M, N, ... obsazovány elektrony v závislosti na 3 kvantových číslech.

**Orbitální kvantové číslo**  $l = 0, 1, 2, \dots$ , určuje počet orbitalů na každé hladině. Zatímco na slupce K je jediný orbital 1s, na slupce L jsou již orbitaly 2s, 2p, na slupce M orbitaly 3s, 3p, 3d, a na slupce N, orbitaly 4s, 4p, 4d, 4f, a tak dále. **Magnetické kvantové číslo** pak určuje počet hladin na každém z orbitalů. Zatímco orbital s obsahuje jedinou hladinu, orbital p už má 3, orbital d jich má 5 a orbital f dokonce 7, obecně tedy  $(2l+1)$  stavů. Na  $n$ -té slupce se tedy nalézají jen omezený počet  $n^2$  energetických hladin (podslupek). Je zde však ještě **spinové kvantové číslo**  $s$ , které umožňuje elektronu zaujmout 2 různé stavy: jeden stav se spinem orientovaným kladně druhý stav se spinem orientovaným záporně. Na každém orbitalu nám tak Pauliho princip dovoluje existenci nanejvýše  $2(2l+1)$  elektronů, což pro hlavní kvantové číslo  $n$ , určující energii slupky, představuje množství  $2n^2$  elektronů. Na tomto jednoduchém případě dobře známém již z hodin fyziky a chemie na střední škole, jsme dobře demonstrovali podstatu

rozdílu mezi Bose – Einsteinovou a Fermi – Diracovu statistikou. Zatímco částice s celočíselným spinem podléhající Bose –Einsteinově statistice se stále chovají jako nezávislé a nemohou spolu tedy vytvořit vázané celky a jakkoli uspořádané struktury, částice s poločíselným spinem, podléhající statistice Fermi – Diracově, pro něž platí Pauliho vylučovací princip, mohou spolu vytvářet atomy, molekuly, krystaly, živé buňky, a živé organismy. Zdálo by se tedy, že za veškerou rozmanitost přírody vděčíme pouze a jedině fermionům. Vystávala by pak otázka, k čemu jsou vlastně dobré bosony. V následujících kapitolách si ukážeme, že bosony jsou pro přírodu neméně důležitými, neboť jsou to právě ony, které zprostředkovávají vazebné síly mezi fermiony. Prostřednictvím bosonů spolu fermiony komunikují a drží vzájemně pohromadě. Zatímco Fermi – Diracova statistika a Pauliho princip jim pouze dovolují vytvářet vázané stavy fermionů, bosony jsou onou silou, která ty vázané stavy doopravdy zprostředkovává a udržuje.

## Klasifikace částic

Na počátku 20. století byla známa jediná elementární částice a tou byl elektron. Na konci 20. století jich už fyzikové znali okolo 300. Již v 60. letech minulého století však byly znalosti o částicích a jejich interakcích poskytované velkými urychlovači dostatečné na to, aby se lidé mohli pokusit tuto stále méně přehlednou změť různých druhů částic nějak uspořádat.

Zatímco elementárních bosonů existuje v přírodě jen několik desítek druhů, fermionů jsou stovky a dělíme je dále do několika rodin.

Největší rodinu tvoří **Hadrony** (z řeckého slova hadros = silný), což jsou částice podléhající tzv. **silné interakci**, o níž budeme hovořit v kapitole o interakcích. Silná jaderná interakce je citlivá na další kvantový náboj zvaný **barva**.

**Tab. 3.2**

Kvarky	d	u	s	c	b	t
Klidová hmotnost [MeV]	~ 3	~ 3	~ 130	~ 1 300	~ 4 300	~ 173 000
Elektrický náboj [ $e$ ]	-1/3	2/3	-1/3	2/3	-1/3	2/3
Spin	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
Baryonové číslo	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3
Doba života [s]	$\infty$	$\infty$	$\infty$	$\infty$	$\infty$	$\infty$

Druhou hlavní rodinu fermionů tvoří šestičlenná skupinka částic zvaných **leptony** – to jsou jediné fermiony nepodléhající silné interakci. Tvoří je **elektron**, **elektronové neutrino**, **mion** (těžký elektron) a **mionové neutrino**, a třetí dvojici **tauon** (supertěžký elektron) a **tauonové neutrino**.

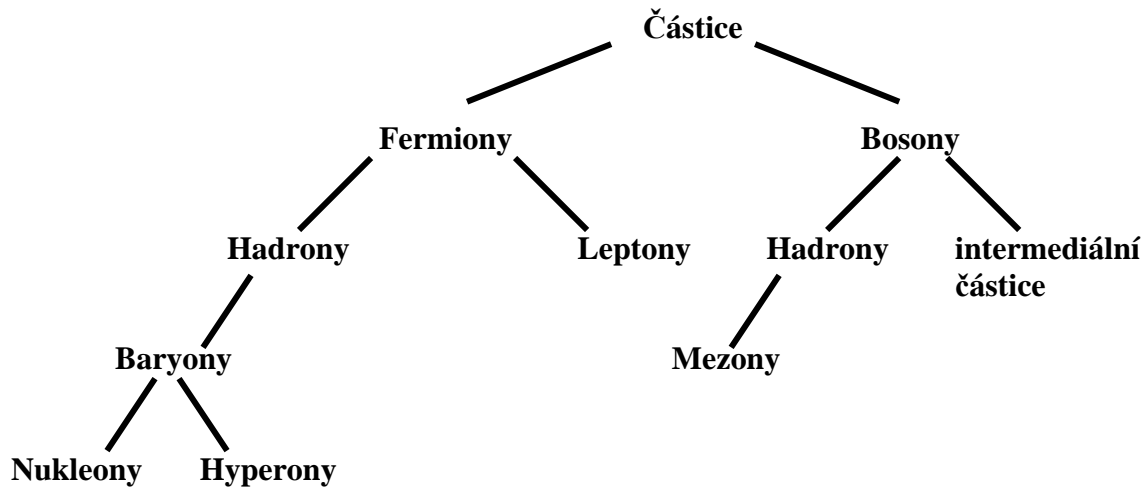
**Tab. 3.3**

Leptony	e	$\nu_e$	$\mu$	$\mu_e$	$\tau$	$\nu_\tau$
Klidová hmotnost [keV]	511	< 0.002	105 658	< 190	1777000	< 18200
Elektrický náboj [ $e$ ]	-1	0	-1	0	-1	0
Spin	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
Leptonové číslo	$1_e$	$1_e$	$1_\mu$	$1_\mu$	$1_\tau$	$1_\tau$
Doba života [s]	$\infty$	$\infty$	$2,2 \cdot 10^{-6}$	$\infty$	$2,9 \cdot 10^{-13}$	$\infty$

Velice početnou rodinu hadronů si dále rozdělíme na **Baryony** – částice látkotvorné, a **mezony** – hadrony s velice krátkou životností, které jsou tak trochu černými ovce v rodině hadronů, neboť jako jediné hadrony nenáleží mezi fermiony, alebrž mezi bosony (jejich spin je buď 1, nebo 0). Jak si povíme dál, je to způsobeno tím, že podobně jako třeba atomové jádro, nejsou mezony ani baryony elementárními hadrony, ale jsou složeny z dvojice ještě elementárnějších fermionických hadronů zvaných kvarky. Typická atomární látka vesmíru je však tvořena pouze dvěma baryony a to protonem a neutronem, které tak tvoří ještě samostatnou rodinu s výsostným postavením uvnitř rodiny baryonů, jež se nazývá **rodinou nukleonů** (nucleus = jádro). Zbylé baryony, které tvoří vůbec

nejpočetnější skupinu částic se nazývají **hyperony**, neboť obsahují nenulovou hodnotu dalšího kvantového čísla zvaného **hypernáboj  $Y$** . Můžeme tak nyní všechny známé částice uspořádat do přehledného rodinného stromu:

Schéma 2



## Lokální symetrie

Všechny známé zákony zachování ve fyzikálním světě jsou důsledkem symetrií přírody.



Emmy Noetherová (1882 – 1935)



Eugene Paul Wigner (1902 – 1995)

### 1) *Permutace stejných částic*

Záměna identických částic, diskutovaná v minulé kapitole, je jednou z mnoha možných operací symetrie a vede k zachování charakteru

vlnové funkce. Vlnová funkce může být vzhledem k takové záměně buď symetrická, nebo antisymetrická, přičemž v prvním případě se částice řídí Bose – Einsteinovou statistikou, ve druhém pak Fermi – Diracovou statistikou. Zachování typu statistiky (neboli zachování symetrie či antisymetrie vlnové funkce) znamená, že statické vlastnosti izolovaného systému nemůže změnit žádný proces, probíhající uvnitř. Systém řídicí se Bose – Einsteinovou statistikou tedy nemůže samovolně přejít k Fermi – Diracově statistice a naopak.

## 2) *Prostorová inverze*

Další významná třída operací symetrie se týká různých druhů **parity**. Tento pojem charakterizuje chování vlnové funkce vůči inverzi souřadnic. Nemění-li se při inverzi souřadnic znaménko vlnové funkce

$$\psi(x, y, z) = \psi(-x, -y, -z), \quad (3.360)$$

říkáme, že  $\psi$  má **sudou paritu**.

Pakliže se znaménko mění:

$$\psi(x, y, z) = -\psi(-x, -y, -z), \quad (3.361)$$

má  $\psi$  **lichou paritu**.

Obecně tedy platí

$$\psi(x, y, z) = (-1)^p \psi(-x, -y, -z) = \hat{\Pi} \psi(-x, -y, -z), \quad (3.362)$$

kde

$$p = \begin{cases} 2n \\ 2n-1 \end{cases}, n \in \mathbb{N}. \quad (3.363)$$



Podobně, jako pro operátor permutace  $\hat{P}$ , jsou tedy vlastní hodnoty operátoru parity  $\hat{\Pi}$  opět  $\pm 1$ , přičemž kladná vlastní hodnota generuje sudou paritu, záporná lichou.

Bylo prokázáno, že parita izolovaného systému se při elektromagnetických i silných jaderných procesech probíhajících uvnitř systému zachovává.

Zákon zachování parity je důsledkem symetrie prostoru vzhledem inverzi, tj. nezávislosti fyzikálních zákonů na tom, zda přírodní procesy popisujeme v levotočivém či pravotočivém souřadném systému.

Pro některé částice však takováto symetrie neplatí. Neutrino má pouze levotočivý spin, antineutrino naopak pouze pravotočivý, takže mezi částicemi a jejich zrcadlovými obrazy existuje hluboký rozdíl. Z této asymetrie plyne, že slabé interakce, jichž se účastní právě neutrina, obecně nezachovávají paritu, což bylo experimentálně poprvé potvrzeno při rozpadu mezonu  $K^+$ .

### 3) Prostorová translace

Vyšetřeme nyní stavovou funkci  $\psi(x, z, z)$  volné částice. Translace o infinitesimální prostorový úsek  $\varepsilon$  ve směru osy  $x$  souvisí s transformací funkce  $\psi(x, z, z)$  vztahem určeným Taylorovým rozvojem

$$\begin{aligned} \psi'(x, z, z) &= \psi(x - \varepsilon, z, z) = \\ &= \psi(x, z, z) - \varepsilon \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, z, z) + \frac{\varepsilon^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, z, z) - \dots = \\ &= \left[ 1 - \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{p}_x + \frac{1}{2} \left( \frac{i}{\hbar} \varepsilon \hat{p}_x \right)^2 - \dots \right] \psi(x, z, z). \end{aligned} \quad (3.364)$$



Brook Taylor (1685 – 1731)

Jako v předchozích dvou případech můžeme uvedenou transformaci vyjádřit působením tzv. **substitučního operátoru**  $\hat{O}_g$  na vlnovou funkci. Substituční operátory v Hilbertově prostoru jsou jednoznačně přiřazeny operátorům  $\hat{g}$  působícím v reálném fyzikálním prostoru, neboli platí

$$\mathbf{r}' = \mathbf{g}\mathbf{r} \rightarrow \hat{O}_g \psi(\hat{g}\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}), \quad (3.365)$$

kde  $\mathbf{g}$  je maticová reprezentace operátoru  $\hat{g}$ . Působení operátoru  $\hat{O}_g$  v Hilbertově prostoru tedy anuluje působení operátoru  $\hat{g}$  v reálném prostoru. Jinými slovy, hodnota funkce  $\psi' = \hat{O}_g \psi$  v novém bodě  $\mathbf{r}'$  je rovna hodnotě původní funkce  $\psi$  v původním bodě  $\mathbf{r}$ . S přihlédnutím k ( 3.365 ) tedy platí

$$\hat{O}_g \psi(\mathbf{r}) = \psi(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{g}^{-1}\mathbf{r}). \quad (3.366)$$

Jsou-li  $\psi_1(\mathbf{r})$  a  $\psi_2(\mathbf{r})$  dva vektory Hilbertova prostoru, pak z definice ( 3.366 ) vyplývá

$$\hat{O}_g [\psi_1(\mathbf{r})\psi_2(\mathbf{r})] = \psi_1(\hat{g}^{-1}\mathbf{r})\psi_2(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}) = [\hat{O}_g \psi_1(\mathbf{r})][\hat{O}_g \psi_2(\mathbf{r})]. \quad (3.367)$$

Pro obecný posun stavu o vektor  $\boldsymbol{\varepsilon}$  v libovolném směru tak z ( 3.364 ) plyne

$$\hat{O}_g(\boldsymbol{\varepsilon}) = 1 - \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} \hat{p}_x + \frac{1}{2} \left( \frac{i}{\hbar} \boldsymbol{\varepsilon} \hat{p}_x \right)^2 - \dots = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (\boldsymbol{\varepsilon} \hat{\mathbf{p}}) \right]. \quad (3.368)$$

Definujme generátor  $\hat{G}(g)$  spojité transformace  $\hat{g}$  jako derivaci příslušného substitučního operátoru podle parametru  $i$  při nulových hodnotách všech parametrů

$$\hat{G}(g) = \left. \frac{\partial}{\partial i} \hat{O}_g(i) \right|_{i=0}. \quad (3.369)$$

Transformace  $\hat{g}$ , pro níž platí

$$\hat{H}(\hat{g}\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r}) \quad (3.370)$$

(invariance hamiltoniánu vůči  $\hat{g}$ ) se nazývá **operace symetrie**.

Z (3.370) a (3.367) pro takovou transformaci okamžitě plyne

$$\begin{aligned} \hat{O}_g \left[ \hat{H}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) \right] &= \left[ \hat{O}_g \hat{H}(\mathbf{r}) \right] \left[ \hat{O}_g \psi(\mathbf{r}) \right] = \\ &= H(\hat{g}^{-1}\mathbf{r}) \hat{O}_g \psi(\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r}) \hat{O}_g \psi(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.371)$$

Je-li tedy hamiltonián invariantní vůči transformaci souřadnic  $\hat{g}$ , potom komutuje s příslušným substitučním operátorem:

$$\left[ \hat{O}_g, \hat{H} \right] = 0 \Leftrightarrow \hat{O}_g \hat{H} \hat{O}_g^{-1} = \hat{H}. \quad (3.372)$$

V případě spojité transformace (translace, rotace) lze  $\hat{O}_g$  vyjádřit ve tvaru

$$\hat{O}_g(\lambda) = \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (\lambda \hat{G}) \right], \quad (3.373)$$

kde  $\hat{G}$  je generátor příslušné transformace,  $\lambda$  je reálný parametr. Derivováním vztahu ( 3.372 ) podle  $\lambda$  při  $\lambda = 0$  dostaneme

$$\frac{d}{d\lambda} \left[ \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}\right) \hat{H} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}\right) \right]_{\lambda=0} = \frac{d}{d\lambda} \hat{H} = 0, \quad (3.374)$$

neboť hamiltonián není funkcí parametru  $\lambda$ . Vypočteme-li derivaci na levé straně ( 3.374 ), máme

$$\left( e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} \hat{H} \frac{i}{\hbar} \hat{G} e^{\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} - \frac{i}{\hbar} \hat{G} e^{-\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} \hat{H} e^{\frac{i}{\hbar} \lambda \hat{G}} \right) = \frac{i}{\hbar} (\hat{H} \hat{G} - \hat{G} \hat{H}) = 0, \quad (3.375)$$

odkud dostáváme důležitý vztah

$$[\hat{H}, \hat{G}] = 0. \quad (3.376)$$

Odtud plyne, že operátor hybnosti  $\hat{p}_i$  je generátorem translací ve směru obecné osy  $i$ .

#### 4) Časová translace

Transformovanou funkci  $\psi'(t)$  při časovém posunu  $t \rightarrow t + \tau$  definujeme zcela obdobně jako v případě translace:

$$\psi'(t) = \hat{U}(\tau) \psi(t) = \psi(t - \tau), \quad (3.377)$$

kde  $\hat{U}(\tau)$  je tzv. **evoluční operátor**. Pro infinitesimální posun v čase zřejmě platí

$$\psi(t - \tau) = \left( 1 - \tau \frac{\partial}{\partial t} + \frac{\tau^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \dots \right) \psi(x, z, z). \quad (3.378)$$

Analogickým postupem jako v případě prostorové translace okamžitě nalézáme řešení ve tvaru

$$\hat{U}(\tau) = \exp\left(-\tau \frac{\partial}{\partial t}\right) = e^{\frac{i\hat{H}\tau}{\hbar}}. \quad (3.379)$$

Všimněme si, že platí

$$\frac{\hbar}{i} \frac{d\hat{U}}{dt} = \hat{H} e^{\frac{i\hat{H}(t-t_0)}{\hbar}} = \hat{H} e^{\frac{i\hat{H}t}{\hbar}} = \hat{H}\hat{U} \quad (3.380)$$

Právě odvozená rovnice se nazývá rovnice časového vývoje, či krátce **evoluční rovnice**. Zapůsobíme-li nyní touto operátorovou rovnicí na počáteční stav  $\psi(t_0)$ , provede evoluční operátor vývoj stavu do času  $t$  a výsledná rovnice pro  $\psi(t)$  není ničím jiným, než nám dobře známou časovou Schrödingerovou rovnicí

$$-\frac{\hbar}{i} \frac{d\psi(t)}{dt} = \hat{H}\psi(t). \quad (3.381)$$

### 5) Prostorová rotace

Podobně, pro rotaci  $\hat{R}(\alpha, z)$  o kladně orientovaný úhel  $\alpha$  okolo osy  $z$  můžeme pomocí (3.366) a s využitím ortonormality matice  $\mathbf{R}$  odvodit

$$\begin{aligned} \hat{O}_R(\alpha, z)\psi(\mathbf{r}) &= \psi(\mathbf{g}^{-1}\mathbf{r}) = \psi\left[\begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ -\sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}\right] = \\ &= \psi(x\cos\alpha + y\sin\alpha, -x\sin\alpha + y\cos\alpha, z). \end{aligned} \quad (3.382)$$

Pravou stranu lze pro infinitesimální  $\alpha$  opět rozvinout v Taylorovu řadu. Uvážíme-li, že v tomto případě platí  $\sin\alpha \sim \alpha$ ,  $\cos\alpha \sim 1$ , a omezíme-li se pro jednoduchost pouze na lineární členy, dostáváme

$$\begin{aligned}
\hat{O}_R(\alpha, z)\psi(x, y, z) &\approx \psi(x + y\alpha, -x\alpha + y, z) = \\
&= \psi(x, y, z) + \alpha \left( y \frac{\partial \psi}{\partial x} - x \frac{\partial \psi}{\partial y} \right) = \quad (3.383) \\
&= \left( 1 - \frac{i}{\hbar} \alpha \hat{L}_z \right) \psi(x, y, z).
\end{aligned}$$

Pro infinitesimální rotaci okolo obecné osy  $\mathbf{n}$  (jednotkový vektor ve směru zvolené osy) bude tedy podobně, jako v případě translací, platit

$$\hat{O}_R(\alpha, \mathbf{n}) = \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \alpha \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}}\right). \quad (3.384)$$

Generátor rotace  $-\frac{i}{\hbar} \mathbf{n} \hat{\mathbf{L}}$  kolem osy  $\mathbf{n}$  je určen průmětem impulsmomentu do této osy.

V případě rotační symetrie odpovídají jednotlivé generátory složkám impulsmomentu  $\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z$ . Protože tyto operátory spolu navzájem nekomutují, můžeme použít jen jeden z nich. Z rovnic

$$[\hat{H}, \hat{J}_x] = [\hat{H}, \hat{J}_y] = [\hat{H}, \hat{J}_z] = 0 \quad (3.385)$$

však plyne

$$[\hat{H}, \hat{J}^2] = 0, \quad (3.386)$$

takže  $\hat{H}, \hat{J}_z, \hat{J}^2$  jsou komutující pozorovatelné veličiny.

## 6) Časová inverze

Definujme operátor komplexního sdružení

$$\hat{K}\psi = \psi^*, \quad (3.387)$$

kde  $\psi$  je libovolná funkce.

Nechť funkce  $\psi(t)$  vyhovuje časové Schrödingerově rovnici ( 3.381 ). Provedeme-li v ní transformaci  $t \rightarrow -t$  a působíme-li na ni zleva operátorem  $\hat{K}$ , dostáváme

$$\hat{H}^* \psi^*(-t) = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial(-t)} \psi^*(-t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi^*(-t). \quad ( 3.388 )$$

Zapůsobíme-li nyní na tuto rovnici evolučním operátorem  $\hat{U}$ , máme

$$\hat{H}\hat{U}\psi^*(-t) = -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \hat{U}\psi^*(-t), \quad ( 3.389 )$$

neboť z unitarity  $\hat{U}$  ihned plyne

$$\hat{U}\hat{H}^*\hat{U}^{-1} = \hat{H} \Leftrightarrow \hat{U}\hat{H}^* = \hat{H}\hat{U}. \quad ( 3.390 )$$

Porovnáním ( 3.388 ) a ( 3.389 ) zjišťujeme, že je-li  $\psi(t)$  řešením Schrödingerovy rovnice, je jím rovněž i funkce

$$\psi'(t) = \hat{U}\psi^*(-t) = \hat{U}\hat{K}\psi(-t) = \hat{K}\psi(-t), \quad ( 3.391 )$$

kde  $\hat{K} = \hat{U}\hat{K}$  je tzv. **operátor inverze času**,  $\psi'(t)$  je časově invertovaný stav  $\psi(t)$ .

Předpokládejme, že libovolný operátor  $\hat{\Omega}$  lze vyjádřit ve tvaru

$$\hat{\Omega} = \hat{\Omega}_r + i\hat{\Omega}_i, \quad ( 3.392 )$$

kde  $\hat{\Omega}_r$  a  $\hat{\Omega}_i$  jsou reálné operátory. Zřejmě platí

$$\hat{K}(\hat{\Omega})\hat{K}^{-1} = \hat{K}(\hat{\Omega}_r + i\hat{\Omega}_i)\hat{K}^{-1} = \hat{K}\hat{\Omega}_r\hat{K}^{-1} + \hat{K}i\hat{\Omega}_i\hat{K}^{-1} = \hat{\Omega}_r - i\hat{\Omega}_i = \hat{\Omega}^*. \quad ( 3.393 )$$

Prozkoumejme nyní vliv působení operátoru časové inverze na různé fyzikální veličiny:

$$\begin{aligned}\hat{K}\hat{\mathbf{r}}K^{-1} &= \hat{\mathbf{r}}^* = \mathbf{r}, \\ \hat{K}\hat{\mathbf{p}}K^{-1} &= \hat{K}(-i\hbar\nabla)K^{-1} = (-i\hbar\nabla)^* = i\hbar\nabla = -\hat{\mathbf{p}}, \\ \hat{K}\hat{\mathbf{J}}K^{-1} &= \hat{K}(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}})K^{-1} = (\hat{\mathbf{r}}\times\hat{K}\hat{\mathbf{p}}K^{-1}) = \hat{\mathbf{r}}\times(-\hat{\mathbf{p}}) = -(\hat{\mathbf{r}}\times\hat{\mathbf{p}}) = -\hat{\mathbf{J}}.\end{aligned}\tag{3.394}$$

Požadujeme přirozeně, aby poslední relace platila obecně pro všechny typy impulsmomentu, tedy též

$$\hat{K}\hat{\mathbf{S}}K^{-1} = -\hat{\mathbf{S}}.\tag{3.395}$$

Ve standardní bázi ( 3.162 ) je pouze složka  $\sigma_y$  ryze imaginární a máme

$$\begin{aligned}\hat{K}\hat{s}_x\hat{K}^{-1} &= \hat{s}_x, \\ \hat{K}\hat{s}_y\hat{K}^{-1} &= -\hat{s}_y, \\ \hat{K}\hat{s}_z\hat{K}^{-1} &= \hat{s}_z.\end{aligned}\tag{3.396}$$

Aby byla splněna rovnice ( 3.395 ), musí mít unitární transformace  $\hat{U}$  tyto vlastnosti:

$$\begin{aligned}\hat{U}\hat{s}_x\hat{U}^{-1} &= -\hat{s}_x, \\ \hat{U}\hat{s}_y\hat{U}^{-1} &= \hat{s}_y, \\ \hat{U}\hat{s}_z\hat{U}^{-1} &= -\hat{s}_z.\end{aligned}\tag{3.397}$$

Transformace ( 3.395 ) představuje obecně rotaci v prostoru spinových funkcí o úhel  $\pi$  kolem osy  $y$ . Příslušný rotační operátor  $\hat{R}_s$  má ve shodě s ( 3.384 ) tvar

$$\hat{R}_s = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y\right).\tag{3.398}$$



Provedeme-li transformaci  $t \rightarrow -t$  v časové Schrödingerově rovnici ( 3.381 ) a následně ještě zapůsobíme zleva operátorem  $\hat{K}$ , dostáváme s přihlédnutím k ( 3.391 ) systém rovnic

$$\begin{aligned}\hat{H}\psi'(t) &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t), \\ \hat{K}\hat{H}\hat{K}^{-1}\psi'(t) &= -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial t} \psi'(t),\end{aligned}\tag{ 3.399 }$$

ze kterého vyplývá, že nutnou a postačující podmínkou pro invarianci časově nezávislého hamiltoniánu vůči inverzi času je požadavek

$$\hat{K}\hat{H}\hat{K}^{-1} = \hat{H}\tag{ 3.400 }$$

neboli

$$[\hat{K}, \hat{H}] = 0.\tag{ 3.401 }$$

Tato podmínka je splněna pro systém v libovolném elektrickém poli, avšak za nepřítomnosti vnějšího magnetického pole  $\mathbf{B}$ .

### Heisenbergova rovnice

Nechť libovolný  $N$ -částicový systém je popsán normovanou vlnovou funkcí  $\Psi = \Psi(\mathbf{x}, t)$ , kde  $\mathbf{x} = (\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$  představuje soubor spinprostorových souřadnic všech částic. Provedeme-li v čase  $t$  sérii měření veličiny  $\Omega$  reprezentované operátorem  $\hat{\Omega}$ , získáme hodnoty  $\omega_1, \omega_2, \dots$ . Střední hodnota veličiny  $\Omega$

$$\langle \hat{\Omega}(t) \rangle = \langle \Psi(t) | \hat{\Omega} | \Psi(t) \rangle.\tag{ 3.402 }$$

Provedeme-li sérii podobných měření v čase  $t + \Delta t$ , dostaneme obecně jiné hodnoty  $\omega'_1, \omega'_2, \dots$ , přičemž

$$\langle \hat{\Omega}(t + \Delta t) \rangle = \langle \Psi(t + \Delta t) | \hat{\Omega} | \Psi(t + \Delta t) \rangle. \quad (3.403)$$

Pro časovou změnu střední hodnoty

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\langle \Psi(t + \Delta t) \rangle - \langle \Psi(t) \rangle}{\Delta t} \quad (3.404)$$

vypočteme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial t} \middle| \hat{\Omega} \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{\Omega} \middle| \frac{\partial \Psi}{\partial t} \right\rangle. \quad (3.405)$$

Dosadíme-li za  $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$  z časové Schrödingerovy rovnice ( 3.381 ),

dostaneme

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \middle| \hat{\Omega} \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{\Omega} \middle| \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \right\rangle. \quad (3.406)$$

Vzhledem k hermitičnosti hamiltoniánu můžeme psát

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \middle| \hat{\Omega} \middle| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \middle| \hat{\Omega} \middle| \frac{1}{i\hbar} \hat{H} \Psi \right\rangle &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \hat{\Omega} - \hat{\Omega} \hat{H} | \Psi \rangle = \\ &= \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [ \hat{H}, \hat{\Omega} ] | \Psi \rangle, \end{aligned} \quad (3.407)$$

takže

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} \middle| \Psi \right\rangle + \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | [ \hat{H}, \hat{\Omega} ] | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [ \hat{H}, \hat{\Omega} ] \right\rangle. \quad (3.408)$$

Časová derivace střední hodnoty operátoru je tedy střední hodnotou veličiny reprezentované tzv. **operátorem časové derivace** pozorovatelné veličiny  $\hat{\Omega}$ :

$$\dot{\hat{\Omega}} = \frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Omega}], \quad (3.409)$$

neboli

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \langle \dot{\hat{\Omega}} \rangle = \langle \Psi | \dot{\hat{\Omega}} | \Psi \rangle. \quad (3.410)$$

Nezávisí-li  $\hat{\Omega}$  explicitně na čase, dostáváme z (3.409) důležitý vztah

$$\dot{\hat{\Omega}} = \frac{i}{\hbar} [\hat{H}, \hat{\Omega}], \quad (3.411)$$

který se nazývá **Heisenbergova rovnice** a její fyzikální obsah je totožný s obsahem Schrödingerovy rovnice.

### Integrály pohybu a zákony zachování

Nezávisí-li hamiltonián systému ani generátor transformace explicitně na čase, pak z Heisenbergovy rovnice plyne  $\frac{d}{dt} \langle \hat{G} \rangle = 0$  a příslušnou pozorovatelnou veličinu  $\hat{\Omega}$  nazýváme **integrálem pohybu**. Podle (3.408) je to taková fyzikální veličina, jejíž operátor  $\hat{\Omega}$  nezávisí explicitně na čase

$$\frac{\partial \hat{\Omega}}{\partial t} = 0 \quad (3.412)$$

a komutuje s hamiltoniánem

$$[\hat{H}, \hat{\Omega}] = 0. \quad (3.413)$$

Jak víme, dva komutující operátory mají společný systém vlastních vektorů. Je-li např.  $\psi$  vlastním vektorem  $\hat{H}$  s vlastní hodnotou  $E$ :

$$\hat{H}\psi = E\psi, \quad (3.414)$$

pak  $\hat{\Omega}\psi$  je rovněž vlastním vektorem  $\hat{H}$  s touž vlastní hodnotou

$$\hat{H}(\hat{\Omega}\psi) = \hat{\Omega}(\hat{H}\psi) = \hat{\Omega}E\psi = E(\hat{\Omega}\psi). \quad (3.415)$$

Integrály pohybu tak závisí na kvantových číslech, která se v čase nemění a lze je tedy užít k označení odpovídajících stacionárních stavů.

Namísto časové Schrödingerovy rovnice můžeme řešit bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H}\psi_n(x) = E_n\psi_n(x). \quad (3.416)$$

Její obecné řešení je možno psát ve tvaru

$$\psi(x, t) = \sum_n c_n \psi_n(x) e^{\frac{E_n t}{i\hbar}}, \quad (3.417)$$

kde  $c_n$  jsou rozvojové koeficienty. Přitom předpokládáme, že funkce  $\psi_n(x)$  tvoří úplný ortonormální systém a funkce  $\psi(x, t)$  je normovaná. Odtud vidíme, že pravděpodobnost, že se uvažovaný systém nachází ve stavu popsaném vlnovou funkcí  $\psi_n(x)$

$$p_n = |c_n|^2, \quad (3.418)$$

jakož i kvantověmechanické střední hodnoty

$$\begin{aligned}\langle \hat{\Omega} \rangle &= \sum_n p_n g_n, \\ \langle \hat{H} \rangle &= \sum_n p_n E_n,\end{aligned}\tag{ 3.419 }$$

jsou časově nezávislé.

Závěrem si provedme přehledný souhrn vybraných zákonů zachování coby důsledků různých symetrií přírody.

### 1) Homogenita prostoru

Homogenitou prostoru rozumíme translační invarianci uzavřeného fyzikálního systému. Ukázali jsme, že translační invariance systému, resp. jeho hamiltoniánu souvisí se zachováním celkového impulsu:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{p}}] = 0,\tag{ 3.420 }$$

který je proto integrálem pohybu.

### 2) Izotropie prostoru

Izotropie prostoru spočívá v ekvivalenci všech prostorových směrů. To znamená, že vlastnosti izolovaného systému se nemění při libovolné rotaci. Ukázali jsme, že rotační invariance souvisí se zákonem zachování celkového impulsmomentu:

$$[\hat{H}, \hat{\mathbf{J}}] = 0\tag{ 3.421 }$$

který je tedy rovněž integrálem pohybu

### 3) Homogenita času

Homogenita času je projevem invariance uzavřeného systému vůči translaci v čase, tzn. explicitní nezávislosti hamiltoniánu systému na čase. Důsledkem této invariance je zachování energie:

$$[\hat{H}, \hat{H}] = 0, \quad (3.422)$$

která je opět integrálem pohybu.

#### 4) *Prostorová inverze*

Jak již bylo řečeno dříve, je zákon zachování parity důsledkem symetrie prostoru vzhledem inverzi, tj. nezávislosti fyzikálních zákonů na tom, zda přírodní procesy popisujeme v levotočivém či pravotočivém souřadném systému. Hamiltonián libovolného uzavřeného systému, v němž působí elektromagnetické a silné jaderné interakce je invariantní vůči prostorové inverzi a tato invariance vede k zachování parity:

$$[\hat{H}, \hat{\Pi}] = 0, \quad (3.423)$$

která je tudíž integrálem pohybu.

#### 5) *Časová inverze*

Bylo ukázáno, že hamiltonián libovolného uzavřeného systému, v němž nepůsobí vnější magnetické pole, je invariantní vůči časové inverzi a tato invariance vede k zachování spinu:

$$[\hat{H}, \hat{S}] = 0 \quad (3.424)$$

jenž je integrálem pohybu.

#### 6) *Invariance vůči permutacím stejných částic*

Jak již dobře víme, záměna identických částic vede k zachování charakteru vlnové funkce. Invariance Hamiltoniánu systému stejných částic vůči libovolné permutaci těchto částic vede k zachování typu statistiky, jíž se uvažovaný systém řídí:

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0. \quad (3.425)$$

Z (3.425) lze rovněž snadno odvodit vztahy

$$[\hat{H}, \hat{S}] = [\hat{H}, \hat{A}] = 0. \quad (3.426)$$

Permutace částic je tedy rovněž integrálem pohybu.

### Štěpení energetických hladin při narušení symetrie

Doposud jsme se zabývali uzavřenými kvantově mechanickými systémy. Nalézali se však systém ve vnějším silovém poli, je jeho hamiltonián invariantní jednak vůči operacím grupy symetrie tohoto pole, a jednak vůči permutacím stejných částic.

Systém v kulově symetrickém poli vykazuje jak rotační invarianci, tak i invarianci vůči inverzi. U lineárních systémů, jako jsou např. dvouatomové molekuly, zůstává hamiltonián invariantní při rotaci kolem osy symetrie, takže se zachovává příslušná složka impulsmomentu.

V kvantové chemii se často předpokládá, že lze odseparovat pohyb elektronů a jader molekuly (Bornova – Oppenheimerova aproximace), takže elektrony se pohybují ve vnějším poli specifikovaném rovnovážnou konfigurací jader. Symetrie tohoto pole je určena bodovou grupou molekuly.

Např. spinová matice částice se spinem 1/2 vyhovuje rovnici (3.395) a zároveň splňuje vztah

$$\hat{K} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi\hat{s}_y\right)\hat{K} = -i\sigma_y\hat{K} \quad (3.427)$$

(operátory  $\hat{U}$  a  $\hat{R}_s$  se liší pouze fázovým faktorem, který nemá žádný fyzikální význam a lze jej tedy položit roven jedné).

Pro působení  $\hat{K}$  na elementární spinové funkce odtud plyne

$$\hat{K}\alpha = \beta, \quad \hat{K}\beta = \alpha, \quad (3.428)$$

neboli

$$\hat{K}|s, m_s\rangle = (-1)^{s-m_s} |s, -m_s\rangle. \quad (3.429)$$

Zobecnění na  $N$ -elektronový systém se provede snadno:

$$\hat{K} = \prod_{j=1}^N [-i\sigma_y(j)] \hat{k} = \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\pi S_y\right) \hat{k}, \quad (3.430)$$

kde  $S_y$  je  $y$ -ová složka operátoru celkového spinu. Pro působení  $\hat{K}$  na  $N$ -elektronové spinově adaptované funkce platí obdoba jednoelektronové rovnice (3.429):

$$\hat{K}|S, M_s\rangle = (-1)^{S-M_s} |S, -M_s\rangle. \quad (3.431)$$

jelikož  $\hat{k}^2 = \hat{1}$  plyne z definice (3.430) důležitý vztah

$$K^2 = \left(\begin{array}{cc} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{array}\right)^{2N} = \left[\left(\begin{array}{cc} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{array}\right)\left(\begin{array}{cc} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{array}\right)\right]^N = \left(\begin{array}{cc} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{array}\right)^N = (-\mathbf{1})^N, \quad (3.432)$$

z něhož lze odvodit závěry o možné degeneraci energetických hladin ve stacionárních stavech systému.

Pro systém ve vnějším magnetickém poli  $\mathbf{B}$  obsahuje hamiltonián členy  $\hat{\mathbf{L}}\mathbf{B}, \hat{\mathbf{S}}\mathbf{B}, \hat{\mathbf{J}}\mathbf{B}$  (viz (3.283)) v důsledku čehož  $\hat{K}$  a  $\hat{H}$  nekomutují.

Popisuje-li funkce  $\psi$  stacionární stav s energií  $E$ , pak  $\hat{K}\psi$  popisuje stav s touž energií. Liší-li se  $\psi$  a  $\hat{K}\psi$  pouze fázovým faktorem, tj. je-li

$$\hat{K}\psi = c\psi, \quad (3.433)$$



kde  $|c|=1$ , jsou oba stavy totožné. Aplikujeme-li  $\hat{K}$  na obě strany ( 3.433 ), máme

$$\hat{K}^2\psi = \hat{K}c\psi = c^*c\psi = \psi. \quad ( 3.434 )$$

Tato rovnost je však splněna pouze pro sudá  $N$ . Proto musí být v systému s poločíselným celkovým spinem (lichým počtem fermionů) stavy  $\psi$  a  $\hat{K}\psi$  navzájem různé. V systému s poločíselným spinem, který je invariantní vůči inverzi času, jsou tedy všechny vlastní hodnoty hamiltoniánu alespoň dvakrát degenerovány.



Hendrik Anthony Kramers (1854 – 1952)

Tento závěr, známý jako **Kramersova věta**, souvisí velmi úzce se skutečností, že všechny částice s poločíselným spinem jsou popsány antisymetrickou vlnovou funkcí a jsou to tedy fermiony.

**Příklad:** Ve vnějším magnetickém poli orientovaném podél osy  $z$  platí dle ( 3.284 )

$$\hat{H} = -\gamma\hbar B\hat{I}_z. \quad ( 3.435 )$$

Z rovnice ( 3.411 ) okamžitě vidíme, že

$$\frac{d\hat{I}_x}{dt} = \frac{i}{\hbar}[\hat{H}, \hat{I}_x] = -\frac{i}{\hbar}\gamma\hbar B[\hat{I}_z, \hat{I}_x] = \gamma B\hat{I}_y \neq 0. \quad ( 3.436 )$$

Za přítomnosti magnetického pole již tedy není jaderný spin integrálem pohybu. Obdobně se lze přesvědčit, že platí

$$\frac{d\hat{I}_y}{dt} = -\gamma B \hat{I}_x \neq 0 \quad (3.437)$$

a pouze

$$\frac{d\hat{I}_z}{dt} = 0. \quad (3.438)$$

Výsledek je možno zapsatve tvaru

$$\frac{d\hat{\mathbf{I}}}{dt} = \mathbf{I} \times \gamma \mathbf{B} \quad (3.439)$$

kde

$$\frac{d\hat{\mathbf{I}}}{dt} = \frac{d\hat{I}_x}{dt} \mathbf{e}_x + \frac{d\hat{I}_y}{dt} \mathbf{e}_y + \frac{d\hat{I}_z}{dt} \mathbf{e}_z. \quad (3.440)$$

Protože  $\hat{\boldsymbol{\mu}} = \gamma \hbar \hat{\mathbf{I}}$ , dostáváme

$$\frac{d\langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \rangle}{dt} = \langle \hat{\boldsymbol{\mu}} \rangle \times \gamma \mathbf{B} \quad (3.441)$$

ve shodě s klasickou pohybovou rovnicí pro gyromagnetickou částici ve vnějším magnetickém poli.

## Princip korespondence

### *Ehrenfestovy rovnice*

Operátor časové derivace ( 3.409 ) můžeme porovnat s **Poissonovou rovnicí klasické mechaniky**

$$\frac{du}{dt} = \frac{\partial u}{\partial t} + \{u, H\}, \quad (3.442)$$

kde  $u$  je klasická veličina,  $H$  je Hamiltonova funkce,

$$\{u, v\} = \sum_k \left( \frac{\partial u}{\partial q_k} \frac{\partial v}{\partial p_k} - \frac{\partial v}{\partial q_k} \frac{\partial u}{\partial p_k} \right) \quad (3.443)$$

je tzv. **Poissonova závorka** a  $q_k$  a  $p_k$  jsou zobecněné souřadnice a impulsy.



Siméon Denis Poisson (1781 – 1840)

Odtud je vidět, že klasické Poissonově závorce odpovídá v kvantové mechanice komutátor odpovídajících operátorů dělený  $i\hbar$

$$\{u, v\} \rightarrow \frac{1}{i\hbar} [\hat{u}, \hat{v}]. \quad (3.444)$$

Vzhledem k tomu, že operátory souřadnice a impulsu nezávisí explicitně na čase, budou operátory časové derivace pro tyto veličiny mít tvar

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}], \\ \hat{\mathbf{p}} &= \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{p}}, \hat{H}].\end{aligned}\tag{3.445}$$

Tyto operátorové rovnice jsou analogiemi Hamiltonových rovnic klasické mechaniky

$$\begin{aligned}\dot{q}_k &= \frac{\partial H}{\partial p_k} = \{q_k, H\}, \\ \dot{p}_k &= -\frac{\partial H}{\partial q_k} = \{p_k, H\}.\end{aligned}\tag{3.446}$$

Předpokládejme hamiltonián v obvyklém tvaru

$$\hat{H} = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \hat{V}(x, y, z, t).\tag{3.447}$$

Z první rovnice ( 3.445 ) dostaneme

$$\hat{\mathbf{r}} = \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}^2 - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}) = \frac{1}{2mi\hbar} (\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}).\tag{3.448}$$

Použitím komutační relace ( 3.71 )

$$\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}} = i\hbar\tag{3.449}$$

na pravé straně rovnice ( 3.448 ) postupně dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{r}} &= \frac{1}{2mi\hbar} ((i\hbar + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}})\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}(\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - i\hbar)) = \\ &= \frac{1}{2mi\hbar} (i\hbar\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} - \hat{\mathbf{p}}\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{p}}i\hbar) = \frac{\hat{\mathbf{p}}}{m}.\end{aligned}\tag{3.450}$$

Souvislost mezi operátory rychlosti a impulsu je tedy v kvantové mechanice stejná, jako mezi rychlostí a impulsem v mechanice klasické.



Paul Ehrenfest (1880 – 1933)

Podobně můžeme postupovat i v případě druhé rovnice ( 3.445 ). Dosazením za hamiltonián obdržíme

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{1}{i\hbar}(\hat{\mathbf{p}}\hat{V} + \hat{V}\hat{\mathbf{p}}) = \frac{1}{i\hbar}(-i\hbar\nabla\hat{V} - i\hbar\hat{V}\nabla + i\hbar\hat{V}\nabla) = -\nabla\hat{V} = \hat{\mathbf{F}}, \quad (3.451)$$

kde  $\hat{\mathbf{F}} = -\text{grad } V$  je tzv. **operátor síly**. Analogie s obyčejnou silou z klasické mechaniky, je více než zřejmá. Rovnice ( 3.451 ) proto představuje kvantový protějšek klasického Newtonova zákona. Kvantověmechanickým vystředováním rovnic ( 3.450 ) a ( 3.451 ) obdržíme **Ehrenfestovy rovnice**:

$$\begin{aligned} \frac{d\langle\hat{\mathbf{r}}\rangle}{dt} &= \langle\hat{\mathbf{r}}\rangle = \frac{\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle}{m}, \\ \frac{d\langle\hat{\mathbf{p}}\rangle}{dt} &= \langle\hat{\mathbf{p}}\rangle = \langle-\nabla V\rangle = \langle\hat{\mathbf{F}}\rangle. \end{aligned} \quad (3.452)$$

Pro časové derivace kvantověmechanických středních hodnot operátorů souřadnice a impulsu platí tedy obdobné vztahy, jako v klasické fyzice.

Postupným použitím Ehrenfestových rovnic dále dostaneme

$$\frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt^2} = \frac{d}{dt} \frac{d \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt} = \frac{d \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle}{dt m} = \frac{\langle -\nabla V \rangle}{m} = \frac{\langle \hat{\mathbf{F}} \rangle}{m}, \quad (3.453)$$

neboli

$$m \frac{d^2 \langle \hat{\mathbf{r}} \rangle}{dt^2} = \langle \hat{\mathbf{F}} \rangle, \quad (3.454)$$

což je další kvantověmechanická obdoba 2. Newtonova zákona. Omezíme-li se nyní pro jednoduchost na jednorozměrný případ a uvážíme-li, že  $\hat{x} = x$ ,  $\hat{F}(x) = F(x)$ , můžeme provést Taylorův rozvoj síly v rovnici (3.454) v okolí hodnoty  $\langle x \rangle$

$$\langle F(x) \rangle = F(\langle x \rangle) + \left. \frac{dF(x)}{dx} \right|_{x=\langle x \rangle} \Delta x + \frac{1}{2} \left. \frac{d^2 F(x)}{dx^2} \right|_{x=\langle x \rangle} (\Delta x)^2 + \dots \quad (3.455)$$

$$\text{kde } \Delta x = \left\langle (x - \langle x \rangle)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}}.$$

Druhý člen na pravé straně této rovnice je roven nule a členy vyšších řádů lze obvykle zanedbat. Z rovnic (3.454) a (3.455) tak dostáváme Newtonův zákon v obvyklé podobě známé z klasické mechaniky

$$m \frac{d^2 x}{dt^2} = F(x), \quad (3.456)$$

kde  $x = \langle x \rangle$ .

Abychom mohli použít klasický popis a reprezentovat stavy systému body ve fázovém prostoru, je nutné, aby kvantověmechanické neurčitosti  $\Delta x$  či  $\Delta p$  objevující se v rovnicích typu (3.455) byly malé.

Zatímco Schrödingerova rovnice je lineární rovnicí pro  $\psi$  a platí pro ni princip superpozice, Newtonova pohybová rovnice pro  $\langle x \rangle$  není obecně lineární. Lineární kvantová mechanika proto v sobě zahrnuje i nelineární mechaniku klasickou.

Střední hodnoty časově nezávislých operátorů, včetně střední hodnoty souřadnice  $\langle \hat{x} \rangle$ , nezávisí pro stacionární stavy na čase. Odtud vyplývá, že pohyb popsáný klasickou mechanikou s časově proměnnou hodnotou souřadnic nelze získat limitním přechodem ze stacionárních stavů kvantové mechaniky. Tento limitní přechod lze provést pouze pro nestacionární stavy.

### *Hamiltonova – Jacobiho rovnice*



Carl Gustav Jacob Jacobi (1804 – 1851)

Vlnovou funkci částice ( 3.9 ) zobecníme na tvar

$$\psi(\mathbf{r}, t) = e^{\frac{is(\mathbf{r}, t)}{\hbar}}, \quad ( 3.457 )$$

kde komplexní funkce  $s(\mathbf{r}, t) = s_1 + is_2$ .

Časovou Schrödingerovu rovnici s potenciální energií  $V$  vynásobíme zleva  $\psi^*$  a provedeme integraci přes souřadnice  $\mathbf{r}$ , přičemž využijeme hermicity operátoru impulsu. Pro jednoduchost se při tom opět omezíme na jednorozměrný případ:

$$i\hbar \int \psi^* \frac{\partial \psi}{\partial t} dx = \frac{1}{2m} \int \left| -i\hbar \frac{\partial \psi}{\partial t} \right|^2 dx + \int V |\psi|^2 dx. \quad (3.458)$$

Po dosazení vztahu ( 3.457 ) dostaneme

$$\begin{aligned} \int \frac{\partial s_1}{\partial t} e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + i \int \frac{\partial s_2}{\partial t} e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + \frac{1}{2m} \int \left| \frac{\partial s_1}{\partial x} \right|^2 e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + \\ + \frac{1}{2m} \int \left| \frac{\partial s_2}{\partial x} \right|^2 e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx + \int V e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx = 0. \end{aligned} \quad (3.459)$$

Druhý integrál v ( 3.459 ) je roven nule

$$\int \frac{\partial s_2}{\partial t} e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} dx = -\frac{\hbar}{2} \frac{\partial}{\partial t} \int |\psi|^2 dx = 0 \quad (3.460)$$

Dále budeme předpokládat, že hustota pravděpodobnosti

$$|\psi|^2 = e^{-\frac{2s_2}{\hbar}} \quad (3.461)$$

je blízka nule všude, kromě bodu  $x = \langle x \rangle$ , kde nabývá svého maxima a kde platí

$$\left. \frac{\partial s_2}{\partial x} \right|_{x=\langle x \rangle} = 0. \quad (3.462)$$

Nahradíme-li hustotu pravděpodobnosti  $\delta$ - funkcí

$$|\psi|^2 = \delta(x - \langle x \rangle) \quad (3.463)$$

a použijeme-li předpoklad ( 3.462 ), z rovnic ( 3.459 ), ( 3.460 ) dostaneme



$$\frac{\partial s_1(\langle x \rangle, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial s_1(\langle x \rangle, t)}{\partial x} \right)^2 + V(\langle x \rangle, t) = 0, \quad (3.464)$$

což je kvantověmechanický ekvivalent Hamilton – Jacobiho rovnice klasické mechaniky, kde funkce  $s_1$  hraje úlohu klasické akce  $S$ . Ze vztahu ( 3.461 ) vidíme, že nahrazení  $|\psi|^2 \rightarrow \delta(x - \langle x \rangle)$  odpovídá provedení limity  $\hbar \rightarrow 0$ . To vyjadřuje tzv. **princip korespondence** podle něhož výsledky kvantové mechaniky přecházejí na výsledky klasické mechaniky pro  $\hbar \rightarrow 0$  nebo v případě velkých kvantových čísel.

Můžeme to jednoduše ukázat tak, že vlnovou funkci ( 3.457 ) dosadíme do časové Schrödingerovy rovnice ( 3.381 ) a máme

$$\frac{\partial s(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{2m} \left( \frac{\partial s(x, t)}{\partial x} \right)^2 + V(x, t) = \frac{i\hbar}{2m} \frac{\partial^2 s(x, t)}{\partial x^2}. \quad (3.465)$$

Předpokládáme-li  $\hbar \rightarrow 0$ , přechází tato rovnice opět v Hamilton – Jacobiho rovnici.

### *Viriálový teorém*

Nechť  $\hat{\Omega}$  je libovolný hermitovský operátor, který je funkcí souřadnic a impulsů částic systému. Uvažujme stacionární stav  $\Psi$  ( $\partial \hat{H} / \partial t = 0$ ), který je vlastním vektorem  $\hat{H}$ , tj.

$$\hat{H}\Psi = E\Psi. \quad (3.466)$$

Z ( 3.410 ) a ( 3.411 ) vypývá

$$\frac{d}{dt} \langle \hat{\Omega} \rangle = \frac{i}{\hbar} \langle \Psi | \hat{H} \hat{\Omega} - \hat{\Omega} \hat{H} | \Psi \rangle = \frac{i}{\hbar} \left[ E \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle - \langle \Psi | \hat{\Omega} | \Psi \rangle E \right] = 0. \quad (3.467)$$

Tato rovnost říká, že střední hodnoty časově nezávislých operátorů ve stacionárních stavech nezávisí na čase a označují se jako tzv.

**hyperviriálový teorém.**

Prozkoumejme nyní případ, kdy

$$\begin{aligned}\hat{\Omega} &= \hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}, \\ \hat{H} &= \frac{\hat{p}^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}),\end{aligned}\tag{3.468}$$

kde součin  $\hat{\mathbf{r}}\hat{\mathbf{p}}$  se nazývá **virial**.

Časovou derivací viriálu s uvážením ( 3.467 ) dostáváme

$$\frac{d}{dt}\hat{\mathbf{r}} \cdot \hat{\mathbf{p}} = \left( \frac{d\hat{\mathbf{r}}}{dt} \cdot \hat{\mathbf{p}} + \hat{\mathbf{r}} \cdot \frac{d\hat{\mathbf{p}}}{dt} \right) = 0.\tag{3.469}$$

Dosažením Ehrenfestových teorémů do časové derivace viriálu ( 3.469 ) dostáváme

$$\left( \frac{\hat{p}^2}{m} - \hat{\mathbf{r}} \frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}} \right) = 0.\tag{3.470}$$

Pro  $N$ -částicové systémy můžeme vztahy ( 3.469 ) a ( 3.470 ) snadno zobecnit:

$$\frac{d}{dt} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}_i \cdot \hat{\mathbf{p}}_i = \sum_{i=1}^N \left( \frac{d\hat{\mathbf{r}}_i}{dt} \cdot \hat{\mathbf{p}}_i + \hat{\mathbf{r}}_i \cdot \frac{d\hat{\mathbf{p}}_i}{dt} \right) = 0,\tag{3.471}$$

$$\sum_{i=1}^N \left( \frac{\hat{p}_i^2}{m} - \hat{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \hat{V}(\mathbf{r})}{\partial \mathbf{r}_i} \right) = 0.\tag{3.472}$$

Podle Eulerova teorému, je-li  $f(r_1, \dots, r_n)$  homogenní funkcí stupně  $s$ , potom

$$\sum_{i=1}^n r_i \frac{\partial f}{\partial r_i} = s f(r_1, \dots, r_n). \quad (3.473)$$

Nechť

$$\psi_{1s}(\mathbf{r}) = R_{10}(\mathbf{r}) Y_{00} = \sqrt{\frac{Z^3}{\pi a_0^3}} e^{-Z \frac{r}{a_0}} \quad (3.474)$$

je normovaná funkce, která je řešením pro atom vodíku s potenciální energií

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = -\frac{Ze^2}{r}. \quad (3.475)$$

Z (3.475) vidíme, že potenciální energie  $V(\mathbf{r})$  vyhovuje rovnici

$$\hat{V}(a\mathbf{r}) = a^{-1} \hat{V}(\mathbf{r}) \quad (3.476)$$

a je tedy homogenní funkcí stupně  $s = -1$ .

Podle (3.473) tedy platí

$$\sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{r}}_i \frac{\partial \hat{V}}{\partial \mathbf{r}_i} = s \hat{V}. \quad (3.477)$$

První člen (3.472) je dvojnásobek kinetické energie elektronů, druhý člen vyjádříme pomocí Eulerova teorému (3.477). Pro každý z elektronů tak dostaneme

$$2\langle \hat{T} \rangle = \langle \hat{\mathbf{r}} \cdot \nabla \hat{V}(\mathbf{r}) \rangle = s \langle \hat{V} \rangle, \quad (3.478)$$

což je kvantověmechanická obdoba tzv. **virialového teorému** známého i z klasické mechaniky.

Speciálně pro případ coulombického pole ( $s = -1$ ) máme

$$2\langle\hat{T}\rangle = -\langle\hat{V}\rangle. \quad (3.479)$$

Dle definice platí

$$E_n = \langle\hat{T}\rangle + \langle\hat{V}\rangle, \quad (3.480)$$

takže máme

$$\begin{aligned} \langle\hat{T}\rangle &= -E_n = \frac{Z^2}{n^2}, \\ \langle\hat{V}\rangle &= 2E_n = -\frac{2Z^2}{n^2}. \end{aligned} \quad (3.481)$$

Energii atomu vodíku můžeme přibližně vyjádřit jako střední hodnotu hamiltoniánu

$$\hat{H} = \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} - \frac{2e^2}{r} \right) \quad (3.482)$$

Pro střední hodnoty jednočásticových operátorů  $\hat{H}$  ( $n = 1$ ) tak platí

$$\begin{aligned} \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle &= Z^2, \\ \left\langle -\frac{2e^2}{r} \right\rangle &= -2Z^2. \end{aligned} \quad (3.483)$$

Např. střední hodnota kinetické a interakční energie jednoelektronového systému s jádrem v atomu H tak vychází

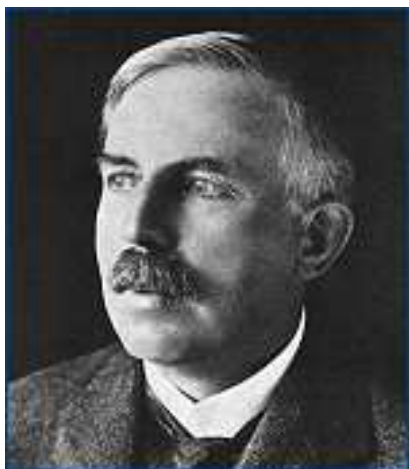
$$W_{k+ej}[Z] = \left( \left\langle \frac{p^2}{2m} \right\rangle + \left\langle -\frac{2e^2}{r} \right\rangle \right) = Z^2 - 2Z^2 [\text{Ry}]. \quad (3.484)$$

Protože v atomu vodíku je  $Z = 1$ , dostáváme dosazením do ( 3.484 ) energii

$$W_{k+ej}[Z] = -Z^2 = -1 \text{ Ry} = -13,6 \text{ eV} .$$

## Atomové jádro

### Základní údaje



Ernst Rutherford (1871 – 1937)



James Chadwick (1891 – 1974)

Tím, že protony a neutrony na sebe působí nejen elektromagneticky, ale i „silně“, se zásadně odlišují od elektronů, které zákonům silné interakce nepodléhají.

Proton můžeme pokládat za částici stabilní, neboť je známa dolní hranice jeho střední doby života, která je  $10^{33}$  let, což je doba přesahující o mnoho řádů stáří vesmíru. Naproti tomu volný neutron nelze považovat za stabilní, neboť jeho střední doba života je pouhých 886 s. Rozdíl klidových hmotností neutronu a protonu, umožňuje neutronu, aby se rozpadnul na proton, elektron a antineutrino (viz tabulku elementárních částic). Neutrony silně vázané v atomových jádrech se nerozpadají, pokud jsou vázány slaběji, k jejich rozpadu může dojít. Základní parametry charakterizující proton a neutron jsou experimentálně určeny s vysokými přesnostmi a jsou uvedeny v tabulce 3.4.

Hmotnosti protonu a neutronu lze určit velmi přesně z rozboru jaderných reakcí a jejich magnetické momenty lze měřit stejnými metodami jako magnetické momenty jader.

**Tab. 3.4 – Nejdůležitější vlastnosti nukleonů**

		proton	neutron
Hmotnost	kg	$1,6726231(10) \cdot 10^{-27}$	$1,6749547(87) \cdot 10^{-27}$
	u	1,007276470(11)	1,008 665 220(60)
Klidová energie v MeV		938,27231(28)	939,56563(28)
Střední doba života		$> 10^{33}$ let	886(1) s
Spin v $h$		1/2	1/2
Parita		+ 1	+ 1
Elektrický náboj v C		$1,60217733(49) \cdot 10^{-19}$	0
Poměr magnetického momentu k jadernému magnetonu $\mu_N$		2,792 847 386(63)	-1,91304275(45)
Izospin $T$		1/2	1/2
Komponenta $T_z$ izospinu		+1/2	-1/2

Vlastní struktura či složení atomového jádra se vystihuje třemi čísly: **Atomové číslo  $Z$** , které se někdy nazývá protonovým číslem, má tři ekvivalentní významy. Zaprvé udává pořadové číslo prvku v periodické soustavě, za druhé počet elektronů v obalu neutrálního atomu a za třetí, což je zde důležité, počet protonů v jádře atomu příslušného prvku.

**Neutronové číslo  $N$**  je počet neutronů v atomovém jádře.

**Hmotnostní číslo  $A$**  nebo nukleonové číslo je počet nukleonů v jádře. Tato tři čísla nejsou nezávislá, neboť platí

$$A = Z + N. \quad ( 3.485 )$$

Jádra, případně látky, které jsou tvořeny jim příslušnými atomy, se podle konkrétní struktury jader označují specifickými termíny. Potřeba těchto termínů vyplývá z toho, že přirozená látka tvořená jedním chemickým prvkem může být složena z atomů, jejichž jádra se liší počtem neutronů.

Proto se látka, která se skládá z atomů, jejichž jádra mají stejné  $Z$ ,  $N$ , a tedy i  $A$ , nazývá **nuklidem**. Nuklid se označuje symbolem  ${}^A_ZX$ , kde  $X$  je chemická značka prvku s atomovým číslem  $Z$  a hmotnostním číslem  $A$ . Někdy se atomové Číslo u tohoto symbolu vynechává, protože udává tutéž informaci jako symbol  $X$ . Značka pro nuklid se beze změny používá i pro příslušné jádro.

Pro látky tvořené jedním chemickým prvkem je důležité jejich izotopické složení. **Izotop** je jeden nuklid z množiny nuklidů, které mají stejné  $Z$ , ale různé  $N$ . Dobře známé jsou např. izotopy vodíku  ${}^1_1H$ ,  ${}^2_1H$ ,  ${}^3_1H$ , tj. vodík, deuterium a tritium. V jaderné fyzice se kromě toho často setkáváme s termínem **izobar**, což je nuklid z množiny nuklidů, jejichž jádra mají stejné  $A$ , ale různá  $Z$ . Pro  $A = 3$  existují dva izobary  ${}^3_1H$  a  ${}^3_2He$  (tritium a tralpium). Méně často se používá termínu **izoton**, což je nuklid z množiny nuklidů, které mají stejný počet neutronů, tj. stejné  $N$ , ale různé  $Z$ . Pro  $N = 2$  známe izotony  ${}^3_1H$ ,  ${}^4_2He$ ,  ${}^5_3Li$ ,  ${}^6_4Be$ .

Někdy se můžeme setkat i s termínem **izomer**, což je látka tvořená nuklidem, jehož jádra se nacházejí poměrně dlouho ve stejném vzbuzeném stavu. Izomer se označuje doplněním symbolu nuklidů písmenem  $m$ . Např.  ${}^{234m}_{91}Pa$ .

Konečně **radionuklidem** nazýváme takový nuklid, jehož jádra jsou nestabilní a rozpadají se.

Atomová, neutronová a hmotnostní čísla  $Z$ ,  $N$  a  $A$  mají značný význam pro stavbu atomových jader. To je patrné z tabulky 3.5, v které je uveden počet stabilních nuklidů tvořených specifickými typy jader charakterizovaných čísly  $Z$  a  $N$ . Jsou to předně jádra sudo-sudá, se sudým počtem protonů a sudým počtem neutronů, která se označují jako jádra S-S, dále jádra sudo-lichá, tj. S-L se sudým  $Z$  a lichým  $N$ , lichosudá či L-S s lichým  $Z$  a sudým  $N$  a lichosudá či L-L se  $Z$  i  $N$  lichým.

**Tab. 3.5 - Rozdělení stabilních nuklidů podle sudosti a lichosti atomového a neutronového čísla**

<b>Z</b>	<b>N</b>	<b>Počet stabilních nuklidů</b>
sudé	sudé	<b>165</b>
sudé	liché	<b>55</b>
liché	sudé	<b>50</b>
liché	liché	<b>4</b>

K ostatním významným veličinám charakterizujícím atomové jádro patří: hmotnost  $M$ , náboj  $Ze$ , poloměr či lépe střední poloměr  $R$ , spin  $I$ , parita  $P$ , magnetický moment  $\mu$ , elektrický kvadrupólový moment  $eQ$  a izotopický spin  $T$ . U nestabilních jader ještě poločas rozpadu  $T_{1/2}$ .

### Hmotnost a vazbová energie jádra

*Hmotnost jádra* udáváme zpravidla jako jeho klidovou hmotnost. Její velikost vyjadřujeme obvykle s pomocí atomové hmotností jednotky  $u$ , která je definována jako 1/12 hmotnosti atomu nuklidů  $^{12}_6\text{C}$ . Platí, že

$$u = 1,6605402(10) \cdot 10^{-27} \text{ kg.} \quad (3.486)$$

Důvod pro její zavedení spočívá v tom, že změření poměru hmotností atomů je jako měření relativní mnohem přesnější než přímé měření hmotnosti atomu. To je patrné i z tabulky 3.4, kde rozdíl v přesnosti hmotnosti protonu měřené přímo a relativně je větší než dva řády. Atomová hmotnostní jednotka  $u$  odpovídá podle zákona ekvivalence klidové energii  $uc^2$ , která se vyjadřuje v jaderné fyzice v MeV:

$$uc^2 = 931,494\ 32(28) \text{ MeV.} \quad (3.487)$$

Hmotnost atomového jádra pro daný nuklid  $^A_Z X$  označíme jako  $M(A, Z)$ . Tato hmotnost souvisí s hmotností atomu  $m(^A_Z X)$  vztahem



$$m\left({}_Z^A X\right) = M(A, Z) + Zm_e - \frac{|W_a(A, Z)|}{c^2}, \quad (3.488)$$

kde  $W_a(A, Z)$  je vazbová energie atomu a  $m_e$  hmotnost elektronu. První člen na pravé straně ( 3.488 ) je podstatně větší než druhé dva členy. Pro neveliká  $Z$  můžeme v ( 3.488 ) často poslední člen zanedbat. Vzhledem k tomu, že atomová jádra s  $A > 1$  jsou vázanými systémy, je účelné zavést pojem **hmotnostního úbytku**  $B(A, Z)$ , což je rozdíl mezi klidovými hmotnostmi volných protonů a neutronů, z nichž je jádro vytvořeno a skutečnou hmotností  $M(A, Z)$ . Tedy veličina

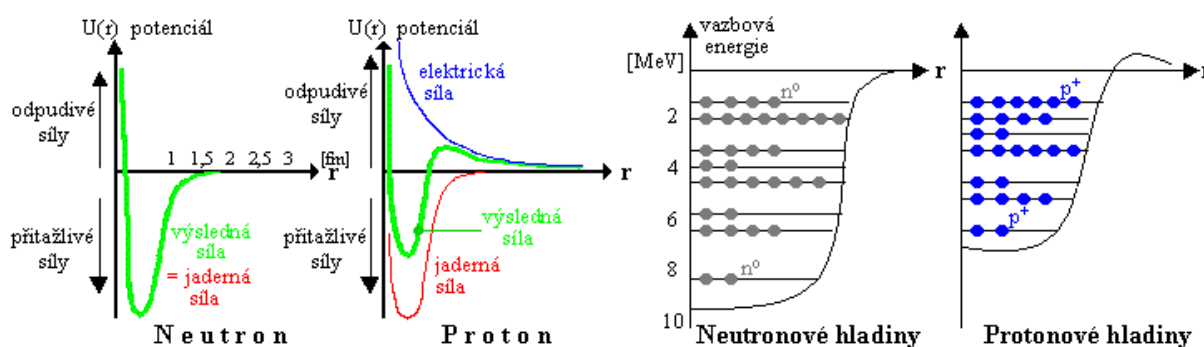
$$B(A, Z) = Zm_p + Nm_n - M(A, Z), \quad N = A - Z, \quad (3.489)$$

charakterizuje, jak silně jsou nukleony v jádře vázány. Energii, která se uvolní při vytvoření jádra z jednotlivých nukleonů, nazýváme **vazbovou energií atomového jádra**. Tato energie je podle zákona ekvivalence rovna

$$W(A, Z) = c^2 B(A, Z) \quad (3.490)$$

a je zřejmě definována jako kladná veličina.

Obr. 3.17



Vedle vazbové energie zavádíme ještě pojem **separační energie**, což je energie potřebná k oddělení určité částice nebo části jádra od daného jádra. Např. pro oddělení částice  $\alpha$ , tj. jádra  ${}_2^4\text{He}$  z daného jádra o hmotnosti  $M(A, Z)$ , je zapotřebí separační energie

$$S_{\alpha}(A, Z) = c^2 \{M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2) - M(A, Z)\}. \quad (3.491)$$

Odtud ihned plyne, že nutnou podmínkou nestability jádra vůči rozpadu  $\alpha$  je  $S_{\alpha}(A, Z) < 0$ . Lze se přesvědčit o tom, že pro známá jádra je  $S_n(A, Z) > 0$  a  $S_p(A, Z) > 0$ , a to vylučuje možnost jejich neutronového a protonového rozpadu. Zdůrazněme, že rovnice typu (3.491) definuje separační energii pro základní stavy atomových jader a nikoliv pro stavy vzbuzené. U těch totiž může dojít k vyzáření protonů nebo neutronů, pokud je jejich excitační energie dostatečně vysoká. V současné době je známo asi 70 jader, která ve vysoce vzbuzeném stavu vysílají neutrony. Jsou to většinou jádra vznikající jako produkty štěpných reakcí. Je známo rovněž několik desítek jader, která v takovém vysoce vzbuzeném stavu vysílají protony. Jádra tohoto typu se produkují v jaderných reakcích při srážkách poměrně lehkých jader.

## 6. Radioaktivní procesy



Antonie Henri Bequerel (1852 – 1908)

### a) Rozpad alfa

Spontánní rozpad atomového jádra, při kterém je vyzářena částice  $\alpha$  se zapisuje schematicky jako



kde na levé straně je tzv. mateřské jádro  $X$  s daným počtem nukleonů a protonů, na pravé straně první člen reprezentuje tzv. dceřiné jádro a

druhý částici  $\alpha$  Tento proces může probíhat pouze tehdy, je-li dovolen relativistickým zákonem zachování energie

$$E(A, Z) = E(A - 4, Z - 2) + E(4, 2), \quad (3.493)$$

a proto separační energie definovaná v rovnici ( 3.491 ) musí být záporná

$$S_\alpha(A, Z) = c^2 [M(A - 4, Z - 2) + M(4, 2) - M(A, Z)] < 0, \quad (3.494)$$

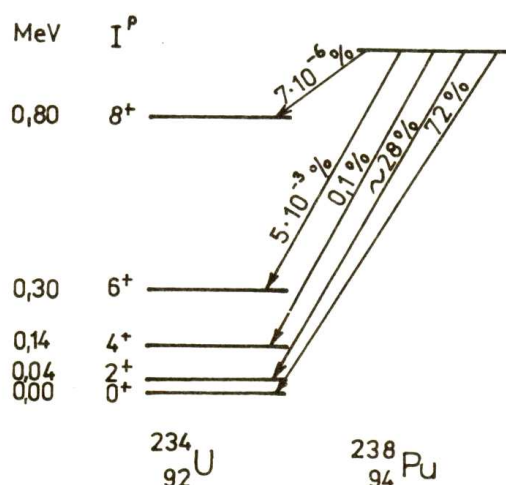
kde  $M$  jsou klidové hmotnosti zúčastněných jader.

Z experimentálně určených hmotností jader plyne, že jádra s hmotnostním číslem větším než 150 se jeví jako nestabilní vůči rozpadu  $\alpha$  Jsou známy tři oblasti, v nichž dochází k vyzařování částic  $\alpha$  jádru, tvoří je aktinidy, jádra v okolí izotopů olova a vzácné zeminy.

Energie  $E_k$  vyzářených částic  $\alpha$  vykazuje jisté pravidelnosti. Pomalu a nikoliv monotónně roste s nukleonovým číslem  $A$ . U izotopů daného prvku klesá s rostoucím číslem  $A$  s výjimkou úzké oblasti u magického čísla  $N = 126$ .

Protože při rozpadu  $\alpha$  se původní jádro rozpadá jen na dvě částice a poněvadž při tomto procesu je splněn zákon zachování energie ( 3.493 ) i zákon zachování hybnosti, jsou energie  $E$  obou vzniklých jader jednoznačně určeny. I z dalších dat je patrné, že energie částic  $\alpha$  leží v intervalu (1 MeV, 10 MeV). Není ovšem nezbytné, aby dceřiné jádro vzniklo v základním stavu, a proto spektrum energií částic  $\alpha$  není obecně reprezentováno jediným bodem, ale má *jemnou strukturu*, skládá se z několika ostrých hodnot energie.

Obr. 3.18



Na obr. 3.18 je energetický diagram i se schématem rozpadu  $\alpha$  pro plutonium  $^{238}_{94}\text{Pu}$ . Je z něho vidět, že 72 % částic  $\alpha$  má energii odpovídající přechodu ze základního stavu plutonia do základního stavu uranu  $^{234}_{92}\text{U}$ , přechody do vyšších energetických stavů uranu jsou méně pravděpodobné, jak ukazují větvící poměry uvedené na obrázku. Kinetická energie  $E_k = E - m_\alpha c^2$  vyzářených částic  $\alpha$  se dá měřit z jejich doletu  $R$  v daném prostředí. Mezi doletem  $R$  a kinetickou energií platí přibližný empirický vztah

$$R \approx k \cdot E_k^{3/2} \quad (3.495)$$

Výběrová pravidla pro rozpad  $\alpha$  jsou velmi jednoduchá, protože částice  $\alpha$  má spin nulový. Orbitální moment hybnosti  $l$  vyzářené částice  $\alpha$  je omezen trojúhelníkovou nerovností

$$|I_i - I_f| \leq l \leq I_i + I_f, \quad (3.496)$$

kde  $I_i$  je spin mateřského jádra a  $I_f$  dceřiného jádra. Jestli parity výchozího jádra  $i$  a konečného jádra  $f$  jsou shodné, musí být parita  $l$  sudá, a jestli jsou opačné, musí být lichá ve shodě se zákonem zachování parity (viz str. 95).

Významnou charakteristikou rozpadu  $\alpha$  jsou střední doby života  $\tau$

jader podléhajících tomuto rozpadu. Jsou sice pro daný typ nuklidu neměnné, avšak pro různá jádra leží v ohromném intervalu ( $10^{-7}$  s,  $10^{25}$  s). Tabulka 3.6 uvádí několik ukázek. Poločas rozpadu  $T_{1/2}$  a energie  $E_k$  částice  $\alpha$  jsou v ní udány jen pro přechod ze základního stavu do základního.

Pro vztah mezi konstantou rozpadu  $\lambda$  a doletem  $R$  částice  $\alpha$  je poměrně dlouho známo empirické pravidlo nalezené při studiu radioaktivních řad. Má tvar

$$\ln \lambda = A \ln R + B, \quad (3.497)$$

kde  $A$ ,  $B$  jsou konstanty. Vzhledem k tomu, že známe empirický vztah mezi doletem  $R$  a energií, poskytuje relace (3.497) možnost odvodit empirickou relaci mezi energií vyzářené částice  $\alpha$  a střední dobou života mateřského jádra.

**Tab. 3.6 Příklady rozpadů  $\alpha$ .  $E_k$  je kinetická energie vyzářovaných částic  $\alpha$**

Jádro	Poločas rozpadu $\alpha$ [s]	$E_k$ [MeV]	Větvicí poměr
$^{212}\text{Po}$	$3,04 \cdot 10^{-7}$	8,776	100 %
$^{211}\text{Po}$	0,52	7,434	99%
$^{224}\text{Ra}$	$3,14 \cdot 10^5$	5,681	95,1 %
$^{241}\text{Am}$	$1,48 \cdot 10^{10}$	5,532	0,34 %

Poněvadž přitažlivé síly mezi nukleony jsou krátkodosahové, je celková vazebná energie jádra přibližně úměrná jeho hmotovému číslu  $A$ , tj. počtu nukleonů v jádře. Odpudivé elektrostatické síly mezi protony však mají neomezený dosah a celková destruktivní energie v jádře je přibližně úměrná  $Z^2$ . Jádra obsahující 210 nebo více nukleonů jsou tak velká, že krátkodosahové jaderné síly, jež drží tato jádra pohromadě, sotva stačí vyrovnat vzájemné odpuzování jejich protonů. Rozpad alfa nastává u těchto jader jako prostředek zvyšování jejich stability zmenšováním jejich velikosti.

Proč jsou však částice alfa emitovány vždy spíše než jednotlivé protony nebo jádra  $^3_2\text{He}$ ? Odpověď vyplývá z veliké vazebné energie částice  $\alpha$ . K úniku z jádra potřebuje částice kinetickou energii a hmota částice alfa je dostatečně menší než hmota nukleonů, z nichž se

skládá, aby zde taková energie byla k dispozici. Pro ilustraci můžeme ze známých hodnot každé částice a mateřských a dceřinných jader vypočítat kinetickou energii  $Q$  volňovanou při emisi různých částic těžkým jádrem. Tato energie je dána výrazem

$$Q = (m_i - m_f - m)c^2, \quad (3.498)$$

kde  $m_i$  je hmota původního jádra,  $m_f$  hmota konečného jádra a  $m$  hmota částice. Výsledkem je zjištění, že energeticky možná je *jedině* emise částice alfa; jiné druhy rozpadu by vyžadovaly dodání energie z vnějšího zdroje mimo jádro. Tak rozpad alfa  ${}^{232}_{92}\text{U}$  je provázen uvolněním energie 5,4 MeV, jinak by bylo nutno nějak dodat 6,1 MeV z vnějšího zdroje, kdyby se měl emitovat proton, a 9,6 MeV v případě, že by se mělo emitovat jádro  ${}^3_2\text{He}$ . Pozorované energie rozpadu alfa jsou v souladu s odpovídajícími hodnotami předpovídanými na základě příslušných jaderných hmot.

Kinetická energie  $T_\alpha$  emitované částice alfa není nikdy přesně rovna energii rozpadu  $Q$ , protože v důsledku zákona zachování hybnosti jádro při emisi částice alfa odskakuje s malou kinetickou energií. Snadno se ukáže, že jako důsledek zachování hybnosti a energie souvisí  $T_\alpha$  s  $Q$  a s hmotovým číslem  $A$  původního jádra vztahem

$$T_\alpha \approx \frac{A-4}{A}Q. \quad (3.499)$$

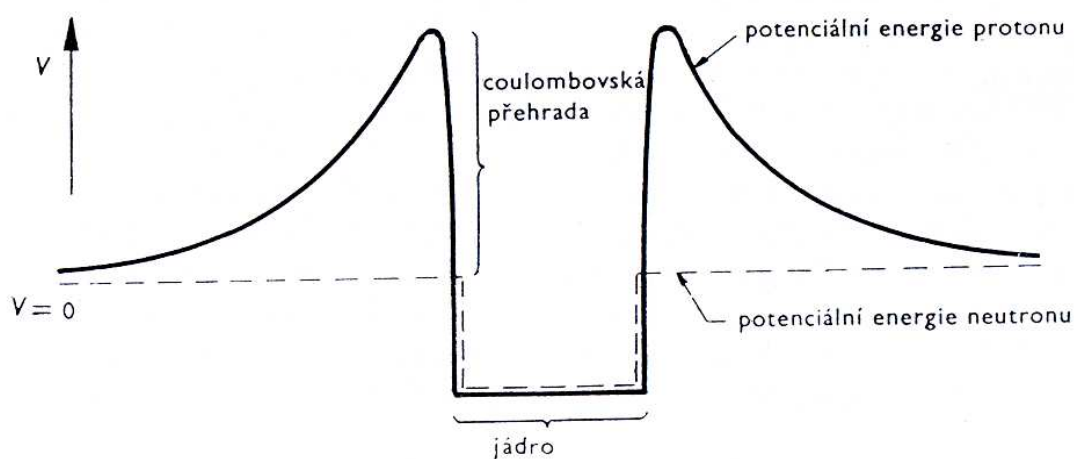
Hmotové číslo téměř všech zářičů alfa je vyšší než 210, a tak se většina rozpadové energie projevuje jako kinetická energie částice alfa. Například při rozpadu  ${}^{222}_{86}\text{Rn}$  je  $Q = 5,587$  MeV a  $T_\alpha = 5,486$  MeV.

I když se těžké jádro v zásadě může zmenšit rozpadem alfa, zůstává zde problém, jak může ve skutečnosti částice alfa uniknout z jádra. Na obr. 3.19 je vynesena potenciální energie  $V$  částice alfa jako funkce vzdálenosti  $r$  od středu nějakého těžkého jádra. Výška potenciálové přehrady (potenciálového valu) je asi 25 MeV, což se rovná práci, kterou je třeba vykonat proti odpudivé elektrostatické síle

při přenesení částice alfa z nekonečna k jádru, těsně k hranici působnosti jeho přitažlivých sil. Můžeme tudíž částici alfa v takovém jádře uvažovat, jako by byla uvnitř krabice se stěnami, jejichž překonání vyžaduje energii 25 MeV. Částice alfa mají ale při rozpadu energie od 4 do 9 MeV v závislosti na daném konkrétním nuklidu - tzn. o 16 – 21 MeV méně, než je zapotřebí k úniku z jádra. Zatímco na základě klasických úvah je rozpad alfa nevysvětlitelný, poskytuje kvantová mechanika jednoduché vysvětlení. Teorie rozpadu alfa vyvinutá v roce 1928 Gamowem byla ve skutečnosti vítaným a zvláště překvapivým potvrzením kvantové mechaniky. Základní body této teorie jsou:

1. Částice alfa může samostatně existovat uvnitř těžkého jádra.
2. Taková částice se neustále pohybuje a je v jádře udržována potenciálovým valem, který ji obklopuje.
3. Existuje malá - ale nenulová - pravděpodobnost, že částice může projít překradou (i přes její výšku) pokaždé, když se s ní srazí.

Obr. 3.19



Potenciální energie protonu a neutronu v blízkosti jádra.

Pravděpodobnost rozpadu  $\lambda$  za jednotku času tak lze vyjádřit vztahem

$$\lambda = \nu P, \quad (3.500)$$

kde  $\nu$  je počet nárazů částice alfa v jádře za vteřinu na potenciálovou

přehradu, která ji obklopuje, a  $P$  pravděpodobnost průchodu částice valem. Předpokládáme-li, že v libovolném okamžiku existuje v jádře jen jedna částice alfa jako taková a že se pohybuje kmitavým pohybem podél průměru jádra, je

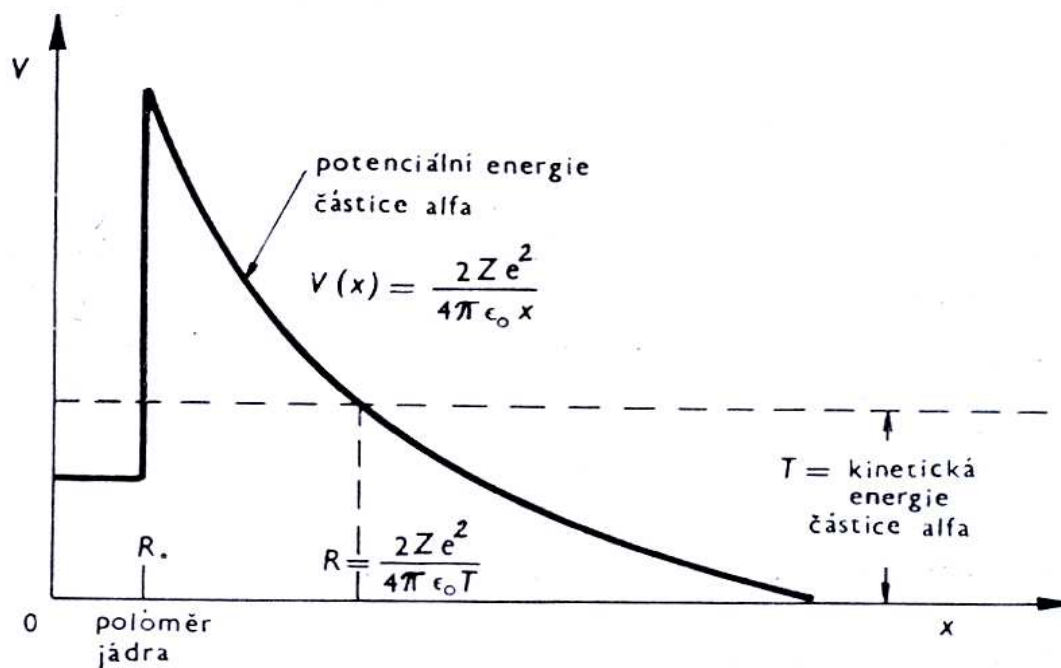
$$\nu = \frac{u}{2R}, \quad (3.501)$$

kde  $u$  je rychlost částice alfa v okamžiku, kdy opouští jádro, a  $R$  je poloměr jádra. Typické hodnoty  $u$  a  $R$  jsou přibližně  $2 \cdot 10^7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ , resp.  $10^{-14} \text{ m}$ , takže

$$\nu \approx 10^{21} \text{ s}^{-1}. \quad (3.502)$$

Částice alfa naráží na stěny svého "vězení"  $10^{21}$  krát za vteřinu, a přesto může čekat v průměru až  $10^{10}$  let, než z některých jader unikne! Jelikož je  $V > E$ , předpovídá klasická fyzika pravděpodobnost průchodu  $P = 0$ .

Obr. 3.20



Potenciální energie částice alfa jako funkce její vzdálenosti od středu jádra.

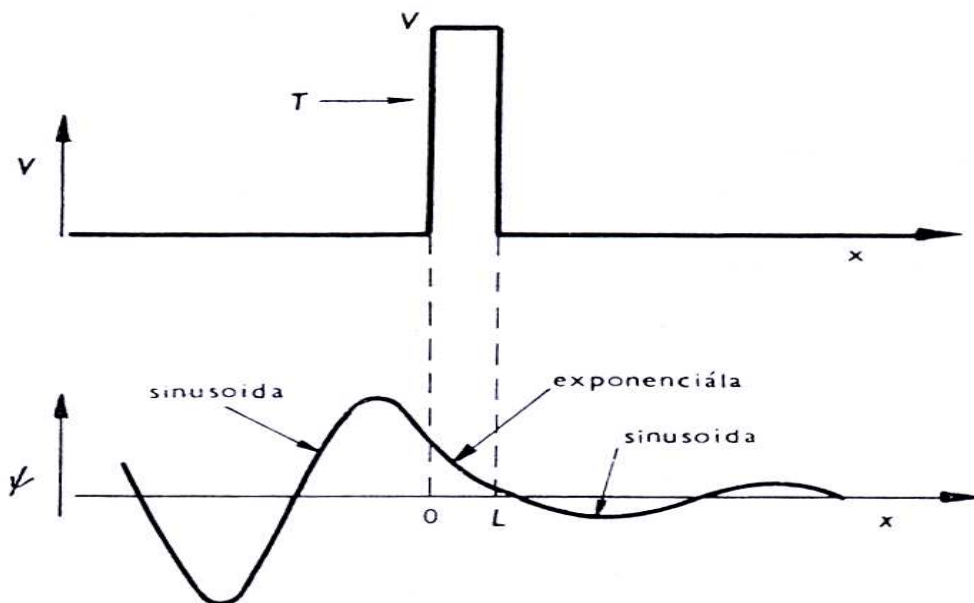


V kvantové mechanice uvažujeme pohybující se částici alfa jako vlnu a výsledkem je malá, ale nenulová hodnota  $P$ . Tato překvapivá skutečnost dostala název **tunelový jev**.

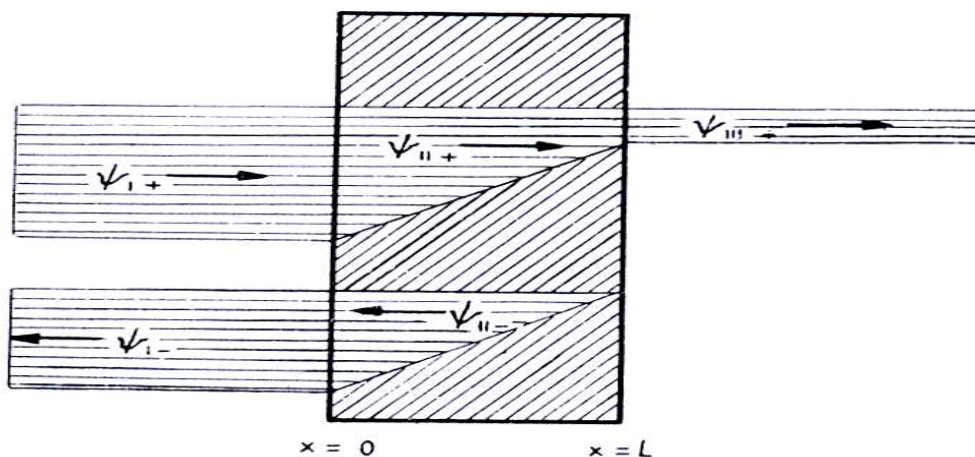
### b) Tunelový jev

Uvažujme případ svazku částic s kinetickou energií  $T$  dopadající zleva na potenciálovou překradu o výšce  $V$  a šířce  $L$  jako na obr. 3.21.

Obr. 3.21



Svazek částic může „prosakovat“ konečnou překradou.



Schematická ilustrace průniku překradou.

Na obou stranách od překrady je  $V = 0$ , což znamená, že na částice tady nepůsobí žádné síly. V těchto oblastech Schrodingerova rovnice

pro částici zní

$$\frac{\partial^2 \psi_I}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} T \psi_I = 0, \quad (3.503)$$

a

$$\frac{\partial^2 \psi_{III}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} T \psi_{III} = 0. \quad (3.504)$$



George Gamow (1904 – 1968)

Předpokládejme, že

$$\begin{aligned} \psi_I &= A \exp(iax) + B \exp(-iax), \\ \psi_{III} &= E \exp(iax) + F \exp(-iax) \end{aligned} \quad (3.505)$$

jsou řešení rovnice ( 3.503 ), resp. ( 3.504 ). Různé členy v těchto výrazech lze snadno interpretovat. Jak schematicky ukazuje obr. 3.21, je  $A \exp(iax)$  vlna s amplitudou  $A$ , dopadající zleva na přehradu, tj.

$$\psi_{I+} = A \exp(iax). \quad (3.506)$$

Tato vlna odpovídá dopadajícímu svazku částic v tom smyslu, že  $|\psi_{I+}|^2$  je jejich hustota pravděpodobnosti. Je-li  $u$  tzv. **grupová**

**rychlost vlny**, která odpovídá rychlosti částice, pak  $|\psi_{I+}|^2 \cdot u$  je proud částic dopadajících na překradu. V místě  $x = 0$  dopadající vlna naráží na překradu a částečně se odráží, takže

$$\psi_{I-} = B \exp(-iax) \quad (3.507)$$

představuje odraženou vlnu. Je tedy

$$\psi_I = \psi_{I+} + \psi_{I-} . \quad (3.508)$$

Na druhé straně do překrady ( $x > L$ ) se může vyskytovat jen vlna

$$\psi_{III+} = E \exp(iax) \quad (3.509)$$

šířící se ve směru  $+x$ , neboť podle předpokladu v oblasti III není nic, co by mohlo vlnu odrážet. Je tudíž

$$\psi_{III} = \psi_{III+} = E \exp(iax). \quad (3.510)$$

Dosazením  $\psi_I$  a  $\psi_{III}$  zpět do příslušných diferenciálních rovnic dostaneme

$$a = \sqrt{\frac{2mT}{\hbar^2}} . \quad (3.511)$$

Je zřejmé, že pravděpodobnost průniku  $P$  částice překradou je poměr

$$P = \frac{|\psi_{III}|^2}{|\psi_{I+}|^2} = \frac{EE^*}{AA^*} \quad (3.512)$$

mezi hustotou pravděpodobnosti výskytu procházejících a dopadajících částic.

Klasicky je  $P = 0$ , neboť klasická částice nemůže existovat uvnitř překrady. Podívejme se, jaký je kvantověmechanický výsledek.

V oblasti II je Schrödingerova rovnice pro částici

$$\frac{\partial^2 \psi_{II}}{\partial x^2} + \frac{2m}{\hbar^2} (T - V) \psi_{II} = 0. \quad (3.513)$$

Její řešení je

$$\psi_{II} = C \exp(-ibx) + D \exp(ibx), \quad (3.514)$$

kde

$$b = \sqrt{\frac{2m(T - V)}{\hbar^2}}. \quad (3.515)$$

Jelikož je  $V > T$ , je  $b$  imaginární a můžeme definovat nové vlnové číslo  $b' \geq 0$  vztahem

$$b' = ib = \sqrt{\frac{2m(V - T)}{\hbar^2}}. \quad (3.516)$$

Máme tedy

$$\psi_{II} = C \exp(-b'x) + D \exp(b'x). \quad (3.517)$$

Člen

$$\psi_{II+} = C \exp(-b'x) \quad (3.518)$$

je exponenciálně klesající vlnová funkce, jež odpovídá neoscilujícímu vzruchu, který se šíří směrem doprava přehradou. Uvnitř přehrady se část vzruchu odrazí a

$$\psi_{II-} = D \exp(b'x) \quad (3.519)$$

je vlnová funkce, jež odpovídá odraženému vzruchu a exponenciálně

roste zprava doleva.

I když  $\psi_{II}$  nekmitá, a nepředstavuje tudíž pohybující se částici s kladnou kinetickou energií, není hustota pravděpodobnosti  $|\psi_{II}|^2$  nula: existuje určitá pravděpodobnost výskytu částice v přehradě. Částice, která se neodrazí na druhém konci přehrady, zde vystupuje do oblasti III se stejnou kinetickou energií  $T$ , jakou měla původně, a její vlnová funkce bude  $\psi_{III}$  neboť částice pokračuje v nerušeném pohybu ve směru  $+x$ . V limitě nekonečně široké přehrady je  $\psi_{III} = 0$ , odkud plyne, že všechny dopadající částice se odrážejí. K odrazu však dochází *uvnitř* přehrady, nikoli na její levé krajní stěně, takže přehrada konečné tloušťky dovoluje průchod zlomku  $P$  počátečního svazku částic.

K výpočtu  $P$  musíme stanovit hraniční podmínky pro  $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$ .

Obr. 3.21 je schematickým znázorněním vlnové funkce v oblasti I, II a III, které nám může pomoci představit si hraniční podmínky. Jak jsme viděli v kap. 1, musí být jak  $\psi$ , tak její derivace všude spojitá. Podle obr. 3.21 tyto podmínky znamenají, že na každé stěně přehrady musí mít vlnové funkce vně i uvnitř nejenom stejnou hodnotu, ale i stejnou směrnici, takže se dokonale spojují. Na levé krajní stěně přehrady ( $x = 0$ ) je tedy

$$\begin{aligned} \psi_I &= \psi_{II} , \\ \frac{\partial \psi_I}{\partial x} &= \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} \end{aligned} \quad (3.520)$$

a na pravé krajní stěně ( $x = L$ )

$$\begin{aligned} \psi_{II} &= \psi_{III} , \\ \frac{\partial \psi_{II}}{\partial x} &= \frac{\partial \psi_{III}}{\partial x} , \end{aligned} \quad (3.521)$$

Dosazením  $\psi_I, \psi_{II}, \psi_{III}$  z (3.505), (3.517) a (3.510) do těchto vztahů dostaneme

$$\begin{aligned}
A + B &= C + D, \\
iaA - iaB &= -b'C + b'D, \\
C \exp(-b'L) + D \exp(b'L) &= E \exp(iaL), \\
-aC \exp(-b'L) + aD \exp(b'L) &= iaE \exp(iaL).
\end{aligned}
\tag{3.522}$$

Rovnice ( 3.522 ) lze snadno řešit. Dostaneme

$$\begin{aligned}
\frac{A}{E} &= \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{4}i \left( \frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(ia + b')L] + \\
&+ \left[ \frac{1}{2} - \frac{1}{4}i \left( \frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(ia - b')L].
\end{aligned}
\tag{3.523}$$

Komplexně sdružená veličina, kterou potřebujeme k výpočtu pravděpodobnosti  $P$  je

$$\begin{aligned}
\frac{A^*}{E^*} &= \left[ \frac{1}{2} - \frac{1}{4}i \left( \frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(-ia + b')L] + \\
&+ \left[ \frac{1}{2} + \frac{1}{4}i \left( \frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) \right] \exp[(-ia - b')L].
\end{aligned}
\tag{3.524}$$

Předpokládejme, že potenciálová překrada je vysoká vzhledem ke kinetické energii dopadající částice ( $b' > a$ ) a že je rovněž dostatečně široká, aby  $\psi_{II}$  byla mezi  $x = 0$  a  $x = L$  hodně tlumena ( $b' \gg 1$ ).

Můžeme pak aproximovat

$$\begin{aligned}
\left( \frac{b'}{a} - \frac{a}{b'} \right) &\approx \frac{b'}{a}, \\
\exp(b'L) &\gg \exp(-b'L).
\end{aligned}
\tag{3.525}$$

Vzorce ( 3.523 ) a ( 3.524 ) lze tedy aproximovat výrazy

$$\frac{A}{E} \approx \left( \frac{1}{2} + \frac{ib'}{4a} \right) \exp[(ia + b')L], \quad (3.526)$$

$$\frac{A^*}{E^*} \approx \left( \frac{1}{2} - \frac{ib'}{4a} \right) \exp[(-ia + b')L].$$

jejich vynásobením dostáváme

$$\frac{AA^*}{EE^*} = \left( \frac{1}{4} + \frac{b'^2}{16a^2} \right) \exp(2b'L), \quad (3.527)$$

takže pravděpodobnost průchodu je

$$P = \frac{EE^*}{AA^*} = \frac{16}{4 + \left( \frac{b'}{a} \right)^2} \exp(-2b'L). \quad (3.528)$$

Z definice  $a$  a  $b'$  plyne

$$\left( \frac{b'}{a} \right)^2 = \frac{V}{T} - 1, \quad (3.529)$$

je závislost koeficientu u exponenciely na  $T$  a  $V$  ve (3.528) zanedbatelná ve srovnání se závislostí exponenciely samé. Tento koeficient se navíc vždycky pohybuje zhruba mezi dvojkou a pětkou, takže můžeme přibližně psát

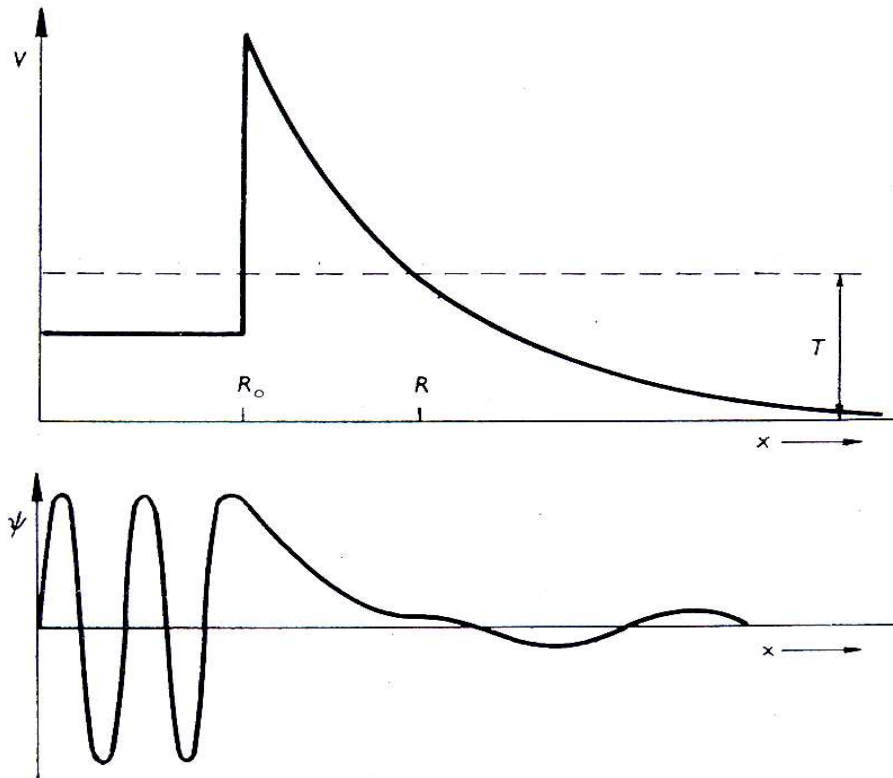
$$P \approx \exp(-2b'L), \quad (3.530)$$

neboli

$$\ln P \approx -2b'L, \quad (3.531)$$

je dobrou aproximací pravděpodobnosti průchodu.

Obr. 3.22



Rozpad alfa z hlediska vlnové mechaniky.

Vztah ( 3.531 ) byl odvozen pro pravoúhlou potenciálovou jámu, kdežto částice alfa uvnitř jádra naráží na potenciálový val  $V(x)$  proměnné výšky. Vztah ( 3.531 ) musíme proto nahradit přesnějším vyjádřením

$$\ln P = -2 \int_0^L b'(x) dx = -2 \int_{R_0}^R b'(x) dx, \quad ( 3.532 )$$

kde  $R_0$  je poloměr jádra a  $R$  vzdálenost od jeho středu, v níž je  $V = T$ . Ve větší vzdálenosti než  $R$  je kinetická energie částice alfa kladná a částice se může volně pohybovat.

$$V(x) = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x} \quad ( 3.533 )$$



je elektrostatičká potenciální energie částice alfa ve vzdálenosti  $x$  od středu jádra s nábojem  $Ze$  jádra ochuzeným o náboj  $2e$  částice alfa. Máme tedy

$$b' = \sqrt{\frac{2m}{\hbar^2} \left( \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 x} - T \right)}, \quad (3.534)$$

a jelikož  $T = V$  při  $x = R$ , je

$$b' = \left( \frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} \left( \frac{R}{x} - 1 \right)^{1/2}. \quad (3.535)$$

Je tudíž

$$\begin{aligned} \ln P &= -2 \int_{R_0}^R b'(x) dx = -2 \left( \frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} \int_{R_0}^R \left( \frac{R}{x} - 1 \right)^{1/2} dx = \\ &= -2 \left( \frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} R \left[ \arccos \left( \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} - \left( \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} \left( 1 - \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} \right]. \end{aligned} \quad (3.536)$$

Jelikož je potenciálová překrada poměrně široká, je  $R \gg R_0$  a

$$\begin{aligned} \arccos \left( \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} &\approx \frac{1}{2} \pi - \left( \frac{R_0}{R} \right)^{1/2}, \\ \left( 1 - \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} &\approx 1. \end{aligned} \quad (3.537)$$

Výsledkem je

$$\ln P = -2 \left( \frac{2mT}{\hbar^2} \right)^{1/2} R \left[ \frac{1}{2} \pi - 2 \left( \frac{R_0}{R} \right)^{1/2} \right]. \quad (3.538)$$

Dosazením z ( 3.534 )

$$R = \frac{2Ze^2}{4\pi\epsilon_0 T} \quad ( 3.539 )$$

dostaneme

$$\ln P = \frac{4e}{\hbar} \left( \frac{m}{\pi\epsilon_0} \right)^{1/2} (ZR_0)^{1/2} - \frac{e^2}{\hbar\epsilon_0} \left( \frac{m}{2} \right)^{1/2} ZT^{-1/2}. \quad ( 3.540 )$$

Kde kinetická energie alfačástice  $T$  je vyjádřena v MeV,  $R_0$  je ve fm ( $1\text{fm} = 10^{-15}\text{ m}$ ) a  $Z$  je atomové číslo jádra poté, co jej alfačástice opustila.

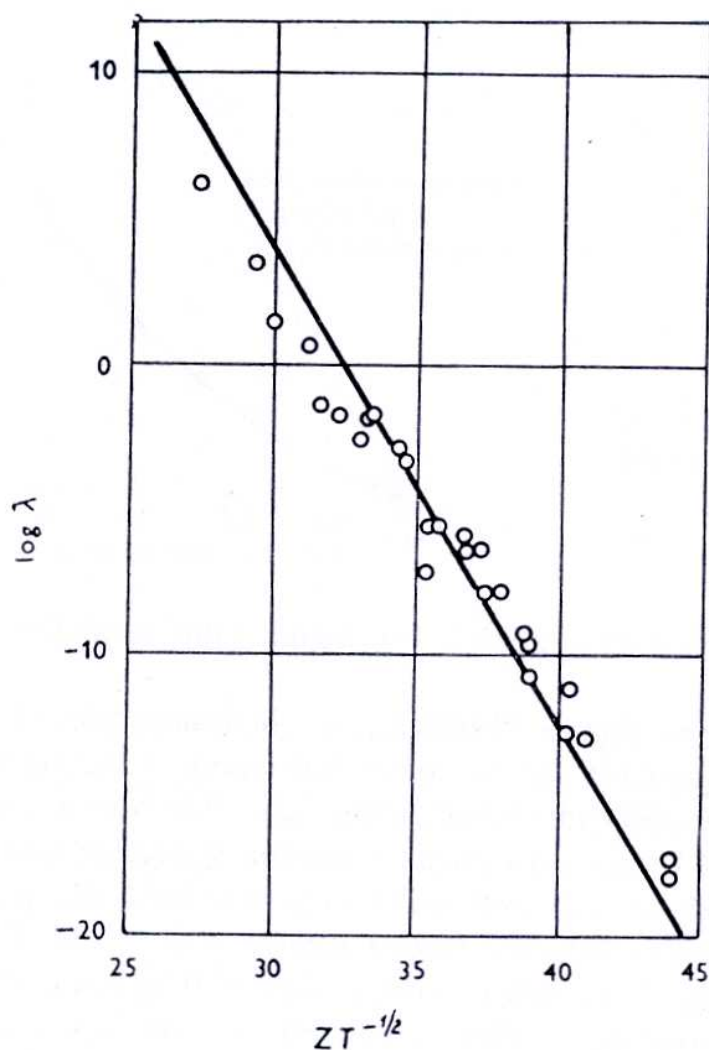
Pro rozpadovou konstantu  $\lambda$ , danou vtahem

$$\lambda = \nu P = \frac{u}{2R} P, \quad ( 3.541 )$$

lze tedy psát

$$\ln \lambda = \ln \frac{u}{2R} + \frac{4e}{\hbar} \left( \frac{m}{\pi\epsilon_0} \right)^{1/2} (ZR_0)^{1/2} - \frac{e^2}{\hbar\epsilon_0} \left( \frac{m}{2} \right)^{1/2} ZT^{-1/2}. \quad ( 3.542 )$$

Na obr. 3.23 je vynesena závislost ( 3.542 ) pro řadu alfaradioaktivních nuklidů (přímka) ve srovnání s experimentálními daty (body).



Obr. 3.23. Experimentální ověření teorie rozpadu alfa.

Kvantověmechanický rozbor vyzařování částic alfa, který je v úplném souladu s experimentálními údaji, je významný ze dvou důvodů. Předně umožňuje pochopit velikou závislost poločasu rozpadu na energii rozpadu. Nejpomalejší rozpad má  $^{232}_{90}\text{Th}$ , jehož poločas je  $1,3 \cdot 10^{10}$  let, a nejrychlejší rozpad  $^{212}_{84}\text{Po}$  s poločasem  $3,0 \cdot 10^{-7}$  s. Zatímco poločas rozpadu je u  $^{232}_{90}\text{Th}$   $10^{24}$  krát větší než u  $^{212}_{84}\text{Po}$ , je energie rozpadu  $^{232}_{90}\text{Th}$  (4,05 MeV) jen asi polovina hodnoty pro  $^{212}_{84}\text{Po}$  (8,95 MeV) - to je chování předpovídané vztahem ( 3.542 ). Druhým významným přínosem teorie rozpadu alfa je vysvětlení tohoto jevu pomocí průniku potenciálového valu částic, která nemá dost energie, aby překradu překonala. V klasické fyzice k takovému průniku nemůže dojít: míč hozený proti Čínské zdi má klasicky

pravděpodobnost průchodu 0%. V kvantové mechanice není pravděpodobnost o mnoho větší než 0%, ale *není* identicky rovna 0.

### c) Rozpad beta

Při výzkumu radioaktivity  $\beta$  se fyzika poprvé a bezprostředně seznámila s novým typem interakce – s interakcí slabou – která se výrazně liší od ostatních tří přírodních sil: interakce silné, elektromagnetické a gravitační. Klasický rozpad  $\beta$ , tj  $\beta^-$  probíhá podle schématu



Na levé straně je jádro s  $A$  nukleony a  $Z$  protony, ležící mimo linii stability vůči rozpadu  $\beta$ , na pravé straně máme jádro, které při rozpadu  $\beta^-$  vzniká. Má stejný počet nukleonů, ale protonové číslo je o jednotku větší ve srovnání s původním jádrem. Při rozpadu vzniká elektron  $e^-$  a elektronové antineutrino  $\bar{\nu}$ .

K rozpadu  $\beta$  může dojít jedině tehdy, probíhá-li v souladu s relativistickým zákonem zachování energie

$$E(A, Z) = E(A, Z + 1) + E_e + E_{\bar{\nu}} \quad ( 3.544 )$$

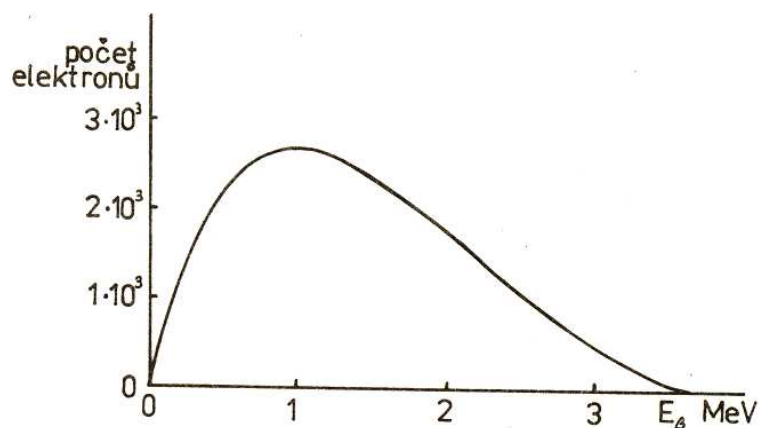
a proto separační energie

$$S_e(A, Z) = c^2 [M(A, Z + 1) + m_e + m_{\bar{\nu}} - M(A, Z)] \quad ( 3.545 )$$

musí být záporná. Původně se relace ( 3.543 ) psala bez neutrina, neboť o jeho existenci se nevědělo. Pozorované spektrum vyzařovaných elektronů však neodpovídalo relativistickému zákonu zachování energie a hybnosti pro rozpad jádra na dvě částice.

V takovém případě bychom očekávali diskrétní spektrum energií elektronů. Experiment však dával zcela průkazně spojité spektrum energie elektronů od prakticky nulové kinetické energie elektronu, až do jeho maximální energie dovolené zákonem zachování.

Obr. 3.24

Spektrum kinetické energie  $E_\beta$  elektronů pro rozpad jádra  $^{30}_{15}\text{P}$ .

Na základě těchto experimentálních poznatků vyslovil Wolfgang Pauli v roce 1931 hypotézu, že rozpad  $\beta$  není rozpadem na dvě, alebrž tři částice, z nichž jedna je právě neutrino.

Pauli nejprve nazval novou částici neutron. Když však Enrico Fermi v roce 1932 dostal otázku, zda je to stejný neutron jako Chadwickův, odpověděl: „ne, Pauliho neutron je mnohem menší – je to takové neutrino“ (tj. „malý neutronek“). Slovo míněné původně jako žert se ujalo a tajemná částice získala úřední název. Fermi vydobyl neutrino novou vážnost v roce 1934, kdy vytvořil první teorii rozpadu  $\beta$ . Fermiho teorii získalo neutrino ve fyzice své pevné místo, avšak mnoho fyziků se smířilo s názorem, že je to pouhá berlička pro záchranu zákona zachování energie, kterou nikdy nikdo neuvidí. První výpočty totiž naznačovaly, že tyto částice mohou urazit v hmotném prostředí až desítky světelných let, aniž by s něčím zainteragovaly, což je pro lovce částic dosti nevábná perspektiva.

Na počátku 50. let se však dva američtí fyzikové Clyde Cowan a Fred Reines, kteří pracovali za války v Los Alamos, začali vážně zabývat myšlenkou detekovat neutrina vzniklá při pokusném jaderném výbuchu. Když se snažili vyvinout aparaturu, které by přežila explozi, uvědomili si, že neutrino vznikají rovněž v jaderném reaktoru, který je pro experimentální účely daleko vhodnější.



Clyde Lorrain Cowan (1919 - 1974)



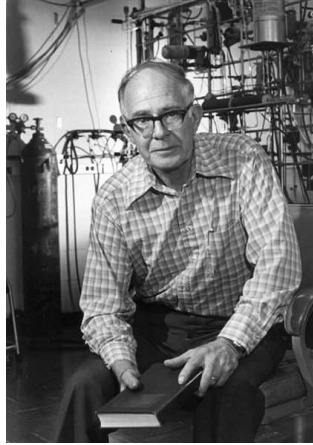
Frederick Reines (1918 - 1998)

V roce 1953 začali pracovat na projektu Poltergeist. Postavili před jaderný reaktor nádrže s deseti tunami roztoku kadmia a okolo nádrží rozmístili G – M počítače. Reaktor produkoval více než  $10^{12}$  neutrin na  $\text{mm}^2$  za sekundu. Tento obrovský počet nakonec vyvážil nepatrný účinný průřez interakcí neutrin s jádrem kadmia, takže detektor registroval v průměru 3 neutrina za hodinu.

Experimentální důkaz existence neutrina znamenal zásadní průlom v porozumění radioaktivitě  $\beta$ . Spojitost spektra energie elektronů emitovaných při  $\beta$ -rozpadu je nyní již lehce pochopitelná.

Je-li např. vyzářeno neutrino s maximální možnou energií, může elektron získat pouze svoji energii klidovou, a naopak při emisi elektronu s energií velmi blízkou maximální, ponese neutrino energii velmi blízkou nule. Všechny energie elektronu v uvedeném intervalu jsou tak dovoleny.

Původní Fermiho teorie předpokládala, že klidová energie neutrina je přesně nulová. Když však roku 1970 začal nositel nobelovy ceny za fyziku Raymond Davis na dně zlatého dolu Homestake v Jižní Dakotě (1,5 km pod povrchem) s pomocí obřího válcového detektoru naplněného 615 tunami perchloretylénu (látky používané v čistírnách oděvů) registrovat první přírodní neutrina vycházející z nitra Slunce, začalo postupně vycházet najevo, že s našimi představami o neutrinech není cosi v pořádku.



**Raymond Davis (1914 – 2006)**

Již v roce 1946, navrhl význačný italský fyzik Bruno Pontecorvo použít pro zachycení některých neutrin s vyšší energií (větší než 0,814 MeV) vznikajících v centru Slunce jádro chlóru, které se může po srážce s neutrinem přeměnit na radioaktivní jádro argonu.

Radioaktivní rozpad argonu pak lze zaznamenat. Odtud je patrné, proč byla celá nádrž umístěna hluboko pod zemí: je třeba odstínit kosmické záření, které by mohlo způsobovat stejný efekt.

V Davisově nádrži se nacházelo asi  $10^{30}$  atomů chlóru, kterými každou sekundu pronikaly stovky bilionů ( $10^{14}$ ) neutrin. Z tohoto obrovského počtu měl Davis zachytit pouze zhruba dvě neutrina za 3 dny. Přes důmyslnost metody byly výsledky pozorování ještě horší, než se očekávalo: Davisova aparatura zachycovala jen třetinu předpovězených neutrin. Pozdější zdokonalené experimenty jen potvrdily, že přes veškeré snahy jsme na zemi schopni registrovat skutečně pouhou třetinu počtu slunečních neutrin, který předpovídá stelární astrofyzika.

Obr. 3.25



Tento rozpor teorie s experimentem, známý jako sluneční, či neutrinový skandál, se dočkal překvapivého rozuzlení v červnu roku 1998. Tehdy oznámil mezinárodní tým fyziků pracujících v Japonsku na největším neutronovém detektoru světa, že během 537 dnů měření zachytili 4 700 neutrin sekundárního kosmického záření. To vzniká ve výškách 10 – 20 km nad povrchem země při srážkách částic primárního kosmického záření přicházejícího z vesmíru, s molekulami atmosféry. Při těchto srážkách vznikají spršky nejrůznějších částic včetně neutrin, které pak „prší“ z výšky na zem. Obří neutrinový detektor nazvaný Superkamiokande leží na dně dolu, 1700 m pod horou Ikena, nedaleko Tokia a je naplněn 50 000 m<sup>2</sup> vody. Specialisté z USA, Japonska, Německa a Polska, kteří tam pracovali, zjistili, že neutrina mají klidovou hmotnost, byť nepatrnou. Protože neutrina jsou kvantové objekty, mají vlnové vlastnosti, a protože existují 3 druhy neutrin (elektronové, mionové a tauonové) které se od sebe liší svojí hmotností, dochází ve směsném poli všech tří druhů neutrin k vzájemné interferenci jejich vlnových funkcí, což vede k oscilacím



efektivní hmoty neutrin. Tyto oscilace teoreticky předpověděl již v roce 1957 Bruno Pontecorvo.

Předpokládá se, že neutrina oscilují, tedy mění vůni. To je možné pouze pokud mají nenulovou hmotnost. Byla pozorována oscilace mezi  $\nu_e$  a  $\nu_\mu$  pomocí detektoru Super Kamionande, která osvětlila proč detekujeme pouze zlomek z počtu slnečních neutrin, které bychom měli teoreticky najít.

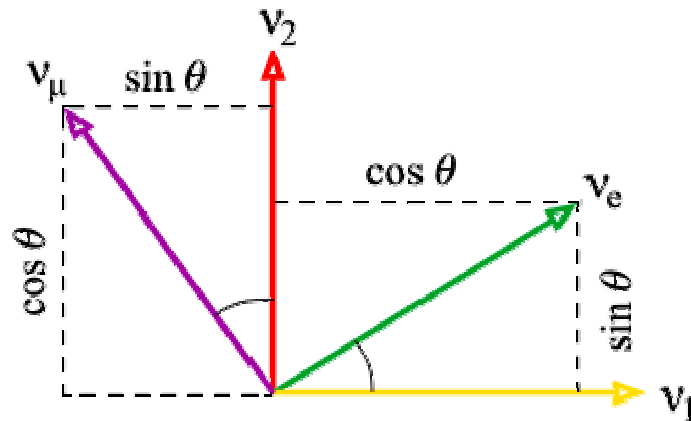
Oscilace neutrin spočívá v tom, že při slabých interakcích vznikají tzv. vlastní stavy vůně  $\nu_e$ ,  $\nu_\mu$  a  $\nu_\tau$ , částice které pozorujeme jsou však lineární kombinací tzv. hmotnostních vlastních stavů. Mixování probíhá podle matice  $\mathbf{P}_{\text{PMNS}}$  která je nazvaná podle svých objevitelů Pontecorva, Makiho, Nakagawy a Sakaty:

$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \\ \nu_\tau \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} & & \\ & \mathbf{P}_{\text{PMNS}} & \\ & & \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \\ \nu_3 \end{pmatrix} \quad (3.546)$$

Např. si pro jednoduchost můžeme představit 2 druhy neutrin (dvě vůně)  $\nu_e, \nu_\mu$  a 2 vlastní stavy hmotnosti,  $\nu_1, \nu_2$  které jsou navzájem propojené unitární maticí  $\mathbf{U}$ :

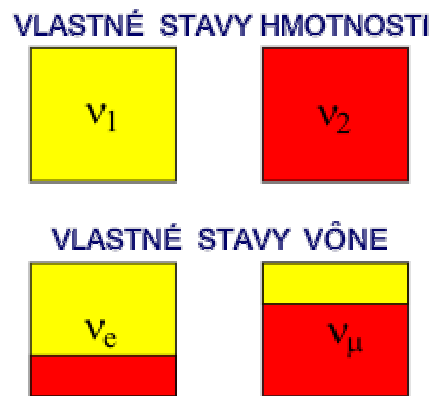
$$\begin{pmatrix} \nu_e \\ \nu_\mu \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix} = \mathbf{U} \begin{pmatrix} \nu_1 \\ \nu_2 \end{pmatrix} \quad (3.547)$$

Tedy když si nakreslíme názorný obrázek, ihned uvidíme že mixážní matice provádí v podstatě pootočení v rovině o úhel  $\theta$ , tzv. mixážní úhel.



Takže stav neutrina se dá znázornit následujícím způsobem:

3.27



Vlastní stavy hmotnosti se však šíří jako vlny rozdílnými rychlostmi ve vakuu (3 hmotnosti neutrin) a tedy čistý stav původního neutrina se mění. Například z velkého počtu původních  $\nu_e$ , jednoho z produktů termojaderné reakce v naší nejbližší hvězdě, se na Zemi detekují též  $\nu_\mu$  nebo  $\nu_\tau$ .

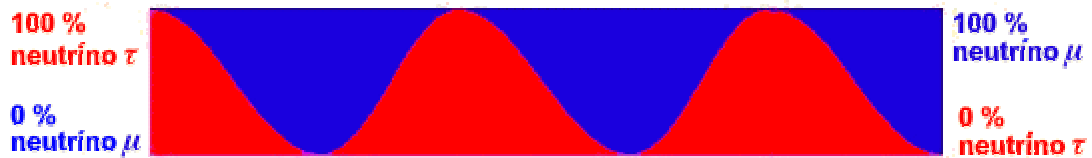
Neutrina oscilují mezi vůněmi podle rovnice, která sa dá jednoduše odvodit:

$$P_{\alpha \rightarrow \beta} = \sin^2(2\theta) \sin^2\left(1,27 \frac{L(m_1^2 - m_2^2)}{E}\right), \quad (3.548)$$

kde  $P_{\alpha \rightarrow \beta}$  je pravděpodobnost oscilace mezi dvěma vůněmi,  $\Delta m^2$  je rozdíl kvadrátů hmotností v  $\text{eV}^2$ ,  $L$  vzdálenost v km od zdroje,  $E$

energie neutrína v GeV. Znázornění oscilací je na následujícím obrázku, kde je modro-červenou barvou zobrazen časový vývoj složení neutrína.

3.28



**Bruno Pontecorvo (1913 – 1993)**



**Ziro Maki ( 1931 )**



**Masami Nakagawa ( 1958 )**



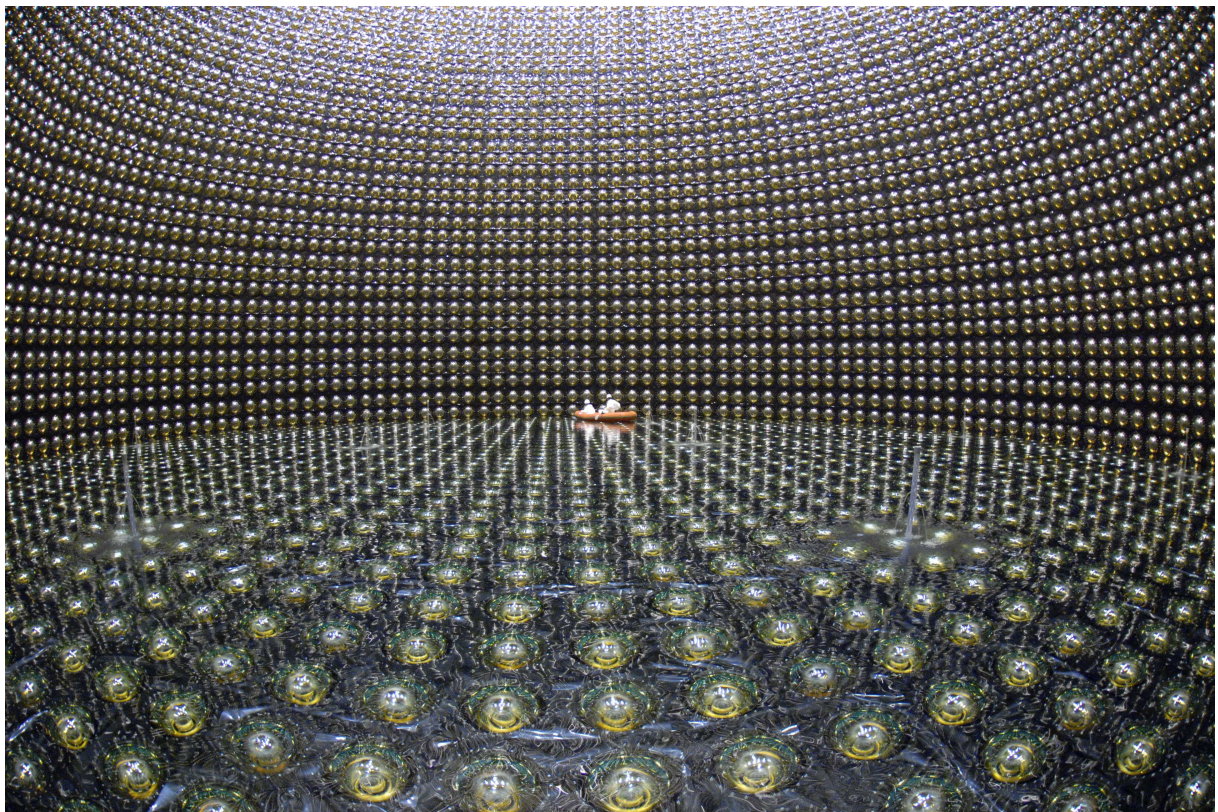
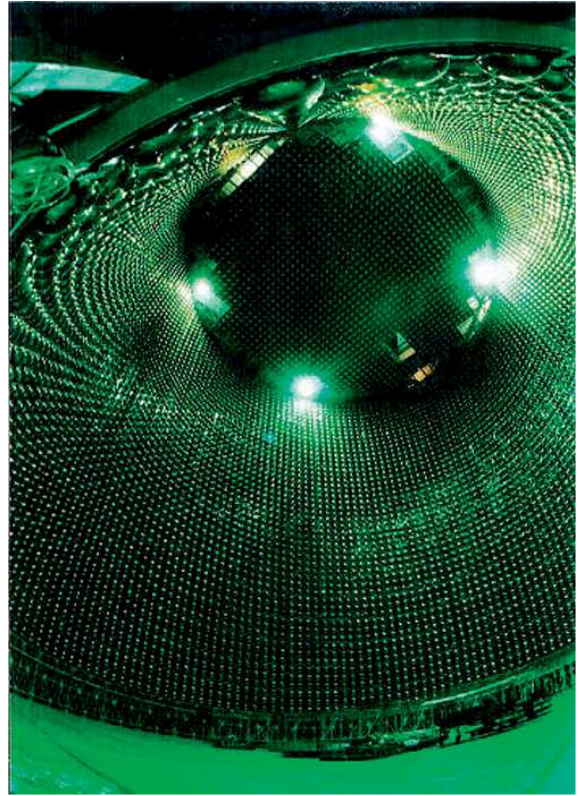
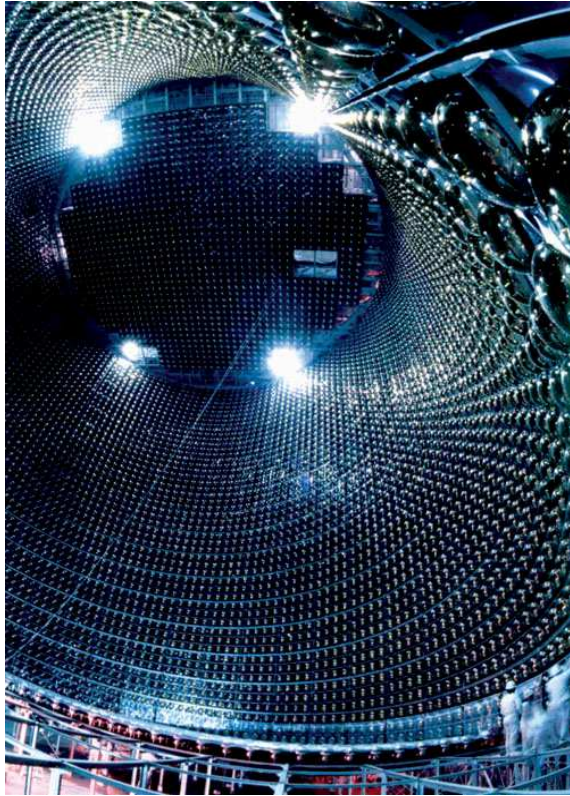
**Shoichi Sakata (1911 – 1970)**

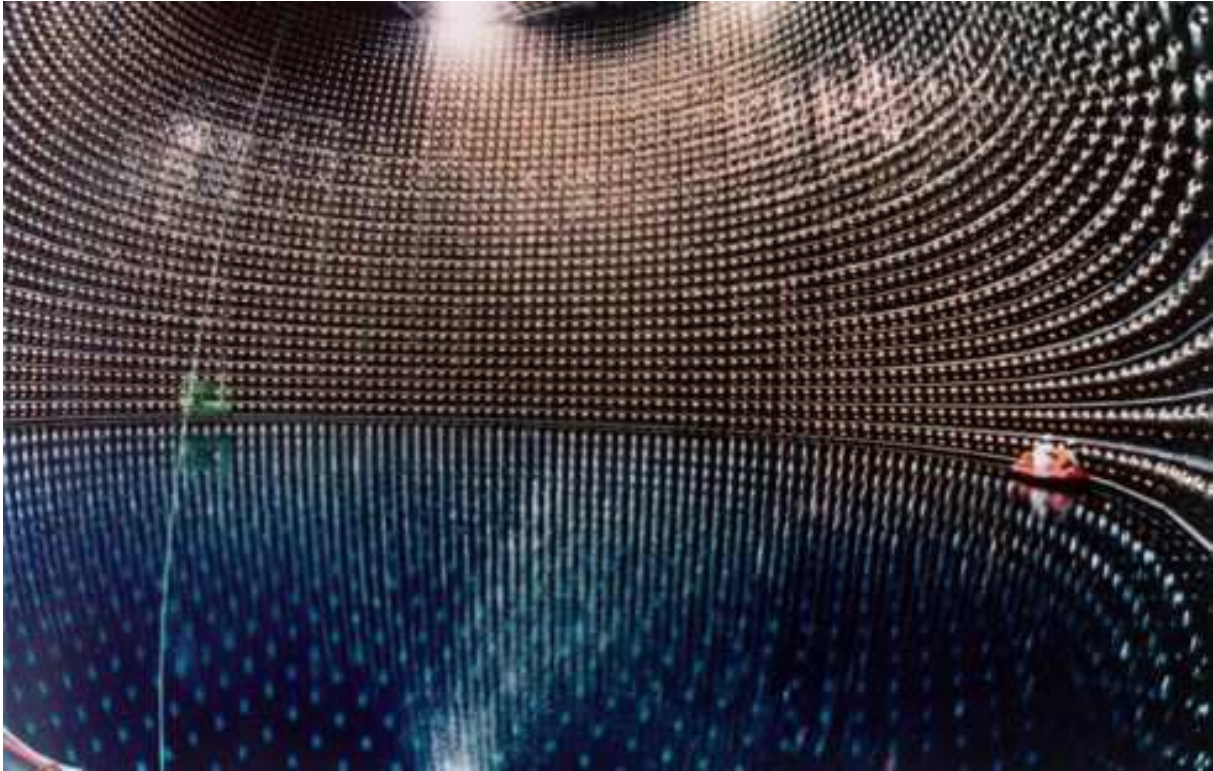
Pod horou Ikena se podařilo detekovat nejen neutrína samotná, ale i směr ze kterého do detektoru přilétají. Zatímco neutrína letící přímo shora překonají vzdálenost pouze několika kilometrů, neutrína

přicházející z opačné strany Zeměkoule urazí vzdálenost téměř 13 000 kilometrů. Zjistilo se, že z čím větší vzdálenosti neutrino přicházejí, tím jich efektivně interaguje méně. Tento rozdíl způsobují oscilace – při delším letu zasáhne detektor jiná část vlnového klubka vzájemně interferujících neutrin, která má menší efektivní hmotnost a menší diferenciální účinný průřez pro interakci neutrin s detektorem. Hmotnost neutrin je v současnosti předmětem rozsáhlých měření, která se provádějí pomocí detektorů rozmístěných v různé vzdálenosti od jaderného reaktoru a přesně proměřujících neutrinové oscilace,

3.29







Obr. 3.30 – Vyprázdňená nádrž obřího neutrinového detektoru Superkamioka, se stěnami pokrytými 13 000 výkonnými fotonásobiči.

Maximální energie vyzářených elektronů při  $\beta$ -rozpadu se pohybují v intervalu od 20 keV u  ${}^3_1\text{H}$  až po 13,4 MeV u  ${}^{12}_5\text{B}$ . Rozpadu  $\beta$  podléhají jak izotopy velmi lehkých jader, tak i izotopy středně těžkých a nejtěžších jader. U těžších jader začíná s rostoucím  $Z$  převládat konkurenční rozpad  $\alpha$  a jiné druhy rozpadu. Poločas rozpadu  $\beta$  daného nuklidu patří k jedné z jeho základních charakteristik. Z rozboru ( 3.543 ) se snadno přesvědčíme, že při něm platí nejen zákon zachování momentu hybnosti, ale také zákon zachování elektrického náboje.

V polovině třicátých let minulého století zjistili manželé I. Curieová a F. Joliot – Curie, že při ostřelování některých jader částicemi  $\alpha$  vznikají jádra, která se rozpadají do té doby neznámým způsobem.



**Frédéric Joliot-Curie (1900 – 1958),  
Irene Joliot-Curie (1897 – 1956)**

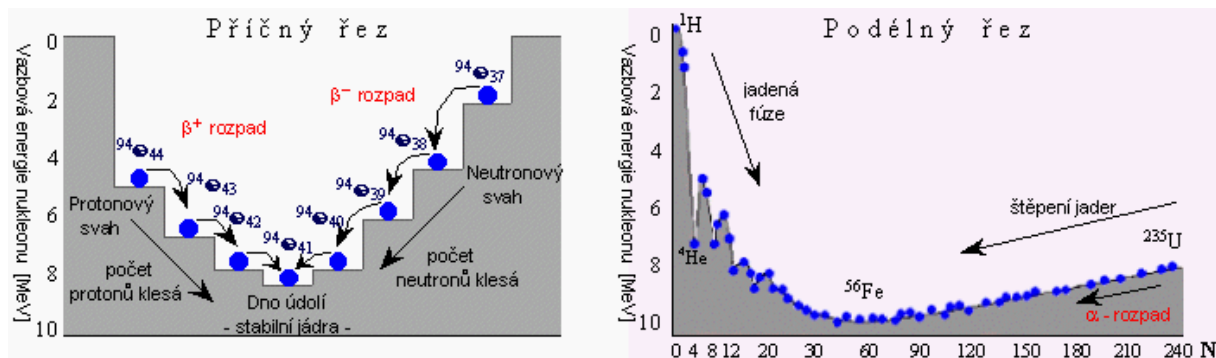
Jednalo se o proces, který je variantou rozpadu  $\beta$ , zvanou  $\beta^+$ , a který probíhá na rozdíl od ( 3.543 ) podle schématu



Při rozpadu  $\beta^+$  se počet nukleonů  $A$  jádra zachovává, ale počet protonů klesá o jednotku.

Současně s přechodem nového systému nukleonů do nižšího energetického stavu se vyzařuje dvojice leptonů – pozitron a elektronové neutrino. Interval energií pozitronů emitovaných z jádra v tomto typu radioaktivity je shodný s intervalem energií elektronů vyzařených při rozpadu  $\beta^-$  podle schématu ( 3.543 ). Podobně je tomu se středními dobami života jader vyzařujících pozitrony a neutrina. Jádra podléhající tomuto druhu rozpadu leží převážně pod linií stability.

Obr. 3.31



Třetím typem reakce, která náleží do této skupiny je proces zvaný **K-záchyt**. U těžších prvků, u nichž existuje jistá, ne zcela mizivá pravděpodobnost výskytu elektronu ze slupky K uvnitř jádra, může dojít k jeho zachycení jádrem, které je provázeno vyzářením neutrina. Schéma této reakce je



Oba dva procesy ( 3.549 ), ( 3.550 ) si mohou navzájem konkurovat. Probíhají v souladu s relativistickým zákonem zachování energie a jsou možné tehdy, pokud výsledné jádro bude mít nižší energetický stav než jádro původní.

Jedním ze zajímavých příkladů pro všechny 3 procesy ( 3.543 ), ( 3.549 ), ( 3.550 ) je licho – liché jádro bromu  ${}^{80}_{35}\text{Br}$ , které má poločas rozpadu 18 minut a používá všech tří možností, aby se změnilo na jádro sudo – sudé o nižším energetickém stavu:



Všechny tři uvedené procesy, které dnes zahrnujeme do radioaktivity  $\beta$  mají společný základ v nestabilitě nukleonu. Neutron má klidovou energii větší, než proton. To mu dovoluje rozpadnout se podle schématu



které je základem radioaktivity  $\beta^-$ .

Proton vázaný v jádře se může rozpadnout jen tehdy, nalézá-li se na dostatečně vysoké energetické hladině a poté přeskočí na některou volnou neutronovou hladinu, která leží níže. V takovém případě nastane děj





kde závorky označují, že k uvedenému rozpadu může dojít pouze tehdy, jsou-li částice v závorkách vázané jádrem.

Za stejných podmínek může proton zachytit elektron ze slupky  $K$  a stát se neutronem:



V druhé polovině padesátých let vyslovili na základě poznatků z fyziky elementárních částic *T. D. Lee* a *C. N. Yang* a nazávisle na nich *L. D. Landau* pochybnosti o tom, že se při slabých interakcích zachovává parita. Rozhodující experiment, který tuto otázku vyjasnil, byl proveden pod vedením čínské fyzičky *C. S. Wu* v roce 1957 ve Spojených státech amerických. Idea experimentu je následující: Budeme mít beta radioaktivní jádra daného nuklidu orientovaná tak, aby jejich spiny byly „paralelní“ a budeme určovat počty elektronů vyzářených do různých prostorových úhlů. Mějme tedy orientované jádro se spinem  $\mathbf{I}$  a  $\mathbf{p}$  necht' je hybnost elektronu  $e^-$  vyzářeného do prostorového úhlu  $\Delta\Omega$ . S pomocí detektoru zaznameneáme počet elektronů vyzářených do vybraného prostorového úhlu. Provedme nyní inverzi souřadnic, tj. substituci

$$\mathbf{x} \rightarrow -\mathbf{x}. \quad (3.555)$$

Při této transformaci se bude hybnost transformovat podle zákona

$$\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p} \quad (3.556)$$

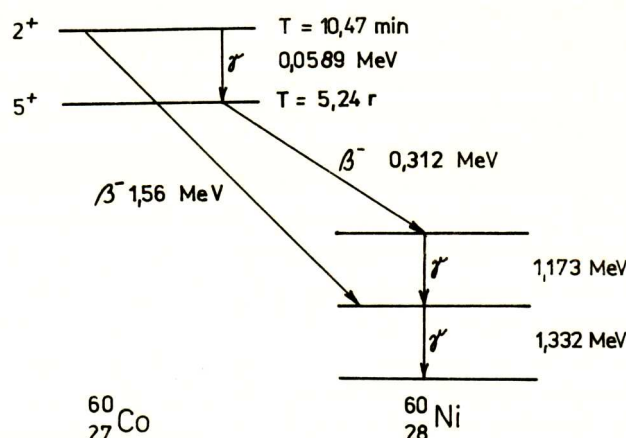
a spin vzhledem k tomu, že je to moment hybnosti (tzn. axiální vektor), podle zákona

$$\mathbf{I} \rightarrow \mathbf{I} \quad (3.557)$$

Kdyby uvažovaný proces byl invariantní vůči prostorové inverzi (3.555), musel by zřejmě počet elektronů vyslaných s hybností  $p$  být stejný jako počet elektronů vyslaných s hybností  $-p$ . Výsledek experimentu však jednoznačně prokázal, že počty elektronů vyslané

v opačných směrech jsou různé. Toto zjištění bylo řadou nezávislých a také podstatně odlišných experimentů plně potvrzeno, a proto lze konstatovat, že při dějích probíhajících pod vlivem slabé interakce *se parita nezachovává*. Tento objev patří k jednomu z významných objevů jaderné fyziky.

Obr. 3.31



Pro pokus paní Wu bylo vybráno jádro nuklidu kobaltu  $^{60}\text{Co}$ . Při teplotě  $\sim 0,01\text{ K}$  byla jádra magnetickým polem zorientována. Kromě elektronů byla při pokusu detekována také vyzářená kvanta  $\gamma$ . Na obr. 3.31 je schéma rozpadu jádra kobaltu, v němž jsou uvedeny známé hodnoty energií vyzářených částic v MeV, poločasy rozpadu energetických stavů (hladin) a spin i parita energetických hladin. Z rozpadového schématu je patrné, že experiment a jeho vyhodnocení zdaleka nebyly jednoduché. Kromě toho obrázek demonstruje, že k rozpadu  $\beta$  nedochází pouze při přechodu ze základního stavu mateřského jádra do základního stavu dceřiného jádra, ale že se může jednat podobně jako u radioaktivity  $\alpha$  i o přechody mezi vzbuzenými stavy nebo mezi vzbuzenými a základním stavy.

#### d) Rozpad gama a vnitřní konverze

Jak při rozpadu  $\alpha$ , tak při rozpadu  $\beta$  jsme poznali, že jádro, které se v tomto procesu vytváří, nemusí vzniknout v základním stavu. Jádro je obecně vázaným systémem protonů a neutronů, a protože protony nesou kladný elementární náboj a obě částice, proton i neutron interagují elektromagneticky, neboť neutron má magnetický moment,

můžeme oprávněně očekávat, že u jádra budou pozorovatelné i spontánní radiační přechody. Jejich projevem je i zjištěná radioaktivita  $\gamma$ , ve skutečnosti vyzáření fotonů  $\gamma$  o relativně vysoké energii. Na obr. 3.31 jsou uvedeny vedle přechodů beta i radiační přechody mezi vzbuzenými stavy a mezi vzbuzeným stavem a stavem základním. Odtud plyne, že radiační přechody budou běžně doprovázet první dva radioaktivní rozpady.

Vyzařování kvant gama v uvažovaném ději nevede na rozdíl od předchozích rozpadů ani ke změně počtu neutronů, ani ke změně počtu protonů, tedy ani ke změně prvku, ani ke změně izotopického stavu. Energetické spektrum těchto fotonů je diskrétní, protože se jedná o přechody mezi diskrétními energetickými hladinami počátečního stavu jádra o energii  $E_i$  a konečného stavu jádra o energii  $E_f$ . Energie fotonu je určena Bohrovou podmínkou

$$\hbar\omega = E_i - E_f, \quad E_i > E_f. \quad (3.558)$$

Máme zde tedy plnou analogii k tomu, co se odehrává při radiačních přechodech v obalu atomu. Proto můžeme říci také naopak, že čárové spektrum záření gama svědčí o existenci diskrétního energetického spektra jádra. Na základě Heisenbergovy relace neurčitosti pro souřadnici a hybnost můžeme očekávat že hybnost, a tedy i energie  $E = cp = \hbar\omega$  vznikajících fotonů při radiačních přechodech v jádře bude podstatně větší než energie fotonů vyzařovaných z atomového obalu. Tomu tak skutečně je a jejich energie leží převážně v intervalu (0,05 MeV, 10 MeV). Danému intervalu odpovídá interval vlnových délek  $\lambda$  příslušných vyzářeným fotonům ( $2,5 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ ,  $1,25 \cdot 10^{-13} \text{ m}$ ) a odtud plyne, že pro vlnové délky u fotonů  $\gamma$  platí podobné relace jako pro vlnové délky u fotonů vyzařovaných atomovým obalem

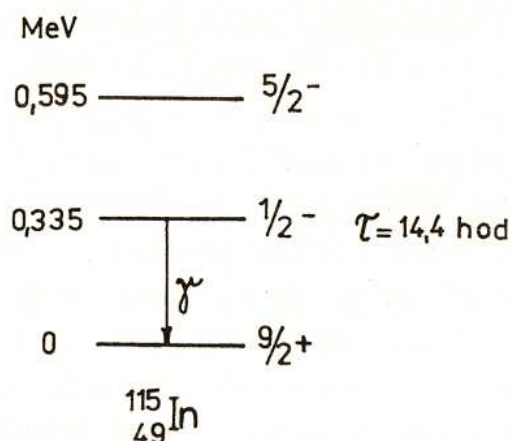
$$\lambda \gg R \quad (3.559)$$

kde nyní je  $R$  poloměrem jádra.

Střední doby života jader pro rozpad  $\gamma$  se nacházejí převážně v intervalu ( $10^{-7} \text{ s}$ ,  $10^{-11} \text{ s}$ ) a to znamená, že ta jádra, která vznikla po rozpadu  $\alpha$  nebo  $\beta$  v excitovaném stavu se zpravidla velmi rychle dostanou do základního stavu radiačním přechodem. Pro tyto

přechody platí podobně jako pro přechody v atomovém obalu řada výběrových pravidel. Pro jádra jsou však tato pravidla složitější, a proto je zde nebudeme explicitně uvádět. Možnosti některých přechodů jsou však výběrovými pravidly silně potlačeny a v takovém případě radiační přechod, který je dovolen z energetického hlediska, nastává s malou pravděpodobností. Jádro může potom poměrně dlouho setrvat v některém ze vzbuzených stavů, jeho stav se tak stává metastabilním a jádro v tomto stavu se nazývá *izomerem*. Jedním z typických příkladů izomerů je indium  $^{115m}_{49}\text{In}$ , jehož nejnižší energetické hladiny jsou na obrázku 3.32 uvedeny i se svými charakteristikami, spinem a paritou.

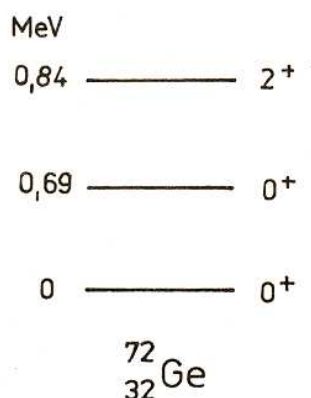
Obr. 3.32

Nejnižší energetické hladiny izomeru  $^{115m}_{49}\text{In}$  a nuklidu  $^{115}_{49}\text{In}$ .

Protože základní stav má spin a paritu rovné  $9/2^+$  a poněvadž první excitovaný stav se od něho liší nevelkou energií 0,335 MeV a má spin a paritu rovné  $1/2^-$ , musí při naznačeném přechodu mezi oběma stavy dojít k velké změně momentu hybnosti (spinu) jádra a relativně malé změně energie. Proto je tento přechod velmi nepravděpodobný. Střední doba života izomeru  $^{115}\text{In}$  ve stavu  $1/2^-$  je 14,4 hodiny, což je veličina o mnoho řádů větší než v obvyklém případě radiačního přechodu  $\gamma$ . Oblasti izomerních jader se nacházejí před tzv. **magickými čísly** 50, 82 a 126 v jejich blízkém okolí, patří k nim např. rtuť  $^{199}_{80}\text{Hg}$  s atomovým číslem  $Z = 80 < 82$ .

Nalézáme-li analogie mezi radiačními přechody v jádře a v atomovém obalu, je nezbytné také poukázat na to, že přechod jádra daného nuklidu ze vzbuzeného stavu do základního nemusí jít vždy cestou emise fotonu. U jader se setkáváme s jevem, který je svou povahou blízký fotoelektrickému jevu, nebo Augerovu jevu v atomovém obalu. U jader se jedná o tzv. **vnitřní konverzi**, nebo také elektronovou konverzi. Při elektromagnetické interakci excitovaného jádra s elektronem obalu může jádro předat elektronu celý přebytek své energie, a vyrazit tak elektron z atomu. Vzhledem k tomu, že tu jde opět o přechod jádra mezi energetickými stavy patřícími do diskrétního spektra, je energetické spektrum elektronů vyzářených při vnitřní konverzi čárové. Typický případ, v kterém nastává vnitřní konverze, je izotop germania  $^{72}_{32}\text{Ge}$ , jehož základní a první excitovaný stav mají stejný spin rovný nule a sudou paritu. Zákon zachování momentu hybnosti nedovoluje, aby došlo mezi těmito stavy k radiačnímu přechodu, neboť foton má spin rovný jedné. Při deexcitaci, která se tu často označuje 0-0 přechod, předá jádro germania elektronu energii 0,69 MeV a ten nabude kinetické energie rovnající se této hodnotě zmenšené o vazbovou energii elektronu.

Obr. 3.33

Nejnižší energetické hladiny jádra  $^{72}_{32}\text{Ge}$ .

Je-li vzdálenost mezi hladinami daného nuklidu větší než  $2m_e c^2$ , kde  $m_e$  je klidová hmotnost elektronu, a není-li mezi těmito hladinami dovolen radiační přechod, může jádro přejít do nižšího energetického stavu i tak, že se v jeho elektromagnetickém poli vytvoří pár pozitron a elektron, který odnese příslušnou energii. Tento jev, který lze

pozorovat např. při deexcitaci kyslíku  $^{16}_8\text{O}$ , je nazýván **dvojnou konverzí**. U uvedeného jádra kyslíku je to opět 0-0 přechod, při kterém se snižuje energie jádra o 6,1 MeV. Na dvojnou konverzi se nepodílí elektronový obal. Obě formy konverzního děje popisuje velmi přesně a ve shodě s experimentem kvantová teorie pole.

### e) Rozpadové řady

Známe dnes 264 *stabilních nuklidů*, zbývající nuklidy se samovolně rozpadají, tj. jsou radioaktivní, nebo se spontánně štěpí (je jich známo přes 3000). Radioaktivní procesy včetně štěpení probíhají tedy bez vnějšího zásahu. Jsou podmíněny možností přechodu daného nestabilního systému, jádra, do energeticky nižšího stavu, obecně nového systému. Každý ze tří klasických radioaktivních dějů je svou fyzikální podstatou odlišný. Při rozpadu  $\alpha$ , který je svojí povahou velmi blízký štěpení, se zformuje v jádře a vyzáří z něho částice  $\alpha$  čili jádro  $^4\text{He}$ , rozpad  $\beta$  je podmíněn rozpadem neutronu a jeho přeměny na proton a konečně rozpad  $\gamma$  je přechodem jádra z vyššího energetického stavu do nižšího, který je spojený s vyzářením fotonu, je to tedy radiační proces čili elektromagnetický přechod. Štěpení jader je podobně jako rozpad  $\alpha$  rozpadem jader přinejmenším na dvě obecně různá jádra.

Z předcházejícího výkladu víme, že existují i jiné typy radioaktivních rozpadů, např. vyzářením nukleonu z excitovaného stavu jader apod. Všechny tyto radioaktivní procesy podléhají stejnému statistickému zákonu rozpadu, kterému se později ještě věnujeme.

Podobně jako u vyzářování fotonů z atomového obalu se nemusí jednat pouze o přechody z vyššího energetického stavu do základního stavu atomu, ani u radioaktivních dějů nemusí jádra vznikající při rozpadu být již stabilními. Tak známe dokonce *radioaktivní řady*, které jsou poměrně dlouhé. Při rozpadu radionuklidu patřícího do radioaktivní řady vzniká obecně opět radionuklid. Dobře známé radioaktivní řady jsou: thoriová řada začínající nuklidem  $^{232}\text{Th}$ , neptuniová řada počínající  $^{237}\text{Np}$ , uranová začínající  $^{238}\text{U}$  a aktiniová, na jejímž začátku stojí  $^{235}\text{U}$ . Protože při rozpadu  $\alpha$  klesá číslo  $A$  o 4 a při rozpadu  $\beta$  se  $A$  nemění, lze radioaktivní rozpad v dané řadě charakterizovat zákonem udávajícím velikost nukleonového čísla  $A$

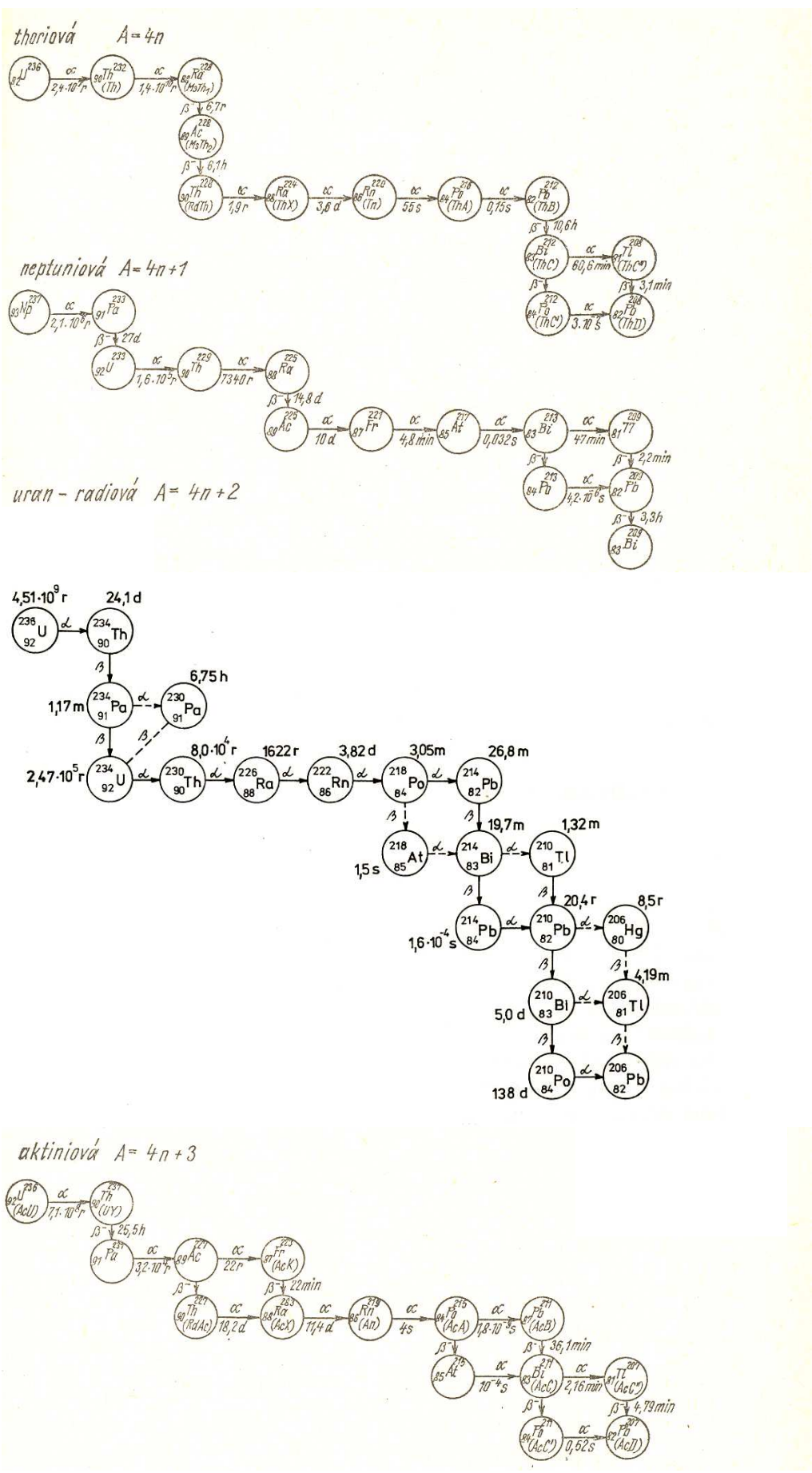
nuklidu v dané řadě

$$A = 4n + D, \quad n = \text{celé číslo}, \quad (3.560)$$

a  $D = 0$  pro thoriovou,  $D = 1$  pro neptuniovou,  $D = 2$  pro uranovou,  $D = 3$  pro aktiniovou řadu. Konečnými stabilními členy těchto řad je některý z izotopů olova  ${}_{82}\text{Pb}$ , u něhož je atomové číslo  $Z$  magickým, s výjimkou neptuniové řady, u níž je posledním nuklidem  ${}^{209}\text{Bi}$ , což je nejtěžší známý stabilní nuklid. Radioaktivní látky, případně radionuklidy, které nalézáme v přírodě, se nazývají často *přírozenými*, naopak radionuklidy vyrobené v jaderných reaktorech nebo s pomocí jaderných reakcí vyvolaných v terčiku po dopadu svazku urychlených částic nazýváme obvykle *umělými* radionuklidy. Mezi radionuklidy prvního a druhého druhu není však ostrá dělicí čára a uvedená klasifikace je proto spíše konvencí.

Jak je patrné z následujících tabulek, některé radionuklidy se mohou rozpadat několika různými způsoby. Tento poznatek se netýká jen radionuklidů, které jsou členy radioaktivních řad. Příslušný jev se nazývá **větvěním** a relativní pravděpodobnosti různých způsobů rozpadu se nazývají **větvící poměry**. Např. u nuklidu  ${}^{212}\text{Bi}$  se 64 % jader z daného výchozího množství mění rozpadem  $\beta$  na  ${}^{212}\text{Po}$  a 36 % rozpadem  $\alpha$  přechází na  ${}^{208}\text{Tl}$ . Proto jsou zde větvící poměry 64 % a 36 %.

Radioaktivní jádra charakterizujeme vedle obvyklých parametrů typem radioaktivního rozpadu, poločasem rozpadu, větvíci poměry a také energiemi vyzářených částic. K těmto datům přistupuje ještě aktivita  $A$  vzorku látky, jejíž jednotkou je *becquerel*, ( $\text{Bq} = \text{počet rozpadů za sekundu}$ ), nesoucí jméno objevitele radioaktivity. Podíl aktivity  $A$  a hmotnosti látky obsahující radionuklid nazýváme měrnou aktivitou  $a = A/m$  [ $\text{Bq} \cdot \text{kg}^{-1}$ ]. Hovoříme tedy o měrné aktivitě radionuklidu nebo prvku či sloučeniny, roztoku apod.





Název	Značka	Poločas rozpadu	Rozpad
Uran — radiová řada			
Uran I	$^{238}_{92}\text{U}$ UI	$4,5 \cdot 10^9$ r	
Uran X <sub>1</sub>	$^{234}_{90}\text{Th}$ UX <sub>1</sub>	24,1 d	
Uran X <sub>2</sub>	$^{234}_{91}\text{Pa}$ UX <sub>2</sub>	1,14 min	
Uran II	$^{234}_{92}\text{U}$ U II	$2,3 \cdot 10^5$ r	
Ionium	$^{230}_{90}\text{Th}$ Io	$8,3 \cdot 10^4$ r	
Radium	$^{226}_{88}\text{Ra}$ Ra	1 590 r	
Radon	$^{222}_{86}\text{Rn}$ Rn	3,825 d	
Radium A	$^{218}_{84}\text{Po}$ RaA	3,05 min	
Radium B	$^{214}_{84}\text{Pb}$ RaB	26,8 min	
Radium C	$^{214}_{82}\text{Bi}$ RaC	19,7 min	
Radium C'	$^{214}_{84}\text{Po}$ RaC'	$1,5 \cdot 10^{-4}$ s	
Radium C''	$^{210}_{81}\text{Tl}$ RaC''	1,32 min	
Radium D	$^{210}_{82}\text{Pb}$ RaD	22,2 r	
Radium E	$^{210}_{83}\text{Bi}$ RaE	5,04 d	
Radium F	$^{210}_{84}\text{Po}$ RaF	139 d	
Radium G	$^{206}_{82}\text{Pb}$ RaG	∞	
Thoriová řada			
Thorium	$^{232}_{90}\text{Th}$ Th	$1,39 \cdot 10^{10}$ r	
Mezothorium I	$^{228}_{88}\text{Ra}$ Ms-Th I	6,7 r	
Mezothorium 2	$^{228}_{89}\text{Ac}$ Ms-Th 2	6,13 h	
Radiothorium	$^{228}_{90}\text{Th}$ Rd-Th	1,90 r	
Thorium X	$^{224}_{88}\text{Ra}$ ThX	3,64 d	
Thoron	$^{220}_{86}\text{Rn}$ Tn	54,5 s	
Thorium A	$^{216}_{84}\text{Po}$ ThA	0,158 s	
Thorium B	$^{212}_{82}\text{Pb}$ ThB	10,6 h	
Thorium C	$^{212}_{83}\text{Bi}$ ThC	60,5 min	
Thorium C'	$^{212}_{84}\text{Po}$ ThC'	$3 \cdot 10^{-7}$ s	
Thorium C''	$^{208}_{81}\text{Tl}$ ThC''	3,1 min	
Thorium D	$^{208}_{82}\text{Pb}$ ThD		

Název	Značka	Poločas rozpadu	Rozpad
Aktiniová řada			
Aktinouran	${}_{92}^{235}\text{U}$ AcU	$7,13 \cdot 10^8$ r	
Aktinium Y	${}_{90}^{231}\text{Th}$ UY	24,6 h	
Protaktinium	${}_{91}^{231}\text{Pa}$ Pa	$3,2 \cdot 10^4$ r	
Aktinium	${}_{89}^{227}\text{Ac}$ Ac	21,7 r	
Radioaktinium	${}_{90}^{227}\text{Th}$ RdAc	18,9 d	
Aktinium K	${}_{87}^{223}\text{Fr}$ AcK	21 min	
Aktinium X	${}_{88}^{223}\text{Ra}$ AcX	11,4 d	
Aktinon	${}_{86}^{219}\text{Rn}$ An	3,92 s	
Aktinium A	${}_{84}^{215}\text{Po}$ AcA	$1,83 \cdot 10^{-3}$ s	
Aktinium B	${}_{82}^{211}\text{Pb}$ AcB	36,1 min	
Aktinium C	${}_{83}^{211}\text{Bi}$ AcC	2,16 min	
Aktinium C'	${}_{84}^{211}\text{Po}$ AcC'	0,52 s	
Aktinium C''	${}_{81}^{207}\text{Tl}$ AcC''	4,76 min	
Aktinium D	${}_{82}^{207}\text{Pn}$ AcD	$\infty$	
Neptuniová řada			
Plutonium	${}_{94}^{241}\text{Pu}$ Pu	10 r	
Americium	${}_{95}^{241}\text{Am}$ Am	500 r	
Neptunium	${}_{93}^{237}\text{Np}$ Np	$2,25 \cdot 10^6$ r	
Protaktinium	${}_{91}^{233}\text{Pa}$ Pa	27,4 d	
Uran	${}_{92}^{233}\text{U}$ U	$1,63 \cdot 10^5$ r	
Thorium	${}_{90}^{229}\text{Th}$ Th	$7 \cdot 10^3$ r	
Radium	${}_{88}^{225}\text{Ra}$ Ra	14,8 d	
Aktinium	${}_{89}^{225}\text{Ac}$ Ac	10 d	
Francium	${}_{87}^{221}\text{Fr}$ Fr	4,8 min	
Astat	${}_{85}^{217}\text{At}$ At	0,021 s	
Bismut	${}_{83}^{213}\text{Bi}$ Bi	47 min	
Polonium	${}_{84}^{213}\text{Po}$ Po	$4,2 \cdot 10^{-6}$ s	
Thallium	${}_{81}^{209}\text{Tl}$ Tl	2,20 min.	
Olovo	${}_{82}^{209}\text{Pb}$ Pb	3,3 h	
Bismut	${}_{83}^{209}\text{Bi}$ Bi	$\infty$	

## f) Rozpadový zákon

Položme si nyní otázku, jak se bude měnit **aktivita**  $A$  radionuklidového zářiče v průběhu času. V čase  $t_0$  bude zářič obsahovat  $N_0$  nestabilních jader. Časová změna počtu těchto nestabilních jader bude zjevně přímo úměrná tomuto počtu (čím více nestabilních jader zářič obsahuje, tím víc se jich za jednotku času rozpadne), což zapíšeme

$$A = \frac{dN}{dt} = -\lambda N, \quad (3.561)$$

kde znaménko minus na pravé straně rovnice zohledňuje, že počet nestabilních jader s časem klesá. Konstanta úměrnosti  $\lambda$  charakterizuje rychlost, s jakou tento počet klesá, tj. jak silně radionuklid v daném okamžiku září. Diferenciální rovnici ( 3.561 ) snadno vyřešíme metodou separace proměnných:

$$\int \frac{dN}{N} = -\lambda \int dt, \quad (3.562)$$

což po integraci dává

$$\ln N + \ln N_0 = -\lambda t + t_0, \quad (3.563)$$

kde integrační konstanta  $t_0$  odpovídá času, do kterého klademe počet nestabilních jader roven  $N_0$ . Definitivně tedy můžeme položit  $t_0 = 0$ . Po úpravě odtud dostáváme

$$N = N_0 \exp(-\lambda t), \quad (3.564)$$

což je známý **rozpadový zákon**.

**Rozpadová konstanta**  $\lambda$  je základní charakteristikou specifikující vlastnosti každého radionuklidu. Položme si nyní otázku, v jakém čase poklesne aktivita daného radionuklidového zářiče přesně na polovinu. Z ( 3.564 ) plyne okamžitě odpověď v podobě exponenciální rovnice

$$1 = 2 \exp(-\lambda T_{1/2}), \quad (3.565)$$

což po zlogaritmování dává

$$0 = \ln 2 - \lambda T_{1/2}, \quad (3.566)$$

čili

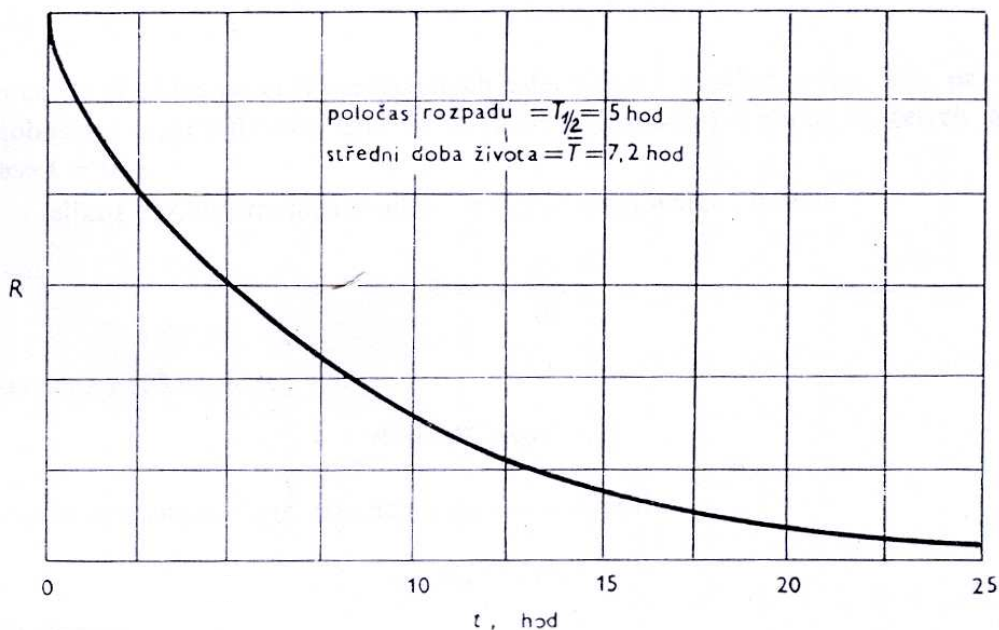
$$T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}. \quad (3.567)$$

Konstantě  $T_{1/2}$  odvozené z rozpadové konstanty  $\lambda$  vztahem ( 3.567 ), říkáme **poločas rozpadu** radionuklidu a je to další význačná charakteristika radionuklidvého zářiče.

Přepíšeme-li rozpadový zákon ( 3.564 ) s použitím poločasu rozpadu namísto rozpadové konstanty, obdržíme jeho alternativní vyjádření:

$$N = N_0 2^{-\frac{t}{T_{1/2}}}. \quad (3.568)$$

Obr. 3.34



Obr. 23.1 Aktivita radioizotopu klesá exponenciálně s časem.

V praxi je však celá situace obvykle komplikována tím, že použitý radionuklid je členem nějaké rozpadové řady. Rozeberme si nyní alespoň nejjednodušší případ radionuklidu  $R_1$ , jehož rozpadem vzniká radionuklid  $R_2$ , který se dále rozpadá na již stabilní nuklid. Potom pravděpodobné počty jader obou nuklidů  $N_1(t)$  a  $N_2(t)$  budou vyhovovat systému diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} \frac{dN_1}{dt} &= -\lambda_1 N_1, \\ \frac{dN_2}{dt} &= \lambda_1 N_1 - \lambda_2 N_2, \end{aligned} \quad (3.569)$$

První rovnice systému se týká jednoho výchozího nuklidu  $R_1$  a je shodná s výše diskutovaným případem. V druhé rovnici udává první člen na pravé straně přírůstek radionuklidu  $R_2$  vznikajícího rozpadem nuklidu  $R_1$  a druhý člen úbytek jader nuklidu  $R_2$  způsobený jeho rozpadem. Znamé řešení první rovnice

$$N_1(t) = N_1(0) \exp(-\lambda_1 t) \quad (3.570)$$

dosadíme do druhé

$$\frac{dN_2}{dt} + \lambda_2 N_2 = \lambda_1 N_1(0) \exp(-\lambda_1 t), \quad (3.571)$$

což je nehomogenní diferenciální rovnice prvního řádu. Položíme

$$N_2(t) = f(t) \exp(-\lambda_2 t). \quad (3.572)$$

Zřejmě musí platit  $f(0) = N_2(0)$ . Po dosazení za  $N_2(t)$  do nehomogenní rovnice dostaneme jednoduou rovnici pro  $f(t)$ , jejímž řešením je

$$f(t) = N_2(0) + \frac{\lambda_1 N_1(0)}{\lambda_2 - \lambda_1} \left[ e^{(\lambda_2 - \lambda_1)t} - 1 \right], \quad (3.573)$$

takže

$$N_2(t) = N_2(0) + \frac{\lambda_1 N_1(0)}{\lambda_2 - \lambda_1} (e^{-\lambda_1 t} - e^{-\lambda_2 t}). \quad (3.574)$$

Pro  $N_2(0) = 0$  dosáhne pravděpodobný počet jader  $R_2$  maximální hodnoty v čase  $t_m$ , který je dán podmínkou  $\frac{dN_2}{dt} = 0$ . Z uvedených vztahů nalezneme

$$t_m = \frac{\ln \frac{\lambda_2}{\lambda_1}}{\lambda_2 - \lambda_1}. \quad (3.575)$$

Z druhé rovnice ( 3.569 ) plyne, že v čase  $t_m$  bude

$$\lambda_1 N_1(t_m) = \lambda_2 N_2(t_m), \quad (3.576)$$

a proto aktivity nuklidů  $R_1$  a  $R_2$  jsou v čase  $t_m$  stejné.

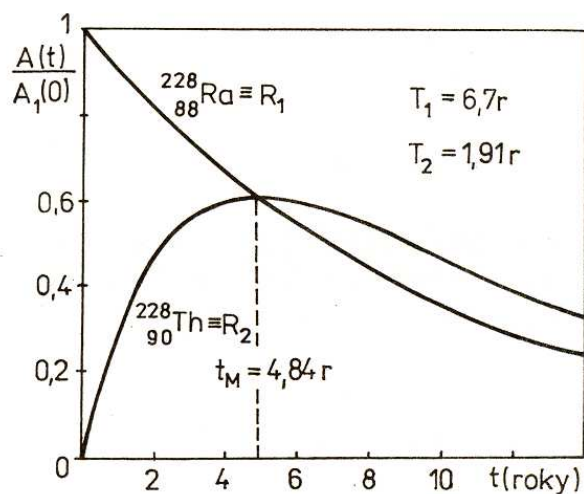
Prozkoumejme ještě, k jakým modifikacím rozpadového zákona ( 3.564 ) rovnice ( 3.574 ) s výchozím počtem jader  $N_2(0) = 0$  vede. Předpokládejme nejprve, že  $\lambda_1 > \lambda_2$ , a zapišme rovnici ( 3.574 ) s pomocí aktivit

$$A_2(t) = A_1(0) \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} [1 - e^{-(\lambda_1 - \lambda_2)t}] e^{-\lambda_2 t}. \quad (3.577)$$

Pro  $t \geq \frac{5}{\lambda_1 - \lambda_2}$  je exponenciála v hranaté závorce prakticky

zanedbatelná vůči jedničce a časový vývoj aktivity se bude řídit prostým exponenciálním zákonem ( 3.564 ) s rozpadovou konstantou  $\lambda_2$  (viz obr. 3.35)

Obr. 3.35



Závislost relativní aktivity radionuklidů  $R_1 = {}^{228}_{88}\text{Ra}$  a  $R_2 = {}^{228}_{90}\text{Th}$  na čase.  $T_1 > T_2$ , a proto  $\lambda_1 < \lambda_2$ .

Pro  $\lambda_1 < \lambda_2$  upravíme ( 3.574 ) na tvar

$$A_2(t) = \frac{\lambda_2}{\lambda_1 - \lambda_2} \left[ 1 - e^{-(\lambda_2 - \lambda_1)t} \right] A_1(t). \quad (3.578)$$

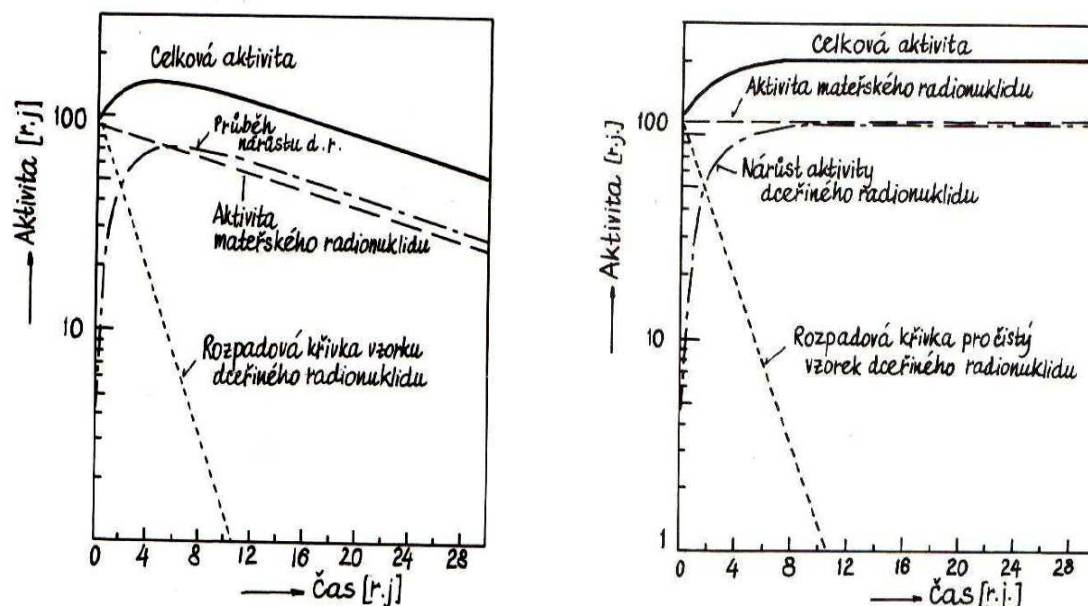
Pro časy  $t \geq \frac{5}{\lambda_2 - \lambda_1} = \frac{5t_m}{\ln \frac{\lambda_2}{\lambda_1}}$  se bude  $A_2(t)$  lišit od  $A_1(t)$  pouze o

multiplikativní konstantu a budeme proto mít pro  $A_2(t)$  exponenciální zákon ( 3.564 ) s rozpadovou konstantou  $\lambda_1$ .

Odtud je již patrné, jak bychom postupovali v případech, kdy máme radioaktivní řadu obsahující více radionuklidů.

Následující dva obrázky ukazují průběh rozpadové křivky pro  $\lambda_1 < \lambda_2$  a pro  $\lambda_1 \ll \lambda_2$ .

Obr. 3.36



### g) Spin, izospin a parita jádra

Velikost spinu jádra charakterizujeme kvantovým číslem  $I$ . Kvadrát spinu je roven

$$I^2 = \hbar^2 I(I+1). \quad (3.579)$$

Je-li spin celočíselný, chová se jádro jako boson, je-li poločíselný, chová se jako fermion.

Průmět spinu do vybraného směru, např. do směru indukce vnějšího makroskopického magnetického pole, nabývá známých kvantových hodnot

$$I_z = M\hbar, \quad M = -I, -I+1, \dots, I-1, I, \quad (3.580)$$

kde číslo  $M$  se označuje často jako *magnetické kvantové číslo*. Spin jádra je určen složením spinu všech nukleonů a jejich orbitálních momentů hybnosti podle pravidel o skládání momentů hybnosti. Podobně jako v atomové fyzice i ve fyzice atomového jádra se nazývá samo kvantové číslo  $I$  spinem. Proto např. říkáme, že spin jádra musí být roven 0, 1, 2, ... jestli  $A$  je sudé, a musí být roven 1/2, 3/2, ... jestli



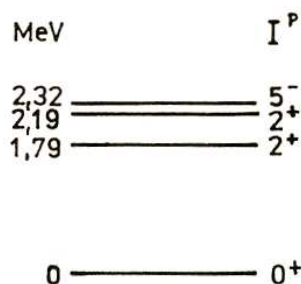
A je liché. Spin jádra chápeme jako jeho vlastní moment hybnosti v základním energetickém stavu jádra. Ale můžeme, a to je třeba vždy explicitně říci, charakterizovat vzbuzené stavy jádra jeho spinem. Ten může být buď shodný se spinem příslušným základnímu stavu, nebo se od něho odlišovat.

Z experimentu plyne, že základní stavy všech jader mají poměrně malé spiny. Nejvyšší hodnota  $I = 6$  byla nalezena u jádra nuklidu  ${}^{50}_{23}\text{V}$ , spiny jader s lichým počtem nukleonů nepřevyšují  $I = 9/2$ . Všechna sudo-sudá jádra mají spin nulový. Uvedené údaje svědčí o tom, že se v jádre vytvářejí *dvojice protonů s opačnými projekcemi spinu a podobné dvojice neutronů*. Tato tendence vytváření dvojic je analogií vytváření dvojic elektronů v atomovém obalu podchyceném v Hundově pravidle.

Metody, jimiž se určují spiny jader, většinou využívají souvislosti mezi spinem jádra a jeho magnetickým momentem. Existují však také metody, které jsou na měření magnetických momentů nezávislé. Jedna z nich využívá rozboru rotačních spekter dvouatomových molekul, které mají shodná jádra.

Spiny vzbuzených stavů jader se určují s pomocí zákona zachování momentu hybnosti při analýze údajů plynoucích z rozpadů  $\beta$ , elektromagnetických přechodů a jaderných reakcí. Přitom se určuje i parita příslušného stavu. Tímto způsobem se dají rovněž určovat i spiny základního stavu atomového jádra.

**Parita** je podobně jako spin velmi důležitou charakteristikou jádra. Paritu jádra udáváme vždy v jeho základním stavu a nahlížíme na ni jako na vnitřní paritu. Experimentální výsledky ukazují, že parita sudo-sudých jader je kladná, u ostatních jader může být jak kladná, tak záporná. Např. parita jádra  ${}^{17}_8\text{O}$  je  $+1$ , jádra  ${}^{15}_7\text{N}$  je  $-1$ . Ve fyzice atomového jádra paritu symbolizujeme obvykle jen znaménky  $+$  a  $-$ , která píšeme jako horní index u spinu jádra nebo částice, tj.  $I^+$  nebo  $I^-$ . Parita excitovaných stavů jádra může být shodná s paritou jádra v základním stavu, a v takovém případě mluvíme o excitovaných stavech s *normální paritou*, v opačném případě jde o excitované stavy s *nenormální paritou*. U většiny jader mají stavy s nenormální paritou vyšší energii než stavy s normální paritou. Mezi základním stavem a prvním stavem s nenormální paritou se obvykle nachází jeden nebo několik excitovaných stavů s normální paritou



Obr. 3.37: Spektrum nejnižších hladin jádra  $^{90}\text{Zr}$ . Vlevo jsou uvedeny energie vzhledem k základnímu stavu, vpravo spin a parita.

Využijeme-li slupkového modelu, bude parita jádra určena vztahem

$$P = \prod_{i=1}^A (-1)^{l_i}, \quad (3.581)$$

kde  $l_i$  je kvantové číslo momentu hybnosti  $i$ -tého nukleonu. Vnitřní parita nukleonu není pro určení  $P$  podstatná, protože je rovna  $+1$ . Z tohoto vztahu např. ihned plyne, že pro jádro  ${}^7_3\text{Li}$ , které má dva protony a dva neutrony ve stavech  $s$  a zbylé nukleony ve stavech  $p$ , by měla být normální parita  $P = -1$ .

Plyne z něho však také, že jednočásticové excitované stavy  $s$  nenormální paritou by měly v tomto modelu vznikat při změnách  $l$  o liché číslo. Při určování parity jádra a jeho vzbuzených stavů se využívají poznatky ze stejných procesů, které pomáhají určovat spin vzbuzených jader. Při dějích, které jsou podmíněny jadernými a elektromagnetickými silami, tj. při jaderných reakcích, rozpadech  $\alpha$  a při přechodech  $\gamma$ , se parita celého systému zachovává, tj. parita jeho počátečního stavu a koncového stavu je stejná. Při radioaktivním rozpadu  $\beta$  se sice parita nezachovává, ale z rychlosti děje (doby života) se dá usuzovat na to, zda došlo ke změně parity jádra a ke změně jeho spinu.

Jedním z důležitých důsledků existence parity stavů atomového jádra je např. to, že elektrický dipólový moment jádra musí být nulový. Vlnová funkce jádra nemůže změnit při inverzi souřadnic, na kterých závisí, svou absolutní hodnotu, neboť je to funkce pro dva systémy fermionů, pro každý z nichž platí Pauliho princip. Proto hustota

pravděpodobnosti pro rozložení náboje v jádře, která je úměrná kvadrátu absolutní hodnoty této vlnové funkce, se chová jako funkce sudá

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho(-\mathbf{r}), \quad (3.582)$$

a tedy elektrický dipólový moment, který je dán integrálem

$$\mathbf{d} = e \int \mathbf{r} \rho(\mathbf{r}) dV, \quad (3.583)$$

je díky tomu, že integrand je lichou funkcí, roven nule! Z tohoto důvodu lze elektrické vlastnosti atomového jádra vedle jeho celkového náboje detailněji popsat až s pomocí *elektrického kvadrupólového momentu*.

Neméně hluboký význam jako spin a parita má pro jádro i jeho **izotopický spin** čili **izospin**. Nukleonům připisujeme izospin  $T = 1$  a jeho projekci  $T_z$ , která je rovna  $+1$  u protonu a  $-1$  u neutronu. Z protonově neutronové stavby atomového jádra ihned plyne, že izospin jádra, který se určuje podle pravidel skládání momentů hybností, je rovný  $T = 0, 1, 2, \dots$ , jestli  $A$  je sudé, a rovný  $T = n + 1, n = 0, 1, 2, \dots$ , je-li  $A$  liché. Relativně široký interval možných hodnot  $n$  se dá omezit, využijeme-li představ slupkového modelu jádra. Přesto je daleko výhodnější a účelnější zjistit experimentálně, která z povolených hodnot celkového izospinu  $T$  se skutečně v daném jádře realizuje, a tím i určit, v kolika různých nábojových stavech s toutéž energií, paritou a spinem se může daná soustava nukleonů nacházet. Projekce celkového izospinu jádra  $T_z$  je bezprostředně dána jako součet projekcí izospinu jednotlivých nukleonů

$$T_z = Z - N. \quad (3.584)$$

Odtud se dá přímo určit jen dolní mez pro hodnotu celkového izospinu  $T$ . K jeho určení se musíme obrátit k dalším experimentálním údajům. Možnost klasifikovat izospinové stavy jader dala podnět k vyslovení hypotézy o *nábojové nezávislosti jaderných sil*. Podle ní sice jaderné síly závisejí na izospinu  $T$ , ale nikoliv na jeho složce  $T_z$ . K

analogickému závěru dospívá též teorie silných interakcí. Z hypotézy o nábojové nezávislosti jaderných sil dále plyne, že v procesech, které jsou jimi určeny, se jak izospin  $T$ , tak jeho složka  $T_z$  zachovává. Jinak řečeno, počáteční a koncový stav celého systému musí mít shodné  $T$  a  $T_z$ . To má velký význam pro experiment, jehož výsledky by se nedaly vysvětlit, kdyby neplatil *zákon zachování izospinu a jeho projekce*. Lze tedy považovat hypotézu nábojové nezávislosti jaderných sil za potvrzenou a brát ji jako empirický zákon.

Srovnajme např. nepružný rozptyl protonů na jádrech  ${}^{10}_5B$  s

nepružným rozptylem deutronů  ${}^2_1H$  na stejných jádrech. Izospin protonu je 1, deutronu 0, základní stav jádra  ${}^{10}_5B$  má  $T = 0$ . U obou procesů zapíšeme hodnoty  $T$  a  $T_z$  a excitovaná jádra označíme hvězdičkou

$$\begin{aligned}
 & p + {}^{10}_5B \rightarrow p + {}^{10}_5B^* \\
 T: & 1 \quad 0 \quad 1 \quad 0; 2 & (3.585) \\
 T_z: & 1 + 0 = 1 + 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 & d + {}^{10}_5B \rightarrow d + {}^{10}_5B^* \\
 T: & 0 \quad 0 \quad 0 \quad 0 & (3.586) \\
 T_z: & 0 + 0 = 0 + 0
 \end{aligned}$$

V relaci ( 3.585 ) je v počátečním stavu soustavy celkový izospin  $T = 1$ , v koncovém musí být podle zákona zachování izospinu celkový izospin  $T = 1$  a to připouští pro jádro  ${}^{10}_5B$  jak stav s  $T = 0$ , tak stav s  $T = 2$  podle pravidel o skládání izospinu. V reakci ( 3.586 ) je však celkový izospin na počátku  $T = 0$  a po reakci musí být rovněž  $T = 0$ , a to nepřipouští stav  $T = 2$  u jádra  ${}^{10}_5B^*$ . Tento závěr je v dokonalém souladu s experimentem.

Zdůrazněme, že jsme tu jednali o procesech probíhajících pod vlivem jaderných sil. Půjde-li o reakce, které probíhají pod vlivem *elektromagnetické interakce*, potom se v nich bude zachovávat zřejmě celková projekce izospinu  $T_z$ , neboť se nebude měnit  $Z$  a  $N$ , ale *celkový izospin  $T$  se obecně zachovávat nebude*. Velmi dobře jsou

známé radiační přechody  $\gamma$  mezi stavy s různým  $T$ . Při radioaktivních dějích provázených slabou interakcí *se nezachovává ani  $T_z$* , neboť se při nich mění neutron v proton, případně proton v neutron. Stejně je tomu při zachycení elektronu v jádře.

## 7) Skládání impulsmomentů



Rudolf Friedrich Alfred Clebsch (1833 – 1872) Paul Albert Gordan (1837 – 1912)

Mějmež 2 částice  $|j_1, m_1\rangle$  a  $|j_2, m_2\rangle$  s impulsmomenty  $\mathbf{J}_1$  a  $\mathbf{J}_2$ , takže

$$\begin{aligned} \hat{J}_{1z} |j_1, m_1\rangle &= \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle, & \hat{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle, \\ \hat{J}_{2z} |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_2, m_2\rangle, & \hat{J}_2^2 |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.587)$$

Protože operátory si všímají pouze svých vlastních stavů a ostatní ignorují, můžeme (3.587) zapsat rovněž ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{J}_{1z} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_1 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \\ \hat{J}_1^2 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \\ \hat{J}_{2z} |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar m_2 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \\ \hat{J}_2^2 |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.588)$$

Často je však potřeba nalézt celkový impulsmoment  $\mathbf{J}$ , který má obecně jiný systém vlastních stavů  $|J, M\rangle$ . Je tedy potřeba nalézt předpis pro vyjádření celkového vlastního stavu  $|J, M\rangle$  pomocí

dílčích vlastních stavů  $|j_1, m_1\rangle$  a  $|j_2, m_2\rangle$  jednotlivých částic. Pro  $z$ -ovou komponentu celkového impulsmomentu  $\hat{J}_z = \hat{J}_{1z} + \hat{J}_{2z}$  platí

$$\hat{J}_z |J, M\rangle = \hbar(m_1 + m_2) |J, M\rangle = \hbar M |J, M\rangle \quad (3.589)$$

a pro kvadrát celkového impulsmomentu  $\hat{J}^2 = \hat{J}_1^2 + \hat{J}_2^2 + 2\hat{\mathbf{J}}_1 \hat{\mathbf{J}}_2$

$$\hat{J}^2 |J, M\rangle = \hbar^2 J(J+1) |J, M\rangle. \quad (3.590)$$

Nechť dva nezávislé operátory impulsmomentů  $\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2, [\hat{\mathbf{J}}_1, \hat{\mathbf{J}}_2] = 0$  působí na Hilbertových prostorech  $\mathcal{H}_1, \mathcal{H}_2$ , a jejich součet  $\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{J}}_1 + \hat{\mathbf{J}}_2$  působící na Hilbertově prostoru  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ . Mezi impulsmomenty, resp. jejich složkami platí komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_1^2] &= [\hat{\mathbf{J}}^2, \mathbf{J}_2^2] = [\hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z] = 0, \\ [\hat{J}_{1z}, \mathbf{J}_1^2] &= [\hat{J}_{2z}, \mathbf{J}_2^2] = 0. \end{aligned} \quad (3.591)$$

To znamená, že na prostoru  $\mathcal{H}$  můžeme volit za ÚMP (úplnou množinu pozorovatelných) následující množiny operátorů se svými bázemi:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_1^2, \hat{\mathbf{J}}_2^2, \hat{\mathbf{J}}^2, \hat{J}_z &\rightarrow |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}_1^2, J_{1z}, \hat{\mathbf{J}}_2^2, J_{2z} &\rightarrow |j_1, m_1\rangle \otimes |j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.592)$$

Stav s definovaným impulsmomentem systému lze tedy popsat dvojitým způsobem: buď vektorem

$$|j_1, m_1, j_2, m_2\rangle = |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle \quad (3.593)$$

nebo pomocí vlastních vektorů  $|J, M\rangle$  operátorů (3.590) a (3.589) vektorem

$$|j_1, j_2, J, M\rangle. \quad (3.594)$$

Analogicky k ( 3.588 ) platí:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}_1^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar^2 j_1(j_1 + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}_2^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar^2 j_2(j_2 + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}^2 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar^2 j(j + 1) |j_1, j_2, J, M\rangle, \\ \hat{\mathbf{J}}_3 |j_1, j_2, J, M\rangle &= \hbar M |j_1, j_2, J, M\rangle \end{aligned} \quad (3.595)$$

Hledejme takovou unitární transformaci, která umožňuje přechod od jedné reprezentace k druhé na Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$  tvořeném vektory  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle$ . Podmínka úplnosti zní

$$\sum_{m_1, m_2} |j_1, j_2, m_1, m_2\rangle \langle j_1, j_2, m_1, m_2| = \hat{1} \quad (3.596)$$

nebo

$$\sum_{J, M} |j_1, j_2, J, M\rangle \langle j_1, j_2, J, M| = \hat{1}. \quad (3.597)$$

S použitím ( 3.596 ) má transformace mezi vektory ( 3.593 ) a ( 3.594 ) tvar

$$|j_1, j_2, J, M\rangle = \sum_{m_1, m_2} C(j_1, m_1, j_2, m_2 | J, M) |j_1, m_1\rangle |j_2, m_2\rangle, \quad (3.598)$$

kde sumace přes  $m_1$  probíhá od  $-j_1$  do  $+j_1$ , součet přes  $m_2$  od  $-j_2$  do  $+j_2$ . Čísla  $C(j_1, m_1, j_2, m_2 | J, M)$  jsou **Clebsch – Gordanovy koeficienty**. Protože  $m_1 = M - m_2$ , stačí na pravé straně ( 3.598 ) sčítat při daném  $M$  pouze přes  $m_2$ . Inverzní transformací k ( 3.598 ) je

$$|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = \sum_{J, M} C(J, M | j_1, j_2, m_1, m_2) |j_1, j_2, J, M\rangle. \quad (3.599)$$

Určíme nyní spektrum operátorů  $\hat{\mathbf{J}}^2$  a  $\hat{J}_z$ . Abychom zjistili, jakých hodnot nabývá kvantové číslo  $J$  (odpovídající pevným hodnotám  $j_1, j_2$ ), určíme možné hodnoty  $M = m_1 + m_2$ . Okamžitě je zřejmé, že

$$M_{\max} = j_1 + j_2. \quad (3.600)$$

Vyskytuje se pouze jednou, a to když  $m_1 = j_1, m_2 = j_2$ . Odtud plyne, že nejvyšší hodnota  $J$

$$J_{\max} = M_{\max} = j_1 + j_2, \quad (3.601)$$

jíž přísluší pouze jediný vlastní stav  $|j_1, j_2, m_1, m_2\rangle = |j_1, j_1\rangle |j_2, j_2\rangle$ .

Druhá nejvyšší hodnota  $M$  je  $M_{\max} - 1 = j_1 + j_2 - 1$  a lze ji realizovat dvojím způsobem: buď  $m_1 = j_1, m_2 = j_2 - 1$ , nebo  $m_1 = j_1 - 1, m_2 = j_2$ . Z příslušných vlastních vektorů

$$\begin{aligned} &|j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle, \\ &|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2\rangle, \end{aligned} \quad (3.602)$$

lze konstruovat dvě lineárně nezávislé kombinace. Jedna z nich odpovídá kvantovému číslu  $J = j_1 + j_2 - 1$ , druhá hodnotě  $J = j_1 + j_2$ . Podobně pro  $M = j_1 + j_2 - 2$  budou existovat tři lineárně nezávislé kombinace utvořené z funkcí

$$\begin{aligned} &|j_1, j_1\rangle |j_2, j_2 - 2\rangle, \\ &|j_1, j_1 - 1\rangle |j_2, j_2 - 1\rangle, \\ &|j_1, j_1 - 2\rangle |j_2, j_2\rangle, \end{aligned} \quad (3.603)$$

jimž odpovídají hodnoty  $J$  rovné



$$J = \begin{matrix} \nearrow & j_1 + j_2 - 2 \\ \rightarrow & j_1 + j_2 - 1 \\ \searrow & j_1 + j_2 - 0 \end{matrix} \quad (3.604)$$

Tímto postupem zmenšování  $M$  vždy o jednotku, dojdeme nakonec k hodnotám, kdy buď  $m_1 = -j_1$ , nebo  $m_2 = -j_2$ . Proto nejmenší hodnota  $J$  bude rovna

$$J_{\min} = |j_1 - j_2| \quad (3.605)$$

a platí tedy nerovnost

$$|j_1 - j_2| \leq J \leq j_1 + j_2. \quad (3.606)$$

Každé hodnotě  $J$  přísluší  $2J + 1$  hodnot  $M$

$$M = J, J - 1, \dots, -J, \quad (3.607)$$

tudíž celkový počet stavů pro všechna možná  $J$  (čili dimenze prostoru  $\mathcal{H} = \mathcal{H}_1 \otimes \mathcal{H}_2$ ), bude roven

$$\sum_{J=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2J+1) = (2j_1+1)(2j_2+1). \quad (3.608)$$

V tabulce 3.7 je přehledný souhrn všech možných kombinací dosažitelných pro 2 částice s  $l_1 = l_2$ :

Tab. 3.7

$M$	Lineární kombinace	Výsledný stav	Poznámka
$l_1 + l_2$	$ l_1, l_1\rangle  l_2, l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle$	$M = M_{\max}$
$l_1 + l_2 - 1$	$ l_1, l_1 - 1\rangle  l_2, l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 1\rangle$	
	$ l_1, l_1\rangle  l_2, l_2 - 1\rangle$	$ l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 1\rangle$	$M = M_{\max}$
$l_1 + l_2 - 2$	$ l_1, l_1 - 2\rangle  l_2, l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, l_1 + l_2 - 2\rangle$	
	$ l_1, l_1 - 1\rangle  l_2, l_2 - 1\rangle$	$ l_1 + l_2 - 1, l_1 + l_2 - 2\rangle$	
	$ l_1, l_1\rangle  l_2, l_2 - 2\rangle$	$ l_1 + l_2 - 2, l_1 + l_2 - 2\rangle$	$M = M_{\max}$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$
$-(l_1 + l_2)$	$ l_1, -l_1\rangle  l_2, -l_2\rangle$	$ l_1 + l_2, -l_1 - l_2\rangle$	$M = M_{\min}$

Příklad:

Složme impulsmomenty  $l_1 = 2, l_2 = 1$

Tab.3.8

$m_1$	2	2	1	2	1	0	1	0	-1	0	-1	-2	-1	-2	-2
$m_2$	1	0	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	1	-1	0	-1
$M$	3	2		1			0			-1			-2		-3
$L$	3	2, 3		1, 2, 3			1, 2, 3			1, 2, 3			2, 3		3

### Explicitní výpočet $C - G$ koeficientů

Obecný postup výpočtu Clebsh – Gordanových koeficientů lze nastínit v následujících 4 krocích:

- 1) Sestrojíme vektor s nejvyšší vahou

$$|l_1, l_2, L\rangle = |l_1 + M, l_2\rangle = |l_1 + M, l_2\rangle = |l_1, l_2\rangle |l_2, M_2\rangle. \quad (3.609)$$

- 2) Aplikujeme posunovací operátor  $\hat{L}_-$ , čímž nalezneme všechny vektory

$$|l_1, l_2, L\rangle = |l_1 + M, l_2\rangle. \quad (3.610)$$

### 3) Vektory

$$\begin{aligned} |l_1, l_2, L\rangle &= |l_1 + l_2 - 1, M\rangle = |l_1 + l_2 - 1\rangle, \\ |l_1, l_2, L\rangle &= |l_1 + l_2, M\rangle = |l_1 + l_2 - 1\rangle. \end{aligned} \quad (3.611)$$

musí být navzájem ortogonální.

### 4) Postupně opakujeme aplikaci posunovacího operátoru $\hat{L}_-$ a ortogonalizace, dokud nezískáme všechny možné vektory

$$|l_1, l_2, L, M\rangle. \quad (3.612)$$

Příklad:

Nalezněme C – G koeficienty pro skládání dvou impulsmomentů  $l_1 = l_2 = 1$ .

Řešení:

Začínáme s vektory s nejvyšší vahou, tzn.  $M_{\max}$ .

$$\begin{aligned} \hat{L}^2 |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle &= (\hat{L}_z^2 + \hat{L}_z + L_- L_+) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = (M^2 + M + 0) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = \\ &= \left[ (l_1 + l_2)^2 + (l_1 + l_2) + 0 \right] |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = \\ &= (l_1 + l_2)(l_1 + l_2 + 1) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle = L(L + 1) |l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle. \end{aligned} \quad (3.613)$$

Zároveň víme, že

$$\hat{L}^2 |L, M\rangle = L(L + 1) |L, M\rangle. \quad (3.614)$$

Srovnáním (3.613) a (3.614) vidíme, že stavu  $|l_1, l_1\rangle |l_2, l_2\rangle$  odpovídá stav

$$|L, M\rangle = |l_1 + l_2, l_1 + l_2\rangle. \quad (3.615)$$

Budeme užívat zkrácený zápis

$$\begin{aligned} |l_1, l_2, L, M\rangle &= |1, 1, L, M\rangle \rightarrow |LM\rangle, \\ |l_{12}, m_{12}\rangle &= |1, m_{12}\rangle \rightarrow |m_1\rangle. \end{aligned} \quad (3.616)$$

V našem případě tedy máme

$$|L, M\rangle = |2, 2\rangle = |1\rangle|1\rangle, \quad (3.617)$$

neboli

$$(1, 1, 1, 1|2, 2) = 1. \quad (3.618)$$

Platí

$$\hat{L}_\pm |L, M\rangle = \sqrt{L(L+1) - M(M \pm 1)} |L, M \pm 1\rangle \quad (3.619)$$

a podobně pro jednotlivé impulsmomenty  $\hat{\mathbf{L}}_{1,2}$ , přičemž  $\hat{L}_\pm = \hat{L}_\pm^{(1)} + \hat{L}_\pm^{(2)}$ . Aplikujeme tuto relaci na vektor  $|2, 2\rangle$ :

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |2, 2\rangle &= 2|2, 1\rangle, \\ \hat{L}_- |1\rangle|1\rangle &= \hat{L}_-^{(1)} |1\rangle|1\rangle + \hat{L}_-^{(2)} |1\rangle|1\rangle = \sqrt{2}(|0\rangle|1\rangle + |1\rangle|0\rangle). \end{aligned} \quad (3.620)$$

Srovnáním dostaneme

$$|2, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|0\rangle + |0\rangle|1\rangle), \quad (3.621)$$

a tedy

$$(1,0,1,1|2,1) = (1,1,1,0|2,1) = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (3.622)$$

Jelikož musí zároveň platit  $M = m_1 + m_2$ , dostáváme

$$\begin{aligned} (1,1,1,1|2,1) &= (1,0,1,0|2,1) = (1,-1,1,0|2,1) = \\ &= (1,0,1,-1|2,1) = (1,-1,1,-1|2,1) = 0. \end{aligned} \quad (3.623)$$

Další aplikací posunovacího operátoru

$$\begin{aligned} \hat{L}_- |2,1\rangle &= \sqrt{6} |2,0\rangle, \\ \hat{L}_- \frac{1}{\sqrt{2}} (\sqrt{2} |-1\rangle |1\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |0\rangle |0\rangle + \sqrt{2} |1\rangle |-1\rangle) &= \\ = |-1\rangle |1\rangle + |0\rangle |0\rangle + |0\rangle |0\rangle + |1\rangle |-1\rangle, \end{aligned} \quad (3.624)$$

neboli

$$|2,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|-1\rangle |1\rangle + 2|0\rangle |0\rangle + |1\rangle |-1\rangle), \quad (3.625)$$

takže

$$\begin{aligned} (1,-1,1,1|2,0) &= (1,1,1,-1|2,0) = \frac{1}{\sqrt{6}}, \\ (1,0,1,0|2,0) &= \frac{2}{\sqrt{6}}. \end{aligned} \quad (3.626)$$

Všechny ostatní C – G koeficienty s  $l = 2$ ,  $m = 0$  jsou nulové.

Další aplikací  $\hat{L}_-$  dostaneme

$$|2, -1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|-1\rangle + |-1\rangle|0\rangle), \quad (3.627)$$

$$|2, -2\rangle = |-1\rangle|-1\rangle,$$

a tedy

$$(1, 0, 1, -1|2, -1) = (1, -1, 1, 0|2, -1) = \frac{1}{\sqrt{2}}, \quad (3.628)$$

$$(1, -1, 1, -1|2, -2) = 1.$$

Hledejme nyní vektor  $|1, 1\rangle$ . Tento vektor musí být ortogonální na  $|2, 1\rangle$ . Označíme-li

$$|1, 1\rangle = c_1|0\rangle|1\rangle + c_2|1\rangle|0\rangle, \quad (3.629)$$

musí být

$$\begin{aligned} \langle 2, 1|11\rangle &= 0, \\ \frac{c_1 + c_2}{\sqrt{2}} &= 0. \end{aligned} \quad (3.630)$$

kde  $c_1, c_2$  volíme reálné a

$$|c_1|^2 + |c_2|^2 = 1. \quad (3.631)$$

Potom

$$|1, 1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|0\rangle - |0\rangle|1\rangle) \quad (3.632)$$

a C – G koeficienty jsou

$$\begin{aligned} (1,1,1,0|1,1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,0,1,1|1,1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{3.633}$$

Aplikací  $\hat{L}_-$  dostaneme

$$\begin{aligned} |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|1\rangle|-1\rangle - |-1\rangle|1\rangle), \\ |1,-1\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|0\rangle|-1\rangle - |-1\rangle|0\rangle), \end{aligned} \tag{3.634}$$

odkud

$$\begin{aligned} (1,1,1,-1|1,0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,-1,1,1|1,0) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,0,1,-1|1,-1) &= \frac{1}{\sqrt{2}}, \\ (1,-1,1,0|1,-1) &= -\frac{1}{\sqrt{2}}. \end{aligned} \tag{3.635}$$

Zbývá poslední stav

$$|0,0\rangle = d_1|1\rangle|-1\rangle + d_2|0\rangle|0\rangle + d_3|-1\rangle|1\rangle. \tag{3.636}$$

Z podmínek

$$\langle 2,0|0,0\rangle = \langle 1,0|0,0\rangle = 0 \tag{3.637}$$

dostáváme soustavu rovnic

$$\frac{d_1 + 2d_2 + d_3}{\sqrt{6}} = 0, \quad (3.638)$$

$$\frac{d_1 - d_3}{\sqrt{2}} = 0,$$

z které vyplývají vztahy

$$d_1 = d_3 = -d_2. \quad (3.639)$$

Volme

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|1\rangle|-1\rangle - |0\rangle|0\rangle + |-1\rangle|1\rangle), \quad (3.640)$$

a tedy

$$(1,1,1,-1|0,0) = (1,-1,1,1|0,0) = \frac{1}{\sqrt{3}}, \quad (3.641)$$

$$(1,0,1,0|0,0) = -\frac{1}{\sqrt{3}}.$$

Všechny Clebsch – Gordanovy koeficienty pro impulsmomenty  $l_1 = l_2 = 1$  jsou přehledně shrnuty v tabulce 3.9.



Tab. 3.9

$L$		2	2	1	2	1	0	2	1	2
$M$		2	1	1	0	0	0	-1	-1	-2
$m_1$	$m_2$									
1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0
1	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0	0	0	0	0	0
0	1	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	0	0	0	0	0	0
1	-1	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	0
0	0	0	0	0	$\frac{2}{\sqrt{6}}$	0	$\frac{-1}{\sqrt{3}}$	0	0	0
-1	1	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{6}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{3}}$	0	0	0
0	-1	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	0
-1	0	0	0	0	0	0	0	$\frac{1}{\sqrt{2}}$	$\frac{-1}{\sqrt{2}}$	0
-1	-1	0	0	0	0	0	0	0	0	1

### *Skládání spinů*

Z obecné teorie impulsmomentu vyplývají dvě možné konstrukce  $N$ -elektronových spinových funkcí odpovídající paralelnímu a antiparalelnímu skládání spinů.

$$\begin{aligned}
|N, S, M_s; k\rangle &= \left(\frac{S + M_s}{2S}\right)^{1/2} \left|N - 1, S - \frac{1}{2}, M_s - \frac{1}{2}\right\rangle \alpha(N) + \\
&= \left(\frac{S - M_s}{2S}\right)^{1/2} \left|N - 1, S - \frac{1}{2}, M_s + \frac{1}{2}\right\rangle \beta(N), \\
|N, S, M_s; k\rangle &= -\left(\frac{S - M_s + 1}{2S + 2}\right)^{1/2} \left|N - 1, S + \frac{1}{2}, M_s - \frac{1}{2}\right\rangle \alpha(N) + \\
&= \left(\frac{S + M_s + 1}{2S + 2}\right)^{1/2} \left|N - 1, S + \frac{1}{2}, M_s + \frac{1}{2}\right\rangle \beta(N),
\end{aligned} \tag{3.642}$$

kde  $k$  indexuje různé funkce odpovídající týmž hodnotám  $N, S, M_s$ . Odmocniny vystupující na pravé straně (3.642) jsou C – G koeficienty.

Z jednoelektronového stavu se  $s = \frac{1}{2}$  můžeme tedy získat dva

dvouelektronové stavy s celkovým spinem  $S = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ , nebo

$S = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ . Podobně můžeme z dvouelektronových stavů odvodit

tříelektronové stavy se spinem  $S = 1 + \frac{1}{2} = \frac{3}{2}$ ,  $S = 1 - \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ , nebo

$S = 0 + \frac{1}{2} = \frac{1}{2}$ .

Obecně mohou nabývat kvantová čísla  $S$  a  $M_s$  hodnot

$$S = \frac{N}{2}, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2} - 2, \dots, \begin{cases} 0 & (N \text{ sudé}) \\ 1/2 & (N \text{ liché}) \end{cases} \tag{3.643}$$

$M_s = S, S - 1, \dots, -S$ .

Protože hermitovské operátory  $\hat{S}^2$  a  $\hat{S}_z$  spolu komutují, mají společný systém vlastních vektorů označených  $|S, M_s\rangle$ , přičemž

$$\begin{aligned}
S^2 |S, M_s\rangle &= \hbar^2 S(S+1) |S, M_s\rangle, \\
\hat{S}_z |S, M_s\rangle &= \hbar M_s |S, M_s\rangle.
\end{aligned}
\tag{3.644}$$

Pro posunovací operátory  $\hat{S}_+$  a  $\hat{S}_-$  platí zcela v analogii s (3.619) rovnost

$$\hat{S}_\pm |S, M_s\rangle = \hbar \sqrt{(S \mp M_s)(S \pm M_s + 1)} |S, M_s \pm 1\rangle.
\tag{3.645}$$

Z libovolné funkce  $|N, S, M_s; k\rangle$  lze tedy pomocí posunovacích operátorů konstruovat s použitím (3.645) všechny ostatní funkce příslušející různým hodnotám  $M_s$  při pevných  $N, S, k$ .

V tabulce ( ) uvádíme tvar ortonormálních spinových funkcí pro  $N = 1$  až 4.

Příklad:

$$\hat{S}_- \left| 3, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hbar \left| 3, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hat{S}_- \frac{(\alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha)}{\sqrt{2}}.
\tag{3.646}$$

Posunovací operátory pro spin jsou reprezentovány maticemi

$$\begin{aligned}
\hat{S}_+ &= \hat{S}_x + i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \\
\hat{S}_- &= \hat{S}_x - i\hat{S}_y = \frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} - i \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \right] = \frac{\hbar}{2} \left[ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \right] = \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},
\end{aligned}
\tag{3.647}$$

(viz též (3.165)), pro jejichž působení na spinové funkce  $\alpha$  a  $\beta$  tak dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{s}_+\alpha &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{0}, & \hat{s}_+\beta &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar\alpha, \\ \hat{s}_-\alpha &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \hbar\beta, & \hat{s}_-\beta &= \hbar \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix} = \mathbf{0}.\end{aligned}\tag{3.648}$$

Máme tedy výsledek

$$\hat{S}_- \left| 3, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hbar \left| 3, \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}; 1 \right\rangle = \hat{S}_- \frac{(\alpha\beta\alpha - \beta\alpha\alpha)}{\sqrt{2}} = \hbar \frac{(\alpha\beta\beta - \beta\alpha\beta)}{\sqrt{2}}.\tag{3.649}$$

Počet možných spinových stavů pro různá  $N, S$  je určen vztahem

$$d(N, S) = \binom{N}{\frac{N}{2} - S} - \binom{N}{\frac{N}{2} - S - 1} = \frac{(2S+1)N!}{\left(\frac{N}{2} + S + 1\right)! \left(\frac{N}{2} - S\right)!}.\tag{3.650}$$

**Tab. 3.10 :** Ortonormované  $N$ -elektronové spinové funkce pro  $M_s = S$  a  $N = 1 - 4$ .  
 V tabulce je použita stručná notace, kdy např. namísto  $[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)]\alpha(3)$  píšeme  $(\alpha\beta - \beta\alpha)\alpha$ .

$N$	$S$	$k$	Funkce
1	1/2	1	$\alpha$
2	1	1	$\alpha\alpha$
	0	1	$(\alpha\beta - \beta\alpha)/\sqrt{2}$
3	3/2	1	$\alpha\alpha\alpha$
	1/2	1	$(\alpha\beta - \beta\alpha)\alpha/\sqrt{2}$
		2	$(\beta\alpha\alpha + \alpha\beta\alpha - 2\alpha\alpha\beta)/\sqrt{6}$
4	2	1	$\alpha\alpha\alpha\alpha$
	1	1	$(\alpha\beta - \beta\alpha)\alpha\alpha/\sqrt{2}$
	0	1	$(\beta\alpha\alpha + \alpha\beta\alpha - 2\alpha\alpha\beta)\alpha/\sqrt{6}$
		2	$(\beta\alpha\alpha\alpha + \alpha\beta\alpha\alpha + \alpha\alpha\beta\alpha - 3\alpha\alpha\alpha\beta)/\sqrt{12}$
		3	$(\alpha\beta - \beta\alpha)^2/2$
4		$(2\alpha\alpha\beta\beta + 2\beta\beta\alpha\alpha - \alpha\beta\alpha\beta - \beta\alpha\beta\alpha - \alpha\beta\beta\alpha - \beta\alpha\alpha\beta)/\sqrt{12}$	

Příklad:

Mějme 2 částice se spinem 1/2. Možná uspořádání jsou

$$|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, 1\rangle,$$

$$|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, -1\rangle,$$

$$|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, 0\rangle,$$

$$|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \left|\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right\rangle\left|\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right\rangle \rightarrow |1, 0\rangle.$$

( 3.651 )

Z principu nerozlišitelnosti však nelze poslední 2 konfigurace uvažovat odděleně – fyzikální smysl má jediné jejich lineární kombinace, tj.

$$|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle + |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle + \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |1,0\rangle, \quad (3.652)$$

která je výsledkem působení operátoru

$$\hat{L}_- |1,1\rangle = \left( \hat{L}_-^{(1)} + \hat{L}_-^{(2)} \right) \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle. \quad (3.653)$$

Snížíme-li  $S$  o 1, dostaneme analogicky

$$|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle - |\uparrow\rangle|\downarrow\rangle = \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle - \left| \frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right\rangle \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle \rightarrow |0,0\rangle, \quad (3.654)$$

( 3.652 ) a ( 3.654 ) jsou vzájemně ortogonální, první odpovídá symetrické vlnové funkci a tvoří triplet, druhá pak antisymetrické vlnové funkci a tvoří singlet.

### ***Diracova identita***

Uvažujme dva elektrony 1, 2 a skalární součin příslušných spinových operátorů

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2) = s_x(1)s_x(2) + s_y(1)s_y(2) + s_z(1)s_z(2) \quad (3.655)$$

definovaný na čtyřdimenzionálním prostoruspinových funkcí

$$\{\eta = \eta(\zeta_1, \zeta_2) \equiv \eta(1,2)\}. \quad (3.656)$$

Jako bázi tohoto prostoru volíme

$$\alpha(1)\alpha(2), \quad \alpha(1)\beta(2), \quad \beta(1)\alpha(2), \quad \beta(1)\beta(2). \quad (3.657)$$

Operátor  $\hat{s}(1)\hat{s}(2)$  můžeme vyjádřit s použitím vztahů

$$\hat{s}_x = \frac{1}{2}(\hat{s}_+ + \hat{s}_-), \quad \hat{s}_y = \frac{1}{2i}(\hat{s}_+ - \hat{s}_-) \quad (3.658)$$

ve tvaru

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2) = \frac{1}{2}[s_+(1)s_-(2) + s_-(1)s_+(2)] + s_z(1)s_z(2). \quad (3.659)$$

Tento operátor působí na dvouelektronové funkce ( 3.657 ) způsobem

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2)\eta(1,2) = \hbar^2 \left( \frac{1}{2}\hat{P}_{12}^\zeta - \frac{1}{4} \right) \eta(1,2) \quad (3.660)$$

kde  $\hat{P}_{12}^\zeta$  je operátor transpozice spinových proměnných  $\zeta_1, \zeta_2$ .

Rozepsána do složek, vypadá formule ( 3.660 ) následovně:

$$\begin{aligned} \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\alpha(1)\alpha(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2\alpha(1)\alpha(2), \\ \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\alpha(1)\beta(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2[2\beta(1)\alpha(2) - \alpha(1)\beta(2)], \\ \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\beta(1)\alpha(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2[2\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], \\ \hat{s}(1)\hat{s}(2)[\beta(1)\beta(2)] &= \frac{1}{4}\hbar^2\beta(1)\beta(2). \end{aligned} \quad (3.661)$$

Z ( 3.660 ) přímo plyne tzv. **Diracova identita**

$$\hat{s}(1)\hat{s}(2) = \hbar^2 \left( \frac{1}{2}\hat{P}_{12}^\zeta - \frac{1}{4} \right). \quad (3.662)$$

Ukažme si některé možnosti jejího využití: pro operátor  $\hat{S}^2$  z Diracovy identity dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{S}^2 &= \sum_{i,j} \hat{s}(i)\hat{s}(j) = \sum_i \hat{s}(i)\hat{s}(i) + 2\sum_{i<j} \hat{s}(i)\hat{s}(j) = \\ &= \sum_i \hat{s}^2(i) + 2\hbar^2 \sum_{i<j} \left( \frac{1}{2} \hat{P}_{ij}^\zeta - \frac{1}{4} \right) = \\ &= \frac{3}{4} N\hbar^2 + 2\hbar^2 \sum_{i<j} \left( \frac{1}{2} \hat{P}_{ij}^\zeta - \frac{1}{4} \right) = \hbar^2 \left[ \sum_{i<j} \hat{P}_{ij}^\zeta - \frac{N(N-4)}{4} \right].\end{aligned}\quad (3.663)$$

Pro operátor  $\hat{S}^2$  definujeme projektor

$$\hat{O}_s = \prod_{s' \neq s} \frac{S^2 - \hbar^2 S'(S'+1)}{\hbar^2 [S(S+1) - S'(S'+1)]} \quad (3.664)$$

kde  $S$  označuje vlastní hodnotu, které přísluší vlnová funkce, již hodláme vyprojektovat. Pro případ dvouelektronového systému. Možné hodnoty kvantového čísla  $S$  jsou, jak víme 0 (singletní stav) a 1 (triplexní stav). S použitím Diracovy identity pro  $N = 2$  můžeme konstruovat projektory pro oba tyto stavy

$$\hat{O}_0 = \frac{1}{2}(1 - \hat{P}_{12}^\zeta), \quad \hat{O}_1 = \frac{1}{2}(1 + \hat{P}_{12}^\zeta). \quad (3.665)$$

Působíme-li jimi na všechny funkce báze (3.657) dvouelektronových spinových funkcí, dostáváme čtyři nenulové funkce. Jejich normovaný tvar je



$$\begin{aligned}
& \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)], & S = M_S = 0, \\
& \alpha(1)\alpha(2), & S = 1, M_S = 1, \\
& \frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)], & S = 1, M_S = 0, \\
& \beta(1)\beta(2), & S = 1, M_S = -1.
\end{aligned}
\tag{3.666}$$

## Spinorbitální interakce



Friedrich Hermann Hund (1896 – 1997)



Alfred Landé (1888 – 1976)

I když různé elektrony ve složitém atomu navzájem interagují, lze mnoho z atomové struktury pochopit tak, že uvažujeme každý elektron zvlášť, jako kdyby byl v konstantním zprůměrovaném poli, kterým je elektrické pole jaderného náboje  $Ze$ , zmenšené o stínící efekt ostatních elektronů, které se nalézají blíže jádru. Všechny elektrony se stejným hlavním kvantovým číslem  $n$  se nalézají zhruba ve stejné střední vzdálenosti od jádra. Tyto elektrony tudíž interagují v podstatě se stejným elektrickým polem a mají podobné energie. O souboru elektronů charakterizovaném stejným  $n$  hovoříme jako o atomové **slupce**. Jednotlivé slupky označujeme velkými písmeny podle schématu

$$\begin{array}{cccccc}
 n=1 & n=2 & n=3 & n=4 & n=5 & \dots \\
 K & L & M & N & O & \dots
 \end{array} \quad (3.667)$$

Energie elektronu v určité slupce jemně závisí rovněž na jeho orbitálním kvantovém čísle  $l$ , ačkoliv tato závislost je mnohem slabší, než je závislost na  $n$ . Ve složitých atomech se pro daný elektron mění stupeň odstínění celého náboje jádramezilehlými slupkami závislosti na rozdělení pravděpodobnosti výskytu tohoto elektronu. Je-li  $l$  velké, má toto rozdělení zhruba kruhové obrysy, kdežto při malém  $l$  jsou obrysy eliptické. Elektron s malým  $l$  se tedy spíše nalézá poblíž jádra, kde je jen slabě stíněn ostatními elektrony, což má za následek jeho nižší celkovou energii a tedy vyšší energii vazebnou. Energie elektronů v každé slupce podle toho roste přímo úměrně  $l$ .

Elektrony, které sdílejí ve slupce totéž kvantové číslo  $l$ , tvoří jednu **podslupku**. Každá podslupka je určena svým hlavním kvantovým číslem  $n$ , za nímž následuje písmeno charakterizující orbitální kvantové číslo  $l$  podslupky. Horní index pak označuje počet elektronů v dané podslupce. Např. elektronovou konfiguraci sodíku bychom zapsali

$$1s^2 2s^2 2p^6 3s^1 \quad (3.338)$$

což znamená, že podslupky  $1s$  ( $n = 1, l = 0$ ) a  $2s$  ( $n = 2, l = 0$ ) obsahují po 2 elektronech, podslupka  $2p$  ( $n = 2, l = 1$ ) obsahuje šest elektronů a podslupka  $3s$  ( $n = 3, l = 0$ ) jeden elektron.

Všechny elektrony v jedné podslupce mají velmi blízkou energii, neboť závislost energie elektronu na  $m_l$  a  $m_s$  je již velmi slabá. Původ této závislosti vysvětluje tzv. **spinorbitální interakce**, o níž budeme hovořit v této kapitole.

### *a) Russelova – Saundersova vazba a jemná struktura*

vzhledem k současnému kvantování  $\mathbf{J}, \mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  mohou mít tyto vektory jen zcela určité vzájemné orientace. V případě jednoelektronového atomu jsou možné jen dvě orientace – první odpovídá  $j = l + s$ , takže  $J > L$ , druhá pak  $j = l - s$ , takže  $J < L$ . Obrázek 3.38 znázorňuje oba způsoby, jimiž se mohou vektory  $\mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  skládat na  $\mathbf{J}$  při  $l = 1$ .



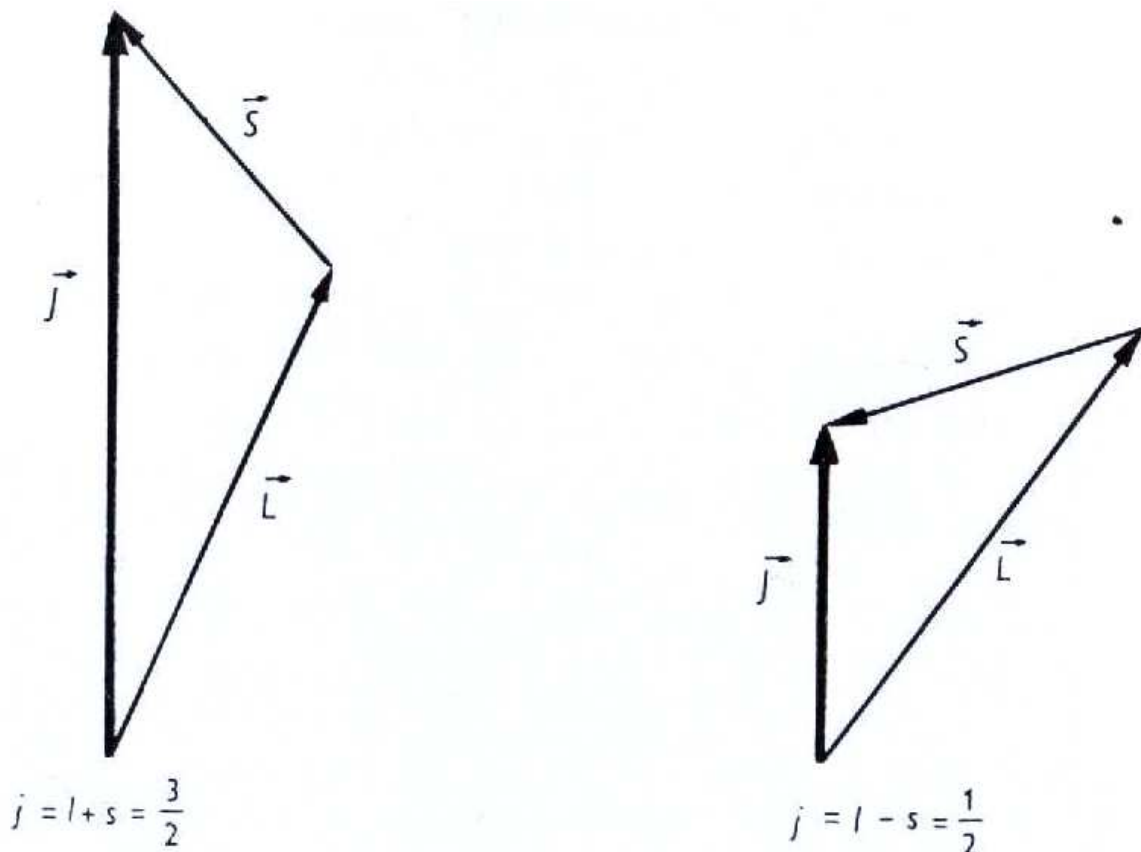
Henry Norris Russell, (1877 – 1957)



Frederick Albert Saunders (1875 – 1963)

Vektory orbitálního a spinového momentu hybnosti zřejmě nemohou být nikdy přesně paralelní či antiparalelní navzájem, ani s vektorem celkového impulsmomentu.

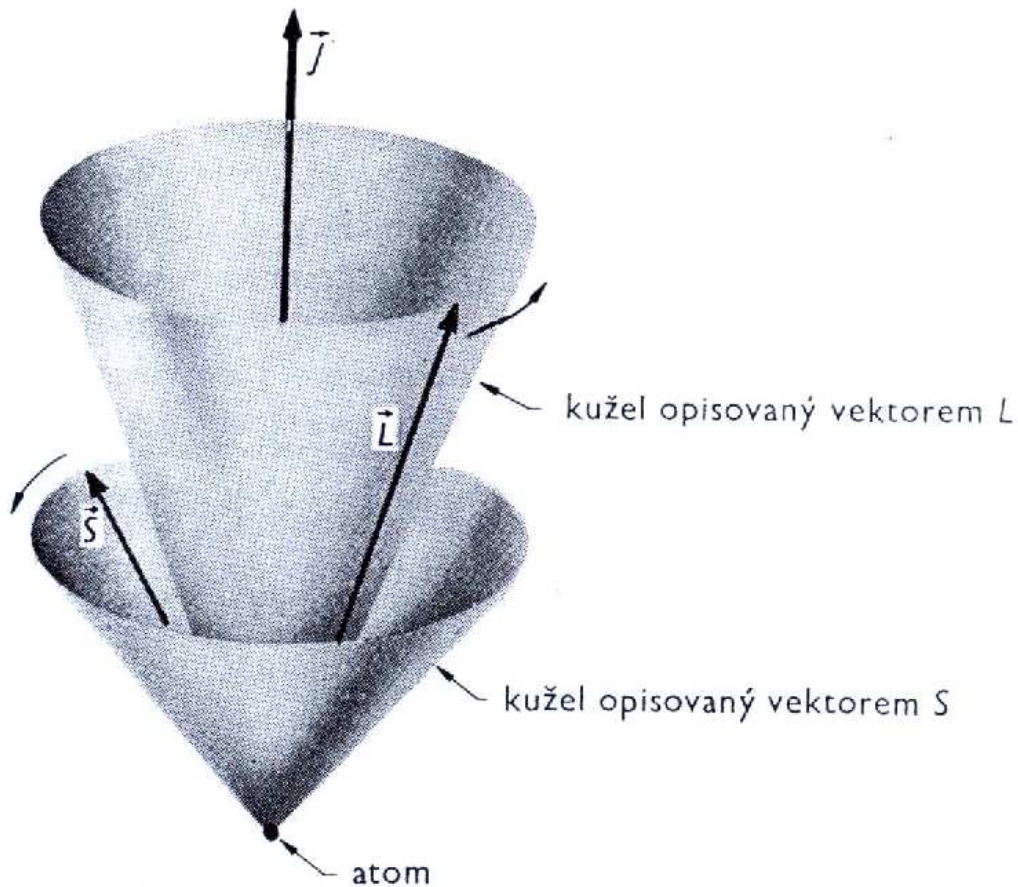
Obr. 3.38



Momenty  $\vec{L}$  a  $\vec{S}$  spolu interagují magneticky, následkem čehož na sebe působí magnetickými momenty. Bez přítomnosti vnějšího

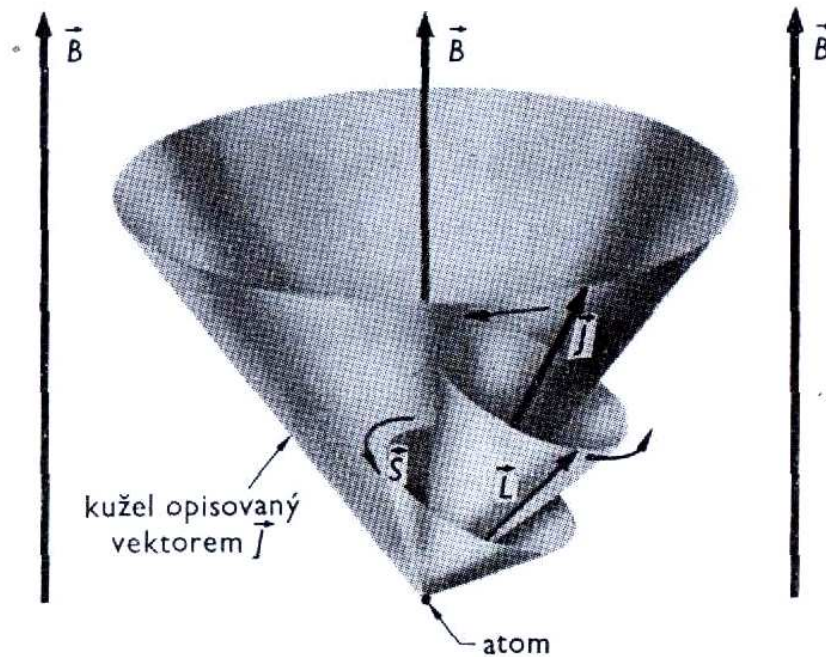
magnetického pole se zachovává celkový impulsmoment  $\mathbf{J}$  a účinek vnitřních momentů se může projevit pouze jako precese vektorů  $\mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  kolem jejich výslednice  $\mathbf{J}$ .

Obr. 3.39



Za přítomnosti magnetického pole  $\mathbf{B}$  však  $\mathbf{J}$  vykonává precesi kolem vektoru  $\mathbf{B}$ , zatímco  $\mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  pokračují v precesi okolo  $\mathbf{J}$ , jak je vidět na obrázku 3.40.

Obr. 3.40



Z obrázku 3.38 použitím kosinové věty plyne pro úhel mezi vektory  $\mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  vztah

$$j(j+1) = l(l+1) + s(s+1) + 2\sqrt{l(l+1)s(s+1)} \cos \vartheta, \quad (3.669)$$

neboli

$$\cos \vartheta = \frac{j(j+1) - l(l+1) - s(s+1)}{2\sqrt{l(l+1)s(s+1)}}. \quad (3.670)$$

Ze vztahů (++) , (--) a z identity

$$\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S} \quad (3.671)$$

jednoduše plyne vztah mezi magnetickými momenty  $\boldsymbol{\mu}^J$ ,  $\boldsymbol{\mu}^L$  a  $\boldsymbol{\mu}^S$

$$\boldsymbol{\mu}^J = \boldsymbol{\mu}^L + \boldsymbol{\mu}^S = \frac{\mu_B}{\hbar} (\mathbf{L} + 2\mathbf{S}). \quad (3.672)$$

Vztah pro magnetický moment atomu, v němž působí  $LS$ -vazba lze potom vyjádřit ve tvaru

$$\boldsymbol{\mu}^J = \frac{\mu_B g_J}{\hbar} \mathbf{J} \quad (3.673)$$

neboli, pro jeho velikost

$$\mu^J = \mu_B g_J \sqrt{J(J+1)}, \quad (3.674)$$

kde  $g_J$  je tzv. **Landého faktor**, jež bude nyní naším úkolem určit. Vynásobíme proto rovnici ( 3.672 ) skalárně  $\mathbf{J}$  a s pomocí ( 3.673 ) obdržíme

$$g_J J^2 = [\mathbf{LJ} + 2\mathbf{SJ}]. \quad (3.675)$$

Protože

$$\begin{aligned} \mathbf{S}^2 &= |\mathbf{J} - \mathbf{L}| = J^2 + L^2 - 2\mathbf{LJ}, \\ \mathbf{L}^2 &= |\mathbf{J} - \mathbf{S}| = J^2 + S^2 - 2\mathbf{SJ}, \end{aligned} \quad (3.676)$$

můžeme ( 3.675 ) přepsat do tvaru

$$g_J J^2 = \frac{1}{2} J^2 + \frac{1}{2} L^2 + \frac{1}{2} S^2 + J^2 + S^2 - L^2 = \frac{1}{2} (3J^2 + S^2 - L^2) \quad (3.677)$$

neboli

$$g_J = \frac{1}{2J^2} (3J^2 + S^2 - L^2) = 1 + \frac{J^2 + S^2 - L^2}{2J^2} = \frac{1}{2} \left( 3 + \frac{S^2 - L^2}{J^2} \right). \quad (3.678)$$

Dosazením za velikost jednotlivých impulsmomentů tak dostáváme

$$g_J = 1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)} = \frac{1}{2} \left( 3 + \frac{S(S+1) - L(L+1)}{J(J+1)} \right), \quad (3.679)$$

kde druhý člen v závorce může nabývat hodnot od  $-1$  ( $J = L$ ) do  $+1$  ( $J = S$ ). Landého faktor atomu tak nabývá hodnot z intervalu  $\langle 1, 2 \rangle$ .

Pro krajní případy nulového spinu resp. Nulového orbitálního momentu dostáváme normální ( $g_J = 1$ ), resp. anomální ( $g_J = 2$ ) hodnotu gyromagnetického poměru.

Právě možnost různých orientací vektoru  $\mathbf{J}$  vzhledem k  $\mathbf{B}$  dává vzniknout tzv. anomálnímu Zemanovu jevu, neboť různé vzájemné orientace znamenají i různé energie.

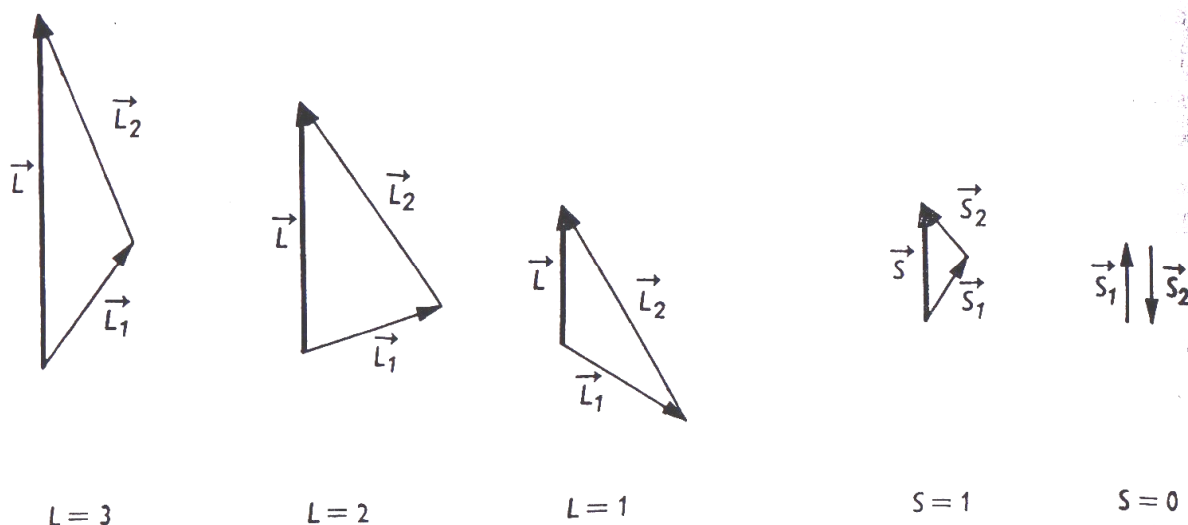
Přispívá-li k celkovému impulsmomentu  $\mathbf{J}$  atomu svými orbitálními a spinovými impulsmomenty více elektronů, je výslednice  $\mathbf{J}$  stále vektorovým součtem těchto impulsmomentů. Jelikož uvažované elektrony navzájem interagují, skládají se jejich jednotlivé impulsmomenty  $\mathbf{L}_i$  a  $\mathbf{S}_i$  na výsledný vektor  $\mathbf{J}$  vždy podle určitého schématu v závislosti na daných okolnostech.

S výjimkou nejtěžších atomů je obvyklé schéma takové, že orbitální impulsmomenty  $\mathbf{L}_i$  různých elektronů jsou elektrostaticky bspřázeny do jediné výslednice  $\mathbf{L}$  a obdobně spiny  $\mathbf{S}_i$  se nezávisle skládají do jiné jediné výslednice  $\mathbf{S}$ . Impulsmomenty  $\mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  pak interagují magneticky přes spinorbitální vazbu a vytvářejí celkový impulsmoment  $\mathbf{J} = \mathbf{L} + \mathbf{S}$ . Jako obvykle jsou  $L$ ,  $S$ ,  $J$ ,  $L_z$ ,  $S_z$ ,  $J_z$  kvantované, s odpovídajícími kvantovými čísly  $L$ ,  $S$ ,  $J$ ,  $M_L$ ,  $M_S$ ,  $M_J$ .

$L$  a  $M_L$  jsou vždy celočíselné, kdežto ostatní kvantová čísla jsou celočíselná pouze je-li počet uvažovaných elektronů sudý. V ostatních případech jsou tato čísla poločíselná.

Jako příklad uvažujme dva elektrony, jeden s  $l_1 = 1$  a druhý s  $l_2 = 2$ . Existují 3 možnosti, jak složit  $\mathbf{L}_1$  a  $\mathbf{L}_2$  na jediný vektor  $\mathbf{L}$  tak, aby byl kvantovaný jako  $L = \hbar\sqrt{L(L+1)}$ , viz obrázek 3.41.

Obr. 3.41



Tyto možnosti odpovídají  $L = 1, 2, 3$ , neboť jsou možné všechny hodnoty  $\mathbf{L}$  od  $l_1 - l_2$  až do  $l_1 + l_2$ .

Spinové kvantové číslo je vždycky  $s = 1/2$ , takže pro součet  $\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$  existují 2 možnosti odpovídající  $S = 0$  a  $S = 1$ .

Poznamenejme, že  $\mathbf{L}_1$  a  $\mathbf{L}_2$  nemohou být nikdy přesně rovnoběžné s  $\mathbf{L}$ , stejně, jako nemohou být  $\mathbf{S}_1$  a  $\mathbf{S}_2$  rovnoběžné s  $\mathbf{S}$ , vyjma případu, kdy se vektorový součet rovná nule.

Kvantové číslo  $J$  může tedy nabývat všech hodnot mezi  $L - S$  a  $L + S$ , což v tomto případě znamená, že  $J = 1, 2, 3, 4$ .

Při výpočtu možných hodnot  $L$ ,  $S$  a  $J$  pro mnohaelektronový atom je třeba mít vždy na paměti, že Pauliho princip omezuje soubor možných kvantových čísel elektronů. Kdybychom měli např. 2 elektrony  $l_1 = l_2 = 1$  se stejným hlavním kvantovým číslem  $n$ , dostali bychom tyto možné hodnoty  $L = 0, 1, 2$ ,  $S = 0, 1$ ,  $J = 0, 1, 2, 3$ . Například stav s  $L = 2$  a  $S = 1$  a tedy hodnotou  $J = 3$  však Pauliho princip vylučuje, neboť se jedná o stav s  $n_1 = n_2$ ,  $l_1 = l_2$ ,  $s_1 = s_2$ , kde oba elektrony mají navíc stejná orbitální i spinová magnetická kvantová čísla. Postupným výčtem všech dovolených stavů bychom zjistili, že Pauliho princip redukuje v tomto případě počet možných stavů z 36 na pouhých 15.

### ***b) Hundova a Landého pravidla***

*1) Plně obsazené slupky a podslupky nepřispívají do celkových momentů hybnosti  $\mathbf{L}$  a celkových spinů  $\mathbf{S}$ .*



2) *Vazba mezi různými  $L_i$  je při stejné multiplicitě určené celkovým spinem taková, že konfigurace s nejnižší energií je ta, která má  $L$  maximální.*

Tuto skutečnost snadno pochopíme, představíme-li si 2 elektrony na témže orbitalu. Jelikož se elektrony navzájem elektrostaticky odpuzují, budou se přirozeně snažit obíhat jádro ve stejném směru, což dává maximální  $L$ . Kdyby obíhaly v navzájem opačných směrech, tj. s minimálním  $L$ , mýjely by se oba elektrony častěji a systém by měl větší energii.

3) *Impulsmomenty  $S_i$  ekvivalentních elektronů, tj. elektronů se stejnou hodnotou kvantových čísel  $n$  a  $l$ , se vždy skládají do konfigurace základního stavu, v němž je  $S$  maximální.*

Původ třetího Hundova pravidla spočívá ve vzájemném odpuzování atomových elektronů. V důsledku tohoto odpuzování je energie atomu tím nižší, čím dále jsou od sebe jeho elektrony. Elektrony v jedné podslupce, jež mají souhlasně orientované spiny, musí mít různé hodnoty  $m_l$  a jsou tedy popsány vlnovými funkcemi s rozdílnou prostorovou distribucí. Elektrony s rovnoběžnými spiny jsou tudíž v prostoru více navzájem odděleny, než kdyby byly spárované. Toto uspořádání, které má menší energii je proto stabilnější.

4) *V normálním multipletu vede k nejnižší energii ta kombinace  $L$  a  $S$ , která dává nejnižší  $J$ .*

**Normálním multipletem** se míní takový stav kterém je podslupka zaplněna méně než z poloviny. Čtvrté hundovo pravidlo vyplývá z existence  $L$ - $S$ -vazby. Antiparalelní  $L$  a  $S$ , tj. stav s  $J = L - S$ , má nejnižší energii. Když je však podslupka téměř obsazena, máme tzv. **obrácený multiplet** nejniže naopak leží stav  $J = l + S$ .

Je zřejmé, že stavy charakterizované ve slabé vazbě různými hodnotami kvantových čísel  $J$ ,  $L$ ,  $S$  budou mít odlišnou energii. Při stejných  $L$  a  $S$  je posunutí stavů úměrné  $J(J + 1)$ . Vzdálenost členů

multipletujemné struktury s hodnotami kvantového čísla  $J$  a  $J + 1$  bude dána

$$E_{J+1} - E_J = \frac{k}{2} [(J+1)(J+2) - J(J+1)] = k(J+1), \quad (3.680)$$

kde  $k$  je konstanta. Vzdálenost dvou členů multipletu je tedy úměrná větší z hodnot čísla  $J$ , připsaných těmto stavům. Uvedená zákonitost se nazývá **Landého pravidlo**.

### c) hyperjemná struktura

Ve vztažné soustavě elektronu se kolem klidného elektronu pohybuje atomové jádro, čímž v této soustavě vzniká magnetické pole působící na vlastní spinový magnetický moment  $\mu_s$  elektronu. Elektron je ovlivňován podobně jako v případě Zeemanova efektu. Na rozdíl od Zeemanova efektu, který vyžaduje působení vnějšího magnetického pole, je spinorbitální interakce závislá pouze na vnitřních vlastnostech daného atomu.

Klasická teorie říká, že proudová smyčka protékaná proudem  $i$ , má ve svém středu magnetické pole o indukci

$$B = \frac{\mu_0 i}{2r}, \quad (3.681)$$

kde  $\mu_0$  je permitivita vakua. Orbitální elektron v atomu vodíku pozoruje, jak jej  $f$ -krát za sekundu obíhá proton s nábojem  $+e$ . Proto na elektron působí magnetické pole s indukcí

$$B = \frac{\mu_0 f e}{2r}. \quad (3.682)$$

Dostředivou silou, udržující elektron na dráze ve vzdálenosti  $r$  od jádra je elektrostatická síla, takže platí

$$\frac{mv^2}{r} = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{r^2}, \quad (3.683)$$

odkud pro rychlost pohybu elektronu máme

$$v = \frac{1}{\sqrt{4\pi\epsilon_0 m_e r}}. \quad (3.684)$$

Pro hledanou frekvenci  $f$  odtud plyne

$$f = \frac{v}{2\pi r} = \frac{e}{2\pi\sqrt{4\pi\epsilon_0 m_e r}}. \quad (3.685)$$

Obvod kruhové dráhy o poloměru  $r$  je  $2\pi r$ , a tak podmínka pro stabilitu dráhy zní

$$n\lambda = 2\pi r, \quad (3.686)$$

kde  $n$  je hlavní kvantové číslo.

Dosazením vlnové délky elektronu za  $\lambda$

$$\lambda = \frac{h}{m_e v} = \frac{h}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m_e}} \quad (3.687)$$

dává podmínku

$$\frac{nh}{e} \sqrt{\frac{4\pi\epsilon_0 r}{m_e}} = 2\pi r, \quad (3.688)$$

odkud

$$r = \frac{n^2 h^2 \epsilon_0}{\pi m_e e^2}. \quad (3.689)$$

Dosažením do ( 3.685 ) dostáváme pro frekvenci pohybu elektronu v atomu vodíku vztah

$$f = \frac{me^4}{4\epsilon_0^2 h^3 n^3} \quad ( 3.690 )$$

Pro atom vodíku v základním stavu ( $n = 1$ ) vychází přibližně  $f \approx 6,5 \cdot 10^{15} \text{ s}^{-1}$ ,  $r \approx 5,3 \cdot 10^{-11} \text{ m}$ , takže  $B \approx 12,5 \text{ T}$ . Magnetická energie takového elektronu je tedy rovna

$$U_m = \mu_B B \approx 10^{-22} \text{ J}. \quad ( 3.691 )$$

Této energii odpovídá změna frekvence

$$\Delta f = \frac{U_m}{h} \approx 175 \text{ GHz}. \quad ( 3.692 )$$

To je ovšem o 2 řády více, než skutečně pozorovaná frekvence hyperjemného štěpení hladin základního stavu atomu vodíku  $f = 1,4204057518 \text{ GHz}$ . Poloklasická Bohrova teorie atomu vodíku v tomto případě tedy selhává a je potřeba k celému problému přistoupit důsledněji kvantově.

Spinu jádra  $\mathbf{I}$  odpovídá magnetický moment  $\boldsymbol{\mu}_I$ , který je se spinem svázán obdobným vztahem ( 3.673 ) jako v případě elektronů

$$\boldsymbol{\mu}_I = \gamma \mathbf{I} = \frac{g \mu_N}{\hbar} \mathbf{I}, \quad ( 3.693 )$$

kde  $g$  je Landého faktor pro jádro a  $\mu_N$  je tzv. **jaderný magneton** zavedený vztahem

$$\mu_N = \mu_B \frac{m_e}{m_p} = \frac{e\hbar}{2m_p}. \quad ( 3.694 )$$

Magnetický moment jádra je zdrojem poruchy, neboť interaguje s magnetickým polem tvořeným kolektivním proudem elektronů v obalu. Tato porucha štěpí dosud uvažovanou strukturu energetických hladin elektronů. Odpovídající magnetickou energii interakce mezi jádrem a magnetickým polem elektronů můžeme tedy zapsat jako

$$\hat{\mathbf{H}}_{\text{int}} = -\boldsymbol{\mu}^I \mathbf{B}, \quad (3.695)$$

kde  $\mathbf{B}$  je kolektivní magnetické pole buzené v místě jádra (v počátku) proudem generovaným spinovou magnetizací

$$\mathbf{j} = \nabla \times \mathbf{M} = \nabla \times -\mu_B \langle \boldsymbol{\sigma} | \boldsymbol{\psi} \rangle. \quad (3.696)$$

Vlnová funkce  $\boldsymbol{\psi}$  je dvoukomponentová vlnová funkce Pauliho teorie Kvantověmechanická hustota proudu ( 3.696 ) budí v počátku magnetické pole , jehož střední hodnotu vypočteme pomocí Biotova – Savartova zákona

$$\langle \mathbf{B} \rangle = \frac{\mu_0}{4\pi} \int \frac{\mathbf{r} \times \mathbf{j}(\mathbf{r})}{r^3} d^3 r. \quad (3.697)$$

Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku vystupující v ( 3.696 ) je součinem  $s$ -funkce

$$\psi_{100}(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{\pi a^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_B}\right), \quad (3.698)$$

kde  $a_B$  je Bohrov poloměr daný vztahem ( 3.231 ) při  $n = 1$ , a funkce  $\eta$  popisující spinový stav elektronu.

Proudovou hustotu ( 3.696 ) pak můžeme přepsat do tvaru

$$\mathbf{j} = -\mu_B \nabla \rho \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle, \quad (3.699)$$

kde

$$\rho = \psi_{100}^2(\mathbf{r}). \quad (3.700)$$

Pro rozbití dvojného vektorového součinu v ( 3.697 ) použijeme identitu

$$\mathbf{a} \times (\mathbf{b} \times \mathbf{c}) = \mathbf{b}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{c}) - \mathbf{c}(\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}) \quad (3.701)$$

neboli

$$\mathbf{r} \times (\nabla \rho \times \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle) = \nabla \rho (\mathbf{r} \cdot \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle) - \langle \boldsymbol{\sigma} \rangle (\mathbf{r} \cdot \nabla \rho). \quad (3.702)$$

Dosazením do ( 3.697 ) nacházíme

$$\langle \mathbf{B}_i \rangle = -\frac{\mu_0 \mu_B}{4\pi} \left( \int \frac{1}{r^3} \frac{\partial \rho}{\partial x_i} \sum_{j=1}^3 x_j \langle \sigma_j \rangle d^3 r - \int \frac{\langle \sigma_j \rangle}{r^3} \sum_{j=1}^3 x_j \frac{\partial \rho}{\partial x_i} d^3 r \right). \quad (3.703)$$

Vzhledem k tomu, že dle ( 3.698 ) nezávisí  $\psi_{100}$  na úhlech, je

$$\frac{\partial \rho}{\partial x_j} = \frac{d\rho}{dr} \frac{x_j}{r} \quad (3.704)$$

a oba integrály v ( 3.703 ) jsou typu

$$I_{jk} = \int \frac{1}{r^4} \frac{d\rho}{dr} x_j x_k d^3 r.$$

Pro  $j \neq k$  dá zjevně úhlová integrace nulu a ze symetrie dále plyne, že

$$I_{11} = I_{22} = I_{33} = I. \text{ Je tedy}$$

$$I = \frac{1}{3} \sum_{j=1}^3 I_{ij} = \frac{1}{3} \int \frac{d\rho}{dr} \frac{\sum x_j^2}{r^4} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = \frac{4\pi}{3} \int_0^\infty \frac{d\rho}{dr} dr = -\frac{4\pi}{3} \rho(0),$$

( 3.705 )

neboť  $\rho(\infty) = 0$ .

Dosazením do ( 3.703 ) obdržíme

$$\langle \mathbf{B}_i \rangle = -\frac{\mu_0 \mu_B}{4\pi} (\langle \sigma_i \rangle I - \langle \sigma_i \rangle 3I) = -\frac{2}{3} \mu_0 \mu_B \rho(0) \langle \sigma_i \rangle$$

( 3.706 )

neboli operátorově

$$\hat{\mathbf{B}} = -\frac{2}{3} \mu_0 \mu_B \delta(\mathbf{r}) \boldsymbol{\sigma},$$

( 3.707 )

kde  $\delta(\mathbf{r})$  je Diracova funkce.

Interakční hamiltonián má tedy podle ( 3.695 ) tvar

$$\hat{\mathbf{H}} = -\boldsymbol{\mu}^I \hat{\mathbf{B}} = \frac{4}{3} \frac{\mu_0 \mu_B \mu_N}{\hbar^2} g \delta(\mathbf{r}) \mathbf{I} \mathbf{S} = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}) \mathbf{I} \mathbf{S} = \boldsymbol{\xi}(\mathbf{r}) \mathbf{I} \frac{\hbar}{2} \boldsymbol{\sigma}.$$

( 3.708 )

Matici poruchy ( 11.14 ) zdiagonalizujeme přechodem k celkovému impulsmomentu atomu

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \mathbf{J}$$

( 3.709 )

který je určen kvantovými čísly  $F$  a  $m_F$

$$F^2 = \hbar^2 F(F+1), \quad F_z = \hbar m_F.$$

( 3.710 )

Umocněním definice ( 3.709 ) dostaneme

$$F^2 = (\mathbf{I} + \mathbf{J})(\mathbf{I} + \mathbf{J}) = \mathbf{I}^2 + \mathbf{J}^2 + 2\mathbf{I}\mathbf{J},$$

( 3.711 )

odkud plyne identita

$$\mathbf{IJ} = \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{I}^2 - \mathbf{J}^2) = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - J(J+1)]. \quad (3.712)$$

Pro námi uvažovanou interakci  $\mathbf{I}\mathbf{S}$ , se vztah ( 3.712 ) redukuje na tvar

$$\mathbf{IS} = \frac{\hbar^2}{2} (\mathbf{F}^2 - \mathbf{I}^2 - \mathbf{S}^2) = \frac{1}{2} [F(F+1) - I(I+1) - S(S+1)]. \quad (3.713)$$

Komposicí spinů  $s = 1/2$  a  $i = 1/2$  vznikne celkový spin  $f = 1, 0$ , přičemž triplexní stav je dán jako

$$\begin{aligned} |1,1\rangle &= |\uparrow\rangle_e |\uparrow\rangle_j, \\ |1,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_j + |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_j), \\ |1,-1\rangle &= |\downarrow\rangle_e |\downarrow\rangle_j \end{aligned} \quad (3.714)$$

a singletní stav jako

$$|0,0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_e |\downarrow\rangle_j - |\downarrow\rangle_e |\uparrow\rangle_j). \quad (3.715)$$

Pro celkovou energii tripletního a singletního stavu ze vztahů ( 3.708 ) a ( 3.713 ) dostáváme

$$E_t = \hbar^2 \langle \xi \rangle \frac{1}{2} \left[ 2 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = \frac{\langle \xi \rangle}{4} \hbar^2, \quad (3.716)$$

$$E_s = \hbar^2 \langle \xi \rangle \frac{1}{2} \left[ 0 - \frac{3}{4} - \frac{3}{4} \right] = -\frac{3}{4} \langle \xi \rangle \hbar^2.$$

hledaná hodnota  $\Delta E$  se tedy rovná

$$\Delta E = E_t - E_s = \langle \xi \rangle \hbar^2. \quad (3.717)$$



Při přechodu mezi hladinami  $E_t$  a  $E_s$  se vyzáří foton o frekvenci

$$\nu = \frac{\Delta E}{2\pi\hbar} = \frac{\langle \xi \rangle \hbar}{2\pi} [\text{Hz}]. \quad (3.718)$$

Dosazením za  $\langle \xi \rangle$  z ( 3.708 ) máme

$$\langle \xi \rangle = \frac{4}{3} \frac{\mu_0 \mu_B \mu_N}{\hbar^2} g \psi_{100}^2(0). \quad (3.719)$$

S uvážením, že pro jádro vodíku (proton) je  $I = 1/2$  a experimentálně stanovená hodnota jeho jaderného magnetického momentu činí  $\mu^I = 2,79$ , nalézáme snadno s pomocí vztahu ( 3.693 ) hodnotu jaderného faktoru  $g \approx 5,585$ .

Odtud pro hledanou hodnotu hyperjemného štěpení nalézáme

$$\nu \approx 1,42 \text{ GHz} \quad (3.720)$$

ve vynikající shodě s experimentálně stanovenou hodnotou. Dalšího zpřesnění výsledku je možno dosáhnout jedině v rámci relativistické kvantové teorie při respektování konečného rozměru protonu i jeho vnitřní struktury, zahrnutí zpětného rázu při vyzáření fotonu, radiačních korekcí souvisejících s kvantovou teorií pole a dalších efektů.

Závěrem poznamenejme, že studovaný přechod se odehrává mezi stavy s různým spinem a nejde tedy o elektrické dipólové záření ale o magnetické dipólové záření. Rozpad má poločas 11 milionů let.

#### ***d) j-j-vazba***

Elektrostatické síly, jež svazují všechna  $\mathbf{L}_i$  do jediného vektoru  $\mathbf{L}$  a všechna  $\mathbf{S}_i$  do jediného vektoru  $\mathbf{S}$  jsou u lehkých atomů větší než magnetické spinorbitální síly vytvářející vazbou  $\mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  vektor  $\mathbf{J}$  a převládají i za přítomnosti nevelkého vnějšího magnetického pole. V těžkých atomech je však náboj jádra dostatečně velký, aby vytvářel

spinorbitální interakce co do velikosti srovnatelné s elektrostatickou interakcí mezi  $\mathbf{L}_i$  a  $\mathbf{S}_i$ . Schéma  $L$ - $S$ -vazby se hroutí a v limitě, kdy  $L$ - $S$ -vazba přestává úplně existovat, se celkové impulsmomenty  $\mathbf{J}_i$  jednotlivých elektronů skládají přímo do impulsmomentu  $\mathbf{J}$  celého atomu. Toto schéma se nazývá  $j$ - $j$ -vazba, neboť každé  $\mathbf{J}_i$  je popsáno kvantovým číslem  $j$ . Platí tedy

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_i &= \mathbf{L}_i + \mathbf{S}_i, \\ \mathbf{J} &= \sum_i \mathbf{J}_i. \end{aligned} \quad (3.721)$$

K označení celkových elektronových stavů stomu podle kvantového čísla  $L$  jeho celkového orbitálního impulsmomentu se používá stejná notace, jako u atomových poslupek, pouze za použití velkých písmen namísto malých:

$$\begin{array}{cccccccc} L=0 & L=1 & L=2 & L=3 & L=4 & L=5 & L=6 & \dots \\ S & P & D & F & G & H & I & \dots \end{array} \quad (3.722)$$

Horní index před písmenem (např.  $^2P$ ) udává multiplicitu stavu, neboli počet různých možných orientací  $\mathbf{L}$  a  $\mathbf{S}$  a tedy počet různých možných hodnot  $J$ . V obvyklém případě, kdy  $L > S$ , je multiplicita rovna  $2S + 1$ , neboť  $J$  se pohybuje v rozmezí hodnot  $L - S, \dots, 0, \dots, L + S$ . Pro několik vybraných hodnot  $S$  je multiplicita stavů přehledně vysvětlena v tabulce 3.11.

Tab. 3.11

$S$	$J$	Multiplicita
0	$L$	1
1/2	$L + 1/2$	2
	$L - 1/2$	
1	$L + 1$	3
	$L$	
	$L - 1$	
⋮	⋮	⋮

V konfiguraci, kde je naopak  $S > L$  se zřejmě multiplicita rovná  $2L + 1$ .

Skupiny stavů takto označené písmenem s udanou multiplicitou se nazývají **termy**. Kvantové číslo  $J$  celkového impulsmomentu se pak píše coby dolní index za písmenem, takže např. dublet  $P$  tři poloviny ( ${}^2P_{3/2}$ ) odpovídá elektronové konfiguraci, kde  $S = 1/2$ ,  $L = 1$ ,  $J = 3/2$ . Pochází-li impulsmoment atomu od jediného vnějšího elektronu, uvádí se obvykle hlavní kvantové číslo  $n$  tohoto elektronu před takovým označením. Např. Základní stav atomu sodíku se píše  $3^2S_{1/2}$ , neboť obsahuje elektron s  $n = 3$ ,  $l = 0$ ,  $s = 1/2$  a tedy  $j = 1/2$  vně uzavřených slupek  $n = 1$  a  $n = 2$ . Kvůli důslednosti se píše v tomto označení horní index 2 jako dublet, ačkoliv zde  $J$  může nabývat jen jediné hodnoty, neboť  $L = 0$  (viz tab. 3.11).

### *Wignerův – Eckartův teorém*



Eugene Paul Wigner (1902 – 1995)



Carl Henry Eckart (1902 – 1973)

Maticové elementy sférického tenzorového operátoru v bázi vlastních hodnot impulsmomentu jsou úměrné impulsmomentu s konstantou úměrnosti rovnou C-G-koeficientům.

$$\begin{aligned}
\langle J, J | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle &= C_{kqjm}^{JM} \frac{\langle J || \hat{\mathbf{T}}^k || j \rangle}{\sqrt{2J+1}} = \\
&= (-1)^{-j+k-M} \begin{pmatrix} j & k & J \\ m & q & -M \end{pmatrix} \langle J || \hat{\mathbf{T}}^k || j \rangle =, \quad (3.723) \\
&= (-1)^{J-M} \begin{pmatrix} J & k & j \\ -M & q & m \end{pmatrix} \langle J || \hat{\mathbf{T}}^k || j \rangle.
\end{aligned}$$

kde  $\hat{\mathbf{T}}_q^k$  je rank  $k$  sférického tenzoru  $\hat{\mathbf{T}}^k$ , kde výrazy nahrazující na pravé straně ( 3.723 ) C-G-koefficienty, se nazývají **Wignerovy 3j permutační symboly**

$$C_{m_1 m_2}^J = (j_1, j_2, m_1, m_2 | j_1, j_2, J, M) = (-1)^{-j_1+j_2-M} \sqrt{2J+1} \begin{pmatrix} j_1 & j_2 & J \\ m_1 & m_2 & -M \end{pmatrix} \quad (3.724)$$

Wignerův – Eckartův teorém říká, že působením sférického tenzorového operátoru  $k$ -tého řádu na vlastní stav impulsmomentu je totéž, jako přičtení stavu s impulsmomentem  $k$  k původnímu stavu. Maticový element sférického tenzorového operátoru je úměrný C-G-koefficientu odpovídajícímu uvažovanému složenému impulsmomentu.

Uvažujme např. vlastní hodnotu polohy  $\langle n, J, M | \hat{x} | n, j, m \rangle$ . Tento maticový element vlastní hodnoty karteziánského operátoru ve sféricky symetrické bázi vlastních hodnot atomu vodíku představuje netriviální problém, který se zjednoduší právě použitím Wignerova – Eckartova teorému.

Víme, že  $x$  je komponentou vektoru  $\mathbf{r}$ . Vektor je tenzorem 1. řádu, takže  $x$  je lineární kombinací  $\hat{\mathbf{T}}_q^1$  pro  $q = -1, 0, 1$ . Skutečně lze ukázat, že

$$x = \frac{\hat{\mathbf{T}}_{-1}^1 - \hat{\mathbf{T}}_1^1}{\sqrt{2}}, \quad (3.725)$$

kde jsme definovali sférický tenzor  $\hat{\mathbf{T}}_0^1 = z$  a

$$\hat{\mathbf{T}}_{\pm 1}^1 = \mp \frac{x \pm iy}{\sqrt{2}}. \quad (3.726)$$

Tedy

$$\langle n, J, M | x | n, j, m \rangle = \left( C_{jm11}^{JM} - C_{jm1(-1)}^{JM} \right) \frac{1}{\sqrt{2}} \langle n, J | \hat{\mathbf{T}}^1 | n, j \rangle. \quad (3.727)$$

Pro složky  $\hat{\mathbf{T}}_i^k$  libovolného tenzorového operátoru  $\hat{\mathbf{T}}^k$ , kde  $k = 0, 1, \dots$ ,  $q = -k, \dots, k$  platí

$$\begin{aligned} [\hat{J}_z, \hat{\mathbf{T}}_q^k] &= \hbar k \hat{\mathbf{T}}_q^k, \\ [\hat{J}_{\pm}, \hat{\mathbf{T}}_q^k] &= \hbar \alpha^{\pm}(k, q) \hat{\mathbf{T}}_{q\pm 1}^k, \end{aligned} \quad (3.728)$$

kde

$$\alpha^{\pm}(k, q) \equiv \sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)}. \quad (3.729)$$

Máme tedy

$$\langle J, M | \hat{J}_z \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle - \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k \hat{J}_z | j, m \rangle = \hbar q \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle, \quad (3.730)$$

a

$$\begin{aligned} &\langle J, M | \hat{J}_{\pm} \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle - \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k \hat{J}_{\pm} | j, m \rangle = \\ &= \hbar \sqrt{k(k+1) - q(q\pm 1)} \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_{q\pm 1}^k | j, m \rangle = \\ &= \hbar \sqrt{J(J+1) - M(M \mp 1)} \langle J, M \mp 1 | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \rangle - \\ &- \hbar \sqrt{j(j+1) - m(m\pm 1)} \langle J, M | \hat{\mathbf{T}}_q^k | j, m \pm 1 \rangle. \end{aligned} \quad (3.731)$$

Přímým dosazením do ( 3.728 ) se lze snadno přesvědčit, že

$$\begin{aligned} T_{-1}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{T}_x - i\hat{T}_y), \\ T_0^1 &= \hat{V}_x, \\ T_1^1 &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{T}_x + i\hat{T}_y). \end{aligned} \quad ( 3.732 )$$

Z ( 3.723 ) dále plyne důležitý vztah

$$\langle J, M | \hat{\mathbf{T}} | j, m \rangle = \left\langle J, M \left| \frac{\hat{\mathbf{J}}(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{T}})}{\hat{\mathbf{J}}^2} \right| j, m \right\rangle. \quad ( 3.733 )$$

Jako ilustraci jeho využití řešme následující úlohu. Uvažujme systém složený ze dvou podsystémů. Máme určit střední hodnotu výsledků měření třetí komponenty impulsmomentu prvního podsystému provedených ve společném vlastním stavu kvadrátů impulsmomentů obou podsystémů a třetí komponenty a kvadrátu impulsmomentu celého systému.

Tato střední hodnota je podle ( 3.733 ) dána maticovým elementem

$$\langle j_1, j_2, J, M | \hat{\mathbf{J}}_z^{(1)} | j_1, j_2, J, M \rangle = \left\langle j_1, j_2, J, M \left| \frac{\hat{\mathbf{J}}_z(\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{J}}_1)}{\hat{\mathbf{J}}^2} \right| j_1, j_2, J, M \right\rangle. \quad ( 3.734 )$$

Protože platí

$$\hat{\mathbf{J}}\hat{\mathbf{J}}_1 = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{J}}^2 + \hat{\mathbf{J}}_1^2 - \hat{\mathbf{J}}_2^2), \quad ( 3.735 )$$

nalozáme pro hledanou střední hodnotu řešení

$$\left\langle j_1, j_2, J, M \left| \hat{J}_z^{(1)} \right| j_1, j_2, J, M \right\rangle = \frac{J(J+1) + j_1(j_1+1) - j_2(j_2+1)}{2J(J+1)}. \quad (3.736)$$

Docházíme tak k závěru, že diagonální maticové elementy tenzorového operátoru prvního řádu jsou úměrné impulsmomentu s konstantou úměrnosti  $g_J$  (Landého faktor).

### Příklad: kvadrupólový moment jádra

Není-li rozložení jaderného náboje sféricky symetrické, závisí elektrostatická energie jádra na orientaci jádra vzhledem k elektrostatickému poli s potenciálem  $\varphi(\mathbf{r})$ . Pro energii interakce jádra s polem dostáváme

$$W = \int \rho(\mathbf{r}) \varphi(\mathbf{r}) dV, \quad (3.737)$$

kde  $\rho(\mathbf{r})$  je hustota náboje. Provedeme rozvoj pole  $\varphi(\mathbf{r})$  podle  $\mathbf{r} = (0,0,0)$ :

$$\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(0) + \sum_i \left. \frac{\partial \varphi}{\partial x_i} \right|_{r=0} x_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left. \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \right|_{r=0} x_i x_j + \dots, \quad (3.738)$$

pak první člen určuje energii bodového náboje, druhý člen energii elektrického dipólu. Jelikož ale vlnové funkce jader ve stacionárním stavu mají lichou paritu, vychází v tomto případě energie

$$W = \int x_i \rho(\mathbf{r}) dV = 0. \quad (3.739)$$

Třetí člen je první, který závisí na orientaci jádra vzhledem k  $\varphi$ . Jedná se o kvadrupólovou interakci, jejíž energie je

$$W_Q = \frac{1}{2} \sum_{i,j} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \Big|_{r=0} \int x_i x_j \rho(\mathbf{r}) dV. \quad (3.740)$$

Označme

$$V_{ij} = \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x_i \partial x_j} \quad (3.741)$$

a definujme **tenzor kvadrupólového momentu**

$$Q_{ij} = \int (3x_i x_j - \delta_{ij} r^2) \rho(\mathbf{r}) dV \quad (3.742)$$

odkud pro interakční energii kvadrupólové interakce máme

$$\begin{aligned} W_Q &= \frac{1}{6} \sum_{i,j} V_{ij} Q_{ij} + \frac{1}{6} \sum_{i,j} \left( V_{ij} \int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2 \delta_{ij} dV \right) = \\ &= \frac{1}{6} \left( \sum_{i,j} V_{ij} Q_{ij} + \sum_i V_{ii} \right) \int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2 dV, \end{aligned} \quad (3.743)$$

kde výraz  $\int \rho(\mathbf{r}) \mathbf{r}^2 dV$  nezávisí na orientaci, takže dále budeme

pracovat pouze s částí, která na orientaci závisí.

Tenzor kvadrupólového momentu je rotačně symetrický tenzor 2. řádu s nulovou stopou. V systému jeho hlavních os platí

$$Q_{11} = Q_{22} = -\frac{1}{2} Q_{33}. \quad (3.744)$$

$V_{ij}$  je symetrický tenzor, který lze diagonalizovat s nulovou stopou:

$$V'_{ij} = V_{ij} - \delta_{ij} \frac{1}{3} \text{Tr } \mathbf{V} \Rightarrow \sum_i V'_{ii} = 0. \quad (3.745)$$



Naším cílem bude zapsat  $W_Q$  pomocí operátorů jaderného spinu.

Zavedem tenzorový operátor kvadrupólového momentu

$$\hat{Q}_{ij} = e \sum_k \left[ \frac{3}{2} (\hat{x}_i^k \hat{x}_j^k + \hat{x}_j^k \hat{x}_i^k) - \delta_{ij} r_k^2 \right] \quad (3.746)$$

a tenzorový operátor jaderného spinu

$$\hat{S}_{ij} = \left[ \frac{3}{2} (\hat{I}_i \hat{I}_j + \hat{I}_j \hat{I}_i) - \delta_{ij} |\hat{I}|^2 \right]. \quad (3.747)$$

Na základě analogie komutačních relací mezi  $\hat{x}_i$  a  $\hat{I}_i$  s  $\hat{I}_j$ :

	$T_m^2(\hat{\mathbf{I}})$	$T_m^2(\hat{\mathbf{r}})$
$T_2^2$	$(\hat{I}^+)^2$	$(x + iy)^2$
$T_1^2$	$-(\hat{I}_z I^+ + I^+ I_z)$	$-2\hat{z}(\hat{x} + i\hat{y})$
$T_0^2$	$\sqrt{\frac{3}{2}}(3\hat{I}_z - \hat{I}^2)$	$\sqrt{\frac{3}{2}}(3\hat{z} - \hat{z}^2)$
$T_{-1}^2$	$\hat{I}_z I^- + I^- I_z$	$2\hat{z}(\hat{x} - i\hat{y})$
$T_{-2}^2$	$(\hat{I}^-)^2$	$(x - iy)^2$

$$\left[ \hat{I}_x, \hat{y} \right] = i\hat{z}, \quad (3.748)$$

$$\left[ \hat{I}_x, \hat{I}_y \right] = i\hat{I}_z,$$

z Wignerova – Eckartova teorému plyne, že operátory  $\hat{Q}_{ij}$  a  $\hat{S}_{ij}$  se dají

sestrojit z  $T_m^2(\hat{\mathbf{I}})$  a  $T_m^2(\hat{\mathbf{r}})$  analogickými kombinacemi. Maticové

operátory  $\hat{\mathbf{Q}}$  a  $\hat{\mathbf{S}}$  mají pro dané  $I$  navzájem úměrné maticové elementy mezi stavy s různými  $m_I$ :

$$\langle I, m_I | \hat{Q}_{ij} | I, m'_I \rangle = C \langle I, m_I | \hat{S}_{ij} | I, m'_I \rangle, \quad (3.749)$$

kde C-G-koefficienty  $C$  nezávisí na  $m_I, m'_I$ .

Namísto ( 3.743 ) tedy můžeme psát

$$W_Q = \frac{1}{6} C \sum V_{ij} S_{ij}. \quad (3.750)$$

Označme

$$eQ = \langle I, I | \hat{Q}_{zz} | I, I \rangle = \int \rho(\mathbf{r}) (3z^2 - r^2) dV. \quad (3.751)$$

Z Wignerova – Eckartova teorému pak plyne

$$eQ = \langle I, I | 3\hat{I}_z^2 - \hat{I}^2 | I, I \rangle = C (3I_z^2 - I(I+1)) = CI(2I-1) \quad (3.752)$$

a tedy

$$C = \frac{eQ}{I(2I-1)}. \quad (3.753)$$

Pro hamiltonián kvadrupólové interakce tak dostáváme

$$\begin{aligned} \hat{W}_Q &= \frac{eQ}{6I(2I-1)} (\text{Tr } \mathbf{VS}) = \\ &= \frac{eQ}{6I(2I-1)} (V_{xx} (2I_x^2 - I^2) + V_{yy} (2I_y^2 - I^2) + V_{zz} (2I_z^2 - I^2)). \end{aligned} \quad (3.754)$$

Zavedeme parametr asymetrie

$$\eta = \frac{V_{xx} - V_{yy}}{V_{zz}} \quad (3.755)$$

odkud plyne

$$V_{xx} = \eta V_{zz} + V_{yy} = \frac{1}{2}(\eta - 1)V_{zz}, \quad (3.756)$$

$$V_{yy} = -(\eta V_{zz} - V_{xx}) = -\frac{1}{2}(\eta + 1)V_{zz},$$

coby důsledek nulové stopy. Výsledný hamiltonián kvadrupólové interakce zapsaný pomocí operátorů jaderného spinu má tedy tvar

$$\hat{W}_Q = \frac{eQV_{zz}}{4I(2I-1)} \left( 3I_z^2 - I^2 + \eta(I_x^2 + I_y^2) \right). \quad (3.757)$$

### Struktura víceelektronových atomů

Vylučovací princip vymezuje zcela určitou hranici pro počet elektronů, jež mohou obsadit danou podslupku. Podslupka je charakterizována určitým hlavním kvantovým číslem  $n$  a orbitálním kvantovým číslem  $l$ , kde

$$l = 0, 1, 2, \dots, n-1. \quad (3.758)$$

Pro každé  $l$  existuje  $2l + 1$  různých hodnot magnetického kvantového čísla  $m_l = 0, \pm 1, \pm 2, \dots, \pm l$  a dvě možné hodnoty spinového

kvantového čísla  $m_s = \left( \pm \frac{1}{2} \right)$  pro každé  $m_l$ . Každá podslupka tedy

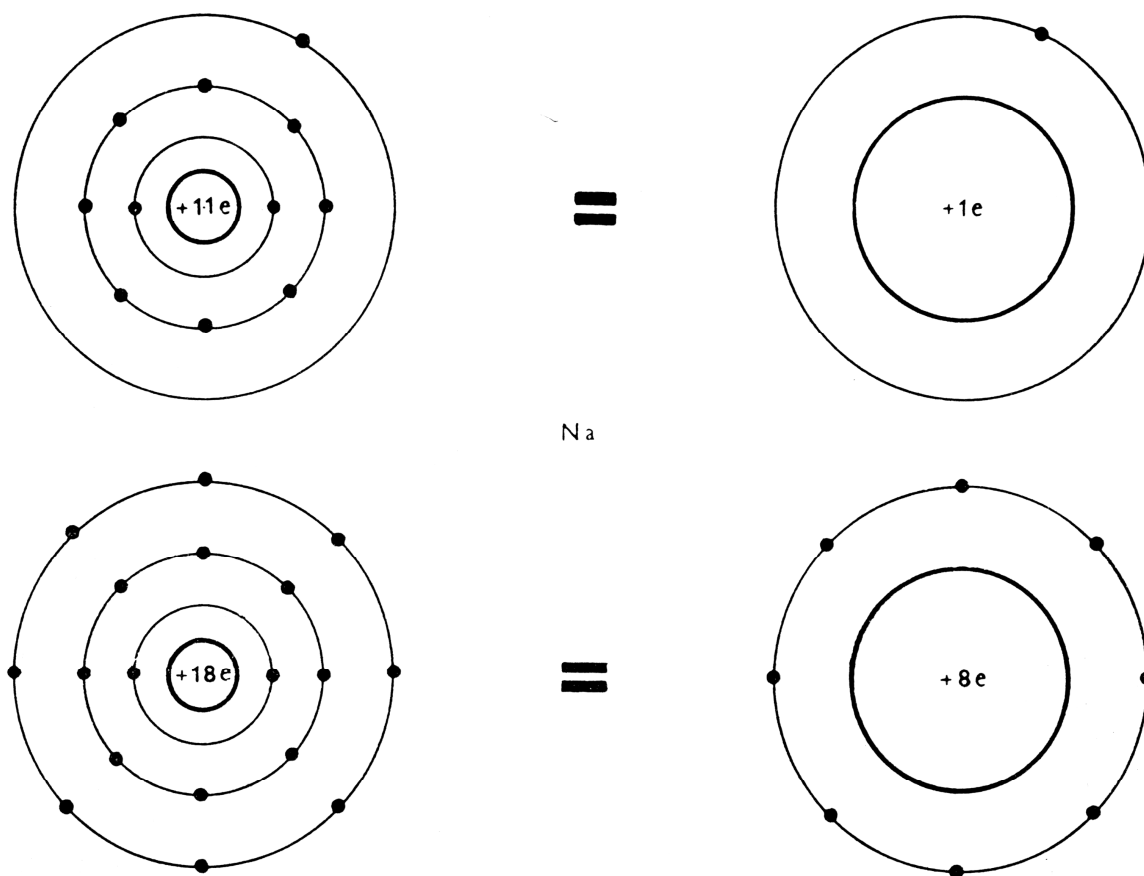
může obsahovat nejvýše  $2(2l + 1)$  elektronů a každá slupka maximálně

$$\begin{aligned} \sum_{l=0}^{n-1} 2(2l+1) &= 2[1+3+5+\dots+2(n-1)+1] = \\ &= 2[1+3+5+\dots+(2n-1)] = 2 \frac{n}{2} [1+(2n-1)] = 2n^2 \end{aligned} \quad (3.759)$$

elektronů. Atomová slupka či podslupka, která je zcela zaplněna elektrony, se nazývá **uzavřená**. Celkový orbitální a spinový impulsmoment elektronů v uzavřené podslupce je roven nule a rozdělení jejich efektivního náboje je symetrické. Elektrony v uzavřené slupce neutrálního atomu jsou velmi silně vázané, protože kladný náboj jádra daleko převyšuje záporný náboj vnitřních stínících elektronů (obr. 3.42). Jelikož atom obsahující pouze uzavřené slupky nemá žádný dipólový moment, nepřitahuje jiné elektrony a jeho vlastní elektrony nelze snadno odtrhnout. Od takových atomů lze očekávat, že budou chemicky inertní.

Naopak atomy s jedním elektronem ve valenční slupce tento elektron často ztrácejí, neboť je poměrně daleko od jádra, jehož celkový náboj vnitřní elektrony odstiňují na pouhý efektivní náboj  $+e$ . K takovým atomům patří vodík, a alkalické kovy. Proto mají tyto prvky valenci  $+1$ .

Obr. 3.42



Atomy, jimž ve vnějších slupkách chybí k uzavřenosti jeden elektron se snaží získat tento elektron přitažlivou silou svého nedokonale odstíněného jaderného náboje, což vysvětluje chemické vlastnosti halogenů.

Tímto způsobem lze vždy objasnit vzájemnou podobnost prvků v grupách periodické soustavy prvků.

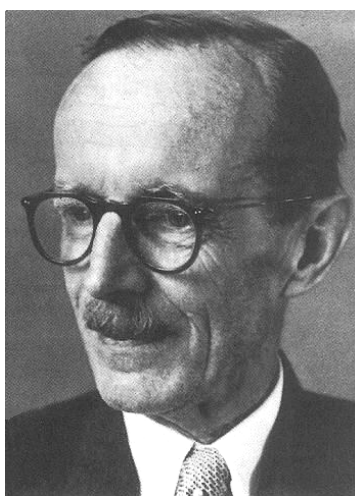
Původ přechodových prvků spočívá v silnější vazbě elektronů  $s$  oproti elektronům  $d$  a  $f$ , která se projevuje u složitých atomů. Prvně se tento efekt vyskytuje u draslíku, jehož poslední vnější elektron je v podstavu  $4s$  namísto očekávaného  $3d$ . Rozdíl ve vazebné energii mezi elektrony  $3d$  a  $4s$  není příliš velký, jak je vidět u konfigurací chromu a mědi. U obou těchto prvků se objevuje další elektron  $3d$  na účet neobsazeného místa v podslupce  $4s$ .

### ***Výstavbový princip a Madelungova pravidla***

Výstavbový princip říká, že orbitaly s nižší energií se zaplňují elektrony dříve než orbitaly s energií vyšší.

V základním stavu atomu tedy elektrony obsazují jednotlivé slupky a podslupky tak, aby měly co nejnižší energii.

Elektronový pár se stejnou orientací spinů obou elektronů má mírně menší energii, než elektronový pár s opačnou orientací spinů. Protože v jednom orbitalu mohou být pouze elektrony s opačným spinem, dochází nejprve k obsazení identických orbitalů (se stejným  $n$  a  $l$ ) jedním elektronem a poté teprve dochází k párování elektronů.

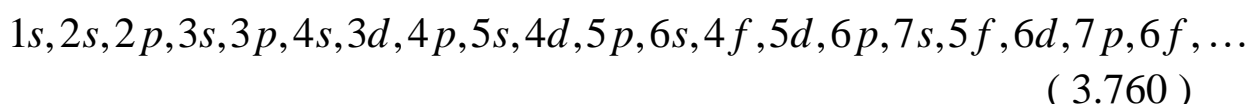


**Erwin Madelung (1881 – 1972)**

Pro obsazování orbitalů elektrony je tedy rozhodující součet hlavního kvantového čísla  $n$  a vedlejšího kvantového čísla  $l$  a pak teprve velikost hlavního kvantového čísla  $n$ , tzn.

- přednostně se obsadí orbital, u něhož je součet  $n + l$  menší
- z orbitalů se stejným součtem  $n + l$ , se jako první zaplní ten, jehož hlavní kvantové číslo  $n$  je menší

elektronové podslupky (orbitaly) se tedy zaplňují v následujícím pořadí:



Na základě této posloupnosti lze snadno pochopit výraznou podobnost v chemických vlastnostech lathanidů a aktinidů. Všechny lathanidy mají stejnou konfiguraci  $5s^2, 5p^6, 6s^2$ , ale neúplné podslupky  $4f$ . Přibývání elektronů v této podslupce nemá prakticky žádný vliv na chemické vlastnosti lathanidů, které jsou určovány vnějšími elektrony. Podobně všechny aktinidy mají konfiguraci  $6s^2, 6p^6, 7s^2$  a liší se jen počtem svých elektronů  $5f$  a  $6d$ .

### ***Výjimky:***

Energie  $d$  orbitalu, který je zcela nebo z poloviny zaplněný, je nižší než energie nejbližšího  $s$  orbitalu. Proto v případě  $d^4$  a  $d^9$  prvků dochází k přeskoku jednoho elektronu z  $s$  orbitalu do orbitalu  $d$ . Např. elektronová konfigurace chromu je  $[\text{Ar}] 4s^1 3d^5$ , nikoliv  $[\text{Ar}] 4s^2 3d^4$ .

	K			L			M			N				O					P						Q						
	1s	2s	2p	3s	3p	3d	4s	4p	4d	4f	5s	5p	5d	5f	5g	6s	6p	6d	6f	6g	6h	7s	7p	7d	7f	7g	7h	7i			
<b>H</b>	1																														
<b>He</b>	2																														
<b>Li</b>	2	1																													
<b>Be</b>	2	2																													
<b>B</b>	2	2	1																												
<b>C</b>	2	2	2																												
<b>N</b>	2	2	3																												
<b>O</b>	2	2	4																												
<b>F</b>	2	2	5																												
<b>Ne</b>	2	2	6																												
<b>Na</b>	2	2	6	1																											
<b>Mg</b>	2	2	6	2																											
<b>Al</b>	2	2	6	2	1																										
<b>Si</b>	2	2	6	2	2																										
<b>P</b>	2	2	6	2	3																										
<b>S</b>	2	2	6	2	4																										
<b>Cl</b>	2	2	6	2	5																										
<b>Ar</b>	2	2	6	2	6																										
<b>K</b>	2	2	6	2	6		1																								
<b>Ca</b>	2	2	6	2	6		2																								
<b>Sc</b>	2	2	6	2	6	1	2																								
<b>Ti</b>	2	2	6	2	6	2	2																								
<b>V</b>	2	2	6	2	6	3	2																								
<b>Cr</b>	2	2	6	2	6	5	1																								
<b>Mn</b>	2	2	6	2	6	5	2																								
<b>Fe</b>	2	2	6	2	6	6	2																								
<b>Co</b>	2	2	6	2	6	7	2																								
<b>Ni</b>	2	2	6	2	6	8	2																								
<b>Cu</b>	2	2	6	2	6	10	1																								
<b>Zn</b>	2	2	6	2	6	10	2																								
<b>Ga</b>	2	2	6	2	6	10	2	1																							
<b>Ge</b>	2	2	6	2	6	10	2	2																							
<b>As</b>	2	2	6	2	6	10	2	3																							
<b>Se</b>	2	2	6	2	6	10	2	4																							
<b>Br</b>	2	2	6	2	6	10	2	5																							
<b>Kr</b>	2	2	6	2	6	10	2	6																							
<b>Rb</b>	2	2	6	2	6	10	2	6		1																					







<b>115</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10					2	3						
<b>Lv</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10					2	4						
<b>117</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10					2	5						
<b>118</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10					2	6						
<b>119</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	1				2	6						
<b>120</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	2				2	6						
<b>121</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	3				2	6						
<b>122</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	4				2	6						
<b>123</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	5				2	6						
<b>124</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	6				2	6						
<b>125</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	7				2	6						
<b>126</b>	2	2	6	2	6	10	2	6	10	14	2	6	10	14		2	6	10	8				2	6						

### *Parita atomu*

V klasické fyzice se pojem parity nezavádí z prostého důvodu – pohybové zákony klasické fyziky jsou invariantní vůči inverzi souřadnic, takže pojem parity ztrácí smysl.

Jinak je tomu ve fyzice kvantové. Jak již dobře víme, vlnové funkce popisující stav elektronu v atomu vodíku a jemu podobných systémech zapisujeme obvykle ve sférických souřadnicích ( 3.166 ). Transformační vztahy pro inverzi, které mají v kartézských souřadnicích známý tvar

$$x' = -x, \quad y' = -y, \quad z' = -z, \quad (3.761)$$

jsou ve sférických souřadnicích vyjádřeny jako

$$r' = r, \quad \vartheta' = \pi - \vartheta, \quad \varphi' = \pi + \varphi. \quad (3.762)$$

Funkce vodíkového typu mají obecný tvar ( 3.218 ). Po transformaci ( 3.762 ) se tyto funkce mění na

$$\psi_{nlm}(r', \vartheta', \varphi') = R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\pi - \vartheta) e^{im(\varphi + \pi)}. \quad (3.763)$$

Odtud plyne, že transformace vlnové funkce  $\psi_{nlm}$  je určena pouze transformací kulové funkce. Obecně platí

$$\begin{aligned}\Theta_{lm}(\pi - \vartheta) &= (-1)^{l-m} \Theta_{lm}(\vartheta), \\ e^{im(\varphi+\pi)} &= (-1)^m e^{im\varphi},\end{aligned}\tag{3.764}$$

takže ( 3.763 ) můžeme přepsat do tvaru

$$\psi_{nlm}(r', \vartheta', \varphi') = (-1)^l R_{nl}(r) \Theta_{lm}(\vartheta) e^{im\varphi} = (-1)^l \psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi).\tag{3.765}$$

Parita vlnové funkce  $\psi_{nlm}(r, \vartheta, \varphi)$  tedy závisí pouze na kvantovém čísle  $l$  a je sudá resp. lichá v závislosti na tom, je-li  $l$  sudé resp. liché. Uvažujme nyní systém dvou neinteragujících elektronů v jednoelektronové aproximaci atomového obalu, popsany vlnovou funkcí

$$\psi(1,2) = \psi_{n_1 l_1 m_1}(r_1, \vartheta_1, \varphi_1) \psi_{n_2 l_2 m_2}(r_2, \vartheta_2, \varphi_2).\tag{3.766}$$

Při transformaci ( 3.761 ) se bude tato vlnová funkce chovat jako

$$\psi(1,2) \rightarrow (-1)^{l_1} (-1)^{l_2} \psi(1,2) = (-1)^{l_1+l_2} \psi(1,2).\tag{3.767}$$

Při skládání systému se tedy parity mezi sebou násobí. V daném případě bude parita systému ( 3.767 ) buď sudá, bude-li  $l_1 + l_2$  sudé, nebo lichá, je-li  $l_1 + l_2$  liché.

Obecně platí, že parita systému složeného z navzájem neinteragujících podsystemů je dána součinem parit vlnových funkcí daných podsystemů

$$\hat{\Pi} = \prod_{i=1}^n (-1)^{l_i}.\tag{3.768}$$

Veličiny typu  $(-1)^l$  můžeme pokládat za vlastní hodnoty operátoru parity ( 3.768 ).

Parita stavu nebo termu se ve spektroskopii běžně používá a připisuje se jako pravý horní index ke spektroskopickému symbolu stavu, např.  ${}^3P_2^-$  znamená stav s lichou paritou,  ${}^3S_1^+$  stav se sudou paritou.

## Atomová spektra

### Výběrová pravidla

Má-li dojít k zářivému přechodu mezi dvěma stavy atomu, požadujeme nenulovost střední hodnoty polohy elektronu, neboli integrálu

$$I \sim \bar{x} = \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_n^* \psi_m dx, \quad (3.769)$$

kde  $I$  je intenzita emitovaného záření. Přechody, pro něž je tento integrál konečný a nenulový, se nazývají **dovolené přechody**. Naopak přechody, pro něž je ( 3.769 ) nulový nazýváme **zakázané přechody**. V případě vodíkového atomu je k udání počátečního a konečného stavu zářivého přechodu zapotřebí tří kvantových čísel a integrovat se musí přes celý prostor

$$I \sim \bar{q} = \int_{-\infty}^{\infty} q \psi_{n',l',m_l}^* \psi_{n,l,m} dV, \quad (3.770)$$

kde čárkovaná kvantová čísla odpovídají počátečnímu stavu, nečárkovaná konečnému stavu a souřadnice  $q$  odpovídá jedné ze souřadnic  $x, y, z$ .

Příslušné záření odpovídá vyzařování dipólu orientovaného podél osy  $q$ . Protože vlnové funkce atomu vodíku známe, můžeme vypočít ( 3.769 ) pro všechna  $q$  i pro všechny dvojice stavů lišících se v jednom či více kvantových číslech. Máme tedy

$$\begin{aligned}
\bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} x \psi_{n,l,m}^* \psi_{n',l',m'} dV = \int_0^{\infty} \int_0^{\pi} \int_0^{2\pi} r \sin \vartheta \cos \varphi \psi_{n,l,m}^* \psi_{n',l',m'} r^2 \sin \vartheta dr d\vartheta d\varphi = \\
&= \int_0^{\infty} r^3 R_{n,l}^* R_{n',l'} dr \int_0^{\pi} \sin^2 \vartheta \Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l',m'_l} d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} \cos \varphi d\varphi.
\end{aligned} \tag{3.771}$$

Protože

$$\cos \varphi = \frac{e^{i\varphi} + e^{-i\varphi}}{2} \tag{3.772}$$

a normovaná azimutální část vlnové funkce je dána vztahem ( 3.182 ), můžeme poslední integrál v ( 3.771 ) vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned}
&\int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} \cos \varphi d\varphi = \\
&= \frac{1}{4\pi} \int_0^{2\pi} \exp[-i\varphi(m_l - m'_l + 1)] + \exp[-i\varphi(m_l - m'_l - 1)] d\varphi,
\end{aligned} \tag{3.773}$$

kde výrazy  $(m_l - m'_l + 1)$  a  $(m_l - m'_l - 1)$  mohou být rovny pouze  $k = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$  . Protože platí

$$\exp(-ik\varphi) = \cos(k\varphi) - i \sin(k\varphi) \tag{3.774}$$

je

$$\int_0^{2\pi} \exp(-ik\varphi) d\varphi = \int_0^{2\pi} \cos(k\varphi) d\varphi - i \int_0^{2\pi} \sin(k\varphi) d\varphi = 0 \quad \forall k \neq 0. \tag{3.775}$$

Pokud tedy není

$$(m_l - m'_l + 1) = 0 \vee (m_l - m'_l - 1) = 0, \quad (3.776)$$

což je totéž jako

$$\Delta m_l = m_l - m'_l = \pm 1, \quad (3.777)$$

nemohou nastat žádné přechody.

Totožné výběrové pravidlo bychom dostali výpočtem ( 3.770 ) pro  $q = y$ .

Pro  $q = z$  dostaneme

$$\begin{aligned} \bar{x} &= \int_{-\infty}^{\infty} z \psi_{n,l,m}^* \psi_{n',l',m'_l} dV = \\ &= \int_0^{\infty} r^3 R_{n,l}^* R_{n',l'} dr \int_0^{\pi} \sin \vartheta \cos \vartheta \Theta_{l,m_l}^* \Theta_{l',m'_l} d\vartheta \int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi. \end{aligned} \quad (3.778)$$

Třetí integrál je

$$\int_0^{2\pi} \Phi_{m_l}^* \Phi_{m'_l} d\varphi = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \exp[-i\varphi(m_l - m'_l)] d\varphi \quad (3.779)$$

a vzhledem k ( 3.775 ) se rovná nule pokud není  $m_l = m'_l$ , neboli

$$\Delta m_l = 0.$$

Úplné výběrové pravidlo pro  $m_l$  ve vodíkovém atomu tedy zní

$$\Delta m_l = 0, \pm 1. \quad (3.780)$$

Ačkoliv jsme si toto pravidlo ověřili jen pro atom vodíku, platí ve skutečnosti ve všech atomech pro přechody zahrnující přeskok jediného elektronu z vnější slupky.

Podíváme-li se dále na obrázky 3.10, 3.12, vidíme, že přechod ze stavu  $2p$  do stavu  $1s$  znamená přechod od jednoho rozdělení hustoty pravděpodobnosti k jinému. Naopak přechod ze stavu  $2s$  do stavu  $1s$  se odehrává mezi stejnými distribucemi pravděpodobnosti a můžeme jej přirovnat k radiálnímu pulzování elektronového oblaku atomu. Kmity tohoto druhu (kmitání monopólu), jak víme z předešlé kapitoly, nevedou k vyzařování elektromagnetických vln. Aniž bychom zde prováděli explicitní kvantově mechanický výpočet výběrových pravidel pro  $\Delta l$ , vede nás tato poloklasická analogie ke správnému názoru, že

$$\Delta l = \pm 1. \quad (3.781)$$

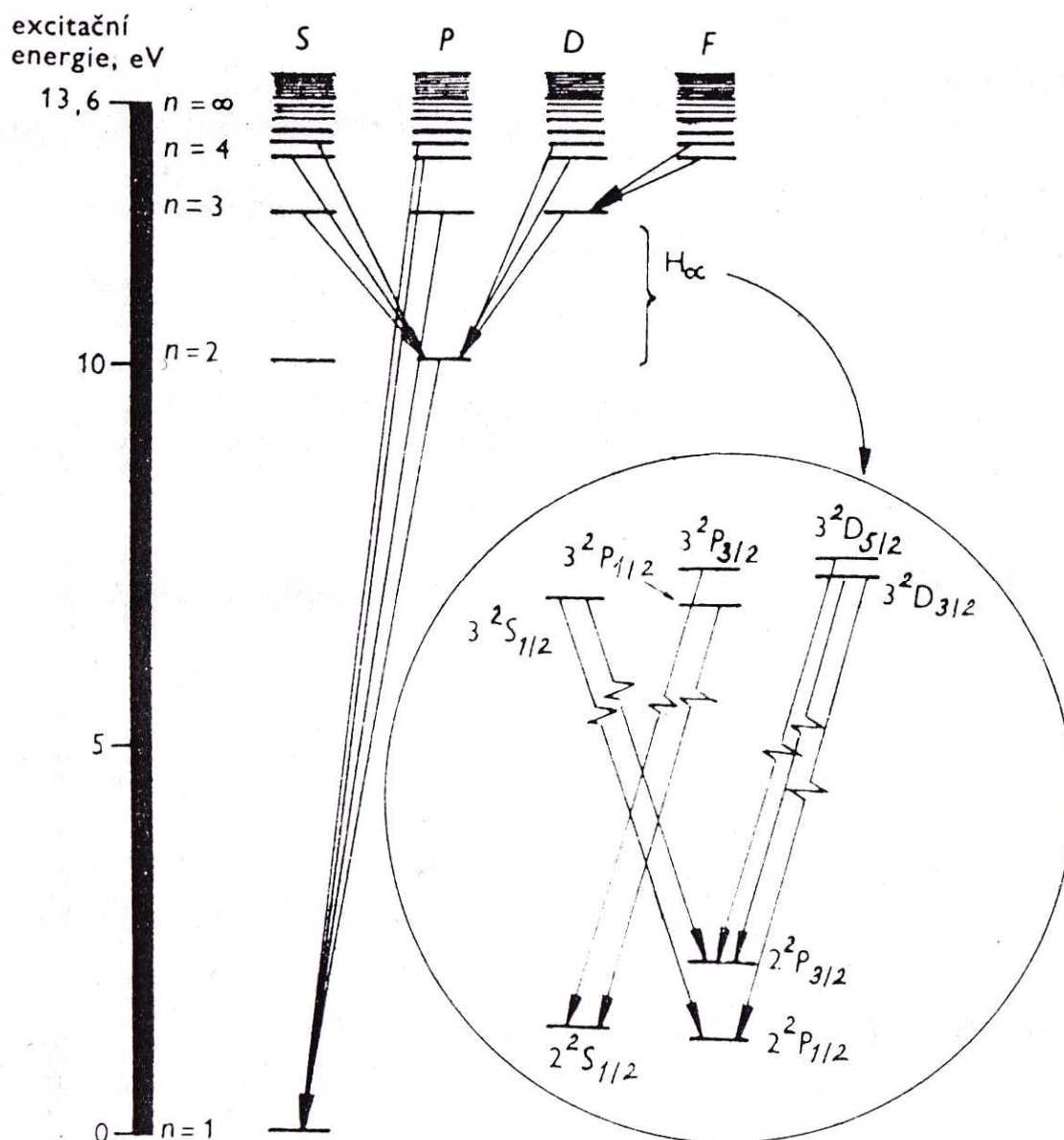
### *Jednoelektronová spektra*

Obrázek 3.43 ukazuje různé stavy atomu vodíku klasifikované hlavním kvantovým číslem  $n$  a orbitálním kvantovým číslem  $l$ . Energeticky rozdělené jsou nejenom všechny podstavy s tímž  $n$ , a různým  $l$ , ale stavy se stejným  $n$  a  $l$ , ale různým  $j$ . Tento poslední efekt je nejvýraznější pro stavy s malým  $n$  a  $l$  a byl poprvé objeven jako posunutí stavu  $2^2S_{1/2}$  vůči stavu  $2^2P_{1/2}$  (tzv. Lambův posun). Různé vlivy tak způsobují rozštěpení spektrální čáry  $H_\alpha$  na osm blízkých komponent.



**Willis Eugene Lamb (1913 – 2008)**

Obr. 3.43

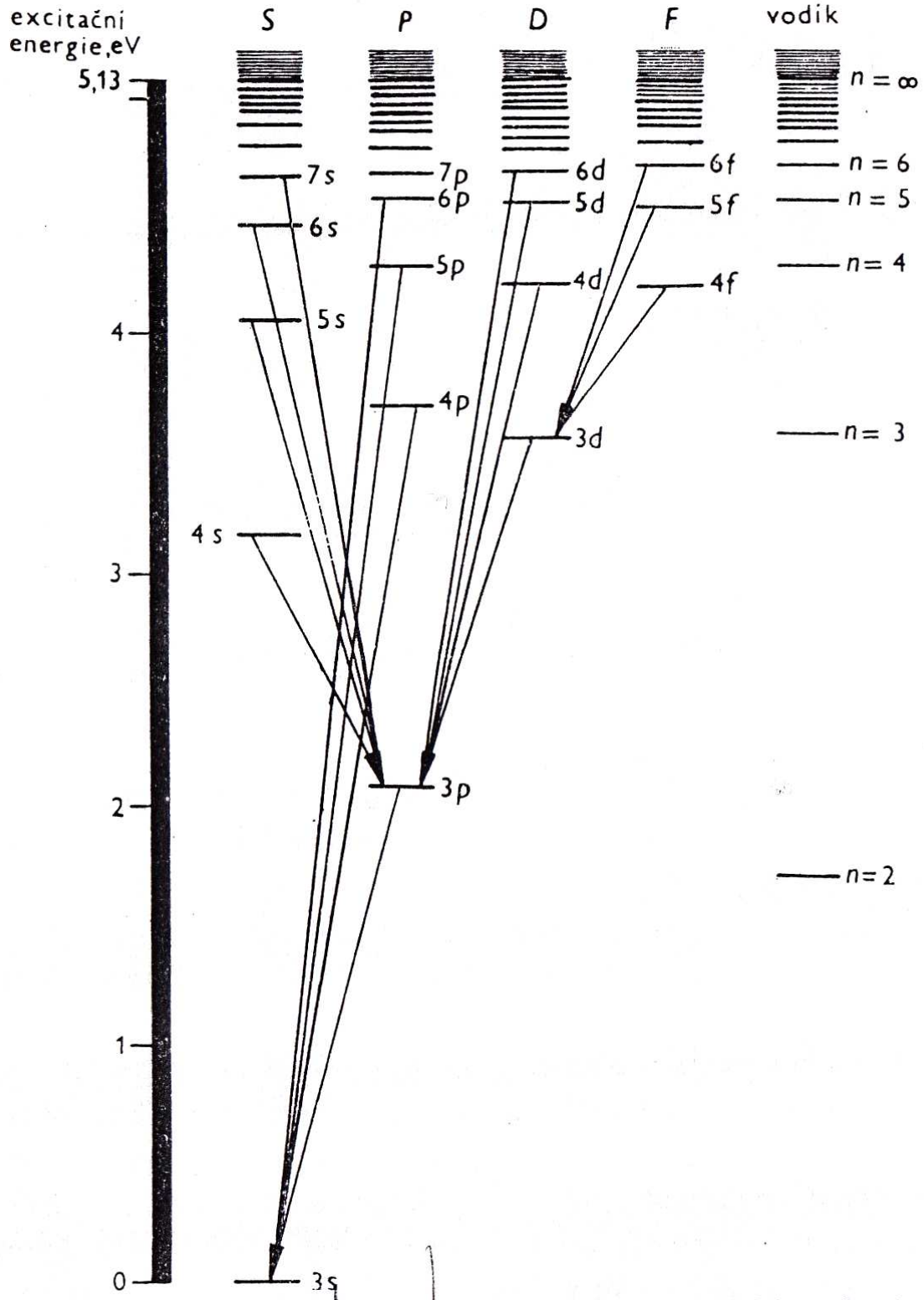


Atom sodíku má vně uzavřených slupek jeden elektron  $3s$  a předpokládáme-li, že 10 vnitřních elektronů úplně odstíňuje náboj  $+10e$  z celkového náboje jádra, působí na vnější elektron efektivní náboj  $+e$  stejně, jako v atomu vodíku. V první aproximaci tedy očekáváme stejné energetické hladiny jako u vodíku, pouze s tím rozdílem, že v důsledku Pauliho principu odpovídá nejnižší hladina odpovídá  $n = 3$  u sodíku namísto  $n = 1$  u vodíku. Na obr. 3.44 je diagram energetických hladin sodíku, kde skutečně pozorujeme shodu pro stavy s nejvyšším  $l$ . K pochopení příčin nesouladu při nižších



hodnotách  $l$  si stačí uvědomit, že čím menší je hodnota  $l$  pro dané  $n$ , tím pravděpodobněji se elektron může vyskytovat blíže jádra.

Obr. 3.44



Díky podobnosti chování vlnových funkcí sodíku a vodíku lze očekávat, že vnější elektron v atomu sodíku bude pronikat mezi vnitřní elektrony uzavřených slupek s největší pravděpodobností, bude-li ve stavu  $s$ , s menší pravděpodobností, bude-li ve stavu  $p$ , ještě méně pravděpodobně, bude-li ve stavu  $d$ , atd. Čím méně je přítom vnější elektron stíněný od úplného náboje jádra, tím větší střední síla na něj působí a tím větší je absolutní hodnota jeho celkové energie. Ta je však záporná, takže s rostoucí silou dále klesá. Z toho důvodu jsou stavy s malým  $l$  v sodíku posunuty směrem dolů. Ve srovnání s ekvivalentními stavy u vodíku.

### *Dvouelektronová spektra*

Ve vodíku i v sodíku vytváří energetické hladiny vždy jeden jediný elektron. Avšak v základním stavu helia jsou dva elektrony  $1s$  a je zajímavé vyšetřovat vliv  $LS$ -vazby na vlastnosti a chování atomu helia. Výběrová pravidla pro dovolené přechody při  $LS$ -vazbě mají tvar

$$\Delta L = 0, \pm 1,$$

$$\Delta J = 0, \pm 1,$$

$$\Delta S = 0.$$

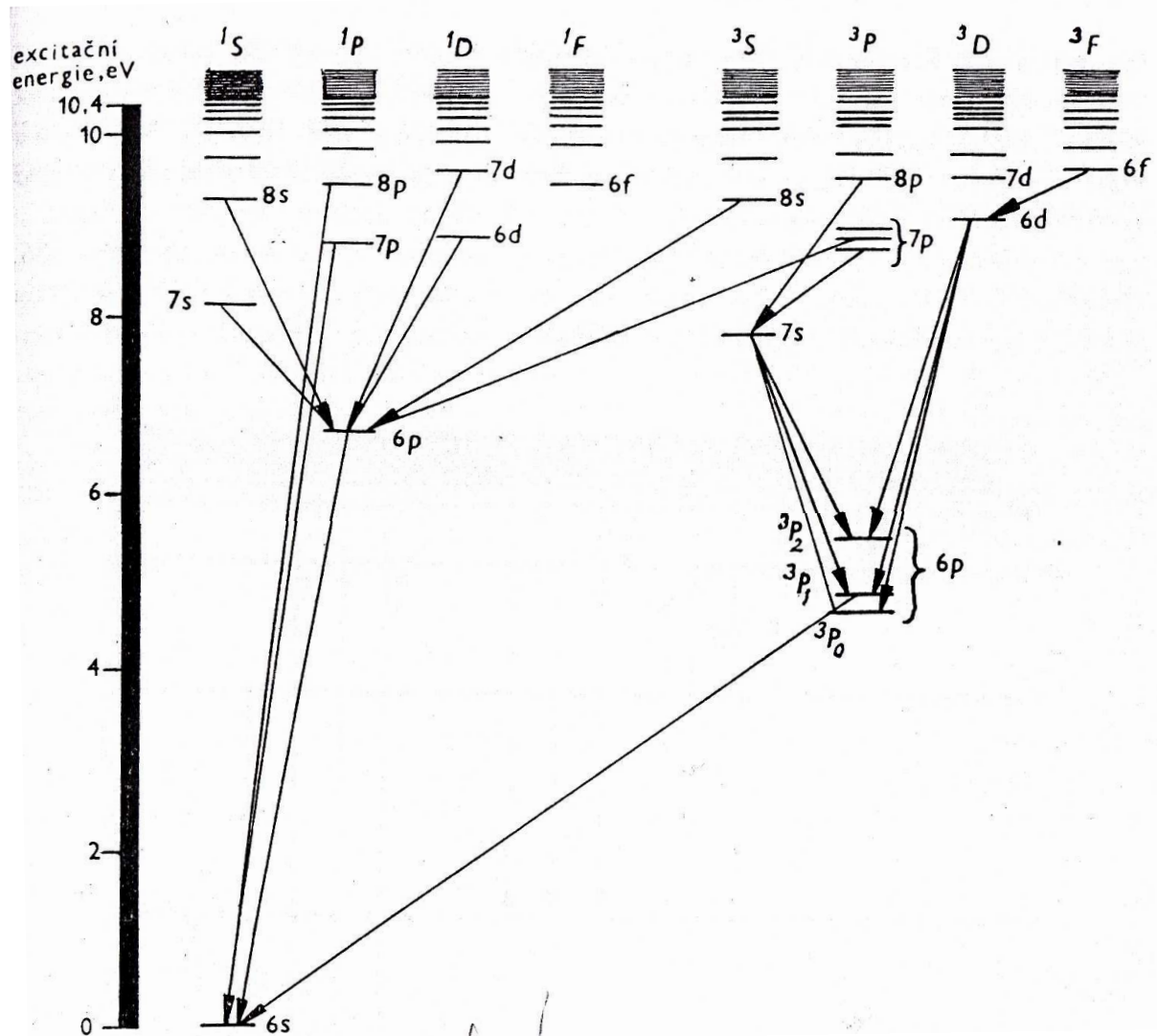
Diagram energetických hladin helia je na obr. 3.45. Různé hladiny představují konfigurace, v nichž jeden elektron je ve svém základním stavu a druhý ve stavu excitovaném. Protože jsou však impulsmomenty obou elektronů spřažené, je vhodné uvažovat hladiny charakterizující celý atom. Na rozdíl od jednoelektronových spekter zde existuje rozdělení na singletní a triplexní stavy. Vzhledem ke spinovému zákazu navíc nemoho nastat žádné dovolené přechody mezi singletními a triplexními stavy a spektrum helia vzniká z přechodů jen uvnitř těchto systémů stavů. Heliové atomy v singletních stavech tvoří *parhelium* a heliové atomy v triplexních stavech tvoří *ortohelium*. Atom ortohelia může ztratit svou excitační energii při srážce a přeměnit se na parhelium, atom parahelia může při



uzavřených slupek. Ionizační energie helia je vůbec nejvyšší ze všech prvků a činí 24,6 eV.

Posledním studovaným diagramem, je diagram energetických hladin rtuti, která má 2 valenční elektrony vně uzavřených slupek o 78 elektronech.

Obr. 3.46



Protože je atom hélia tak těžký, projevuje se zde zhroucení  $LS$ -vazby mezi impulsmomenty a to porušením výběrového pravidla  $\Delta S = 0$ . Příkladem je přechod  $^3P_1 \rightarrow ^1S_0$  vytvářející silou čáru o vlnové délce 2537 nm v ultrafialové oblasti. Pravděpodobnost přechodu je velmi vysoká, neboť tři stavy  $^3P_1$  jsou nejnižší z tripletního systému a v excitované rtuťové páře mají tudíž tendenci být hustě obsazeny.

Přechody  ${}^3P_0 \rightarrow {}^1S_0$  a  ${}^3P_2 \rightarrow {}^1S_0$  porušují pravidlo o zakázaných přechodech  $\Delta J = 0, \pm 1$ , stejně jako spinový zákaz  $\Delta S = 0$ , a výskyt těchto přechodů je tak mnohem méně pravděpodobný. Stavy  ${}^3P_0$  a  ${}^3P_2$  jsou teď metastabilní a za nepřítomnosti srážek může atom setrvat v každém z nich relativně dlouhou dobu. Silná spinorbitální interakce ve rtuti, má mimo částečného zhroucení  $LS$ -vazby, na svědomí rovněž i velkou vzdálenost mezi sousedními komponentami tripletů  ${}^3P$ .

## Struktura jádra

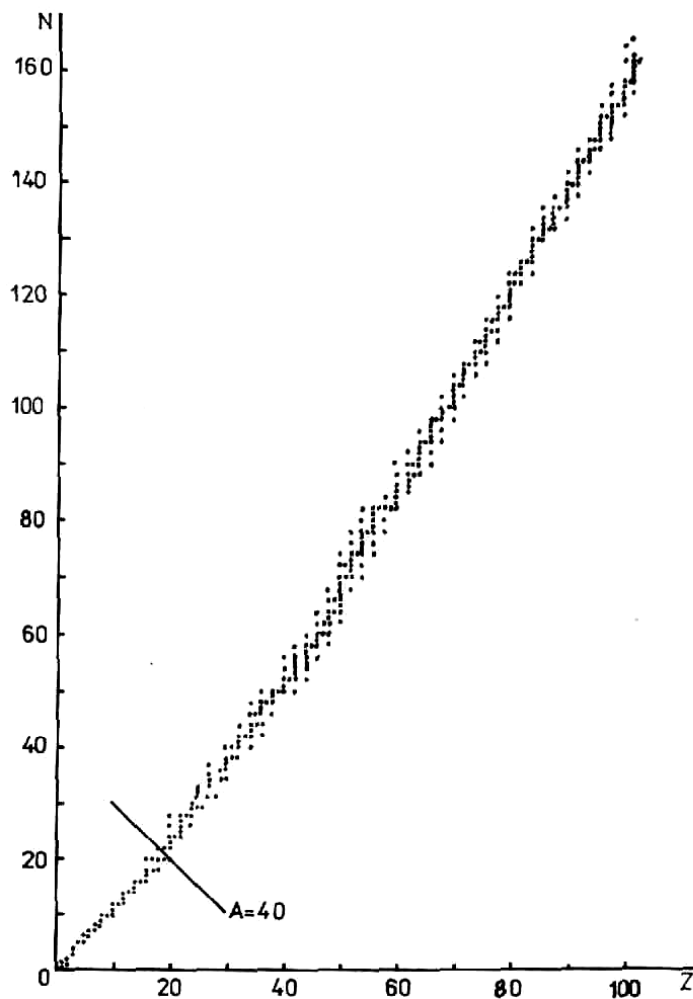
Známé hmotnosti jader asi 3 000 nuklidů lze roztrdit na základě toho, co již víme. Vybereme z těchto nuklidů nejdříve ty, které jsou stabilní vůči rozpadu  $\beta$ , budou to tedy zcela stabilní nuklidy a nestabilní nuklidy nepodléhající radioaktivnímu rozpadu  $\beta$ . Takových nuklidů je asi 350. Ke každému z nich přiřadíme bod v rovině  $(Z, N)$  a obdržíme tím v této rovině pás zvaný *linie stability*  $\beta$  (obr. 3.47a).

Jádra ležící nad linií stability, tj. ta, která mají při pevném  $Z$  vyšší  $N$ , se samovolně rozpadají typem  $\beta^-$ , vysílají při rozpadu elektron a antineutrino. Pod linií stability se nalézají jádra, která jsou nestabilní vůči rozpadu  $\beta^+$ , při němž je z jádra vyslán pozitron a neutrino. Tato jádra jsou také nestabilní vůči tzv. záchytu elektronu.

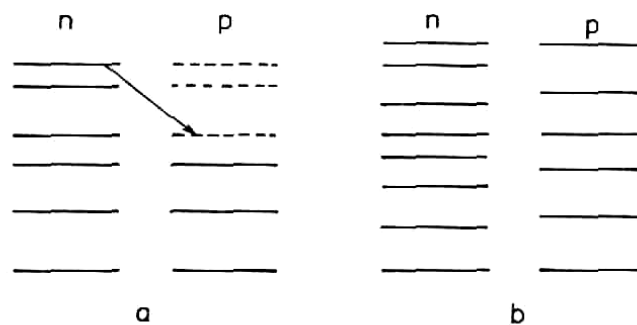
Z obr. 3.47a. je patrné, že jádra ležící na linii stability pro  $A \leq 40$  se soustřeďují v okolí přímky  $N = Z$ . To je lehce pochopitelné, vyjdeme-li z Pauliho principu. V jádrech, kde je přebytek nukleonů jednoho druhu, např. neutronů, musí tyto částice obsazovat díky Pauliho principu vyšší energetické hladiny (viz obr. 3.47b). Rozpad  $\beta^-$  umožňuje neutronu změnit projekci svého izospinu, stát se protonem a přejít do *nižšího* energetického stavu. Proto jsou nejstabilnějšími jádry pro

$A < 40$  jádra s přibližně stejným počtem protonů a neutronů. Pro  $A > 40$  je již  $N > Z$  a převaha neutronů s růstem  $A$  se zvětšuje. To je způsobeno coulombickým odpuzováním protonů, které posunuje jejich energetické stavy k *vyšším* hodnotám (obr. 3.47b).

Obr. 3.47a, 3.47b

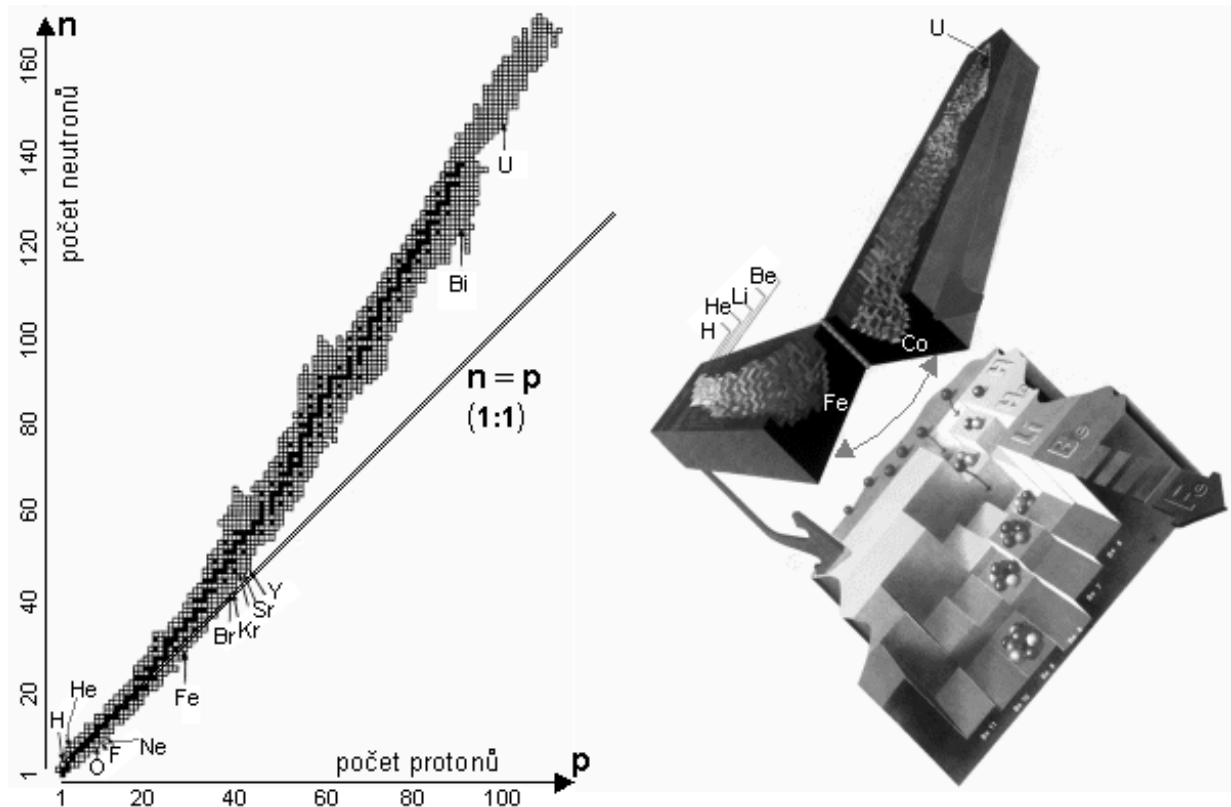


Poloha stabilních jader vůči rozpadu  $\beta$  je označena tečkami v rovině  $(Z, N)$ . Tečky definují linii (pás) stability.  $Z$  – atomové číslo,  $N$  – neutronové číslo.



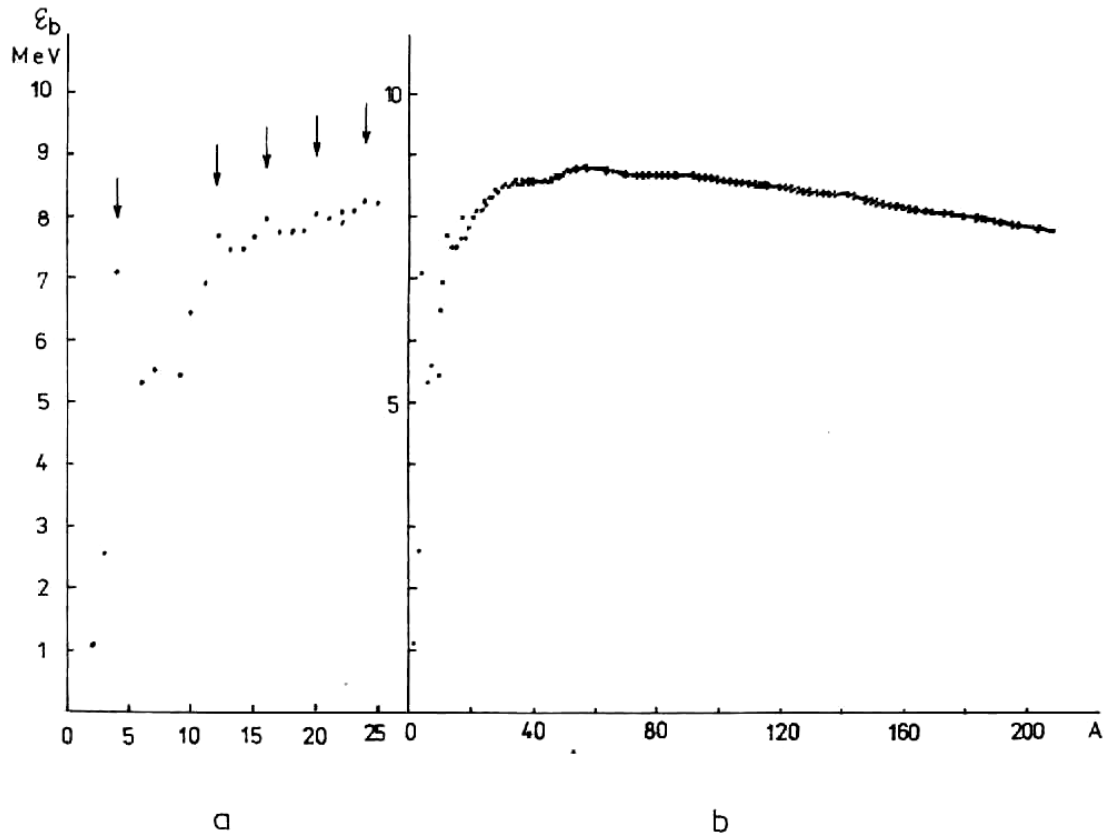
Plnou čarou jsou označeny obsazené hladiny, přerušovanou neobsazené;  $n$  – neutron,  $p$  – proton, a – jádro s nadbytkem neutronů prodělává rozpad, b – posuv hladin protonů vyvolaný coulombickým polem.

Obr. 3 48



Vyšetřme ještě závislost *nukleonové vazbové energie*, tj.  $\varepsilon_b(A)$ , na čísle  $A$  pro jádra ležící na linii stability. Na obr. 3.49 je tato závislost vynesena a jsou z ní patrné tyto skutečnosti:

1.  $\varepsilon_b(A)$  rychle roste pro  $A \leq 16$ ,
2.  $\varepsilon_b(A)$  má výrazná maxima pro  $A = 4, 12, 16, 20, 24$ , což ukazuje na význam zobecněného Pauliho principu pro nukleony a z toho plynoucí stability jader, která mají celkový počet nukleonů  $A = n\alpha$  pro neveliká  $n = 1, 3, 4, \dots$ ;  $\alpha$  zde reprezentuje 4 nukleony částice alfa.



Obr. 3.49. Vazbová energie  $\varepsilon_b(A, Z)$  stabilních jader připadajících na jeden nukleon jako funkce nukleonového čísla. Šipky označují jadra s  $A = na$ .

3.  $\varepsilon_b(A)$  je přibližně konstantní, leží v intervalu (7,4 MeV; 8,8 MeV) pro všechna jadra s  $A > 16$ . To znamená, že pro ně je vazbová energie jádra

$$W(A, Z) \approx A. \quad (3.782)$$

Odtud soudíme, že nukleon může interagovat jen s omezeným počtem nukleonů. Kdyby tomu bylo totiž při interakci nukleonů stejně jako v systému podrobeném např. gravitační interakci, kde každý objekt interaguje s každým, musela by vazbová energie záviset na počtu různých dvojic nukleonů a nemělo by platit (3.782). Říkáme tedy, že u jaderných sil působících mezi nukleony se projevuje **nasycení**. Při malém  $A$  energie  $\varepsilon_b(A)$  rychle stoupá, nasycení ještě nenastalo, záhy však, tj. pro  $A \approx 16$ , k nasycení dochází.

4. Energie  $\varepsilon_b(A)$  klesá z maximální hodnoty 8,8 MeV při  $A = 60$  prakticky monotónně až na energii 7,4 MeV při  $A = 238$ . Tento pokles je projevem vzájemného elektrostatického odpuzování protonů.



5. Existence maxima  $\varepsilon_b(A)$  při  $A = 60$ , což je nuklid  ${}^{60}_{28}\text{Ni}$ , je důležitým rozhraním. Z jeho polohy plyne, že jadernou energii lze uvolnit buď při syntéze, spojení lehkých jader pokud jejich  $A < 60$ , anebo při dělení těžkých jader na lehčí, přičemž jejich hmotnosti číslo  $A$  musí být větší než 60.

Závislost hmotnosti či vazbové energie jader na číslech  $A$  a  $Z$  lze vystihnout matematicky různými formulemi, z nichž nejznámější je Weizsäckerova – Fermiho. Ta se obvykle vyvozuje v rámci jednoho z elementárních modelů jader, jímž je tzv. **kapkový model**. Jádru se v něm považuje za kapku těžko stlačitelné kapaliny. Tato představa vede bezprostředně k úměrnosti mezi objemem jádra a počtem nukleonů, které se v něm nacházejí. Poloměr jádra by měl proto být dán vztahem

$$R = r_0 A^{1/3} \quad (3.783)$$

v němž konstantu  $r_0$  určíme na základě srovnání vypočtených výsledků s experimentálními daty. Optimální hodnota  $r_0$  se pohybuje kolem  $1,4 \cdot 10^{-15}$  m. Uvedeme přímo současnou formuli pro vazbovou energii jádra definovaného čísly  $A$  a  $Z$

$$W(A, Z) = a_v A - a_s A^{2/3} - a_c \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_a \frac{(A - 2Z)}{A} + \frac{\delta(A, Z)}{A^{3/4}}, \quad (3.784)$$

kde příslušné parametry mají hodnoty

$$a_v = 15,75 \text{ MeV}, a_s = 17,80 \text{ MeV}, a_c = 0,71 \text{ MeV}, a_a = 23,70 \text{ MeV},$$

$$\delta(A, Z) = \begin{array}{ll} 34 \text{ MeV} & \text{pro jádra S-S} \\ 0 & \text{pro } A \text{ liché} \\ -34 \text{ MeV} & \text{pro jádra L-L} \end{array} \quad (3.785)$$

Vezmeme-li v úvahu relaci ( 3.783 ) mezi poloměrem jádra  $R$  a hmotnostním číslem  $A$ , vidíme, že první člen ve formuli ( 3.784 ) je objemová energie jádra, která je podstatná pro vytvoření kapky, druhý člen je úměrný povrchu jádra a vystihuje skutečnost, že nukleony na

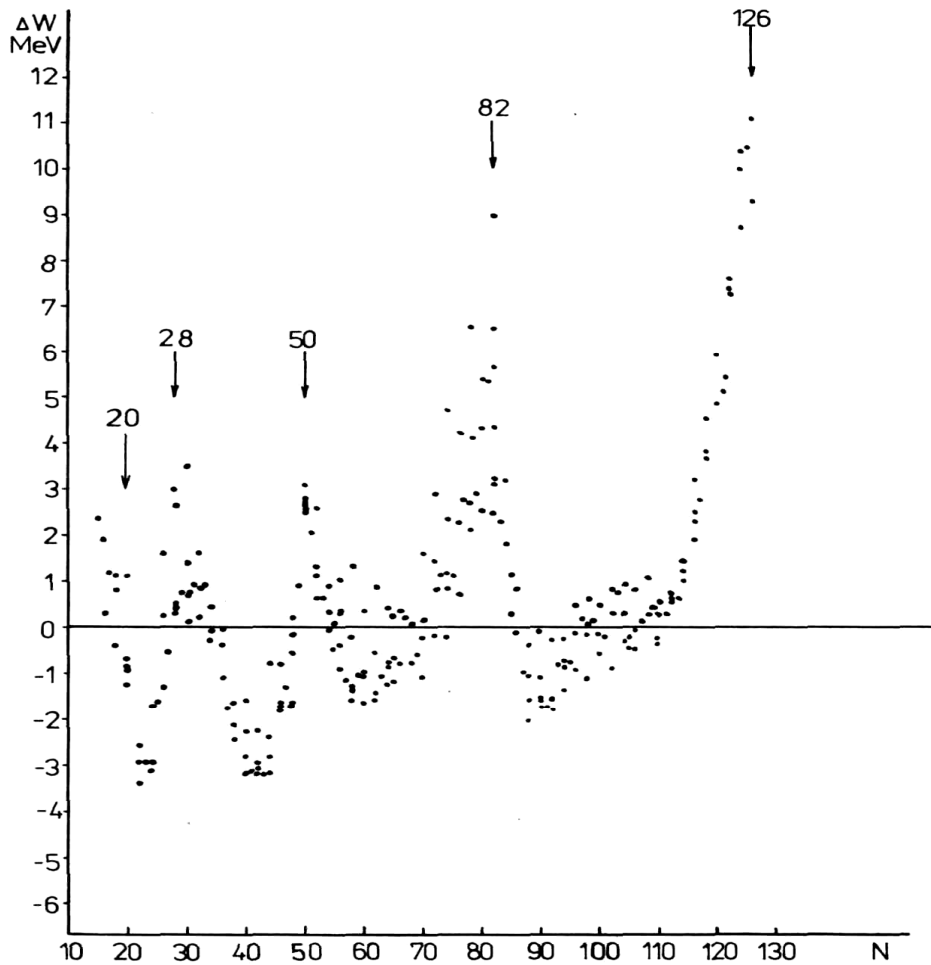
povrchu jsou méně vázané, neboť interagují s menším počtem nukleonů než nukleony uvnitř kapky, třetí člen reprezentuje elektrostatické odpuzování protonů, čtvrtý člen je fenomenologický a vystihuje skutečnost, že stabilní nuklidy leží na linii stability, tj. že přibližně platí  $N = Z$ . Poslední příspěvek se rovněž nedá dobře objasnit v rámci kapkového modelu, neboť souvisí zejména se spinovými, ale také s izospinovými stavy systému nukleonů.

Odchylka hodnoty vazbové energie  $\Delta W$  vypočtená podle formule ( 3.784 ) od experimentální nepřesahuje 20 MeV. Na obr. 3.50 je tato odchylka vynesena v závislosti na neutronovém čísle  $N$ . Maxima odpovídají silně vázaným jádrům s tzv. **magickým počtem neutronů** 28, 50, 82, 126.

Existenci posledních dvou členů ve formuli ( 3.784 ) a též i magických čísel lze fyzikálně odůvodnit v jiném elementárním modelu jádra, označovaném jako **slupkový**. Řada experimentálních údajů nasvědčuje tomu, že nukleony se v podstatě seskupují do „*slupek*“ podobných těm, které známe z atomového obalu.

Energetické stavy nukleonů v dané slupce se od sebe liší obecně málo ve srovnání s rozdílem energií mezi slupkami. Ve slupkovém modelu jádra se uvažuje o neutronech a protonech jako o rozlišitelných objektech, které nezávisle zaplňují protonové slupky a neutronové slupky. Zaplnění dané slupky má v jádře podobný význam jako zaplnění elektronové slupky v obalu atomu, přispívá k vysoké vazbové energii jádra. Z experimentálních dat plyne, že k zaplnění slupek dochází tehdy, když počty protonů nebo neutronů dosahují **magických čísel** 2, 8, 20, 28, 50, 82, 126. První dvě magická čísla lze snadno reprodukovat ve vhodném slupkovém modelu a jsou shodná s počtem elektronů zaplňujících slupky  $s$  a  $p$  pro  $n = 1, 2$  v obalu atomů. Vhodnou volbou potenciální jámy, v níž se protony a neutrony nezávisle na sobě pohybují, lze ve slupkovém modelu dospět i k dalším magickým číslům. Jak víme, budou přitom hrát důležitou roli i spiny protonů a neutronů. Slupkový model vede tedy jednak přímo k tomu, že by mělo být  $Z = N$  a jednak s ohledem na *párování antiparalelních spinů* protonů nebo neutronů také k tomu, že jádra S-S budou mít větší vazbovou energii než jádra S-L nebo L-S a ta opět vyšší než jádra L-L. Tak lze vysvětlit i přítomnost opravy ( 3.785 ) k vazbové energii jádra.

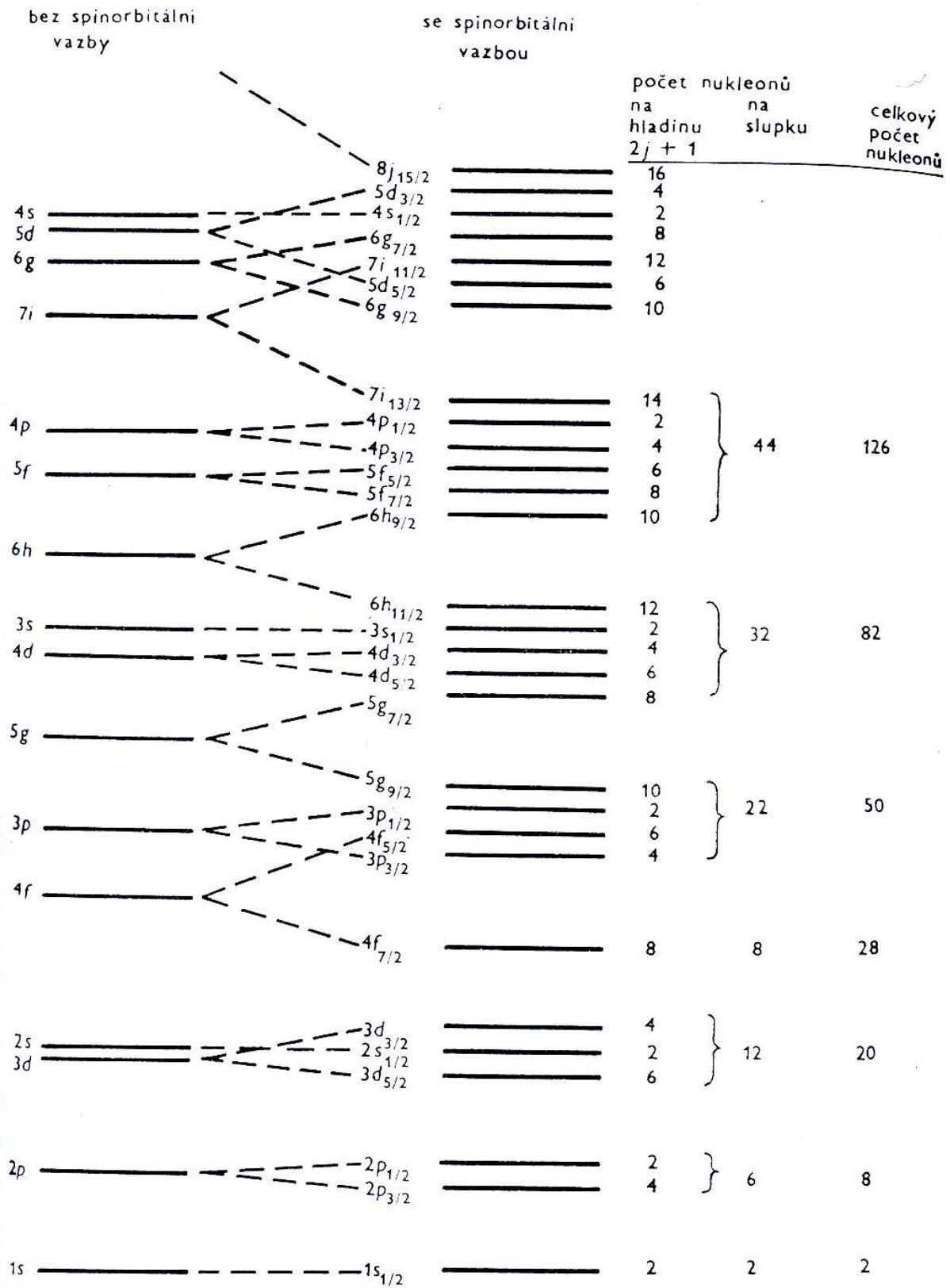
Obr. 3.50



Odchylka  $\Delta W$  vazbové energie jádra vypočtená podle Weizsäckerovy formule od experimentální hodnoty v závislosti na neutronovém čísle  $N$ .

Vraťme se na závěr tohoto paragrafu ještě ke srovnání experimentálních hodnot vazbových energií *zrcadlových jader*, což jsou jádra, která mají navzájem vyměněná protonová a neutronová čísla  $Z$  a  $N$ . Takovou dvojicí jsou např.  ${}^{10}_4\text{Be}$  a  ${}^{10}_6\text{C}$ . Z tohoto srovnání vyplývá důležitý závěr. Odečteme-li totiž od vazbových energií zrcadlových jader příspěvek coulombické energie, obdržíme shodné hodnoty. To znamená, že jaderné síly mezi dvěma nukleony jsou stejné. Tato vlastnost jaderných sil svědčí o tom, že jaderné síly jsou nábojově nezávislé, nebo jinými slovy řečeno: jaderné síly nerozeznávají elektrický náboj nukleonů.

Obr. 3.51



Posloupnost energetických hladin nukleonu podle slupkového modelu (není v patřičném měřítku).

## Obecnější modely jádra

Elementární modely, jimiž jsme se zabývali v této kapitole, jsou sice užitečné, neboť podávají fyzikálně podloženou představu o stavbě jádra a umožňují kvantitativně anebo alespoň kvalitativně určit některé jejich vlastnosti. K některým přesnějším studiím však nejsou dost dobré, např. k tomu, aby se určil systém excitovaných hladin nebo chování jádra v jaderných reakcích. Jen v některých případech lze nalezené jednonukleonové funkce ve slupkovém modelu jádra použít jako východiska k přesnějšímu teoretickému popisu jádra. Proto bylo vytvořeno více modelů, které jsou vhodnější ke kvantitativnímu vystižení skutečnosti a které poskytují lepší možnosti předpovědět některé vlastnosti jádra nebo průběh jaderných reakcí apod. Z relativně široké třídy těchto modelů nejdůležitější místo zastávají tzv. **zobecněný model**, který je určen k popisu a výkladu vlastností daného jádra, a **optický model**, který je užitečný při popisu jaderných reakcí. Podrobnější rozbor těchto modelů leží mimo rámec této publikace. Omezíme se proto jen na nástin výchozích myšlenek obou modelů.

**Zobecněný model** na rozdíl od jednočásticových modelů, nepotlačuje zcela přímou interakci mezi nukleony, ale bere ji v úvahu. Přímá interakce mezi nukleony je zodpovědná za to, že se jádro chová také jako celek a jako kolektiv odpovídá na vnější zásah. Projevy jádra jako stmelěného systému vystoupily zřejmě při štěpení jader, u gigantické rezonance a v široké aplikaci Weizsackerovy formule, vycházející z kapkového modelu jádra, objevují se ale i jinde. Proto se v zobecněném modelu rozděluje jádro na dva podsystémy. Všechny nukleony ve vnitřních slupkách, které dohromady vytvářejí sudo-sudé jádro, jsou kolektivním podsystémem a zbývající vnější nukleony tvoří podsystém podobný tomu, který známe ze slupkového modelu. Kolektivní podsystém lze pokládat v duchu kapkového modelu za kapku nestlačitelné avšak kvantové kapaliny, která je schopna kvantových oscilací různého typu. V poli tohoto podsystému se potom pohybují v nejjednodušším případě jeden nebo dva nukleony tak, jakoby byly nezávislé. Energetické spektrum tohoto jádra je v základním stavu v zásadě totožné se spektrem nevzbuzeného jednočásticového modelu. Spektrum vzbuzených stavů se však liší od

spektra jednočásticového modelu. Kolektivní podsystem se může excitovat jednak stejně jako jádro u modelu nezávislých částic, jednak jako kapka kvantové kapaliny. Vnější nukleony se excitují stejně jako v modelu nezávislých částic. Energetické spektrum bude nyní bohatší o *kolektivní excitace*. Při kolektivních excitacích se může měnit také moment hybnosti tohoto podsystemu. Zobecněný model popisuje dobře spektra, spiny a parity hladin, neboť u jader se skutečně projevují kolektivní excitace. Například u nuklidu stříbra  $^{107}_{47}\text{Ag}$  je jeden vnější proton ve stavu  $2p_{1/2}$  a zbytek tvoří sudo-sudý kolektivní podsystem. Jádro v základním stavu přísluší spin a parita  $1/2^-$ . Ve spektru vzbuzeného jádra se jasně projevují kolektivní excitace, které vedou ke stavu se spinem a paritou jádra  $3/2^-$  a  $5/2^-$ . Dalším prvkem rozšiřujícím možnosti zobecněného modelu je představa, že se dá v souladu s experimentálními daty považovat některý z příslušných kolektivních podsystemů za „jádro“, které není sféricky symetrické, ale má jen axiální symetrii. I tyto modely se osvědčují při studiu jader, která jsou axiálně symetrická a nazývají se proto *jádry deformovanými*.

**Optický model** atomového jádra, který je častěji nazýván optickým modelem jaderných reakcí, vychází z fenomenologického popisu jaderných reakcí. Připomeňme, že reakce nějaké částice, např. neutronu s jádrem boru

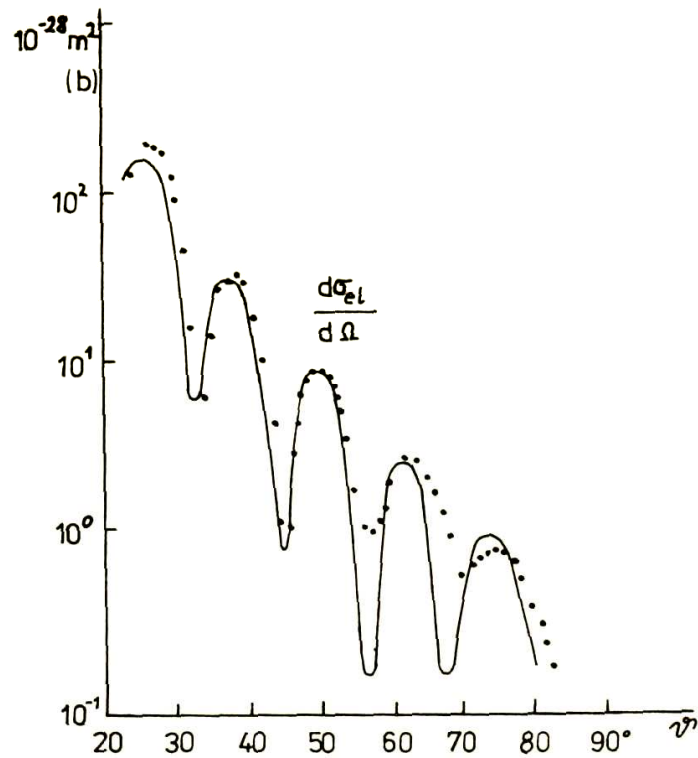


musí jít jednak kanálem elastického rozptylu, který je identický se vstupním kanálem a může jít a také jde obecně jinými kanály, např. zachycením neutronu v jádře boru. Dojde-li k této reakci, zmizí z původního stavu, z původního svazku neutron. Jinými slovy, při všech dějích, pro něž je nenulový účinný průřez reakce  $\sigma_r$ , z původního kanálu, kanálu pro elastický rozptyl, ubývají částice. Tuto skutečnost lze fenomenologicky popsat v kvantové mechanice tak, že potenciální energie v příslušném hamiltoniánu pro Schrödingerovu rovnici bude komplexní. S komplexním indexem lomu se setkáváme např. při průchodu světla kovy v optice. Proto uvažovaný model nese název optický. S pomocí komplexního optického potenciálu se velmi úspěšně reprodukuje experimentální diferenciální účinné průřezy pro

elastický rozptyl v oblasti energií nalétávajících částic do 100 MeV, podobně se dobře určují účinné průřezy pro tento rozptyl a totální účinné průřezy. To znamená, že výpočet podává též vyhovující informace o účinném průřezu reakce.

Typický pro optický model je obrázek 3.52, na němž je srovnán výsledek výpočtu s naměřenými hodnotami (černé body) diferenciálního účinného průřezu pro elastický rozptyl částice  $\alpha$  s energií 40 MeV na titanu. Diferenciální účinný průřez se mění v intervalu úhlu rozptylu  $S$  od  $20^\circ$  do  $80^\circ$  o tři řády a vykazuje charakteristická „difrakční“ maxima, jejichž poloha, výška a do značné míry i tvar jsou dobře reprodukovány.

Obr. 3.52



## Pokročilé metody kvantové mechaniky

### Rayleighova-Schrödingerova stacionární poruchová teorie

#### a) Nedegenerovaný případ



John William Strutt,  
3. Baron Rayleigh (1842 – 1919)

Mějme libovolný kvantověmechanický systém popsany časově nezávislým hamiltoniánem

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{W}. \quad (4.1)$$

Úkolem poruchové teorie je nalézt vlastní funkce a vlastní hodnoty hamiltoniánu  $\hat{H}$ , jestliže známe vlastní vektory  $\varphi_i$  a vlastní hodnoty  $E_i$  neporušeného hamiltoniánu  $\hat{H}_0$

$$\hat{H}_0 |\varphi_i\rangle = E_i |\varphi_i\rangle, \quad i = 1, 2, \dots \quad (4.2)$$

Předpokládejme, že  $\{\varphi_i\}$  jsou ortonormální funkce a že vlastní hodnota  $E_0$  je nedegenerovaná a odpovídá základnímu stavu neporušeného systému.  $\hat{W}$  se nazývá **poruchový operátor**, nebo krátce **porucha**.



Vlastní hodnota  $E$  a vlastní vektor  $|\Psi\rangle$  základního stavu systému s hamiltoniánem  $\hat{H}$  (vlastní problém operátoru  $\hat{H}$ ) jsou určeny rovnicí

$$(\hat{H}_0 + \hat{W} - E)|\Psi\rangle = 0. \quad (4.3)$$

Nechť dále vektor  $|\Psi\rangle$  splňuje podmínku

$$\langle\varphi_0|\Psi\rangle = 1. \quad (4.4)$$

Z (4.2) až (4.4) plyne

$$\begin{aligned} \langle\varphi_0|\hat{H}_0|\Psi\rangle &= E_0\langle\varphi_0|\Psi\rangle, \\ \langle\varphi_0|\hat{H}_0|\Psi\rangle + \langle\varphi_0|\hat{W}|\Psi\rangle &= E\langle\varphi_0|\Psi\rangle. \end{aligned} \quad (4.5)$$

Pro energii základního stavu porušeného a neporušeného systému dostaneme odečtením první rovnice (4.5) od druhé a s přihlédnutím k (4.4) vztah

$$\Delta E \equiv E - E_0 = \langle\varphi_0|\hat{W}|\Psi\rangle. \quad (4.6)$$

Protože vlastní vektory  $\hat{H}_0$  tvoří úplný systém, vyjádříme podmínku úplnosti jako rozvoj jednotky

$$\hat{1} = \sum_i |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|. \quad (4.7)$$

Definujme projekční operátor

$$\hat{O} = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| \quad (4.8)$$

a jeho ortogonální doplněk

$$\hat{O}' = \hat{1} - \hat{O} = \sum_{i \neq 0} |\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|. \quad (4.9)$$

S použitím normalizace ( 4.4 ) můžeme napsat identitu

$$|\Psi\rangle = (\hat{O} + \hat{O}')|\Psi\rangle = |\varphi_0\rangle + O'|\Psi\rangle. \quad (4.10)$$

Pro libovolné komplexní číslo  $\varepsilon$  z ( 4.3 ) plyne

$$(\varepsilon - \hat{H}_0)|\Psi\rangle = (\varepsilon - E + \hat{W})|\Psi\rangle. \quad (4.11)$$

Existuje-li resolventa  $(\varepsilon - \hat{H}_0)^{-1}$  operátoru  $\hat{H}_0$ , můžeme upravit ( 4.11 ) na tvar

$$|\Psi\rangle = \frac{\varepsilon - E + \hat{W}}{\varepsilon - \hat{H}_0}|\Psi\rangle. \quad (4.12)$$

Volba konstanty  $\varepsilon$  je omezena pouze existencí výše uvedené resolventy, jinak je libovolná a obvykle klademe  $\varepsilon = E_0$ .

Po dosazení ( 4.12 ) do pravé strany ( 4.10 ) dostaneme rovnici

$$|\Psi\rangle = |\varphi_0\rangle + \frac{\hat{O}'}{E_0 - \hat{H}_0}(E_0 - E + \hat{W})|\Psi\rangle, \quad (4.13)$$

kteřou řešíme iterační metodou

$$|\Psi\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \left[ \frac{\hat{O}'}{E_0 - \hat{H}_0}(E_0 - E + \hat{W}) \right]^n |\varphi_0\rangle. \quad (4.14)$$

Pro posuv energií  $\Delta E$  z ( 4.6 ) a ( 4.10 ) plyne

$$\Delta E = \sum_{n=0}^{\infty} \left\langle \varphi_0 \left| \hat{W} \left[ \frac{\hat{O}'}{E_0 - \hat{H}_0} (E_0 - E + \hat{W}) \right]^n \right| \varphi_0 \right\rangle. \quad (4.15)$$

Ve většině aplikací vystačíme v ( 4.14 ) a ( 4.15 ) s rozvojem do třetího řádu, proto se omezíme jen na první 3 členy rozvoje.

Nejprve upravíme výraz  $\frac{\hat{O}'}{E_0 - \hat{H}_0}$ , který se vyskytuje v obou

rovnících. Vzhledem k definici ( 4.9 ) projektoru  $\hat{O}'$  a ortonormalitě neporušených funkcí  $\{\varphi_i\}$

$$\langle \varphi_i | \varphi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (4.16)$$

dostáváme tzv. **redukovanou resolventu**

$$\hat{R}_0 = \frac{\hat{O}'}{E_0 - \hat{H}_0} = \sum_{i \neq 0} \frac{|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|}{E_0 - E_i}. \quad (4.17)$$

Brueckner ukázal, že výsledky poruchové teorie lze vyjádřit právě pomocí operátoru  $\hat{R}_0$ .

Předpokládáme, že  $\hat{W}$  je hermitovský operátor, a dosadíme z ( 4.17 ) do ( 4.14 ):

$$\begin{aligned} |\Psi\rangle &= |\varphi_0\rangle + \sum_{i \neq 0} \frac{|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|}{E_0 - E_i} (E_0 - E + \hat{W}) |\varphi_0\rangle + \\ &= \sum_{i \neq 0} \sum_{j \neq 0} \frac{|\varphi_i\rangle\langle\varphi_i|}{E_0 - E_i} (E_0 - E + \hat{W}) \frac{|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|}{E_0 - E_j} (E_0 - E + \hat{W}) |\varphi_0\rangle = \\ &= |\varphi_0\rangle - \sum_{i \neq 0} |\varphi_i\rangle \frac{\langle\varphi_i|\hat{W}|\varphi_0\rangle}{E_0 - E_i} \Delta E + \sum_{i \neq 0} \sum_{j \neq 0} |\varphi_i\rangle \frac{\langle\varphi_i|\hat{W}|\varphi_j\rangle\langle\varphi_j|\hat{W}|\varphi_0\rangle}{(E_0 - E_i)(E_0 - E_j)} (\Delta E)^2. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Podobně, rozvojem ( 4.15 ) dostaneme

$$\begin{aligned}
E &= E_0 + \langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_0 \rangle + \sum_{i \neq 0} \frac{\langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | E_0 - E + \hat{W} | \varphi_0 \rangle}{E_0 - E_i} + \\
&+ \sum_{i \neq 0} \sum_{j \neq 0} \frac{\langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | E_0 - E + \hat{W} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | E_0 - E + \hat{W} | \varphi_0 \rangle}{(E_0 - E_i)(E_0 - E_j)} = \\
&= E_0 + \langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_0 \rangle + \sum_{i \neq 0} \frac{\langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \hat{W} | \varphi_i \rangle}{E_0 - E_i} + \\
&+ \sum_{i \neq 0} \sum_{j \neq 0} \frac{\langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle \left[ (E_0 - E) \langle \varphi_i | \varphi_j \rangle + \langle \varphi_i | \hat{W} | \varphi_j \rangle \right] \langle \varphi_j | \hat{W} | \varphi_0 \rangle}{(E_0 - E_i)(E_0 - E_j)} = \\
&= E_0 + \langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_0 \rangle + \sum_{i \neq 0} \frac{\left| \langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle \right|^2}{E_0 - E_i} + \\
&+ \sum_{i \neq 0} \sum_{j \neq 0} \frac{\langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle \langle \varphi_i | \hat{W} | \varphi_j \rangle \langle \varphi_j | \hat{W} | \varphi_0 \rangle}{(E_0 - E_i)(E_0 - E_j)} - \langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_0 \rangle \sum_{i \neq 0} \frac{\left| \langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle \right|^2}{E_0 - E_i},
\end{aligned} \tag{4.19}$$

kde v posledním členu napravo jsme  $(E - E_0)$  aproximovali veličinou prvního řádu  $\langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_0 \rangle$ . Z (4.18) a (4.19) plyne podmínka použitelnosti poruchové teorie

$$\left| \frac{\langle \varphi_0 | \hat{W} | \varphi_i \rangle}{E_0 - E_i} \right| \ll 1. \tag{4.20}$$

Z rovnic (4.18) a (4.19) je také vidět, že všechny korekce k energii a vlnové funkci lze vyjádřit pomocí veličin nultého řádu, tj. pomocí známého řešení charakteristického problému neporušeného hamiltoniánu  $\hat{H}_0$ .



Keith Allen Brueckner (1924)

**Příklad:** Lineární harmonický oscilátor s nábojem  $q > 0$  je vložen do konstantního elektrického pole intenzity  $E$ . Nalezněte hladiny oscilátoru jednak exaktně, jednak použitím stacionární poruchové teorie.

**Řešení:** Hamiltonián oscilátoru v elektrickém poli intenzity  $E$  je

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \mathbf{x}^2 - q\mathbf{x}\mathbf{E}. \quad (4.21)$$

Poslední dva členy lze převést na úplný čtverec

$$\hat{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 \left( \mathbf{x} - \frac{q\mathbf{E}}{m\omega^2} \right)^2 - \frac{(q\mathbf{E})^2}{2m\omega^2}, \quad (4.22)$$

Takže Schrödingerova rovnice má exaktní řešení, kterými jsou původní oscilátorové funkce argumentu  $\mathbf{x} - \frac{q\mathbf{E}}{m\omega^2}$ , a odpovídající energie jsou homogenně posunuty o

$$\Delta E = -\frac{(q\mathbf{E})^2}{2m\omega^2}. \quad (4.23)$$

Stejný výsledek lze získat ve 2. řádu stacionární poruchové teorie (prvý řád dává vzhledem k paritě oscilátorových funkcí nulový výsledek). Pro  $p$ -tou hladinu udává stacionární poruchový počet vztah

$$\Delta E_p = \sum_i \frac{|\langle \varphi_p | q\mathbf{x}\mathbf{E} | \varphi_i \rangle|^2}{E_p - E_i}. \quad (4.24)$$

Jelikož maticový element  $\mathbf{x}$  je nenulový pouze mezi sousedními stavy, kdy je roven

$$\langle \varphi_p | \mathbf{x} | \varphi_i \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega}} (\delta_{i,p-1} \sqrt{i+1} + \delta_{i,p+1} \sqrt{i}), \quad (4.25)$$

jsou nenulové pouze dva příspěvky v sumě (4.24). Jmenovatele těchto dvou příspěvků jsou rovny

$$E_p - E_{p\pm 1} = \mp \hbar\omega. \quad (4.26)$$

Dosazením (4.25) a (4.26) do (4.24) nalézáme opět

$$\Delta E_p = \frac{\hbar}{2m\omega} (q\mathbf{E})^2 \left( \frac{p}{\hbar\omega} - \frac{p+1}{\hbar\omega} \right) = -\frac{(q\mathbf{E})^2}{2m\omega^2}. \quad (4.27)$$

Příspěvky všech vyšších řádů stacionární poruchové teorie jsou zřejmě rovny nule.

### ***b) Degenerovaný případ***

Zatím jsme se zabývali pouze nedegenerovaným případem. Podívejme se nyní, jak se situace změní v případě degenerace. Nechť nejnižší vlastní hodnota  $E_0$  neporušeného hamiltoniánu je  $p$ -násobně degenerována. Potom příslušný vlastní podprostor má dimenzi  $p$  a existuje v něm tedy  $p$  lineárně nezávislých funkcí  $\varphi_{0j}$  vyhovujících rovnici

$$\hat{H}_0 |\varphi_{0j}\rangle = E_0 |\varphi_{0j}\rangle, \quad j = 1, 2, \dots, p. \quad (4.28)$$

Bez újmy na obecnosti můžeme předpokládat, že  $\{\varphi_{0j}\}$  jsou ortonormální, přičemž

$$\hat{1} = \sum_{j=1}^p |\varphi_{0j}\rangle \langle \varphi_{0j}|. \quad (4.29)$$

V tomto případě nelze použít předchozí teorie, neboť různým stavům  $\varphi_{0k}, \varphi_{0l}$  odpovídá stejná energie a výrazy  $E_0 - E_j$  ve jmenovateli (4.18) a (4.19) by byly nulové.

Protože každá lineární kombinace funkcí  $\{\varphi_{0j}\}$

$$|\varphi_0\rangle = \sum_{j=1}^p |\varphi_{0j}\rangle \langle \varphi_{0j} | \varphi_0 \rangle = \sum_{j=1}^p c_j |\varphi_{0j}\rangle \quad (4.30)$$

je rovněž vlastní funkcí  $\hat{H}$  s vlastní hodnotou  $E_0$  a tvoří  $p$ -dimenzionální stavový podprostor. Je tedy rovněž řešením rovnice (4.28) a proto můžeme v nultém přiblížení položit  $\Psi = \varphi_0$ .

Po zapnutí poruchy  $\hat{W}$  bude platit Schrödingerova rovnice (4.28) ve tvaru

$$(\hat{H}_0 + \hat{W}) |\Psi\rangle = E |\Psi\rangle, \quad (4.31)$$

která určí zatím neznámá řešení porušené úlohy  $E = E_j$  a  $\varphi = \varphi_j$ .

Naznačená přítomnost druhého kvantového čísla  $j$  u porušené energie  $E_{0j}$  ve srovnání s jediným kvantovým číslem u energie  $E_0$  neporušeného systému znamená, že typickým kvalitativním efektem zapnutí poruchy v degenerovaném systému bude štěpení energetických hladin. Na  $p$ -násobně degenerovanou neporušenou hladinu  $E_0$  totiž můžeme pohlížet jako na  $p$  různých stavů s energetickými hladinami v zákrytu, které získají po zapnutí poruchy různé energie (rozštěpí se). Jestliže i při působení poruchy zůstanou

některé porušené hladiny degenerované, hovoříme o tzv. **částečném sejmutí degenerace**. V opačném případě se bude jednat o **úplné sejmutí degenerace**.

Dosazením ( 4.30 ) do rovnice ( 4.31 ) a projekcí do stavu  $|\varphi_{0i}\rangle$  získáme soustavu  $p$  homogenních lineárních rovnic

$$\sum_{j=1}^p [W_{ij} - \Delta E \delta_{ij}] c_j = 0, \quad i = 1, 2, \dots, p, \quad (4.32)$$

kde

$$W_{ij} = \langle \varphi_{0i} | \hat{W} | \varphi_{0j} \rangle. \quad (4.33)$$

Soustava ( 4.32 ) má netriviální řešení  $E$  tehdy a jen tehdy, platí-li sekulární rovnice

$$\det [W_{ij} - \Delta E \delta_{ij}] = 0. \quad (4.34)$$

Rozeepsána do maticového tvaru tedy sekulární rovnice zní

$$\begin{vmatrix} E_0 - E + W_{11} & W_{12} & \cdots & W_{1p} \\ W_{21} & E_0 - E + W_{11} & \cdots & W_{2p} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ W_{p1} & W_{p2} & \cdots & E_0 - E + W_{pp} \end{vmatrix} = 0. \quad (4.35)$$

Řešením ( 4.35 ) dostaneme obecně  $p$  hodnot energie  $E$ . Protože, jak jsme již uvedli výše, nemusí být všechny tyto hodnoty navzájem různé, rozpadá se v důsledku působení poruchy  $p$ -násobně degenerovaná hladina  $E_0$  neporušeného systému na  $q \leq p$  různých hladin.

Postupným dosazováním jednotlivých řešení  $E^{(i)}$  do ( 4.32 ) a řešením odpovídajících sekulárních rovnic nalezneme série koeficientů  $\{c_j^{(i)}\}$  a z ( 4.30 ) i vlnové funkce



$$\varphi_0^{(i)} = \sum_{j=1}^p c_0^{(i)} \varphi_{0j}. \quad (4.36)$$

Při bližším zkoumání vlastností rovnice ( 4.32 ) bychom dospěli k závěru, že se ve skutečnosti jedná o optimální výběr neporušených vlnových funkcí Ritzovou variační metodou, o které budeme podrobněji hovořit později.

Výsledky, k nimž jsme dospěli, odpovídají prvnímu řádu poruchové teorie pouze pro případ výpočtu energetických hladin. Vypočteným vlnovým funkcím ( 4.36 ) odpovídá přiblížení dokonce nultého řádu. Popis výpočetních algoritmů pro získání výsledků ve vyšších řádech přesahuje rámec tohoto textu.

**Příklad 1:** Necht' funkce  $\psi_1, \psi_2$  jsou vlastními funkcemi neporušeného hamiltoniánu  $\hat{H}_0$  příslušející k dvakrát degenerované hladině  $E_0$ . Nalezněme opravu k energii v nejnižším řádu poruchové teorie a příslušné vlnové funkce, působí-li na systém časově nezávislá porucha  $W$ . Pro jednoduchost předpokládejme, že diagonální elementy matice poruchy jsou stejné.

**Řešení:** V nejnižším řádu poruchového rozvoje hledáme opravenou vlnovou funkci ve tvaru lineární kombinace neporušených řešení  $\psi_1, \psi_2$ :

$$\Psi = c_1 \psi_1 + c_2 \psi_2, \quad (4.37)$$

$$\sum_{i=1,2} |c_i|^2 = 1 \quad (4.38)$$

Matice poruchy bude typu 2 x 2

$$\hat{W} = \begin{pmatrix} W_{11} & W_{12} \\ W_{21} & W_{22} \end{pmatrix} \quad (4.39)$$

Položíme  $W_{11} = W_{22}$  ;  $W_{12} = W_{21}$  a provedeme diagonalizaci

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix}. \quad (4.40)$$

Nyní najdeme vlastní vektory matice poruchy

$$\begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (4.41)$$

Hledáme matice takové, že

$$(H_{aa}^0 + W_{aa})c_a = Ec_a \quad (4.42)$$

neboli

$$\left[ \begin{pmatrix} E_0 & 0 \\ 0 & E_0 \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} A & B \\ B & A \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}. \quad (4.43)$$

To je ale systém homogenních rovnic

$$\begin{pmatrix} E_0 + A - E & B \\ B & E_0 + A - E \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (4.44)$$

jehož řešením je rovnice

$$\begin{vmatrix} E_0 + A - E & B \\ B & E_0 + A - E \end{vmatrix} = 0, \quad (4.45)$$

neboli

$$(E_0 + A - E)^2 - B^2 = 0. \quad (4.46)$$

Tu můžeme upravit na součin

$$(E_0 + A - E - B)(E_0 + A - E + B) = 0, \quad (4.47)$$

odkud ihned plyne řešení

$$E_{1,2} = E_0 + A \pm B. \quad (4.48)$$

Dosadíme-li jej do systému rovnic (4.44), dostáváme

$$\begin{aligned} (E_0 + A)c_1 + Bc_2 &= Ec_1 = (E_0 + A)c_1 \pm Bc_1 \\ Bc_1 + (E_0 + A)c_2 &= Ec_2 = (E_0 + A)c_2 \pm Bc_2 \end{aligned} \quad (4.49)$$

odkud srovnáním s (4.38)

$$c_1 = \pm c_2 = \frac{1}{\sqrt{2}}. \quad (4.50)$$

Odpovídající vlnové funkce jsou

$$\Psi_{1,2} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 \pm \psi_2). \quad (4.51)$$

Obecné řešení časové Schrödingerovy rovnice je dáno klubkem

$$\Psi(t) = d_1 \psi_1 e^{-\frac{E_1 t}{\hbar}} + d_2 \psi_2 e^{-\frac{E_2 t}{\hbar}}, \quad (4.52)$$

$$\sum_{i=1,2} |d_i|^2 = 1. \quad (4.53)$$

Koeficienty

$$d_i = \langle \psi_i | \Psi(0) \rangle \quad (4.54)$$

jsou dány počáteční podmínkou. Je-li

$$\psi(0) = \psi_1, \quad (4.55)$$

plyne z (4.51), (4.54)

$$d_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_1 + \psi_2 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \quad (4.56)$$

$$d_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} \langle \psi_1 - \psi_2 | \psi_1 \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}$$

Pak podle (4.52) závisí obecné řešení na čase vztahem

$$\Psi(t) = e^{-i\frac{E^0+A}{\hbar}t} \frac{1}{2} \left[ (\psi_1 + \psi_2) e^{-i\frac{B}{\hbar}t} + (\psi_1 - \psi_2) e^{-i\frac{B}{\hbar}t} \right] = \quad (4.57)$$

$$= e^{-i\frac{E^0+A}{\hbar}t} \left( \cos \frac{B}{\hbar}t + i \sin \frac{B}{\hbar}t \right)$$

**Příklad 2:** S použitím stacionárního poruchového počtu započtete působení elektrického pole konstantní intenzity  $\mathbf{E}$  na prvou excitovanou hladinu atomu vodíku ( $n = 2$ ).

**Řešení:** Jedná se o standardní úlohu ilustrující použití stacionárního poruchového počtu. Jelikož hladina  $n = 2$  je čtyřikrát degenerovaná, je třeba aplikovat odpovídající stacionární poruchový počet, který v principu vede na diagonalizaci matice poruchy řádu  $4 \times 4$ . Fakticky je však řada maticových elementů poruchy nulová z důvodu symetrie. Vodíkové vlnové funkce příslušející hladině  $n = 2$  jsou v atomových jednotkách

$$\begin{aligned}\psi_{200} &= \frac{1}{\sqrt{8\pi}} \left(1 - \frac{r}{2a_0}\right) e^{-\frac{r}{2a_0}}, \\ \psi_{210} &= \frac{1}{\sqrt{32\pi}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} \cos \vartheta, \\ \psi_{21\pm 1} &= \mp \frac{1}{\sqrt{64\pi}} \frac{r}{a_0} e^{-\frac{r}{2a_0}} e^{\pm i\varphi} \sin \vartheta,\end{aligned}\tag{4.58}$$

a položíme-li pole  $\mathbf{E}$  podél osy  $z$ , bude mít porucha tvar

$$W = ez\mathbf{E} = er\mathbf{E} \cos \vartheta.\tag{4.59}$$

Snadno se přesvědčíme, že různé od nuly jsou pouze maticové elementy

$$\langle \psi_{200} | r \cos \vartheta | \psi_{210} \rangle = \langle \psi_{210} | r \cos \vartheta | \psi_{200} \rangle = -3a_0.\tag{4.60}$$

Poruchová matice je již tedy kvazidiagonální a úloha vede na řešení sekulární rovnice pouze řádu  $2 \times 2$

$$\begin{vmatrix} \Delta E & -3a_0 e\mathbf{E} \\ -3a_0 e\mathbf{E} & \Delta E \end{vmatrix} = 0.\tag{4.61}$$

Započtení poruchy tak vede k rozštěpení čtyřnásobně degenerované hladiny  $E_0 = -\frac{1}{4}\text{Ry}$  na trojici hladin

$$\begin{aligned}E_1 &= E_2 = E_0, \\ E_{3,4} &= E_0 \pm 3a_0 e\mathbf{E}.\end{aligned}\tag{4.62}$$

Rozštěpení je lineární v intenzitě elektrického pole, což je efekt existující pouze u vodíku. Jen u vodíku totiž patří k téže hladině vlnové funkce s opačnou paritou (v tomto případě  $s$  a  $p$  funkce), takže jejich kombinací mohou vzniknout stavy, které mají nenulový

dipólový moment (na rozdíl od funkcí ( 4.58 )). Jejich tvar vyjde automaticky řešením sekulární rovnice, jako v příkladu 1

$$\Psi_{3,4} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_{200} \pm \psi_{210}). \quad (4.63)$$

Analogické kombinace lze samozřejmě utvořit i z funkcí  $\psi_{200}$  a  $\psi_{21\pm 1}$ , ale vzniklý dipólový moment je kolmý na osu  $z$  a jeho energie v poli mřícíím podél osy  $z$  je nulová.

### Bornova-Oppenheimerova aproximace

Nerelativistický hamiltonián pro izolovanou molekulu má tvar

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{T}_n + \hat{T}_e + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{nn} = \\ &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_a \frac{\Delta_{R_a}}{M_a} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \Delta_{r_i} - \\ &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_a \sum_i \frac{Z_a}{|R_a - r_i|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \sum_{j>i} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_a \sum_{b>a} \frac{Z_a Z_b}{|R_a - R_b|}. \end{aligned} \quad (4.64)$$

Např. pro hamiltonián molekuly  $\text{H}_2\text{O}$  dostaneme tvar

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{I=1}^3 \frac{\Delta_I}{m_I} - \frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{10} \Delta_i - \\ &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1}^3 \sum_{i=1}^{10} \frac{Z_I}{|R_I - r_i|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{10} \sum_{j>i} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1}^3 \sum_{J>I} \frac{Z_I Z_J}{|R_I - R_J|}, \end{aligned} \quad (4.65)$$

kde první člen napravo odpovídá kinetické energii jader, druhý člen kinetické energii elektronů, třetí člen coulombické interakci elektron-jádro, čtvrtý člen coulombické repulzi elektron-elektron a poslední, pátý člen coulombické repulzi jádro-jádro.

Přesná Schrödingerova rovnice pro tento systém má tvar

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r};\mathbf{R}) = E\Psi(\mathbf{r};\mathbf{R}), \quad (4.66)$$

kde  $\mathbf{r}$  a  $\mathbf{R}$  označují souhrnně všechny elektronové a jaderné souřadnice vztažené obvykle k těžišti systému. Born a Oppenheimer ukázali, že kinetickou energii jader lze považovat za malou poruchu, neboť poměr hmotnosti elektronu a jádra je malé číslo. Elektrony se proto pohybují mnohem rychleji než jádra.

V přiblížení nultého řádu, kdy úplně zanedbáváme  $\hat{T}_n$ , vystupují souřadnice jader jako parametry. Operátor

$$\hat{H}_e = \hat{T}_e + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{nn} \quad (4.67)$$

se nazývá **elektronový hamiltonián** a platí pro něj Schrödingerova rovnice

$$\hat{H}_e \varphi_k(\mathbf{r};\mathbf{R}) = E_k^e(\mathbf{R})\varphi_k(\mathbf{r};\mathbf{R}), \quad (4.68)$$

jejíž řešení obecně závisí na konkrétní konfiguraci jader. Protože  $\hat{H}_e$  je hermitovský operátor, tvoří  $\{\varphi_k\}$  úplný systém a libovolnou funkci souřadnic elektronů lze podle  $\{\varphi_k\}$  rozvinout. Totéž platí pro závislost přesné vlnové funkce  $\Psi(\mathbf{r};\mathbf{R})$  na  $\mathbf{r}$ :

$$\Psi(\mathbf{r};\mathbf{R}) = \sum_l \chi_l(\mathbf{R})\varphi_l(\mathbf{r};\mathbf{R}), \quad (4.69)$$

kde rozvojové koeficienty  $\chi_l(\mathbf{R})$  je potřeba určit. Dosadíme-li (4.69) do (4.66), dostaneme s použitím (4.68) rovnost

$$\sum_l \left[ E_l^e(\mathbf{R}) + \hat{T}_n \right] \chi_l(\mathbf{R})\varphi_l(\mathbf{r};\mathbf{R}) = E \sum_l \chi_l(\mathbf{R})\varphi_l(\mathbf{r};\mathbf{R}). \quad (4.70)$$

Vynásobení této rovnice zleva funkcí  $\varphi_k^*(\mathbf{r};\mathbf{R})$  a integrací přes všechny elektronové souřadnice dostaneme vzhledem k ortonormalitě  $\{\varphi_k\}$

$$\sum_l \left\langle \varphi_k(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \left| \hat{T}_n \right| \chi_l(\mathbf{R}) \varphi_l(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \right\rangle_r + E_k^e(\mathbf{R}) \chi_k(\mathbf{R}) = E \chi_l(\mathbf{R}). \quad (4.71)$$

Operátor  $\hat{T}_n$  je součtem druhých derivací, které působí jak na  $\chi_l(\mathbf{R})$ , tak na  $\varphi_l(\mathbf{r}; \mathbf{R})$ . Protože platí

$$\nabla^2(\chi\varphi) = \varphi\nabla^2\chi + 2\nabla\chi\nabla\varphi + \chi\nabla^2\varphi, \quad (4.72)$$

můžeme (4.71) upravit na tvar

$$\begin{aligned} \left[ \hat{T}_n + E_k^e(\mathbf{R}) - E \right] \chi_k(\mathbf{R}) = \hbar^2 \sum_l \sum_a \frac{1}{M_a} \left[ \left\langle \varphi_k(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \left| \nabla_{R_a} \right| \varphi_l(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \right\rangle_r \nabla_{R_a} + \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left\langle \varphi_k(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \left| \nabla_{R_a}^2 \right| \varphi_l(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \right\rangle_r \right] \chi_l(\mathbf{R}) = \sum_l \hat{B}_{kl} \chi_l(\mathbf{R}). \end{aligned} \quad (4.73)$$

Soustava rovnic (4.73) platí přesně a matice  $\mathbf{B}$  zahrnuje vazbu mezi elektronovým a jaderným pohybem. Jak se ukazuje, exaktní řešení (4.73) lze provést pouze pro nejjednodušší molekulu, jíž představuje iont  $\text{H}_2^+$ . V ostatních případech je nezbytné použít aproximativních metod. Zanedbáme-li v (4.73) všechny nediagonální členy matice  $\mathbf{B}$ , dostáváme systém rovnic

$$\left[ \hat{T}_n + E_k^e(\mathbf{R}) - \hat{B}_{kk} \right] \chi_k(\mathbf{R}) = \left[ \hat{T}_n + \hat{U}_k(\mathbf{R}) \right] \chi_k(\mathbf{R}) = E \chi_k(\mathbf{R}), \quad (4.74)$$

kde  $k = 1, 2, 3, \dots$ . První rovnice popisuje vibrace a rotace molekuly a má tvar Schrödingerovy rovnice. Výraz  $\left[ \hat{T}_n + \hat{U}_k(\mathbf{R}) \right]$  lze interpretovat jako hamiltonián pro jádra, v němž vystupuje korigovaná elektronová energie  $\hat{U}_k(\mathbf{R}) = E_k^e(\mathbf{R}) - \hat{B}_{kk}$  jako tzv. **efektivní potenciál** závisující na polohách jader,  $\chi_k(\mathbf{R})$  představuje vlnovou funkci jader.

Uvedená aproximace, umožňující separaci elektronového a jaderného pohybu a částečně zahrnující interakci obou pohybů, se nazývá



**adiabatická aproximace.** Vlnová funkce systému ( 4.69 ) v ní přechází v jediný člen

$$\Psi_{k,\nu}(\mathbf{r};\mathbf{R}) = \chi_{k,\nu}(\mathbf{R})\varphi_k(\mathbf{r};\mathbf{R}), \quad (4.75)$$

tj. každému elektronovému stavu specifikovanému kvantovým číslem  $k$  přísluší stavy jader charakterizované kvantovým číslem  $\nu$ .

$\chi_k(\mathbf{R})$  jsou řešením rovnice ( 4.74 ), tj.

$$\left[ \hat{T}_n + \hat{U}_k(\mathbf{R}) \right] \chi_{k,\nu}(\mathbf{R}) = E_{k,\nu} \chi_{k,\nu}(\mathbf{R}), \quad k = 1, 2, 3, \dots; \quad \nu = 1, 2, 3, \dots \quad (4.76)$$

Dalšího zjednodušení lze dosáhnout zanedbáním diagonální opravy  $\hat{B}_{kk}$  na pohyb jader. Tato aproximace se nazývá **Bornova-**

**Oppenheimerova.** Při studiu dané molekuly nejprve řešíme elektronový problém ( 4.68 ) pro danou konfiguraci jader a poté s použitím elektronové energie  $E_k^e(\mathbf{R})$  jako potenciálové funkce řešíme rovnici pro jádra

$$\left[ \hat{T}_n + E_k^e(\mathbf{R}) \right] \chi_k(\mathbf{R}) = E \chi_k(\mathbf{R}), \quad k = 1, 2, 3, \dots \quad (4.77)$$



**Julius Robert Oppenheimer (1904 – 1967)**

Při tomto přístupu se atomová jádra považují za stacionární a elektrony se pohybují v potenciálovém poli jader o souřadnicích  $R$ , které na nich zpětně nezávisí. Dochází tak k úplné separaci jaderného a elektronového pohybu a z hamiltoniánu tak vypadnou

některé členy. Tak např. hamiltonián ( 4.65 ) bude mít v Bornově-Oppenheimerově aproximaci tvar

$$\hat{H} \approx -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{10} \Delta_i - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1}^3 \sum_{i=1}^{10} \frac{Z_I}{|R_I - r_i|} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{i=1}^{10} \sum_{j>i}^{10} \frac{1}{|r_i - r_j|}. \quad (4.78)$$

Problematický poslední člen závisí na souřadnicích dvou elektronů a obecně nejde řešit analyticky. Proto se obvykle nahrazuje **efektivním potenciálem** což je zprůměrnované pole ostatních elektronů, v němž řešíme pohyb jednoho vybraného elektronu. Hamiltonián ( 4.78 ) pak můžeme přepsat do tvaru

$$\hat{H} \approx -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_{i=1}^{10} \Delta_i - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \sum_{I=1}^3 \sum_{i=1}^{10} \frac{Z_I}{|R_I - r_i|} + \sum_{i=1}^{10} \hat{V}_i(1). \quad (4.79)$$

Každý člen hamiltoniánu nyní působí jen na jeden z elektronů

$$\hat{H} \approx \sum_{i=1}^{10} \hat{H}(i) = \sum_{i=1}^{10} (\hat{h}_i + \hat{V}_i), \quad (4.80)$$

kde

$$\hat{h}_i = \hat{T}_i + \hat{V}_{iJ}. \quad (4.81)$$

Celkovou vlnovou funkci systému potom hledáme ve tvaru produktu jednoelektronových funkcí, kdy se původní stacionární Schrödingerova rovnice

$$\sum_{i=1}^N \hat{H}(i) \Psi(1, 2, \dots, N) = E \Psi(1, 2, \dots, N) \quad (4.82)$$

rozpadá na  $n$  jednoelektronových rovnic

$$\sum_{i=1}^N \hat{H}(i) \prod_{i=1}^N \varphi_i(i) = E \prod_{i=1}^N \varphi_i(i) \quad (4.83)$$

Abychom vyhověli antisymetrizačnímu postulátu musíme celkovou vlnovou funkci hledat ve tvaru Slaterova determinantu (při záměně souřadnic dvou elektronů vlnová funkce změní znaménko)

$$\psi(1,2,\dots,N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(1) & \varphi_1(2) & \cdots & \varphi_1(N) \\ \varphi_2(1) & \varphi_2(2) & \cdots & \varphi_2(N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(1) & \varphi_N(2) & \cdots & \varphi_N(N) \end{vmatrix} \quad (4.84)$$

Jednoelektronové vlnové funkce molekul – **molekulové orbitaly** – hledáme ve tvaru lineární kombinace z báze jednoelektronových vlnových funkcí atomů – atomových orbitalů  $\chi$ :

$$\varphi_i = \sum_{\mu=1} c_{i\mu} \chi_{\mu}, \quad (4.85)$$

kde  $i$  označuje index molekulového a  $\mu$  index atomového orbitalu. K minimalizaci energie v závislosti na  $c_{i\mu}$  se s úspěchem používá variační počet.

V rámci Bornovy-Oppenheimerovy aproximace definujeme nejstabilnější konfiguraci jader pro daný elektronový stav jako bod  $\mathbf{R}$  konfiguračního prostoru, který vede k minimu elektronové energie  $E_k^e(\mathbf{R})$ , resp.  $\hat{U}_k(\mathbf{R})$ .

## Wignerovo-von Neumannovo pravidlo



John von Neumann (1903-1957)

V rámci poruchové teorie lze pokládat Bornovo-Oppenheimerovo přiblížení za za nultou aproximaci, diagonální korekce  $\hat{B}_{kk}$  za poruchu prvního řádu, nediagonální prvky  $\hat{B}_{kl}$  za poruchu druhého řádu. Z podmínky konvergence poruchového rozvoje ( 4.20 ) vyplývá kritérium použitelnosti adiabatické aproximace

$$\left\langle \chi_{k,\mu}(\mathbf{R}) \left| \hat{B}_{kl} \right| \chi_{l,\nu}(\mathbf{R}) \right\rangle_{\mathbf{R}} \ll |E_{k,\mu} - E_{l,\nu}|, \quad (4.86)$$

kterážto rovnost je splněna pro většinu molekul

V bodě  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_c$  konfiguračního prostoru nerovnost ( 4.86 ) neplatí a křivky 1 a 2 na obr. 4.1 se těsně vyhybají jedna druhé. Říkáme, že v tomto bodě dochází k tzv. **pseudokřížení** a úzké oblasti kolem bodu  $\mathbf{R}_c$  říkáme **oblast nediabaticity**.

Nechť hamiltonián závisí na parametru  $\mathbf{R}$  a nechť známe řešení charakteristického problému  $\hat{H}(\mathbf{R}) \equiv \hat{H}_e(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  pro systém s pevnými jádry v konfiguraci  $\mathbf{R}$ . Tento problém zní

$$\hat{H}(\mathbf{R}') \equiv \hat{H}(\mathbf{R}) + \hat{H}(\mathbf{R}') - \hat{H}(\mathbf{R}) = \hat{H}(\mathbf{R}) + V \quad (4.87)$$

pro konfiguraci  $\mathbf{R}'$ . Rozdíl  $V = \hat{H}(\mathbf{R}') - \hat{H}(\mathbf{R})$  považujeme za malou poruchu. Předpokládejme, že dva stavy  $\varphi_1$  a  $\varphi_2$  splňující

$$\hat{H}(\mathbf{R})\varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = E_i^e(\mathbf{R})\varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}), \quad i = 1, 2 \quad (4.88)$$

mají téměř stejnou energii  $E_1^e$  a  $E_2^e$ , neboli

$$|E_1^e - E_2^e| \ll |E_i^e - E_k^e|, \quad i = 1, 2; \quad k = 3, 4, \dots \quad (4.89)$$

V tomto případě musíme použít postupů poruchové teorie pro degenerované stavy. Stavy  $\varphi_1$  a  $\varphi_2$  pak tvoří bázi pro dva neznámé vektorové stavy, jimiž jsou vlastní vektory hamiltoniánu  $\hat{H}(\mathbf{R}')$ . Příslušné vlastní hodnoty  $E_i^e(\mathbf{R}')$  nalezneme řešením sekulárního problému

$$\begin{vmatrix} E_1^e(\mathbf{R}) + V_{11} - E(\mathbf{R}') & V_{12} \\ V_{21} & E_2^e(\mathbf{R}) + V_{22} - E(\mathbf{R}') \end{vmatrix} = 0, \quad (4.90)$$

kde

$$E_i^e(\mathbf{R}') = \langle \varphi_i | \hat{H}(\mathbf{R}) | \varphi_i \rangle \equiv E_i^e, \quad (4.91)$$

$$V_{ij} = \langle \varphi_i | \hat{V} | \varphi_j \rangle, \quad i, j = 1, 2.$$

Řešení problému (4.90) vede na kvadratickou rovnici, jejíž dva kořeny jsou

$$E_{1,2}^e(\mathbf{R}') = \frac{1}{2}(E_1^e + V_{11} + E_2^e + V_{22}) \pm \frac{1}{2}\sqrt{(E_1^e + V_{11} - E_2^e - V_{22})^2 + 4|V_{12}|^2}. \quad (4.92)$$

Protínají-li se dvě potenciálové křivky v bodě  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_c$ , je z (4.92) zřejmé, že musí současně platit

$$E_1^e + V_{11} = E_2^e + V_{22} \wedge |V_{12}| = 0. \quad (4.93)$$

Zahrnuje-li hamiltonián molekuly spinorbitální interakci, je  $V_{12}$  komplexní číslo a ( 4.93 ) se štěpí na

$$E_1^e + V_{11} = E_2^e + V_{22} \wedge \operatorname{Re} V_{12} = 0 \wedge \operatorname{Im} V_{12} = 0. \quad (4.94)$$

Protože ( 4.93 ) nemohou být obecně současně splněny, potenciálové křivky se nemohou protínat.

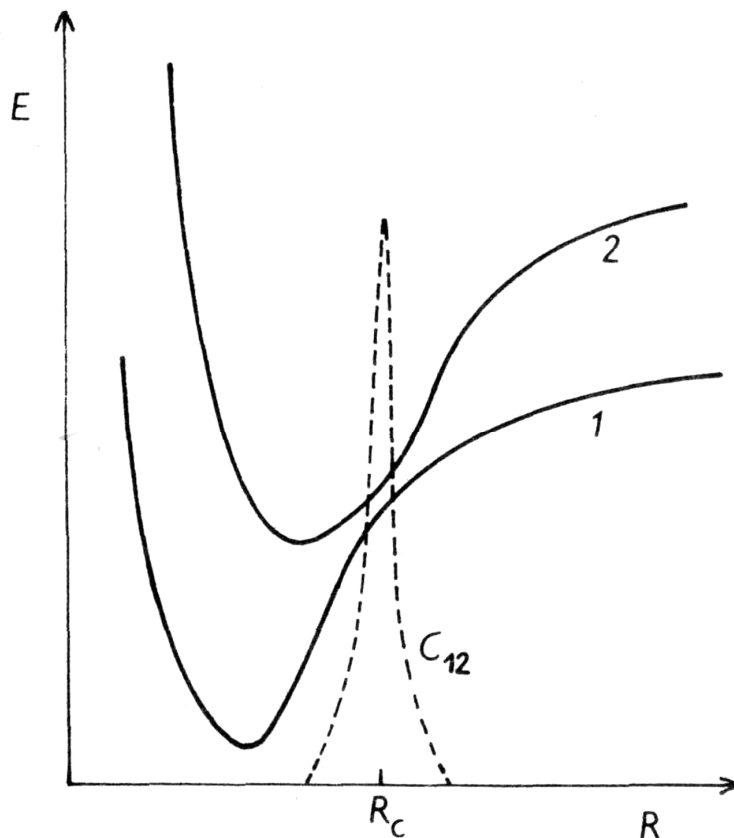
Mají-li však stavy  $\varphi_1$  a  $\varphi_2$  různou symetrii, pak rovnost  $V_{12} = 0$  je identicky splněna pro všechna  $\mathbf{R}$ . V tomto případě platí pouze jediná podmínka

$$E_1^e + V_{11} = E_2^e + V_{22} \quad (4.95)$$

která může být pro určitou hodnotu  $\mathbf{R}$  splněna.

V roce 1929 formulovali toto pravidlo von Neumann a Wigner jako tzv. **pravidlo nekřížení**: při nekonečně pomalé změně mezijaderné vzdálenosti se dva elektronové stavy téže symetrie nemohou protínat.

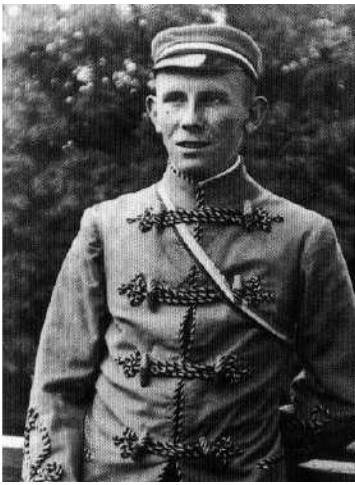
Obr. 4.1



Je-li  $V_{12}$  reálné,  $s$ -dimenzionální potenciálové hyperplochy téže symetrie se protínají v  $(s - 1)$ -dimenzionálním prostoru. V případě systému s jedním stupněm volnosti se tedy potenciálové termy neprotínají. Pro dva stupně volnosti se protínají v bodě, pro tři stupně volnosti v přímce.

Je-li  $V_{12}$  komplexní, dimenze těchto prostorů se snižuje o jednotku na  $(s - 3)$ .

### Hellmanova-Feynmanova věta



Hans Gustav Adolf Hellmann (1903 – 1938)



Richard Phillips Feynman (1918 – 1988)

Nechť hamiltonián  $\hat{H} = \hat{H}(\alpha)$  kvantově mechanického systému závisí na reálném parametru  $\alpha$ . Např. v elektronovém hamiltoniánu dvouatomové molekuly je tímto parametrem mezijaderná vzdálenost  $R$ . Je-li  $\Psi = \Psi(\alpha)$  přesná normovaná vlnová funkce a  $E = E(\alpha)$  odpovídající nedegenerovaná energie, pak

$$E = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \langle \hat{H} \rangle. \quad (4.96)$$

diferencováním této rovnice dostaneme

$$\begin{aligned}
\frac{dE}{d\alpha} &= \frac{d}{d\alpha} \langle \hat{H} \rangle = \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} \left| \hat{H} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \right| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \hat{H} \right| \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} \right\rangle = \\
&= \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \right| \Psi \right\rangle + E \left[ \left\langle \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} \left| \Psi \right\rangle + \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \Psi}{\partial \alpha} \right\rangle \right] = \\
&= \left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \right| \Psi \right\rangle + E \frac{\partial}{\partial \alpha} \langle \Psi | \Psi \rangle = \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \right\rangle,
\end{aligned} \tag{4.97}$$

což je tzv. **Hellmanova-Feynmanova věta**. Podle ní může být směrnice křivky  $E = E(\alpha)$  vypočtena jako střední hodnota operátoru  $\frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha}$ .

### *Elektrostatická formule*

Např. pro dvouatomovou molekulu má příslušný  $N$ -elektronový hamiltonián tvar

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{\hbar^2}{2m_e} \sum_i \Delta_i - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \sum_{i=1}^N \left( \frac{Z_a}{|r_i - r_a|} + \frac{Z_b}{|r_i - r_b|} \right) + \sum_{i<j} \frac{1}{|r_i - r_j|} + \frac{Z_a Z_b}{|R_a - R_b|} \right) = \\
&= \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + \hat{V}_{en} + \hat{V}_{nn},
\end{aligned} \tag{4.98}$$

Jako parametr  $\alpha$  zvolíme mezijadernou vzdálenost  $R$ . Počátek soustavy souřadné položíme do jádra  $a$ , osu  $z$  do spojnice jader  $a, b$ . Protože  $\hat{T}_e$  ani  $\hat{V}_{ee}$  na  $R$  nezávisí, plyne z (4.97) a (4.98)

$$\begin{aligned}
\frac{dE}{d\alpha} &= \left\langle \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \right\rangle = \left\langle \Psi \left| \frac{\partial (V_{en} + V_{nn})}{\partial R} \right| \Psi \right\rangle = \\
&= \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \left\langle \Psi \left| \sum_{i=1}^N \frac{Z_b}{|r_i - r_b|^2} \frac{\partial r_{ib}}{\partial R} \right| \Psi \right\rangle - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{Z_a Z_b}{R^2}.
\end{aligned} \tag{4.99}$$



Upravíme nejprve první člen napravo v ( 4.99 ), který představuje až na konstantu střední hodnotu operátoru

$$\sum_{i=1}^N \frac{Z_b}{|r_i - r_b|^2} \frac{\partial |r_i - r_b|}{\partial \mathbf{R}} = \sum_{i=1}^N \hat{V}(i) \quad (4.100)$$

a který je symetrický vůči libovolné permutaci  $N$  elektronů. Protože  $\hat{V}(i)$  je bezspinový jednoelektronový operátor, zahrnuje zmíněný člen pouze integrál přes prostorové proměnné. Ze symetrie výrazu  $\Psi^* \Psi$  plyne, že každý člen součtu

$$\left\langle \Psi \left| \sum_i \hat{V}(i) \right| \Psi \right\rangle = \sum_i \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{V}(i) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N \quad (4.101)$$

je stejný, dostáváme tedy  $N$ -krát výsledek pro první člen

$$\left\langle \Psi \left| \sum_i \hat{V}(i) \right| \Psi \right\rangle = N \int \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \hat{V}(1) \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N. \quad (4.102)$$

Definujeme-li veličinu

$$P(\mathbf{r}|\mathbf{r}') = N \int \Psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) \Psi^*(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, \mathbf{r}_N) d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \dots d\mathbf{r}_N, \quad (4.103)$$

kteřou nazýváme **bezspinová matice hustoty**, po malé úpravě dostáváme

$$\left\langle \Psi \left| \sum_i \hat{V}(i) \right| \Psi \right\rangle = \int_{\mathbf{r}'=\mathbf{r}} \hat{V}(1) P(\mathbf{r}|\mathbf{r}') d\mathbf{r}, \quad (4.104)$$

Zde pokládáme  $\mathbf{r}' = \mathbf{r}$  po působení  $\hat{V}$  na  $P$ , avšak ještě před integrací. Protože  $\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |r_i - r_b|$  je složka vektoru  $\nabla(\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_b)$  ve směru  $\mathbf{R}$ , je

$$\frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_b| = \frac{\nabla |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_b| \cdot \mathbf{R}}{R} = \frac{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_b| \cdot \mathbf{R}}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_b| R} = \cos \vartheta_{ib}, \quad (4.105)$$

kde  $\vartheta_{ib}$  je úhel mezi vektory  $\mathbf{R}$  a  $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_b|$ . Rovnici ( 4.99 ) pak můžeme zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} -F_{bz} &= \frac{dE}{dR} = \frac{Z_b e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \int \frac{P \cos \vartheta_b}{r_b^2} d\mathbf{r} - \frac{Z_a}{R^2} \right), \\ -F_{az} &= \frac{dE}{dR} = \frac{Z_a e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \int \frac{P \cos \vartheta_a}{r_a^2} d\mathbf{r} - \frac{Z_b}{R^2} \right), \end{aligned} \quad (4.106)$$

Podle ní lze sílu působící na jádro  $b$  počítat pomocí klasické teorie, známe-li náboj jádra  $Z$  a kvantověmechanickou hustotu elektronového náboje  $P$ .

Sečtením obou rovnic ( 4.106 ) dostaneme

$$F = -\frac{dE}{dR} = \frac{Z_a Z_b}{4\pi\epsilon_0 R} - \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int P \left( \frac{Z_a}{r_a^2} \cos \vartheta_a - \frac{Z_b}{r_b^2} \cos \vartheta_b \right) d\mathbf{r}, \quad (4.107)$$

což je tzv. **elektrostatická formule**, která má jednoduchou klasickou interpretaci: první člen napravo představuje jadernou repulzi, druhý člen složku přitažlivé síly mezi jádry a elektronovou hustotu  $P$  podél vazby.

Podmínka

$$F = -\left( \frac{dE}{dR} \right)_{R=R_e} = 0 \quad (4.108)$$

definuje rovnovážný stav, charakterizovaný určitou rovnovážnou vzdáleností  $R_e$  jader a disociační energií

$$E_d = E(\infty) - E(R_e). \quad (4.109)$$

### *Hellmannova-Feynmanova formule*

Nechť  $\{\Psi_i\}$  jsou přesné nedegenerované vlastní funkce hamiltoniánu  $\hat{H} = \hat{H}(\alpha)$ . Derivováním podmínky ortogonality

$$\langle \Psi_i | \Psi_j \rangle = \delta_{ij} \quad (4.110)$$

podle parametru  $\alpha$  dostaneme

$$\left\langle \frac{\partial \Psi_i}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle + \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial \Psi_j}{\partial \alpha} \right\rangle = 0. \quad (4.111)$$

Z (4.110) plyne, že

$$\frac{\partial}{\partial \alpha} \langle \Psi_i | \hat{H} | \Psi_j \rangle = 0, \quad i \neq j, \quad (4.112)$$

neboli, s využitím (4.111)

$$\begin{aligned} & \left\langle \frac{\partial \Psi_i}{\partial \alpha} \middle| \hat{H} \middle| \Psi_j \right\rangle + \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle + \left\langle \Psi_i \middle| \hat{H} \middle| \frac{\partial \Psi_j}{\partial \alpha} \right\rangle = \\ & = \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle + E_j \left\langle \frac{\partial \Psi_i}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle + E_i \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial \Psi_j}{\partial \alpha} \right\rangle = \\ & = \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle + E_i \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle - E_j \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle = \\ & = \left\langle \Psi \middle| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \middle| \Psi \right\rangle + (E_i - E_j) \left\langle \Psi_i \middle| \frac{\partial}{\partial \alpha} \middle| \Psi_j \right\rangle = 0. \end{aligned} \quad (4.113)$$

Odkud již vyplývá **Hellmannova-Feynmanova**, nebo též **nediagonální formule**:

$$\left\langle \Psi_i \left| \frac{\partial}{\partial \alpha} \right| \Psi_j \right\rangle = \frac{\left\langle \Psi \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \right| \Psi \right\rangle}{E_i - E_j}, \quad i \neq j. \quad (4.114)$$

Tato formule platí pouze pro přesné vlnové funkce. Pro zkusmé funkce  $\{\Phi_i\}$  je

$$\left\langle \Phi_i \left| \Phi_j \right\rangle = \left\langle \Phi_i \left| \hat{H} \right| \Phi_j \right\rangle = 0, \quad i \neq j. \quad (4.115)$$

Funkci  $\Phi_i$  můžeme rozvinout v nějaké ortogonální bázi  $\{f_s\}$

$$\Phi_i = \sum_s c_{si} f_s, \quad (4.116)$$

či v maticovém vyjádření

$$\Phi = \mathbf{Cf}. \quad (4.117)$$

Za předpokladu, že funkce  $\{f_s\}$  nezávisí na  $\alpha$ , máme

$$\left\langle \Phi_i \left| \frac{\partial}{\partial \alpha} \right| \Psi_j \right\rangle = \sum_s \sum_t c_{si}^* \frac{\partial c_{tj}}{\partial \alpha} \langle f_s | f_t \rangle = \mathbf{c}_i^+ \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{c}_j. \quad (4.118)$$

Zavedeme-li matici

$$\mathbf{H}' \equiv \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial \alpha} = \left\langle f_s \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial \alpha} \right| f_t \right\rangle, \quad (4.119)$$

můžeme podobně vyjádřit i čítecil napravo ( 4.114 ) a celou rovnici zapsat v maticovém tvaru

$$\left\langle \Phi_i \left| \frac{\partial}{\partial \alpha} \right| \Psi_j \right\rangle = \mathbf{c}_i^+ \frac{\partial}{\partial \alpha} \mathbf{c}_j = \frac{\mathbf{c}_i^+ \mathbf{H}' \mathbf{c}_j}{E_j - E_i}, \quad i \neq j. \quad (4.120)$$

Je-li  $\alpha = R$  (mezijaderná vzdálenost v molekule) a  $\Phi_i = \varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R})$ , můžeme takto počítat nediabatickou vazbu  $\langle \varphi_i(\mathbf{r}, \mathbf{R}) | \nabla_{\mathbf{R}} | \varphi_j(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \rangle$  mezi dvěma potenciálovými povrchy.

## Variační princip

### *Eulerův-Lagrangeův variační princip*



Leonhard Paul Euler (1707 – 1783)



Joseph Louis Lagrange (1736 – 1813)

Předpokládaný tvar stacionární vlnové funkce má v případě interagujících částic jen přibližnou platnost. Proto hledáme jednočásticové vlnové funkce  $\varphi_k$  takové, aby Slaterův determinant approximoval přesné řešení stacionární Schrödingerovy rovnice co nejlépe. K tomuto účelu užijeme variační metodu a tvrzení, že základnímu stavu kvantového systému odpovídá vlnová funkce  $|\Phi\rangle$  která minimalizuje funkcional

$$E(\Phi) = \langle \hat{H} \rangle_{\Phi} = \frac{\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}, \quad (4.121)$$

kde  $\hat{H}$  je hamiltonián studovaného mnohočásticového systému. Výše uvedený Slaterův determinant  $\Phi$  bude proto aproximovat vlnovou

funkci základního stavu systému interagujících fermionů nejpřesněji, bude-li nabývat funkcionál

$$\begin{aligned}
 E(\Phi) &= \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle \equiv \\
 &\equiv \sum_{\xi_1, \dots, \xi_N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \Phi^*(\mathbf{r}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{r}_N, \xi_N) \hat{H} \Phi(\mathbf{r}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{r}_N, \xi_N) d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N
 \end{aligned}
 \tag{4.122}$$

své minimální hodnoty. V posledním uvedeném vztahu jsme využili normalizaci Slaterova determinantu k jedničce

$$\begin{aligned}
 \langle \Phi | \Phi \rangle &= \\
 &= \sum_{\xi_1, \dots, \xi_N} \int_{\mathbb{R}^{3N}} \Phi^*(\mathbf{r}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{r}_N, \xi_N) \Phi(\mathbf{r}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{r}_N, \xi_N) d^3\mathbf{r}_1 \dots d^3\mathbf{r}_N = 1.
 \end{aligned}
 \tag{4.123}$$

Minimalizace funkcionálu  $E(\Phi)$  je velmi komplikovanou úlohou, která svým obsahem patří do matematické disciplíny zvané *variační počet*. Naším úkolem je nalézt minimum funkce, jejímiž nezávislými proměnnými jsou jiné funkce (jednočásticové vlnové funkce  $\varphi_k$ ), na něž navíc klademe jisté vazebné podmínky - jednočásticové vlnové funkce jsou podle předpokladu normalizovány. Dá se ukázat, že tato úloha je ekvivalentní hledání vázaného extrému funkce nekonečně mnoha proměnných.

Aniž bychom zabíhali do přílišných podrobností, připomeňme si, že nutnou podmínkou minima funkce konečně mnoha reálných proměnných je nulovost všech jejích parciálních derivací. Tato podmínka vede obvykle k soustavě nelineárních algebraických rovnic, jejíž řešení poskytuje „podezřelé“ body, v nichž může studovaná funkce minima nabývat.

**Věta 1:** Necht'  $\hat{H}$  je přesný hamiltonián systému a  $\Phi$  libovolná funkce souřadnic systému mající konečnou normu a splňující okrajové podmínky daného problému.

Je-li  $\Phi$  aproximací k přesné vlnové funkci  $\Psi$ , od níž se liší pouze variací prvního řádu

$$\Phi = \Psi + \delta\Psi, \quad (4.124)$$

pak variace funkcionálu

$$\delta E(\Phi) = 0. \quad (4.125)$$

**Důkaz:** S použitím Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \quad (4.126)$$

dostáváme

$$\begin{aligned} (\hat{H} - E)\Phi &= (\hat{H} - E)(\Psi + \delta\Psi) = \underbrace{(\hat{H}\Psi - E\Psi)}_0 + (\hat{H} - E)\delta\Psi = \\ &= (\hat{H} - E)\delta\Psi. \end{aligned} \quad (4.127)$$

Odtud plyne vztah

$$\begin{aligned} \delta E(\Phi) &= E(\Psi + \delta\Psi) - \hat{H}(\Psi + \delta\Psi) + \hat{H}(\delta\Psi) = \\ &= E(\Psi + \delta\Psi) - \hat{H}(\Psi) = E(\Psi + \delta\Psi) - E(\Psi) = \\ &= E(\Phi) - E(\Psi) = \frac{\langle \Phi | \hat{H} - E | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{\langle \delta\Psi | \hat{H} - E | \delta\Psi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}, \end{aligned} \quad (4.128)$$

Podle něhož je funkcionál  $E(\Phi)$  aproximací k přesné hodnotě energie  $E$ , od níž se liší pouze členem druhého řádu ve variaci  $\delta\Psi$ . Člen obsahující variaci prvního řádu napravo v (4.128) chybí, čímž je věta dokázána.

Ukážeme, že platí i obrácené tvrzení, to jest, že z variačního principu vyplývá Schrödingerova rovnice

**Věta 2:** Stavový vektor  $\Phi$ , pro nějž platí ( 4.125 ), je vlastním vektorem  $\hat{H}$  a stacionární hodnoty funkcionálu  $E(\Phi)$  jsou vlastními hodnotami  $\hat{H}$ .

**Důkaz:** Necht'  $\Phi$  je normovaná vlnová funkce, pro níž platí

$$\delta \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle = 0, \quad (4.129)$$

$$\langle \Phi | \Phi \rangle = 1.$$

pak ovšem

$$\delta \left[ \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle - \lambda \langle \Phi | \Phi \rangle \right] = 0, \quad (4.130)$$

kde  $\lambda$  je Lagrangeův multiplikátor. Variací výrazu v hranaté závorce dostáváme

$$\langle \delta \Phi | \hat{H} - \lambda | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{H} - \lambda | \delta \Phi \rangle = 0. \quad (4.131)$$

Položme

$$\delta \Phi = \delta u + i \delta v, \quad u, v \in \mathbb{R}. \quad (4.132)$$

Pak pro všechna  $\delta u, \delta v$  platí

$$\begin{aligned} & \langle \delta \Phi | \hat{H} - \lambda | \Phi \rangle - \langle \Phi | \hat{H} - \lambda | \delta \Phi \rangle = \\ & = \langle \delta \Phi | \hat{H} - \lambda | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{H} - \lambda | \delta u \rangle + \langle i \delta v | \hat{H} - \lambda | \Phi \rangle + \langle \Phi | \hat{H} - \lambda | i \delta v \rangle = \\ & = \langle \delta u | \hat{H} - \lambda | \Phi + \Phi^* \rangle - i \langle \delta v | \hat{H} - \lambda | \Phi + \Phi^* \rangle = 0 \end{aligned} \quad (4.133)$$

a Eulerovy rovnice pro variační problém mají tvar



$$(\hat{H} - \lambda)|\Phi \pm \Phi^*\rangle = 0. \quad (4.134)$$

Jejich odečtením dostáváme

$$\begin{aligned} (\hat{H} - \lambda)|\Phi\rangle &= 0, \\ (\hat{H} - \lambda)|\Phi^*\rangle &= \langle\Phi|(\hat{H} - \lambda) = 0. \end{aligned} \quad (4.135)$$

Lagrangeův multiplikátor  $\lambda$  zde má zřejmě význam vlastní hodnoty hamiltoniánu

$$\lambda \equiv E, \quad (4.136)$$

takže obě rovnice ( 4.135 ) jsou ekvivalentní Schrödingerově rovnici

$$\hat{H}\Phi = E\Phi. \quad (4.137)$$

Na ( 4.137 ) můžeme pohlížet jako na nutnou podmínku, kterou musí zkusmá vlnová funkce splňovat, aby funkcionál  $E(\Phi)$  měl stacionární hodnotu.

**Věta 3:** Necht'  $E_0$  je přesná energie základního stavu a  $\Psi_0$  je jí odpovídající vlastní funkce  $\hat{H}$ . Potom platí nerovnost

$$E(\Phi) \geq E(\Psi_0) = E_0, \quad (4.138)$$

tj. energie počítaná variační metodou pomocí zkusmé vlnové funkce  $\Phi$  je (na rozdíl od energie počítané poruchovou metodou) horní limitou k přesné hodnotě  $E_0$ . Přitom znaménko rovnosti platí pouze v případě, že  $\Phi = \Psi_0$ .

**Důkaz:** S použitím spektrálního rozvoje hamiltoniánu

$$\hat{H} = \sum_k E_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k| \quad (4.139)$$

a s uvažáním, že

$$\hat{1} = \sum_k |\Psi_k\rangle\langle\Psi_k|, \quad (4.140)$$

kde  $E_k$  a  $\Psi_k$  jsou přesné vlastní hodnoty a vlastní funkce  $\hat{H}$ , odvodíme

$$E(\Phi) - E(\Psi_0) = \frac{\langle\Phi|\hat{H} - E_0|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle} = \sum_k (E_k - E_0) \frac{|\langle\Phi|\Psi_k\rangle|^2}{\langle\Phi|\Phi\rangle}. \quad (4.141)$$

Jelikož pro  $k \neq 0$  je  $E_k > E_0$ , máme větu dokázanu.

Variační princip lze s pomocí poslední věty snadno zobecnit rovněž pro excitované stavy.

**Věta 4:** Necht' přibližná vlnová funkce  $\Phi$  je ortogonální k přesné vlnové funkci základního stavu

$$\langle\Psi_0|\Phi\rangle = 0, \quad (4.142)$$

pak pro energii  $E_1$  prvního excitovaného stavu platí variační princip

$$E_1 \leq \frac{\langle\Phi|\hat{H}|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle}. \quad (4.143)$$

**Důkaz:** Postupujeme stejně, jako u předchozí věty

$$E(\Phi) - E(\Psi_1) = \frac{\langle\Phi|\hat{H} - E_1|\Phi\rangle}{\langle\Phi|\Phi\rangle} = \sum_k (E_k - E_1) \frac{|\langle\Phi|\Psi_k\rangle|^2}{\langle\Phi|\Phi\rangle}, \quad (4.144)$$

kde  $E_k \geq E_1$  pro  $k \geq 1$ . Pro  $k = 0$  je podle (4.142)  $\langle\Phi|\Psi_k\rangle = 0$ .

## *Raileighův-Ritzův variační princip*



Walther Ritz (1878 – 1909)

Pro praktické aplikace je nejvhodnější modifikace Eulerova-Lagrangeova variačního principu, známá jako Ritzova, popřípadě Raileighova-Ritzova variační metoda. Vychází se při ní z nějaké testovací (zkusmé) vlnové funkce závisující lineárně na parametrech  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$

$$\Phi \equiv \Phi(\alpha, \beta, \gamma, \dots). \quad (4.145)$$

Potom vlnová funkce  $\Phi$ , která má být nejlepším přiblížením k přesné vlnové funkci  $\Psi_0$  základního stavu, je určena požadavkem (4.125), který nyní zapíšeme jako

$$\delta E(\Phi) = \frac{\partial E}{\partial \alpha} \delta \alpha + \frac{\partial E}{\partial \beta} \delta \beta + \frac{\partial E}{\partial \gamma} \delta \gamma + \dots = 0. \quad (4.146)$$

Předpokládáme-li navíc, že parametry  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  a jejich variace  $\delta \alpha, \delta \beta, \delta \gamma, \dots$  jsou lineárně nezávislé, bude (4.146) splněna tehdy, když

$$\frac{\partial E(\Phi)}{\partial \alpha} = \frac{\partial E(\Phi)}{\partial \beta} = \frac{\partial E(\Phi)}{\partial \gamma} = \dots = 0. \quad (4.147)$$

Z podmínek (4.147) dostaneme rovnice pro parametry  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$ .

Protože není prakticky možné rozvinout aproximativní funkci podle úplné (nekonečné) báze, provádí se rozvoj pouze podle konečné množiny funkcí zvané **redukovaná báze**.

Normovanou testovací funkci  $\Phi_k$  tedy rozvineme v libovolné bázi  $\{f_i\}$  a omezíme se pouze na  $n$  členů

$$\Phi_k = \sum_{i=1}^n c_{ik} f_i, \quad (4.148)$$

kde  $c_{ik}$  jsou rozvojové koeficienty. Předpokládejme, že lineárně nezávislé funkce  $\{f_i\}$  nejsou obecně ortogonální. Definujme matici hamiltoniánu v bázi  $\{f_i\}$

$$\mathbf{H} \equiv H_{ij} = \langle f_i | \hat{H} | f_j \rangle \quad (4.149)$$

a tzv. **překryvovou matici**

$$\mathbf{S} \equiv S_{ij} = \langle f_i | f_j \rangle. \quad (4.150)$$

Snadno se přesvědčíme, že matice  $\mathbf{S}$  je hermitovská a zároveň metrická. Z výrazu (4.148) nyní plyne

$$E_k \equiv E(\Phi_k) = \frac{\sum_{i,j} c_{ik}^* c_{jk} H_{ij}}{\sum_{i,j} c_{ik}^* c_{jk} S_{ij}} = \frac{\mathbf{c}_k^+ \mathbf{H} \mathbf{c}_k}{\mathbf{c}_k^+ \mathbf{S} \mathbf{c}_k}, \quad (4.151)$$

neboli

$$E_k \sum_{i,j} c_{ik}^* c_{jk} S_{ij} = \sum_{i,j} c_{ik}^* c_{jk} H_{ij}, \quad (4.152)$$

kde  $\mathbf{c}_k \equiv c_{ik}$  je sloupcová matice. Derivujeme-li postupně obě strany rovnice ( 4.152 ) vzhledem k jednomu z koeficientů, např.  $c_{pk}^*$ , dostáváme

$$\frac{\partial E_k}{\partial c_{pk}^*} \sum_{i,j} c_{ik}^* c_{jk} S_{ij} + E_k \sum_j c_{jk} S_{pj} = \sum_j c_{jk} H_{pj}. \quad (4.153)$$

Považujeme-li rozvojové koeficienty  $\{c_{ik}\}$  za variační parametry, dostaneme stacionární hodnotu energie tak, že podle ( 4.147 ) položíme

$$\frac{\partial E_k}{\partial c_{pk}^*} = 0, \quad p = 1, 2, \dots, n. \quad (4.154)$$

To vede k soustavě  $n$  rovnic

$$\sum_j c_{jk} (H_{pj} - E_k S_{pj}) = 0, \quad p = 1, 2, \dots, n, \quad (4.155)$$

nebo v maticovém tvaru

$$(\mathbf{H} - E_k \mathbf{S}) \mathbf{c}_k = 0, \quad (4.156)$$

kteřá má nenulové řešení tehdy a jen tehdy, když platí sekulární rovnice

$$\det(\mathbf{H} - E_k \mathbf{S}) = 0. \quad (4.157)$$

Podobně, jako v případě poruchové teorie, dává řešení této rovnice množinu energií  $E_1, \dots, E_n$  spolu s příslušnými koeficienty  $\mathbf{c}_1, \dots, \mathbf{c}_n$ . Definujeme-li matice

$$\mathbf{E} = E_i \delta_{ik} = \begin{pmatrix} E_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & E_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & E_n \end{pmatrix}, \quad (4.158)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{c}_i = (\mathbf{c}_1 \quad \mathbf{c}_2 \quad \cdots \quad \mathbf{c}_n) = \begin{pmatrix} c_{11} & c_{21} & \cdots & c_{n1} \\ c_{12} & c_{22} & \cdots & c_{n2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{13} & c_{23} & \cdots & c_{nn} \end{pmatrix}, \quad (4.159)$$

můžeme ( 4.156 ) shrnout do jediné rovnice

$$\mathbf{HC} = \mathbf{SCE}. \quad (4.160)$$

Nejnižší hodnota  $E_i$  je podle ( 4.138 ) horní mezí k přesné energii základního stavu. Za předpokladu, že stavy s různou energií jsou vzájemně ortogonální, lze ostatní řešení interpretovat jako přibližné hodnoty energie pro excitované stavy.

Uspořádáme-li funkce  $\{f_i\}$  a  $\{\Phi_k\}$  do řádkových matic

$$\mathbf{f} = (f_1 \quad f_2 \quad \cdots \quad f_n), \quad (4.161)$$

$$\mathbf{\Phi} = (\Phi_1 \quad \Phi_2 \quad \cdots \quad \Phi_n),$$

můžeme zavést pro překryvovou matici  $\mathbf{S}$  označením

$$\mathbf{S} = \langle \mathbf{f} | \mathbf{f} \rangle = \mathbf{f}^+ \mathbf{f} \quad (4.162)$$

a transformaci ( 4.148 ) zapsat ve tvaru

$$\mathbf{\Phi} = \mathbf{fC}. \quad (4.163)$$

Normovací podmínku pro funkce  $\{\Phi_k\}$  vyjádříme vztahem

$$\langle \mathbf{\Phi} | \mathbf{\Phi} \rangle = \mathbf{\Phi}^+ \mathbf{\Phi} = (\mathbf{fC})^+ \mathbf{fC} = \mathbf{C}^+ \mathbf{f}^+ \mathbf{fC} = \mathbf{C}^+ \mathbf{SC} = \mathbf{1}. \quad (4.164)$$

Vynásobíme-li ( 4.160 ) zleva maticí  $\mathbf{C}^+$ , pak s použitím ( 4.164 ) dostáváme

$$\mathbf{E} = \mathbf{C}^+ \mathbf{H} \mathbf{C}. \quad ( 4.165 )$$

$\mathbf{C}$  je tedy matice, která převádí jak  $\mathbf{H}$ , tak i  $\mathbf{S}$  na diagonální tvar. Je-li báze  $\{f_i\}$  ortonormální, je  $\mathbf{S} = \mathbf{1}$ ,  $\mathbf{C}$  je pak unitární matice a

$$\mathbf{H} \mathbf{C} = \mathbf{C} \mathbf{E}. \quad ( 4.166 )$$

Obdobně se postupuje i v úloze, kterou budeme řešit v následujících podkapitolách. Snad jen s tou obměnou, že rovnice pro „podezřelé“ jednočásticové vlnové funkce (tedy ty, které minimalizují funkcionál ( 4.121 )) nabudou tentokrát tvaru nelineárních integrodiferenciálních rovnic, po svých objevitelích obvykle nazývaných *rovnícemi Hartreeho-Fockovými*. Jejich konkrétní vyjádření závisí ovšem na konkrétním studovaném systému.

### Mnohaelektronové vlnové funkce

Odvodíme nyní obecný tvar  $N$ -částicové antisymetrické vlnové funkce. Zavedeme-li úplnou bázi jednoelektronových funkcí (spinorbitalů)  $\psi_k(\mathbf{x}) \equiv \psi_k(\mathbf{r}, \zeta)$ , může být každá normovatelná jednoelektronová funkce  $\psi(\mathbf{x})$  též proměnné rozvinuta ve tvaru

$$\psi(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k \psi_k(\mathbf{x}) = \sum_{k=1}^{\infty} \langle \psi_k | \psi \rangle \psi_k(\mathbf{x}). \quad ( 4.167 )$$

Mějme nyní dvouelektronovou funkci  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  a naokamžik předpokládejme, že  $\mathbf{x}_2$  je pouze parametr. Pak lze  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  vyjádřit pomocí  $\psi_k(\mathbf{x}_1)$ . Koeficienty  $c_k = c_k(\mathbf{x}_2)$  jsou funkcemi  $\mathbf{x}_2$  a můžeme je opět rozvinout podle  $\mathbf{x}_2$  :

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) = \sum_{k=1}^{\infty} c_k(\mathbf{x}_2) \psi_k(\mathbf{x}_1) = \sum_{k,l=1}^{\infty} c_{kl} \psi_k(\mathbf{x}_1) \psi_l(\mathbf{x}_2). \quad (4.168)$$

Obecně pro každou  $N$ -elektronovou funkci  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$  mající konečnou normu můžeme psát

$$\begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) &= \sum_{k_1, k_2, \dots, k_N} c(k_1, k_2, \dots, k_N) \psi_{k_1}(\mathbf{x}_1) \psi_{k_2}(\mathbf{x}_2) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{x}_N) = \\ &= \sum_{k_1, k_2, \dots, k_N} c(k_1, k_2, \dots, k_N) \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i), \end{aligned} \quad (4.169)$$

kde

$$c(k_1, k_2, \dots, k_N) = \left\langle \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i) \middle| \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \right\rangle. \quad (4.170)$$

Požadujeme, aby  $N$ -elektronová funkce  $\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$  byla antisymetrická, tj.

$$\hat{A} \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) = \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N), \quad (4.171)$$

a ukážeme, že koeficienty (4.169) jsou pak antisymetrickými funkcemi svých argumentů:



$$\begin{aligned}
\hat{A}_k c(k_1, k_2, \dots, k_N) &= \left\langle \hat{A}_k \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i) \middle| \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \right\rangle = \\
&= \left\langle \hat{A}_x \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i) \middle| \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \right\rangle = \\
&= \left\langle \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i) \middle| \hat{A}_x \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \right\rangle = \\
&= \left\langle \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i) \middle| \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \right\rangle = c(k_1, k_2, \dots, k_N).
\end{aligned}
\tag{4.172}$$

Indexy  $k$  nebo  $x$  označují, že se v daném případě jedná buď o permutaci indexů  $k_1, k_2, \dots, k_N$ , nebo permutaci částicových souřadnic  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ .

Jak víme z kapitoly 3,  $N$ -elektronová vlnová funkce  $\hat{A}_x \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i)$  tvoří podle ( 3.353 ), resp. ( 3.354 ) až na konstantu Slaterův determinant. Protože je každý determinant invariantní vůči transpozici svých prvků, mohli jsme si dovolit na pravé straně ( 4.172 ) zaměnit  $\hat{A}_k$  za  $\hat{A}_x$ . Z ( 4.169 ), ( 4.171 ) a ( 4.172 ) vyplývá tvar antisymetrické  $N$ -elektronové vlnové funkce

$$\begin{aligned}
\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) &= \frac{1}{N!} \sum_{k_1, \dots, k_N} c(k_1, \dots, k_N) \sum_p (-1)^p \hat{P}[\psi_{k_1}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{x}_N)] = \\
&= \frac{1}{N!} \sum_{k_1, \dots, k_N} c(k_1, \dots, k_N) \det[\psi_{k_1}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{x}_N)].
\end{aligned}
\tag{4.173}$$

Protože determinant se dvěma stejnými řádky je nulový, uvažujeme ze všech členů v sumacích přes  $k_1, k_2, \dots, k_N$  pouze členy odpovídající různým indexům  $k_1, k_2, \dots, k_N$ . Protože záměna dvou řádků determinantu mění jeho znaménko, pak v případě, že se různé členy

v jednotlivých součtech liší pouze pořadím indexů  $k_1, k_2, \dots, k_N$ , jsou vzhledem k antisymetričnosti koeficientů  $c(k_1, k_2, \dots, k_N)$  tyto členy stejné. Protože z  $N$  indexů je možno sestavit  $N!$  jejich permutací, dostáváme

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_{k_1 < k_2 < \dots < k_N} c(k_1, \dots, k_N) \det[\psi_{k_1}(\mathbf{x}_1) \dots \psi_{k_N}(\mathbf{x}_N)]. \quad (4.174)$$

Každou uspořádanou podmnožinu  $N$  jednoelektronových indexů

$$K \equiv \{k_1 < k_2 < \dots < k_N\} \quad (4.175)$$

nazveme uspořádanou konfigurací a zavedeme nové koeficienty

$$C_K = (N!)^{\frac{1}{2}} c(k_1, k_2, \dots, k_N). \quad (4.176)$$

Normovaným determinanem příslušejícím uspořádané konfiguraci  $K$ , je Slaterův determinant

$$\begin{aligned} D_K(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_P (-1)^P \hat{P} \left( \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i) \right) = \sqrt{N!} \hat{A} \left( \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(\mathbf{x}_i) \right) = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{k_1}(\mathbf{x}_1) & \psi_{k_1}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{k_1}(\mathbf{x}_N) \\ \psi_{k_2}(\mathbf{x}_1) & \psi_{k_2}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{k_2}(\mathbf{x}_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{k_N}(\mathbf{x}_1) & \psi_{k_N}(\mathbf{x}_2) & \dots & \psi_{k_N}(\mathbf{x}_N) \end{vmatrix}. \end{aligned} \quad (4.177)$$

S použitím (4.176) a (4.177) upravíme pravou stranu (4.174) na tvar

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N) = \sum_K C D_K(\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N). \quad (4.178)$$

Ukázali jsme tedy, že libovolnou antisymetrickou vlnovou funkci lze vyjádřit jako lineární kombinaci Slaterových determinantů všech uspořádaných konfigurací. Slaterovy determinanty odpovídající všem uspořádaným konfiguracím tak tvoří úplný systém v prostoru normovatelných antisymetrických vlnových funkcí.

### *Metoda Konfigurační interakce*

Jedním ze základních problémů kvantové mechaniky je nalezení vlastních hodnot hermitovského operátoru  $\hat{\Omega}$  odpovídajícího nějaké pozorovatelné fyzikální veličině, neboli řešení charakteristického problému operátoru  $\hat{\Omega}$ . V předchzím oddíle jsme ukázali, že libovolnou  $N$ -elektronovou funkci můžeme rozvinout pomocí úplného systému Slaterových determinantů. Vybereme-li určitým způsobem konečný počet  $M$  těchto determinantů, dostáváme přibližnou vlnovou funkci

$$\Phi = \sum_K^M C_K D_K, \quad (4.179)$$

přičemž koeficienty  $C_k$  určujeme Ritzovou variační metodou. Tento přístup vede k soustavě lineárních rovnic

$$\sum_L \left( \langle D_K | \hat{\Omega} | D_L \rangle - \omega \langle D_K | D_L \rangle \right) C_L = 0, \quad (4.180)$$

kde

$$\omega = \langle \hat{\Omega} \rangle_{\Phi} = \frac{\langle \Phi | \hat{\Omega} | \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle} = \frac{\sum_K \sum_L C_K^* C_L \langle D_K | \hat{\Omega} | D_L \rangle}{\sum_K \sum_L C_K^* C_L \langle D_K | D_L \rangle}. \quad (4.181)$$

Řešení soustavy (4.180) vede na sekulární rovnici

$$\det \left( \langle D_K | \hat{\Omega} | D_L \rangle - \omega \langle D_K | D_L \rangle \right) = 0, \quad (4.182)$$

jejíž kořeny jsou, jak víme, horními mezemi pro přesné vlastní hodnoty  $N$ -elektronového problému. Koeficienty  $C_K$  opět nalezneme dosazením nalezených kořenů do původních rovnic ( 4.180 ). Tato metoda je známa pod názvem **metoda konfigurační interakce**.

### *Slaterova-Condonova pravidla*



Edward Uhler Condon (1902 – 1974)

$\hat{\Omega}$  je obecně mnohaelektronový hermitovský operátor, o němž předpokládáme, že je symetrický (invariantní) vůči libovolné permutaci  $N$  elektronů. Může být vyjádřen jako součet  $n$ -elektronových operátorů, kde  $n = 0, 1, 2, \dots, N$  :

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} &= \hat{\Omega}_{(0)} + \sum_i \hat{\Omega}_i + \frac{1}{2!} \sum_{i,j} \hat{\Omega}_{ij} + \frac{1}{3!} \sum_{i,j,k} \hat{\Omega}_{ijk} + \dots = \\ &= \hat{\Omega}_{(0)} + \sum_i \hat{\Omega}_i + \sum_{i<j} \hat{\Omega}_{ij} + \sum_{i<j<k} \hat{\Omega}_{ijk} + \dots, \end{aligned} \quad (4.183)$$

kde se v sumacích vynechávají členy, u nichž dva či více indexů je stejných. Obvykle v rozvoji ( 4.183 ) vystačíme s třemi členy, tj. s nejvýše dvouelektronovými operátory. Vzhledem k symetrii operátoru  $\hat{\Omega}$

$$[\hat{\Omega}, \hat{P}] = [\hat{\Omega}, \hat{A}] = 0 \quad (4.184)$$

a s použitím ( 4.184 ) dostaneme vztah

$$\begin{aligned} \langle D_K | \hat{\Omega} | D_L \rangle &= N! \left\langle \hat{\mathcal{A}} \prod_{i=1}^N \psi_{k_i}(i) \middle| \hat{\Omega} \middle| \hat{\mathcal{A}} \prod_{i=1}^N \psi_{l_i}(i) \right\rangle = \\ &= N! \prod_{i=1}^N \langle \psi_{k_i}(i) | \hat{\Omega} | \hat{\mathcal{A}} \psi_{l_i}(i) \rangle = \sum_p (-1)^p \prod_{i=1}^N \langle \psi_{k_i}(i) | \hat{\Omega} | \hat{\mathcal{A}} \psi_{l_i}(i) \rangle, \end{aligned} \quad (4.185)$$

v němž integrujeme přes spinprostorové souřadnice všech elektronů. Předpokládejme, že spinorbitaly  $\{\psi_{k_i}\}$  jsou ortonormální funkce a že permutační operátor je definován jako

$$\hat{P} = \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & \cdots & l_N \\ p_{l_1} & p_{l_2} & \cdots & p_{l_N} \end{pmatrix}. \quad (4.186)$$

Rozlišujeme celkem 3 možnosti výběru  $\hat{\Omega}$  v maticovém elementu  $\langle D_K | \hat{\Omega} | D_L \rangle$ :

$$1) \hat{\Omega} = \hat{1}$$

$$\begin{aligned} \langle D_K | D_L \rangle &= \sum_p (-1)^p \prod_{i=1}^N \langle \psi_{k_i}(i) | \hat{P} \psi_{l_i}(i) \rangle = \sum_p (-1)^p \prod_{i=1}^N \langle \psi_{k_i}(i) | \psi_{l_{p_i}}(i) \rangle = \\ &= \sum_p (-1)^p \prod_{i=1}^N \delta_{k_i l_{p_i}} = \delta_{KL}, \end{aligned}$$

( 4.187 )

$$2) \hat{\Omega} = \sum_j \hat{z}(j) \equiv \hat{Z}$$

$$\begin{aligned}
\langle D_K | \hat{Z} | D_L \rangle &= \sum_j \langle D_K | \hat{z}(j) | D_L \rangle = \sum_j \sum_p (-1)^p \prod_{i=1}^N \langle \psi_{k_i}(i) | \hat{z}(j) | \psi_{l_{p_i}}(i) \rangle = \\
&= \sum_j \sum_p (-1)^p \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \langle \psi_{k_i}(i) | \psi_{l_{p_i}}(i) \rangle \langle \psi_{k_j}(j) | \hat{z}(j) | \psi_{l_{p_j}}(j) \rangle = \\
&= \sum_j \sum_p (-1)^p \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j}}^N \delta_{k_i l_{p_i}} \langle \psi_{k_j}(j) | \hat{z}(j) | \psi_{l_{p_j}}(j) \rangle,
\end{aligned}$$

( 4.188 )

$$3) \hat{\Omega} = \sum_{j < m} \hat{v}(j, m) = \frac{1}{2} \sum_{j, m} \hat{v}(j, m) \equiv \hat{V}$$

$$\begin{aligned}
\langle D_K | \hat{V} | D_L \rangle &= \\
&= \sum_{j < m} \sum_p (-1)^p \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j, m}}^N \langle \psi_{k_i}(i) | \psi_{l_{p_i}}(i) \rangle \langle \psi_{k_j}(j) \psi_{k_m}(m) | \hat{v}(j, m) | \psi_{l_{p_j}}(j) \psi_{l_{p_m}}(m) \rangle = \\
&= \sum_{j < m} \sum_p (-1)^p \prod_{\substack{i=1 \\ i \neq j, m}}^N \delta_{k_i l_{p_i}} \langle \psi_{k_j}(j) \psi_{k_m}(m) | \hat{v}(j, m) | \psi_{l_{p_j}}(j) \psi_{l_{p_m}}(m) \rangle,
\end{aligned}$$

( 4,189 )

kde  $\hat{z}(j)$  je jednoelektronový operátor (např.  $-\frac{\hbar}{2m}\Delta_i$  je operátor

kinetické energie  $j$ -tého elektronu,  $\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 |R - r_j|}$  operátor coulombické

interakce mezi jádrem s nábojem  $Ze$  a  $j$ -tým elektronem vzdáleným od jádra  $r_j$ ),  $\hat{v}(j, m)$  je dvouelektronový operátor (např. operátor

$\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |r_i - r_j|}$  coulombické interakce mezi  $i$ -tým a  $j$ -tým elektronem).

Rovnice ( 4.187 ), ( 4.188 ), ( 4.189 ) se nazývají **Slaterova-  
Condonova pravidla** výpočtu maticových elementů jednoelektronových a dvouelektronových operátorů.

V případě jednoelektronových operátorů se možná řešení rozpadají na tři případy:

a)  $K = L$  (obě uspořádané konfigurace jsou stejné)

$$\langle D_K | \hat{Z} | D_L \rangle = \sum_j \langle \psi_{k_j} | \hat{z} | \psi_{k_j} \rangle. \quad (4.190)$$

b)  $K$  a  $L$  se liší v jediném spinorbitálu, tj.  $k_1 \neq l_1, k_2 = l_2, k_3 = l_3, \dots$

$$\langle D_K | \hat{Z} | D_L \rangle = \langle \psi_{k_1} | \hat{z} | \psi_{l_1} \rangle. \quad (4.191)$$

c)  $K$  a  $L$  se liší ve dvou spinorbitálech, tj.  $k_1 \neq l_1, k_2 \neq l_2, k_3 = l_3, \dots$

$$\langle D_K | \hat{Z} | D_L \rangle = 0. \quad (4.192)$$

V případě dvouelektronových operátorů rozlišujeme celkem čtyři možnosti:

a)  $K = L$

$$\langle D_K | \hat{V} | D_L \rangle = \sum_{j < m} \left[ \langle \psi_{k_j} \psi_{k_m} | \hat{v} | \psi_{k_j} \psi_{k_m} \rangle - \langle \psi_{k_j} \psi_{k_m} | \hat{v} | \psi_{k_m} \psi_{k_j} \rangle \right]. \quad (4.193)$$

b)  $K \neq L, k_1 \neq l_1, k_2 = l_2, k_3 = l_3, \dots$

$$\langle D_K | \hat{V} | D_L \rangle = \sum_j \left[ \langle \psi_{k_1} \psi_{k_j} | \hat{v} | \psi_{l_1} \psi_{k_j} \rangle - \langle \psi_{k_1} \psi_{k_j} | \hat{v} | \psi_{k_j} \psi_{l_1} \rangle \right]. \quad (4.194)$$

c)  $K \neq L, k_1 \neq l_1, k_2 \neq l_2, k_3 = l_3, \dots$

$$\langle D_K | \hat{V} | D_L \rangle = \left[ \langle \psi_{k_1} \psi_{k_2} | \hat{v} | \psi_{l_1} \psi_{l_2} \rangle - \langle \psi_{k_1} \psi_{k_2} | \hat{v} | \psi_{l_2} \psi_{l_1} \rangle \right]. \quad (4.195)$$

d)  $K$  a  $L$  se liší ve více než dvou spinorbitálech

$$\langle D_K | \hat{V} | D_L \rangle = 0. \quad (4.196)$$

## Matice hustoty

### *Čisté a smýšené soubory*

**Čistým statistickým souborem** nazveme takový kvantověmechanický soubor, jehož všechny členy mají stejnou vlnovou funkci. Takový soubor umožňuje úplný popis daného systému.

Nemáme-li však úplnou informaci o systému, můžeme jej reprezentovat souborem, jehož jednotlivé členy mají různé vlnové funkce. Takový soubor systémů nazveme **smýšeným statistickým souborem**. Ten představuje analogii klasického systému.

Vlnovou funkci  $\psi_k$  libovolného členu souboru lze vyjádřit pomocí rozvoje

$$\Psi_k(q, t) = \sum_n c_n(k, t) \varphi_n(q), \quad (4.197)$$

kde  $\{\varphi_n\}$  je úplná ortonormální vektorová báze stejná pro všechny členy souboru. Koeficienty  $c_n(k, t)$  vyhovují normovací podmínce

$$\sum_n c_n^*(k, t) c_n(k, t) = 1 \quad (4.198)$$

pro každý systém ( $k = 1, 2, \dots, N$ ) daného souboru.

Pomocí (4.197) můžeme vypočítat očekávanou hodnotu  $\langle \Omega_k \rangle$  veličiny  $\Omega$  pro  $k$ -tý systém. Tato očekávaná hodnota je určena rovnicí

$$\langle \Omega_k \rangle = \sum_{m,n} \Omega_{mn} c_m^*(k, t) c_n(k, t). \quad (4.199)$$

Maticové elementy  $\Omega_{mn}$  se počítají pomocí stejné báze  $\{\varphi_n\}$  a jsou tedy při stejném  $m, n$  stejné pro všechny členy souboru. Očekávané hodnoty  $\langle \Omega_k \rangle$  jsou však obecně různé, poněvadž dle předpokladu mají jednotlivé členy souboru obecně různé vlnové funkce.



Z jednotlivých očekávaných hodnot  $\langle \Omega_k \rangle$  lze sestavit průměrnou, neboli kvantověstatistickou střední hodnotu

$$\overline{\langle \Omega \rangle} = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \langle \Omega_k \rangle. \quad (4.200)$$

Po dosazení za  $\langle \Omega_k \rangle$  z rovnice ( 4.199 ) dostaneme vztah

$$\overline{\langle \Omega \rangle} = \sum_{m,n} \Omega_{mn} \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N c_m^*(k,t) c_n(k,t). \quad (4.201)$$

Tento vztah lze zjednodušit s pomocí operátoru hustoty

$$\hat{\rho}_{nm}(t) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N c_m^*(k,t) c_n(k,t) = \overline{c_m^* c_n} = w_n(t) \quad (4.202)$$

s jehož pomocí lze ( 4.201 ) přepsat do tvaru

$$\overline{\langle \Omega \rangle} = \sum_{m,n} \hat{\rho}_{nm} \Omega_{mn} = \text{Tr}(\hat{\rho} \Omega). \quad (4.203)$$

K výpočtu středních hodnot  $\overline{\langle \Omega \rangle}$  není třeba znát jednotlivé koeficienty  $c_n(k,t)$  stačí znát pouze operátor hustoty  $\hat{\rho}_{mn}$ .

Přejdeme-li od báze  $\{\varphi_n\}$  k nové ortonormální bázi  $\{\varphi'_n\}$  unitární transformací  $\varphi = \mathbf{U} \varphi'$ , pak se stopa operátoru zachovává, takže k jejímu výpočtu lze použít libovolné ortonormální báze.

Diagonální element  $w_n(t)$  určuje pravděpodobnost, že náhodně vybraný systém souboru bude v čase  $t$  nalezen v  $n$ -tém kvantovém stavu. Odvodíme nyní důležité kritérium pro čistý, resp. smýšený soubor. Pro čistý soubor je  $\hat{\rho}_{mn}$  definováno rovnicí ( 4.202 ), kde  $c_n(k,t) = c_n(t)$  pro všechna  $k = 1, 2, \dots, N$ . Užitím pravidla pro násobení matic vypočteme

$$\hat{\rho}_{mn}^2 = \sum_k \hat{\rho}_{mk} \hat{\rho}_{kn} = \sum_k c_k^* c_m c_n^* c_k. \quad (4.204)$$

Jelikož

$$\sum_k c_k^* c_k = \sum_k \rho_{kk} = \text{Tr } \rho = 1, \quad (4.205)$$

je také

$$\hat{\rho}_{mn}^2 = \hat{\rho}_{mn}, \quad (4.206)$$

či v maticové podobě

$$\rho^2 = \rho. \quad (4.207)$$

Je-li matice  $\rho$  diagonalizována, pak z ( 4.206 ) ihned plyne, že její vlastní (tj. diagonální) hodnoty jsou buď 0 nebo 1. Protože rovnice ( 4.205 ) nezávisí na volbě báze, musí být právě jeden diagonální element roven 1 a všechny ostatní elementy rovny 0. Z rovnice ( 4.202 ) pak plyne, že všechny systémy souboru nalezneme v témže kvantovém stavu a to v tom, jemuž přísluší ona jediná nenulová hodnota matice hustoty. Rovnice ( 4.204 ) tak udává nutnou a postačující podmínku pro matici hustoty čistého souboru.

### *Transformační vlastnosti matice hustoty*

Matice hustoty závisí na volbě báze. Vysvětlíme si nyní transformační vlastnosti této matice při přechodu k jiné bázi. Mějme dva lineární samoadjungované operátory  $\hat{L}$ ,  $\hat{M}$ , jejichž úplné ortonormální báze označíme  $\{\varphi_k\}$ ,  $\{\psi_\alpha\}$ , tj.

$$\begin{aligned} \hat{L}\varphi_k &= L_k\varphi_k, \\ \hat{M}\psi_\alpha &= M_\alpha\psi_\alpha. \end{aligned} \quad (4.208)$$

Vlnová funkce  $k$ -tého systému v bázi  $\varphi_k$  je dána rovnicí ( 4.197 ). Tuto vlnovou funkci však můžeme vyjádřit také pomocí báze  $\psi_\alpha$  operátoru  $\hat{M}$

$$\Psi_k(q,t) = \sum_{\alpha} b_{\alpha}(k,t) \psi_{\alpha}(q), \quad (4.209)$$

kde koeficienty  $b_{\alpha}(k,t)$  se obecně liší od koeficientů  $c_n(k,t)$ . Porovnáním ( 4.197 ) a ( 4.209 ) dostaneme vztah mezi oběma koeficienty

$$\sum_k c_k(k,t) \varphi_k(q) = \sum_{\alpha} b_{\alpha}(k,t) \psi_{\alpha}(q). \quad (4.210)$$

Tuto rovnici vynásobíme  $\varphi_n^*(q)$ , prointegrujeme přes  $q$  a užitíme relací ortonormality báze  $\varphi_k$ . Po jednoduché úpravě dostaneme hledaný vztah

$$c_n(k,t) = \sum_{\alpha} U_{n\alpha} b_{\alpha}(k,t), \quad (4.211)$$

kde maticové elementy transformační matice

$$U_{n\alpha} = \int \varphi_n^*(q) \psi_{\alpha}(q) dq = \langle L_n | M_{\alpha} \rangle \quad (4.212)$$

jsou určeny skalárními součiny prvků obou bází. Normovací podmínka ( 4.198 ) musí zůstat zachována i pro nové koeficienty  $b_{\alpha}$ , což vede k jisté omezující podmínce na transformační matici.

Zapíšeme-li

$$c_n^* = \sum_{\beta} U_{n\beta}^* b_{\beta}^*(k,t) \quad (4.213)$$

a užitíme

$$\sum_{\alpha} b_n^*(k,t) b_{\alpha}(k,t) = \sum_{\alpha,\beta} \delta_{\alpha\beta} b_{\alpha}^*(k,t) b_{\beta}(k,t) = 1, \quad (4.214)$$

pak z normovací podmínky ( 4.198 ) dostaneme hledaný vztah pro transformační matici

$$\sum_n U_{n\beta}^* U_{n\alpha} = \sum_n U_{\beta n}^+ U_{n\alpha} = \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.215)$$

Neboli, v maticové symbolice

$$\mathbf{U}\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}^+\mathbf{U} = \mathbf{1}. \quad (4.216)$$

Matici vyhovující této podmínce nazýváme unitární. Pomocí ( 4.213 ) nyní můžeme vyjádřit

$$c_m^*(k,t) = \sum_{\beta} U_{m\beta}^* b_{\beta}^*(k,t) \quad (4.217)$$

a užijeme definice ( 4.202 ). Po jednoduché úpravě dostaneme hledaný transformační vztah

$$\hat{\rho}_{nm}(t) = \sum_{\alpha,\beta} U_{n\alpha} \rho_{\alpha\beta}(t) U_{m\beta}^* = \sum_{\alpha,\beta} U_{n\alpha} \overline{b_{\beta}^* b_{\alpha}} U_{m\beta}^* \quad (4.218)$$

kde

$$\rho_{\alpha\beta} = \rho_{\alpha\beta}(t) = \overline{b_{\beta}^* b_{\alpha}} \quad (4.219)$$

jsou maticové elementy operátoru hustoty v bázi  $\psi_{\alpha}$ . Označíme-li operátory hustoty symboly  $\hat{\rho}_c, \hat{\rho}_b$ , pak s ohledem na podmínku unitarity ( 4.216 ) lze vztah ( 4.219 ) zapsat ve tvaru

$$\hat{\rho}_c = \mathbf{U} \rho_b \mathbf{U}^{-1}. \quad (4.220)$$

S pomocí relací úplnosti a ortonormality je možný i ekvivalentní zápis rovnice ( 4.2118 )

$$\langle L_n | \hat{\rho} | L_m \rangle = \sum_{\alpha, \beta} \langle L_n | M_\alpha \rangle \langle M_\alpha | \hat{\rho} | M_\beta \rangle \langle M_\beta | L_m \rangle. \quad ( 4.221 )$$

Zvolme nyní za operátor  $\hat{L}$  kupř. operátor zobecněné souřadnice  $\hat{Q}$ . Příslušná báze je pak dána Diracovou distribucí

$$\varphi_n(q) = \delta[q - q^{(n)}], \quad ( 4.222 )$$

kde

$$\begin{aligned} q &= (q_1, q_2, \dots, q_f), \\ q^{(n)} &= (q_1^{(n)}, q_2^{(n)}, \dots, q_f^{(n)}). \end{aligned} \quad ( 4.223 )$$

Prvky  $U_{n\alpha}$  vypočteme pomocí ( 4.208 ) a ( 4.222 ), což dá

$$\begin{aligned} U_{n\alpha} &= \psi_\alpha(q^{(n)}), \\ U_{m\beta}^* &= \psi_\beta^*(q^{(m)}). \end{aligned} \quad ( 4.224 )$$

Označme  $q^{(n)} \equiv q$ ,  $q^{(m)} \equiv q'$  a dosadíme ( 4.224 ) do ( 4.218 ). Po jednoduché úpravě dostaneme

$$\rho(q, q', t) = \sum_{\alpha, \beta} \rho_{\alpha\beta}(t) \psi_\alpha(q) \psi_\beta^*(q'). \quad ( 4.225 )$$

Na levé straně této rovnice jsme spojité indexy  $q$ ,  $q'$  nahradili funkční závislostí. Namísto matice  $\rho_{\alpha\beta}$  zavedeme operátor  $\hat{\rho}$  pomocí vztahu

$$\hat{\rho} \psi_\beta(q) = \sum_{\alpha} \rho_{\alpha\beta} \psi_\alpha(q), \quad ( 4.226 )$$

pomocí něhož přepíšeme ( 4.225 ) do tvaru

$$\rho(q, q', t) = \sum_{\alpha, \beta} \psi_{\beta}^*(q') \hat{\rho} \psi_{\alpha}(q). \quad ( 4.227 )$$

Veličina  $\rho(q, q', t)$  je operátor hustoty v souřadnicové reprezentaci. Jeho diagonální prvky  $\rho(q, q, t)$  mají velmi názorný fyzikální význam: veličina

$$dw_q = \rho(q, q, t) dq \quad ( 4.228 )$$

určuje pravděpodobnost toho, že namátkou vybraný systém statistického souboru bude v čase  $t$  nalezen v konfiguraci mezi  $q$  a  $q + dq$ . Tato interpretace ještě lépe vynikne, vezmeme-li matici hustoty v diagonálním tvaru

$$\rho_{\alpha\beta} = w_{\alpha} \delta_{\alpha\beta}, \quad ( 4.229 )$$

kde  $w_{\alpha}$  je pravděpodobnost realizace stavu  $\alpha$ . Rovnice ( 4.225 ) a ( 4.228 ) pak dávají pro pravděpodobnost  $dw_q$  vyjádření

$$dw_q = \sum_{\alpha} w_{\alpha} |\psi_{\alpha}(q)|^2 dq. \quad ( 4.230 )$$

U čistého souboru (jedno  $w_{\alpha} = 1$ , všechna ostatní  $w_{\beta} = 0$ ) dostáváme obvyklou interpretaci vlnové funkce. U smíšeného souboru mají jednotlivé systémy souboru různé pravděpodobnosti  $w_{\alpha}$  realizace stavů  $\alpha$ , takže pravděpodobnosti  $|\psi_{\alpha}(q)|^2 dq$  konfigurací ve stavech  $\alpha$  nutno ještě vystředovat přes pravděpodobnosti rozdělení těchto stavů. To je obsahem rovnice ( 4.230 ).

Normovací podmínku ( 4.205 ) pro  $\rho(q, q, t)$  je nutno nahradit odpovídajícím integrálním vztahem

$$\int \rho(q, q, t) dq = 1. \quad ( 4.231 )$$

V reprezentaci ( 4.230 ) souvisí operátor  $\hat{\rho}$  velmi jednoduše s rozdělením souřadnic, a tedy i s hustotou částic, odkud také pochází jeho název.

### *Liouvilleův teorém*



Joseph Liouville (1809 – 1882)

Přejdeme nyní k odvození výrazu pro časovou změnu operátoru hustoty. Koeficienty  $c_n(k,t)$  vyhovují rovnici,

$$i\hbar \frac{\partial c_n(k,t)}{\partial t} = \sum_l \hat{H}_{nl} c_l(k,t), \quad (4.232)$$

kde  $\hat{H}_{nl} = \langle n | \hat{H} | l \rangle$ .

Vezmeme komplexně sdruženou rovnici a užijeme hermiticitu hamiltoniánu  $\hat{H}_{mi}^* = \hat{H}_{im}$ . Dostaneme

$$-i\hbar \frac{\partial c_m^*(k,t)}{\partial t} = \sum_l \hat{H}_{lm} c_l^*(k,t). \quad (4.233)$$

Rovnici ( 4.232 ) vynásobíme  $c_m^*(k,t)$  a rovnici ( 4.233 )  $c_n(k,t)$  a výsledné rovnice sečteme:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} [c_n(k,t)c_m^*(k,t)] = \sum_l [\hat{H}_{nl}c_l(k,t)c_m^*(k,t) - \hat{H}_{km}c_l^*(k,t)c_n(k,t)]. \quad (4.234)$$

Rovnici ( 4.234 ) vysčítáme přes  $k$  a vydělíme počtem systémů  $N$ .  
Užitím definičního vztahu ( 4.202 ) pak získáme rovnici

$$\left( \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} \right)_{nm} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H})_{nm} = 0. \quad (4.235)$$

Levá strana této rovnice však představuje úplnou časovou derivaci operátoru hustoty, takže máme

$$\frac{d\hat{\rho}}{dt} = \frac{\partial \hat{\rho}}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} (\hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H})_{nm} = 0, \quad (4.236)$$

což je kvantová obdoba **Liouvilleova teorému** pro rozdělovací funkci, známého ze statistické fyziky. Mějme nějaký operátor  $\Omega$  nezávislý explicitně na čase. Z požadavku, aby střední kvantověstatistická hodnota  $\overline{\langle \Omega \rangle}$  nezávisela na čase plyne, že musí být

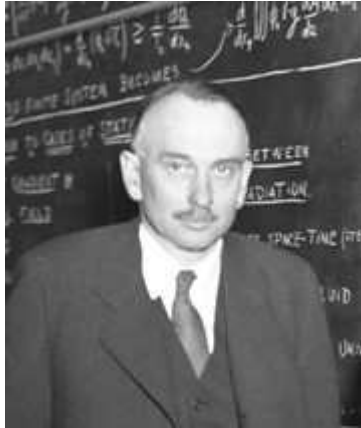
$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (4.237)$$

Soubor, jehož operátor hustoty vyhovuje této podmínce, nazýváme **stacionárním souborem**. Operátor hustoty stacionárního souboru pak splňuje rovnici

$$\hat{H}\hat{\rho} - \hat{\rho}\hat{H} \equiv [\hat{H}, \hat{\rho}] = 0. \quad (4.238)$$

Jak ale již víme z kapitoly 3, komutativita nějakého operátoru s hamiltoniánem vyjadřuje zákon zachování. Operátor hustoty stacionárního souboru lze tedy vyjádřit jako funkci operátorů konzervativních (zachovávajících se) veličin.



**Tolmanův teorém****Richard Chace Tolman (1881 – 1948)**

Rovnice ( 4.203 ) určuje střední kvantověstatistickou hodnotu veličiny  $\Omega$ , tj. střední hodnotu vypočtenou pomocí kvantového statistického souboru. Budeme předpokládat, že soubor je stacionární, takže pro operátor hustoty platí rovnice ( 4.237 ). Necht' tento soubor sestává z konzervativních systémů a jeho operátor hustoty vezmeme ve tvaru

$$\hat{\rho} = w(\hat{H}). \quad ( 4.239 )$$

Reprezentace operátoru je nejjednodušší v jeho vlastní bázi, takže bude výhodné zvolit za  $\{\psi_n\}$  vlastní funkce hamiltoniánu

$$\hat{H}\psi_n = E_n\psi_n. \quad ( 4.240 )$$

V takovém případě je

$$H_{mn} = \langle m | \hat{H} | n \rangle = E_n \delta_{mn}. \quad ( 4.241 )$$

Z vyjádření ( 4.239 ) pak plyne pro maticové elementy operátoru hustoty vztah

$$\rho_{mn} = \langle m | \hat{\rho} | n \rangle = w(E_n) \delta_{mn}. \quad ( 4.242 )$$

Diagonální elementy  $\rho_{nn}$  určují pravděpodobnost nalezení namátkou vybraného systému souboru v  $n$ -tém kvantovém stavu

$$w_n = \rho_{nn} = w(E_n), \quad (4.243)$$

kde normovací podmínka má nyní tvar

$$\sum_n w_n = \sum_n w(E_n) = 1. \quad (4.244)$$

Ve výrazu ( 4.203 ) nyní užijeme pro  $\rho_{mn}$  vztahu ( 4.242 ), což vede na výraz

$$\overline{\langle \Omega \rangle} = \sum_n w_n \Omega_{nn} = \sum_n w(E_n) \Omega_{nn}. \quad (4.245)$$

Energetické hladiny makrosystémů jsou zpravidla silně degenerovány. K dané hodnotě energie  $E_n$  tak existuje několik různých lineárně nezávislých vlastních funkcí  $\psi_{n\alpha}$ , kde  $\alpha = 1, 2, \dots, g_n$ , kde  $g_n$  je stupeň degenerace. Abychom zahrnuli tuto skutečnost, přepíšeme rovnici ( 4.240 ) ve tvaru

$$H\psi_{n\alpha} = E_n\psi_{n\alpha}, \quad \alpha = 1, 2, \dots, g_n. \quad (4.246)$$

Latinské indexy  $n, m$  budeme užívat k označení energetických hladin, řeckými indexy  $\alpha, \beta$  budeme odlišovat kvantové stavy s danou hodnotou energie.

Jelikož i vlastní funkce operátoru s degenerovaným spektrem lze zvolit ortonormální

$$\int \psi_{n\alpha}^*(q) \psi_{m\beta}(q) dq = \langle n\alpha | m\beta \rangle = \delta_{nm} \delta_{\alpha\beta}, \quad (4.247)$$

kde  $\alpha = 1, 2, \dots, g_n$ ,  $\beta = 1, 2, \dots, g_m$ , budou nyní maticové elementy operátoru hustoty a hamiltoniánu určeny rovnicemi

$$\langle m\beta | \hat{H} | n\alpha \rangle = E_n \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta}, \quad (4.248)$$

$$\langle m\beta | \hat{\rho} | n\alpha \rangle = w(E_n) \delta_{mn} \delta_{\alpha\beta}. \quad (4.249)$$

Pravděpodobnost nalezení namátkou vybraného systému souboru ve stavu  $|n\alpha\rangle$  je nyní rovna

$$w_{n\alpha} = \langle n\alpha | \hat{\rho} | n\alpha \rangle = w(E_n). \quad (4.250)$$

Všechny stavy s toutéž hodnotou energie  $E_n$  jsou tedy stejně pravděpodobné, což je znění **Tolmanova teoremu**.

### *Redukované matice hustoty*

Stacionární stav kvantově mechanického  $N$ -částicového systému je popsán vlnovou funkcí  $\Psi = \Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N)$ , kde  $\mathbf{x}_i = (\mathbf{r}_i, \zeta_i)$ . Řada vlastností systému závisí na těchto  $4N$  proměnných. Část informací, zahrnutých ve vlnové funkci, je tedy při výpočtu některých fyzikálních veličin nepodstatná. Pomocí  $N$ -částicové vlnové funkce a integrace přes řadu proměnných můžeme definovat tzv. **redukované matice hustoty** čímž vyloučíme řadu nevýznamných informací.

Víme, že veličina

$$\Psi(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \Psi^*(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N) \quad (4.251)$$

představuje hustotu pravděpodobnosti výskytu elektronů  $1, \dots, N$  se spinorovými souřadnicemi  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$ .

Funkci

$$\Gamma_N(1, 2, \dots, N | 1', 2', \dots, N') = \Psi(1, 2, \dots, N) \Psi^*(1', 2', \dots, N'), \quad (4.252)$$

v níž zavádíme čárkované souřadnice u komplexně sdružené vlnové funkce, nazýváme **maticí hustoty  $N$ -tého řádu**.

Toto označení nám umožňuje jednodušší zápis výrazu pro střední hodnotu. Je-li  $\Psi(1, 2, \dots, N)$  normovaná vlnová funkce, pak např. pro energii máme

$$\begin{aligned} \langle \hat{H} \rangle_{\Psi} &= \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle = \int \Psi^*(1', 2', \dots, N') \hat{H} \Psi(1, 2, \dots, N) d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_N = \\ &= \int H \Gamma_N(1, 2, \dots, N | 1', 2', \dots, N') d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_N. \end{aligned} \quad (4.253)$$

kde operátory necháváme působit pouze na nečárkované proměnné, avšak po této operaci, ale ještě před integrací, musíme položit  $1' = 1, 2' = 2, \dots, N' = N$ .

**Redukovanou maticí hustoty  $p$ -tého řádu** ( $1 \leq p \leq N$ ) rozumíme integrál matice hustoty  $N$ -tého řádu v prostoru  $N - p$  elektronů, neboli

$$\begin{aligned} \Gamma_p(1, 2, \dots, p | 1', 2', \dots, p) &= \\ &= \binom{N}{p} \int \Gamma_N(1, 2, \dots, p+1, \dots, N | 1', 2', \dots, p', p+1, \dots, N) d\mathbf{x}_{p+1}, \dots, d\mathbf{x}_N. \end{aligned} \quad (4.254)$$

Označení těchto veličin za matice vyplývá z toho, že např.  $\Gamma_N$  lze považovat za tenzorový součin sloupcového vektoru  $\Psi$  se spojitými parametry souřadnic a podobného řádkového vektoru  $\Psi^*$ . My se budeme zajímat především o redukované matice hustoty prvního a druhého řádu:

$$\begin{aligned} \Gamma_1(1|1') &= N \int \Gamma_N(1, 2, \dots, N | 1', 2, \dots, N) d\mathbf{x}_2, \dots, d\mathbf{x}_N = \\ &= \frac{2}{n-1} \int \Gamma_2(1, 2 | 1', 2) d\mathbf{x}_2, \\ \Gamma_2(1, 2 | 1', 2') &= \binom{N}{2} \int \Gamma_N(1, 2, 3, \dots, N | 1', 2', 3, \dots, N) d\mathbf{x}_3, \dots, d\mathbf{x}_N, \end{aligned} \quad (4.255)$$

Diagonální elementy těchto matic mají jednoduchou fyzikální interpretaci:

$\Gamma_1(1|1) \equiv \Gamma(\mathbf{x}_1)$  odpovídá hustotě pravděpodobnosti nalezení elektronu v bodě  $\mathbf{x}_1$ , neboli elektronové hustotě v tomto bodě, bez ohledu na souřadnice všech ostatních elektronů.

$\Gamma_2(1,2|1,2) \equiv \Gamma(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  udává hustotu pravděpodobnosti nalezení jednoho elektronu v bodě  $\mathbf{x}_1$  a druhého elektronu v bodě  $\mathbf{x}_2$ , přičemž souřadnice všech ostatních elektronů jsou libovolné.

Redukované matice hustoty jsou zřejmě hermitovské

$$\begin{aligned}\Gamma_1(1|1') &= \Gamma_1^*(1'|1), \\ \Gamma_2(1,2|1',2') &= \Gamma_2^*(1',2'|1,2),\end{aligned}\tag{4.256}$$

a vzhledem k tomu, že  $\Psi$  je antisymetrická, jsou antisymetrické i v každé sérii indexů

$$\Gamma_2(1,2|1',2') = -\Gamma_2(2,1|1',2') = -\Gamma_2(1,2|2',1').\tag{4.257}$$

Odtud plyne, že pokud se v množině proměnných  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2, \dots, \mathbf{x}_N$  vyskytne dva či více stejných indexů, pak jsou diagonální elementy redukovaných matic hustoty rovny nule:

$$\begin{aligned}\Gamma_2(1,1) &= 0, \\ \Gamma_3(1,1,2) &= 0,\end{aligned}\tag{4.258}$$

což odpovídá skutečnosti, že elektrony s paralelním spinem jsou drženy od sebe, kterýžto jev se nazývá **Fermiho díra**.

Uvažujme operátor  $\hat{\Omega}$ , symetrický ve všech elektronových souřadnicích. Pro jednoduchost předpokládejme, že tento operátor neobsahuje souřadnice více než dvou elektronů

$$\hat{\Omega} = \hat{\Omega}_0 + \sum_{i=1}^N \hat{\Omega}_i + \sum_{i<j}^N \hat{\Omega}_{ij},\tag{4.259}$$

kde první člen napravo nezávisí na elektronových souřadnicích, druhý člen představuje jednoelektronový operátor a třetí člen

dvouelektronový operátor. Máme tedy  $N$  operátorů  $\hat{\Omega}_i$  a  $\binom{N}{2}$  operátorů  $\hat{\Omega}_{ij}$ . Jelikož je  $\hat{\Omega}$  symetrický vzhledem k elektronům, stačí při výpočtu střední hodnoty  $\langle \hat{\Omega} \rangle$  spočítat jeden maticový element operátorů  $\hat{\Omega}_1$  a  $\hat{\Omega}_{ij}$  a vynásobit jej  $N$  či  $\binom{N}{2}$ .

Protože tyto maticové elementy závisí na souřadnicích nejvýše dvou elektronů, integruje se ve výrazech pro  $\langle \hat{\Omega} \rangle$  přes všechny zbylé elektrony. Právě tyto integrace jsou zahrnuty v definici redukovaných matic hustoty

$$\begin{aligned} \langle \hat{\Omega} \rangle &= \int \Psi^* \hat{\Omega} \Psi \, d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_N = \\ &= \hat{\Omega}_0 + N \int \Psi^* (1', 2, \dots, N) \hat{\Omega}_1 \Psi (1, 2, \dots, N) \Big|_{1=1'} \, d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_N + \\ &+ \binom{N}{2} \int \Psi^* (1', 2', \dots, N) \hat{\Omega}_{12} \Psi (1, 2, \dots, N) \Big|_{\substack{1=1' \\ 2=2'}} \, d\mathbf{x}_1, \dots, d\mathbf{x}_N = \\ &= \hat{\Omega}_0 + \int \hat{\Omega}_1 \Gamma_1 (1|1') \, d\mathbf{x}_1 + \int \hat{\Omega}_{12} \Gamma_2 (1, 2|1', 2') \, d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2, \end{aligned}$$

( 4.260 )

takže  $\langle \hat{\Omega} \rangle$  lze vyjádřit pomocí redukovaných matic hustoty prvního a druhého řádu.

Jak víme z předešlého, může být  $N$ -elektronová vlnová funkce rozvinuta podle úplného systému Slaterových determinantů konstruovaných z uspořádané množiny jednoelektronových funkcí  $\{\psi_k\}$ . Podobným způsobem můžeme rozvinout každou redukovanou matici hustoty v ortonormální bázi spinorbitalů  $\{\psi_k\}$ . Pro matice prvního a druhého řádu máme

$$\begin{aligned}\Gamma_1 &= (1|1') = \sum_{k,l} \psi_l(1) \Gamma_1(l|k) \psi_k^*(1') = \Psi(1) \Gamma \Psi^+(1'), \\ \Gamma_2 &= (1,2|1',2') = \sum_{k_1,k_2} \sum_{l_1,l_2} \Gamma_2(l_1,l_2|k_1,k_2) \psi_{l_1}(1) \psi_{l_2}(2) \psi_{k_1}^*(1') \psi_{k_2}^*(2') = \\ &= \sum_{k_1 < k_2} \sum_{l_1 < l_2} \Gamma_2(l_1,l_2|k_1,k_2) \det\{\psi_{l_1}(1) \psi_{l_2}(2)\} \det\{\psi_{k_1}^*(1') \psi_{k_2}^*(2')\},\end{aligned}\tag{4.261}$$

kde  $\Gamma_1(l|k)$  a  $\Gamma_2(l_1,l_2|k_1,k_2)$  fungují jako rozvojové koeficienty.

Podle (4.256) je matice  $\Gamma = [\Gamma_1(l|k)]$  hermitovská a lze proto nalézt unitární transformaci, která ji převádí na diagonální tvar

$$\mathbf{U}^+ \Gamma \mathbf{U} = \mathbf{n} = \delta_{ik} n_k.\tag{4.262}$$

Kde  $\mathbf{U} \mathbf{U}^+ = \mathbf{U}^+ \mathbf{U} = \mathbf{1}^+$ . Zavedeme novou ortogonální bázi tzv. **přirozených spinorbitalů**  $\{\chi_k\}$  které jsou uspořádány do řádkové matice. V této bázi je redukovaná matice hustoty prvního řádu diagonální

$$\begin{aligned}\chi &= \Psi \mathbf{U}, \\ \Psi &= \chi \mathbf{U}^+, \end{aligned}\tag{4.263}$$

neboli

$$\chi_k = \sum_l \psi_l U_{lk}.\tag{4.264}$$

Pomocí přirozených spinorbitalů lze psát redukované matice hustoty ve tvaru

$$\begin{aligned}\Gamma_1(1|1') &= \Psi(1) \Gamma \Psi^+(1') = \chi(1) \mathbf{U}^+ \Gamma \mathbf{U} \chi^+(1') = \chi(1) \mathbf{n} \chi(1') = \\ &= \sum_k n_k \chi_k(1) \chi_k^*(1'),\end{aligned}\tag{4.265}$$

kde  $n_k$  jsou obsazovací čísla. Löwdin ukázal, že splňují dvě podmínky

$$\begin{aligned} 0 \leq n_k \leq 1, \\ \sum_k n_k = N, \end{aligned} \quad (4.266)$$

z čehož vyplývá, že elektrony musí být distribuovány nejméně do  $N$  přirozených orbitalů. V limitním případě, kdy je jich obsazeno přesně  $N$ , platí

$$\Gamma^2 = \mathbf{U}\mathbf{n}\mathbf{U}^+\mathbf{U}\mathbf{n}\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}\mathbf{n}^2\mathbf{U}^+ = \mathbf{U}\mathbf{U}^+\mathbf{\Gamma}\mathbf{U}\mathbf{U}^+ = \mathbf{\Gamma}, \quad (4.267)$$

kde  $\mathbf{n}^2$  je opět diagonální matice. Protože  $n_k = 1$ , je také  $n_k^2 = 1$  pro  $k = 1, 2, \dots, N$  a  $n_k = n_k^2 = 0$  pro  $k > N$ .

$$\text{Tr } \mathbf{\Gamma} = \text{Tr}(\mathbf{U}\mathbf{n}\mathbf{U}^+) = \text{Tr}(\mathbf{U}\mathbf{U}^+\mathbf{n}) = \text{Tr } \mathbf{n} = N. \quad (4.268)$$

Význam přirozených spinorbitalů spočívá v tom, že libovolný spinorbital, jehož populace  $n_k$  je zanedbatelná, může být vypuštěn z rozvoje pro  $N$ -elektronovou vlnovou funkci, aniž by se tím významně porušila přesnost tohoto rozvoje. Toto je proto přirozené kritérium pro výběr konečného počtu takových spinorbitalů, zaručující, že odpovídající redukovaný rozvoj bude nejpřesnější aproximací pro vlnovou funkci.

### ***Fockův-Diracův operátor hustoty***

Uvažujme vlnovou funkci aproximovanou Slaterovým determinanem konstruovaným z  $N$  ortonormálních spinorbitalů  $\{\psi_k\}$ . Matice hustoty  $N$ -tého řádu může být potom psána ve tvaru



$$\begin{aligned}
\Gamma_N(1, 2, \dots, N | 1', 2', \dots, N') &= (N!)^{-1} \det[\psi_k(j)] \det[\psi_k^*(j')] = \\
&= (N!)^{-1} \det\{[\psi_k(j)][\psi_k^*(j')]\} = \\
&= (N!)^{-1} \det[\hat{\rho}(j, j')] = \\
&= \frac{1}{N!} \begin{vmatrix} \hat{\rho}(1, 1') & \hat{\rho}(1, 2') & \cdots & \hat{\rho}(1, N') \\ \hat{\rho}(2, 1') & \hat{\rho}(2, 2') & \cdots & \hat{\rho}(2, N') \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\rho}(N, 1') & \hat{\rho}(N, 2') & \cdots & \hat{\rho}(N, N') \end{vmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.269}$$

Veličina

$$\hat{\rho}(i, j') \equiv \hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_{j'}) = \sum_{k=1}^N \psi_k(\mathbf{x}_i) \psi_k^*(\mathbf{x}'_{j'}) \tag{4.270}$$

se nazývá **Fockův-Diracův** operátor hustoty. Pro redukovanou matici hustoty  $p$ -tého řádu bychom s použitím ortonormality spinorbitalů odvodili vztah

$$\Gamma_p(1, 2, \dots, p | 1', 2', \dots, N') = \frac{1}{p!} \begin{vmatrix} \hat{\rho}(1, 1') & \hat{\rho}(1, 2') & \cdots & \hat{\rho}(1, p') \\ \hat{\rho}(2, 1') & \hat{\rho}(2, 2') & \cdots & \hat{\rho}(2, p') \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \hat{\rho}(p, 1') & \hat{\rho}(p, 2') & \cdots & \hat{\rho}(p, p') \end{vmatrix}. \tag{4.271}$$

Např. pro matice hustoty prvních dvou řádů ( $p = 1$  a  $p = 2$ ) dostaneme

$$\begin{aligned}
\Gamma_1(1 | 1') &= \hat{\rho}(1, 1'), \\
\Gamma_2(1, 2 | 1', 2') &= \frac{1}{2} \begin{vmatrix} \hat{\rho}(1, 1') & \hat{\rho}(1, 2') \\ \hat{\rho}(2, 1') & \hat{\rho}(2, 2') \end{vmatrix}.
\end{aligned} \tag{4.272}$$

Vidíme tedy, že redukovaná matice hustoty prvního řádu je totožná s Fockovým-Diracovým operátorem hustoty a redukované matice hustoty vyšších řádů jsou plně určeny maticí hustoty prvního řádu.

S použitím definice součinu matice můžeme psát

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^2 &= \int \hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \xi) \hat{\rho}(\xi, \mathbf{x}'_j) d\xi = \sum_k \sum_l \psi_k(\mathbf{x}_i) \psi_l^*(\mathbf{x}'_j) \int \psi_k^*(\xi) \psi_l(\xi) d\xi = \\ &= \sum_k \sum_l \psi_k(\mathbf{x}_i) \psi_l^*(\mathbf{x}'_j) \delta_{kl} = \sum_k \psi_k(\mathbf{x}_i) \psi_k^*(\mathbf{x}'_j) = \hat{\rho}.\end{aligned}\tag{4.273}$$

Snadno ověříme, že  $\hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j)$  je hermitovský operátor

$$\begin{aligned}\hat{\rho}^+(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j) &= \hat{\rho}^*(\mathbf{x}'_j, \mathbf{x}_i) = \left[ \sum_k \psi_k(\mathbf{x}'_j) \psi_k^*(\mathbf{x}_i) \right]^* = \\ &= \sum_k \psi_k(\mathbf{x}_i) \psi_k^*(\mathbf{x}'_j) = \hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j)\end{aligned}\tag{4.274}$$

a že

$$\text{Tr} \left[ \hat{\rho}(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}'_j) \right] = \int \sum_{k=1}^N \psi_k(\mathbf{x}_i) \psi_k^*(\mathbf{x}_i) d\mathbf{x}_i = N.\tag{4.275}$$

Vidíme, že Fockův-Diracův operátor hustoty (resp. redukovaná matice hustoty prvního řádu ve výše uvedeném přiblížení) má vlastnosti projekčního operátoru.

Integrujme nyní redukované matice hustoty prvního a druhého řádu přes spinové proměnné:

$$\begin{aligned}P_1(\mathbf{r}_1 | \mathbf{r}'_1) &= \int \Gamma_1(\mathbf{x}_1 | \mathbf{x}'_1) d\zeta_1, \\ P_2(\mathbf{r}_1 \mathbf{r}_2 | \mathbf{r}'_1 \mathbf{r}'_2) &= \int \Gamma_2(\mathbf{x}_1 \mathbf{x}_2 | \mathbf{x}'_1 \mathbf{x}'_2) d\zeta_1 d\zeta_2.\end{aligned}\tag{4.276}$$

S pomocí těchto nových matic, zvaných **bezspinové matice hustoty** můžeme přepsat vztah (4.260) do tvaru

$$\langle \hat{\Omega} \rangle = \hat{\Omega}_0 + \int \hat{\Omega}_1 P_1 d\mathbf{r}_1 + \int \hat{\Omega}_{12} P_2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2.\tag{4.277}$$

## Model nezávislých částic (jednoelektronová aproximace)

V kvantové chemii vystačíme často s  $N$ -elektronovým hamiltoniánem tvaru

$$\hat{H} = \hat{T}_e + \hat{V}_{ee} + V_{en} = \sum_{i=1}^N \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \sum_a \frac{Z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ia}} \right) + \sum_{i<j}^N \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}}, \quad (4.278)$$

kde zanedbáváme člen  $V_{nn}$  který považujeme pro danou konfiguraci jader za konstantní. Odtud vyplývají následující omezení:

- 1) Zabýváme se pouze stacionárními stavy – všechny časově závislé jevy je třeba vyloučit
- 2) Hamiltonián je nerelativistický, tzn. nezahrnuje spinorbitální a jiné relativistické jevy
- 3) Používáme Bornovu-Oppenheimerovu aproximaci, tj. uvažujeme pohyb elektronů v poli pevných jader.

Vzhledem k interakci elektronů je vyjma nejjednodušších systémů nemožné řešit exaktně charakteristický problém hamiltoniánu (4.278). V celé řadě případů lze však získat rozumné výsledky za předpokladu, že se každý elektron pohybuje nezávisle na ostatních v potenciálním poli zahrnujícím zprůměrnované interakce všech ostatních částic. Namísto hamiltoniánu (4.278) musíme proto pracovat s tzv. **efektivním  $N$ -elektronovým hamiltoniánem**. Tato představa je jádrem **modelu nezávislých částic**, o kterém pojednává tento odstavec

### *Vlnová funkce v modelu nezávislých částic*

Pro systém  $N$  nezávislých částic je vhodné předpokládat, že vlnovou funkci lze vyjádřit jako součin  $N$  jednočásticových funkcí. Pravděpodobnost nalezení různých částic v jistých místech prostoru je pak rovna součinu pravděpodobností vztahujících se jednotlivým částicím. Tyto individuální pravděpodobnosti jsou tedy nezávislé. Elektronové vlnové funkce ve formě součinu odpovídá **efektivní hamiltonián** ve tvaru součtu jednotlivých příspěvků

$$\hat{H}^{ef}(1, 2, \dots, N) = \sum_{i=1}^N \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \sum_a \frac{Z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ia}} + \hat{V}^{ef}(i) \right] = \sum_{i=1}^N \hat{H}^{ef}(i), \quad (4.279)$$

kde  $\hat{V}^{ef}(i)$  je průměrné efektivní pole tvořené ostatními elektrony, působící na  $i$ -tý elektron, které lze určit variační metodou, jak uvidíme dále.

V modelu nezávislých částic vycházíme ze zkusmé  $N$ -elektronové vlnové funkce, která je antisymetrická vzhledem k záměně částic. Nejjednodušší takovouto vlnovou funkcí je Slaterův determinant

$$D = \frac{1}{\sqrt{N!}} \hat{A} \prod_{i=1}^N \psi_i(\mathbf{x}_i), \quad (4.280)$$

kde  $\psi_i(\mathbf{x}) = \phi_i^+(\mathbf{r})\alpha(\zeta) + \phi_i^-(\mathbf{r})\beta(\zeta)$  jsou spinorbitaly, z nichž každý může obsahovat obecně dvě prostorové funkce  $\phi_i^+, \phi_i^-$ .

Podmnožina těchto  $N$  jednočásticových funkcí vytváří podprostor Hilbertova prostoru. Uspořádáme-li  $\{\psi_i\}$  jako jako řádkovou matici

$$\Psi = (\psi_1, \psi_2, \dots, \psi_N), \quad (4.281)$$

je tento podprostor charakterizován projekčním operátorem

$$\hat{\rho} = |\Psi\rangle\langle\Psi|\Psi\rangle^{-1}\langle\Psi| = |\Psi\rangle\mathbf{d}^{-1}\langle\Psi|. \quad (4.282)$$

Matice  $\mathbf{d}$  je metrický tenzor s prvky  $d_{kl} = \langle\psi_k|\psi_l\rangle$ .

Snadno se lze přesvědčit, že  $\hat{\rho}$  splňuje vztahy

$$\begin{aligned} \hat{\rho}^2 &= \hat{\rho} = \hat{\rho}^+, \\ \text{Tr}\hat{\rho} &= N. \end{aligned} \quad (4.283)$$

Mějme nějakou lineární transformaci spinorbitalů

$$\psi'_k = \sum_l \psi_l \alpha_{lk} \quad (4.284)$$

neboli

$$\boldsymbol{\psi}' = \boldsymbol{\psi} \boldsymbol{\alpha}. \quad (4.285)$$

Pro Slaterův determinant konstruovaný z čárkovaných funkcí  $\{\psi'_i\}$  dostaneme s použitím pravidel o násobení determinantů

$$\begin{aligned} D' &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\psi'_k(\mathbf{x}_i)\} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\left\{\sum_l \psi_l(\mathbf{x}_i) \alpha_{lk}\right\} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{N!}} \det\{\psi_l(\mathbf{x}_i)\} \det\{\alpha_{lk}\} = D \det \boldsymbol{\alpha}. \end{aligned} \quad (4.286)$$

To znamená, že vlnová funkce se lineární transformací jednoelektronových funkcí nemění (až na konstantní faktor). Odtud plyne, že Slaterův determinant je charakterizován výlučně volbou podprostoru spinorbitalů, tj. projekčním operátorem  $\hat{\rho}$  v tomto podprostoru.

### ***Brillouinova věta***



**Léon Nicolas Brillouin (1889 – 1969)**

Vyjdeme z vlnové funkce ve tvaru jednoho Slaterova determinantu základního stavu  $\Psi = D_0$  sestaveného ze spinorbitalů  $\{\psi_i\}$ ,

$i = 1, 2, \dots, N$ . Pro tyto spinorbitaly, jež jsou zahrnuty v  $D_0$  používáme označení **obsazené spinorbitaly**. Vyhradíme si pro ně indexy  $i, j, k \leq N$ , kdežto pro zbylé orbitaly úplného systému (tzv. **virtuální spinorbitaly**) použijeme indexy  $a, b, c, \dots > N$ .

Variace spinorbitalů  $\{\psi_i\}$  dává

$$\psi_i \rightarrow \psi_i + \delta\psi_i = \psi_i + \sum_{p \neq i}^{\infty} c_{ip} \psi_p = \psi_i + \sum_{k \neq i}^N c_{ik} \psi_k + \sum_{a=N+1}^{\infty} c_{ia} \psi_a, \quad (4.287)$$

kde  $c_{ip}$  jsou členy malé prvního řádu. Pro variaci Slaterova determinantu z (4.287) dostáváme

$$\begin{aligned} D_0 \rightarrow D_0 + \delta D_0 &= D_0 + \sqrt{N!} \delta \left[ \hat{A} \prod_{j=1}^N \psi_j(j) \right] = \\ &= D_0 + \sqrt{N!} \hat{A} \sum_{i=1}^N \delta\psi_i(i) \prod_{j=1}^N \psi_j(j) = \\ &= D_0 + \sqrt{N!} \hat{A} \sum_{i=1}^N \sum_{p \neq i}^{\infty} c_{ip} \psi_p(p) \prod_{j=1}^N \psi_j(j) = \\ &= D_0 + \sqrt{N!} \hat{A} \sum_{i=1}^N \left( \sum_{k \neq i}^N c_{ik} \psi_k(i) + \sum_{a=N+1}^{\infty} c_{ia} \psi_a(i) \right) \prod_{j=1}^N \psi_j(j) = \\ &= D_0 + \sqrt{N!} \sum_{i=1}^N \left( \sum_{k \neq i}^N c_{ik} \hat{A} \psi_k(i) \prod_{j=1}^N \psi_j(j) + \sum_{a=N+1}^{\infty} c_{ia} \hat{A} \psi_a(i) \prod_{j=1}^N \psi_j(j) \right) = \\ &= \sum_{i \neq 1}^N \sum_{a=N+1}^{\infty} c_{ia} D_i^a, \end{aligned} \quad (4.288)$$

protože determinant  $\hat{A} \psi_k(i) \prod_{j=1}^N \psi_j(j)$  má dva řádky stejné a proto je

roven nule.

Zkonstruujeme funkcionál

$$E[D_0 + \delta D_0] = \frac{\langle D_0 + \delta D_0 | \hat{H} | D_0 + \delta D_0 \rangle}{\langle D_0 + \delta D_0 | D_0 + \delta D_0 \rangle}. \quad (4.289)$$

Ze Slaterových-Condonových pravidel plyne, že

$$\langle D_0 | D_i^a \rangle = \langle D_i^a | D_0 \rangle = 0, \quad i \leq N < a, \quad (4.290)$$

takže

$$E[D_0 + \delta D_0] = \frac{\langle D_0 | \hat{H} | D_0 \rangle + \sum_i^N \sum_a^\infty c_{ia}^* \langle D_i^a | \hat{H} | D_0 \rangle + \sum_i^N \sum_a^\infty c_{ia} \langle D_0 | \hat{H} | D_i^a \rangle}{\langle D_0 | D_0 \rangle} +$$

+ členy vyšších řádů.

(4.291)

Z variačního principu plyne

$$E = E[D_0 + \delta D_0] - E[D_0] = \frac{\sum_i^N \sum_{a=N+1}^\infty \left[ c_{ia} \langle D_0 | \hat{H} | D_i^a \rangle + c_{ia}^* \langle D_i^a | \hat{H} | D_0 \rangle \right]}{\langle D_0 | D_0 \rangle} = 0. \quad (4.292)$$

Protože členy v hranaté závorce jsou navzájem komplexně sdružené, bude (4.292) splněna, když

$$\langle D_i^a | \hat{H} | D_0 \rangle = 0, \quad i \leq N < a, \quad (4.293)$$

tj. maticové elementy mezi základním stavem a všemi monoexcitovanými konfiguracemi jsou rovny nule, což je vyjádřením tzv. **Brillouinovy věty**.

### *Hartreeho-Fockova aproximace*

V rámci *Hartreeho-Fockovy aproximace* hledáme vlnovou funkci základního stavu systému navzájem interagujících fermionů ve tvaru Slaterova determinantu

$$\Psi(\mathbf{r}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{r}_N, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \varphi_1(\mathbf{r}_1, \xi_1) & \varphi_1(\mathbf{r}_2, \xi_2) & \cdots & \varphi_1(\mathbf{r}_N, \xi_N) \\ \varphi_2(\mathbf{r}_1, \xi_1) & \varphi_2(\mathbf{r}_2, \xi_2) & \cdots & \varphi_2(\mathbf{r}_N, \xi_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \varphi_N(\mathbf{r}_1, \xi_1) & \varphi_N(\mathbf{r}_2, \xi_2) & \cdots & \varphi_N(\mathbf{r}_N, \xi_N) \end{vmatrix}, \quad (4.294)$$

kde  $\varphi_k$  jsou normalizované jednočásticové vlnové funkce a symboly  $\mathbf{r}_j$  resp.  $\xi_j$  označují polohový vektor a spinové číslo  $j$ -tého fermionu.

Orbitaly, z nichž je Slaterův determinant konstruován jsou určeny podmínkou, aby energie odpovídající vlnové funkci  $\Psi$  byla stacionární vzhledem k jejich malým variacím.

Předpokládejme, že báze jednoelektronových funkcí (spinorbitalů)  $\psi_i$  je ortonormální. Nechť hamiltonián systému má tvar

$$\hat{H} = \sum_i \hat{h}(i) + \sum_{i < j} \hat{v}(i, j), \quad (4.295)$$

kde

$$\hat{h}(i) = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta_i - \sum_a \frac{Z_a e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ia}} \quad (4.296)$$

je jednoelektronový operátor,

$$\hat{v}(i, j) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{ij}} \quad (4.297)$$

dvouelektronový operátor.

Definujme jednoelektronový operátor

$$\hat{F} = \hat{h}(1) + \sum_j \langle \psi_j(2) | \hat{v}'(1, 2) | \psi_j(2) \rangle \quad (4.298)$$

kde



$$\hat{v}'(1,2) = \hat{v}(1,2)(1 - \hat{P}_{12}) \quad (4.299)$$

a  $\hat{P}_{12}$  je operátor transpozice elektronů 1, 2.

Samoadjungovaný operátor  $\hat{F}$  se nazývá **Fockův operátor**. Přepišme jej s použitím Fockovy-Diracovy matice hustoty  $\rho$  na tvar

$$\hat{F} = \hat{h}(1) + \sum_j \langle \psi_j(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_j(2) \rangle = \hat{h}(1) + \int d\mathbf{x}_2 \hat{v}'(1,2) \rho(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}'_2) \Big|_{\mathbf{x}'_2 = \mathbf{x}_2} \quad (4.300)$$

operátor  $v'(1,2)$  zde působí pouze na nečárkované souřadnice a po provedení této operace, ale ještě před integrací, položíme  $\mathbf{x}'_2 = \mathbf{x}_2$ .

Vyjádríme-li podle definice  $\hat{v}'$ , dostáváme

$$\hat{F} = \hat{h}(1) + \int \hat{v}(1,2) \rho(\mathbf{x}_2, \mathbf{x}_2) d\mathbf{x}_2 \Big|_{\mathbf{x}'_2 = \mathbf{x}_2} - \int \hat{v}(1,2) \rho(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \hat{P}_{12} d\mathbf{x}_2 \Big|_{\mathbf{x}'_2 = \mathbf{x}_2}, \quad (4.301)$$

kde druhý člen napravo je tzv. **coulombický potenciál**, třetí tzv. **výměnný potenciál**.

### *Hartreeho-Fockovy rovnice*

Rozepíšeme-li maticový element ( 4.293 ), máme podle ( 4.301 ), popř. podle Slater – Condonových pravidel

$$\langle D_i^a | \hat{H} | D_0 \rangle = \langle \psi_a | \hat{h} | \psi_i \rangle + \sum_j \left[ \langle \psi_a \psi_j | \hat{v} | \psi_i \psi_j \rangle - \langle \psi_a \psi_j | \hat{v} | \psi_j \psi_i \rangle \right] = 0. \quad (4.302)$$

S použitím Fockova operátoru ( 4.298 ) můžeme rovnici ( 4.302 ) přepsat do tvaru

$$\langle \psi_a | \hat{F} | \psi_i \rangle = 0, \quad i = 1, 2, \dots, N, \quad a = N + 1, N + 2, \dots. \quad (4.303)$$

Rovnice ( 4.303 ) je splněna právě tehdy, platí-li

$$\hat{F}\psi_i = \sum_{j=1}^N \varepsilon_{ji} \psi_j, \quad i = 1, 2, \dots, N,$$

( 4.304 )

kde  $\varepsilon_{ji}$  jsou rozvojové koeficienty.

Rovnice ( 4.304 ) se nazývají **Hartree-Fockovy rovnice** a představují charakteristický problém operátoru  $\hat{F}$ . V maticovém vyjádření mají tvar

$$\hat{F}\Psi = \Psi\varepsilon.$$

( 4.305 )

Diagonální element  $\varepsilon_k = \varepsilon_{ij} \delta_{ij}$  odpovídá jednoelektronové energii spinorbitalu  $\psi_k$ .

Soustava ( 4.305 ) představuje systém tolika simultánních integrodiferenciálních rovnic, kolik je v systému elektronů. Protože efektivní hamiltonián  $\hat{F}$  je konstruován pomocí jednoelektronových funkcí  $\{\psi_i\}$ , jedná se o metodu **selfkonzistentního pole**. Vychází se při ní z nějakého předem daného průměrného pole, řeší se charakteristický problém efektivního hamiltoniánu  $\hat{F}$ , tj HF-rovnice, a ze získaných vlastních funkcí se konstruuje nový efektivní hamiltonián. Vlastní funkce se tedy používají k výpočtu elektronové distribuce a odpovídajícího průměrného pole. V dalším kroku se pak vychází z nového průměrného pole a proces se opakuje tak dlouho, dokud není dosaženo selfkonzistence, tj. dokud opakování cyklu nevede ke změně v průměrném poli menší, než předem zvolená odchylka.

Jako ilustraci uveďme tvar Hartreeho-Fockových rovnic pro soustavu elektronů pohybujících se v poli jádra pevně umístěného v počátku souřadnic. Pro jednoduchost předpokládejme mezi nabitými částicemi pouze elektrostatickou interakci. Pak hledané rovnice nabývají tvaru

$$\begin{aligned}
& \left[ -\frac{\hbar}{2M} \Delta - \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{Ze^2}{|\mathbf{r}|} \right] \varphi_k(\mathbf{r}, \xi) + \\
& + \sum_{j \neq k} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left[ \sum_{\eta=-1/2}^{1/2} \varphi_j(\mathbf{r}', \eta) \varphi_j(\mathbf{r}', \eta) \right] \varphi_k(\mathbf{r}, \xi) - \\
& - \sum_{j \neq k} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \left[ \sum_{\eta=-1/2}^{1/2} \varphi_j(\mathbf{r}', \eta) \varphi_k(\mathbf{r}', \eta) \right] \varphi_k(\mathbf{r}, \xi) = \epsilon_k \varphi_k(\mathbf{r}, \xi)
\end{aligned}
\tag{4.306}$$

kde  $k = 1, \dots, N$ .

Svou strukturou připomínají uvedené rovnice jednočásticové stacionární Schrödingerovy rovnice pro jednoelektronové vlnové funkce  $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ . Vskutku, první člen na levé straně odpovídá operátoru kinetické energie  $K$ -tého elektronu, druhý člen interakční energii tohoto elektronu s jádrem atomu a člen třetí interakční energii  $K$ -tého elektronu se zbývajících elektrony, rozloženými v prostoru s pravděpodobnostmi odpovídající vlnovým funkcím  $\varphi_1, \dots, \varphi_N$ . Jen čtvrtému členu levé strany Hartreeho-Fockových rovnic pro víceelektronový atom není možno dát podobnou názornou interpretaci, především proto, že nemá žádný klasický protějšek. Tento člen je zodpovědný za čistě kvantové výměnné efekty, které souvisejí s nerozlišitelností elektronů. Jeho zanedbáním získáme formálně jednodušší, avšak méně přesné *rovnice Hartreeho*.

Každá z uvedených Hartreeho-Fockových rovnic odpovídá stacionární Schrödingerově rovnici pro jediný elektron, který se pohybuje v poli jádra a současně i v jakémsi středním poli reprezentujícím jeho interakce s ostatními elektrony. Protože je toto pole ovlivňováno i samotnými jednoelektronovými vlnovými funkcemi, hovoříme o něm obvykle jako o *poli self-konzistentním*.

Např. v případě atomu hélia máme dva elektrony, které popíšeme vlnovými funkcemi

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \varphi(\mathbf{r})|\uparrow\rangle, \\ \psi_2 &= \varphi(\mathbf{r})|\downarrow\rangle.\end{aligned}\tag{4.307}$$

Pro funkci  $\varphi(\mathbf{r})$  máme rovnici

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{2e^2}{r}\right)\varphi(\mathbf{r}) + e^2 \int \frac{|\varphi(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} d^3 r' \varphi(\mathbf{r}) = \varepsilon \varphi(\mathbf{r}).\tag{4.308}$$

Výměnný člen odpadá, protože existuje pouze mezi elektrony se shodně orientovaným spinem. Po iteraci k selfkonzistenci je základní stav dán jako determinant z funkcí (4.307):

$$\Psi(1,2) = \frac{\varphi(1)\varphi(2)}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\uparrow\rangle_2 |\downarrow\rangle_1).\tag{4.309}$$

V případě atomu lithia máme tři elektrony. V nejjednodušší verzi mají dva z nich stejnou prostorovou část a opačné spiny

$$\begin{aligned}\psi_1 &= \varphi_1(\mathbf{r})|\uparrow\rangle_1, \\ \psi_2 &= \varphi_1(\mathbf{r})|\downarrow\rangle_2, \\ \psi_3 &= \varphi_2(\mathbf{r})|\uparrow\rangle_3.\end{aligned}\tag{4.310}$$

Hartreeho-Fockovy rovnice pak mají tvar

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{2e^2}{r}\right)\varphi_1(\mathbf{r}) + e^2 \sum_{j=1}^2 \int \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r' \varphi_1(\mathbf{r}) -$$

$$- e^2 \int \frac{\varphi_2^*(\mathbf{r}')\varphi_1(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r' \varphi_2(\mathbf{r}) = \varepsilon_1 \varphi_1(\mathbf{r}),$$
( 4.311 )

$$\left(\frac{p^2}{2m} - \frac{2e^2}{r}\right)\varphi_2(\mathbf{r}) + 2e^2 \int \frac{|\varphi_1(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r' \varphi_2(\mathbf{r}) -$$

$$- e^2 \int \frac{\varphi_1^*(\mathbf{r}')\varphi_2(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3r' \varphi_1(\mathbf{r}) = \varepsilon_2 \varphi_2(\mathbf{r}).$$

V případě, že prostorová část elektronu se spinem  $|\uparrow\rangle$  je různá od elektronu se spinem  $|\downarrow\rangle$ , dostáváme tzv. **rozšířenou Hartreeho-Fockovu aproximaci**:

$$\psi_1 = \varphi_1(\mathbf{r})|\uparrow\rangle_1,$$

$$\psi_2 = \varphi_2(\mathbf{r})|\downarrow\rangle_2,$$

$$\psi_3 = \varphi_3(\mathbf{r})|\uparrow\rangle_3.$$
( 4.312 )

A Hartree-Fockovy rovnice nabývají tvaru

$$\begin{aligned}
& \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{2e^2}{r} \right) \varphi_1(\mathbf{r}) + e^2 \sum_{j=2,3} \int \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3 r' \varphi_1(\mathbf{r}) - \\
& \quad - e^2 \int \frac{\varphi_3^*(\mathbf{r}') \varphi_1(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3 r' \varphi_3(\mathbf{r}) = \varepsilon_1 \varphi_1(\mathbf{r}), \\
& \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{2e^2}{r} \right) \varphi_2(\mathbf{r}) + e^2 \sum_{j=1,3} \int \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3 r' \varphi_2(\mathbf{r}) = \varepsilon_2 \varphi_2(\mathbf{r}), \\
& \left( \frac{p^2}{2m} - \frac{2e^2}{r} \right) \varphi_3(\mathbf{r}) + e^2 \sum_{j=1,2} \int \frac{|\varphi_j(\mathbf{r}')|^2}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3 r' \varphi_3(\mathbf{r}) - \\
& \quad - e^2 \int \frac{\varphi_1^*(\mathbf{r}') \varphi_3(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} d^3 r' \varphi_1(\mathbf{r}) = \varepsilon_3 \varphi_3(\mathbf{r}). \tag{4.313}
\end{aligned}$$

Parametry  $\varepsilon_k$ , vyskytující se na pravých stranách Hartreeho-Fockových rovnic, hrají pak zřejmě roli **vlastních jednoelektronových energií**. Upozorňujeme však, že jejich součet není roven celkové energii studovaného atomu v základním stavu. V tomto součtu jsou totiž příspěvky odpovídající vzájemné interakci libovolné dvojice elektronů  $i$  a  $j$  nesprávně započteny dvakrát - jednou v jednočásticové energii  $\varepsilon_i$  a podruhé v energii  $\varepsilon_j$ , jak si podrobně ukážeme v následujícím odstavci.

Energii základního stavu atomu počítáme pomocí vztahu

$$E(\psi_0) = \langle \psi_0 | \hat{H} | \psi_0 \rangle, \tag{4.314}$$

v něm  $\psi_0$  je Slaterův determinant sestavený z normalizovaných jednočásticových vlnových funkcí, které jsme získali řešením odpovídajících Hartreeho-Fockových rovnic.



Douglas Rayner Hartree (1897 – 1958)



Vladimir Aleksandrovič Fock (1898 – 1974)

Genialita metody Hartreeho a Focka, jak vidno spočívá v technickém řešení – postupně se řeší problém pro jednotlivé elektrony, které se pohybují ve zprůměrovaném potenciálu ostatních elektronů.

Samotné řešení Hartreeho-Fockových rovnic je zpravidla velmi obtížnou matematickou úlohou, u které se obvykle neobejdeme bez dalších aproximací a pokročilých numerických metod. Protože se Hartreeho-Fockova metoda stala základním nástrojem teoretického studia elektronové struktury atomů a molekul, byla jí v minulosti věnována značná pozornost.

### *Koopmansova věta*

Jak jsme viděli v předchozím odstavci,  $N$ -elektronová energie v HF-metodě se definuje jako

$$E^{HF} = \langle D | \hat{H} | D \rangle. \quad (4.315)$$



Tjalling Charles Koopmans (1910 – 1985)

Z rovnic

$$\begin{aligned}
 \varepsilon_i &= \langle \psi_i(1) | \hat{F} | \psi_i(1) \rangle = \\
 &= \langle \psi_i(1) | \hat{h}(1) | \psi_i(1) \rangle + \sum_j^N \langle \psi_i(1) \psi_j(2) | \hat{v}'(1,2) | \psi_i(1) \psi_j(2) \rangle \equiv \\
 &\equiv \langle \psi_i | \hat{h} | \psi_i \rangle + \sum_j^N \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}' | \psi_i \psi_j \rangle, \\
 \langle D | \hat{H} | D \rangle &= \sum_i^N \langle \psi_i | \hat{h} | \psi_i \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^N \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}' | \psi_i \psi_j \rangle = \\
 &= \sum_i^N \langle \psi_i | \hat{h} | \psi_i \rangle + \sum_{i<j}^N \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}' | \psi_i \psi_j \rangle,
 \end{aligned} \tag{4.316}$$

vypočteme

$$E^{HF} = \frac{1}{2} \sum_i^N \left( \varepsilon_i + \langle \psi_i | \hat{h} | \psi_i \rangle \right). \tag{4.317}$$

HF-energie není tedy pouhým součtem orbitálních energií.

Spočtěme nyní rozdíl energií systému s  $N$  elektrony a systému s  $N - 1$  elektrony, který vznikl odtržením elektronu ze spinorbitalu  $\psi_i$

přičemž nedošlo k reorganizaci zbylých  $N - 1$  spinorbitalů. S použitím vztahů

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_i \psi_i | \hat{v}' | \psi_i \psi_i \rangle &= 0, \\
 \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}' | \psi_i \psi_j \rangle &= \langle \psi_i \psi_j | \hat{v}' | \psi_j \psi_i \rangle,
 \end{aligned} \tag{4.318}$$

odvodíme



$$\begin{aligned}
E_{n-1}^{HF} &= \sum_{i \neq k}^N \langle \psi_i | \hat{h} | \psi_i \rangle + \sum_{i < j; i, j \neq k}^N \sum_{i < j}^N \langle \psi_i \psi_j | \hat{v} | \psi_i \psi_j \rangle = \\
&= \sum_i^N \langle \psi_i | \hat{h} | \psi_i \rangle + \sum_{i < j}^N \sum_{i < j}^N \langle \psi_i \psi_j | \hat{v} | \psi_i \psi_j \rangle - \\
&\quad - \langle \psi_k | \hat{h} | \psi_k \rangle - \sum_j^N \langle \psi_k \psi_j | \hat{v} | \psi_k \psi_j \rangle,
\end{aligned} \tag{4.319}$$

a tedy

$$E_{N-1}^{HF} - E_N^{HF} = -\varepsilon_k. \tag{4.320}$$

Energie, potřebná k odtržení elektronu z  $k$ -tého spinorbitálu ( $k$ -tý ionizační potenciál) je tedy rovna záporně vzaté orbitální energii, což je znění tzv. **Koopmansovy věty**.

### **Metoda MO-LCAO**

HF-rovnice představují komplikovaný integrodiferenciální problém a jejich přímočaré řešení je i pro malé molekuly velmi obtížné. Proto byly vytvořeny přibližné metody řešení HF-rovnic, ve kterých vyjadřujeme každý spinorbital  $\psi(\mathbf{r}, \zeta)$  či jeho prostorovou část  $\phi(\mathbf{r})$  (molekulový orbital) pomocí nějaké konečné báze  $\{\chi_\mu\}$  jednoelektronových funkcí, jež nemusí být obecně ortogonální

$$\psi_k = \sum_{\mu=1}^M c_{\mu k} \chi_\mu, \quad M \geq N. \tag{4.321}$$

Široce rozšířená verze této metody nese název Molecular Orbitals by Linear Combination of Atomic Orbitals (MO-LCAO).

Metoda staví na předpokladu, že molekulové orbitály je možno uspokojivě aproximovat sčítáním a odčítáním nijak nepozměněných atomových vlnových funkcí.

V tomto schématu je každý MO konstruován z jistého počtu funkcí báze  $\{\chi_\mu\}$  reprezentovaných atomovými orbitály (AO), centrovaných na různých jádrech.

Pro danou bázi AO vede optimalizace MO k určení rozvojových koeficientů  $\{c_{\mu k}\}$ .

Zapišme ( 4.321 ) v maticovém tvaru

$$\Psi = \mathbf{c}\chi, \quad ( 4.322 )$$

kde  $\mathbf{c} = c_{\mu k}$  je pravoúhlá matice typu  $(M,N)$ . Definujme **překryvový integrál**

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_a \chi_b dV, \quad ( 4.323 )$$

neboli, v maticovém vyjádření

$$\mathbf{S} = \langle \chi | \chi \rangle. \quad ( 4.324 )$$

Protože  $\hat{F}$  je samoadjungovaný operátor, můžeme bez újmy na obecnosti předpokládat, že  $\{\psi_k\}$  jsou ortonormální funkce, odkud plyne podmínka

$$\langle \Psi | \Psi \rangle = \mathbf{c}^+ \mathbf{S} \mathbf{c} = \mathbf{1}. \quad ( 4.325 )$$

S použitím ( 4.322 ) můžeme vyjádřit Fockovu-Diracovu matici hustoty  $\rho(1,2)$  ve tvaru

$$\rho(1,2) = |\Psi(1)\rangle \langle \Psi(2)| = |\chi(1)\rangle \mathbf{c} \mathbf{c}^+ \langle \chi(2)|. \quad ( 4.326 )$$

Zavedeme-li matici  $\mathbf{R}$  předpisem

$$\mathbf{R} = \mathbf{c} \mathbf{c}^+, \quad ( 4.327 )$$

můžeme ( 4.326 ) přepsat ve tvaru

$$\begin{aligned} \rho(1,2) &= |\chi(1)\rangle \mathbf{R} \langle \chi(2)| = \sum_{\mu,\nu=1}^N \chi_{\mu}(\mathbf{x}_1) R_{\mu\nu} \chi_{\nu}^*(\mathbf{x}_2) = \\ &= \sum_{\mu,\nu=1}^N \chi_{\mu}(\mathbf{x}_1) \sum_{k=1}^N (c_{\mu k} c_{\nu k}^*) \chi_{\nu}^*(\mathbf{x}_2). \end{aligned} \quad (4.328)$$

Snadno se přesvědčíme, že platí

$$\begin{aligned} \mathbf{RSR} &= \mathbf{cc}^+ \mathbf{Scc}^+ = \mathbf{c1c}^+ = \mathbf{R}, \\ \mathbf{R} &= (\mathbf{cc}^+)^+ = \mathbf{R}, \\ \text{Tr}(\mathbf{SR}) &= \text{Tr}(\mathbf{Scc}^+) = \text{Tr}(\mathbf{c}^+ \mathbf{Sc}) = \text{Tr} \mathbf{1}_N = N. \end{aligned} \quad (4.329)$$

Prvky matice koeficientů  $\mathbf{c} = (c_{\mu k})$  v rozvoji (4.321), resp. (4.322) nalezneme standardní variační metodou, která vede na systém *Roothaanových-Hallových rovnic*

$$\sum_{\nu=1}^M c_{\nu} (F_{\mu\nu} - \varepsilon S_{\mu\nu}) = \sum_{\nu=1}^M c_{\nu} (\langle \chi_{\mu} | \hat{F} | \chi_{\nu} \rangle - \varepsilon S_{\mu\nu}) = 0, \quad \mu = 1, 2, \dots, M, \quad (4.330)$$

který má netriviální řešení, je-li sekulární determinant roven nule

$$\det(F_{\mu\nu} - \varepsilon S_{\mu\nu}) = 0. \quad (4.331)$$

Dostáváme obecně  $M$  řešení, z nichž  $N$  odpovídá nejnižším jednoelektronovým energiím  $\varepsilon_k$  a zbylých  $(M - N)$  řešení lze připsat excitovaným orbitálním energiím.



Clemens C.J. Roothaan (1918)



George Garfield Hall (1925)

Vyjádříme nyní  $\hat{F}$  v bázi  $\{\chi_\mu\}$ :

$$\begin{aligned}
 \hat{F}(1) &= \hat{h}(1) + \sum_j \langle \psi_j(2) | \hat{v}'(1,2) | \psi_j(2) \rangle = \\
 &= \hat{h}(1) + \sum_j \sum_\kappa \sum_\lambda c_{\kappa j}^* c_{\lambda j} \langle \chi_\kappa(2) | \hat{v}'(1,2) | \chi_\lambda(2) \rangle = \\
 &= \hat{h}(1) + \sum_\kappa \sum_\lambda R_{\lambda\kappa} \langle \chi_\kappa(2) | \hat{v}'(1,2) | \chi_\lambda(2) \rangle.
 \end{aligned} \tag{4.332}$$

Pro maticové elementy HF hamiltoniánu v bázi  $\{\chi_\mu\}$  dostáváme

$$\begin{aligned}
 F_{\mu\nu} &= \langle \chi_\mu(1) | \hat{F}(1) | \chi_\nu(1) \rangle = \\
 &= \langle \chi_\mu | \hat{h} | \chi_\nu \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\lambda,\kappa} R_{\lambda\kappa} \left[ \left\langle \chi_\mu \chi_\kappa \left| \frac{e^2}{r_{1,2}} \right| \chi_\nu \chi_\lambda \right\rangle - \left\langle \chi_\mu \chi_\kappa \left| \frac{e^2}{r_{1,2}} \right| \chi_\lambda \chi_\nu \right\rangle \right] = \\
 &= \langle \chi_\mu | \hat{h} | \chi_\nu \rangle + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_{\lambda,\kappa} R_{\lambda\kappa} \left[ \int \chi_\mu^*(1) \chi_\kappa^*(2) \frac{e^2}{r_{1,2}} \chi_\nu(1) \chi_\lambda(2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 - \right. \\
 &\quad \left. - \int \chi_\mu^*(1) \chi_\kappa^*(2) \frac{e^2}{r_{1,2}} \chi_\lambda(1) \chi_\nu(2) d\mathbf{x}_1 d\mathbf{x}_2 \right].
 \end{aligned}$$

(4.333)

## Molekulární iont $\text{H}_2^+$

Jako příklad užití metody si spočtáme molekulový iont  $\text{H}_2^+$ . Jedná se o nejjednodušší molekulu tvořenou dvěma protony, které k sobě poutá jediný společný elektron.

Jestliže vzdálenost elektronu od protonu  $a$  je rovna  $r_a$  a od protonu  $b$  rovna  $r_b$  (obr. 4.2), je potenciální energie elektronu

$$V = -\left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_a} + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_b} \right) \quad (4.334)$$

a Schrödingerova rovnice zní

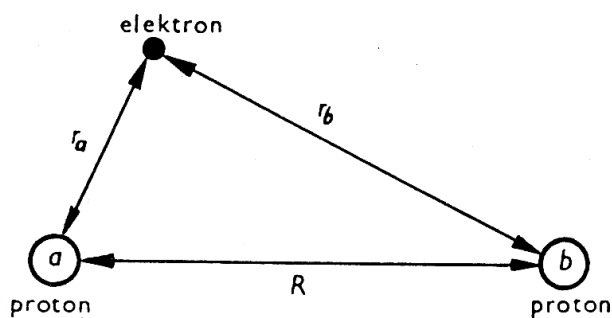
$$\nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}[E - V]\psi = \nabla^2\psi + \frac{2m}{\hbar^2}\left[ E + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0}\left(\frac{1}{r_a} + \frac{1}{r_b}\right) \right]\psi. \quad (4.335)$$

Abychom mohli řešit tuto rovnici, musíme použít tzv. eliptických souřadnic

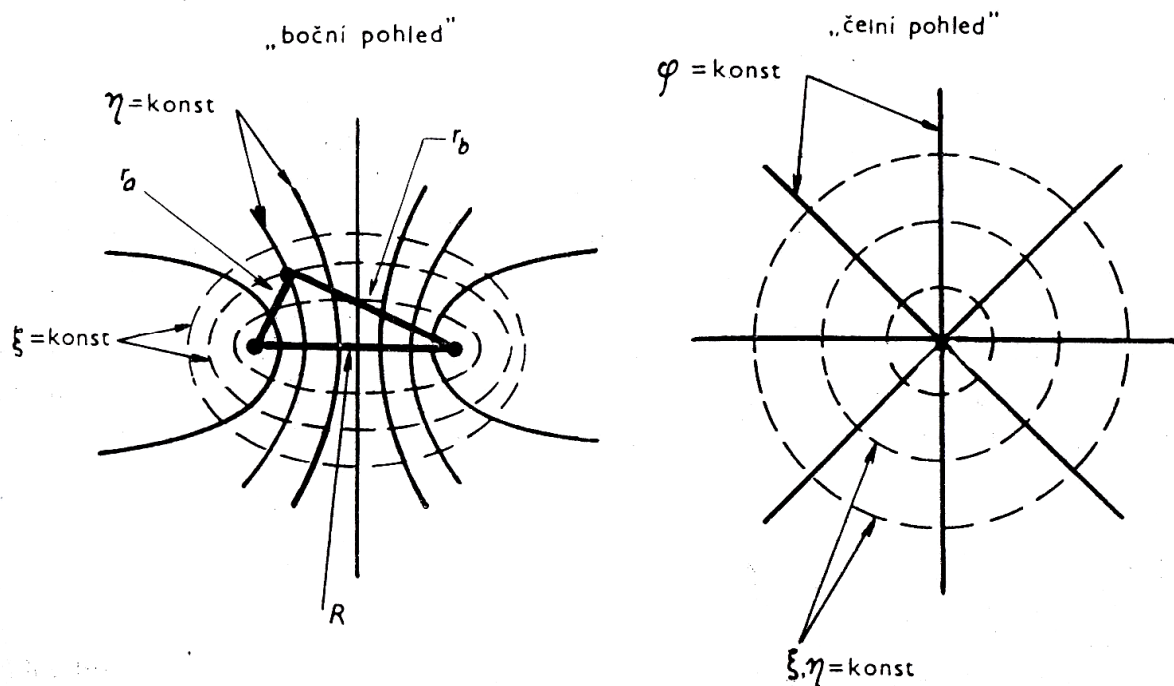
$$\zeta = \frac{r_a + r_b}{R}, \quad \eta = \frac{r_a - r_b}{R}, \quad \varphi. \quad (4.336)$$

Plochy  $\zeta = \text{konst.}$  jsou elipsoidy s ohnisky v místech polohy protonů, plochy  $\eta = \text{konst.}$  jsou dvoulisté hyperboloidy s týmiž ohnisky a konečně plochy  $\varphi = \text{konst.}$  jsou roviny obsahující osu molekuly (viz obr 4.2).

Obr. 4.2



Obr. 12.3 Systém dvou protonů a elektronu.



Podobně, jako když jsme řešili atom vodíku ve sférických souřadnicích, lze Schrödingerovu rovnici pro molekulu  $H_2^+$  vyjádřenou v eliptických souřadnicích separovat na tři samostatné rovnice, z nichž každá obsahuje jen jednu souřadnici.

Exaktní řešení rovnice ( 4.335 ) je sice možné, jedná se nicméně o zdlouhavý a komplikovaný výpočet. Zároveň se jedná o nejsložitější kvantový systém, který je ještě možno analyticky vyřešit. Např. pro molekulu  $H_2$  už analytické řešení neexistuje a je třeba se uchýlit k přibližným postupům.

V tomto odstavci si demonstrujeme metodu MO-LCAO na příkladu přibližného řešení rovnice ( 4.335 ). Atomové orbitály, které je třeba kombinovat pro získání orbitalů  $\psi$  iontu  $H_2^+$ , jsou vodíkové vlnové

funkce  $\chi_a$  a  $\chi_b$  základního stavu (tj. stavu  $1s$ ), jež popisují atomy vodíku v bodech  $a$  a  $b$ . Existují dvě možné kombinace, kterak vytvořit  $\psi$ , a to symetrická

$$\psi_S = c_S (\chi_a + \chi_b) \quad (4.337)$$

a antisymetrická

$$\psi_A = c_A (\chi_a - \chi_b) . \quad (4.338)$$

V těchto vztazích jsou  $c_S$  a  $c_A$  normovací konstanty, jejichž hodnoty musí splňovat podmínky existence elektronu v prostoru

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_S|^2 dV = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_A|^2 dV = 1. \quad (4.339)$$

Pro symetrickou kombinaci dostáváme

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_S|^2 dV &= c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\chi_a + \chi_b|^2 dV = c_S^2 \left( \int_{-\infty}^{\infty} |\chi_a|^2 dV + \int_{-\infty}^{\infty} |\chi_b|^2 dV + 2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi_a \chi_b dV \right), \\ \int_{-\infty}^{\infty} |\psi_A|^2 dV &= c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} |\chi_a - \chi_b|^2 dV = c_A^2 \left( \int_{-\infty}^{\infty} |\chi_a|^2 dV + \int_{-\infty}^{\infty} |\chi_b|^2 dV - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi_a \chi_b dV \right). \end{aligned} \quad (4.340)$$

Jelikož  $\psi_a$  a  $\psi_b$  jsou vodíkové funkce stavu  $1s$ , je

$$\begin{aligned} \chi_a &= \chi_a^*, \\ \chi_b &= \chi_b^*, \end{aligned} \quad (4.341)$$

což nás opravňuje psát poslední člen ( 4.340 ) uvedeným způsobem. Navíc jsou  $\chi_a$  a  $\chi_b$  již normované, takže

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\chi_a|^2 dV = \int_{-\infty}^{\infty} |\chi_b|^2 dV = 1 \quad (4.342)$$

a

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_S|^2 dV = c_S^2 \left( 2 + 2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi_a \chi_b dV \right) = c_S^2 (2 + 2S) = 1, \quad (4.343)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_A|^2 dV = c_A^2 \left( 2 - 2 \int_{-\infty}^{\infty} \chi_a \chi_b dV \right) = c_A^2 (2 - 2S) = 1,$$

kde

$$S = \int_{-\infty}^{\infty} \chi_a \chi_b dV \quad (4.344)$$

je překryvový integrál. Máme tedy

$$c_S^2 = \frac{1}{2(1+S)}, \quad (4.345)$$

$$c_A^2 = \frac{1}{2(1-S)}.$$

Výpočet překryvového integrálu  $S$  se provádí v eliptických souřadnicích a vede k výsledku

$$S = \left( 1 + R + \frac{1}{3} R^2 \right) e^{-R}, \quad (4.346)$$

kde  $R$  je vzdálenost mezi protony  $a$  a  $b$  v jednotkách Bohrova poloměru  $a_0$ . Pro  $R \approx 2$  u iontu  $\text{H}_2^+$  vychází  $S \approx 0,6$ . Stojí za povšimnutí, že pro veliká  $R$  jde  $S$  k nule, což odpovídá zanedbatelnému překryvu, naopak pro  $R$  jdoucí k nule se  $S$  blíží jedné, což odpovídá splynutí obou protonů a vytvoření spíše atomového, než molekulového systému.



Nyní, když jsme našli přibližný tvar molekulových orbitalů  $\psi_S$  a  $\psi_A$  můžeme přikročit k určení příslušné elektronové energie  $E_S$  a  $E_A$  symetrického a antisymetrického stavu. Pro zjednodušení symboliky se používá tzv. **atomových jednotek**, kde délku vyjadřujeme v jednotkách Bohrova poloměru  $a_0$  a energii v jednotkách Ry (1 rydberg se rovná energii základního stavu vodíkového atomu 13,6 eV). Schrödingerova rovnice ( 4.335 ) se tím redukuje na tvar

$$\nabla^2\psi + \left[ E + \left( \frac{2}{r_a} + \frac{2}{r_b} \right) \right] \psi = 0, \quad (4.347)$$

který lze dále upravit do výhodnější podoby

$$-\nabla^2\psi - \left( \frac{2}{r_a} + \frac{2}{r_b} \right) \psi = E\psi. \quad (4.348)$$

Rovnici ( 4.348 ) nejprve vynásobíme hermitovskými sruženou funkcí  $\psi^*$  a poté ji integrujeme přes celý prostor. Máme

$$-\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \left[ \nabla^2\psi + \left( \frac{2}{r_a} + \frac{2}{r_b} \right) \psi \right] dV = \langle \psi^* | E | \psi \rangle = E \int_{-\infty}^{\infty} |\psi|^2 dV = E, \quad (4.349)$$

což je hledaný výraz pro energii elektronu v molekule  $H_2^+$ . Pro symetrický a antisymetrický stav odtud dostáváme

$$E_S = -c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\chi_a^* + \chi_b^*) \left[ \nabla^2\chi_a + \nabla^2\chi_b + \frac{2}{r_a}\chi_a + \frac{2}{r_a}\chi_b + \frac{2}{r_b}\chi_a + \frac{2}{r_b}\chi_b \right] dV,$$

$$E_A = -c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\chi_a^* - \chi_b^*) \left[ \nabla^2\chi_a - \nabla^2\chi_b + \frac{2}{r_a}\chi_a - \frac{2}{r_a}\chi_b + \frac{2}{r_b}\chi_a - \frac{2}{r_b}\chi_b \right] dV. \quad (4.350)$$

Jelikož energie základního stavu atomu vodíku  $\varepsilon$  je vlastní hodnotou každé z vlastních funkcí  $\chi_a$  a  $\chi_b$ , lze psát

$$\begin{aligned}
 -\nabla^2 \chi_a - \frac{2}{r_a} \chi_a &= \varepsilon \chi_a = -\chi_a, \\
 -\nabla^2 \chi_b - \frac{2}{r_b} \chi_b &= \varepsilon \chi_b = -\chi_b.
 \end{aligned}
 \tag{4.351}$$

neboť podle definice je  $\varepsilon = -1$  Ry.

Vztahy ( 4.350 ) pak přejdou na tvar

$$\begin{aligned}
 E_S &= -c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\chi_a^* + \chi_b^*) \left[ \left( 1 + \frac{2}{r_b} \right) \chi_a + \left( 1 + \frac{2}{r_a} \right) \chi_b \right] dV, \\
 E_A &= -c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\chi_a^* - \chi_b^*) \left[ \left( 1 - \frac{2}{r_b} \right) \chi_a - \left( 1 - \frac{2}{r_a} \right) \chi_b \right] dV.
 \end{aligned}
 \tag{4.352}$$

Rozepsáním jednotlivých členů máme

$$\begin{aligned}
 E_S &= -c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\chi_a^* + \chi_b^*) dV - 2c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_b} |\chi_a|^2 dV - 2c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_a} |\chi_b|^2 dV - \\
 &\quad - 2c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_b} \chi_a \chi_b^* dV - 2c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_a} \chi_a^* \chi_b dV, \\
 E_A &= -c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} (\chi_a^* - \chi_b^*) dV + 2c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_b} |\chi_a|^2 dV + 2c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_a} |\chi_b|^2 dV + \\
 &\quad + 2c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_b} \chi_a \chi_b^* dV + 2c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{2}{r_a} \chi_a^* \chi_b dV.
 \end{aligned}
 \tag{4.353}$$

Vzhledem ke ( 4.337 ) a ( 4.339 ) je první člen každého z výrazů roven -1 a přispívá tedy energií, která se rovná energii základního stavu izolovaného atomu vodíku. V této situaci je třeba energii interpretovat, jako by se skládala z potenciální energie elektronového oblaku kolem protonu  $a$  v poli tohoto protonu, dále z potenciální energie elektronového oblaku kolem protonu  $b$  v poli tohoto protonu a z kinetické energie elektronu.

Další dva členy ve ( 4.353 ) se nazývají **coulombické integrály**. První představuje potenciální energii elektronového oblaku kolem protonu  $a$  v poli protonu  $b$  a druhý potenciální energii elektronového oblaku kolem protonu  $b$  v poli protonu  $a$ .

Poslední dva členy ve ( 4.353 ) se nazývají **výměnné integrály** a na rozdíl od předchozích tří členů se energie reprezentované těmito členy nedají přímo interpretovat na základě klasických pojmů – představují čistě kvantověmechanický jev.

Dva coulombovské integrály ve ( 4.353 ) jsou si rovny, neboť protony  $a$  a  $b$  lze zaměnit bez jakýchkoliv následků a oba integrály mají hodnotu

$$-2c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\chi_a|^2}{r_b} dV = -2c_S^2 \left[ -\frac{1}{R} + \left( \frac{1}{R} + 1 \right) e^{-2R} \right], \quad (4.354)$$

$$2c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{|\chi_a|^2}{r_b} dV = 2c_A^2 \left[ -\frac{1}{R} + \left( \frac{1}{R} + 1 \right) e^{-2R} \right],$$

Výměnné integrály jsou rovněž stejné a každý z nich má hodnotu

$$-2c_S^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_a^* \chi_b}{r_b} dV = -2c_S^2 \left[ (1+R) e^{-R} \right], \quad (4.355)$$

$$2c_A^2 \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\chi_a^* \chi_b}{r_b} dV = 2c_A^2 \left[ (1+R) e^{-R} \right].$$

Označíme-li

$$C = -2 \left[ -\frac{1}{R} + \left( \frac{1}{R} + 1 \right) e^{-2R} \right], \quad (4.356)$$

$$A = -2 \left[ (1+R) e^{-R} \right],$$

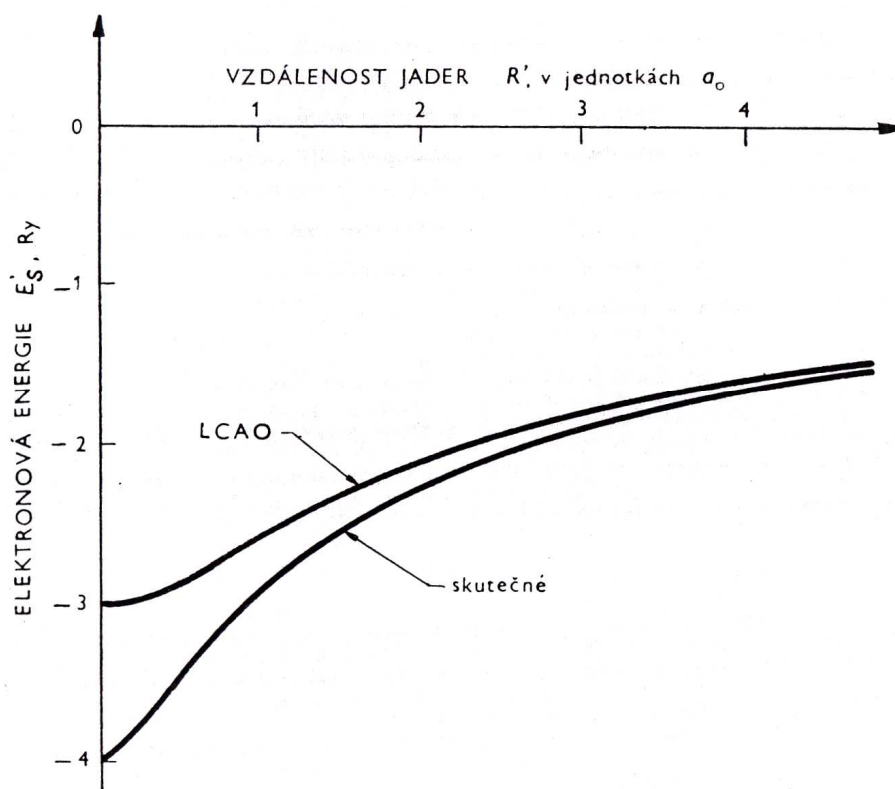
můžeme vztahy zapsat v kompaktním tvaru

$$E_S = -1 + 2c_S^2(C + A) = \frac{C + A}{1 + S} - 1, \quad (4.357)$$

$$E_A = -1 + 2c_A^2(C - A) = \frac{C - A}{1 - S} - 1,$$

kde každá z veličin  $C, A, S$  je funkcí  $R$ . Pro  $R \rightarrow \infty$  je  $E_S \rightarrow -1$  což je vskutku energie izolovaného atomu vodíku. Pro  $R \rightarrow 0$  vychází  $E_S \rightarrow -3$ , což je o něco více, než energie iontu  $\text{He}^+$ , která vychází okolo  $-4$ . Na příliš krátkých vzdálenostech tedy metoda MO-LCAO ztrácí přesnost (viz obr. 4.3).

Obr. 4.3



Ke stanovení celkové energie molekuly  $\text{H}_2^+$  musíme k elektronové energii  $E$  přičíst ještě vzájemnou potenciální energii protonů

$$V_p = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}. \text{ Vyjádřena v atomových jednotkách, vychází tato energie}$$

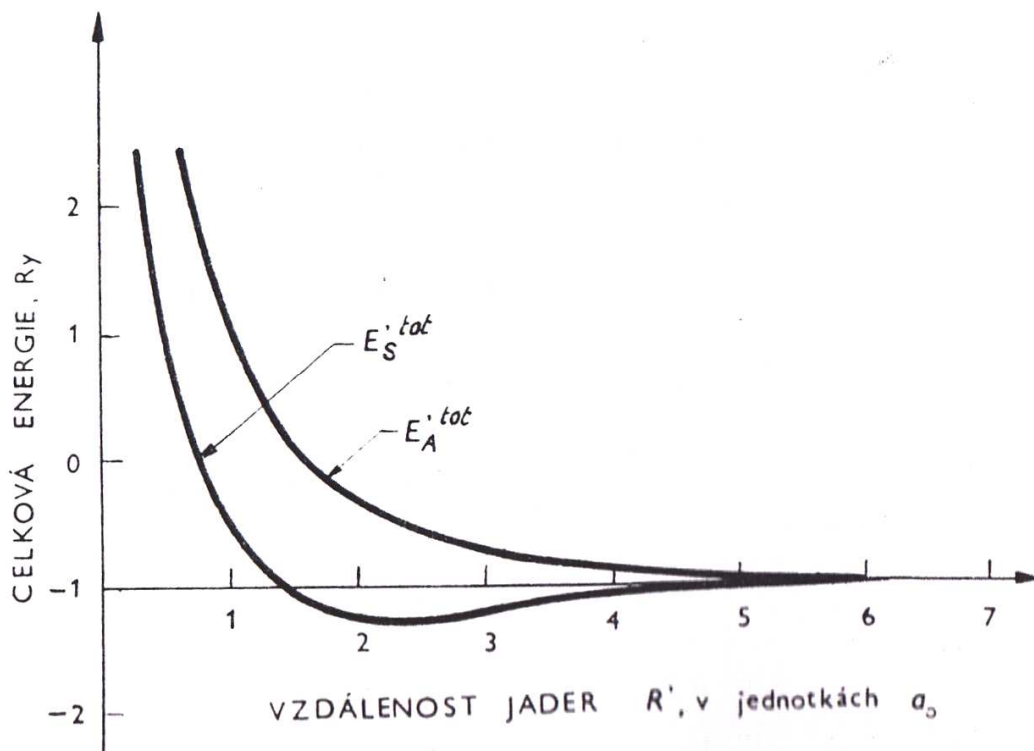
$$V_p = \frac{2}{R}. \quad (4.358)$$

Proto je celková energie molekuly rovna

$$E_{S,A}^{tot} = \frac{C \pm A}{1 \pm S} + \frac{2}{R} - 1. \quad (4.359)$$

Vztah ( 4.359 ) je vyneseno do grafu na obr. 4.4. Křivka pro symetrický stav dává vazebnou energii přibližně 0,2 Ry (2,65 eV) při rovnovážné vzdálenosti protonů cca. 2, zatímco křivka pro antisymetrický stav nemá žádné minimum.

Obr. 4.4



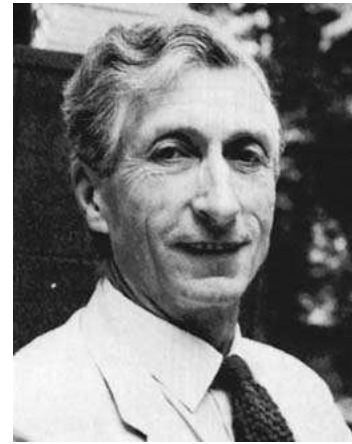
### *Molekula H<sub>2</sub>*

Co se týče molekuly H<sub>2</sub>, nejpodrobnější výpočty variační metodou provedli William Coolidge a Charles Coulson. Hamiltonián pro elektronové termy vodíkové molekuly nabývá tvaru

$$\hat{H}(R) = \left[ -\frac{\hbar}{2m} \sum_{i=1}^2 \Delta_i + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{|r_1 - r_2|} - \frac{1}{|r_1 - r_A|} - \frac{1}{|r_2 - r_A|} - \frac{1}{|r_1 - r_B|} - \frac{1}{|r_2 - r_B|} \right) \right] \quad (4.360)$$



William David Coolidge (1873 – 1975)



Charles Alfred Coulson (1910 – 1974)

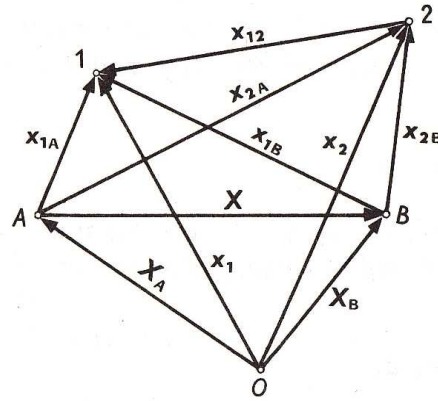
Analytické řešení Schrödingerovy rovnice pro takovýto hamiltonián neexistuje, k nalezení nejnižších elektronových termů však můžeme užít variační metodu. Pro pevně zvolené vektory  $\mathbf{X}_A$ ,  $\mathbf{X}_B$  dostáváme bezčasovou Schrödingerovu rovnici

$$\hat{H} \left| \psi_{\mathbf{X}_A \mathbf{X}_B}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \right\rangle = E(R) \left| \psi_{\mathbf{X}_A \mathbf{X}_B}(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2) \right\rangle \quad (4.361)$$

pro soustavu dvou elektronů ve vnějším elektrostatickém poli vyvolaném dvěma nekonečně těžkými protony fixovanými v bodech  $\mathbf{X}_A$ ,  $\mathbf{X}_B$ , kde jednotlivé termy vodíkové molekuly jsou definovány jako

$$U(R) = E(R) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (4.362)$$

Obr. 4.5



Hamiltonián ( 4.361 ) přepíšeme do tvaru

$$\hat{H} = H_0(1A) + \hat{H}_0(2B) + \hat{H}_I(12) + \hat{H}_I(1B) + \hat{H}_I(2A), \quad (4.363)$$

v němž jednotlivé členy mají následující význam:

$$\hat{H}_0(1A) \equiv \frac{\hat{\mathbf{P}}_1^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_1 - \mathbf{X}_A|} \quad (4.364)$$

je hamiltonián vodíkového atomu tvořeného elektronem 1 a protonem A fixovaným v bodě  $\mathbf{X}_A$ . Analogický význam pro elektron 2 a proton B fixovaný v bodě  $\mathbf{X}_B$  má operátor  $\hat{H}_0(2B)$ .

$$\hat{H}_I(12) \equiv \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \quad (4.365)$$

popisuje elektrostatickou interakci mezi elektrony.

$$\hat{H}_I(1B) \equiv -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 |\mathbf{x}_1 - \mathbf{X}_B|} \quad (4.366)$$

popisuje interakci elektronu 1 s protonem B fixovaným v bodě  $\mathbf{X}_B$  a  $\hat{H}_I(2A)$  má analogický význam pro elektron 2 a proton A. Při

dostatečně velkých vzdálenostech  $R$  může elektron 1 utvořit s protonem  $A$  vodíkový atom, který prakticky neinteraguje s vodíkovým atomem tvořeným elektronem 2 a protonem  $B$ . Jinými slovy řečeno, pro velká  $R$  existují taková řešení rovnice ( 4.361 ), pro která poslední tři členy rozkladu ( 4.363 ) představují malou poruchu. Zanedbáme-li ji úplně, redukují se tato řešení na direktní součin vektoru popisujícího stacionární stav vodíkového atomu a tvořeného elektronem 1 a protonem  $A$  s vektorem popisujícím stacionární stav vodíkového atomu tvořeného elektronem 2 a protonem  $B$ . Přitom energie  $E(R)$  bude minimální, pokud oba atomy budou v základním stavu. V nultém přiblížení je tedy zmíněné řešení dáno normalizovaným vektorem

$$|\Phi_{AB}\rangle \equiv |\varphi_A\rangle|\varphi_B\rangle, \quad (4.367)$$

kde

$$\langle \mathbf{x} | \varphi_A \rangle \equiv \psi_{100}(\mathbf{x} - \mathbf{X}_A) \equiv \varphi_A(\mathbf{x}), \quad (4.368)$$

kde

$$\psi_{100}(\mathbf{x}) \equiv \frac{1}{\sqrt{\pi a_0^3}} \exp\left(-\frac{r}{a_0}\right) \quad (4.369)$$

je vlnová funkce základního stavu atomu vodíku. Ket  $|\varphi_B\rangle$  je definován zcela analogicky. Stejně dobře ovšem mohou být vodíkové atomy vytvořeny elektronem 1 s protonem  $B$  a elektronem 2 s protonem  $A$ . Odpovídající stav je v nulté aproximaci popsáv vektorem

$$|\Phi_{AB}\rangle \equiv |\varphi_A\rangle|\varphi_B\rangle. \quad (4.370)$$

V tomto případě je výhodné zapsat hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H} = H_0(1B) + \hat{H}_0(2A) + \hat{H}_I(12) + \hat{H}_I(1A) + \hat{H}_I(2B), \quad (4.371)$$



v němž poslední tři členy představují poruchu, kterou v nulté aproximaci zanedbáváme.

Na základě těchto úvah jsme oprávněni očekávat rozumné výsledky variačního výpočtu nejnižších elektronových termů i tehdy, když třídu konkurujících vektorů omezíme na všechny lineární kombinace vektorů  $|\Phi_{AB}\rangle$  a  $|\Phi_{BA}\rangle$ . V této aproximaci jsou nejnižší dvě hodnoty  $E(R)$  dány vlastními hodnotami submatice hamiltoniánu odpovídající dvourozměrnému podprostoru napnutému na vektory  $|\Phi_{AB}\rangle$  a  $|\Phi_{BA}\rangle$ . K diagonalizaci této submatice si stačí uvědomit, že hamiltonián je invariantní vůči vzájemné záměně elektronů. To znamená, že

$$\left( \langle \Phi_{AB} | + \langle \Phi_{BA} | \right) \hat{H} \left( | \Phi_{AB} \rangle - | \Phi_{BA} \rangle \right) = 0. \quad (4.372)$$

Elektrostatické pole vyvolané dvěma bodovými náboji je invariantní vůči libovolnému potočení kolem spojnice obou nábojů. Pro libovolný systém, umístěný v takovém poli je projekce celkového impulsmomentu na osu symetrie integrálem pohybu. V případě dvouatomové molekuly můžeme řešení rovnice (4.360) vybrat vždy tak, aby bylo vlastní funkcí operátoru projekce celkového impulsmomentu všech elektronů na spojnici jader. Díky spinové nezávislosti můžeme toto řešení zvolit tak, aby bylo zároveň vlastní funkcí celkového spinu  $S$  všech elektronů a jeho projekce na osu molekuly. Toto řešení pak je také vlastní funkcí projekce celkového orbitálního momentu na osu molekuly. Absolutní hodnota této projekce se nazývá  $\Lambda$ . Termy s  $\Lambda = 0, 1, 2, \dots$  se označují velkými řeckými písmeny  $\Sigma, \Pi, \Delta, \Phi \dots$  v analogii se spektroskopickou symbolikou  $S, P, D, F \dots$  pro  $L = 0, 1, 2, \dots$ . Celkový spin elektronů  $S$  je určován multiplicitou  $2S + 1$ , kterou píšeme ve formě levého horního indexu. Např.  ${}^3\Sigma$  představuje term s  $\Lambda = 0, S = 1$ .

Pole vyvolané dvěma bodovými náboji je také invariantní vzhledem k zrcadlení v libovolné rovině obsahující tyto náboje. Tato operace převádí řešení rovnice (4.360) odpovídající dané projekci orbitálního momentu elektronů na osu molekuly v řešení odpovídající opačné hodnotě této projekce. Odtud vidíme, že termy  $\Lambda \neq 0$  jsou nejméně dvojnásobně degenerované. Řešení  $\Lambda = 0$  lze vždy volit tak, že při

zmíněném zrcadlení zůstanou nezměněna, nebo pouze změní znaménko. Odpovídající termy značíme  $\Sigma^+$ ,  $\Sigma^-$ .

Pole vyvolané dvěma stejnými náboji má navíc uprostřed jejich spojnice střed symetrie. V případě molekuly sestávající ze dvou stejných atomů je tedy rovnice ( 4.360 ) invariantní vůči inverzi souřadnic všech elektronů vzhledem ke středu spojnice obou jader. Termy odpovídající řešením rovnice ( 4.360 ), která při této inverzi zůstávají nezměněna, resp. mění znaménko, se nazývají **sudé**, resp. **liché** a značíme je pravým dolním indexem  $g$ , resp.  $u$ .

Hledanými vlastními hodnotami jsou tedy

$$\begin{aligned} E_g(R) &= \langle \Phi_g | \hat{H} | \Phi_g \rangle, \\ E_u(R) &= \langle \Phi_u | \hat{H} | \Phi_u \rangle, \end{aligned} \quad (4.373)$$

kde ortonormální vektory

$$|\Phi_{gu}\rangle \equiv \frac{|\Phi_{AB}\rangle \pm |\Phi_{BA}\rangle}{\| |\Phi_{AB}\rangle \pm |\Phi_{BA}\rangle \|} \quad (4.374)$$

představují v uvažovaném prostoru testovacích funkcí nejlepší aproximaci vektorů odpovídajících elektronových termů  $U_g(R)$  a  $U_u(R)$ .

$$\begin{aligned} U_g(R) &= 2E_1 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{1}{1+S^2}(P+Q), \\ U_u(R) &= 2E_1 + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} + \frac{1}{1-S^2}(P-Q), \end{aligned} \quad (4.375)$$

kde

$$E_1 \equiv \frac{\alpha^2 mc^2}{2} \quad (4.376)$$

je energie základního stavu atomu vodíku,

$$\begin{aligned}
 P &\equiv \left\langle \Phi_{AB} \left| \hat{H}_I(1,2) + \hat{H}_I(1,B) + \hat{H}_I(2,A) \right| \Phi_{AB} \right\rangle, \\
 Q &\equiv \left\langle \Phi_{AB} \left| \hat{H}_I(1,2) + \hat{H}_I(1,B) + \hat{H}_I(2,A) \right| \Phi_{AB} \right\rangle, \\
 S &\equiv \langle \varphi_A | \varphi_B \rangle = \int \varphi_A(x) \varphi_B(x) d^3 \mathbf{x}.
 \end{aligned} \tag{4.377}$$

Veličiny definované (4.377) závisejí všechny na vzdálenosti  $R$ . Veličina  $S$  je nám dobře známý překryvový integrál, který je mírou překrytí orbitalů atomů, z nichž jeden má jádro v místě  $\mathbf{X}_A$  a druhý v místě  $\mathbf{X}_B$ .

Veličiny  $P$  a  $Q$  můžeme v  $X$ -reprezentaci vyjádřit jako

$$\begin{aligned}
 P &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} \rho_A(\mathbf{x}_1) \rho_B(\mathbf{x}_2) d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 - \\
 &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}_B|} \rho_A(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x} - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}_A|} \rho_B(\mathbf{x}) d^3 \mathbf{x}, \\
 Q &= \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 \varphi_A(\mathbf{x}_1) \varphi_B(\mathbf{x}_1) \varphi_A(\mathbf{x}_2) \varphi_B(\mathbf{x}_2) \frac{1}{|\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2|} - \\
 &\quad - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} S \int d^3 \mathbf{x} \varphi_A(\mathbf{x}) \varphi_B(\mathbf{x}) \left( \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}_A|} + \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}_B|} \right),
 \end{aligned} \tag{4.378}$$

kde

$$\begin{aligned}
 \rho_A(\mathbf{x}) &\equiv \varphi_A^2(\mathbf{x}), \\
 \rho_B(\mathbf{x}_2) &\equiv \varphi_B^2(\mathbf{x}),
 \end{aligned} \tag{4.379}$$

udává rozdělení hustoty pravděpodobnosti polohy elektronu v základním stavu vodíkového atomu s jádrem fixovaným v místě  $\mathbf{X}_A$ , resp.  $\mathbf{X}_B$ . Vidíme, že výraz

$$P + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \quad (4.380)$$

Ize interpretovat jako energii elektrostatické interakce mezi dvěma vodíkovými atomy v základním stavu, neboli nám dobře známý Coulombický integrál.

Konečně příspěvek  $Q$  představuje maticový element interakční energie mezi stavem, ve kterém jeden atom je tvořen elektronem 1 s protonem  $A$  a druhý elektronem 2 s protonem  $B$  a stavem, v němž si elektrony 1 a 2 navzájem vymění role. Jedná se tedy o výměnný integrál.

Všechny 3 integrály lze spočítat v uzavřeném tvaru a jim odpovídající průběh termů  $U_g$  a  $U_u$  je znázorněn na obr. 4.6.

O jaké termy se jedná? Snadno se přesvědčíme, že vlnové funkce  $\Phi_g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ ,  $\Phi_u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$ , popisující vektory (4.375) v  $X$ -reprezentaci, závisí pouze na vzdálenostech  $r_{1A}$ ,  $r_{1B}$ ,  $r_{2A}$ ,  $r_{2B}$  a jako takové jsou invariantní jak vůči libovolnému potočení kolem spojnice jader, tak vůči zrcadlení v rovině obsahující tuto spojnici. V obou případech tedy jde o term  $\Sigma^+$ .

Při inverzi souřadnic elektronů vzhledem ke středu spojnice jader přechází

$$\begin{aligned} r_{1A} &\rightleftharpoons r_{1B}, \\ r_{2A} &\rightleftharpoons r_{2B}. \end{aligned} \quad (4.381)$$

Vůči této záměně je funkce  $\Phi_g(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  invariantní a  $\Phi_u(\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2)$  při ní změni znaménko. Tedy  $|\Phi_g\rangle$  přísluší k  $\Sigma_g^+$  a  $|\Phi_u\rangle$  k  $\Sigma_g^-$ .

Vektor  $|\Phi_g\rangle$  je symetrický vzhledem k vzájemné záměně elektronů.

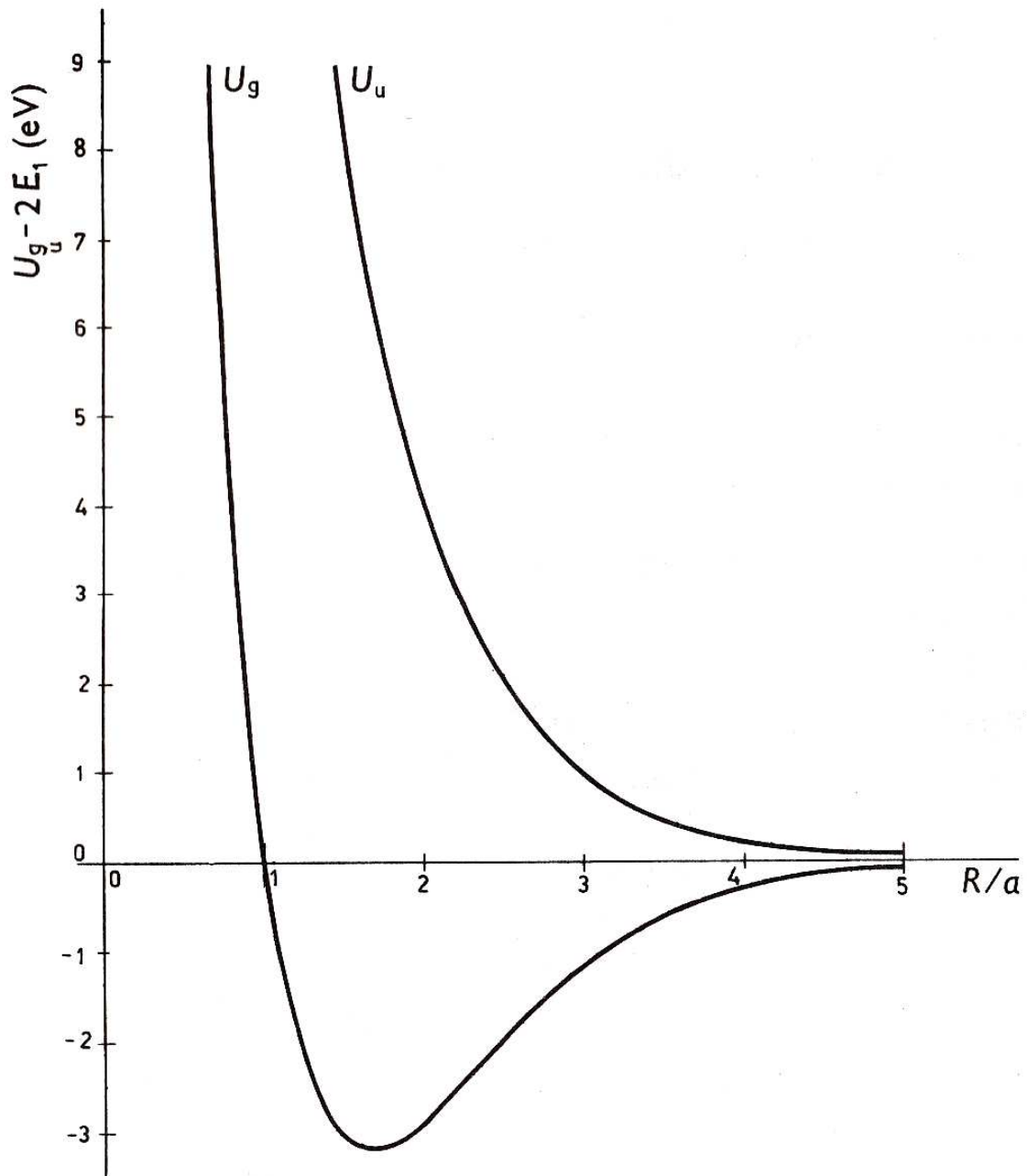
Protože se jedná o dva stejné fermiony, musí být jejich spinový stav antisymetrickým, tj. celkový spin elektronů  $S = 0$ . Tedy  $U_g$  odpovídá termu  $^1\Sigma_g^+$ . Obdobně z antisymetrie  $|\Phi_u\rangle$  plyne  $S = 1$ , a tedy  $U_u$

odpovídá termu  $^3\Sigma_u^+$ . Z obr. 4.6 je zřejmé, že ve stavu  $^3\Sigma_u^+$  se dva atomy vodíku od sebe odpuzují na každé vzdálenosti (přesnější výpočet ukazuje, že na dostatečně velkých vzdálenostech dochází i zde ke slabé přitažlivé mezimolekulové interakci, jak ukážeme ihned

v následující kapitole, na vytvoření vázaného systému však tato síla nestačí). Naproti tomu, ve stavu  $^1\Sigma_g^+$  jsou vzdálené atomy k sobě přitahovány tak silně, že dojde k vytvoření molekuly. Přitom střední vzdálenost  $R_0$  mezi jádry je dána polohou minima termu  $U_g(R)$

$$U_g(R) = \min U_g(R). \quad (4.382)$$

Obr. 4.6



Znalost funkce  $U_g(R)$  umožňuje určit i další experimentálně měřitelné veličiny. Tak např. pro disociační energii dostáváme

$$D = 2E_1 - U_g(R_0) - \frac{\hbar\Omega}{2}, \quad (4.383)$$

kde

$$\Omega \approx \left( \frac{2}{m_p} \frac{d^2}{dR^2} U_g(R_0) \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.384)$$

udává frekvenci kmitů jader,  $m_p$  je hmotnost protonu.

Nejpodstatnějším pro pochopení vzniku kovalentní vazby je fakt, že oba atomy mohou sdílet každý z elektronů. Závislost střední energie elektronů na vzdálenosti jader ve stavu, v němž každé jádro zachytilo na svoji orbitu svůj elektron je dána výrazem

$$E_{AB}(R) = \langle \Phi_{AB} | \hat{H} | \Phi_{AB} \rangle = 2E_1 + P. \quad (4.385)$$

V tomto stavu by se tedy jádra nacházela pod vlivem potenciální energie

$$U_{AB}(R) = E_{AB}(R) + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R}. \quad (4.386)$$

Ze symetrie hamiltoniánu víme, že stacionární stavy můžeme vždy zvolit tak, že jsou buď sudé ( $\Phi_g$ ) nebo liché ( $\Phi_u$ ). Ze samotné definice plyne, že pro stav  $|\Phi_u\rangle$  je nulová pravděpodobnost toho, že oba elektrony budou nalezeny uprostřed spojnice jader. Díky tomu bude zřejmě tato pravděpodobnost i v okolí tohoto místa menší, než v případě stavu  $|\Phi_{AB}\rangle$ . Z podobných důvodů je pro stav  $|\Phi_g\rangle$  pravděpodobnost nalezení obou elektronů v okolí spojnice jader

zřejmě větší, než pro stav  $|\Phi_{AB}\rangle$ . To ale znamená, že ve stavu  $|\Phi_g\rangle$  je střední hustota elektronů

$$\bar{N}_g(\mathbf{x}) = 2 \int |\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' | \Phi_g \rangle|^2 d^3 \mathbf{x}' \quad (4.387)$$

mezi jádry podstatně větší, než ve stavu  $|\Phi_u\rangle$ :

$$\bar{N}_u(\mathbf{x}) = 2 \int |\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' | \Phi_u \rangle|^2 d^3 \mathbf{x}'. \quad (4.388)$$

V naší aproximaci je

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' | \Phi_g \rangle = \frac{\varphi_A(\mathbf{x})\varphi_B(\mathbf{x}') + \varphi_B(\mathbf{x})\varphi_A(\mathbf{x}')}{\sqrt{2(1+S^2)}}, \quad (4.389)$$

$$\langle \mathbf{x}, \mathbf{x}' | \Phi_u \rangle = \frac{\varphi_A(\mathbf{x})\varphi_B(\mathbf{x}') - \varphi_B(\mathbf{x})\varphi_A(\mathbf{x}')}{\sqrt{2(1-S^2)}},$$

a z formuleí ( 4.387 ), ( 4.388 ) dostaneme

$$\bar{N}_{gu}(\mathbf{x}) = \frac{\varphi_A^2(\mathbf{x}) + \varphi_B^2(\mathbf{x}) \pm 2S\varphi_A(\mathbf{x})\varphi_B(\mathbf{x})}{1+S^2}. \quad (4.390)$$

Z těchto rozdělí je vskutku zřejmé, že střední hodnota počtu elektronů v oblastech, v nichž jejich přítomnost vede k vzájemnému přitahování jader je ve stavu  $|\Phi_g\rangle$  podstatně větší, než ve stavu  $|\Phi_u\rangle$ .

Nepřekvapuje proto, že term  $^1\Sigma_g^+$  vede k vázanému stavu a vzniku

molekuly  $\text{H}_2$ , kdežto term  $^3\Sigma_u^+$  nikoliv. Díky nerozlišitelnosti

elektronů můžeme rovněž tvrdit, že k vytvoření molekuly dochází ve stavu, který je antisymetrickým vůči vzájemné záměně spinů

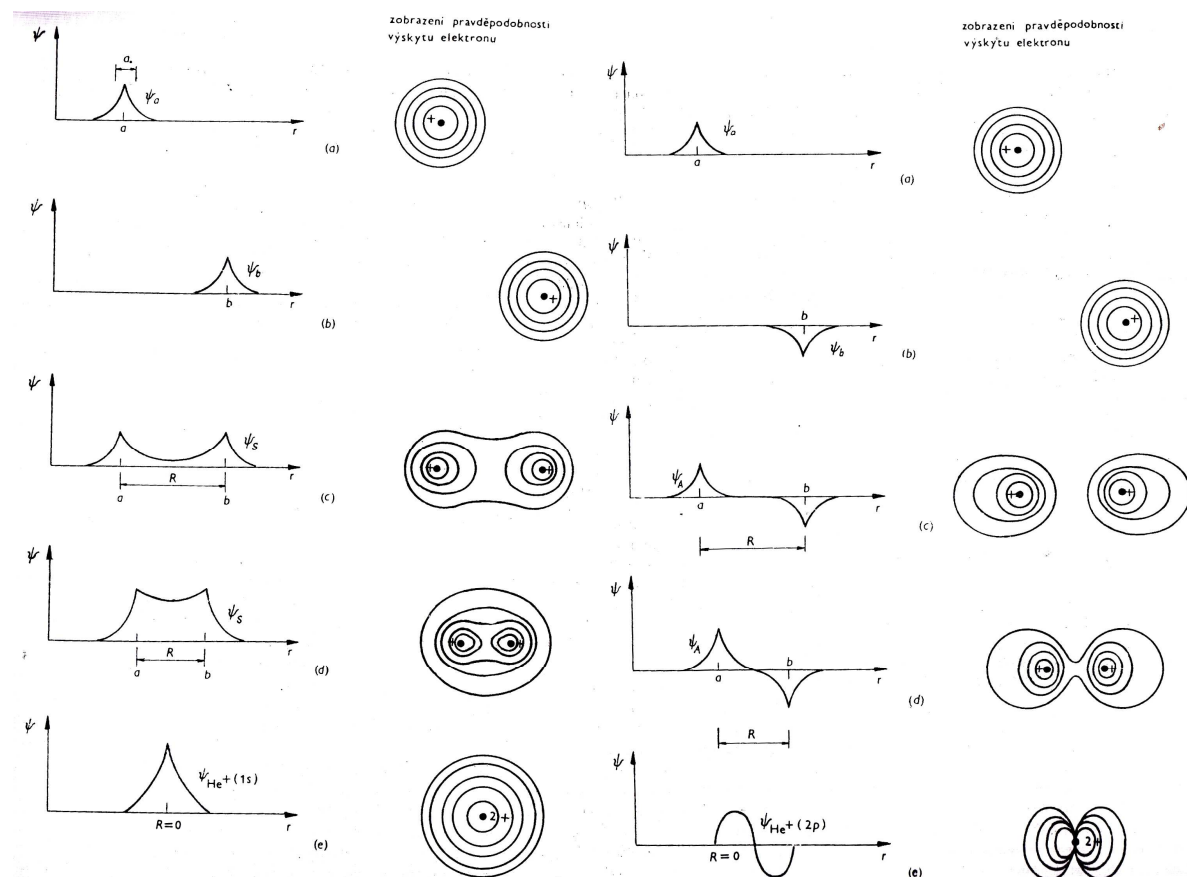
elektronů. Dříve nalezené výsledky pak můžeme přeformulovat následovně:

Dva vodíkové atomy v základním stavu, vzdálené navzájem o více než  $R_0$ , se k sobě přitahují, pokud se spiny jejich elektronů navzájem

kompenzují, tj. pokud je celkový spin těchto dvou elektronů roven nule.

Rozdílnost křivek pro  $U_g(R)$ ,  $U_u(R)$  je důsledkem Pauliho principu, který brání dvěma elektronům v témže kvantovém stavu, aby měly stejné spiny a vede tak k převládajícímu odpuzování tehdy, jsou-li spiny paralelní. Molekula  $H_2$  obsahuje 2 elektrony, které mohou být dle Pauliho principu popsány stejnou vlnovou funkcí  $\psi_{nlm_l}$  za předpokladu, že jejich spiny jsou antiparalelní. Se dvěma elektrony přispívajícími k vazbě lze předpokládat, že molekula  $H_2$  bude zhruba dvakrát stabilnější, než molekula  $H_2^+$ , tzn. s energií zhruba 5,3 eV. Vzhledem k elektrostatickému odpuzování mezi oběma elektrony, které v molekule  $H_2^+$  zcela chybí, je skutečná vazebná energie snížena na 4,7 eV. Z téhož důvodu je meziprotonová vzdálenost u  $H_2$  poněkud větší, než bychom dostali s použitím neupravených vlnových funkcí  $H_2^+$ , a činí 0,74 Å.

Obr. 4.7





Úplná vlnová funkce  $\Psi(1,2)$  systému dvou elektronů je součinem prostorové vlnové funkce  $\psi(1,2)$ , jež popisuje souřadnice elektronů a spinové vlnové funkce  $\eta(1,2)$ , která popisuje orientace elektronových spinů. Pauliho princip požaduje, aby úplná vlnová funkce

$$\Psi(1,2) = \psi(1,2)\eta(1,2) \quad (4.391)$$

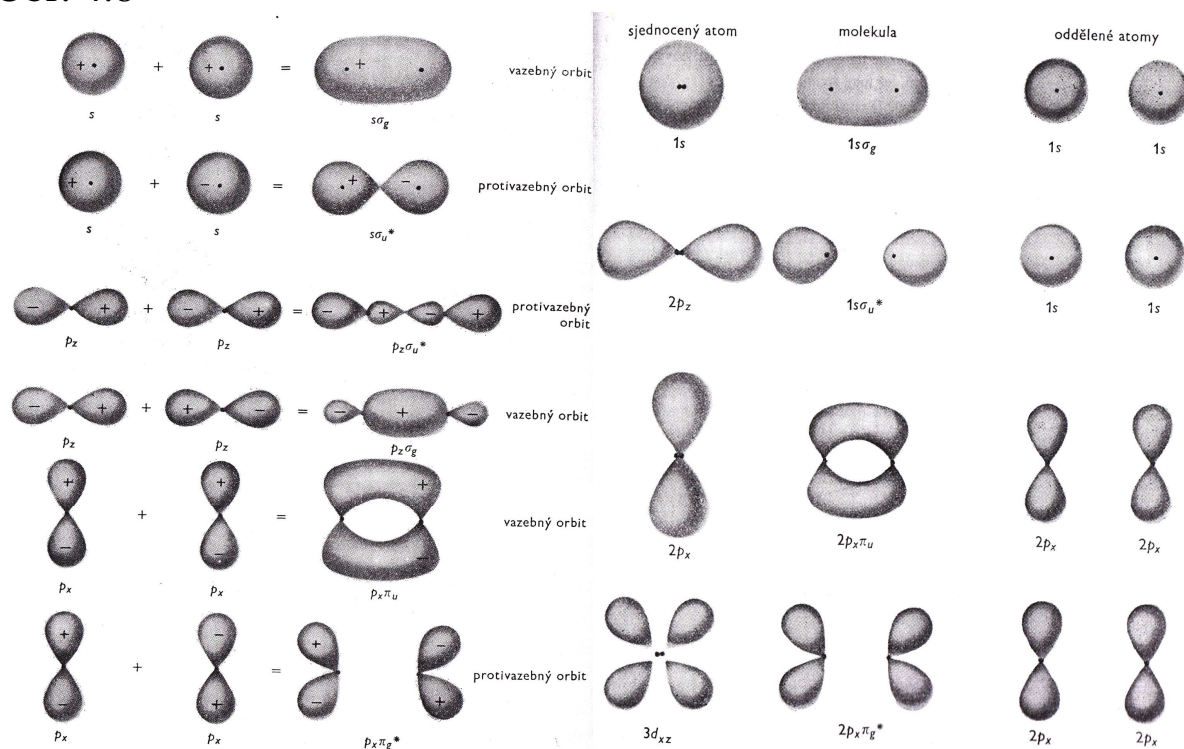
byla antisymetrická vůči záměně jak souřadnic, tak spinů. Úplná antisymetrická vlnová funkce  $\Psi_A$  může vzniknout buď kombinací symetrické prostorové vlnové funkce  $\psi_S$  (molekulového orbitalu) a antisymetrické spinové funkce  $\eta_A$ , nebo kombinací antisymetrické prostorové vlnové funkce  $\psi_A$  a symetrické spinové funkce  $\eta_S$ . Přípustné jsou tedy jen funkce

$$\begin{aligned} \Psi &= \psi_S \eta_A, \\ \Psi &= \psi_A \eta_S. \end{aligned} \quad (4.392)$$

Jsou-li spiny obou elektronů paralelní a spinová funkce je tak symetrická (nemění znaménko při záměně elektronů), musí být prostorová část vlnové funkce těchto dvou elektronů antisymetrická. Jsou-li naopak spiny obou elektronů antiparalelní, je spinová funkce antisymetrická (při záměně elektronů mění znaménko) a prostorová část vlnové funkce těchto elektronů pak musí být symetrická. Symbolicky to lze vyjádřit vztahy

$$\begin{aligned} \psi_{\uparrow\uparrow} &= \psi_A, \\ \psi_{\uparrow\downarrow} &= \psi_S. \end{aligned} \quad (4.393)$$

Obr. 4.8



### *Slabé mezimolekulové interakce – Van der Waalsovy síly*

Uvažujme dva vodíkové atomy v základním stavu vzdálené od sebe mnohem více, než je Bohrovův poloměr. Na těchto vzdálenostech bude první oprava k vlastní hodnotě hamiltoniánu již velmi malá, díky čemuž se variační metoda redukuje na první přiblížení poruchové teorie. Na vyšetřovaných vzdálenostech je první oprava k vlastní hodnotě již velmi malá, díky čemuž se může stát dominantní oprava druhého řádu.



**Johannes Diderik van der Waals (1837 – 1923)**

Hamiltonián soustavy je roven

$$\hat{H} = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left( \frac{1}{R} + \frac{1}{r_{12}} - \frac{1}{r_{1B}} - \frac{1}{r_{2A}} \right) = \hat{H}_A + \hat{H}_B + \hat{W}(\mathbf{x}_{1A}, \mathbf{x}_{2B}, \mathbf{X}), \quad (4.394)$$

kde  $\hat{H}_A$  resp.  $\hat{H}_B$  jsou hamiltoniány atomu vodíku v místě  $\mathbf{X}_A$  resp.  $\mathbf{X}_B$ . pro  $R \gg r_A, r_B$  můžeme vzdálenosti v poruše  $W$  rozvést

v Taylorovu řadu podle  $\frac{r_A}{R}, \frac{r_B}{R}$ . Její první nenulový člen dává

$$\hat{W}(R) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left[ (\mathbf{x}_{1A} \mathbf{x}_{2B}) - \frac{3}{R^2} (\mathbf{x}_{1A} \mathbf{X})(\mathbf{x}_{2B} \mathbf{X}) \right]. \quad (4.395)$$

Neporušený hamiltonián

$$\hat{H}_0 = H_A + H_B \quad (4.396)$$

má základní stav

$$\Psi_g = \psi_{100}(\mathbf{x}_{1A}) \psi_{100}(\mathbf{x}_{1B}) \quad (4.397)$$

s energií

$$E_g = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} = -2 \text{ Ry} \quad (4.398)$$

a excitované stavy

$$\Psi_i = \psi_{n_i l_i m_i}(\mathbf{x}_{1A}) \psi_{n_i' l_i' m_i'}(\mathbf{x}_{1B}) \quad (4.399)$$

o energiích

$$E_i = -\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 a_0} \left( \frac{1}{n_i^2} + \frac{1}{n_i'^2} \right). \quad (4.400)$$

V nejnižším řádu poruchové teorie je oprava k energii základního stavu

$$\Delta E^{(1)} = \langle \Psi_g | \hat{W} | \Psi_g \rangle. \quad (4.401)$$

Uvážíme-li, že platí

$$\hat{W}(-\mathbf{x}_{1A}, \mathbf{x}_{2B}, \mathbf{X}) = \hat{W}(\mathbf{x}_{1A}, -\mathbf{x}_{2B}, \mathbf{X}) = -\hat{W}(\mathbf{x}_{1A}, \mathbf{x}_{2B}, \mathbf{X}), \quad (4.402)$$

zatímco vlnová funkce ( 4.397 ) je vůči inverzi  $\mathbf{x}_{1A}$  a  $\mathbf{x}_{2B}$  symetrická, je oprava ( 4.401 ) rovna nule.

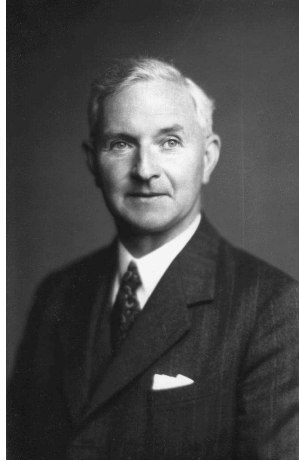
V druhém řádu poruchové teorie je

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{i \neq g} \frac{\left| \langle \Psi_g | \hat{W} | \Psi_i \rangle \right|^2}{E_g - E_i}. \quad (4.403)$$

Dosazením dle ( 4.395 ) plyne, že

$$\Delta E^{(2)} = -\frac{C}{R^6}, \quad C > 0. \quad (4.404)$$

Výraz ( 4.404 ) se nazývá Lenard – Jonessův potenciál



Sir John Edward Lennard-Jones (1894 – 1954)

Abychom stanovili konstantu

$$C = R^6 \sum_{i \neq g} \frac{\left| \langle \Psi_g | \hat{W} | \Psi_g \rangle \right|^2}{E_g - E_i} \quad (4.405)$$

uvažme, že pro všechny stavy diskrétního spektra (tj.  $E_i < 0$ ) je

$$E_1 - E_g \leq E_i - E_g < -E_g, \quad (4.406)$$

kde  $E_1$  je energie prvního excitovaného stavu, pro nějž je maticový element  $\langle \Psi_g | \hat{W} | \Psi_i \rangle \neq 0$ , což je vzhledem k paritě až stav s  $n = n' = 2$ . Proto je dle (4.400)

$$E_1 = -\frac{e^2}{16\pi\epsilon_0 a_0}. \quad (4.407)$$

S použitím (4.406) v definici (4.404) je

$$-\frac{1}{E_g} \sum_{i \neq g} \langle \psi_g | \hat{W} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \hat{W} | \psi_g \rangle < \frac{C}{R^6} < \frac{1}{E_1 - E_g} \sum_{i \neq g} \langle \psi_g | \hat{W} | \psi_i \rangle \langle \psi_i | \hat{W} | \psi_g \rangle. \quad (4.408)$$

Omezení  $i \neq g$  v sumě můžeme vynechat, jelikož dle (4.402) je

$$\langle \psi_g | \hat{W} | \psi_g \rangle = 0, \quad (4.409)$$

a následně použít relace úplnosti

$$\sum_i |\psi_i\rangle\langle\psi_i| = 1, \quad (4.410)$$

čímž se ( 4.408 ) zjednoduší na

$$\frac{\langle \psi_g | \hat{W}^2 | \psi_g \rangle}{E_g} < \frac{C}{R^6} < \frac{\langle \psi_g | \hat{W}^2 | \psi_g \rangle}{E_1 - E_g}. \quad (4.411)$$

Střední hodnotu  $\langle \psi_g | \hat{W}^2 | \psi_g \rangle$  snadno vypočteme

$$\begin{aligned} \langle \psi_g | \hat{W}^2 | \psi_g \rangle &= \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \right)^2 6 \langle \psi_g | \mathbf{x}_{1A}^2 \mathbf{x}_{2B}^2 + \mathbf{y}_{1A}^2 \mathbf{y}_{2B}^2 + 2\mathbf{z}_{1A}^2 \mathbf{z}_{2B}^2 | \psi_g \rangle = \\ &= \left( \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R^3} \right)^2 6 \langle \psi_g | x_{1A}^2 x_{2B}^2 | \psi_g \rangle = \left( \frac{3e^2 a_0^2}{2\pi\epsilon_0 R^3} \right)^2, \end{aligned} \quad (4.412)$$

kde jsme využili

$$\begin{aligned} \langle \psi_{100} | \mathbf{x}^2 | \psi_{100} \rangle &= \frac{1}{3} \langle \psi_{100} | \mathbf{r}^2 | \psi_{100} \rangle = \frac{1}{3\pi a_0^2} \int e^{-\frac{2r}{a_0}} r^2 d^3 r = \frac{4}{3a_0^3} \int_0^\infty r^4 e^{-\frac{2r}{a_0}} dr = \\ &= \frac{4}{3} \frac{4!}{a_0^3} \left( \frac{a_0}{2} \right)^5 = a_0^2. \end{aligned} \quad (4.413)$$

Ze ( 4.412 ) s použitím ( 4.398 ) a ( 4.407 ) vyplývá

$$\frac{6e^2 a_0^5}{4\pi\epsilon_0} < C < \frac{8e^2 a_0^5}{4\pi\epsilon_0}. \quad (4.414)$$

Ve druhém přiblížení je tak

$$-\frac{8e^2 a_0^5}{4\pi\epsilon_0 R^6} < \Delta E^{(2)} < -\frac{6e^2 a_0^5}{4\pi\epsilon_0 R^6}. \quad (4.415)$$

Všiměme si, že energie je záporná a odpovídající síla přitažlivá. Zatímco v případě vodíkové molekuly jde jen o modelovou situaci, protože van der Waalsova interakce je v okolí rovnovážné vzdálenosti atomů překryta mnohem silnější kovalentní vazbou. Van der Waalsova interakce je však dominantní při vzniku vazby mezi atomy vzácných plynů, které v důsledku plně obsazených elektronových slupek ani kovalentní, ani iontovou vazbu vytvořit nemohou.

V čem spočívá fyzikální podstata van der Walsových sil?

Atom vodíku v místě  $\mathbf{X}_A$  budí v místě  $\mathbf{X}_B$  v nejnižší aproximaci pole jako elektrický dipól s momentem

$$\mathbf{d}_A = -e\mathbf{x}_{1A}, \quad (4.416)$$

takže elektrické pole v místě  $\mathbf{X}_B$  je

$$\mathbf{E}(B) \approx \frac{e}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left[ x_{1A} - 3 \left( \frac{(\mathbf{x}_{1A} \mathbf{X}) \mathbf{X}}{R^2} \right) \right]. \quad (4.417)$$

Atom v místě  $\mathbf{X}_B$  představuje dipól s momentem

$$\mathbf{d}_B = -e\mathbf{x}_{1B}, \quad (4.418)$$

jehož potenciální energie v poli ( 4.417 ) je právě interakce ( 4.395 ), neboli

$$\hat{W}(\mathbf{X}) = -\mathbf{E}(B)\mathbf{d}_B = \frac{1}{4\pi\epsilon_0 R^3} \left[ (\mathbf{d}_A \mathbf{d}_B) - \frac{3(\mathbf{d}_A \mathbf{X})(\mathbf{d}_B \mathbf{X})}{R^2} \right]. \quad (4.419)$$

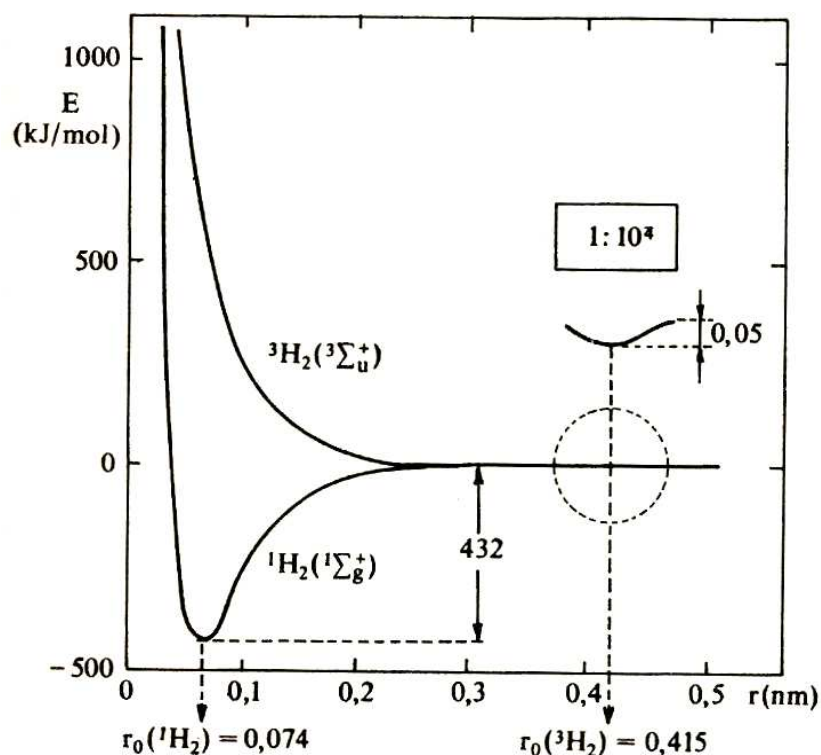
Operátor ( 4.419 ) tak popisuje interakční energii dvou dipólových momentů, jejichž vzájemná poloha je určována vektorem  $\mathbf{X}$ .

Snadno nahlédneme, že ke stejnému výrazu dospějeme při diskusi interakce libovolné dvojice dostatečně vzdálených neutrálních atomů či molekul.

Pokud je dipólový moment alespoň jedné z těchto částic nulový, potom operátor ( 4.419 ) nevede k žádné opravě v prvním řádu poruchové teorie a v druhém řádu dostáváme opět potenciál tvaru ( 4.404 ). Van der Waalsovy síly popisované tímto potenciálem jsou projevem dipól-dipólové interakce neutrálních atomů či molekul, jejichž dipólové momenty jsou nulové. O takovéto interakci hovoříme jako o disperzní interakci.

Na obr. 4.9 jsou uvedeny potenciální křivky pro případ, že se k sobě přiblíží dva atomy vodíku jejichž oba elektrony mají spiny antiparalelní ( $^1\text{H}_2$ ), resp. paralelní ( $^3\text{H}_2$ ). Vidíme, že van der Waalsova interakce způsobí vznik mělkého minima dokonce i na antivazebném (repulsním) termu  $^3\Sigma_u^+$  což dovoluje vznik van der Waalsovské molekuly  $^3\text{H}_2$ . Rozdíl disociační energie  $^1\text{H}_2$  a  $^3\text{H}_2$  je však obrovský. Molekule  $^1\text{H}_2$  přísluší relativně velká disociační energie a malá délka vazby, molekule  $^3\text{H}_2$  naopak nepatrná disociační energie a velká délka vazby.

Obr. 4.9





Teoretickou interpretaci této síly podal na základě kvantové mechaniky Fritz London roku 1930.



Fritz Wolfgang London (1900 – 1954)

Skutečnost, že dipól-dipólová interakce se netriviálně projevuje i v případě atomů s nulovým dipólovým momentem souvisí s tím, že pod dipólovým momentem rozumíme jeho střední hodnotu v základním stavu, přičemž tento stav není vlastním stavem dipólového momentu. V důsledku oscilací atomových jader a elektronů přísluší i nepolárním, kulově symetrickým systémům časově proměnný dipól (obecněji multipól). Jeho hodnota je dána okamžitou pozicí atomových jader a elektronů, mění se s rychle časem, avšak při zprůměrování přes všechny pozice vychází rovna nule. V okamžiku, kdy časově proměnlivý multipól je nenulový, působí indukčně na molekuly v sousedství a indukovaný multipól interaguje s časově proměnným multipólem.

Existenci Van der Waalsových interakcí mezi molekulami vděčíme za existenci kapalně fáze. Jak bylo ukázáno výše, za vhodných fyzikálních podmínek se vytvoří van der Waalsova vazba mezi libovolnými částicemi (atomy, molekulami, ionty, radikály). Za pokojové a vyšší teploty se tato vazba však udrží po delší dobu pouze u komplexů s vyšší stabilizační energií.

### ***Korelační energie***

V modelu nezávislých částic se předpokládá, že se každá částice pohybuje v časově zprůměrovaném poli všech ostatních částic, a to tak, že hustota pravděpodobnosti současného nalezení  $N$ -elektronů je

rovna součinu hustot pravděpodobností jednotlivých elektronů. Tato vzájemná nezávislost elektronů je však v rozporu s tím, že se

elektrony vlivem coulombického potenciálu  $\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|r_1 - r_2|}$  odpuzují,

což vede k zanedbání korelace mezi pohyby elektronů systému.

Můžeme si představit, že každý elektron, bez ohledu na jeho spin, je obklopen tzv. **coulombickou dírou** vzhledem k ostatním elektronům.

Pro elektrony s paralelními spiny přejímá funkci coulombické díry Fermiho díra která zabraňuje, aby dva elektrony s paralelními spiny obsazovali stejný prostorový orbital. Z toho plyne, že největší část korelační chyby lze připsat dvojicím elektronů s antiparalelními spiny.

Abychom dokázali kvantitativně vyjádřit velikost korelační chyby, zavádíme v modelu nezávislých elektronů velmi důležitou veličinu  $E_{\text{cor}}$  zvanou **korelační energie**, kterou zavedli Seitz a Löwdin.



Frederick Seitz (1911 – 2008)



Per-Olov Löwdin (1916 – 2000)

Je definována jako rozdíl mezi přesnou energií  $E$  daného nerelativistického hamiltoniánu systému v Bornově-Oppenheimerově aproximaci a Hatreeho-Fockovou limitou energie  $E_{\text{HFL}}$  čili nejnižší hodnotou energie, které lze v rámci H-F-modelu dosáhnout, zvolíme-li velmi rozsáhlou bázi atomových orbitalů:

$$E_{\text{cor}} = E - E_{\text{HFL}}. \quad (4.420)$$

Pro atomy a malé molekuly činí korelační energie maximálně 1% celkové energie, což je však mnoho ve srovnání se změnami energie při chemických reakcích.

H-F-vlnová funkce i přesná energie splňují viriálový teorém a stejně tak i korelační energie

$$\langle \hat{T} \rangle = -\frac{1}{2} \langle \hat{V} \rangle = -\langle \hat{H} \rangle, \quad (4.421)$$

$$\langle \hat{T} \rangle_{\text{cor}} = -\frac{1}{2} \langle \hat{V} \rangle_{\text{cor}} = -\langle \hat{H} \rangle_{\text{cor}}.$$

Z ( 4.421 ) plyne, že absolutní hodnota korelační chyby v potenciální energii je dvakrát větší, než korelační chyba v kinetické energii. Např. v systému H má korelační energie hodnotu -1,1 eV, z toho 1,1 eV přísluší kinetické energii a -2,2 eV potenciální energii. Pro víceelektronové atomy jsou hodnoty korelační energie vyšší.

Například -11 eV pro Ne a 21,5 eV pro Ar.

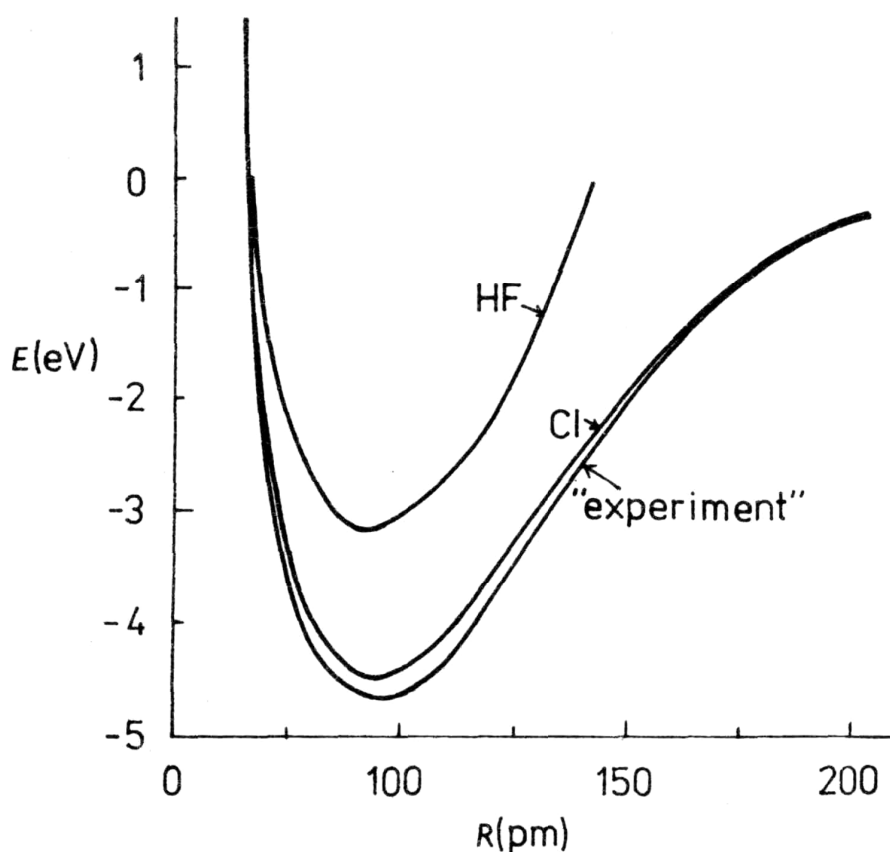
Je zřejmé, že korelační energii nelze počítat v rámci H-F-modelu.

Nejčastěji se  $E$  v ( 4.420 ) počítá pomocí úplné konfigurační interakce.

Jak je patrné z obr. 4.10, který ukazuje průběh potenciálu základního stavu hydroxilového radikálu OH, selhává H-F-metoda v oblasti větších mezijaderných vzdáleností, neboli v **disociační limitě**.

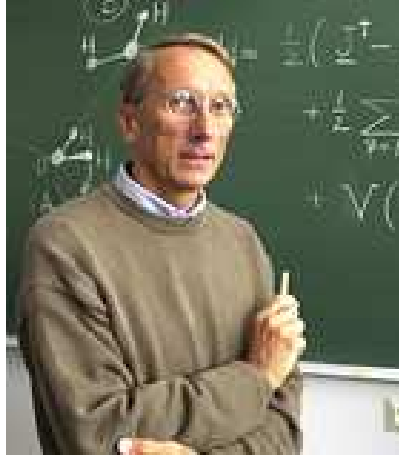
Často se pro výpočet přesné energie  $E$  malých systémů používají vlnové funkce obsahující tzv. **korelační funkce**  $1 + c|r_i - r_j|$ , které přímo zahrnují efekt coulombické díry pro paralelní a antiparalelní spiny elektronového páru. První přesné vlnové funkce tohoto typu použil Egil Andersen Hylleraas roku 1930.

Obr. 4.10



### *Metoda valenčních vazeb*

Přesnou interakční energii lze konstruovat jako součet dvou separátních příspěvků Hartreeho – Fockovy selfkonzistentní interakční energie a korelační interakční energie. Obě složky však budou získány různými matematickými postupy a mají rozdílné požadavky na kvalitu vlnové funkce. Velice příznivým rysem metody valenčních struktur je, že umožňuje popsat všechny složky interakční energie jednotným formalismem založeným na stavech neporušeného subsystému. Pionýrem v této oblasti byl van der Avoird.



Ad van der Avoird (1942)

Nejnižší vlastní hodnotu hamiltoniánu lze rozvinout jako

$$E_{VB} = E_0^A + E_0^B + \left\langle \Phi_0^A \Phi_0^B \left| \hat{W}^{AB} \right| \Phi_0^A \Phi_0^B \right\rangle + \sum_{i,j} \frac{\left\langle \Phi_0^A \Phi_0^B \left| \hat{W}^{AB} \right| \Phi_i^A \Phi_j^B \right\rangle}{E_0^A + E_0^B - E_i^A - E_j^B} + \dots \quad (4.422)$$

Definujme příspěvek

$$E_{VB}^{(1)} = \left\langle \Phi_0^A \Phi_0^B \left| \hat{H} \right| \Phi_0^A \Phi_0^B \right\rangle \quad (4.423)$$

k celkové energii  $E_{VB}$ . Tento výraz, v němž je

$$\hat{H} = \hat{H}^A + \hat{H}^B + \hat{W}^{AB}, \quad (4.424)$$

představuje střední hodnotu celkového hamiltoniánu pro základní stav struktury VB (valence bond) dimeru.

Definujme dále energii

$$E_{VB}^{(2)} = E_{VB} - E_{VB}^{(1)}. \quad (4.425)$$

Pro interakční energie potom platí

$$\begin{aligned} \Delta E_{VB}^{(1)} &= E_{VB}^{(1)} - E_0^A - E_0^B, \\ \Delta E_{VB}^{(2)} &= E_{VB}^{(2)}. \end{aligned} \quad (4.426)$$

Tyto interakční energie přecházejí na velkých vzdálenostech v interakční energie plynoucí z prvního a druhého řádu poruchové teorie. U rozsáhlejších komplexů, než jsou dimery se výběr valenčních struktur stává velmi komplikovaným, což činí příslušné výpočty obtížně proveditelnými. Co se tedy týče organických molekul, uspokojivé shody s experimentem bylo touto metodou dosaženo např. při výpočtu van der Waalsovského minima při interakci dvou dimerů ethylenu.

### ***Konfigurace uzavřených slupek***

Většina molekul má sudý počet elektronů a jejich základní stav je singletní. Je-li každý prostorový orbital  $\phi_i$  obsazen dvojicí elektronů, jedním se spinem  $\alpha$  a druhým se spinem  $\beta$ , hovoříme o systému s **uzavřenými slupkami**

$$\begin{aligned}\psi_{2i-1} &= \phi_i \alpha, \\ \psi_{2i} &= \phi_i \beta,\end{aligned}\tag{4.427}$$

kde  $i = 1, 2, \dots, N/2$ . Není-li každý prostorový orbital obsazen dvojicí elektronů, hovoříme o systému s **otevřenými slupkami**.

Slaterův determinant pro systém s uzavřenými slupkami má tvar

$$D_0 = \frac{1}{\sqrt{N!}} \det \{ \phi_1(1) \alpha(1) \phi_1(2) \beta(2) \dots \phi_{N/2}(N-1) \alpha(N-1) \phi_{N/2}(N) \beta(N) \}\tag{4.428}$$

nebo ve zkrácené notaci

$$D_0 = \frac{1}{\sqrt{N!}} \left| \phi_1 \bar{\phi}_1 \dots \phi_{N/2} \bar{\phi}_{N/2} \right|,\tag{4.429}$$

kde orbitaly se spinovým stavem  $\beta$  označujeme pruhem, orbitaly se spinem  $\alpha$  bez pruhu.

Odvodíme výraz pro energii a HF-rovnice pro konfiguraci s uzavřenými slupkami v molekulárním systému se čtyřmi elektrony.

Necht'

$$\begin{aligned}
 \psi_1 &= \phi_1 \alpha, \\
 \psi_2 &= \phi_1 \beta, \\
 \psi_3 &= \phi_2 \alpha, \\
 \psi_4 &= \phi_2 \beta,
 \end{aligned} \tag{4.430}$$

a

$$\begin{aligned}
 D_0 &= \frac{1}{\sqrt{4!}} \begin{vmatrix} \phi_1(1)\alpha(1) & \phi_1(1)\beta(1) & \phi_2(1)\alpha(1) & \phi_2(1)\beta(1) \\ \phi_1(2)\alpha(2) & \phi_1(2)\beta(2) & \phi_2(2)\alpha(2) & \phi_2(2)\beta(2) \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \phi_1(4)\alpha(4) & \phi_1(4)\beta(4) & \phi_2(4)\alpha(4) & \phi_2(4)\beta(4) \end{vmatrix} \equiv \\
 &\equiv |\phi_1 \phi_1 \bar{\phi}_2 \bar{\phi}_2|.
 \end{aligned} \tag{4.431}$$

Označíme-li

$$h_{ii} = \langle \psi_i | \hat{h} | \psi_i \rangle = \langle \phi_i | \hat{h} | \phi_i \rangle, \tag{4.432}$$

pak

$$\begin{aligned}
 \langle \psi_1 | \hat{h} | \psi_1 \rangle &= \langle \psi_2 | \hat{h} | \psi_2 \rangle = \langle \phi_1 | \hat{h} | \phi_1 \rangle = h_{11}, \\
 \langle \psi_3 | \hat{h} | \psi_3 \rangle &= \langle \psi_4 | \hat{h} | \psi_4 \rangle = \langle \phi_2 | \hat{h} | \phi_2 \rangle = h_{22},
 \end{aligned} \tag{4.433}$$

takže příspěvek jednoelektronových integrálů k energii je  $2(h_{11} + h_{22})$ .

Zavedeme-li coulombický operátor

$$\hat{C}_j(1) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\phi_j^*(2)\phi_j(2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_2 \tag{4.434}$$

a výměnný operátor

$$\hat{A}_j(1)\phi_i(1) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\phi_j^*(2)\phi_i(2)}{r_{12}} d\mathbf{r}_2 \phi_j(1), \quad (4.435)$$

máme

$$C_{ij} = \left\langle \phi_i(1)\phi_j(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| \phi_i(1)\phi_j(2) \right\rangle = \left\langle \phi_i(1) \left| \hat{J}_j(1) \right| \phi_i(1) \right\rangle,$$

$$A_{ij} = \left\langle \phi_i(1)\phi_j(2) \left| \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r_{12}} \right| \phi_j(1)\phi_i(2) \right\rangle = \left\langle \phi_i(1) \left| \hat{A}_j(1) \right| \phi_i(1) \right\rangle, \quad (4.436)$$

což jsou opět coulombický a výměnný integrál, které jsme zavedli v minulém odstavci. Pro  $N = 4$  lze zkonstruovat 6 coulombických integrálů  $C_{ij}$  ( $i \leq j$ ):

$$\left. \begin{aligned} \langle \psi_1(1)\psi_2(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_1(1)\psi_2(2) \rangle &= \langle \phi_1(1)\phi_1(2) | \hat{v}(1,2) | \phi_1(1)\phi_1(2) \rangle = C_{11}, \\ \langle \psi_1(1)\psi_3(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_1(1)\psi_3(2) \rangle \\ \langle \psi_1(1)\psi_4(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_1(1)\psi_4(2) \rangle \\ \langle \psi_2(1)\psi_3(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_2(1)\psi_3(2) \rangle \\ \langle \psi_2(1)\psi_4(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_2(1)\psi_4(2) \rangle \end{aligned} \right\} = \langle \phi_1(1)\phi_2(2) | \hat{v}(1,2) | \phi_1(1)\phi_2(2) \rangle = C_{12},$$

$$\langle \psi_3(1)\psi_4(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_3(1)\psi_4(2) \rangle = \langle \phi_2(1)\phi_2(2) | \hat{v}(1,2) | \phi_2(1)\phi_2(2) \rangle = C_{22} \quad (4.437)$$

jejichž příspěvek ke energii je tedy

$$C_{11} + C_{22} + 4C_{12}. \quad (4.438)$$

Vzhledem k ortogonalitě spinových funkcí jsou čtyři ze šesti výměnných integrálů nulové, příspěvek zbývajících dvou



$$\begin{aligned} \langle \psi_1(1)\psi_3(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_3(1)\psi_1(2) \rangle &= \langle \psi_2(1)\psi_4(2) | \hat{v}(1,2) | \psi_4(1)\psi_2(2) \rangle = \\ &= \langle \phi_1(1)\phi_2(2) | \hat{v}(1,2) | \phi_2(1)\phi_1(2) \rangle = A_{12} \end{aligned} \quad (4.439)$$

činí  $-2A_{12}$ .

Celková energie je součtem integrálů tří typů

$$E = 2(h_{11} + h_{22}) + C_{11} + C_{22} + 4C_{12} - 2A_{12}. \quad (4.440)$$

Přímočaré zobecnění této rovnice pro systém  $N=2n$  elektronů dává, s přihlédnutím ke vztahu  $C_{ii} = A_{ii}$ , výraz

$$\begin{aligned} E &= 2 \sum_{i=1}^n h_{ii} + \sum_{i<j}^n \sum_{i<j}^n (4C_{ij} - 2A_{ij}) + \sum_{i=1}^n C_{ii} = \\ &= 2 \sum_{i=1}^n h_{ii} + \sum_{i,j}^n \sum_{j \neq i}^n (2C_{ij} - A_{ij}) + \sum_{i=1}^n C_{ii} = \\ &= 2 \sum_{i=1}^n h_{ii} + \sum_{j,i}^n (2C_{ij} - A_{ij}). \end{aligned} \quad (4.441)$$

Fockův operátor  $\hat{F}$  a orbitální energie  $\varepsilon_i$  mají pro systém s uzavřenými slupkami tvar

$$\hat{F}(1) = \hat{h}(1) + \sum_{j=1}^n [2C_j(1) - A_j(1)], \quad (4.442)$$

$$\varepsilon_i = \langle \phi_i | \hat{F} | \phi_i \rangle = h_{ii} + \sum_{j=1}^n (2C_{ij} - A_{ij}).$$

Pro spinové stavy  $i$ -tého a  $a$ -tého orbitalu existují čtyři možnosti

$$(\phi_i \alpha)(\phi_a \alpha), \quad (\phi_i \alpha)(\phi_a \beta), \quad (\phi_i \beta)(\phi_a \alpha), \quad (\phi_i \beta)(\phi_a \beta), \quad (4.443)$$

z nichž pouze funkce s  $\alpha(1)\alpha(2)$  a  $\beta(1)\beta(2)$  jsou vlastními funkcemi spinových operátorů

$$\begin{aligned}\hat{S}_z &= \hat{s}_z(1) + s_z(2), \\ \hat{S}^2 &= [\hat{s}(1) + \hat{s}(2)]^2.\end{aligned}\tag{4.444}$$

Z funkcí  $\alpha(1)\beta(2)$  a  $\beta(1)\alpha(2)$  je zapotřebí sestavit lineární kombinace

$$\frac{1}{\sqrt{2}}[\alpha(1)\beta(2) \pm \beta(1)\alpha(2)],\tag{4.445}$$

kde znaménko (+) odpovídá vlastním hodnotám  $S = 1, M_s = 0$ , znaménko (−) vlastním hodnotám  $S = 0, M_s = 0$ .

Protože uzavřené slupky spinových determinantových funkcí nepřispívají k celkovému spinu, jsou spinově adaptované vlnové funkce pro excitovaný singletový a tripletový stav lineárními kombinacemi Slaterových determinantů

$$\begin{aligned}{}^1\Phi_i^a &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\phi_1 \dots \bar{\phi}_{i-1} \phi_i \bar{\phi}_a \phi_{i+1} \dots \bar{\phi}_n| - |\phi_1 \dots \bar{\phi}_{i-1} \bar{\phi}_i \phi_a \phi_{i+1} \dots \bar{\phi}_n|\right\}, \\ {}^3\Phi_i^a(1) &= |\phi_1 \dots \bar{\phi}_{i-1} \phi_i \phi_a \phi_{i+1} \dots \bar{\phi}_n|, \quad M_s = 1, \\ {}^3\Phi_i^a(0) &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left\{|\phi_1 \dots \bar{\phi}_{i-1} \phi_i \bar{\phi}_a \phi_{i+1} \dots \bar{\phi}_n| + |\phi_1 \dots \bar{\phi}_{i-1} \bar{\phi}_i \phi_a \phi_{i+1} \dots \bar{\phi}_n|\right\}, \quad M_s = 0, \\ {}^3\Phi_i^a(-1) &= |\phi_1 \dots \bar{\phi}_{i-1} \bar{\phi}_i \bar{\phi}_a \phi_{i+1} \dots \bar{\phi}_n|, \quad M_s = -1.\end{aligned}\tag{4.446}$$

Energie singletního a tripletního excitovaného stavu spočítané pomocí Slaterových-Condonových pravidel jsou

$$\begin{aligned}{}^{1,3}E(\Phi_i^a) &= 2\sum_{j \neq i} (h_{jj} + h_{ii} + h_{aa}) + \sum_{j,k \neq i} (2C_{jk} - A_{jk}) + \sum_{j \neq i} (2C_{ij} - A_{ij}) + \\ &+ \sum_{j \neq i} (2C_{ja} - A_{ja}) + (C_{ia} \pm A_{ia}).\end{aligned}\tag{4.447}$$

Pro excitační energie dostáváme výrazy

$${}^{1,3}E(\Phi_i^a) - {}^1E(D_0) = \varepsilon_a - \varepsilon_i - (C_{ia} - A_{ia}) \pm A_{ia}, \quad (4.448)$$

odkud plyne

$${}^{1,3}E(\Phi_i^a) - {}^1E(\Phi_i^a) = 2A_{ia}. \quad (4.449)$$

Protože  $A_{ij} \geq 0$ , je energie nejnižšího tripletního stavu nižší než energie nejnižšího excitovaného stavu, což je ve shodě s Hundovým pravidlem.

**Příklad :** Nalezněme možné termy pro elektronové konfigurace  $np^3$ ,  $nd^2$  a  $np^4$  a s pomocí Hundových pravidel určíme nejnižše ležící termy.

**Řešení :** Máme určit, které stavy s ostrými hodnotami operátorů celkových impulsmomentů  $\hat{L}^2$ ,  $\hat{S}^2$ ,  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{S}_z$  se realizují na prostoru jednodeterminantových funkcí utvořených z 6 jednoelektronových funkcí

$$|n, l, m, s\rangle \quad (4.450)$$

$$\text{kde } m = -1, 0, 1, \quad s = \frac{1}{2}, -\frac{1}{2}.$$

Těchto determinantů je 20 (tvorba trojic bez opakování)

$$N = \binom{6}{3} = 20. \quad (4.451)$$

Každý z determinantů je již vlastní funkcí operátorů  $\hat{L}_z$ ,  $\hat{S}_z$  a sice

$$\hat{L}_z \det(m_1 s_1, m_2 s_2, m_3 s_3) = \sum_{i=1}^3 m_i \hbar \det(m_1 s_1, m_2 s_2, m_3 s_3), \quad (4.452)$$

$$\hat{S}_z \det(m_1 s_1, m_2 s_2, m_3 s_3) = \sum_{i=1}^3 s_i \hbar \det(m_1 s_1, m_2 s_2, m_3 s_3).$$

Můžeme proto seřadit všechny determinanty podle jejich průmětů  $M_L$  a  $M_S$  do následující tabulky:

Tab. 4.1

$M_S \backslash M_L$	$\frac{3}{2}$	$\frac{1}{2}$	$-\frac{1}{2}$	$-\frac{3}{2}$
2	$(1, 0, \bar{1}   )$	$(1, 0   1)$	$(1   01)$	$(   1, 0, \bar{1} )$
1		$(1, 0   0) (1, \bar{1}   1)$	$(0   10) (1   \bar{1} \bar{1})$	
0		$(1, 0   \bar{1}) (1, \bar{1}   0) (0, \bar{1}   1)$	$(\bar{1}   10) (0   1 \bar{1}) (1   0 \bar{1})$	
-1		$(\bar{1}, 0   0) (\bar{1}, 1   \bar{1})$	$(0   \bar{1} 0) (\bar{1}   \bar{1} \bar{1})$	
-2		$(\bar{1}, 0   \bar{1})$	$(\bar{1}   \bar{1} 0)$	

Pro označení determinantů v tabulce 4.1 jsme zavedli stručnou notaci, v níž píšeme u každé jednoelektronové funkce v determinantu jen kvantové číslo  $m$  a záporná  $m$  značíme  $\bar{m}$ . Kladná a záporná  $s$  oddělujeme svíslou čarou, přičemž kladné hodnoty  $s$  píšeme nalevo, záporné napravo od této čáry. Například

$$\begin{aligned}
\det\left(\left|1, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|0, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|-1, \frac{1}{2}\right\rangle\right) &\equiv (10\bar{1}|), \\
\det\left(\left|1, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|0, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|-1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right) &\equiv (10|1), \\
\det\left(\left|1, \frac{1}{2}\right\rangle, \left|0, -\frac{1}{2}\right\rangle, \left|-1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right) &\equiv (1|0\bar{1}), \\
\det\left(\left|1, -\frac{1}{2}\right\rangle, \left|0, -\frac{1}{2}\right\rangle, \left|-1, -\frac{1}{2}\right\rangle\right) &\equiv (|10\bar{1}).
\end{aligned}
\tag{4.453}$$

Kombinací determinantů v prostoru  $D(M_L, M_S)$  s touž hodnotou  $M_L$  a  $M_S$  lze nalézt stavy mající I ostrou hodnotu  $L$  a  $S$  kvantující  $\mathbf{L}^2$  a  $\mathbf{S}^2$ . Je-li prostor  $D(M_L, M_S)$  jednorozměrný, musí mít tuto vlastnost už příslušný jediný determinant. V našem případě se jedná o prostor  $D\left(0, \frac{3}{2}\right)$  s jediným determinantem daným prvním řádkem (4.453).

Zřejmě patří k termu  $L = 0, S = 3/2$ , tj.  ${}^4S$ , takže můžeme tento determinant zapsat ve tvaru  $|LSM_L M_S\rangle$  jako

$$(10\bar{1}|) \equiv \left|0, \frac{3}{2}, 0, \frac{3}{2}\right\rangle. \tag{4.454}$$

Vhodnou kombinací determinantů v prostorech  $D(M_L, M_S)$  obdržíme i ostatní ze 4 stavů tohoto termu lišící se průmětem  $M_S$ , stavu  $\left|0, \frac{3}{2}, 0, -\frac{3}{2}\right\rangle$  však odpovídá opět jen jediný determinant  $(10\bar{1}|)$ .

Term  ${}^{2S+1}L$  přispěje ke každému z prostorů  $D(M_L, M_S)$  jediným stavem, takže mu můžeme přiřadit obdélníkové schéma o rozměrech  $(2L+1) \times (2S+1)$  tvořené jedničkami:

Tab. 4.2

$M_S \backslash M_L$	$S$	$S-1$	$\dots$	$-S$
$L$	1	1	$\dots$	1
$L-1$	1	1	$\dots$	1
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\dots$	
$-L$	1	1	$\dots$	1

Tabulku 4.2 pak můžeme přepsat s uvedením dimenzí prostorů  $D(M_L, M_S)$  jako

$$\begin{array}{cccccccc}
 1 & 1 & & & & & 1 & 1 \\
 2 & 2 & & & & & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 3 & 3 & 1 \equiv 1 & 1 & 1 & 1 \oplus 1 & 1 \oplus 1 & 1 \equiv & {}^4S \oplus {}^2D \oplus {}^2P. & (4.455) \\
 2 & 2 & & & & & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & & & & & 1 & 1
 \end{array}$$

Na prostoru dvaceti determinantů konfigurace  $(np)^3$  vede započtení zbytkové interakce ke vzniku termů  ${}^4S$  (čtyři stavy),  ${}^2D$  (10 stavů),  ${}^2P$  (6 stavů). Původně dvacetkrát degenerovaná energie se rozštěpí na tři hladiny uvedených degenerací. Podle Hundova pravidla vidíme, že nejnižší leží term  ${}^4S$ .

V případě konfigurace  $(nd)^2$  je dimenze prostoru determinantových funkcí rovna

$$N = \binom{10}{2} = 45. \quad (4.456)$$

Tyto funkce opět seřadíme do tabulky dle průmětů  $M_L$  a  $M_S$ :

Tab. 4.3

$M_S \backslash M_L$	1	0	-1
4		$(2 2)$	
3	$(2,1 )$	$(2 1)(1 2)$	$( 1,1)$
2	$(2,0 )$	$(1 1)(2 0)(0 2)$	$( 2,0)$
1	$(1,0 )(2,\bar{1} )$	$(1 0)(0 1)(2 \bar{1})(\bar{1} 2)$	$( 1,0)( 2,\bar{1})$
0	$(1,\bar{1} )(2,\bar{2} )$	$(1 \bar{1})(\bar{1} 1)(2 \bar{2})(\bar{2} 2)(0 0)$	$( 1,\bar{1})( 2,\bar{2})$
-1	$(0,\bar{1} )(1,\bar{2} )$	$(\bar{1} 0)(0 \bar{1})(\bar{2} 1)(1 \bar{2})$	$(0,\bar{1} )(1,\bar{2} )$
-2	$(\bar{2},0 )$	$(\bar{1} \bar{1})(\bar{2} 0)(0 \bar{2})$	$(\bar{2},0 )$
-3	$(\bar{2},\bar{1} )$	$(\bar{1} \bar{2})(\bar{2} \bar{1})$	$(\bar{2},\bar{1} )$
-4		$(\bar{2} \bar{2})$	

a provedeme rozklad na termy

$$\begin{matrix}
 1 & 1 \\
 1 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 2 & 4 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 2 & 5 & 2 \equiv 1 \oplus 1 & 1 & 1 \oplus 1 \oplus 1 & 1 & 1 \oplus 1 \equiv {}^1G \oplus {}^3F \oplus {}^1D \oplus {}^3P \oplus {}^1S. \\
 2 & 4 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 3 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 1 & 1
 \end{matrix}$$

( 4.457 )

Na prostoru pětáčtyřiceti jednodeterminantových stavů konfigurace  $(nd)^2$  se tedy realizují stavy  ${}^1G$  (9 stavů),  ${}^3F$  (21 stavů),  ${}^1D$  (5 stavů),

${}^3P$  (9 stavů),  ${}^1S$  (1 stav). Původní hladina se tedy rozštěpí zbytkovou interakcí na 5 hladin a podle Hundova pravidla leží nejnižše term  ${}^3F$ .

Konfigurace  $(np)^4$  má tytéž stavy jako  $(np)^2$  (dohromady tvoří uzavřenou slupku). Pro  $(np)^2$  můžeme sestavit tabulku

Tab. 4.4

$M_S \backslash M_L$	1	0	-1
2		$(1 1)$	
1	$(1,0 )$	$(0 1)(1 0)$	$( 1,0)$
0	$(1,\bar{1} )$	$(0 0)(1 \bar{1})(\bar{1} 1)$	$( \bar{1},\bar{1})$
-1	$(\bar{1},0 )$	$(0 \bar{1})(\bar{1} 0)$	$( \bar{1},0)$
-2		$(\bar{1} \bar{1})$	

Kterou lze opět přepsat jako

$$\begin{array}{ccccccc}
 & 1 & & & 1 & & \\
 1 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 1 & 3 & 1 \equiv 1 \oplus 1 & 1 & 1 \oplus 1 \equiv {}^1D \oplus {}^3P \oplus {}^1S. & & (4.458) \\
 1 & 2 & 1 & 1 & 1 & 1 & 1 \\
 & 1 & & & 1 & & 
 \end{array}$$

Na prostoru  $N = \binom{6}{2} = 15$  jednodeterminantových stavů konfigurace

$(np)^2$ , resp.  $(np)^4$  máme tedy  ${}^1D$  (5 stavů),  ${}^3P$  (9 stavů),  ${}^1S$  (1 stav). Původní hladina se zbytkovou interakcí rozštěpí na 3 hladiny, z nichž nejnižše leží dle Hundova pravidla term  ${}^3P$ .



## Nestacionární poruchová teorie

Věnujme se nyní případu, kdy je kvantový systém podroben působení časově závislé vnější poruchy. Příkladem může být atom nebo molekula interagující s elektromagnetickou vlnou. V takovém případě předpokládáme hamiltonián ve tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{W}(t), \quad (4.459)$$

v němž jsou vyznačeny časové závislosti poruchového členu  $\hat{W}(t)$  a tedy i výsledného hamiltoniánu  $\hat{H}(t)$ . Neporušený hamiltonián  $\hat{H}_0$  (např. atomu nebo molekuly před dopadem elektromagnetické vlny) budeme považovat za časově neproměnný.

Z výkladu základních pojmů kvantové mechaniky v kapitole 3 víme, že systém s hamiltoniánem  $\hat{H}_0$  má stacionární stavy a budeme vycházet z toho, že jsou nám známy. Jejich energie  $E_n$  a vlnové funkce  $\psi_n$  zapíšeme přímo do již vyřešené neporušené úlohy

$$\hat{H}_0 \psi_n = E_n \psi_n. \quad (4.460)$$

Naproti tomu porušený hamiltonián (4.459) již žádné stacionární stavy nemá. Nestacionární poruchová teorie je tedy spojena s naprosto odlišným typem úlohy než teorie stacionární. Cílem nemůže být výpočet nových (porušených) stacionárních stavů, protože žádné takovéto stavy nemohou existovat. Základní úlohou je v tomto případě studium přechodů mezi neporušenými stavy vyvolané časově závislou poruchou.

Usnadníme si formulaci problému předpokladem, že nestacionární porucha  $\hat{W}$  působí pouze v časovém intervalu  $0 < t < \tau$ . V takovém případě je v časových intervalech  $t < 0$  (před zapnutím poruchy) a  $t > \tau$  (po vypnutí poruchy)  $W(t) = 0$  a  $H(t) = H_0$  a systém v nich má stacionární stavy.

Můžeme proto očekávat, že je-li systém až do zapnutí poruchy v určitém počátečním stavu, může se po jejím odeznění nalézat ve stavu jiném, neboli dojde k přechodu mezi stacionárními stavy.

K vyšetření změn kvantových stavů systému v celé časové škále je nutné řešit nestacionární Schrödingerovu rovnici. Nejobecnější tvar jejího řešení je rozvoj vlnové funkce do báze funkcí  $\psi_n$  stavového prostoru  $V$

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n(t) \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right). \quad (4.461)$$

Konkrétní řešení získáme volbou počáteční podmínky a výpočtem časově závislých koeficientů  $c_n(t)$ , které tvoří maticové elementy rozvoje evolučního operátoru v této bázi.

Volbou počáteční podmínky

$$\psi(\mathbf{r}, t = 0) = \psi_p \quad (4.462)$$

stanovíme, že byl kvantový systém před zapnutím poruchy v  $p$ -tém (počátečním) stavu popsán neporušenou vlnovou funkcí  $\psi_p$ . Tato volba vede k jedinému konkrétnímu řešení

$$\psi^{(p)}(\mathbf{r}, t) = \sum_n c_n^{(p)}(t) \psi_n(\mathbf{r}) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right), \quad (4.463)$$

kde počáteční hodnoty koeficientů  $c_n^{(p)}(t)$  se určí z podmínky

$$\psi^{(p)}(\mathbf{r}, t = 0) = \sum_n c_n^{(p)}(t) \psi_n(\mathbf{r}) = \psi_p. \quad (4.464)$$

Snadno nahlédneme, že musí být

$$c_n^{(p)}(t = 0) = \delta_{np}. \quad (4.465)$$

Podají-li se nám vypočítat všechny koeficienty  $c_n^{(p)}(t)$ , můžeme pomocí nich určit veličinu

$$P_{p \rightarrow k}(\tau) = \left| c_k^{(p)}(t = \tau) \right|^2 = \left| \sum_p c_k^{(p)}(t) \right|^2, \quad (4.466)$$

kteřou lze s odvoláním na princip superpozice stavů oprávněně považovat za pravděpodobnost, že se systém v čase  $t = \tau$  (při vypnutí poruchy) bude nalézat v  $k$ -tém (konečném) stavu.

Protože však byl kvantový systém před zapnutím poruchy až do okamžiku  $t = 0$  v počátečním stavu charakterizovaném kvantovým číslem  $p$ , je  $P_{p \rightarrow k}(\tau)$  zároveň pravděpodobnost přechodu z počátečního stavu  $\psi_p$  do konečného stavu  $\psi_k$ .

Není možné stanovit, do kterého konkrétního konečného stavu systém působením nestacionární poruchy přejde. Vypočítat lze pouze pravděpodobnosti jednotlivých přechodů, z nichž některé mohou vyjít identicky rovny nule. Takové přechody se nazývají **zakázané přechody**, v ostatních případech hovoříme o **dovolených přechodech**. Souhrn dovolených a zakázaných přechodů nazýváme **Výběrovými pravidly**.

Změní-li se stacionární stav kvantového systému v jiný stacionární stav, je to nutně doprovázeno přebytkem nebo deficitem energie. Je-li např. poruchou elektromagnetické záření, projeví se to emisí nebo absorpcí fotonu, kterou můžeme experimentálně studovat. Proto je nestacionární poruchová teorie nejčastěji spojována se spektroskopí atomů, molekul, kondenzovaných soustav aj.

Teoreticky vypočítané pravděpodobnosti přechodů a výběrová pravidla pak mohou být vodítkem pro interpretaci spekter těchto mikrosystémů.

Pro konfrontaci teoretických výpočtů s experimentálními výsledky bývá někdy výhodnější počítat místo pravděpodobností přechodů (4.466) veličiny

$$w_{p \rightarrow k}(\tau) = \frac{d}{d\tau} P_{p \rightarrow k}(\tau), \quad (4.467)$$

kteřé mají význam pravděpodobností přechodů za jednotku času a měří se v jednotkách  $[s^{-1}]$ .

Věnujme se nyní postupu výpočtu koeficientů funkcí  $c_n^{(p)}(t)$ , jejichž znalost je nezbytná pro dosažení do vzorců ( 4.466 ) a ( 4.467 ). Nejprve dosadíme předpokládaný tvar řešení ( 4.463 ) do nestacionární Schrödingerovy rovnice:

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi^{(p)} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \sum_n c_n^{(p)} \psi_n \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) = \\
 &= i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n^{(p)} \psi_n \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) + i\hbar \sum_n c_n^{(p)} \psi_n \left(-i \frac{E_n}{\hbar}\right) \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) = \\
 &= H_0 \sum_n c_n^{(p)} \psi_n \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) + \hat{W} \sum_n c_n^{(p)} \psi_n \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right).
 \end{aligned} \tag{ 4.468 }$$

Druhý člen na druhém řádku a první člen na třetím řádku jsou díky platnosti rovnice ( 4.460 ) stejné, takže zbývá

$$i\hbar \sum_n \frac{d}{dt} c_n^{(p)} \psi_n \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right) = \hat{W} \sum_n c_n^{(p)} \psi_n \exp\left(-i \frac{E_n}{\hbar} t\right). \tag{ 4.469 }$$

Utvoříme-li skalární součin funkce  $\psi_k \exp\left(-i \frac{E_k}{\hbar} t\right)$  s oběma stranami této rovnice a využijeme-li ortonormality funkcí  $\psi_n$ , dostaneme soustavu rovnic pro výpočet časových závislostí koeficientů  $c_k^{(p)}(t)$ :

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_k^{(p)}(t) = \sum_n \langle \psi_k | \hat{W}(t) | \psi_n \rangle \exp\left(\frac{E_k - E_n}{\hbar} t\right) c_n^{(p)}(t). \tag{ 4.470 }$$

Známe-li tvar poruchy  $W$  a je-li tato porucha dostatečně slabá, můžeme soustavu rovnic ( 4.470 ) řešit v první aproximaci poruchové teorie tak, že dosadíme do pravé strany ( 4.470 ) za neznámé funkce  $c_n^{(p)}(t)$  jejich nulté přiblížení, kterým jsou jejich známé hodnoty v počátečním časovém okamžiku  $t = 0$ , tj.

$$c_n^{(p)}(t) \approx c_n^{(p)}(t=0) = \delta_{np}. \tag{ 4.471 }$$

Diferenciální rovnice ( 4.470 ) se tím zjednoduší na

$$i\hbar \frac{d}{dt} c_k^{(p)}(t) = \sum_n \langle \psi_k | \hat{W}(t) | \psi_p \rangle \exp\left(\frac{E_k - E_p}{\hbar} t\right) c_k^{(p)}(t). \quad (4.472)$$

Zajímáme-li se pouze o přechody, můžeme se při jejím řešení omezit na případy  $k \neq p$  a po její integraci vyjádřit hledané funkce ve tvaru

$$c_k^{(p)}(t) = \frac{1}{i\hbar} \int_0^t \langle \psi_k | \hat{W}(t) | \psi_p \rangle \exp\left(\frac{E_k - E_p}{\hbar} t\right) dt. \quad (4.473)$$

### *Fermiho zlaté pravidlo*

Pro časově neproměnnou poruchu zapnutou v čase  $t_0$  dostaneme do 1. řádu poruchové teorie

$$P_{p \rightarrow k}(t_0 \rightarrow t) = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \psi_k | \hat{W}(t) | \psi_p \rangle \right|^2 \delta(\omega_{kp}) \Delta t, \quad (4.474)$$

kde  $\Delta t = t - t_0$  a úhlová frekvence

$$\omega_{kp} \equiv \frac{E_k - E_p}{\hbar}. \quad (4.475)$$

Funkce

$$\delta(\omega_{kp}) = \frac{\sin^2 \frac{\omega_{kp} \Delta t}{2}}{\pi \frac{\omega_{kp}^2 \Delta t}{2}} \quad (4.476)$$

má v okolí nuly ostré maximum pološířky

$$\text{FWHM} \approx 2\pi\Delta t \quad (4.477)$$

a výšky

$$I = \frac{\Delta t}{2\pi}. \quad (4.478)$$

Za dobu  $\Delta t$  dojde k přechodům prakticky pouze v oblasti tohoto maxima, tj.

$$\omega_{kp} \leq \frac{2\pi}{\Delta t}. \quad (4.479)$$

Označíme-li

$$\Delta E \equiv |E_k - E_p|, \quad (4.480)$$

dostaneme

$$\Delta E \Delta t \geq h, \quad (4.481)$$

což je vztah blízký Heisenbergově relaci neurčitosti mezi energií a časem.

Pokud lze na okolí  $E_i$  pohlížet jako na kontinuum hladin, např. jedná-li se o přechod do spojité části spektra, nebo se v tomto okolí nachází velké množství diskretních hladin o celkové hustotě  $\rho_k(E)$ , můžeme pravděpodobnost (4.467) psát ve tvaru

$$w_{p \rightarrow k}(t_0 \rightarrow t) \equiv \frac{P_{p \rightarrow k}(t_0 \rightarrow t)}{\Delta t} = \frac{2\pi}{\hbar} |W|^2 \rho_k(E) \Big|_{E=E_i}, \quad (4.482)$$

který udává rychlost přechodu z počátečního stavu  $p$  do celého jeho okolí  $k \in K$ , na kterém je porucha  $W$  přibližně konstantní. Vztah (4.482) nazýváme **Fermiho zlatým pravidlem** kvantové mechaniky. V případě harmonické poruchy o frekvenci  $\omega$

$$\hat{W} = \hat{h}^+ e^{i\omega t} + \hat{h}^- e^{-i\omega t} \quad (4.483)$$

zapnuté po dobu

$$\Delta t \gg \frac{2\pi}{\omega}, \quad (4.484)$$

dostaneme obdobným postupem jako v případě konstantní poruchy vztah

$$\omega_{kp} \approx \pm \omega, \quad (4.485)$$

neboli

$$E_k \approx E_p \pm \hbar \omega. \quad (4.486)$$

Fermiho zlaté pravidlo v tomto případě dává

$$w_{p \rightarrow k}(t_0 \rightarrow t) = \frac{2\pi}{\hbar} |h_{kp}^+|^2 \rho_k(E) \Big|_{E=E_i - \hbar\omega} = \frac{2\pi}{\hbar} |h_{kp}^-|^2 \rho_k(E) \Big|_{E=E_i + \hbar\omega}. \quad (4.487)$$

Máme-li periodickou poruchu která není harmonická, můžeme ji pomocí Fourierovy analýzy rozložit na harmonické komponenty a počítat pravděpodobnost přechodu pro každou komponentu zvlášť.

### ***Fotoelektrický jev***

Hamiltonián atomu vodíku má tvar

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m_e} - \frac{e^2}{\hat{r}}, \quad (4.488)$$

Hamiltonián, popisující interakci jeho elektronu s elektromagnetickým polem, má tvar

$$\hat{H}(t) = \frac{1}{2m_e} \left( \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \right)^2 + e\varphi(\hat{\mathbf{r}}) - \frac{e^2}{\hat{r}}. \quad (4.489)$$

Ve speciální **coulombické kalibraci**

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \mathbf{A} &= 0, \\ \Phi &= 0, \end{aligned} \quad (4.490)$$

lze přepsat ( 4.489 ) do tvaru

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 - \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}} + \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}^2(\hat{\mathbf{r}}, t) \approx \hat{H}_0 - \frac{e}{m_e c} \mathbf{A}(\hat{\mathbf{r}}, t) \cdot \hat{\mathbf{p}}. \quad (4.491)$$

Druhý člen napravo ( 4.491 ) budeme považovat za poruchu  $\hat{W}(t)$  a za vektorový potenciál dosadíme monochromatickou vlnu

$$\hat{W}(t) = -\frac{2eA_0 \boldsymbol{\varepsilon}}{m_e c} \cos(\boldsymbol{\kappa} \hat{\mathbf{r}} - \omega t) = -\frac{eA_0}{m_e c} \left( e^{i(\boldsymbol{\kappa} \hat{\mathbf{r}} - \omega t)} + e^{-i(\boldsymbol{\kappa} \hat{\mathbf{r}} - \omega t)} \right) \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \hat{\mathbf{p}}, \quad (4.492)$$

kde  $\boldsymbol{\varepsilon}$  je vektor polarizace vln,  $\boldsymbol{\kappa}$  je vlnový vektor. Nás bude zajímat pouze existence, stačí tedy vzít pouze část

$$\hat{W}(t) = \hat{h} e^{-i\omega t}, \quad (4.493)$$

kde

$$\hat{h} = -\frac{eA_0}{m_e c} e^{i\boldsymbol{\kappa} \hat{\mathbf{r}}} \boldsymbol{\varepsilon} \hat{\mathbf{p}}. \quad (4.494)$$

Vlnová funkce základního stavu atomu vodíku je

$$\psi_p(\mathbf{r}) = R_{10}(r) Y_{00}(\vartheta, \varphi) = \frac{e^{i\boldsymbol{\kappa} \hat{\mathbf{r}}}}{\sqrt{\pi a_0^3}}, \quad (4.495)$$



kde  $\mathbf{k}$  je vlnový vektor elektronu s energií  $E_e$ ,

$$E_e = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}. \quad (4.496)$$

Výpočet přechodu mezi spojitou a diskrétní částí spektra zjednodušíme předpokladem, že elektron není zcela volný, alebrž uzavřený v trojrozměrné nekonečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámě o objemu  $V$ . Budeme předpokládat, že rozměry jámy jsou tak velké, že výrazněji neovlivní spektrum atomu vodíku se kterým počítáme. Nakonec provedeme limitu  $V \rightarrow \infty$ .

Vlnová funkce elektronu v krabici má tvar

$$\psi_k(\mathbf{r}) = \frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{\sqrt{V}}. \quad (4.497)$$

V tomto případě je  $\mathbf{k}$  důsledkem konečných rozměrů kvantovaná veličina. Pokud je však objem  $V$  dostatečně velký, lze s ní nadále počítat jako se spojitou.

Objem fázového prostoru klasicky se pohybujícího volného elektronu v krabici je

$$V_\Omega(E) = \int_V d^3\mathbf{x} \int \delta\left(E - \frac{\mathbf{p}^2}{2m_e}\right) d^3\mathbf{p} = V \int_\Omega d\Omega \int_0^\infty \delta\left(E - \frac{p^2}{2m_e}\right) p^2 dp. \quad (4.498)$$

Budeme se ptát po hustotě hladin s vlnovým vektorem mířícím do elementu prostorového úhlu  $d\Omega$ , tj.

$$\begin{aligned} \frac{d\rho(E)}{d\Omega} &= \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \frac{dV_\Omega(E)}{d\Omega} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \int_0^\infty \delta\left(E - \frac{p^2}{2m_e}\right) p^2 dp = \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2m_e}{\sqrt{2m_e E}} \delta\left(p - \sqrt{2m_e E}\right) p^2 dp = \\ &= \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \frac{2m_e}{\sqrt{2m_e E}} 2m_e E = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} m_e \sqrt{2m_e E}. \end{aligned} \quad (4.499)$$

či v závislosti na veličině  $k$

$$\frac{d\rho(k)}{d\Omega} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \hbar k m_e. \quad (4.500)$$

K výpočtu pravděpodobnosti, resp. rychlosti přechodu použijeme Fermiho zlaté pravidlo. Maticový element, který v něm vystupuje je

$$\begin{aligned} h_{kp} &= \langle \psi_k | \hat{h} | \psi_p \rangle = -\frac{eA_0}{m_e c} \int \psi_k^*(\mathbf{r}) e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{p} \psi_p(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \\ &= \frac{i\hbar e A_0}{m c \sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\varepsilon} \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{r}} \nabla e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r} = \frac{i\hbar e A_0}{m c a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\varepsilon} \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{\mathbf{r}}{r} e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r} = \\ &= \frac{i\hbar e A_0}{m c a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{I}(\mathbf{q}). \end{aligned} \quad (4.501)$$

Jediný vektor, na kterém závisí integrál  $\mathbf{I}(\mathbf{q})$  je právě  $\mathbf{q} \equiv \mathbf{k} - \mathbf{k}'$ . To ale znamená, že integrál musí být možné vyjádřit jako

$$\mathbf{I} = \mathbf{q} I. \quad (4.502)$$

Budeme tedy počítat výraz

$$q^2 I = \int e^{i\mathbf{q}\mathbf{r}} \frac{\mathbf{q}\mathbf{r}}{r} e^{-\frac{r}{a_0}} d^3\mathbf{r}. \quad (4.503)$$

Položíme-li osu  $z$  paralelní s vektorem  $\mathbf{q}$  a přejdeme do sférických souřadnic, máme

$$q^2 I = \int_0^\infty r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \int_0^\pi e^{iqr \cos\vartheta} q r \cos\vartheta \sin\vartheta d\vartheta \int_0^{2\pi} d\varphi. \quad (4.504)$$

Řešení provádíme nejprve substitucí

$$\begin{aligned} u &= \cos \vartheta \\ du &= -\sin \vartheta d\vartheta \end{aligned} \quad (4.505)$$

po níž přejde integrál ( 4.504 ) na

$$q^2 I = 2\pi q \int_0^{\infty} r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \int_{-1}^1 e^{iqr u} u du. \quad (4.506)$$

Dále již postupujeme per partes

$$\begin{aligned} q^2 I &= 2\pi q \int_0^{\infty} r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \left\{ \left[ \frac{ue^{iqr u}}{iqr} \right]_{-1}^1 - \frac{1}{iqr} \int_{-1}^1 e^{iqr u} du \right\} = \\ &= 2\pi q i \int_0^{\infty} r e^{-\frac{r}{a_0}} dr \left\{ \frac{e^{iqr} + e^{-iqr}}{qr} + i \frac{e^{iqr} - e^{-iqr}}{(qr)^2} \right\} = \\ &= 2\pi i \int_0^{\infty} r \left[ e^{-r\left(\frac{1}{a_0} + iq\right)} + e^{-r\left(\frac{1}{a_0} - iq\right)} \right] dr - \frac{2\pi}{q} \int_0^{\infty} \left[ e^{-r\left(\frac{1}{a_0} + iq\right)} - e^{-r\left(\frac{1}{a_0} - iq\right)} \right] dr = \\ &= -2\pi i J_1 - \frac{2\pi}{q} J_2. \end{aligned} \quad (4.507)$$

Protože pro  $\alpha > 0$  platí

$$\begin{aligned} \int_0^{\infty} e^{-\alpha r} dr &= \frac{1}{\alpha}, \\ \int_0^{\infty} r e^{-\alpha r} dr &= \frac{1}{\alpha} \int_0^{\infty} e^{-\alpha r} dr = \frac{1}{\alpha^2}, \end{aligned} \quad (4.508)$$

takže

$$J_1 = \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} + iq\right)^2} + \frac{1}{\left(\frac{1}{a_0} - iq\right)^2} = a_0^2 \frac{(1 - iqa_0)^2 + (1 + iqa_0)^2}{(1 + q^2 a_0^2)^2} = \frac{2a_0(1 - q^2 a_0^2)}{(1 + q^2 a_0^2)^2},$$

$$J_1 = \frac{1}{\frac{1}{a_0} + iq} - \frac{1}{\frac{1}{a_0} - iq} = a_0 \frac{1 - iqa_0 - 1 - iqa_0}{1 + q^2 a_0^2} = \frac{2iqa_0^2}{1 + q^2 a_0^2},$$

( 4.509 )

a po dosazení do ( 4.507 ) dostaneme

$$q^2 I = -4\pi i a_0^2 \left[ \frac{1 - q^2 a_0^2}{(1 + q^2 a_0^2)^2} - \frac{1}{1 + q^2 a_0^2} \right] = -4\pi i a_0^2 \frac{1 - q^2 a_0^2 - 1 - q^2 a_0^2}{1 + q^2 a_0^2} =$$

$$= \frac{8i\pi q^2 a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2},$$

( 4.510 )

neboli

$$\mathbf{I} = \frac{8i\pi q^2 a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2} \mathbf{q}.$$

( 4.511 )

Pro hledaný maticový element odtud plyne

$$h_{kp} = \frac{i\hbar e A_0}{mca_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8i\pi q^2 a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot (\boldsymbol{\kappa} - \mathbf{k}) = \frac{i\hbar e A_0}{mca_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8i\pi q^2 a_0^4}{(1 + q^2 a_0^2)^2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k},$$

( 4.512 )

neboť z vlastností coulombické kalibrace plyne  $\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \boldsymbol{\kappa} = 0$ .

Nyní již máme v rukou vše, co potřebujeme k použití Fermiho zlatého pravidla ( 4.487 ):

$$\begin{aligned} \frac{dw_{p \rightarrow k}}{d\Omega} &= \frac{2\pi}{\hbar} |h_{kp}|^2 \frac{d\rho}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \frac{i\hbar e A_0}{m c a_0 \sqrt{\pi a_0^3 V}} \frac{8i\pi q^2 a_0^4}{(1+q^2 a_0^2)^2} \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k} \right|^2 \frac{V \hbar k m}{(2\pi \hbar)^3} = \\ &= \frac{k (4e A_0 \boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k})^2 a_0^3}{\pi \hbar m_e c^2 (1+q^2 a_0^2)^4}. \end{aligned} \quad (4.513)$$

Účinný průřez procesu je definován jako poměr počtu procesů  $p \rightarrow k$  za jednotku času ku celkovému toku částic. V našem případě je to tedy absorbovaná energie za jednotku času dělená tokem energie dopadajícího elektromagnetického záření, neboli

$$\frac{d\sigma_{p \rightarrow k}}{d\Omega} = \frac{U_{p \rightarrow k}}{\Phi}. \quad (4.514)$$

Absorbovaná energie za jednotku času je dána součinem rychlosti přechodu (4.513) a absorbované energie  $E = \hbar \omega$

$$U_{p \rightarrow k} = \hbar \omega \frac{dw_{p \rightarrow k}}{d\Omega}. \quad (4.515)$$

Tok energie je součin rychlosti přenosu energie a hustoty energie:

$$\Phi = \frac{c}{16\pi} (\mathbf{E}_0^2 + \mathbf{B}_0^2) = \frac{c}{16\pi} \frac{8A_0^2 \omega^2}{c^2} = \frac{A_0^2 \omega^2}{2\pi c}. \quad (4.516)$$

Po dosazení do (4.514) tedy máme

$$\frac{d\sigma_{p \rightarrow k}}{d\Omega} = \frac{2\pi \hbar c}{\omega A_0^2} \frac{dw_{p \rightarrow k}}{d\Omega} = \frac{32e^2 (\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k})^2 k a_0^3}{m c \omega (1+q^2 a_0^2)^4}. \quad (4.517)$$

Natočme nyní soustavu souřadnou tak, aby vektor polarizace  $\boldsymbol{\varepsilon}$  mířil do směru osy  $x$ , vlnový vektor dopadající vlny  $\mathbf{k}$  do směru osy  $z$ . Ve sférických souřadnicích pak dostaneme

$$\boldsymbol{\varepsilon} \cdot \mathbf{k} = k \sin \vartheta \cos \varphi,$$

$$q^2 = k^2 - 2\mathbf{k} \cdot \boldsymbol{\kappa} + \kappa^2 = k^2 - 2k \frac{\omega}{c} \cos \vartheta + \left( \frac{\omega}{c} \right)^2. \quad (4.518)$$

Energii, kterou získá vyražený elektron, aproximujeme energií dopadajících fotonů

$$k = \frac{\sqrt{2m_e E_e}}{\hbar} = \frac{\sqrt{2m_e \omega c}}{\hbar}, \quad (4.519)$$

přičemž zanedbáváme vliv coulombického pole atomu na vyražený elektron, který tak popisujeme jako volný.

Jelikož  $\kappa = \frac{\omega}{c}$ , dostáváme

$$\frac{\kappa}{k} = \frac{\hbar k}{2mc} = \frac{p}{2mc} = \frac{v}{2c} \quad (4.520)$$

a můžeme aproximovat

$$1 + q^2 a_0^2 \approx 1 + k^2 a_0^2 \left( 1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta \right) \approx k^2 a_0^2 \left( 1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta \right). \quad (4.521)$$

Diferenciální účinný průřez tak můžeme aproximovat jako

$$\frac{d\sigma_{p \rightarrow k}}{d\Omega} \approx \frac{32e^2}{mc\omega (ka_0)^5} \frac{\sin^2 \vartheta \cos^2 \varphi}{\left( 1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta \right)^4}. \quad (4.522)$$

Ten nabývá maxima pro  $\varphi = 0$  a pro  $\vartheta$  dané rovnicí

$$\begin{aligned} \frac{d}{d\vartheta} \frac{\sin^2 \vartheta}{1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta} &= 2 \sin \vartheta \cos \vartheta \left(1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta\right)^4 - 4 \frac{v}{c} \sin^3 \vartheta \left(1 - \frac{v}{c} \cos \vartheta\right)^3 = \\ &= 2 \cos \vartheta - 2 \frac{v}{c} \cos^2 \vartheta - \frac{v}{c} \sin^2 \vartheta = 0. \end{aligned} \quad (4.523)$$

Ta má řešení

$$\cos \vartheta = \frac{-1 \pm \sqrt{1 + 8 \left(\frac{v}{c}\right)^2}}{2 \frac{v}{c}} \approx \frac{c}{2v} \left[ -1 \pm 1 \pm 4 \left(\frac{v}{c}\right)^2 \right] \approx \begin{cases} \frac{c}{v} \\ 2 \frac{v}{c} \end{cases} \quad (4.524)$$

První řešení nevyhovuje, neboť pravá strana je větší než 1. Maximální pravděpodobnost emise je tedy do směru

$$\vartheta = \frac{\pi}{2} - 2 \frac{v}{c}, \quad \varphi = 0. \quad (4.525)$$

## Molekulová spektra

Snahou je separovat operátor kinetické energie na

$$\hat{T}_n = \hat{T}^{transl} + \hat{T}^{rot} + \hat{T}^{vnitřní}, \quad (4.526)$$

kde by každý z dílčích operátorů působil jen na jeden typ souřadnic a pro energie platilo

$$E = E^{transl} + E^{rot} + E^{vnitřní}. \quad (4.527)$$

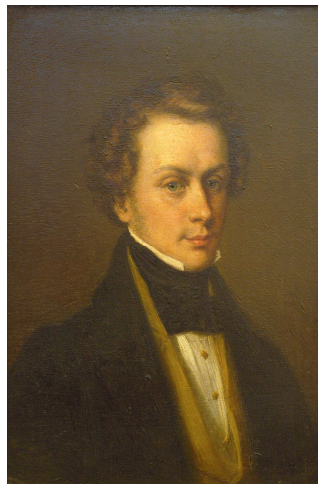
### ***Translační pohyb***

Translační pohyb lze exaktně separovat přechodem do těžišťové soustavy souřadnic (inerciální), kde samozřejmě platí

$$E^{transl} = \frac{p^2}{2M} = \frac{Mv^2}{2}. \quad (4.528)$$

Při interakci translačního pohybu molekuly s dopadajícím zářením frekvence  $f$  dochází vlivem dopplerova jevu k frekvenčnímu posuvu

$$\Delta f = \frac{v}{c} f. \quad (4.529)$$



Christian Andreas Doppler (1803 – 1853)

### ***Rotační pohyb***

Při zanedbání vnitřních pohybů molekuly platí

$$T^{rot} = \frac{\hat{L}^2}{2J_a} + \left( \frac{1}{2J_b} - \frac{1}{2J_a} \right) \hat{L}_b^2 + \left( \frac{1}{2J_b} - \frac{1}{2J_a} \right) \hat{L}_a^2, \quad (4.530)$$

kde  $J_i$  jsou momenty setrvačnosti ve směru hlavních os  $i$  momentu setrvačnosti,  $\hat{L}$ ,  $\hat{L}_i$  jsou operátor celkového impulsmomentu a



operátory impulsmomentu ve směru hlavních os momentu setrvačnosti.

V případě dvouatomové molekuly se operátor ( 4.530 ) zjednoduší na

$$\hat{T}^{rot} = \frac{\hat{L}^2}{2J} \quad ( 4.531 )$$

jehož vlastní hodnoty jsou

$$E_l^{rot} = \frac{\hbar^2}{2J} l(l+1), \quad l = 0, 1, \dots \quad ( 4.532 )$$

Pro každou hodnotu rotačního kvantového čísla  $l$  je hladina  $(2l + 1)$ -krát degenerovaná.

U molekul s nenulovým elektrickým dipólovým momentem může docházet a absorpčním a emisním přechodům mezi rotačními stavy.

Přitom opět platí výběrové pravidlo

$$\Delta l = \pm 1. \quad ( 4.533 )$$

Rezonanční frekvence pro jednotlivé přechody je tedy dána rozdílem

$$h\nu_{ij} = \frac{\hbar^2}{2J} [l_i(l_i - 1) - l_k(l_k - 1)] = i \frac{\hbar^2}{J}, \quad i - k = 1. \quad ( 4.534 )$$

Jelikož jsou ve skutečnosti molekulové vazby elastické, dochází vlivem odstředivé síly k deformaci molekuly. Označíme-li tuhost vazby jako  $k$ , bude elastická síla, působící na jádra molekuly  $k(R - R_0)$ , kde výraz v závorce představuje vychýlení jader z rovnovážné polohy vlivem odstředivé síly. Tato síla reprezentuje běžnou dostředivou sílu, takže můžeme položit

$$k(R - R_0) = \omega^2 MR, \quad ( 4.535 )$$

odkud

$$R = \frac{kR_0}{k - M\omega^2}. \quad (4.536)$$

Celková energie rotující molekuly je tedy součtem její rotační kinetické energie a elastické potenciální energie napjaté vazby:

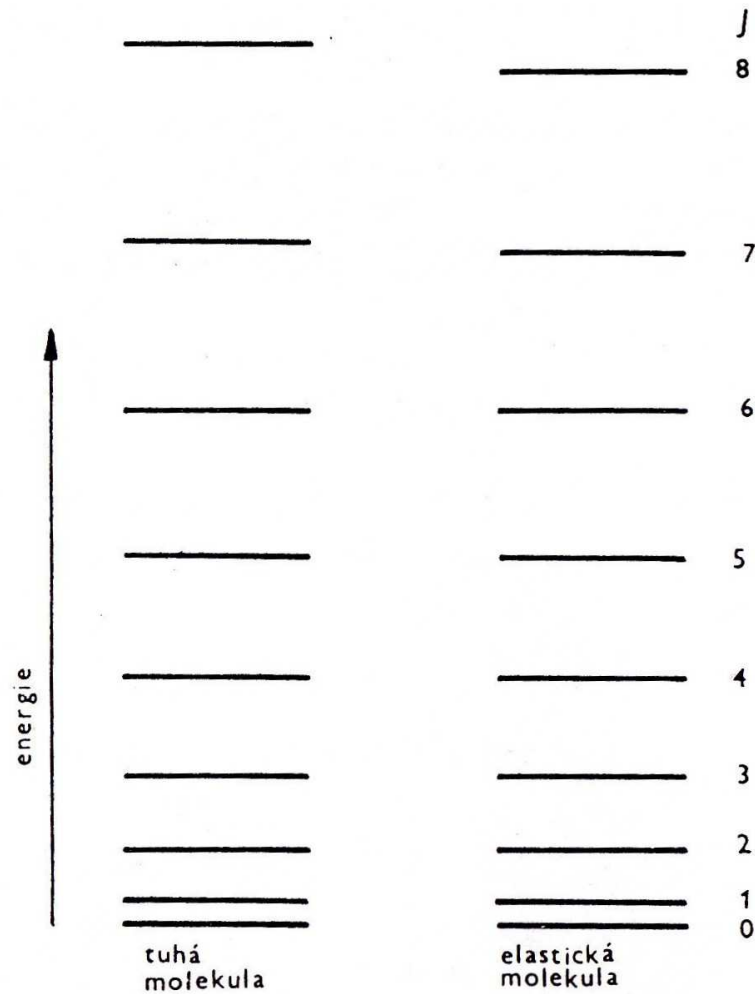
$$\begin{aligned} E^{rot} &= \frac{1}{2} \left( J\omega^2 + k \cdot (R - R_0)^2 \right) = \frac{1}{2} \left( J\omega^2 + \frac{M^2 \omega^4 R^2}{k} \right) = \\ &= \frac{1}{2} \left( J\omega^2 + \frac{(J\omega^2)^2}{kR^2} \right) = \frac{L^2}{2J} \left( 1 + \frac{L^2}{JkR^2} \right). \end{aligned} \quad (4.537)$$

Pro celkovou energii elastické dvouatomové molekuly tak dostáváme

$$E^{rot} = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2J} \left( 1 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{JkR^2} \right) \approx \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2MR_0^2} \left( 1 + \frac{\hbar^2 l(l+1)}{MkR_0^4} \right). \quad (4.538)$$

Srovnáním ( 4.534 ) a ( 4.538 ) se ukazuje, že rotační energetické hladiny elastické molekuly jsou nižší, než odpovídající hladiny tuhé molekuly.

Obr. 4.11



### *Vibrační energetické hladiny*

Teorie malých kmitů molekul vychází z jednoduchého modelu, v němž atomy (hmotné body) kmitají okolo rovnovážných poloh. V dvouatomové molekule je potenciální energie  $V(r)$  vyjádřena vztahem

$$V(r) = \frac{1}{2}k(r - r_0)^2, \quad (4.539)$$

kde  $r_0$  je rovnovážná mezijaderná vzdálenost a  $k$  je silová konstanta. Energie vibračních hladin dvouatomové molekuly je v aproximaci harmonického oscilátoru kvantována a určena vztahem

$$E_v = \left( v + \frac{1}{2} \right) h\nu = \left( v + \frac{1}{2} \right) \hbar \nu \sqrt{\frac{k}{\mu}}, \quad (4.540)$$

kde  $v$  je vibrační kvantové číslo nabývající hodnot 0, 1, 2, 3, ...,  $h$  je Planckova konstanta,  $\nu$  je frekvence vibrace a  $\mu$  je redukovaná hmotnost.

Vyjdeme z předpokladu, že vnější pohyb molekuly byl odseparován. Ve Schrödingerově rovnici tak zbývá již jen vzájemný pohyb jader

$$\hat{T}_n^{\text{vnitřní}} \Theta(\{\xi\}) + E^e(\{\xi\}) \Theta(\{\xi\}) = E^{\text{vnitřní}} \Theta(\{\xi\}). \quad (4.541)$$

Rovnice (4.541) obsahuje  $3N - 6$  vnitřních stupňů volnosti (pro speciální případ lineární molekuly je to  $3N - 5$ , neboť odečítáme 3 stupně volnosti na translaci, ale jen 2 na rotaci, která je v ose molekuly invariantní). Rovnici (4.541) nelze obecně analyticky řešit, v případě dostatečně tuhých molekul lze však použít tzv. **aproximaci malých výchylek**:

$$\hat{T}_n^{\text{vnitřní}} = \sum_{j,k=1}^{3N-6} T_{jk} \frac{\partial^2}{\partial \Delta \xi_j \partial \Delta \xi_k}. \quad (4.542)$$

V případě víceatomové molekuly můžeme potenciální energii vyjádřit pomocí Taylorova rozvoje

$$V = V_0 + \sum_i \left( \frac{\partial V}{\partial q_i} \right)_0 q_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} \left( \frac{\partial^2 V}{\partial q_i \partial q_j} \right)_0 q_i q_j + \dots \quad (4.543)$$

kde  $V_0$  značí potenciální energii rovnovážného stavu molekuly (a zpravidla ji pokládáme rovnu nule), druhý člen je roven nule, což odpovídá podmínce pro minimum energie

$$\left( \frac{\partial V}{\partial q_i} \right)_0 = 0, \quad (4.544)$$

$q_i$  jsou souřadnice výchylek z rovnovážné polohy.

Označíme-li druhé parciální derivace ve třetím členu rozvoje  $k_{ij}$  (**silové konstanty**) a zanedbáme členy řádu vyššího než 2 (harmonická aproximace), potom dostáváme

$$V_{ij} = V_0(q_0) + \frac{1}{2} \sum_{i,j}^{3N-6} F_{ij} q_i q_j, \quad (4.545)$$

a Schrödingerova rovnice (4.541) získá tvar

$$\sum_{i,k=1}^{3N-6} \left[ F_{ik} q_i q_k - T_{ik} \frac{\partial^2}{\partial q_i \partial q_k} \right] \Theta(q) = [E^{\text{vnitřní}} - V_0(q_0)](q). \quad (4.546)$$

Pro jednu vnitřní souřadnici ( $3N - 6 = 0$ ) je tato rovnice rovnicí

lineárního harmonického oscilátoru s hmotností  $\mu = \frac{2\hbar^2}{T}$  a vlastní

frekvencí  $f_0 = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{4FT}{\hbar^2}}$ . Rovnici (4.546) bychom tedy uměli

vyřešit, pokud by se nám ji podařilo převést na diagonální tvar. Dá se ukázat, že to lze provést použitím lineární transformace

$$Q_i = \sum_{j=1}^{3N-6} L_{ij} q_j. \quad (4.547)$$

Ačkoli tedy vnitřní pohyb vibrující molekuly není jednoduchý harmonický pohyb, lze jej rozložit na jednoduché harmonické vibrační pohyby – tzv. **normální vibrace** nebo **normální vibrační mody** molekuly. Každému z nich přísluší v dané molekule určitá frekvence. Počet normálních vibrací odpovídá počtu vibračních stupňů volnosti. Dále jsme viděli, že lze nalézt souřadnice  $Q_i$  v nichž se hamiltonián pro vibrační pohyb víceatomové molekuly redukuje do diagonální formy a může být vyjádřen pomocí čtverců těchto souřadnic a jejich derivací

$$\hat{H}_v = \sum_{i=1}^{3N-6} \left[ \left( \sum_{j,k=1}^{3N-6} F_{jk} L_{ji}^{-1} L_{ki}^{-1} \right) Q_i^2 - \left( \sum_{i=1}^{3N-6} T_{jk} L_{ji} L_{ki} \right) \frac{\partial^2}{\partial \zeta_i^2} \right]. \quad (4.548)$$

Tím dostáváme hamiltonián ve tvaru součtu  $3N - 6$  hamiltoniánů lineárních harmonických oscilátorů, které právě nazýváme normálními vibračními módy. S ohledem na vztah mezi parametry oscilátoru a členy v jeho hamiltoniánu můžeme ( 4.548 ) přepsat do tvaru

$$\hat{H}_v = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^{3N-6} \frac{1}{\mu_i} \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N-6} \lambda_i \mu_i Q_i^2, \quad (4.549)$$

kde  $\lambda_i$  jsou konstanty. Schrödingerovu rovnici pro vibrační pohyb molekuly

$$\hat{H}_v \chi_v = E_v \chi_v, \quad (4.550)$$

kde  $E_v$  je celková vibrační energie a  $\chi_v$  je celková vibrační vlnová funkce, lze separovat na  $3N - 6$  rovnic (v případě nelineární molekuly)

$$-\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2 \chi_{v_i}^i}{\partial Q_i^2} + \frac{1}{2} \lambda_i Q_i^2 \chi_{v_i}^i(Q_i) = E_{v_i} \chi_{v_i}^i(Q_i) \quad i = 1, 2, \dots, 3N - 6 \quad (4.551)$$

přičemž celková vibrační energie je rovna součtu vlastních hodnot  $E_{v_i}$  a vibrační vlnová funkce molekuly je součinem vibračních funkcí  $\chi_{v_i}^i(Q_i)$

$$E_v = \sum_{i=1}^{3N-6} E_{v_i}, \quad (4.552)$$

$$\chi_v = \prod_{i=1}^{3N-6} \chi_{v_i}^i(Q_i).$$

Rovnice ( 4.551 ) má tvar rovnice harmonického oscilátoru, a tedy vibrační energie  $E_{v_i}$  pro jednotlivé normální vibrace jsou dány vztahem

$$E_{v_i} = \left( v_i + \frac{1}{2} \right) \hbar f_i, \quad ( 4.553 )$$

kde  $v_i$  je vibrační kvantové číslo a  $v_i$  je vibrační frekvence  $i$ -té normální vibrace odpovídající normální souřadnici  $Q_i$ , přičemž

$$f_i = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k_i}{\mu_i}} = \sqrt{\lambda_i}. \quad ( 4.554 )$$

Vibrační vlnové funkce mají tvar

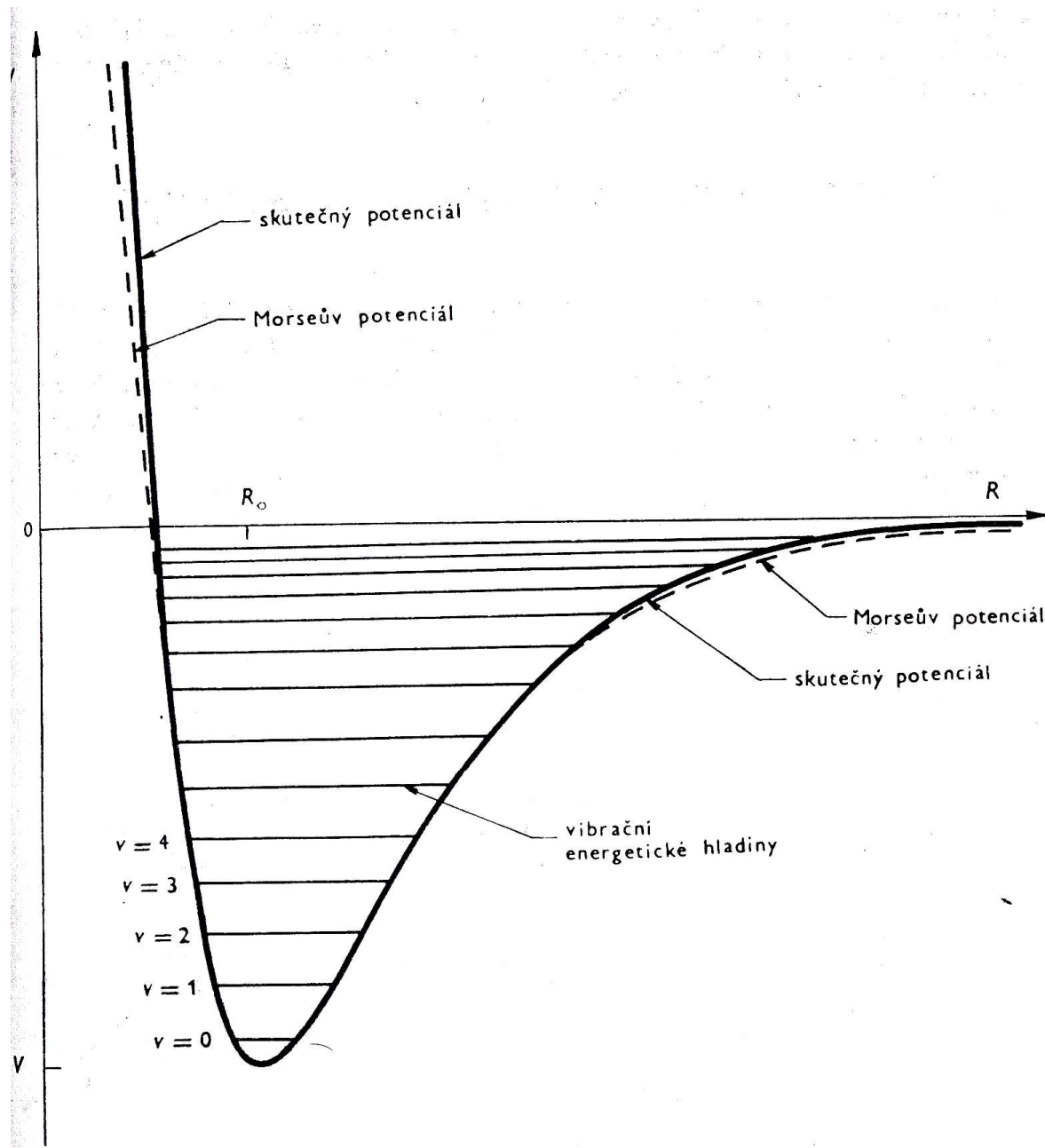
$$\chi_{v_i}^i(\xi_i) = N_{v_i} H_{v_i}(\xi_i) \exp\left(-\frac{1}{2}\xi_i^2\right) \quad \text{kde} \quad \xi_i = \lambda_i^{1/4} Q_i \quad ( 4.555 )$$

kde  $H_{v_i}(\xi_i)$  je Hermitův polynom stupně  $v_i$ .



**Charles Hermite (1822 – 1901)**

Obr. 4.12



### *Vliv spinu na energie elektronových stavů*

Předpokládejme přechod, při němž elektron přejde z výchozího orbitalu  $\varphi_i$  na orbital  $\varphi_j$ . Předpokládejme dále, že výchozí orbital je obsazen dvěma elektrony 1, 2. Spinové části vlnové funkce elektronu značíme  $\alpha(s_z = 1/2)$ ,  $\beta(s_z = -1/2)$ . Slaterův determinant pro základní stav bude



$$\begin{aligned}
 D_{II} &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_I(1)\alpha(1) & \varphi_I(2)\alpha(2) \\ \varphi_I(1)\alpha(1) & \varphi_I(2)\alpha(2) \end{vmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \varphi_I(1)\varphi_I(2) [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)].
 \end{aligned}
 \tag{4.556}$$

Tato vlnová funkce je vlastní funkcí operátoru celkového spinu i operátoru zetové komponenty spinu. Je symetrická vzhledem k výměně elektronů v prostorové části a antisymetrická v části spinové. Celková velikost spinu je rovna nule.

Pro excitovaný stav dostáváme 4 možné Slaterovy determinanty:

$$\begin{aligned}
 D_{IJ}^1 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_I(1)\alpha(1) & \varphi_I(2)\alpha(2) \\ \varphi_J(1)\alpha(1) & \varphi_J(2)\alpha(2) \end{vmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_I(1)\varphi_J(2) - \varphi_J(1)\varphi_I(2)] \alpha(1)\alpha(2),
 \end{aligned}
 \tag{4.557}$$

$$\begin{aligned}
 D_{IJ}^2 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_I(1)\beta(1) & \varphi_I(2)\beta(2) \\ \varphi_J(1)\beta(1) & \varphi_J(2)\beta(2) \end{vmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_I(1)\varphi_J(2) - \varphi_J(1)\varphi_I(2)] \beta(1)\beta(2),
 \end{aligned}
 \tag{4.558}$$

$$\begin{aligned}
 D_{IJ}^3 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_I(1)\alpha(1) & \varphi_I(2)\alpha(2) \\ \varphi_J(1)\beta(1) & \varphi_J(2)\beta(2) \end{vmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_I(1)\varphi_J(2)\alpha(1)\beta(2) - \varphi_J(1)\varphi_I(2)\beta(1)\alpha(2)],
 \end{aligned}
 \tag{4.559}$$

$$\begin{aligned}
 D_{IJ}^4 &= \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{vmatrix} \varphi_I(1)\beta(1) & \varphi_I(2)\beta(2) \\ \varphi_J(1)\alpha(1) & \varphi_J(2)\alpha(2) \end{vmatrix} = \\
 &= \frac{1}{\sqrt{2}} [\varphi_I(1)\varphi_J(2)\beta(1)\alpha(2) - \varphi_J(1)\varphi_I(2)\alpha(1)\beta(2)].
 \end{aligned}
 \tag{4.560}$$

První dva determinanty jsou již vlastními funkcemi operátoru celkového spinu i operátoru projekce celkového spinu do osy  $z$ , takže je můžeme považovat za možné vlnové funkce. Pro druhé dva determinanty to neplatí, ale můžeme snadno sestavit vlastní funkce jejich lineárními kombinacemi:

$$\begin{aligned}\Phi_T(1,2) &= \frac{1}{2}(D_{IJ}^3 + D_{IJ}^4) = \\ &= [\varphi_I(1)\varphi_J(2) - \varphi_J(1)\varphi_I(2)] + [\alpha(1)\beta(2) + \beta(1)\alpha(2)], \\ \Phi_S(1,2) &= \frac{1}{2}(D_{IJ}^3 - D_{IJ}^4) \\ &= [\varphi_I(1)\varphi_J(2) - \varphi_J(1)\varphi_I(2)] + [\alpha(1)\beta(2) - \beta(1)\alpha(2)].\end{aligned}\tag{4.561}$$

Výsledkem jsou tedy 4 možné vlnové funkce.

První tři mají prostorovou část antisymetrickou vůči výměně elektronů a spinovou část symetrickou. Celková hodnota spinu je rovna 1 a projekce spinu do osy  $z$  jsou po řadě +1, -1, 0. Energie odpovídající těmto třem vlnovým funkcím je stejná (viz níže). Jedná se tedy o 3x degenerovanou energetickou hladinu. Při umístění molekuly do magnetického pole se Zeemanovým efektem hladiny rozštěpí podle  $S_z$ , takže dostaneme trojici blízkých hladin. Excitovanému stavu, který lze charakterizovat jednou z těchto tří vlnových funkcí říkáme stav **tripletní**.

Čtvrtá vlnová funkce má prostorovou část symetrickou vůči výměně elektronů a spinovou část antisymetrickou. Celková hodnota spinu je rovna 0. Jedná se o nedegenerovanou energetickou hladinu, která se při umístění molekuly do magnetického pole samozřejmě neštěpí. Excitovanému stavu, který představuje tato vlnová funkce, říkáme stav **singletní**. (Singletní byl i výše uvažovaný základní stav).

Při výpočtu celkové energie excitovaného stavu po přechodu  $I \rightarrow J$  jako diagonálního maticového prvku hamiltoniánu se rozdíl mezi singletním a tripletním stavem může projevit pouze při výpočtu příspěvku elektrostatického odpuzování mezi elektrony 1, 2. Jedná se tedy o porovnání velikostí integrálů přes prostorové souřadnice elektronů 1,2:

$$\Delta E_T = \left\langle \Phi_T(1,2) \left| \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Phi_T(1,2) \right\rangle, \quad (4.562)$$

$$\Delta E_S = \left\langle \Phi_S(1,2) \left| \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \Phi_S(1,2) \right\rangle.$$

Když dosadíme výše uvedený tvar prostorových částí vlnových funkcí, zjistíme, že se v obou případech výsledek skládá ze dvou jednodušších integrálů, a to Coulombického integrálu.

$$C_{IJ} = \left\langle \varphi_I(1)\varphi_J(2) \left| \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \varphi_I(1)\varphi_J(2) \right\rangle = \quad (4.563)$$

$$= \left\langle \varphi_J(1)\varphi_I(2) \left| \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \varphi_J(1)\varphi_I(2) \right\rangle,$$

a výměnného integrálu

$$K_{IJ} = \left\langle \varphi_I(1)\varphi_J(2) \left| \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \varphi_J(1)\varphi_I(2) \right\rangle = \quad (4.564)$$

$$= \left\langle \varphi_J(1)\varphi_I(2) \left| \frac{e^2}{2\pi\epsilon_0 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \right| \varphi_I(1)\varphi_J(2) \right\rangle.$$

Příspěvky k energii jsou

$$\Delta E_T = 2(C_{IJ} - K_{IJ}), \quad (4.565)$$

$$\Delta E_S = 2(C_{IJ} + K_{IJ}).$$

Protože výměnný integrál je kladný, dostáváme závěr, že pokud může molekula při stejném obsazení elektronových orbitalů být v singletním i tripletním stavu, je energie tripletního stavu vždy nižší.

Pokud není základní hladina degenerovaná, jsou orbitály s nejnižší energií většiny molekul (sudý počet elektronů) obsazené

elektronovými páry, takže je tento stav singletní. Výjimkou jsou molekuly s degenerovaným základním stavem, například molekula kyslíku. Její základní elektronový stav je proto tripletní.

### Absorpční přechody

Elektrický dipólový moment přechodu má tvar

$$\mathbf{d}_{12} = \left\langle \Psi_{v_2}^{e_2}(R, r) \left| \hat{\mathbf{d}}(R, r) \right| \Psi_{v_1}^{e_1}(R, r) \right\rangle, \quad (4.566)$$

kde operátor elektrického dipólového momentu lze vyjádřit jako součet elektronového a jaderného členu

$$\hat{\mathbf{d}}(R, r) = \hat{\mathbf{d}}_e(r) + \hat{\mathbf{d}}_n(R) = -e \sum_i \mathbf{r}_i + \sum_{j=1}^{3N-6} Q_j \mathbf{R}_j. \quad (4.567)$$

Vlnové funkce molekuly ve stavu 1 a 2 můžeme v adiabatické aproximaci, odseparování vnějších pohybů a aproximaci malých výchylek jader z rovnovážné polohy vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \Psi_{v_1}^{e_1}(R, r) &= \Phi_R^{e_1}(r) \Theta_{v_1}^{e_1}(Q) = \Phi_R^{e_1}(r) \prod_{j=1}^{3N-6} \vartheta_{v_{1,i}}^{e_{1,i}}(Q_i), \\ \Psi_{v_2}^{e_2}(R, r) &= \Phi_R^{e_2}(r) \Theta_{v_2}^{e_2}(Q) = \Phi_R^{e_2}(r) \prod_{j=1}^{3N-6} \vartheta_{v_{2,i}}^{e_{2,i}}(Q_i), \end{aligned} \quad (4.568)$$

### Vibrační přechody

Při vibračních absorpčních přechodech se nemění elektronový stav, takže  $e_1 = e_2$ ,  $v_1 \neq v_2$ , takže v tomto odstavci elektronový kvantový stav explicitně vyjadřovat. Pro elektrický dipólový moment přechodu nyní máme

$$\mathbf{d}(R, r) = \left\langle \Theta_{v_2}^{e_1}(Q) \left| \hat{\mathbf{D}}(R) \right| \Theta_{v_1}^{e_1}(Q) \right\rangle, \quad (4.569)$$

kde

$$\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}_e(R) + \hat{\mathbf{d}}_n(R) \quad (4.570)$$

a vektor

$$\mathbf{D}_e(R) = \langle \Phi_R(r) | \hat{\mathbf{d}}_e(r) | \Phi_R(r) \rangle \quad (4.571)$$

je elektrický dipólový moment elektronového obalu molekuly při poloze jader  $R$ , přičemž závislost na poloze jader vzniká díky závislosti elektronové vlnové funkce na poloze jader jako parametru. Výraz  $\mathbf{D}(R)$  má význam celkového elektrického dipólového momentu molekuly při poloze jader  $R$ . V souladu s již dříve použitým přístupem dále aplikujeme na tuto veličinu aproximaci malých výchylek z rovnovážné polohy, které vyjádříme pomocí normálních vibračních souřadnic Taylorovým rozvojem

$$\mathbf{D}(R) = \mathbf{D}(R_0) + \sum_{i=1}^{3N-6} \left. \frac{\partial \mathbf{D}(R)}{\partial Q_i} \right|_{R=R_0} Q_i + \dots \quad (4.572)$$

Nultý člen rozvoje k velikosti dipólového momentu přechodu nepřispívá, neboť vede k výrazu

$$\mathbf{D}(R_0) \langle \Theta_{v_2}(Q) | \Theta_{v_1}(Q) \rangle, \quad (4.573)$$

který při integraci přes vibrační souřadnice dává nulu, neboť jde o překryvový integrál vlnových funkcí, které jsou každá různým řešením téže Schrödingerovy rovnice.

Člen rozvoje prvního řádu vede potom na vyjádření dipólového momentu přechodu, který lze při uvážení tvaru vibrační vlnové funkce upravit na tvar

$$\mathbf{d}_{12} = \sum_{i=1}^{3N-6} \left. \frac{\partial \mathbf{D}(R)}{\partial Q_i} \right|_{R=R_0} \langle \vartheta_{v_{2,i}}(Q_i) | Q_i | \vartheta_{v_{1,i}}(Q_i) \rangle \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{3N-6} \langle \vartheta_{v_{2,k}}(Q_k) | \vartheta_{v_{1,k}}(Q_k) \rangle. \quad (4.574)$$

Na konci výrazu jsou součiny jednodimenzionálních vlnových funkcí jednotlivých normálních vibračních módů. Uvážíme-li, že pro daný mód jsou jeho vlnové funkce s různým kvantovým číslem vzájemně ortogonální, dojdeme k prvnímu důležitému závěru pro vibrační absorpční přechody v aproximaci malých výchylek:

***Jsou zakázány všechny vibrační absorpční přechody, kdy se mění současně kvantový stav více než jednoho normálního vibračního módu***

Uvažujme povolený přechod; mód, jehož vibrační stav se mění, označme  $K$ . Potom z vlastností vlnových funkcí jednorozměrného harmonického oscilátoru vyplývá, že dipólový moment přechodu bude

$$\mathbf{d}_{12} = \left. \frac{\partial \mathbf{D}(R)}{\partial Q_K} \right|_{R=R_0} \langle \vartheta_{n_{2,K}}(Q_K) | Q_K | \vartheta_{n_{1,K}}(Q_K) \rangle = \left. \frac{\partial \mathbf{D}(R)}{\partial Q_K} \right|_{R=R_0} \sqrt{\frac{\hbar \left( v_{i,L} + \frac{1}{2} \right)}{4\pi\mu_K f_K}} \quad (4.575)$$

pro  $v_{2,K} = v_{1,K} \pm 1$ . V ostatních případech je dipólový moment přechodu nulový. Konečný závěr tedy zní:

**V přiblížení malých výchylek jader z rovnovážné polohy jsou povoleny pouze takové absorpční vibrační přechody, kdy se u jednoho vibračního módu zvýší kvantové číslo o jedničku a kvantový stav ostatních módů zůstane zachován. Tyto přechody se nazývají FUNDAMENTÁLNÍ.**

Rezonanční optická frekvence pro fundamentální vibrační přechod tedy činí

$$\begin{aligned}
 f_{12} &= \frac{E_2 - E_1}{h} = f_K \left[ \left( v_{2,K} + \frac{1}{2} \right) - \left( v_{1,K} + \frac{1}{2} - 1 \right) \right] = \\
 &= f_K \left[ \left( v + \frac{1}{2} \right) - \left( v + \frac{1}{2} - 1 \right) \right] = f_K.
 \end{aligned}
 \tag{4.576}$$

Intenzita absorpčního přechodu odpovídá změně dipólového momentu molekuly při pohybu jader v příslušném normálním vibračním módu.

### *Vibračně rotační přechody*

Jak jsme ukázali v předchozím odstavci, v aproximaci harmonického oscilátoru je výběrové pravidlo pro přechody mezi vibračními stavy  $\Delta v = \pm 1$ . Toto pravidlo vyplývá z toho, že dipól oscilující na frekvenci  $f_K$ , může absorbovat nebo emitovat jen elektromagnetické záření téže frekvence a energie  $hf_K$ . Takový dipól pak může naráz absorbovat i emitovat pouze toto kvantum energie, takže změna jeho energie bude

$$\Delta E = hf_K \left[ \left( v + \frac{1}{2} \right) - \left( v + \frac{1}{2} - 1 \right) \right].
 \tag{4.577}$$

Výběrové pravidlo tak zní

$$\Delta v = \pm 1.
 \tag{4.578}$$

Výběrové pravidlo pro harmonický oscilátor se formálně získá výpočtem integrálu

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_n^* x \psi_m dx,
 \tag{4.579}$$

kde  $\psi_n$  a  $\psi_m$  jsou vlnové funkce stavů  $n$  a  $m$  harmonického oscilátoru. Pravděpodobnost přechodu oscilátoru ze stavu  $n$  do stavu  $m$  je přitom přímo úměrná čtverci absolutní hodnoty tohoto integrálu, jehož hodnota je nulová s výjimkou přechodů  $m = n \pm 1$ .

Výběrová pravidla pro anharmonický oscilátor jsou

$$\Delta v = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (4.580)$$

Nicméně, čím větší je změna kvantového čísla, tím menší je pravděpodobnost příslušného přechodu, takže v praxi jsou přechody (4.578) daleko nejpravděpodobnější.

Protože je

$$hf_K > kT, \quad (4.581)$$

je ve vzorku při pokojové teplotě jen málo molekul v excitovaných vibračních stavech. Proto jsou zřetelné jen přechody ze stavu  $v = 0$  do stavu  $v = 1$ . Přechody do vyšších stavů jsou mnohem řidší a vedou k mnohem slabším absorpčním čárám.

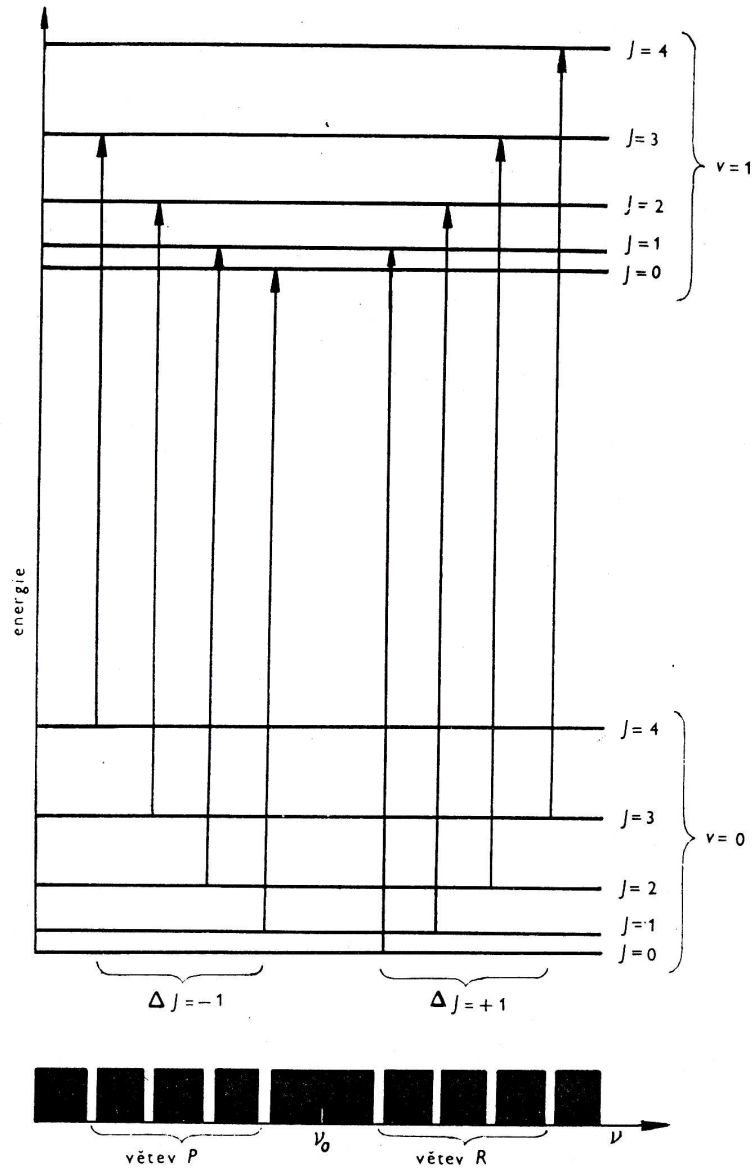
U rotujících molekul můžeme v první aproximaci považovat kmity a rotace molekuly za navzájem nezávislé a rovněž zanedbáváme vliv enharmonických členů a odstředivé deformace. Za těchto okolností jsou energetické hladiny dvouatomové molekuly dány prostým součtem vibrační a rotační energie

$$E_{v,l} = \hbar \left( v + \frac{1}{2} \right) \sqrt{\frac{k}{\mu} + \frac{\hbar^2}{2J} l(l+1)}. \quad (4.582)$$

Na obr. 4.13 vidíme rotační hladiny dvouatomové molekuly pro vibrační stavy  $v = 0$  a  $v = 1$  spolu s absorpčními spektrálními čarami, jež jsou v souladu s výběrovými pravidly  $\Delta v = +1$ ,  $\Delta l = \pm 1$ .



Obr. 4.13



Přechody  $\nu = 0 \rightarrow \nu = 1$  jsou dvojího druhu a dělí se na větev  $P$ , kde  $\Delta l = -1$  a větev  $R$ , kde  $\Delta l = +1$ . Na základě ( 4.582 ) jsou kmitočty spektrálních čar v těchto větvích dány vztahy

$$f_P = E_{1,l-1} - E_{0,l} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} + \frac{\hbar}{4\pi J} [l(l-1) - l(l+1)] = f_0 - \frac{\hbar}{2\pi J} l,$$

$$f_R = E_{1,l+1} - E_{0,l} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} + \frac{\hbar}{4\pi J} [l(l+1)(l+2) - l(l+1)] =$$

$$= f_0 + (l+1) \frac{\hbar}{2\pi J} l, \quad l = 0, 1, 2, \dots$$

( 4.583 )

Vzdálenost sousedních čar v obou větvích je

$$\Delta f = \frac{\hbar}{2\pi J} . \quad ( 4.584 )$$

Moment setrvačnosti molekuly lze tudíž stanovit z jejího infračerveného vibračně rotačního spektra i z jejího čistě rotačního spektra v mikrovlnné oblasti.

U víceatomových molekul mohou navíc nastávat i příčné kmity, na jejichž základě se výběrové pravidlo pro orbitální kvantové číslo mění na

$$\Delta l = 0, \pm 1, \quad ( 4.585 )$$

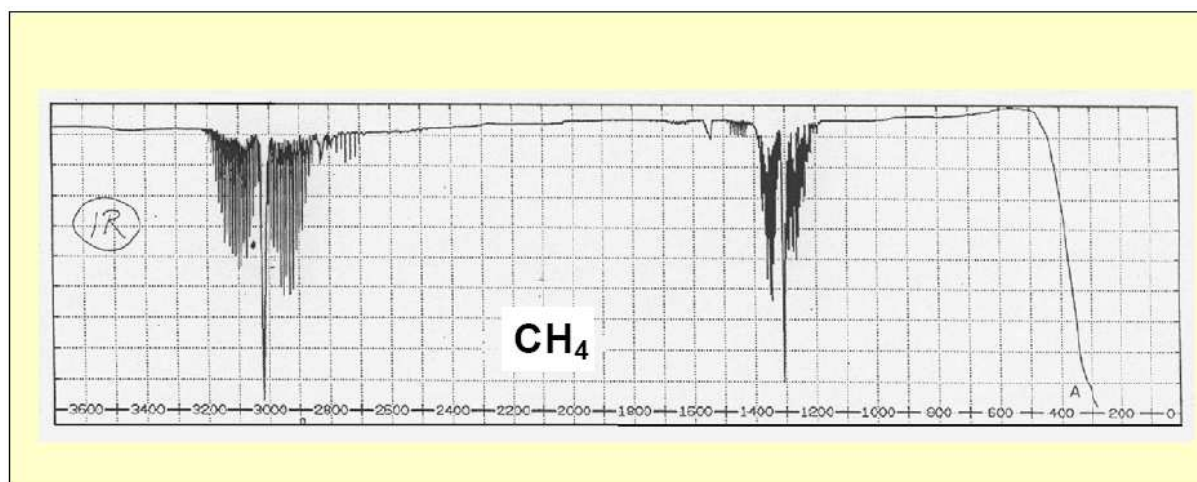
což značí, že vibrační přechody mohou nastat i bez současného rotačního přechodu. Nyní tedy bude existovat čára  $\nu = \nu_0$ , která se nazývá větev  $Q$ . Ta je velmi intenzivní, neboť k ní mohou přispívat všechny obsazené hladiny  $l$  přechodem  $\Delta l = 0$ .

Molekuly tvaru symetrického setrvačnicku mají též dvojí výběrová pravidla pro vibračně rotační přechody. Výběrová pravidla platná pro **rovnoběžné kmity**, to jest pro vibrace, které vedou k oscilujícím dipólovým momentům rovnoběžným s osou symetrie, jsou  $\Delta \nu = \pm 1, \Delta l = 0, \pm 1, \Delta M = 0$ , kde  $M$  je magnetické kvantové číslo

$$L_z = \hbar M . \quad ( 4.586 )$$

Tato spektra tedy připomínají odpovídající ortogonálním kmitům lineární molekuly. Výběrová pravidla pro ortogonální kmity molekuly tvaru symetrického setrvačnicku však budou

$\Delta \nu = \pm 1, \Delta l = 0, \pm 1, \Delta M = \pm 1$  následkem čehož může mít větev  $Q$  čáry na obě strany od  $\nu_0$  a objevuje se zde mnoho skupin čar větví  $P$  a  $R$  tak těsně u sebe, že mohou být navzájem nerozlišitelné – viz obr. 4.14.



Obr. 4.14: Křídla satelitních pásů vibračně – rotačních přechodů

### *Elektronové přechody*

Při elektronových přechodech se mění elektronový stav a obecně i vibrační stav molekuly, takže  $e_1 \neq e_2$ ,  $v_1 \neq v_2$ . Při výpočtu dipólového momentu přechodu ( 4.566 ) je zřejmé, že operátor dipólového momentu jader se nyní neuplatňuje, neboť nezávisí na elektronových souřadnicích, což vede k překryvovému integrálu dvou vzájemně ortogonálních elektronových funkcí. Bude tedy

$$\mathbf{d}_{12} = \left\langle \Theta_{v_2}^{e_2}(Q) \left| \mathbf{D}_{e_1, e_2}(R) \right| \Theta_{v_1}^{e_1}(Q) \right\rangle, \quad (4.587)$$

kde vektor

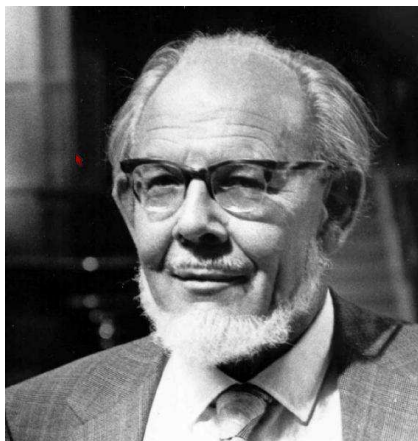
$$\mathbf{D}_{e_1, e_2}(R) = \left\langle \Phi_R^{e_2}(r) \left| \hat{\mathbf{d}}_e(r) \right| \Phi_R^{e_1}(r) \right\rangle \quad (4.588)$$

je dipólový moment elektronového přechodu  $e_1 \rightarrow e_2$ .

V dalším postupu opět v přiblížení malých výchylek jader z rovnovážných poloh provedeme rozvoj této veličiny podle normálních vibračních souřadnic

$$\mathbf{D}_{e_1, e_2}(R) = \mathbf{D}_{e_1, e_2}(R_0) + \sum_{i=1}^{3N-6} \left. \frac{\partial \mathbf{D}_{e_1, e_2}(R)}{\partial Q_i} \right|_{R=R_0} Q_i + \dots \quad (4.589)$$

Na rozdíl od vibračních přechodů je příspěvek nultého členu obecně nenulový (přinejmenším v případě tzv. čistě-elektronového přechodu, kdy  $\nu_1 = \nu_2$ ) a jako příspěvek pocházející z nejnižšího řádu aproximace je dominantní. Pokud zanedbáme vyšší členy rozvoje, jedná se o tzv. **Franck-Condonovu aproximaci**.



Sir Frederick Charles Frank (1911 – 1998)

Pro konkrétní elektronově-vibrační přechod bude potom

$$\mathbf{d}_{12} = \mathbf{D}_{e_1, e_2}(R_0) \langle \Theta_{\nu_2}^{e_2}(Q) | \Theta_{\nu_1}^{e_1}(Q) \rangle. \quad (4.590)$$

To znamená, že všechny (Franck-Condonovy) elektronově-vibrační přechody mají stejný směr dipólového momentu přechodu.

### *Výběrová pravidla pro elektronové přechody*

Budeme-li chtít určit celkovou pravděpodobnost elektronového přechodu (bez ohledu na to, jak se mění vibrační stav molekuly), bude tato veličina

$$\frac{dP_{e_1, e_2}}{dt} \approx \sum_{\forall n_2} (\mathbf{e} \cdot \mathbf{d}_{12})^2 = (\mathbf{e} \cdot \mathbf{D}_{e_1, e_2}(R_0))^2 \sum_{\forall n_2} \langle \Theta_{\nu_2}^{e_2}(Q) | \Theta_{\nu_1}^{e_1}(Q) \rangle^2. \quad (4.591)$$

Jednotlivé členy sumace můžeme chápat jako kvadráty projekce vibrační vlnové funkce  $\Theta_{n_1}^{e_1}(Q)$  do jednotlivých prvků báze tvořené vibračními vlnovými funkcemi elektronového stavu  $e_2$ . Jako řešení

Schrödingerovy rovnice tvoří tyto funkce úplný systém, a proto musí být celková suma přes něj rovna

$$\sum_{\forall n_2} \langle \Theta_{v_2}^{e_2}(Q) | \Theta_{v_1}^{e_1}(Q) \rangle^2 = \langle \Theta_{v_2}^{e_2}(Q) | \Theta_{v_1}^{e_1}(Q) \rangle^2 = 1. \quad (4.592)$$

Je tedy

$$\frac{dP_{e_1, e_2}}{dt} \approx (\mathbf{e} \cdot \mathbf{D}_{e_1, e_2}(R_0))^2. \quad (4.593)$$

Nyní můžeme formulovat výběrová pravidla pro elektronové přechody, seřazená sestupně podle supně zákazu (nulovost  $\mathbf{D}_{e_1, e_2}(R_0)$ ):

- **spinový zákaz:** zakázané přechody mezi elektronovými stavy s různým spinem (například zákaz singlet-tripletních přechodů)
- **symetrický zákaz:** zakázané přechody, kdy součin elektronových vlnových funkcí počátečního a konečného elektronového stavu nemá symetrii ani jedné ze složek polohového vektoru (například u molekuly se středem symetrie nesmí mít vlnová funkce počátečního a konečného stavu stejnou symetrii vůči středu symetrie)
- **překryvový zákaz:** zakázané elektronové přechody, kdy elektron přechází mezi molekulovými orbitály, které mají nulový překryv (například  $n-\pi^*$  přechody jsou velmi slabé)

### Vliv mezimolekulárních interakcí na elektronové stavy

Elektronové přechody významné pro běžnou elektronovou spektroskopii se týkají vnější části elektronového obalu molekuly, který je silně ovlivňován mezimolekulárními interakcemi v kondenzovaných fázích (případně interakcemi mezi různými částmi makromolekul).

U molekul v roztoku vede interakce s molekulami rozpouštědla ke snížení energetických hladin. Z hlediska spektroskopie je důležitý

rozdíl tohoto poklesu mezi různými elektronovými stavy molekuly. U polárních rozpouštědel záleží v případě malých molekul na tom, zda se při excitaci zvýší nebo sníží polarita molekuly. Při snížení je efekt rozpouštědla na excitovaný stav menší, a proto dojde ke zvýšení energetického rozdílu hladin (*hypsochromní* neboli *modrý posun* ve spektru). V opačném případě dojde ke snížení (*batochromní* neboli *červený posun* ve spektru). U větších molekul s nerovnoměrně rozloženým nábojem (všechny relativně dobře rozpustné molekuly) se vždy molekuly rozpouštědla zorientují v jejím okolí energeticky nejvýhodnějším způsobem. Při excitaci do vyššího elektronového stavu se tedy snižuje výhodnost uspořádání okolí, protože optický přechod je velmi rychlý. Absorpce má tedy modrý posun. Pak následuje relaxace okolí a snížení energie elektronového stavu. Při emisním přechodu jde naopak o přechod z energeticky relaxovaného okolí do méně výhodného uspořádání při nižším stavu – červený posun.

### *Elektronově – vibrační (vibronické) přechody*

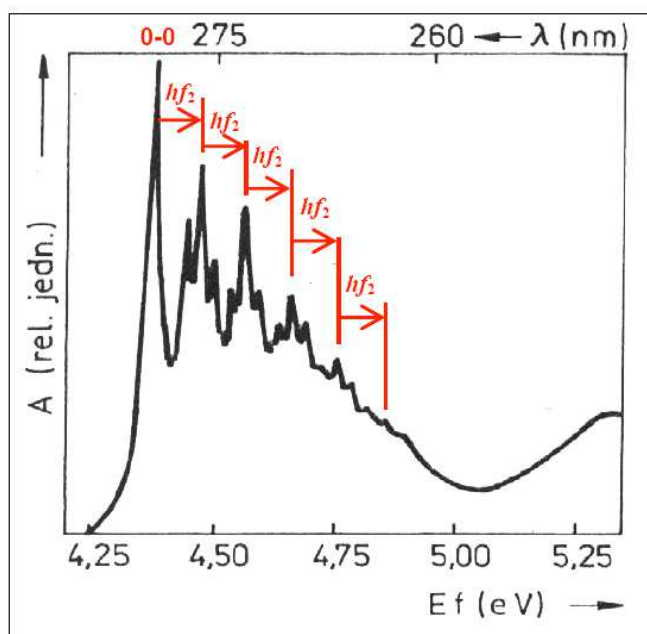
Jednotlivé elektronově – vibrační přechody mají rezonanční frekvence

$$f_{12} = \frac{E_2 - E_1}{h} = \frac{[E_{e_2}(R_0) - E_{e_1}(R_0)] + h \left[ \sum_{i=1}^{3N-6} f_i^{e_2} \left( v_{2,i} + \frac{1}{2} \right) - \sum_{i=1}^{3N-6} f_i^{e_1} \left( v_{1,i} + \frac{1}{2} \right) \right]}{h}. \quad (4.594)$$

Tvoří se tedy absorpční spektrum v podobě čistě-elektronového přechodu a systému vibračních satelitů na vysokofrekvenční straně (předpokládáme, že vesměs dochází k přechodům ze základního vibračního stavu molekuly). Vibronická struktura závisí na Condonově integrálu

$$\langle \Theta_{v_2}^{e_2}(Q) | \Theta_{v_1}^{e_1}(Q) \rangle = \prod_{i=1}^{3N-6} \langle \vartheta_{v_{2,i}}^{e_{2,i}}(Q_i) | \vartheta_{v_{1,i}}^{e_{1,i}}(Q_i) \rangle. \quad (4.595)$$

Pro  $n_1 \neq n_2$  nemusí být tento integrál nulový, protože se nejedná o vlnové funkce téže Schrödingerovy rovnice. I při harmonické aproximaci se mohou vibrační módy v různých elektronových stavech lišit - jednak frekvencí, jednak posunem rovnovážné hodnoty vibrační souřadnice (ve stavu  $e_2$  není rovnovážná poloha jader při  $\zeta = 0$ , ale  $\zeta = \Delta\zeta^0$ ). Je zřejmé, že díky součinu překryvových integrálů se mohou kombinovat vibrační přechody několika módů současně, přičemž relativní pravděpodobnost kombinačního přechodu (v poměru vůči čistě-elektronovému přechodu) je součinem relativních pravděpodobností jednoduchých přechodů.



Obr. 4.15: Příklad elektronově-vibračního spektra: CYTOSIN (monokrystal hydrátu), teplota 78K. Dominantní posloupnost dýchací vibrace s frekvencí  $f_2$

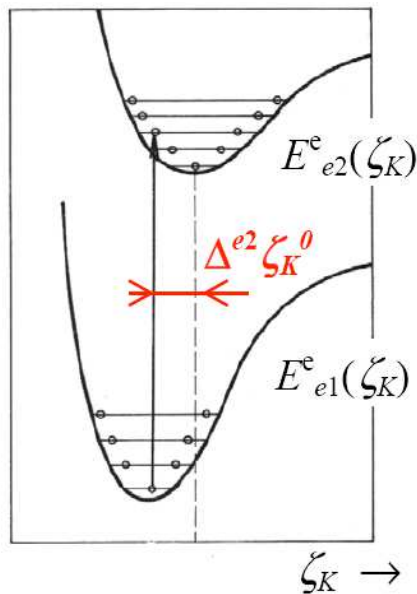
Velikosti překryvových integrálů pro jednotlivý mód při znalosti posunu rovnovážné hodnoty vibrační souřadnice a posunu frekvence (způsobené daným elektronovým přechodem) jsou analyticky vyjádřitelné. Pro jednoduchost probereme jen dva speciální případy pro elektronově-vibrační přechod v jediném (K-tém) módu, přičemž budeme uvažovat pouze základní počáteční vibrační stav:

1) - nemění se frekvence

$$\langle \vartheta_u^{e_2, K} (Q_K) | \vartheta_0^{e_1, K} (Q_K) \rangle = \frac{\gamma^u}{\sqrt{u!}} \exp\left(-\frac{\gamma^2}{2}\right), \quad \gamma = |\Delta^{e_2} Q_K^0| \pi \sqrt{\frac{\mu_K f_K}{h}}. \quad (4.596)$$

Podle velikosti posunu rovnovážné hodnoty souřadnice je posloupnost klesající, nebo zpočátku rostoucí a posléze klesající.

Obr. 4.16



Nejpravděpodobnější vibrační excitace je pro tento případ ukázána na obr. 4.16.

2) Nemění se rovnovážná hodnota vibrační souřadnice

$$\langle \vartheta_u^{e_2, K} (Q_K) | \vartheta_0^{e_1, K} (Q_K) \rangle = \sigma^u \sqrt{\frac{u!}{2^u \left(\frac{u}{2}!\right)^2}} \sqrt[4]{1 - \sigma^2}, \quad \sigma = \frac{f_K^{e_2} - f_K^{e_1}}{f_K^{e_1}} \quad (4.597)$$

U neúplně symetrických vibrací může nastat jen tento případ. Pro lichá  $u$  je překryvový integrál nulový.

Aproximace, kdy se započítává člen prvního řádu v rozvoji dipólového momentu elektronového přechodu (tzv. **Herzberg-**



**Tellerova aproximace**) se uplatňuje především tehdy, jestliže ve Franck-Condonově přiblížení nejsou elektronově-vibrační přechody povoleny (elektronový přechod nemění geometrii ani efektivní silové pole mezi jádry), případně je v F-C přiblížení zakázán samotný elektronový přechod.

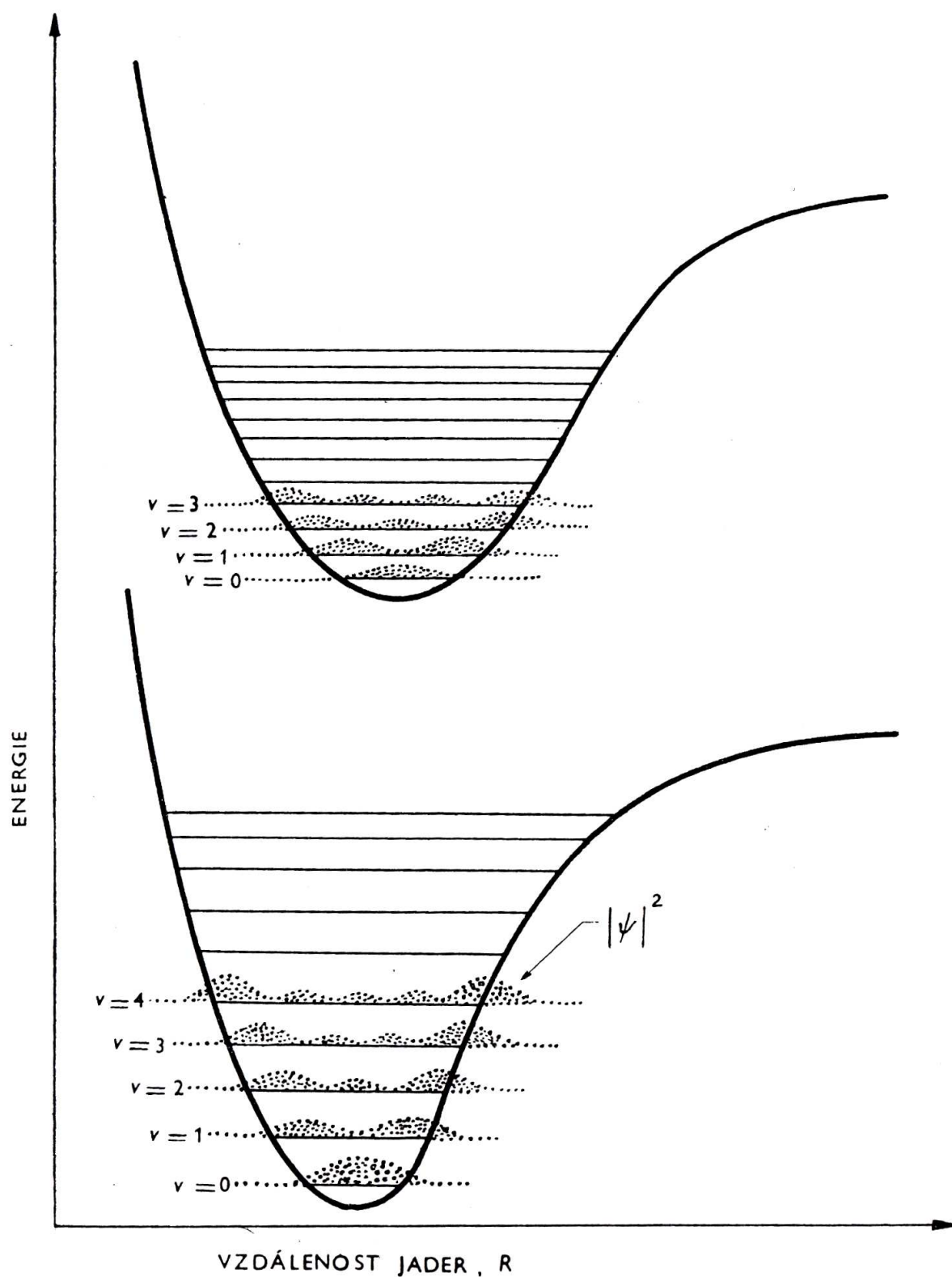
Vzájemná vzdálenost elektronových přechodů je mnohem větší než vzdálenost sousedních rotačních a vibračních hladin. Elektronové přechody jsou proto provázeny zářením ve viditelné a ultrafialové části spektra, kde každý přechod se jeví jako série těsně u sebe položených čar (pás), vznikající vlivem přítomnosti různých rotačních a vibračních stavů molekuly v každém elektronovém stavu.

Elektronová spektra se vyskytují u všech molekul, poněvadž změna v elektronové konfiguraci molekuly je vždy provázena změnou dipólového momentu. Elektronové přechody nastávají ve zlomku času ve srovnání s periodou vibračních či rotačních cyklů molekuly.

Takový přechod je ve skutečnosti tak rychlý, že během něho můžeme považovat mezijaderné vzdálenosti za neměnné, což je pravý význam Franckova – Condonova principu.

Obr. 4.17 ukazuje křivky potenciální energie v závislosti na mezijaderné vzdálenosti pro elektronový základní a první excitovaný stav v typické dvouatomové molekule spolu s vibračními energetickými hladinami pro každý stav.

Obr. 4.17:

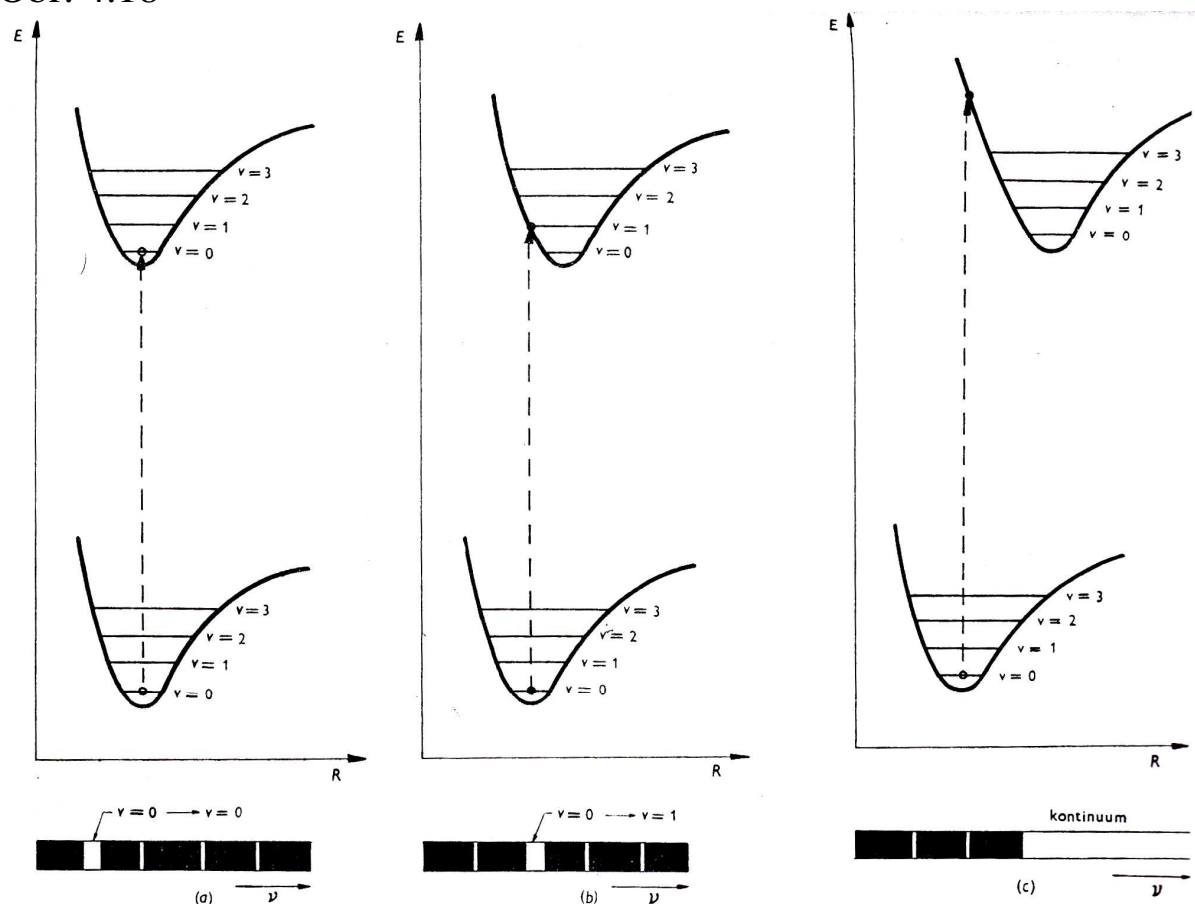


Na těchto vibračních hladinách jsou vždy znázorněny odpovídající hustoty pravděpodobnosti pro harmonický oscilátor. Čím vyšší je tato hustota při daném  $R$  na vibrační hladině, tím větší je pravděpodobnost

výskytu jader v této vzájemné vzdálenosti. Na hladinách  $\nu = 0$  je  $|\psi|^2$  maximální uprostřed rozsahu pohybu. Pro vyšší vibrační hladiny to bude naopak v krajních polohách pohybu jader.

Obecně jsou favorizovány elektronové přechody ze stavu o vysoké pravděpodobnosti opět do stavů s vysokou pravděpodobností. Takže při  $\nu = 0$  nastává elektronový přechod nejpravděpodobněji v rovnovážné poloze jader, pro  $\nu > 0$  naopak v krajních polohách. Na obr. 4.18 vidíme 3 možné případy: v části *a* jsou mezijaderné vzdálenosti v obou elektronových stavech stejné, v *b* je střední vzdálenost v excitovaném stavu o něco vyšší a v *c* je v excitovaném stavu vzdálenost jader ještě vyšší.

Obr. 4.18



Je-li molekula ve svém základním stavu, je nejpravděpodobnější hodnota vyznačena plnou tečkou na nejnižší vibrační hladině. Podle Franckova – Condonova principu se během přechodu nemění mezijaderná vzdálenost  $R$ , takže přechody znázorňují svislé čáry. V případě *a* je tak favorizován přechod na hladinu  $\nu = 0$  horního

(excitovaného) stavu, neboť takovýto přechod spojuje konfigurace s vysokou pravděpodobností. V případě *b* je nyní favorizován přechod na hladinu  $\nu = 1$  horního stavu, protože  $|\psi|^2$  je maximální v krajních polohách pohybu jader na vyšších vibračních hladinách. V případě *c* svislá čára přechodu protíná horní křivku potenciální energie v bodě, kde již nejsou možné žádné vázané stavy, takže pravděpodobně dojde k disociaci molekuly. Přechody do vázaných stavů mohou nastat s menší pravděpodobností, takže spektrum tvoří několik slabých čar a kontinuum bez čárové struktury.

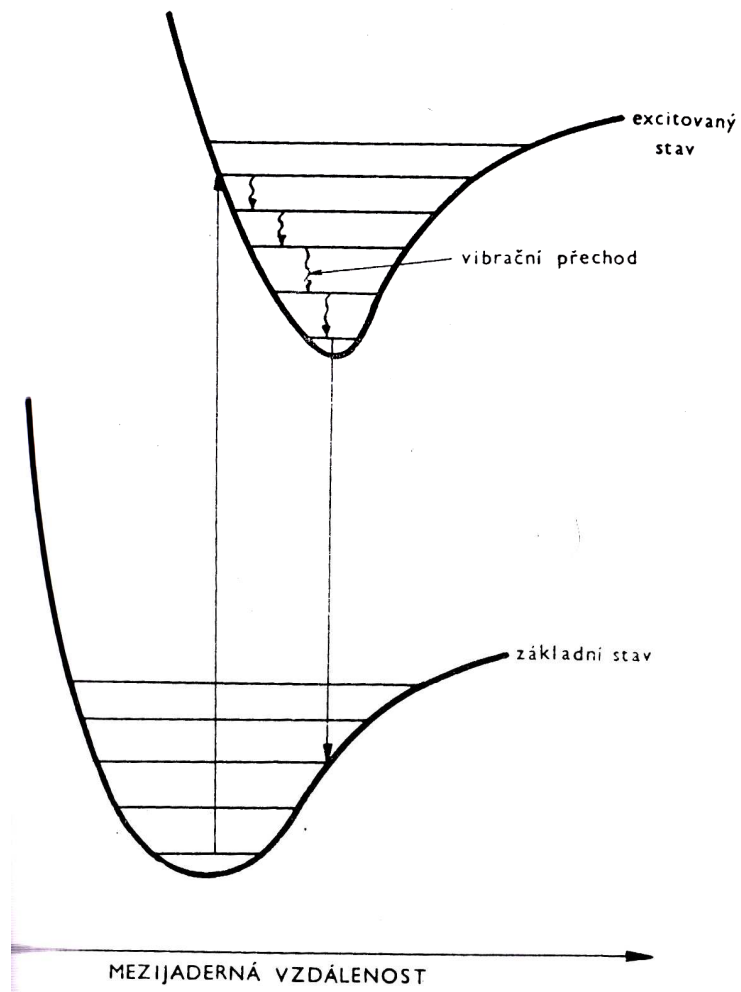
### Emisní spektra – luminiscence molekul

Molekula v excitovaném elektronovém stavu může ztratit energii a vrátit se do svého základního stavu různými způsoby. Může samozřejmě emitovat foton na stejné frekvenci jakou měl excitační foton a vrátit se tak jediným procesem zpět do základního stavu. Často však dříve, než se tak stane, přejdá molekula část svojí energie nezářivým přechodem jiným molekulám, s nimiž mezi tím stihne zainteragovat. Zářivý přechod směrem dolů pak nastane z nižší energetické hladiny excitovaného elektronového stavu a emitované záření má pak nižší frekvenci než byla frekvence absorbovaného excitačního fotonu. Doba, po níž dojde k zářivé deexcitaci molekuly je velmi krátká a pohybuje se typicky od  $10^{-8}$  s do  $10^{-6}$  s. K emisi záření na nižší frekvenci tedy prakticky dochází pouze po dobu trvání excitace. Tento jev se nazývá **fluorescence**.



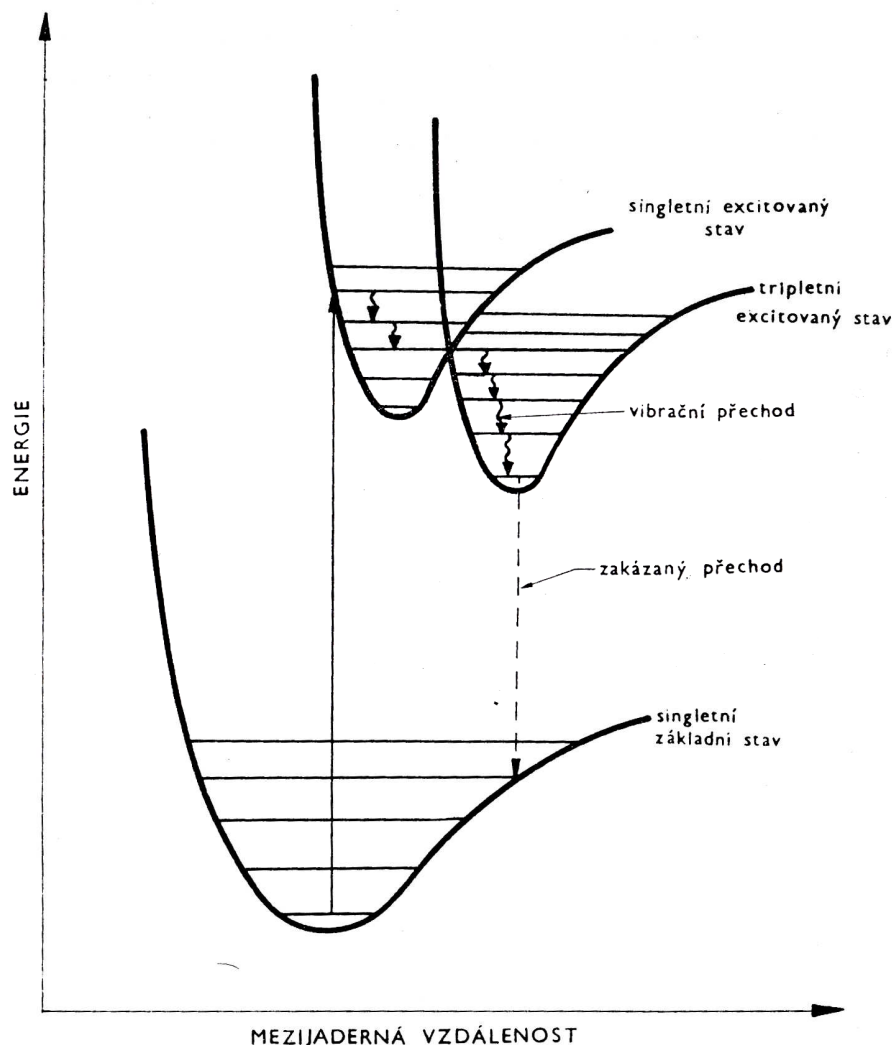
Alexander Jablonski  
(1898-1980)

Obr. 4.19



Obr. 4.20 Znázorňuje případ, kdy molekula v singletním základním stavu absorbuje foton a přejde do vyššího singletního stavu. Při interakci s okolními molekulami však může opět dojít k nezářivým přechodům na nižší vibrační hladiny. Pokud má náhodou jedna z nich energii přibližně stejnou, jako některá z hladin v tripletním excitovaném stavu, pak existuje jistá nenulová pravděpodobnost, že molekula samovolně přejde do tripletního stavu. Další srážky v tripletním stavu přivedou molekulu pod energii průsečíku, takže je nyní zachycena v tripletním stavu, odkud nakonec dospěje na hladinu  $v = 0$ . Zářivý přechod z tripletního do singletního stavu je spinově zakázaný, takže k němu dochází jen s velmi malou pravděpodobností. Takové přechody proto mohou nastat až za značně dlouhou dobu po excitaci a výsledné záření může být emitováno po dobu minut nebo i hodin po excitaci. Tento jev se nazývá **fosforescence**.

Obr. 4.20



## Klasická teorie Ramanova rozptylu

Ačkoliv klasická teorie nedokáže vysvětlit všechny aspekty Rayleighova a Ramanova rozptylu, nevystihuje kvantování energetických stavů molekul a jejich interakcí a nedovede vysvětlit např. rozdíl intenzit Stokesovy a anti-Stokesovy oblasti, dokáže uspokojivě vysvětlit především frekvenční závislost a částečně i výběrová pravidla.

Jak v klasickém, tak i v kvantově-mechanickém přístupu jsou za původce rozptýleného záření považovány oscilující elektrické a magnetické multipólové momenty indukované v molekule elektromagnetickým polem dopadajících světelných vln. Běžně je nejdůležitějším multipólovým zdrojem oscilující elektrický dipól. Oscilující magnetický dipól a elektrický kvadrupól jsou dalšími nejdůležitějšími zdroji v řadě, ale velikost jejich příspěvku je typicky o několik řádů menší ve srovnání s oscilujícím elektrickým dipólem. Proto se zde omezíme pouze na oscilující indukovaný elektrický dipól jako zdroj rozptýleného záření.

### *Indukované oscilující elektrické dipóly jako zdroje rozptýleného záření*

Ačkoliv klasická teorie nedokáže vysvětlit všechny aspekty Rayleighova a Ramanova rozptylu, nevystihuje kvantování energetických stavů molekul a jejich interakcí a nedovede vysvětlit např. rozdíl intenzit Stokesovy a anti-Stokesovy oblasti, dokáže uspokojivě vysvětlit především frekvenční závislost a částečně i výběrová pravidla.

Jak v klasickém, tak i v kvantově-mechanickém přístupu jsou za původce rozptýleného záření považovány oscilující elektrické a magnetické multipólové momenty indukované v molekule elektromagnetickým polem dopadajících světelných vln. Běžně je nejdůležitějším multipólovým zdrojem oscilující elektrický dipól. Oscilující magnetický dipól a elektrický kvadrupól jsou dalšími nejdůležitějšími zdroji v řadě, ale velikost jejich příspěvku je typicky o několik řádů menší ve srovnání s oscilujícím elektrickým dipólem. Proto se zde omezíme pouze na oscilující indukovaný elektrický dipól jako zdroj rozptýleného záření.

Elektrický dipól, sestávající z dvojice bodových nábojů  $-q$  a  $+q$  vzdálených od sebe  $R$ , je charakterizován dipólovým momentem  $\mathbf{d}$  definovaným jako

$$\mathbf{d} = q\mathbf{R} \quad (4.598)$$

kde  $\mathbf{R}$  je vektor mířící od  $-q$  k  $+q$ . Jestliže takový dipól kmitá

s frekvencí  $\nu = \frac{\omega}{2\pi}$  nebo vlnočtu  $\bar{\nu} = \frac{\nu}{c}$ , potom emituje

elektromagnetické záření o stejné frekvenci.

Mějme elektrický dipól v počátku soustavy souřadné, který kmitá ve směru osy  $z$ .

V tzv. vlnové zóně, tj. při splnění podmínky  $r \gg \lambda$  (kde je vzdálenost bodu, ve kterém vyšetřujeme pole generované kmitajícím dipólem od počátku, a  $\lambda$  je vlnová délka) bude pro intenzitu elektrické a magnetické komponenty pole generovaného dipólem platit

$$\begin{aligned} \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) &= \frac{\mu_0 q}{4\pi r} \left[ \ddot{\mathbf{R}} \left( t - \frac{r}{c} \right) \times \mathbf{s} \right] \times \mathbf{s} \\ \mathbf{H}(\mathbf{r}, t) &= \frac{q}{4\pi cr} \left[ \ddot{\mathbf{R}} \left( t - \frac{r}{c} \right) \times \mathbf{s} \right] \end{aligned} \quad (4.599)$$

kde

$$\mathbf{s} = \frac{\mathbf{r}}{r} \quad (4.600)$$

je jednotkový vektor definující směr šíření.

Poyntingův vektor potom můžeme vyjádřit jako

$$\mathbf{S} = \mathbf{E} \times \mathbf{H} = \mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \frac{\mu_0 q^2}{16\pi^2 cr^2} \left[ \ddot{\mathbf{R}} \left( t - \frac{r}{c} \right) \times \mathbf{s} \right]^2 \cdot \mathbf{s}. \quad (4.601)$$

Jestliže



$$\mathbf{R} = (0, 0, Z_0 \cos \omega t), \quad (4.602)$$

potom

$$\mathbf{E} = \frac{\mu_0 q}{4\pi r} \begin{pmatrix} -\omega^2 Z_0 \cos \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) s_x s_z \\ -\omega^2 Z_0 \cos \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) s_y s_z \\ \omega^2 Z_0 \cos \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) (s_x^2 + s_y^2) \end{pmatrix} \quad (4.603)$$

a

$$\begin{aligned} E^2 = \mathbf{E}\mathbf{E} &= \left( \frac{\mu_0 q}{4\pi r} \right)^2 \left[ \omega^2 Z_0 \cos \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right]^2 \left( s_x^2 s_z^2 + s_y^2 s_z^2 + (s_x^2 + s_y^2)^2 \right) = \\ &= \left( \frac{\mu_0 q}{4\pi r} \right)^2 \left[ \omega^2 Z_0 \cos \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right]^2 (s_x^2 + s_y^2 + s_z^2) (s_x^2 + s_y^2) = \\ &= \left( \frac{\mu_0 q}{4\pi r} \right)^2 \left[ \omega^2 Z_0 \cos \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right]^2 (s_x^2 + s_y^2) \end{aligned} \quad (4.604)$$

V polárních souřadnicích  $(r, \varphi, \vartheta)$  můžeme jednotkový vektor  $\mathbf{s}$  vyjádřit jako

$$\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z) = (\cos \varphi \sin \vartheta; \sin \varphi \sin \vartheta; \cos \vartheta). \quad (4.605)$$

Potom

$$(s_x^2 + s_y^2) = (\cos^2 \varphi + \sin^2 \varphi) \sin^2 \vartheta = \sin^2 \vartheta \quad (4.606)$$

a

$$E = \frac{\mu_0 q Z_0 \omega^2}{4\pi r} \sin \vartheta \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] = \frac{\mu_0 p_0 \omega^2}{4\pi r} \sin \vartheta \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] \quad (4.607)$$

kde  $p_0 = qZ_0$  je amplituda dipólového momentu.

S užitím vztahů pro vlnové číslo a rychlost šíření elektromagnetického záření

$$k \equiv \frac{2\pi}{\lambda}, \quad (4.608)$$

$$c = \frac{1}{\sqrt{\epsilon_0 \mu_0}},$$

potom dostáváme

$$E = \frac{p_0 k^2 \sin \vartheta}{4\pi \epsilon_0 r} \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] = E_0 \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right], \quad (4.609)$$

kde  $E_0$  je velikost amplitudy intenzity elektrického pole oscilujícího dipólu

$$E_0 = \frac{p_0 k^2 \sin \vartheta}{4\pi \epsilon_0 r}. \quad (4.610)$$

Analogicky pro vektor  $\mathbf{H}$ :

$$\mathbf{H}(\mathbf{r}, t) = \frac{q}{4\pi cr} \left( \omega^2 Z_0 \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] s_y; -\omega^2 Z_0 \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] s_x; 0 \right), \quad (4.611)$$

$$\begin{aligned}
H^2 &= \left\{ \frac{q\omega^2 Z_0}{4\pi cr} \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] \right\}^2 (s_x^2 + s_y^2) = \\
&= \left\{ \frac{p_0 \omega^2}{4\pi cr} \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] \right\}^2 \sin^2 \vartheta,
\end{aligned} \tag{4.612}$$

$$\begin{aligned}
H &= \frac{p_0 \omega^2}{4\pi c} \frac{\sin \vartheta}{r} \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] = \frac{p_0 k^2 c}{4\pi} \frac{\sin \vartheta}{r} \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] = \\
&= H_0 \cos \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right],
\end{aligned} \tag{4.613}$$

kde  $H_0$  je velikost amplitudy intenzity magnetického pole oscilujícího dipólu

$$H_0 = \frac{p_0 k^2 c}{4\pi} \frac{\sin \vartheta}{r}. \tag{4.614}$$

Pro Poyntingův vektor udávající hustotu toku energie potom dostáváme

$$\begin{aligned}
\mathbf{S} &= \mathbf{E} \times \mathbf{H} = \frac{\mu_0 p_0^2 \omega^4}{16\pi^2 cr^2} \cos^2 \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] \left[ s_x (s_x^2 + s_y^2); s_y (s_x^2 + s_y^2); s_z (s_x^2 + s_y^2) \right] = \\
&= \frac{\mu_0 p_0^2 \omega^4}{16\pi^2 cr^2} \cos^2 \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] (s_x; s_y; s_z) \sin^2 \vartheta = \\
&= \frac{p_0^2 \omega^4}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \vartheta}{r^2} \cos^2 \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] \mathbf{s},
\end{aligned} \tag{4.615}$$

a pro časovou střední hodnotu velikosti Poyntingova vektoru (střední hodnota energie přenesené za jednotku času přes jednotkovou plochu)

$$\langle S \rangle = \frac{p_0^2 \omega^4}{16\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \vartheta}{r^2} \left\langle \cos^2 \left[ \omega \left( t - \frac{r}{c} \right) \right] \right\rangle = \frac{p_0^2 \omega^4}{32\pi^2 \epsilon_0 c^3} \frac{\sin^2 \vartheta}{r^2}. \tag{4.616}$$

Budeme-li používat, jak je v Ramanově spektroskopii obvyklé, namísto frekvence  $\omega$  vlnčet  $\tilde{\nu}$

$$\tilde{\nu} = \frac{\omega}{2\pi c}, \quad (4.617)$$

potom můžeme vztahy ( 4.600 ), ( 4.613 ), ( 4.616 ) psát ve tvaru

$$\begin{aligned} E_0 &= \frac{\pi \tilde{\nu}^2 p_0 \sin \vartheta}{\epsilon_0 r}, \\ H_0 &= \pi c \tilde{\nu}^2 p_0 \frac{\sin \vartheta}{r}, \\ \langle S \rangle &= \frac{\pi c \tilde{\nu}^4 p_0^2 \sin^2 \vartheta}{2 \epsilon_0 r^2}. \end{aligned} \quad (4.618)$$

Časová střední hodnota hustoty energie záření v daném bodě ve směru šíření je

$$\langle u \rangle = \frac{1}{2} \epsilon_0 E_0^2 = \frac{\pi^2 \tilde{\nu}^4 p_0^2 \sin^2 \vartheta}{2 \epsilon_0 r^2}. \quad (4.619)$$

Rozdělení hustoty energie má osovou symetrii s rotační osou mířící ve směru kmitů dipólu. Ze vztahu ( 4.619 ) je zřejmé, že hustota energie je maximální v ekvatoriální rovině (rovina  $xy$ ,  $\vartheta = \pi/2$ ) a směrem k pólům klesá a dosahuje nulové hodnoty na pólech ( $\vartheta = 0$ ).

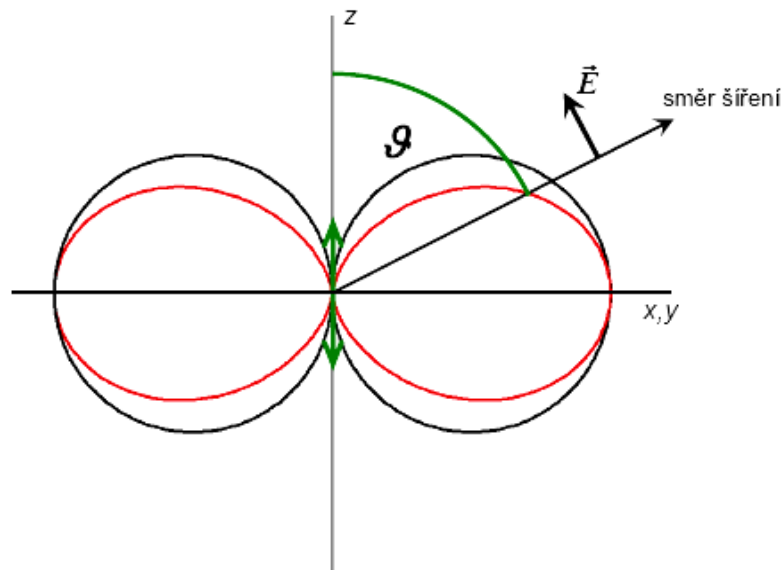
Střední výkon (zářivý tok)  $d\Phi$

$$d\Phi = \langle S \rangle dA = \frac{\pi c \tilde{\nu}^4 p_0^2 \sin^2 \vartheta}{2 \epsilon_0 r^2} dA = \frac{\pi c \tilde{\nu}^4 p_0^2}{2 \epsilon_0} \sin^2 \vartheta d\Omega, \quad (4.620)$$

protože element prostorového úhlu

$$d\Omega = \frac{dA}{r^2}. \quad (4.621)$$

Obr. 4.21



**Obr. 1:** Úhlové rozlišení amplitudy  $E_0$  (černě) a zářivosti  $I$  (červeně) kmitajícího elektrického dipólu  $p$ . Zdroj [2]

Celkový výkon vyzářený dipólem dostaneme z ( 4.620 ) integrací podle  $d\Omega = \sin \vartheta d\vartheta d\varphi$

$$\Phi = \frac{\pi c \tilde{V}^4 p_0^2}{2\epsilon_0} \int \sin^2 \vartheta d\Omega = \frac{\pi c \tilde{V}^4 p_0^2}{2\epsilon_0} \int_{\varphi=0}^{2\pi} \int_{\vartheta=0}^{\pi} \sin^3 \vartheta d\vartheta d\varphi = \frac{4\pi^3 c \tilde{V}^4 p_0^2}{3\epsilon_0}. \quad (4.622)$$

Pro *zářivost* (irradiance) potom dostáváme

$$I = \frac{d\Phi}{d\Omega} = \frac{\pi^2 c \tilde{V}^4 p_0^2}{2\epsilon_0} \sin^2 \vartheta. \quad (4.623)$$

V reálném experimentu zpravidla detekujeme zářivý tok v konečném prostorovém úhlu

$$\Delta\Phi = \frac{\pi^2 c \tilde{V}^4 p_0^2}{2\varepsilon_0} \int_{\varphi-\Delta\varphi}^{\varphi+\Delta\varphi} \int_{\vartheta-\Delta\vartheta}^{\vartheta+\Delta\vartheta} \sin^2 \vartheta d\vartheta d\varphi. \quad (4.624)$$

V rozptylových experimentech zavádíme veličinu **účinný průřez rozptylu** (scattering cross-section)  $\sigma$  jako poměr rozptýleného světelného výkonu (totálního, tj. do celého prostorového úhlu) a plošné hustoty zářivého toku dopadajícího záření

$$\sigma \equiv \frac{\Phi}{\langle S \rangle}. \quad (4.625)$$

Pro soubor rozptylujících molekul zpravidla vztahujeme účinný průřez na jednu molekulu případně i na jednotkový interval vlnočtů. Mimo to ještě zavádíme diferenciální účinný průřez rozptylu vztahem

$$\frac{d\sigma}{d\Omega} = \frac{d\Phi}{d\Omega} \frac{1}{\langle S \rangle}. \quad (4.626)$$

Intenzita  $I$  (střední výkon vyzářený oscilujícím dipólem indukovaným v molekule elektrickým polem dopadajícího záření o frekvenci  $\omega_1$  do jednotkového prostorového úhlu ve směru svírajícím úhel  $\vartheta$  s osou dipólu) je dána vztahem plynoucím z (4.623)

$$I = k'_{\tilde{v}} \tilde{V}_s^4 p_0^2 \sin^2 \vartheta, \quad (4.627)$$

kde jsme označili

$$k'_{\tilde{v}} = \frac{\pi^2 c}{2\varepsilon_0}. \quad (4.628)$$

## Tenzorový popis Rayleighova a Ramanova rozptylu

Úkolem teorie rozptylu světla je ukázat, jak  $\omega_s$  a  $p_0$  souvisí s vlastnostmi rozptylující molekuly a s frekvencí  $\omega_l$  dopadajícího elektromagnetického záření.



Chandrasekhara Venkata Raman (1888 – 1970)

Frekvenčně závislý indukovaný dipólový moment molekuly má tvar

$$\mathbf{d} = \boldsymbol{\alpha}\mathbf{E}, \quad (4.629)$$

kde  $\mathbf{E}$  je vektor elektrické intenzity dopadající rovinné monochromatické vlny o frekvenci  $\omega_l$  a  $\boldsymbol{\alpha}$  je tenzor polarizovatelnosti molekuly. Vztah (4.629) je systémem 3 lineárních rovnic

$$\begin{pmatrix} d_x \\ d_y \\ d_z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \alpha_{xx} & \alpha_{xy} & \alpha_{xz} \\ \alpha_{yx} & \alpha_{yy} & \alpha_{yz} \\ \alpha_{zx} & \alpha_{zy} & \alpha_{zz} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \\ E_z \end{pmatrix}, \quad (4.630)$$

kde 9 koeficientů  $\alpha_{\rho\sigma}$  tvoří komponenty tenzoru polarizovatelnosti  $\boldsymbol{\alpha}$ .

V případě nerezonančního rozptylu je tenzor polarizovatelnosti symetrický, tj.  $\alpha_{\rho\sigma} = \alpha_{\sigma\rho}$ , potom má pouze šest nezávislých složek.

Tenzor polarizovatelnosti molekuly si můžeme graficky vyjádřit jako elipsoid mající v obecném případě tři různé poloosy. Ačkoli tvar

elipsoidu polarizovatelnosti molekuly nezávisí na volbě souřadného systému, aktuální hodnoty jeho složek na orientaci os závisí. Pokud osy souřadného systému koincidují s hlavními osami elipsoidu polarizovatelnosti, nabývá tenzor polarizovatelnosti jednodušší diagonální tvar, tj. všechny nediagonální složky vymizí a délky poloos elipsoidu budou

$$\frac{1}{\sqrt{\alpha_{xx}}}; \frac{1}{\sqrt{\alpha_{yy}}}; \frac{1}{\sqrt{\alpha_{zz}}}. \quad (4.631)$$

Ačkoli jednotlivé složky tenzoru polarizovatelnosti se při rotaci souřadného systému mění, některé jejich kombinace jsou invariantní. V případě symetrického tenzoru polarizovatelnosti existují dva takové invarianty: *střední polarizovatelnost*  $a$  definovaná vztahem

$$a = \frac{1}{3}(\alpha_{xx} + \alpha_{yy} + \alpha_{zz}) \quad (4.632)$$

a *anizotropie*  $\gamma$  definovaná vztahem

$$\gamma^2 = \frac{1}{2} \left[ (\alpha_{xx} - \alpha_{yy})^2 + (\alpha_{yy} - \alpha_{zz})^2 + (\alpha_{zz} - \alpha_{xx})^2 + 6(\alpha_{xy}^2 + \alpha_{xz}^2 + \alpha_{yz}^2) \right]. \quad (4.633)$$

Pro nesymetrický tenzor polarizovatelnosti existuje ještě třetí *antisymetrický invariant*  $\delta$ , definovaný vztahem

$$\delta^2 = \frac{3}{4} \left( |\alpha_{xy} - \alpha_{yx}|^2 + |\alpha_{xz} - \alpha_{zx}|^2 + |\alpha_{yz} - \alpha_{zy}|^2 \right). \quad (4.634)$$

Tyto invarianty získávají na významu v případě souboru náhodně orientovaných molekul, kdy je mohutnost rozptýleného záření dána prostorovým středováním čtverců složek tenzoru polarizovatelnosti. Dá se ukázat, že střední hodnoty čtverců složek tenzoru polarizovatelnosti mohou být vyjádřeny pomocí invariantů  $a$  a  $\gamma$



$$\begin{aligned}\overline{\alpha_{xx}^2} &= \overline{\alpha_{yy}^2} = \overline{\alpha_{zz}^2} = \frac{45a^2 + 4\gamma^2}{45}, \\ \overline{\alpha_{xy}^2} &= \overline{\alpha_{xz}^2} = \overline{\alpha_{yz}^2} = \frac{\gamma^2}{15}, \\ \overline{\alpha_{xx}\alpha_{yy}} &= \overline{\alpha_{xx}\alpha_{zz}} = \overline{\alpha_{yy}\alpha_{zz}} = \frac{45a^2 - 2\gamma^2}{45}.\end{aligned}\tag{4.635}$$

Tenzor polarizovatelnosti bude obecně funkcí jaderných souřadnic a tudíž bude záviset i na frekvencích vibrací molekuly

$$\alpha_{\rho\sigma} = (\alpha_{\rho\sigma})_0 + \sum_k \left( \frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k} \right)_0 Q_k + \frac{1}{2} \sum_{k,l} \left( \frac{\partial^2 \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k \partial Q_l} \right)_0 Q_k Q_l + \dots\tag{4.636}$$

kde  $(\alpha_{\rho\sigma})_0$  je hodnota  $\alpha_{\rho\sigma}$  v rovnovážné konfiguraci molekuly,  $Q_k$ ,  $Q_l$ , ... jsou normální souřadnice vibrací o frekvencích  $\omega_k$ ,  $\omega_l$ , ... a sčítá se přes všechny normální souřadnice.

Index '0' u derivací znamená, že jsou počítány v rovnovážné konfiguraci. Omezíme se pouze na první dva členy rozvoje, tj. zanedbáme členy zahrnující vyšší než první mocninu  $Q$  (harmonická aproximace). Soustředíme se pro začátek pouze na jednu normální vibraci  $k$   $Q$ . V tom případě můžeme vztah (4.636) psát ve tvaru

$$(\alpha_{\rho\sigma})_k = (\alpha_{\rho\sigma})_0 + (\alpha'_{\rho\sigma})_k Q_k,\tag{4.637}$$

kde složky derivace tenzoru polarizovatelnosti tvoří derivace polarizovatelnosti podle normálních souřadnic  $Q_k$

$$(\alpha'_{\rho\sigma})_k = \left( \frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k} \right)_0.\tag{4.638}$$

Vztah (4.637) platí pro všechny složky tenzoru, a proto můžeme psát

$$\mathbf{\alpha}_k = \mathbf{\alpha}_0 + \mathbf{\alpha}'_k Q_k.\tag{4.639}$$

Uvažujeme-li jednoduchý harmonický pohyb, potom můžeme závislost  $Q_k$  na čase vyjádřit jako

$$Q_k = Q_{k0} \cos(\omega_k t + \delta_k), \quad (4.640)$$

kde  $Q_{k0}$  je amplituda normální vibrace a  $\delta_k$  je fázový faktor.

Dosazením (4.640) do (4.639) dostaneme časovou závislost tenzoru polarizovatelnosti vyplývající z  $k$ -tého vibračního módu

$$\mathbf{\alpha}_k = \mathbf{\alpha}_0 + \mathbf{\alpha}'_k Q_{k0} \cos(\omega_k t + \delta_k). \quad (4.641)$$

Do rovnice (4.629) nyní dosadíme frekvenční závislost dopadajícího pole  $\mathbf{E}$  danou vztahem

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_0 \cos \omega_1 t. \quad (4.642)$$

Potom

$$\mathbf{d} = \mathbf{\alpha}_0 \mathbf{E}_0 \cos \omega_1 t + \mathbf{\alpha}'_k \mathbf{E}_0 Q_{k0} \cos(\omega_k t + \delta_k) \cos \omega_1 t. \quad (4.643)$$

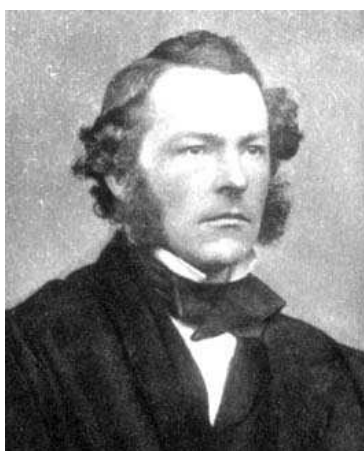
Užitím trigonometrické identity

$$\cos A \cos B = \frac{1}{2} [\cos(A+B) + \cos(A-B)] \quad (4.644)$$

můžeme vztah (4.643) vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned} \mathbf{d} &= \mathbf{d}(\omega_1) + \mathbf{d}(\omega_1 - \omega_k) + \mathbf{d}(\omega_1 + \omega_k) = \\ &= \mathbf{d}_0^{\text{Rayleigh}} \cos \omega_1 t + \mathbf{d}_0^{\text{Raman}} \cos[(\omega_1 - \omega_k)t - \delta_k] + \mathbf{d}_0^{\text{Raman}} \cos[(\omega_1 + \omega_k)t + \delta_k] = \\ &= \mathbf{\alpha}_0^{\text{Rayleigh}} \mathbf{E}_0 \cos \omega_1 t + \mathbf{\alpha}_k^{\text{Raman}} \mathbf{E}_0 \cos[(\omega_1 - \omega_k)t - \delta_k] + \mathbf{\alpha}_k^{\text{Raman}} \mathbf{E}_0 \cos[(\omega_1 + \omega_k)t + \delta_k] = \\ &= \mathbf{\alpha}_0^{\text{Rayleigh}} \mathbf{E}_0 \cos \omega_1 t + \frac{1}{2} \{ \mathbf{\alpha}'_k Q_{k0} \mathbf{E}_0 \cos[(\omega_1 - \omega_k)t - \delta_k] + \mathbf{\alpha}'_k Q_{k0} \mathbf{E}_0 \cos[(\omega_1 + \omega_k)t + \delta_k] \}. \end{aligned} \quad (4.645)$$

Kosinové funkce definují frekvence indukovaných dipólů, vztahy pro  $\alpha^{\text{Rayleigh}}$  a  $\alpha^{\text{Raman}}$  definují klasické **tenzory Rayleighova a Ramanova rozptylu**. Ze vztahu ( 4.645 ) je zřejmé, že indukovaný lineární dipól má tři složky o různých frekvencích:  $\mathbf{d}(\omega_1)$ , která je příčinou záření o stejné frekvenci jako je dopadající záření a vysvětluje pružný Rayleighův rozptyl; dále složku  $\mathbf{d}(\omega_1 - \omega_k)$ , která je příčinou záření o frekvenci  $\omega_1 - \omega_k$  a vysvětluje Stokesův Ramanův rozptyl; a nakonec složku  $\mathbf{d}(\omega_1 + \omega_k)$ , která je příčinou záření o frekvenci  $\omega_1 + \omega_k$  a vysvětluje anti-Stokesův Ramanův rozptyl.



George Gabriel Stokes (1819 – 1903)

Povšimněme si, že zatímco indukovaný dipól  $\mathbf{d}(\omega_1)$  má stejnou fázi jako dopadající vlna, indukované dipóly  $\mathbf{d}(\omega_1 \pm \omega_k)$  jsou fázově posunuty vůči dopadajícímu vlně o  $\delta_k$ . Tato veličina definuje relativní fázi normální vibrace  $Q_k$  vzhledem k dopadající vlně a pro různé molekuly může být různá. Tento jednoduchý klasický přístup nám poskytuje užitečný kvalitativní obrázek mechanismu Rayleighova a Ramanova rozptylu. Rayleighův rozptyl vzniká díky kmitům elektrického dipólu o frekvenci  $\omega_1$  indukovaného v molekule elektrickým polem dopadajícího záření, jež samo kmitá s frekvencí  $\omega_1$ . Ramanův rozptyl vzniká díky elektrickým dipólům kmitajícím s frekvencemi  $\omega_1 \pm \omega_k$ , které vznikají následkem modulace elektrického dipólu kmitajícího s frekvencí  $\omega_1$  molekulárními vibracemi s frekvencí  $\omega_k$ . Nezbytnou vazbu mezi pohybem jader a elektrickým polem zajišťují elektrony, jež sledují pohyby jader a způsobují harmonickou modulaci polarizovatelnosti. Frekvence

pozorované při Ramanově rozptylu jsou frekvence rázů mezi frekvencí záření  $\omega_1$  a frekvencí molekulární vibrace  $\omega_k$ .

Je zřejmé, že nutnou podmínkou pro existenci Rayleighova rozptylu je nenulovost  $\alpha^{\text{Rayleigh}}$ .

Jelikož všechny molekuly jsou v menší či větší míře polarizovatelné, klasický rovnovážný tenzor  $\alpha_0$  bude vždy mít nějaké nenulové složky a tudíž  $\alpha^{\text{Rayleigh}}$  bude vždy nenulový. Všechny molekuly tedy vyvolávají Rayleighův rozptyl.

Analogickou podmínkou pro existenci Ramanova rozptylu spojeného s molekulovou vibrací o frekvenci  $\omega_k$  je nenulovost  $\alpha^{\text{Raman}}$ . To znamená, že alespoň jedna ze složek derivace tenzoru polarizovatelnosti  $\alpha'_k$  musí být nenulová. Podle vztahu ( 4.638 ) je  $(\alpha'_{\rho\sigma})_k$  derivací  $\rho\sigma$  složky tenzoru polarizovatelnosti podle normální souřadnice  $Q_k$  v rovnovážné konfiguraci jader. Podmínkou pro existenci Ramanova rozptylu tedy je, aby alespoň pro jednu ze složek tenzoru polarizovatelnosti měla její závislost na normální souřadnici v rovnovážné konfiguraci nenulový gradient, tedy

$$(\alpha'_{\rho\sigma})_k = \left( \frac{\partial \alpha_{\rho\sigma}}{\partial Q_k} \right)_0 \neq 0. \quad ( 4.646 )$$

Takováto vibrace je pak aktivní v Ramanově spektru. Vztah ( 4.646 ) odráží citlivost polarizovatelnosti molekuly na změny konfigurace jader při normální vibraci  $Q_k$ .

## Kvantová teorie Ramanova rozptylu

Kvantový popis Ramanova rozptylu [1] vychází z řešení Schrödingerovy rovnice pro pole o dvou frekvencích. Pravděpodobnost  $P$  přechodu molekuly ze stavu 1 do stavu 2 mechanismem Ramanova rozptylu je v 1. řádu poruchové teorie pro optické frekvence nulová. Ve druhém řádu poruchové teorie dostáváme pro pravděpodobnost tohoto přechodu spojeného s emisí fotonu o polarizaci  $\mathbf{e}^R$  do prostorového úhlu  $d\Omega$  vztah

$$\frac{dP_{12}^R}{d\Omega} = \frac{16\pi^4}{hc^4} \left[ e_i^R (\alpha_{12}^R)_{ij} e_j^0 \right] F_{12}^R(\nu) \nu_R^3 I_0, \quad (4.647)$$

kde

$$(\alpha_{12}^R)_{ij} = \sum_{s \neq 1,2} \left( \frac{\langle \Psi_2 | \hat{D}_i | \Psi_s \rangle \langle \Psi_s | \hat{D}_j | \Psi_1 \rangle}{E_1 - E_s + h\nu_0} + \frac{\langle \Psi_2 | \hat{D}_j | \Psi_s \rangle \langle \Psi_s | \hat{D}_i | \Psi_1 \rangle}{E_2 - E_s - h\nu_0} \right) \quad (4.648)$$

je tenzor Ramanova rozptylu pro přechod ze stavu 1 do stavu 2,  $\mathbf{e}^R$  resp.  $\mathbf{e}^0$  je jednotkový vektor ve směru rozptýleného resp. dopadajícího záření,  $F_{12}^R$  popisuje tvar Ramanovy čáry a  $\hat{\mathbf{D}}$  je operátor dipólového momentu skládající se z elektronové  $\hat{\mathbf{D}}^e$  a jaderné  $\hat{\mathbf{D}}^n$  části

$$\hat{\mathbf{D}} = \hat{\mathbf{D}}^e + \hat{\mathbf{D}}^n = -e \sum_l \mathbf{r}^l + \sum_{p=1}^N Z_p \mathbf{R}^p, \quad (4.649)$$

kde  $\mathbf{r}^l$  jsou souřadnice elektronů,  $\mathbf{R}^p$  souřadnice jader a  $Z_p$  je atomové číslo  $p$ -tého jádra.

Adiabatická aproximace dává

$$\Psi_s(\mathbf{r}, \mathbf{R}) = \Phi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \chi_m^u(\mathbf{R}), \quad (4.650)$$

kde  $\Phi_m(\mathbf{r}, \mathbf{R})$  jsou elektronové a  $\chi_m^u(\mathbf{R})$  jaderné vlnové funkce.

Symboly  $m$  a  $u$  označují elektronový a vibrační stav. Dále se omezíme pouze na přechody mezi různými vibračními stavy v základním elektronovém stavu  $g$ , neboť s jinými přechody se v molekulární Ramanově spektroskopii prakticky nesetkáváme.

Označme tedy počáteční stav  $1 = g\{v_1\}$  a konečný stav  $2 = g\{v_2\}$ . Za tohoto předpokladu bude řada členů v sumaci (4.647) nulová buď z důvodu ortogonality vlnových funkcí, nebo antisymetričnosti v některé souřadnici. Ze sumace tak vypadnou stavy  $s = g\{u\}$ , ve kterých se kombinuje základní elektronový stav s libovolným vibračním stavem  $u$ . Potom můžeme psát Ramanův tenzor ve tvaru

$$\begin{aligned}
(\alpha_{12}^R)_{ij} = \sum_e \sum_{\{u\}} & \left( \frac{\langle \Psi_{g\{v_2\}} | \hat{D}_i | \Psi_{e\{u\}} \rangle \langle \Psi_{e\{u\}} | \hat{D}_j | \Psi_{g\{v_1\}} \rangle}{E_1 - E_s + h\nu_0} + \right. \\
& \left. + \frac{\langle \Psi_{g\{v_2\}} | \hat{D}_j | \Psi_{e\{u\}} \rangle \langle \Psi_{e\{u\}} | \hat{D}_i | \Psi_{g\{v_1\}} \rangle}{E_2 - E_s - h\nu_0} \right)
\end{aligned} \tag{4.651}$$

kde suma probíhá přes všechny excitované elektronové stavy a přes všechny vibrační stavy.

Jelikož z důvodu ortogonality elektronových vlnových funkcí platí

$$\begin{aligned}
& \langle \Phi_g(r, R) \chi_g^{v_2}(R) | R_i^k | \Phi_e(r, R) \chi_g^u(R) \rangle = \\
& = \langle \Phi_g | \Phi_e \rangle_r \langle \chi_g^{v_2}(R) | R_i^k | \chi_g^u(R) \rangle_R = 0,
\end{aligned} \tag{4.652}$$

vypadnou z výrazu ( 4.651 ) všechny členy obsahující jadernou část operátoru dipólového momentu. K Ramanově rozptylu tak může docházet pouze při interakci záření s elektronovým obalem molekuly. Vazba na vibrační přechody je umožněna především tím, že elektrony sledují vibrace jader.

Vazbu mezi elektronovým a jaderným pohybem vyjadřuje závislost elektronové vlnové funkce na souřadnicích jader.

Ve vlnové funkci tak zbudou členy

$$\langle \Phi_g(r, R) \chi_e^{v_2}(R) | r_i^l | \Phi_e(r, R) \chi_e^u(R) \rangle = \langle \chi_e^{v_2} | (D_e)_i | \chi_e^u \rangle_R = 0, \tag{4.653}$$

kde

$$(D_e)_i = \langle \Phi_g | \hat{D}_i^e | \Phi_e \rangle_r \tag{4.654}$$

je maticový element dipólového momentu elektronového přechodu  $g \leftrightarrow e$ .

Pro malé výchylky jader z rovnovážných poloh lze závislost elektronové vlnové funkce na souřadnicích jader aproximovat prvními dvěma členy Taylorova rozvoje funkce  $\Phi(r, R)$  v okolí hodnot vibračních souřadnic odpovídajících rovnovážné konfigurace jader  $\mathbf{R} = \mathbf{R}_0$

$$\Phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) = \Phi_{\mathbf{R}_0}(\mathbf{r}) + (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0) \text{grad}_{\mathbf{R}} \Phi_{\mathbf{R}}(\mathbf{r}) \Big|_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0}. \quad (4.655)$$

První člen rozvoje představuje tzv. Condonovu aproximaci elektronové vlnové funkce a druhý člen, odpovědný za synchronizaci pohybů jader a elektronů, tzv. Herzberg-Tellerovu aproximaci.



**Gerhard Heinrich Friedrich  
Otto Julius Herzberg (1904 – 1999)**



**Edward Teller (1908 – 2003)**

Potom se výraz pro tenzor Ramanova rozptylu rozpadne na tři členy (termy)

$$\left(\alpha_{12}^R\right)_{ij} = \left(A_{12}^R\right)_{ij} + \left(B_{12}^R\right)_{ij} + \left(C_{12}^R\right)_{ij}, \quad (4.656)$$

kde první člen  $A$  zahrnuje pouze Condonovu aproximaci:

$$\left(A_{12}^R\right)_{ij} = \sum_e (D_e)_i (D_e)_j \sum_{\{u\}} \left\{ \frac{C_{u2}^e C_{u1}^e}{\Delta E_{u1}^e} + \frac{C_{u2}^e C_{u1}^e}{\Delta E_{u2}^e} \right\}, \quad (4.657)$$

kde

$$(D_e)_i = \left\langle \Phi_e(r, R_0) \left| \hat{D}_i^e \right| \Phi_g(r, R_0) \right\rangle_r \quad (4.658)$$

je maticový element dipólového momentu elektronového přechodu  
 $e \leftrightarrow g$ ,

$$C_{uv}^e = \left\langle \chi_e^u(R) \left| \chi_g^v(R) \right. \right\rangle \quad (4.659)$$

je Condonův překryvový integrál vibračních funkcí a

$$\Delta E_{u1}^e = E_{g\nu_1} - E_{eu} + h\nu_0, \quad (4.660)$$

$$\Delta E_{u2}^e = E_{g\nu_2} - E_{eu} - h\nu_0,$$

jsou rezonanční členy

$$E_{eu} - E_{g\nu_1} \rightarrow h\nu_0 \Rightarrow \Delta E_{u1}^e \rightarrow 0, \quad (4.661)$$

$$E_{g\nu_2} - E_{eu} \rightarrow h\nu_0 \Rightarrow \Delta E_{u2}^e \rightarrow 0.$$

Druhý člen  $B$  představuje Herzberg-Tellerovu opravu k elektronové funkci excitovaných elektronových stavů

$$\begin{aligned} (B_{12}^R)_{ij} = & \sum_e \sum_p \left( (V_e)_p \right)_i (D_e)_j \sum_{\{u\}} \left[ \frac{(G_{u2}^e)_p C_{u1}^e}{\Delta E_{u1}^e} + \frac{C_{u2}^e (G_{u1}^e)_p}{\Delta E_{u2}^e} \right] + \\ & + \sum_e \sum_p (D_e)_i \left( (V_e)_p \right)_j \sum_{\{u\}} \left[ \frac{(G_{u1}^e)_p C_{u2}^e}{\Delta E_{u1}^e} + \frac{C_{u1}^e (G_{u2}^e)_p}{\Delta E_{u2}^e} \right], \end{aligned} \quad (4.662)$$

kde

$$\left( (V_e)_p \right)_i = \left\langle \frac{\partial \Phi_e(r, R)}{\partial R_p} \left| \hat{D}_i^e \right| \Phi_g(r, R) \right\rangle_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \quad (4.663)$$



a

$$(G_{uv}^e)_p = \left\langle \chi_e^u(R) \left| (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p \right| \chi_g^v(R) \right\rangle \quad (4.664)$$

je maticový element operátoru výchylky souřadnic jader mezi stavy  $eu$  a  $gv$ , přičemž  $(\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p$  je výchylka  $p$ -tého jádra z rovnovážné polohy.

Třetí člen  $C$  je Herzberg-Tellerovou opravou k elektronové funkci základního elektronového stavu

$$(C_{12}^R)_{ij} = \sum_e \sum_p ((U)_p)_i (D_e)_j \sum_{\{u\}} \left[ \frac{(G_{u2}^e)_p C_{u1}^e}{\Delta E_{u1}^e} + \frac{C_{u2}^e (G_{u1}^e)_p}{\Delta E_{u2}^e} \right] + \\ + \sum_e \sum_p (D_e)_i ((U)_p)_j \sum_{\{u\}} \left[ \frac{(G_{u1}^e)_p C_{u2}^e}{\Delta E_{u1}^e} + \frac{C_{u1}^e (G_{u2}^e)_p}{\Delta E_{u2}^e} \right], \quad (4.665)$$

kde

$$((U)_p)_i = \left\langle \Phi_e(r, R) \left| \hat{D}_i^e \left| \frac{\partial \Phi_g(r, R)}{\partial R_p} \right| \right. \right\rangle_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0}. \quad (4.666)$$

Hodnota této opravy je zpravidla zanedbatelná a proto tento člen nebudeme v další diskusi uvažovat.

Vztahy (4.656) představují výchozí vztahy pro výpočet intenzity Ramanova rozptylu na daném vibračním přechodu. O tom, které členy budou dominantní, rozhoduje kromě druhu přechodu a symetrií zúčastněných vibrací i velikost frekvence budícího záření  $\nu_0$  s ohledem na vzdálenosti energetických hladin molekuly.

### Nerezonanční přiblížení

Je-li frekvence budícího záření dostatečně vzdálená od frekvencí odpovídajících elektronové absorpci dané molekuly, lze užít tzv. nerezonanční přiblížení.

V tomto přiblížení zanedbáváme rozdíly v energiích jednotlivých elektronově vibračních stavů  $E_{eu}$  a přiřazujeme jim jednu hodnotu  $\bar{E}_e$  odpovídající poloze maxima absorpčního pásu elektronového přechodu.

$$\begin{aligned}\Delta E_{u1}^e &= E_{gv_1} - E_{eu} + h\nu_0 \approx \bar{E}_e + h\nu_0, \\ \Delta E_{u2}^e &= E_{gv_2} - E_{eu} - h\nu_0 \approx \bar{E}_e - h\nu_0.\end{aligned}\tag{4.667}$$

Potom bude

$$\begin{aligned}(A_{12}^R)_{ij} &= \sum_e (D_e)_i (D_e)_j \sum_{\{u\}} \left\{ \frac{C_{u2}^e C_{u1}^e}{\bar{E}_e + h\nu_0} + \frac{C_{u2}^e C_{u1}^e}{\bar{E}_e - h\nu_0} \right\} = \\ &= \sum_e (D_e)_i (D_e)_j \frac{2\bar{E}_e}{(\bar{E}_e)^2 - (h\nu_0)^2} \sum_{\{u\}} C_{u2}^e C_{u1}^e.\end{aligned}\tag{4.668}$$

Protože ale vibrační vlnové funkce daného elektronového stavu tvoří úplný ortogonální systém, bude platit

$$\begin{aligned}\sum_{\{u\}} C_{u2}^e C_{u1}^e &= \sum_{\{u\}} \langle \chi_g^{v_2}(R) | \chi_g^u(R) \rangle \langle \chi_g^u(R) | \chi_g^{v_1}(R) \rangle = \\ &= \langle \chi_g^{v_2}(R) | \chi_g^{v_1}(R) \rangle = \delta_{v_1 v_2}.\end{aligned}\tag{4.669}$$

V nerezonančním přiblížení je tedy člen  $(A_{12}^R)_{ij}$  pro Ramanův rozptyl nulový (nenulový je pouze pro elastický Rayleighův rozptyl).

V případě Hezberg-Tellerova členu  $(B_{12}^R)_{ij}$  dostáváme

$$\begin{aligned}
\sum_{\{u\}} (G_{u2}^e)_p C_{u1}^e &= \sum_{\{u\}} \langle \chi_g^{v_2}(R) | (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p | \chi_e^u(R) \rangle \langle \chi_e^u(R) | \chi_g^{v_1}(R) \rangle = \\
&= \langle \chi_g^{v_2}(R) | (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p | \chi_g^{v_1}(R) \rangle, \\
\sum_{\{u\}} C_{u2}^e (G_{u1}^e)_p &= \sum_{\{u\}} \langle \chi_g^{v_2}(R) | \chi_e^u(R) \rangle \langle \chi_e^u(R) | (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p | \chi_g^{v_1}(R) \rangle = \\
&= \langle \chi_g^{v_2}(R) | (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p | \chi_g^{v_1}(R) \rangle,
\end{aligned} \tag{4.670}$$

a tedy v nerezonanční aproximaci bude

$$\begin{aligned}
(B_{12}^R)_{ij} &= \sum_e \sum_p \frac{2\bar{E}_e}{(\bar{E}_e)^2 - (h\nu_0)^2} \left[ ((V_e)_p)_i (D_e)_j + (D_e)_i ((V_e)_p)_j \right] \cdot \\
&\quad \cdot \langle \chi_g^{v_2}(R) | (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p | \chi_g^{v_1}(R) \rangle
\end{aligned} \tag{4.671}$$

Přejdeme nyní od okamžitých výchylek  $\Delta\mathbf{R}$  k normálním souřadnicím  $Q_k$

$$\begin{aligned}
\Delta R_i^p &= \sum_k L_i^{pk} Q_k, \quad p = 1, 2, \dots, N \text{ (číslování jader)}, \\
&\quad i = x, y, z \text{ (číslování souřadnic)}.
\end{aligned} \tag{4.672}$$

Unimodulární matice  $\mathbf{L}$  udává transformaci souřadnic jaderných výchylek na normální vibrační souřadnice plus 6 souřadnic udávajících polohu a orientaci molekuly jako celku a je tedy čtvercová.

Celkový vibrační stav je souhrnem kvantových čísel jednotlivých normálních modů a celková vibrační vlnová funkce součinem vibračních funkcí normálních modů, tedy

$$\chi_g^u = \prod_{a=1}^{3N-6} \xi_{u_a}^a(Q_a), \tag{4.673}$$

kde  $\xi_u^a$  jsou vlnové funkce  $a$ -tého normálního módu, tj. lineárního harmonického oscilátoru proměnné  $Q_a$  o frekvenci  $f_a$  v kvantovém stavu  $u_a$ .

Potom

$$\begin{aligned}
 (B_{12}^R)_{ij} &\approx \sum_k \left\langle \prod_a \xi_{v_2^a}^a(Q_a) |Q_k| \prod_a \xi_{v_1^a}^a(Q_a) \right\rangle \cdot \\
 &\cdot \sum_{p,r} L_r^{pk} \sum_e \frac{2\bar{E}_e}{(\bar{E}_e)^2 - (h\nu_0)^2} \left[ ((V_e)_p)_i (D_e)_j + (D_e)_i ((V_e)_p)_j \right] \\
 &= \sum_k \left\langle \xi_{v_2^k}^k(Q_k) |Q_k| \xi_{v_1^k}^k(Q_k) \right\rangle \prod_{a \neq k} \left\langle \xi_{v_2^a}^a(Q_a) | \xi_{v_1^a}^a(Q_a) \right\rangle \cdot \\
 &\cdot \sum_{p,r} L_r^{pk} \sum_e \frac{2\bar{E}_e}{(\bar{E}_e)^2 - (h\nu_0)^2} \left[ ((V_e)_p)_i (D_e)_j + (D_e)_i ((V_e)_p)_j \right].
 \end{aligned} \tag{4.674}$$

Tento výraz připouští pouze fundamentální přechody, tj. přechody, kdy  $|v_2^k - v_1^k| = 1$  a

$$v_1^a = v_2^a \quad \forall a \neq k. \tag{4.675}$$

Z výrazu (4.674) je zřejmé, že v nerezonančním přiblížení je

$$B_{12}^R = B_{21}^R \tag{4.676}$$

a

$$(B_{12}^R)_{ij} = (B_{21}^R)_{ji}, \tag{4.677}$$

tj. symetrický tenzor. Frekvence přechodu se rozpadne na 2 části:

$$f = \frac{E_2 - E_1}{h} = f_k \left[ \nu_1^k + \frac{1}{2} + 1 \right] - f_k \left[ \nu_1^k + \frac{1}{2} \right] = f_k \quad \text{Stokes} \quad (E_2 > E_1)$$

$$f = \frac{E_2 - E_1}{h} = f_k \left[ \nu_1^k + \frac{1}{2} \right] - f_k \left[ \nu_1^k + \frac{1}{2} - 1 \right] = f_k \quad \text{antiStokes} \quad (E_2 < E_1)$$

( 4.678 )

### **Rezonanční přiblížení**

Při přibližování frekvence  $\nu_0$  budícího záření k frekvenci  $(E_g - E_h)/h$  elektronového přechodu  $g \leftrightarrow h$  dojde ve vztazích pro Ramanův tenzor ( 4.655 ) ke snížení jmenovatelů některých členů (tzv. rezonanční členy) termů  $A$  a  $B$  týkajících se rezonančního stavu  $h$ . U sledované čáry nastane prudké zvýšení intenzity rozptylu, pokud je účast dané vibrace v elektronově vibračních přechodech  $g \leftrightarrow h$  povolena v Condonově aproximaci ( $A$  term) nebo je silná závislost elektronové části vlnové funkce molekuly ve stavu  $h$  na daném vibračním pohybu ( $B$  term).

V ostatních případech se intenzita čáry zřetelně nezvyšuje a čára zaniká v pozadí jiných rezonančně zesílených linií. Celkově se tedy při přibližování frekvence budícího záření k absorpční hraně intenzita Ramanova rozptylu zvyšuje a mění se i tvar spektra.

V rezonančním přiblížení ( 4.668 ) nabývá tvar

$$(A_{12}^R)_{ij} = (D_h)_i (D_h)_j \sum_{\{u\}} \frac{C_{u2}^h C_{u1}^h}{E_{g1} - E_{hu} + h\nu_0}, \quad ( 4.679 )$$

kde

$$C_{uv}^h = \langle \chi_h^u(R) | \chi_g^v(R) \rangle \quad ( 4.680 )$$

je Condonův překryvový integrál vibračních funkcí stavů  $u$  (v rezonančním excitovaném elektronovém stavu  $h$ ) a  $v$  (v základním elektronovém stavu  $g$ ) a

$$(D_h)_i = \langle \Phi_h(r, R_0) | \hat{D}_i^e | \Phi_g(r, R_0) \rangle_r \quad ( 4.681 )$$

je maticový element dipólového momentu elektronového přechodu  $g \leftrightarrow h$ , a ( 4.674 ) nabývá tvar

$$\begin{aligned} (B_{12}^R)_{ij} = & \sum_p ((V_e)_p)_i (D_h)_j \sum_{\{u\}} \left[ \frac{(G_{u2}^h)_p C_{u1}^h}{\Delta E_{u1}^e} \right] + \\ & + \sum_p (D_h)_i ((V_h)_p)_j \sum_{\{u\}} \left[ \frac{(G_{u1}^h)_p C_{u2}^h}{\Delta E_{u1}^e} \right], \end{aligned} \quad (4.682)$$

kde

$$((V_e)_p)_i = \left\langle \frac{\partial \Phi_h(r, R)}{\partial R_p} \middle| \hat{D}_i^e \middle| \Phi_g(r, R) \right\rangle_{\mathbf{R}=\mathbf{R}_0} \quad (4.683)$$

a

$$(G_{uv}^e)_p = \left\langle \chi_u^e(R) \middle| (\mathbf{R} - \mathbf{R}_0)_p \middle| \chi_v^e(R) \right\rangle \quad (4.684)$$

je maticový element operátoru výchylky jader mezi stavy  $hu$  a  $gv$ . Dva členy  $A$  ( 4.679 ) a  $B$  ( 4.682 ) odpovídají dvěma mechanismům rezonančního zesílení (na rozdíl od nerezonančního přiblížení je člen  $A$  nenulový pokud jsou nenulové překryvové integrály

$\langle \chi_h^u(R) | \chi_g^v(R) \rangle$  mezi vibračními funkcemi základního  $g$  a

rezonančního excitovaného elektronového stavu  $h$ ). To nastává v případě plně symetrických vibračních modů, pokud při přechodu ze základního do excitovaného elektronového stavu dojde k posunu minima (tj. ke změně rovnovážné konfigurace molekuly). V opačném případě (nulový posun minima) bude vždy jeden z činitelů součinu  $C_{u2}^h C_{u1}^h$  a tudíž i celý člen  $A$  nulový.

V případě Condonova mechanismu rezonančního zesílení (člen  $A$ ) nejsou kladeny žádné restriktce na změnu vibračního kvantového čísla,

v rezonančních Ramanových spektrech mohou být (a jsou) pozorovány posloupnosti vyšších harmonických vibračních přechodů, kdy relativní intenzity pásů v posloupnosti jsou dány pouze velikostí příslušných překryvových integrálů  $\langle \chi_h^u(R) | \chi_g^v(R) \rangle$ .

## Symetrie a molekulové vibrace

Charakter vibračních módů molekuly je výsledkem určitých symetrií v jejím prostorovém uspořádání. Pro teoretické uchopení těchto vlastností byl v minulosti vypracován rozsáhlý matematický aparát založený na teorii grup.

## Operace symetrie a jejich vlastnosti

Operace symetrie (viz tabulka 4.5) převádějí molekulu do symetricky ekvivalentní polohy.

Tab. 4.5: Prvky, operátory a operace symetrií.

<i>Prvky symetrie</i>	<i>Označení</i>	<i>Operátory symetrie</i>	<i>Označení</i>	<i>Operace symetrie</i>
Identita	$E$	Operátor identity	$E(I)$	Identita
Rotační osa	$C_n$	Operátor rotace	$C_n^k$	rotace o úhel $\frac{2\pi k}{n}$ kolem $C_n$
Roviny symetrie	$\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$	Operátor zrcadlení	$\sigma$	zrcadlení v rovině $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$
Střed symetrie	$i$	Operátor inverze	$i$	inverze vůči středu $i$
Rotačně reflexní osa	$S_n$	Operátor nevlastní rotace	$S_n^k$	kompozice $C_n^k$ a $\sigma$ v rovině kolmé k $C_n$

Uvedme si dále některé důležité vlastnosti operací symetrie

$$\mathbf{Rotace:} \quad C_n^n = \underbrace{C_n C_n \dots C_n}_n = E \quad (4.685)$$

$$C_n^{-1} = C_n^{n-1} \quad (4.686)$$

$$\forall \frac{n}{l} \in \mathbb{Z}: C_n^{n/l} = C_l \quad (4.687)$$

z existence  $n$ -četné rotační osy vyplývá i existence  $n/l$ -četné rotační osy.

$$\mathbf{Reflexe:} \quad P(x, y, z) \xrightarrow{\sigma(xy)} P(x, -y, z) \quad (4.688)$$

$$\sigma^2 = E \quad (4.689)$$

$$\sigma^{-1} = \sigma \quad (4.690)$$

$\sigma_v$  – vertikální roviny symetrie (obsahují hlavní osu)

$\sigma_h$  – horizontální roviny symetrie (kolmé na hlavní osu)

$\sigma_d$  – vertikální roviny symetrie (obsahují hlavní osu – tj. osu s nejvyšší četností – a diagonální dvojčetnou osu)

### **Komposice operací symetrie**

$$\mathbf{Inverze:} \quad P(x, y, z) \xrightarrow{i} P(-x, -y, -z) \quad (4.691)$$

$$i^2 = E \quad (4.692)$$

$$i^{-1} = i \quad (4.693)$$

$$\mathbf{Nevlastní rotace:} \quad S_n = C_n \sigma_h = \sigma_h C_n \quad (4.694)$$

$$S_n^k = (C_n \sigma_h)^k = \begin{cases} C_n^k \sigma_h & \forall k \text{ liché} \\ C_n^k & \forall k \text{ sudé} \end{cases} \quad (4.695)$$

Skládání operací symetrie znamená jejich postupné provádění, přičemž obecně záleží na pořadí. Pro každou molekulu můžeme najít úplnou množinu navzájem různých operací symetrie, v níž libovolný součin dvou operací symetrie je opět nějakou operací z této množiny. Operace symetrie každé molekuly tvoří tzv. **bodovou grupu symetrie** (bodovou proto, že alespoň jeden bod zůstává při aplikaci libovolné



operace symetrie beze změny - všechny prvky symetrie dané molekuly se v tomto bodě protínají).

## Grupové postuláty

Množina  $\mathfrak{S}$  prvků  $A, B, \dots, F, \dots$  tvoří grupu, je-li pro tuto množinu definována grupová operace  $*$ , která každé uspořádané dvojici prvků grupy  $\mathfrak{S}$  jednoznačně přiřazuje prvek  $A * B = F$  tak, že jsou splněny následující 4 postuláty:

1) uzavřenost vůči grupové operaci

$$A * B = F \quad F \in \mathfrak{S}$$

2) asociativní zákon

$$(A * B) * C = A * (B * C) = A * B * C \quad A, B, C \in \mathfrak{S}$$

3) existence jednotkového prvku

$$\forall A \in \mathfrak{S} \exists E \in \mathfrak{S}: \quad A * E = E * A = A$$

4) existence inverzního prvku

$$\forall A \in \mathfrak{S} \exists A^{-1} \in \mathfrak{S}: \quad A * A^{-1} = A^{-1} * A = E$$

## *izomorfismus a homomorfismus grup*

Mějme grupy  $\mathfrak{S} = \{A, B, \dots, F, \dots\}$  a  $\mathfrak{S}' = \{A', B', \dots, F', \dots\}$ .

Lze-li mezi prvky obou grup stanovit vzájemně jednoznačné přiřazení  $A \leftrightarrow A', B \leftrightarrow B', \dots, F \leftrightarrow F', \dots$  takové, že ze vztahu  $AB = F$  vyplývá  $AB = F \leftrightarrow A'B' = F'$ , kde  $A, B$  a  $A', B'$  jsou libovolné dvojice grupových prvků, pak grupy  $\mathfrak{S}$  a  $\mathfrak{S}'$  jsou *izomorfní*.

Není-li vzájemná jednoznačnost přiřazení prvků grup  $\mathfrak{S}$  a  $\mathfrak{S}'$  zachována, jde o homomorfní přiřazení. Říkáme, že grupa  $\mathfrak{S}$  je *homomorfní* s grupou  $\mathfrak{S}'$ , když každému prvku  $A \in \mathfrak{S}$  odpovídá právě jeden prvek  $A' \in \mathfrak{S}'$  a každému prvku z  $\mathfrak{S}'$  odpovídá alespoň jeden prvek z  $\mathfrak{S}$ .

## **Třídy konjugovaných prvků**

Říkáme, že prvek  $A$  je konjugován s prvkem  $B$  grupy  $\mathfrak{S}$ , lze-li najít prvek  $S$  téže grupy takový, že platí

$$A = S^{-1} * B * S. \quad (4.696)$$

Je-li  $A$  konjugován s  $B$ , je i  $B$  konjugován s  $A$ .

Je-li kromě prvku  $A$  konjugován s  $B$  i prvek  $C$  téže grupy, potom i prvky  $A$  a  $C$  jsou navzájem konjugovány.

Množina vzájemně konjugovaných prvků se nazývá třída (konjugovaných) prvků.

Např. z tabulky 4.6 je zřejmé, že grupa  $C_{3v}$  se rozpadá na tři třídy ( $K_1$ ,  $K_2$ ,  $K_3$ ) konjugovaných prvků.

**Tab. 4.6: Multiplikační tabulka grupy  $C_{3v}$**

$X$	$X^{-1}EX$	$X^{-1}C_3X$	$X^{-1}C_3^2X$	$X^{-1}\sigma_vX$	$X^{-1}\sigma_v'X$	$X^{-1}\sigma_v''X$
$E$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$	$\sigma_v''$
$C_3$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_v''$	$\sigma_v$	$\sigma_v'$
$C_3^2$	$E$	$C_3$	$C_3^2$	$\sigma_v'$	$\sigma_v''$	$\sigma_v$
$\sigma_v$	$E$	$C_3^2$	$C_3$	$\sigma_v$	$\sigma_v''$	$\sigma_v'$
$\sigma_v'$	$E$	$C_3^2$	$C_3$	$\sigma_v''$	$\sigma_v'$	$\sigma_v$
$\sigma_v''$	$E$	$C_3^2$	$C_3$	$\sigma_v'$	$\sigma_v$	$\sigma_v''$
	$K_1 = \{E\}$	$K_2 = \{C_3, C_3^2\}$		$K_3 = \{\sigma_v, \sigma_v', \sigma_v''\}$		

Obecně platí:

- každá třída je jednoznačně určena svým libovolným prvkem,
- grupa je sjednocením tříd konjugovaných prvků, přičemž tyto třídy jsou neprázdné a navzájem disjunktní,
- třídy obsahují obecně různý počet prvků, přičemž počet prvků třídy je dělitelem řádu grupy.

### Maticové reprezentace grup

Jestliže  $\forall R \in \mathfrak{S}$  přiřadíme matici  $\mathbf{D}(R)$  tak, že zobrazení  $\mathfrak{S} \rightarrow \Gamma = \{\mathbf{D}(R)\}$  je homomorfní, pak grupa matic  $\Gamma$  je reprezentací grupy  $\mathfrak{S}$ . Grupová operace v  $\Gamma$  je reprezentována operací násobení matic.

***Báze reprezentace***

například v trojdimenzionální bázi reprezentace  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  bude reprezentace  $\Gamma^x$  bodové grupy  $C_{2v}$  tvořena čtveřicí matic

$$\begin{aligned}
 E \rightarrow \mathbf{D}(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 C_2 \rightarrow \mathbf{D}(C_2) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \sigma(xz) \equiv \sigma_v \rightarrow \mathbf{D}(\sigma_v) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \sigma(yz) \equiv \sigma'_v \rightarrow \mathbf{D}(\sigma'_v) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned} \tag{4.697}$$

jako jinou trojdimenzionální bázi můžeme použít vnitřní souřadnice  $(r_1, r_2, \alpha)$  v této bázi bude reprezentace  $\Gamma^u$  bodové grupy  $C_{2v}$  tvořena dvěma maticemi

$$\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \tag{4.698}$$

neboť

$$\begin{aligned}
 E: \quad & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \alpha \end{pmatrix} & \sigma_v: \quad & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_2 \\ r_1 \\ \alpha \end{pmatrix} \\
 C_2: \quad & \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_2 \\ r_1 \\ \alpha \end{pmatrix} & \sigma'_v: \quad & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \alpha \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} r_1 \\ r_2 \\ \alpha \end{pmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{4.699}$$

Ve vibrační spektroskopii hraje důležitou roli reprezentace  $\Gamma^{3N}$  (kde  $N$  je počet atomů v molekule) generovaná množinou jednotkových vektorů  $3N$  jednotkových vektorů ( $\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3$ ) (matice  $3N \times 3N$ ) pro molekulu vody (bodová grupa  $C_{2v}$ ) bude maticová reprezentace  $\Gamma^{3N}$  tvořena maticemi

$$\begin{aligned}
 \mathbf{D}^{3N}(E) = & \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{D}^{3N}(C_2) = & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\
 \mathbf{D}^{3N}(\sigma'_v) = & \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{D}^{3N}(\sigma_v) = & \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}
 \end{aligned}
 \tag{4.700}$$

Lze se snadno přesvědčit, že uvedené čtyři matice tvoří reprezentaci grupy  $C_{2v}$ .

### *Maticové operátory symetrií*

V trojdimenzionální bázi reprezentace  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  platí:

$$\begin{aligned} \mathbf{D}(E) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{D}(i) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} & \mathbf{D}(\sigma_{xy}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{D}(\sigma_{xz}) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{D}(\sigma_{yz}) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} & \mathbf{D}(C_n) &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ \mathbf{D}(S_n) &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, & \alpha &= \frac{2\pi}{n}, & C_n, S_n &\parallel z \end{aligned}$$

( 4.701 )

jsou ortogonální matice ( $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$ ).

### **Podobnostní transformace**

Nechť  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{Y}$  jsou čtvercové matice téhož řádu. Existuje-li regulární matice  $\mathbf{S}$  taková, že platí

$$\mathbf{Y} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{X} \mathbf{S}, \quad ( 4.702 )$$

říkáme, že matice  $\mathbf{X}$  a  $\mathbf{Y}$  jsou podobné, a předchozí vztah nazýváme **podobnostní transformací**. Jestliže na všechny matice v maticové rovnici aplikujeme tutéž podobnostní transformaci, zůstává v platnosti i pro transformované matice. Je-li například

$$\mathbf{A} \mathbf{B} = \mathbf{C}, \quad \mathbf{A}' = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S}, \quad \mathbf{B}' = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{S}, \quad ( 4.703 )$$

potom

$$\mathbf{A}' \mathbf{B}' = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{S} \mathbf{S}^{-1} \mathbf{B} \mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{B} \mathbf{S} = \mathbf{S}^{-1} \mathbf{C} \mathbf{S} = \mathbf{C}'. \quad ( 4.704 )$$

Někdy je možno k dané čtvercové matici  $\mathbf{A}$  nalézt takovou podobnostní transformaci, která tuto matici převede na kvazidiagonální tvar:

$$\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S} = \mathbf{D},$$

$$\mathbf{D} = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{D}_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{D}_n \end{pmatrix}, \quad (4.705)$$

kde  $\mathbf{D}_1, \dots, \mathbf{D}_n$  jsou čtvercové submatice obecně různé dimenze. Podobné matice mají stejné stopy

$$\text{Tr } \mathbf{B} = \text{Tr} (\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}\mathbf{S}) = \text{Tr} (\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A})\mathbf{S} = \text{Tr } \mathbf{S}(\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}) = \text{Tr} (\mathbf{S}\mathbf{S}^{-1}\mathbf{A}) = \text{Tr } \mathbf{A}. \quad (4.706)$$

Je-li matice  $\mathbf{D}$  direktním součinem matic  $\mathbf{D}_1, \dots, \mathbf{D}_n$

$$\mathbf{D} = \bigoplus_i^n \mathbf{D}_i \quad (4.707)$$

pak zřejmě

$$\text{Tr } \mathbf{D} = \sum_i^n (\text{Tr } \mathbf{D}_i). \quad (4.708)$$

### Charakter reprezentace

Stopu operátoru symetrie ve vybrané bázi nazýváme *charakterem reprezentace*.

V trojdimenzionální bázi  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$  budou charaktery

$$\text{Tr } \mathbf{D}(E) = 3 \quad (\text{dimenze reprezentace}) \quad (4.709)$$

$$\text{Tr } \mathbf{D}(C_n) = 2 \cos \alpha + 1 \quad (4.710)$$

$$\text{Tr } \mathbf{D}(S_n) = 2 \cos \alpha - 1 \quad (4.711)$$

$$\text{Tr } \mathbf{D}(\sigma) = 1 \quad (4.712)$$

$$\text{Tr } \mathbf{D}(i) = -3 \quad (4.713)$$

Obecněji, vyjdeme-li z nějaké reprezentace grupy, můžeme sestrojít s pomocí podobnostní transformace nekonečně mnoho ekvivalentních reprezentací téže dimenze. Veličinou, která je invariantní vůči podobnostní transformaci je stopa matice, čili charakter.

Uvažujme reprezentaci  $\Gamma\{\mathbf{D}(R)\}$  dimenze  $d$ , potom stopa matice  $\mathbf{D}(R)$  se nazývá charakterem prvku  $R$  v reprezentaci  $\Gamma$  a značí se  $\chi(R)$

$$\text{Tr } \mathbf{D}(R) = \sum_{k=1}^d D_{kk}(R) = \chi(R). \quad (4.714)$$

Množina čísel

$$\chi = \{\chi(R), \quad R \in \mathfrak{S}\} \quad (4.715)$$

je charakterem reprezentace  $\Gamma$ .

Protože jednotkový prvek bodové grupy symetrie je vždy reprezentován jednotkovou maticí, je charakter prvku  $E$  vždy roven dimenzi reprezentace. Ukážeme, že charaktery prvků grupy, jež patří do stejné třídy konjugovaných prvků, jsou si rovny. Necht' prvky  $A, B$  téže třídy grupy  $\mathfrak{S}$  spolu souvisejí vztahem

$$A = S^{-1}BS, \quad (4.716)$$

kde  $S$  je nějaký prvek grupy  $\mathfrak{S}$ . Jsou-li  $\mathbf{D}(A), \mathbf{D}(B), \mathbf{D}(S)$  odpovídající matice libovolné reprezentace grupy  $\mathfrak{S}$ , musí splňovat podmínku

$$\mathbf{D}(A) = [\mathbf{D}(S)]^{-1} \mathbf{D}(B) \mathbf{D}(S). \quad (4.717)$$

S použitím vlastnosti stopy  $\text{Tr}(\mathbf{AB}) = \text{Tr}(\mathbf{BA})$  dostáváme

$$\text{Tr}\mathbf{D}(A) = \text{Tr}\mathbf{D}(B). \quad (4.718)$$

### Reducibilní a ireducibilní reprezentace

Mějme reprezentaci  $\Gamma = \{\mathbf{D}(R)\}$  grupy  $\mathfrak{S} = \{R\}$ . Předpokládejme, že platí vztah

$$\mathbf{D}(A)\mathbf{D}(B) = \mathbf{D}(C). \quad (4.719)$$

Nechť  $\mathbf{X}$  je libovolná regulární čtvercová matice téhož řádu jako  $\mathbf{D}(R)$ .

S pomocí podobnostní transformace zkonstruujeme matice

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{D}}(A) &= \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(A)\mathbf{X}, \\ \bar{\mathbf{D}}(B) &= \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(B)\mathbf{X}. \end{aligned} \quad (4.720)$$

Snadno ověříme, že pro tyto matice platí stejná multiplikační tabulka jako pro matice původní

$$\bar{\mathbf{D}}(A)\bar{\mathbf{D}}(B) = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(A)\mathbf{X}\mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(B)\mathbf{X} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(AB)\mathbf{X} = \mathbf{X}^{-1}\mathbf{D}(C)\mathbf{X} = \bar{\mathbf{D}}(C). \quad (4.721)$$

To ale znamená, že množina matic  $\bar{\Gamma} = \{\bar{\mathbf{D}}(R)\}$  je rovněž reprezentací původní grupy. Říkáme, že reprezentace  $\Gamma$  a  $\bar{\Gamma}$  jsou *ekvivalentní*. Naopak dvě libovolné reprezentace téže grupy jsou neekvivalentní, neexistuje-li žádná podobnostní transformace, která by převáděla jednu reprezentaci v druhou.

Lze ukázat, že je možno najít takovou matici  $\mathbf{X}$ , která by převáděla libovolnou matici reprezentace  $\Gamma$ , např. matici  $\mathbf{D}(A)$ , na kvazidiagonální tvar



$$\mathbf{D}(A) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}_1(A) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{D}_2(A) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{D}_n(A) \end{pmatrix}. \quad (4.722)$$

Má-li matice  $\mathbf{D}(A)$  takovou strukturu, potom z pravidel o násobení matic plyne:

1. Všechny matice reprezentace lze stejnou podobnostní transformací (pomocí stejné matice  $\mathbf{X}$ ) převést na kvazidiagonální tvar. Takto získané matice mají stejnou blokovou strukturu.

2. Pro submatice ve stejnohleých blocích platí též pravidla pro násobení jako pro původní matice  $\mathbf{D}(A), \mathbf{D}(B), \mathbf{D}(C), \dots$ , tj. je-li splněna rovnice (4.719), budou splněny i rovnice

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{D}}_1(A)\bar{\mathbf{D}}_1(B) &= \bar{\mathbf{D}}_1(C) \\ \bar{\mathbf{D}}_2(A)\bar{\mathbf{D}}_2(B) &= \bar{\mathbf{D}}_2(C) \\ \bar{\mathbf{D}}_3(A)\bar{\mathbf{D}}_3(B) &= \bar{\mathbf{D}}_3(C) \\ &\vdots \\ \bar{\mathbf{D}}_n(A)\bar{\mathbf{D}}_n(B) &= \bar{\mathbf{D}}_n(C) \end{aligned} \quad (4.723)$$

To však neznamená nic jiného, než že množiny submatic  $\{\bar{\mathbf{D}}_1(R)\}, \{\bar{\mathbf{D}}_2(R)\}, \{\bar{\mathbf{D}}_3(R)\}, \dots, \{\bar{\mathbf{D}}_n(R)\}$  rovněž tvoří reprezentace grupy  $\mathfrak{S}$ . Tímto způsobem jsou matice vyšších řádů *redukovány* na matice nižších řádů. V případě, že taková podobnostní transformace existuje, říkáme, že reprezentace  $\Gamma$  je *reducibilní* (redukovatelná), v opačném případě se nazývá *ireducibilní* (neredukovatelná).

### ***Důležité věty pro ireducibilní reprezentace***

- 1) Počet neekvivalentních ireducibilních reprezentací grupy se rovná počtu tříd konjugovaných prvků grupy.
- 2) Součet čtverců dimenzí všech neekvivalentních ireducibilních reprezentací  $\Gamma^\alpha$  grupy se rovná řádu grupy

$$\sum_{\alpha} d_{\alpha}^2 = g \quad (4.724)$$

- 3) Součet čtverců absolutních hodnot charakterů všech prvků grupy v libovolné ireducibilní reprezentaci  $\Gamma^\alpha$  se rovná řádu grupy

$$\sum_R |\chi^\alpha(R)|^2 = g \quad (4.725)$$

- 4) Charaktery dvou neekvivalentních ireducibilních reprezentací  $\Gamma^\alpha$  a  $\Gamma^\beta$  splňují vztah ortogonalit pro charaktery

$$\sum_R \chi^\alpha(R) \chi^\beta(R) = 0 \quad (4.726)$$

- 5) Jestliže charaktery  $\chi^\alpha(R)$  prvků  $R \in \mathfrak{S}$  reprezentace  $\Gamma^\alpha$  splňují rovnici (4.725), potom  $\Gamma^\alpha$  je ireducibilní reprezentací. Proto se tato rovnice označuje jako kritérium ireducibility. V případě reducibilní reprezentace vždy platí

$$\sum_R |\chi^\alpha(R)|^2 > g. \quad (4.727)$$

## Analýza reducibilní reprezentace

Nechť

$$\mathbf{D}(R) = \begin{pmatrix} \mathbf{D}^1(R) & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mathbf{D}^2(R) & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & \mathbf{D}^\alpha(R) \end{pmatrix}. \quad (4.728)$$

Matice  $\{\mathbf{D}^\alpha(R)\}$   $R \in \mathfrak{S}$  tvoří opět reprezentaci  $\Gamma^\alpha$  grupy  $\mathfrak{S}$ .

Předpokládejme, že  $\Gamma^\alpha$  jsou ireducibilní. Potom

$$\chi(R) = \text{Tr } \mathbf{D}(R) = \sum_{\alpha} [\text{Tr } \mathbf{D}^\alpha(R)] = \sum_{\alpha} \chi^\alpha(R). \quad (4.729)$$

Ekvivalentní reprezentace mají stejné charaktery:

$$\chi(R) = \sum_{\alpha} a_{\alpha} \chi^{\alpha}(R), \quad (4.730)$$

kde koeficient  $a_{\alpha}$  udává, kolikrát je  $\Gamma^{\alpha}$  obsažena v reducibilní reprezentaci  $\Gamma$ .

Tyto veličiny vyjádříme pomocí  $\chi(R)$  a  $\chi^{\alpha}(R)$ :

$$\begin{aligned} \sum_R \chi(R) \chi^{\beta}(R)^* &= \sum_R \sum_{\alpha} a_{\alpha} \chi^{\beta}(R)^* \chi^{\alpha}(R) = \\ &= \sum_{\alpha} a_{\alpha} \sum_R \chi^{\beta}(R)^* \chi^{\alpha}(R) = g a_{\alpha}, \end{aligned} \quad (4.731)$$

čili

$$a_{\alpha} = \frac{1}{g} \sum_R \chi(R) \chi^{\alpha}(R)^* = \frac{1}{g} \sum_{K_i} n(K_i) \chi(K_i) \chi^{\alpha}(K_i)^*, \quad (4.732)$$

kde  $n(K_i)$  udává počet prvků třídy  $K_i$  (využíváme faktu, že charaktery prvků grupy, jež patří do stejné třídy konjugovaných prvků, jsou si rovny).

Tab. 4.7: Označení ireducibilních reprezentací bodových grup symetrie.

Symbol reprezentace			Dimenze reprezentace = $\chi(E)$	
$A, B$			1	
$E$			2	
$T$ nebo $F$			3	
$A$		symetrická	Vůči rotaci o úhel $2\pi/n$ kolem hlavní osy	$\chi(C_n) = +1$
$B$		antisymetrická		$\chi(C_n) = -1$
Horní index	'	symetrická	Vůči $\sigma_h$	$\chi(\sigma_h) = +1$
	"	antisymetrická		$\chi(\sigma_h) = -1$
1. dolní index	1	symetrická	Vůči $\sigma_v$	$\chi(\sigma_v) = +1$
	2	antisymetrická		$\chi(\sigma_v) = -1$
2. dolní index	g	symetrická	Vůči $i$	$\chi(i) = +1$
	u	antisymetrická		$\chi(i) = -1$

### Charakter reprezentace $\Gamma^{3N}$

Abychom mohli určit  $a_\alpha$ , musíme nejprve určit  $\chi(R)$  respektive  $\chi(K_i)$   $\forall R$  respektive  $K_i$ .

Platí: jestliže nějaký atom v molekule a jemu příslušející vektory báze reprezentace mění při aplikaci operace symetrie svoji polohu v prostoru, pak těmto vektorům odpovídají v  $\mathbf{D}^{3N}(R)$  nulové diagonální maticové elementy.

Jinými slovy: pouze vektory umístěné na atomech, které zůstaly při působení operace symetrie  $R$  beze změny, mohou mít nenulový příspěvek k charakteru dané operace symetrie v reprezentaci  $\Gamma^{3N}$ .

Postup při výpočtu charakterů reprezentace  $\Gamma^{3N}$  je následující:

1. Určit počet atomů invariantních vůči dané operaci symetrie (stačí udělat pro jednotlivé třídy konjugovaných prvků). Prakticky: leží-li atom na prvku symetrie (rovině, rotační ose, ...), potom je vůči této operaci invariantní.

2. Spočítat příspěvek od jednoho invariantního atomu  $\chi^0(R)$  pro každou operaci symetrie (třidu).

Tab. 4.8: Tabulka charakterů reprezentace  $\Gamma^{3N}$ .

$R$	$\chi^0(R)$
$C_n^k$	$2 \cos \frac{2\pi k}{n} + 1$
$S_n^k$	$2 \cos \frac{2\pi k}{n} - 1$
$E$	$\chi^0(C_1)$
$\sigma$	$\chi^0(S_1)$
$i$	$\chi^0(S_2)$

### 2.3.10 Molekula H<sub>2</sub>O

Tab. 4.9: Bodová grupa  $C_{2v}$ , 3 atomy, 3 vibrační stupně volnosti.

$C_{2v}$	$E$	$C_2$	$\sigma(xz)$	$\sigma(yz)$		
$A_1$	1	1	1	1	$z, x, y, z$	
$A_2$	1	1	-1	-1	$xy$	$R_z$
$B_1$	1	-1	1	-1	$x, xz$	$R_y$
$B_2$	1	-1	-1	1	$y, yz$	$R_x$
$n_R$	3	1	1	3		
$\chi^0(R)$	3	-1	1	1		
$\chi(R)$	9	-1	1	3		

Redukce:

$$\begin{aligned}
 a_{A_1} &= \frac{1}{4}[9 - 1 + 1 + 3] = 3, \\
 a_{A_2} &= \frac{1}{4}[9 - 1 - 1 - 3] = 1, \\
 a_{B_1} &= \frac{1}{4}[9 + 1 + 1 - 3] = 2, \\
 a_{B_2} &= \frac{1}{4}[9 + 1 - 1 + 3] = 3.
 \end{aligned}
 \tag{4.733}$$

Tedy

$$\Gamma^{3N} = 3A_1 \oplus A_2 \oplus 2B_1 \oplus 3B_2.
 \tag{4.734}$$

Protože

$$\Gamma^{3N} = \Gamma^{trans} \oplus \Gamma^{rot} \oplus \Gamma^{vib},
 \tag{4.735}$$

máme

$$\Gamma^{vib} = \Gamma^{3N} - (A_1 \oplus A_2 \oplus 2B_1 \oplus 2B_2) = 2A_1 \oplus B_2.
 \tag{4.736}$$

Aktivita:  $A_1$  (IČ, Raman),  $B_2$  (IČ, Raman).

Molekula  $\text{CCl}_4$ Tab. 4.10: Bodová grupa  $T_d$ , 5 atomů, 9 vibračních stupňů volnosti.

$T_d$	$E$	$8C_3$	$3C_2$	$6\sigma_d$	$6S_4$		
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$	
$A_2$	1	1	1	-1	-1		
$E$	2	-1	2	0	0	$(x^2 - y^2, 2z^2 - x^2 - y^2)$	
$F_1$	3	0	-1	-1	1		$(R_x, R_y, R_z)$
$F_2$	3	0	-1	1	-1	$(x, y, z), (xy, xz, yz)$	
$n_R$	5	2	1	3	1		
$\chi^0(R)$	3	0	-1	1	-1		
$\chi(R)$	15	0	-1	3	-1		

Redukce:

$$a_{A_1} = \frac{1}{24} [15 - 3 + 18 - 6] = 1,$$

$$a_{A_2} = \frac{1}{24} [15 - 3 - 18 + 6] = 0,$$

$$a_E = \frac{1}{24} [30 - 6] = 1, \quad (4.737)$$

$$a_{F_1} = \frac{1}{24} [45 + 3 - 18 - 6] = 1,$$

$$a_{F_2} = \frac{1}{24} [45 + 3 - 18 - 6] = 3.$$

Tedy

$$\Gamma^{3N} = A_1 \oplus E \oplus F_1 \oplus 3F_2. \quad (4.738)$$

Protože

$$\Gamma^{3N} = \Gamma^{trans} \oplus \Gamma^{rot} \oplus \Gamma^{vib}, \quad (4.739)$$

máme

$$\Gamma^{vib} = \Gamma^{3N} - (F_1 \oplus F_2) = A_1 \oplus E \oplus 2F_2. \quad (4.740)$$

Aktivita:  $A_1$  (Raman),  $E$  (Raman),  $F_2$  (IČ, Raman).

### **Typy vibračních přechodů**

V základním stavu budou všechna vibrační kvantová čísla rovna nule. Přechody mezi základní vibrační hladinou a jednou excitovanou hladinou

$$(0, 0, \dots, \overset{v_m}{0}, \dots, 0) \rightarrow (0, 0, \dots, \overset{v_m}{1}, \dots, 0) \quad (4.741)$$

se nazývají **fundamentální**; odpovídající pás v Ramanově nebo infračerveném spektru se nazývá **fundamentální pás**. Kdyby harmonická aproximace platila striktně, byly by povoleny pouze fundamentální přechody. Díky anharmonicitě vibrací reálné molekuly jsou však povoleny i další typy vibračních přechodů – **vyšší harmonické**

$$(0, 0, \dots, \overset{v_m}{0}, \dots, 0) \rightarrow (0, 0, \dots, \overset{v_m}{n}, \dots, 0) \quad n = 2, 3, \dots \quad (4.742)$$

a **kombinační**

$$(0, 0, \dots, \overset{v_m}{0}, \dots, \overset{v_n}{0}, \dots, 0) \rightarrow (0, 0, \dots, \overset{v_m}{1}, \dots, \overset{v_n}{1}, \dots, 0) \quad (4.743)$$

### **Symetrie vlnových funkcí fundamentálních stavů**

Vibrační vlnová funkce pro systém  $3N - 6$  normálních souřadnic  $Q_i$  má v harmonické aproximaci tvar



$$\chi_{\{v_i\}} = N \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N-6} \lambda_i^{1/2} Q_i^2\right) \prod_{i=1}^{3N-6} H_{v_i}(\lambda_i^{1/4} Q_i). \quad (4.744)$$

V základním stavu je  $v_i = 0$  pro všechna  $i$ , a tedy

$$\chi_{\{0\}} = N \exp\left(-\frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N-6} \lambda_i^{1/2} Q_i^2\right), \quad (4.745)$$

kde  $N$  je normalizační konstanta. Pro vlnovou funkci  $k$ -tého fundamentálního stavu platí

$$\chi_{\{0, \dots, 1, \dots, 0\}} \sim \chi_{\{0\}} H_1(\lambda_k^{1/4} Q_k) \sim \chi_{\{0\}} Q_k. \quad (4.746)$$

Z tohoto vztahu plyne, že vibrační vlnová funkce  $k$ -tého fundamentálního stavu a  $k$ -tá normální souřadnice  $Q_k$  mají stejné transformační vlastnosti.

Pro infračervené absorpční přechody bude integrál

$$\int \chi_{\{0\}} \mu_k \chi_{\{i\}} d\tau \quad k = x, y, z \quad (4.747)$$

nenulový (a tedy  $0 \rightarrow i$  bude dovolený přechod), pokud bude integrand totálně symetrický, tj. když charakter reprezentace

$$\Gamma(\chi_0) \otimes \Gamma(\mu_k) \otimes \Gamma(\chi_i) \quad (4.748)$$

je roven jedné pro všechny prvky bodové grupy symetrie dané molekuly. Ze vztahu (4.745) je zřejmé, že vibrační vlnová funkce základního stavu  $\chi_{\{0\}}$  je vždy plně symetrická. Z podmínky totální symetrie integrandu (4.747) pak plyne, že součin  $\mu_k \chi_{\{i\}}$  musí mít stejnou symetrii, tj. musí patřit téže ireducibilní reprezentaci. Složky elektrického dipólového momentu  $\mu_x, \mu_y, \mu_z$  se transformují působením operací symetrie jako složky translace resp. jako kartézské

souřadnice  $x, y, z$ . Pokud tedy vlnová funkce  $\chi_{\{i\}}$  (resp.  $i$ -tá normální souřadnice) přísluší téže ireducibilní reprezentaci bodové grupy symetrie molekuly jako jedna ze souřadnic  $x, y, z$ , bude přechod ze základního do  $i$ -tého vibračního stavu aktivní (dovolený) v infračervené oblasti spektra.

Vibrační Ramanův přechod ze základního do  $i$ -tého fundamentálního stavu je dovolený jen tehdy, když jeden ze šesti integrálů

$$\int \chi_{\{0\}} \alpha_{kl} \chi_{\{i\}} \quad k, l = x, y, z \quad (4.749)$$

je nenulový. Integrál bude nenulový (a tedy  $0 \rightarrow i$  bude dovolený přechod), pokud bude integrand opět totálně symetrický, tj. když charakter reprezentace

$$\Gamma(\chi_{\{0\}}) \otimes \Gamma(\alpha_{ik}) \otimes \Gamma(\chi_{\{i\}}). \quad (4.750)$$

je roven jedné pro všechny prvky bodové grupy symetrie dané molekuly.

Ze vztahu (4.745) je zřejmé, že vibrační vlnová funkce základního stavu  $\chi_{\{0\}}$  je vždy plně symetrická. Z podmínky, aby integrand (4.749) byl plně symetrický, potom plyne, že součin  $\alpha_{kl} \chi_{\{i\}}$  musí být rovněž plně symetrický a tedy že funkce  $\alpha_{kl}$  a  $\chi_{\{i\}}$  musí mít stejnou symetrii, tj. musí patřit téže ireducibilní reprezentaci.

Lze odvodit, že  $\alpha_{kl}$  se transformuje stejným způsobem (tj. přísluší téže ireducibilní reprezentaci bodové grupy symetrie dané molekuly) jako kvadratická funkce kartézských souřadnic (například  $\alpha_{xx}$  jako  $x^2$ ,  $\alpha_{yz}$  jako  $yz$  atd.).

Má-li tedy normální vibrace tutéž symetrii jako jeden z výrazů  $x^2, xy, \dots, z^2$  uvedených v tabulce charakterů bodové grupy symetrie molekuly, potom fundamentální přechod  $0 \rightarrow i$  bude v Ramanově spektru aktivní.

## Vylučovací pravidlo

Obecně lze říci, že vibrační přechod může být aktivní jak v infračerveném, tak i v Ramanově spektru nebo jenom v jednou z nich popřípadě může být zcela inaktivní. V případě molekul se středem symetrie však platí vylučovací pravidlo (alternativní zákaz): žádná vibrace nemůže být aktivní v obou spektrech současně.

Kartézské souřadnice jsou totiž vždy antisymetrické vůči inverzi (vibrace typu u), zatímco funkce  $x^2$ ,  $xy$ , atd. jsou vždy symetrické (vibrace typu g). Toto se využívá při řešení molekulové struktury. Dochází-li ke shodě v nějaké vibrační frekvenci molekuly jak v IČ, tak i v Ramanově spektru, nemá molekula střed symetrie, a naopak.

## Interakce ionizujícího záření s látkou

### a) Interakce záření gama s látkou:

Vlnová délka rentgenového záření určuje základní vlastnosti tohoto záření: schopnost pronikat látkou, působit na fotografickou emulzi, vyvolat ionizaci látky.

Při průchodu RTG záření hmotou dochází k rozptylu a absorpci.

Pro zeslabení svazku fotonů při průchodu látkou platí známý vztah

$$\frac{dI}{dx} = -\mu I. \quad (4.751)$$

Integrací této rovnice a následným odlogaritmováním postupně dospějeme k řešení

$$\int \frac{dI}{I} = -\int \mu dx, \quad (4.752)$$

$$\ln I - \ln I_0 = -\mu x, \quad (4.753)$$

$$I(x) = I_0 \cdot \exp(-\mu \cdot x) = I_0 \cdot \exp(-n \cdot \sigma \cdot x), \quad (4.754)$$

kde  $I_0$  je **hustota toku** těsně před vstupem svazku do látky,  
 $\mu$  je **součinitel zeslabení**.

$\sigma$  je **účinný průřez** pro absorpci fotonu

$n$  je **hustota atomů** tj. počet atomů v objemové jednotce

Probereme nyní podrobněji jednotlivé fyzikální procesy, které k zeslabení svazku fotonů přispívají.

Hlavním typem interakce fotonů s látkou je **fotoelektrický jev** ( fotoefekt ), při němž dochází k úplnému předání energie fotonu orbitálnímu elektronu.

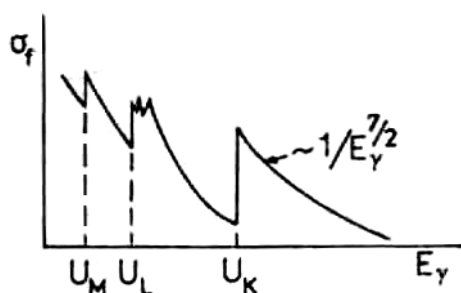
K fotoefektu nemůže docházet na volném elektronu, protože by nemohly být splněny současně zákon zachování energie a zákon zachování hybnosti.

Dochází k němu pouze na elektronu vázaném v atomovém obalu.

Přitom energie fotonu  $E_\gamma$  musí být větší než vazbová energie  $U_n = -E_n$  elektronu v atomu dané látky.

Tím je vlastně již určena závislost účinného průřezu  $\sigma_f$  na energii fotonu  $E_\gamma$ , kterou ukazuje obr. 4.12.

Obr. 4.12



Závislost účinného průřezu  $\sigma_f$  pro fotoefekt na energii fotonu  $E_\gamma$ .

Účinný průřez bude mít maxima pro energie  $E_\gamma$  srovnatelné s vazbovými energiemi elektronu v jednotlivých slupkách  $U_n$  ( $n = K, L, M, \dots$ ) a bude klesat vždy v intervalu  $U_n > E_\gamma > U_{n+1}$ .

Protože vazbové energie rostou s poklesem  $n$ , k fotoefektu dochází asi v 80 % případů na slupce K.

Poněvadž vazbové energie rostou rovněž s atomovým číslem  $Z$ , fotoefekt se více projevuje u těžších atomů než u lehčích.

Teoretický výraz pro účinný průřez  $\sigma_f$  je poměrně složitý, a proto se zpravidla spokojujeme s jeho zjednodušeným tvarem.

Pro fotoefekt na slupce K tak platí Bornova aproximace:

$$\sigma_f^K = \sqrt{2^5} \cdot Z^4 \cdot \sigma_0 \cdot \alpha^4 \cdot k^a, \quad (4.755)$$

kde  $\alpha$  je konstanta jemné struktury,

$$k = \frac{E_\gamma}{m_e \cdot c^2}, \quad (4.756)$$

a exponent  $a$  nabývá hodnot:  $a = -7/2$  pro  $E_\gamma \gg U_k$  a pro  $\hbar \ll m \cdot c^2$ ,  
 $a = -1$  pro  $E_\gamma \gg m \cdot c^2$ .

$\sigma_0$  je účinný průřez pro tzv. Thomsonův rozptyl fotonu na elektronu. Platí:

$$\sigma_0 = \frac{8\pi}{3} \cdot r_0, \quad (4.757)$$

kde  $r_0$  je klasický poloměr elektronu.

Všimněme si silné závislosti účinného průřezu na  $Z$ .

Pro účinné průřezy na dalších slupkách platí:

$$\frac{\sigma_f^L}{\sigma_f^K} \approx \frac{1}{5}, \quad \frac{\sigma_f^M}{\sigma_f^L} \approx \frac{1}{4}, \quad (4.758)$$

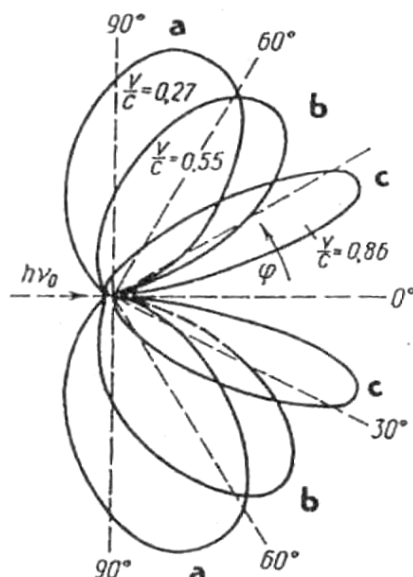
Počítáme-li proto celkový účinný průřez  $\sigma_f$ , který je součtem účinných průřezů na jednotlivých slupkách, klademe  $\sigma_f = 5/4 \sigma_f^K$ .  
 Prostorové rozdělení fotoelektronů závisí na jejich energii.

Úhlové rozdělení fotoelektronů, které je popsáno vztahem

$$\frac{dN}{d\Omega} = \frac{\sin^2 \Theta}{1 - \frac{v}{c} \cdot \cos \Theta} \quad (4.759)$$

kde  $\Theta$  je úhel mezi dráhou primárního fotonu a dráhou vyraženého fotoelektronu,  $v$  je rychlost vyraženého fotoelektronu, znázorňuje obrázek 4.13.

Obr. 4.13



Pokud fotoelektrony mají malou energii, pak se pohybují zejména po dráze která je kolmá k původní dráze pohybu rentgenového fotonu. Se zvětšováním energie fotoelektronů se jejich orientace stále více blíží k dráze původního fotonu.

Při koherentním rozptylu rentgenova záření se mění směr jeho šíření při zachování vlnové délky.

Zásluhou silně vázaných elektronů, působením elektrické složky elektromagnetické vlny, dochází k tzv. **koherentnímu rozptylu záření**.

Elektrony získávají proměnné zrychlení a samy vyzařují elektromagnetické vlny téže frekvence jakou mělo primární záření. Pro rentgenologii má větší význam **nekoherentní**, tj. tzv. **Comptonův rozptyl** fotonů na elektronech.

Jedná se o kvantově-mechanický jev při němž se mění energie rozptýleného fotonu v závislosti na úhlu rozptylu a to podle vztahu:

$$E_{\gamma} = \frac{E_{\gamma 0}}{1 + \frac{E_{\gamma 0}}{m_e \cdot c^2} \cdot (1 - \cos \vartheta)} , \quad (4.760)$$

kde  $E_{\gamma 0}$  je počáteční energie fotonu,  $E_{\gamma}$  je energie rozptýleného fotonu,  $\vartheta$  je úhel odraženého fotonu.



Artur Holly Compton (1892 – 1962)

Vztah odvodil roku 1923 A. Compton na základě experimentu znázorněném na obr. 4.14.

Obr. 4.14

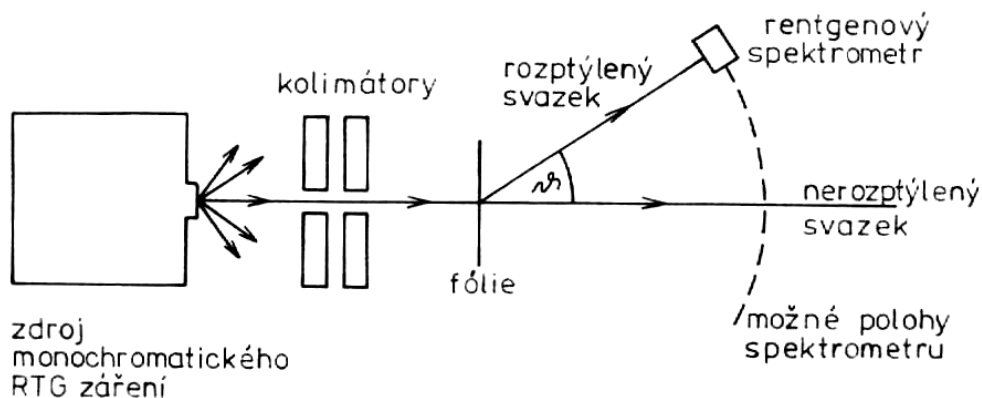


Schéma Comptonova experimentu. Symbolem RTG záření se označuje rentgenové záření.

Pro kinetickou energii odraženého fotonu platí

$$E_{\gamma} = \frac{E_{\gamma 0}^2 (1 - \cos \vartheta)}{m_e \cdot c^2 + E_{\gamma 0} \cdot (1 - \cos \vartheta)} . \quad (4.761)$$

Z tohoto vztahu vyplývá, že nový foton má energii nejmenší, je-li vyzářen ve směru opačném oproti původnímu směru ( $\vartheta=180^\circ$ ). Elektron v tomto případě přebírá maximální energii

$$E_{e \text{ max}} = \frac{E_{\gamma 0}}{1 + \frac{m_e \cdot c^2}{2 \cdot E_{\gamma 0}}}, \quad (4.762)$$

a je vyzářen ve směru letu původního fotonu.

Souvislost mezi úhlem rozptylu fotonu  $\varphi$  a úhlem  $\Theta$ , pod nímž je vyražen elektron, je popsána vztahem

$$\tan \Theta = -\frac{m_e \cdot c^2}{m_e \cdot c^2 + E_{\gamma 0}} \cdot \cot \frac{\varphi}{2}. \quad (4.763)$$

Jak ukazuje tabulka 13, energie fotonu se mění s úhlem významněji při vyšších počátečních energiích rentgenového fotonu.

Změny energie fotonu v oblasti energií užívaných v radiodiagnostice jsou pro malé úhly velmi malé.

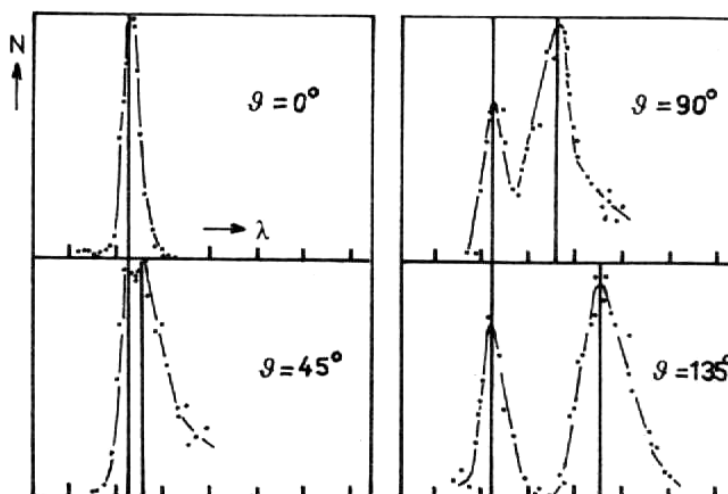
U prvků s nízkým atomovým číslem je dominantní Comptonův rozptyl, kdežto u prvků s vyšším atomovým číslem má primární vliv fotoelektrická absorpce.

Tab. 14.11: energie rozptýlených fotonů [keV]

počáteční energie fotonů [ keV]	Úhel vychýlení fotonu $\varphi$			
	30°	60°	90°	180°
25	24,9	24,4	24	23
50	49,6	47,8	46	42
75	74,3	70,0	66	58
100	98,5	91,0	84	72
150	146,0	131,0	116	95
1000	794,0	508,0	341	205



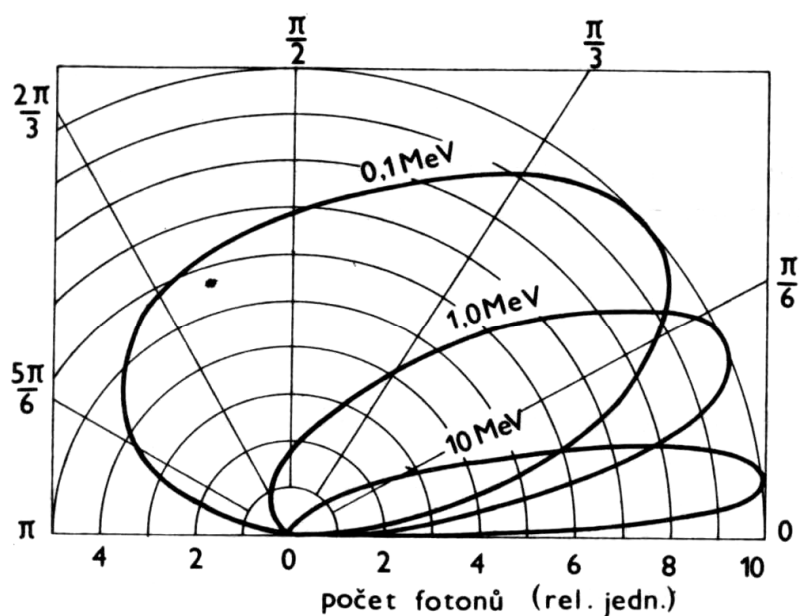
Obr. 4.15



Rozptyl monochromatického rentgenového záření na uhlíku. Na horizontální ose je uvedena vlnová délka  $\lambda$ , na vertikální ose počet detekovaných fotonů  $N$ . Maximum vlevo přísluší Comptonovsky rozptýleným fotonům na atomech, maximum vpravo fotonům rozptýleným na elektronech.

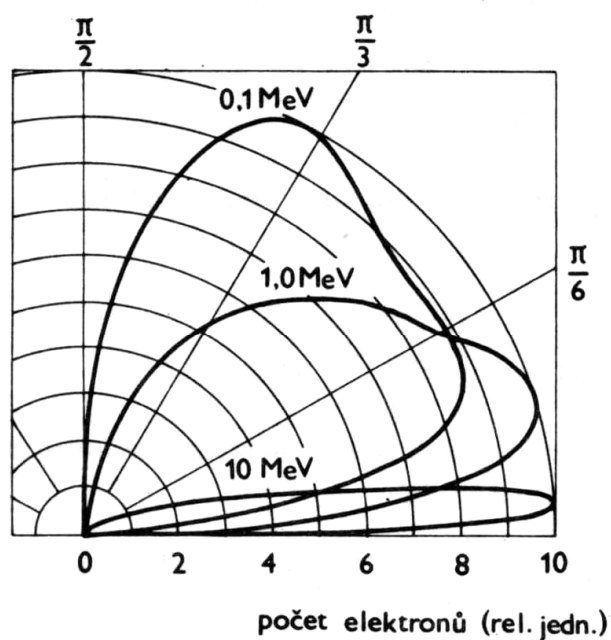
Elektrony uvolněné při Comptonově rozptylu s monoenergetickými fotony mají spojitě energetické spektrum od hodnoty 0 až do  $E_{max}$ .

Obr. 4.16



Úhlové rozložení rozptýlených fotonů při Comptonově jevu (relativní počet na jednotkový interval úhlu)

Obr. 4.17



Úhlové rozložení  
elektronů odražených při  
Comptonově jevu (relativní  
počet na jednotkový interval  
úhlu)

Účinný průřez pro tento děj stanovili O. Klein, Y. Nishina a I. E. Tamm :

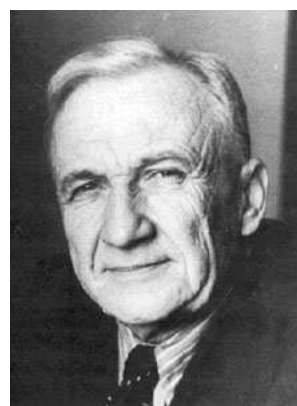
$$\sigma_c = \frac{3}{4} \cdot Z \cdot \sigma_0 \cdot \left\{ \frac{1+k}{k^2} \cdot \left[ \frac{2(1+k)}{1+2k} - \frac{1}{k} \cdot \ln(1+2k) \right] + \frac{1}{2k} \cdot \ln(1+2k) - \frac{1+3k}{(1+2k)^2} \right\} \quad (4.764)$$



Oskar Benjamin Klein  
(1894 – 1977)



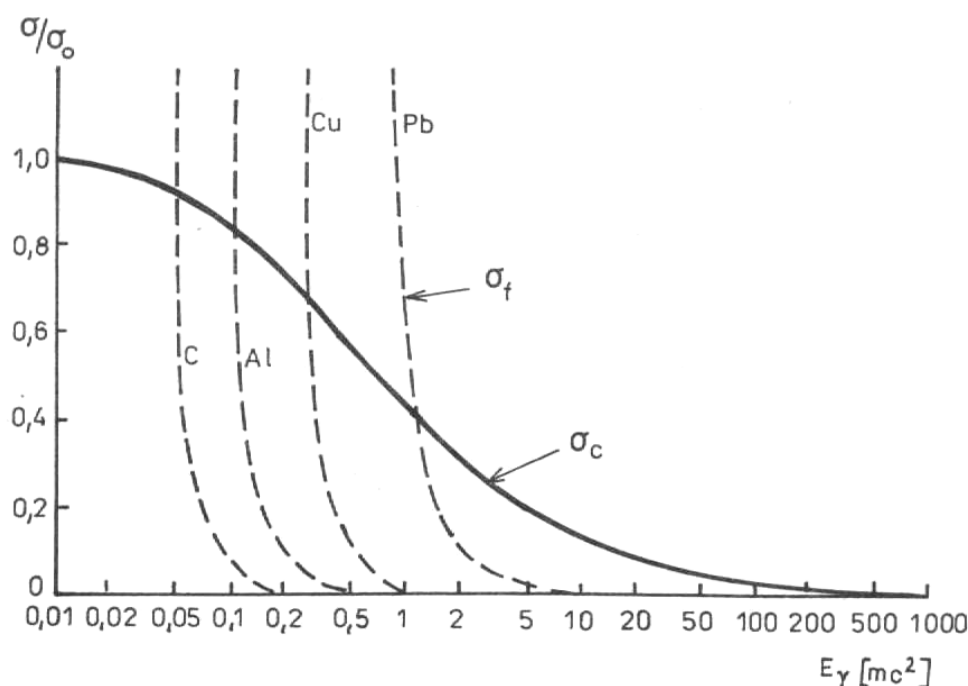
Yoshio Nishina  
(1890 – 1951)



Igor Yevgenyevič Tamm  
(1895 – 1971)

Závislost účinného průřezu Comptonova rozptylu  $\sigma_c$  na energii fotonu  $E_\gamma$  je znázorněna na obrázku 4.18, kde je také porovnán tento účinný průřez s průřezem  $\sigma_f$  pro fotoefekt na různých látkách.

Obr. 4.18



Závislost účinného průřezu Comptonova rozptylu  $\sigma_c$  na energii fotonu  $E_\gamma$ . Účinný průřez  $\sigma_c$  je porovnán s účinným průřezem  $\sigma_f$  pro různé prvky. Oba účinné průřezy uvedeny v jednotkách  $\sigma_0$ , energie  $E_\gamma$  v klidových hmotnostech elektronu.

Zatímco fotoefekt pozitivně přispívá k zobrazení tkání s různým rozložením, Comptonův rozptyl naopak kvalitu obrazu zhoršuje. V energetickém oboru rentgenova záření používaného v lékařské diagnostice mají rozptýlené fotony energii srovnatelnou s počáteční energií a jsou příčinou vážné degradace rentgenogramů.

Třetím procesem, který přispívá k oslabení intenzity svazku fotonů pohybujících se v dané látce je **produkce  $e^- - e^+$  párů** k níž může dojít v poli atomového jádra nebo s menší pravděpodobností též v poli elektronu.

Přítomnost jádra či elektronu je nutná, aby byly splněny zákony zachování energie a hybnosti soustavy.

Pro vygenerování páru  $e^- - e^+$  je nutné aby platilo  $E_\gamma > 2m_e \cdot c^2 = 1,022$  MeV pro tvorbu páru v poli jádra, nebo  $E_\gamma > 4m_e \cdot c^2 = 2,044$  MeV pro tvorbu páru v poli elektronu. Teorii tvorby elektron - pozitronových párů zpracovali Bethe a Heitler.



Hans Albrecht Bethe (1906 – 2005)



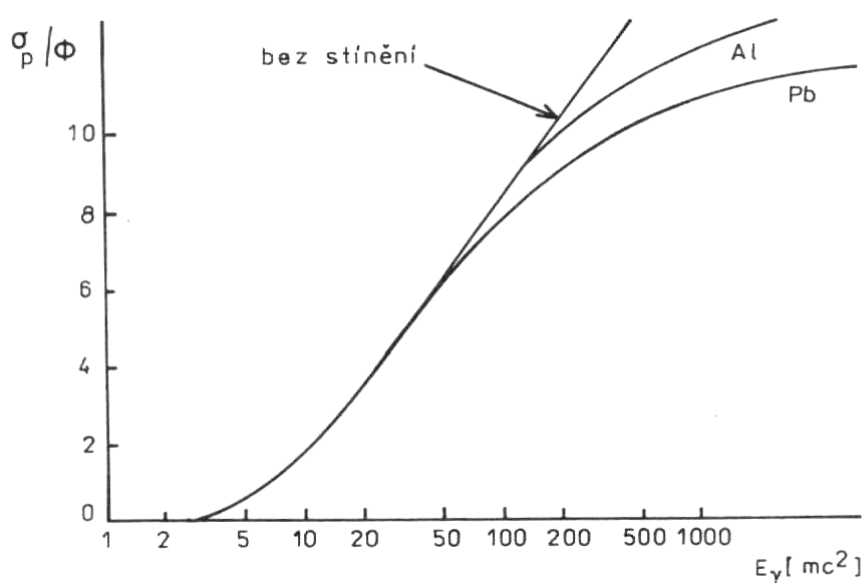
Walter Heinrich Heitler (1904 – 1981)

Přesný výraz pro účinný průřez tvorby párů je opět velmi složitý, při energiích fotonů, jež lze v lékařské fyzice předpokládat, však přibližně platí:

$$\sigma_p = Z^2 \cdot r^2 \cdot \alpha \cdot \left( \frac{28}{9} \cdot \ln(2k) - \frac{218}{27} \right). \quad (4.765)$$

Závislost účinného průřezu pro produkci párů na energii fotonu ukazuje obr. 4.19.

Obr. 4.19



Závislost účinného průřezu pro tvorbu párů  $\sigma_p$  na energii fotonu  $E_\gamma$ . Účinný průřez je vyjádřen v jednotkách  $\Phi = \sigma_0 Z^2 \alpha$ .

Zpomalováním vzniklého elektronu a pozitronu uvnitř látky samozřejmě dochází k vyzařování fotonů brzdného záření.

Po zpomalení navíc vytvoří pozitron vázaný stav  $e^+ - e^-$  s libovolným elektronem dané látky, který se nazývá pozitronium.

Tento systém se chová jako neutrální částice která po určité krátké době zanikne anihilací.

V pozitroniu mohou být spiny elektronu a pozitronu orientovány antiparalelně nebo paralelně.

V prvním případě se pozitronium rozpadá v souladu se zákonem zachování impulsmomentu na dva fotony:



a má dobu života  $\sim 10^{-10}$  s.

V druhém případě se musí, jak plyne ze zákona zachování impulsu a impulsmomentu, rozpadat na tři nebo více fotonů.

Tento proces je však méně pravděpodobný, a proto je odpovídající doba života  $\sim 10^{-8}$  s.

Docházíme tak k závěru, že tvorba párů vede jak k zeslabování fotonového svazku, tak zároveň k jeho rozptylu, podobně jako je tomu u Comptonefektu.

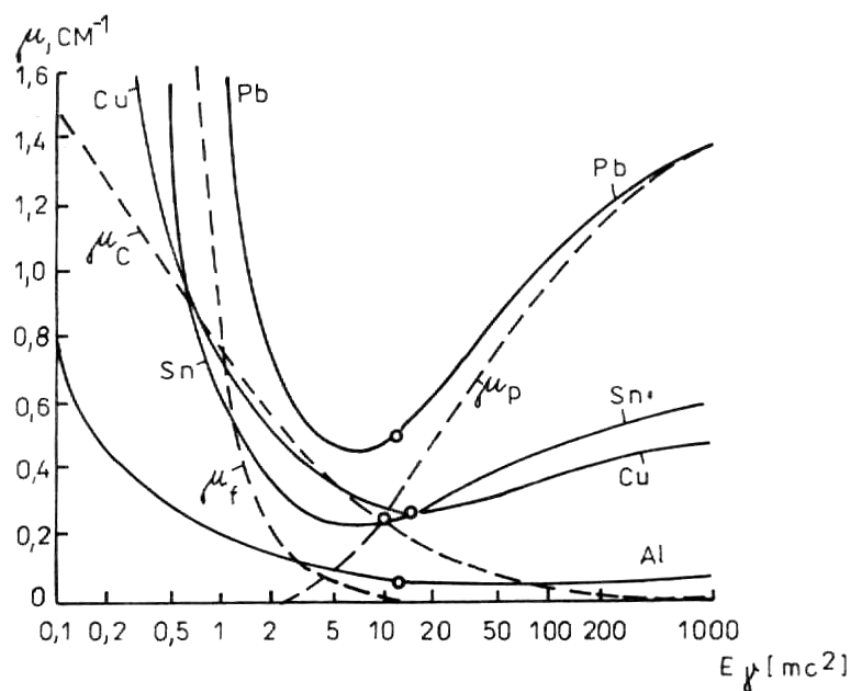
Fotoefekt, Comptonefekt a tvorba párů jsou tři procesy, které nezávisle na sobě oslabují intenzitu svazku fotonů procházejících danou látkou.

Celkový účinný průřez absorpce  $\sigma$  charakterizující oslabení intenzity svazku v rovnici ( 4.754 ) dostaneme tudíž sumací příslušných účinných průřezů pro jednotlivé procesy:

$$\sigma = \sigma_f + \sigma_c + \sigma_p . \quad (4.767)$$

Závislost součinitele zeslabení  $\mu$ , který získáme z účinného průřezu absorpce  $\sigma$  ze vztahu ( 4.754 ), na energii fotonů znázorňuje obr. 4.20, resp. 4.21.

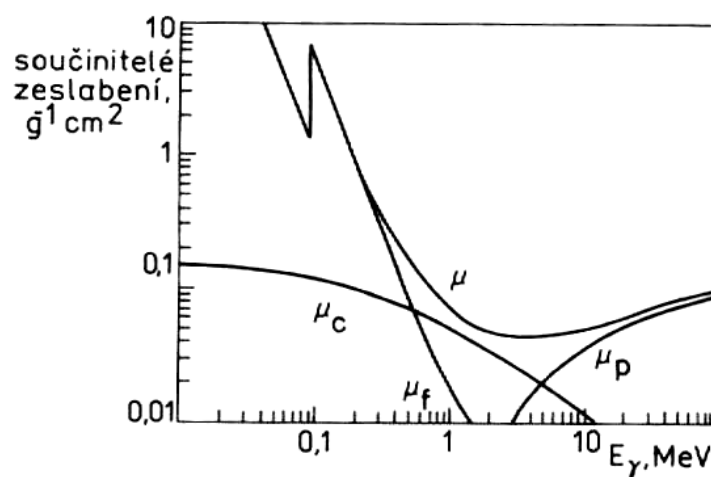
Obr. 4.20

Závislost součinitelů zeslabení  $\mu(\mu_f, \mu_c, \mu_p)$  na energii fotonu  $E_\gamma$  pro prvky Al, Cu, Sn, Pb.

Rozeznáme na něm tři oblasti energií.

Pro  $E_\gamma < E_1$  převládá fotoefekt, pro  $E_1 < E_\gamma < E_2$  Comptonefekt, a pro  $E_\gamma > E_2$  tvorba párů.

Obr. 4.21

Závislost dílčích součinitelů zeslabení  $\mu_c, \mu_f$  a  $\mu_p$  a úhrnného součinitele zeslabení  $\mu$  na energii fotonů záření  $\gamma$ 

Hranice  $E_1, E_2$  jsou různé pro různé prvky.

Např. pro hliník je  $E_1 = 0,05$  MeV a  $E_2 = 1,5$  MeV, pro olovo platí  $E_1 = 0,5$  MeV a  $E_2 = 5$  MeV.

Zajímavé rovněž je, jak se s rostoucím  $Z$  zvyrazňuje poloha minima závislosti  $\mu(E_\gamma)$ .

Viděli jsme, že pohlcování záření značně závisí na hmotnostním čísle  $Z$  atomů látky jíž prochází:

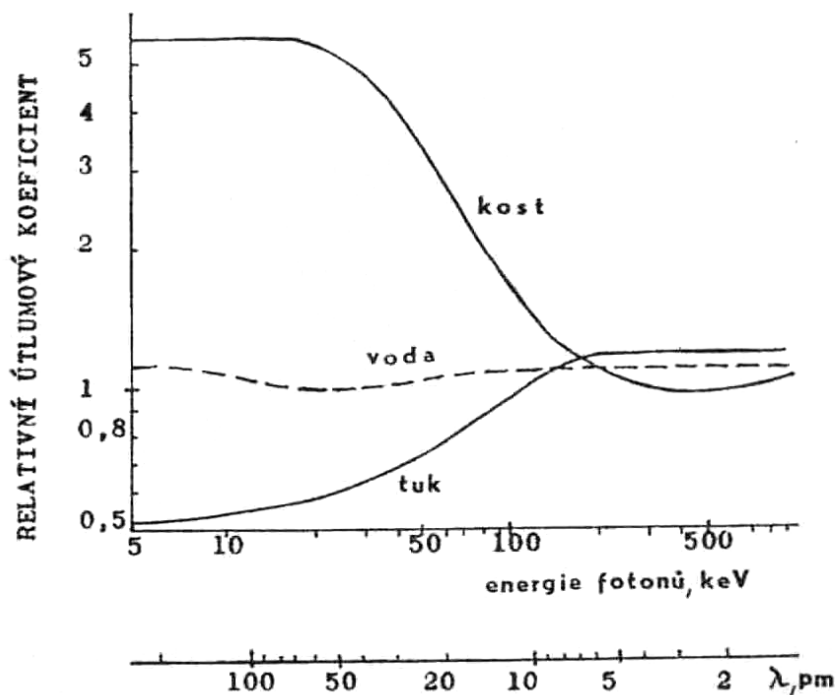
$$\sigma_f \sim \frac{Z^5}{E_\gamma^{7/2}}, \quad \sigma_c \sim \frac{Z}{E_\gamma}, \quad \sigma_p \sim Z^2 \cdot \ln(2E_\gamma). \quad (4.768)$$

Prvky s vyšším  $Z$  pohlcují rentgenové záření více, což umožňuje zobrazit jak změny ve vnitřní hustotě tak i změny ve vnitřním chemickém složení těles.

Např. v lidském těle se rentgenové záření pohlcuje 150-krát více v kostech, složených převážně z fosforečnanu vápenatého, než ve svalech, jejichž převažující složkou je voda.

Proto se na rentgenovém snímku jeví kosti světlejší než tkáně (viz obr. 4.22).

Obr. 4.22



Na podobném principu je založena rentgenová defektoskopie, pomocí níž se zjišťují skryté vady v kovových materiálech (např. dutiny v odlitcích).

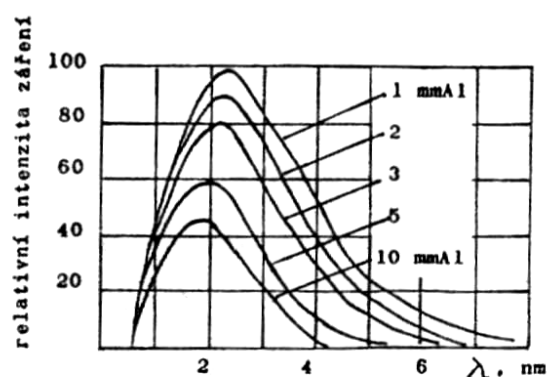
Záření které vychází z rentgenky, je zeslabováno filtrací (okénko rentgenky, chladicí olej atd.), která je ekvivalentní 0.5 - 2 mm Al. K této vlastní filtraci se dále volí tzv. přídavné filtry podle nastaveného napětí tak, aby byly splněny podmínky stanovené předpisy. Pro běžnou skiografii jsou přídavné filtry vyrobeny z hliníku, popř. mědi.

Pro mamografická vyšetření kde se vyžaduje velmi měkké záření, se jako přídavný filtr nejčastěji používá molybden, popř. rhodium. Filtry zeslabují nízkoenergetickou složku spojitého rentgenového spektra, která by se jinak absorbovala v těle pacienta neúčelně, neboť by nepřispěla k tvorbě obrazu.

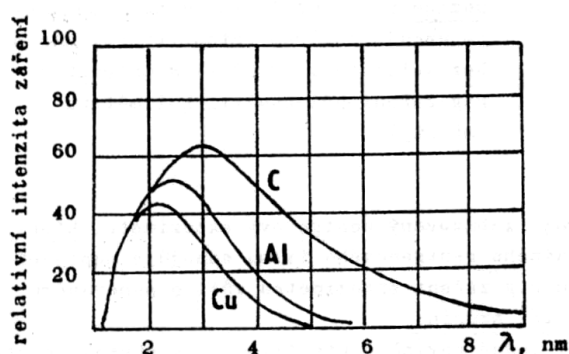
Použitím filtrů se snižuje nejen hustota toku fotonů, ale svazek se stává pronikavějším, vzrůstá střední energie fotonového spektra.

Na obr. 4.23 vidíme, kterak se výstupní záření zeslabuje při použití filtrů téhož atomového čísla, avšak rozdílné tloušťky.

Na obr. 4.24 jsou znázorněny změny relativní intenzity rentgenového záření ( v % ), pro tři druhy filtrů při napětí rentgenky  $U=100$  kV: C - filtrace grafitovým filtrem tloušťky 11 mm, Al - filtrace hliníkovým filtrem tloušťky 4,4 mm, Cu - filtrace měděným filtrem tloušťky 0,25 mm.



Obr. 4.23



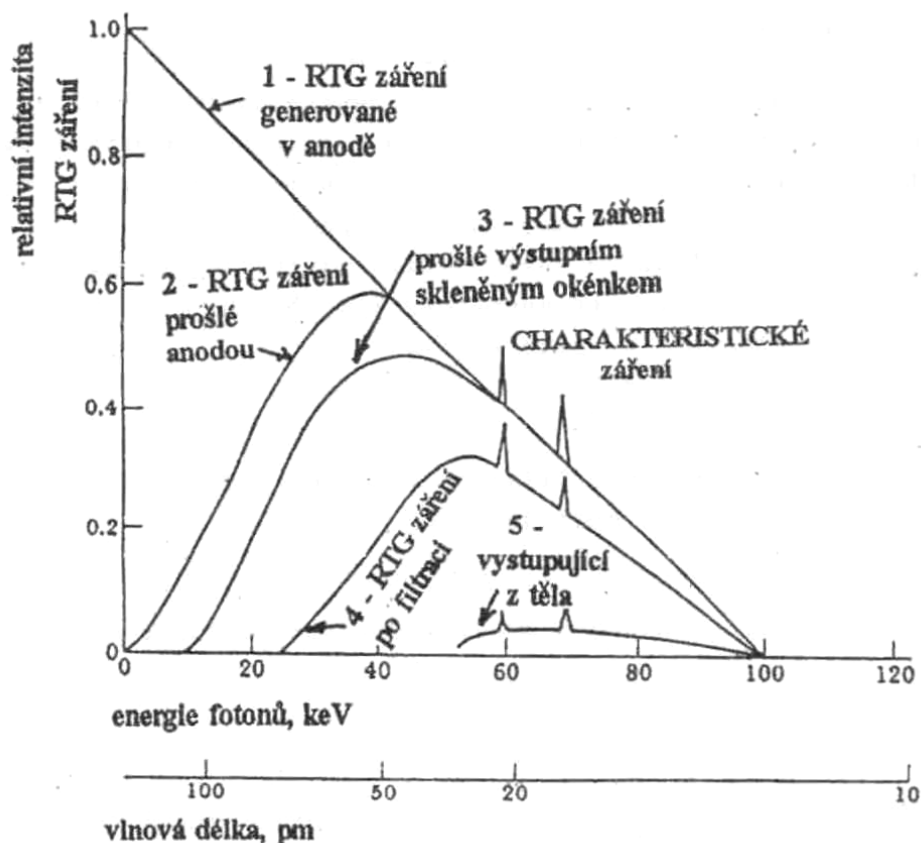
Obr. 4.24

Na obrázku 4.25 můžeme vidět srovnání relativních intenzit rentgenového záření procházejícího postupně jednotlivými prvky



zobrazovací soustavy: anoda, okénko rentgenky, filtrace, tělo pacienta, v závislosti na energii RTG. fotonů.

Obr. 4.25



Zavedeme nyní tzv. **polotloušťku** stínění  $d_{1/2}$  jakožto tloušťku stínícího materiálu která zeslabí intenzitu prošlého rentgenova záření právě na polovinu.

Polotloušťku lze snadno určit logaritmováním vztahu ( 4.754 ) a dosazením  $I_0 = 2I$  :

$$d_{1/2} = \frac{\ln 2}{\mu} \quad ( 4.769 )$$

V tabulce 4.12 jsou uvedeny polotloušťky různých materiálů pro fotony různých energií:

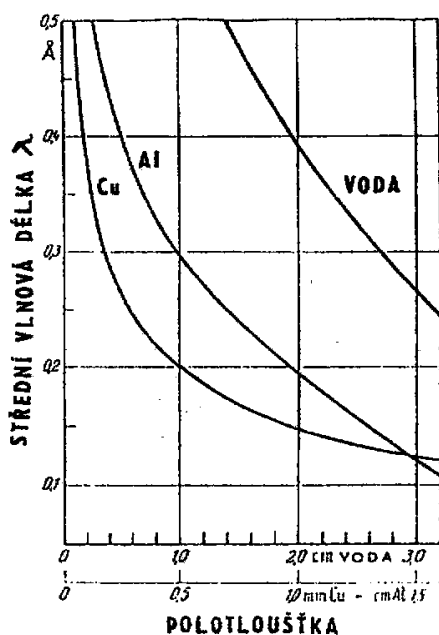
Materiál stínění	Energie fotonů [keV]													
	25	50	100	250	500		600		800		1000		1250	
	a	a	a	a	a	b	a	b	a	b	a	b	a	b
Voda	15	32	41	55	72	110	77	110	88	120	98	120	110	140
Beton	—	—	—	—	34	47	37	50	42	58	46	64	52	73
Železo	—	—	—	—	10,5	15	11,5	17	13	20	15	21	17	24
Olovo	0,02	0,08	0,1	0,8	4	5	5,5	6	7	8,5	9,5	10	11	11

a) hodnoty pro úzký svazek záření  
b) hodnoty pro široký svazek záření

Tabulka 4.12: polotloušťky [mm] pro různé stínící materiály v závislosti na energii fotonů.

Na obr. 4.26 vidíme relaci mezi střední vlnovou délkou ( v  $\text{\AA}$  ) a korespondující polotloušťkou mědi, hliníku a vody.

Obr. 4.26



**Druhou polotloušťkou**  $d_{II\ 1/2}$  se rozumí tloušťka stínícího materiálu, při níž se intenzita záření prošlého první polotloušťkou zeslabí opět na polovinu.

To nám umožňuje kvantifikovat tzv. **homogenitu záření**  $H$  jakožto podíl

$$H = \frac{d_{I1/2}}{d_{II1/2}}. \quad (4.770)$$

U homogenního záření je  $H \approx 1$ , u heterogenního záření je  $H < 1$ .

### Interakce elektronů s látkou



Joseph John Thompson (1856 – 1940)

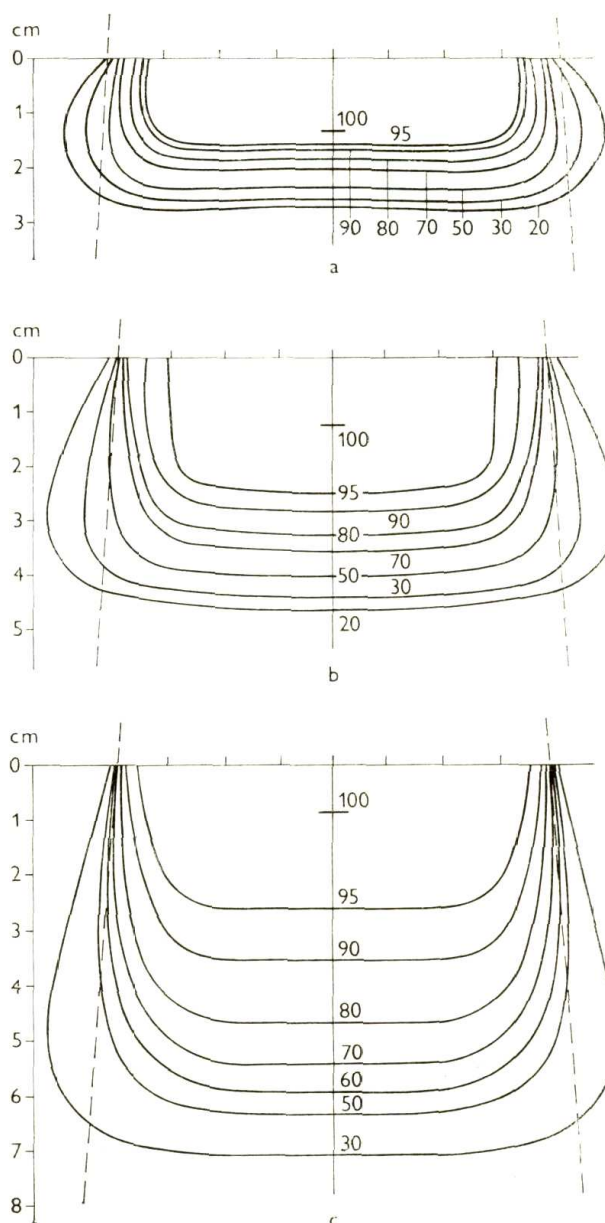
#### *Průchod rychlých elektronů hmotou*

Při průchodu rychlých elektronů hmotou dochází k těmto jevům:

**Rozptyl elektronů elastickými srážkami s oběžnými elektrony.** Primární elektron se přitom vychýlí ze své dráhy bez ztráty energie. Úhel rozptylu může činit až  $180^\circ$  a jednotlivé elektrony mohou pokračovat ve své dráze různým směrem. Tak svazek elektronů ztrácí svoji intenzitu do hloubky a původně ostře ohraničený svazek dostává "bachratý" tvar (obr. 4.27).

Obr. 4.27

**Izodozní křivky elektronového svazku měřené ve vodním fantómu**  
 a — 7 MeV, kruhové pole  $\varnothing$  8 cm, OK 50 cm, 80 % izodoze v 1,8 cm. Ve větší hloubce než 2 cm je již málo záření;  
 b — 11 MeV, kruhové pole  $\varnothing$  8 cm, OK 50 cm, 80 % izodoze ve 3,2 cm; pokles hloubkové dávky je mírnější než u 7 MeV. V hloubce 8 cm je již minimum záření. 80 % izodoze nedosahuje na stranách k okraji geometrického vymezení pole!  
 c — 18 MeV, kruhové pole  $\varnothing$  8 cm, OK 50 cm, 80 % izodoze ve 4,7 cm. Pokles hloubkové dávky je mírnější než u 11 MeV. V hloubce 8 cm je již minimum záření. 80 % izodoze nedosahuje na stranách k okraji geometrického vymezení pole!



**Vznik sekundárních elektronů neelastickým nárazem na oběžné elektrony.** Oběžný elektron je primárním elektronem vyražen ze své dráhy, část kinetické energie primárního elektronu se spotřebuje na uvolnění sekundárních elektronů (primární ionizace), část energie je předána jako kinetická energie sekundárnímu elektronu, a tak sekundární elektron (paprsek  $\beta$ ) může dále na své dráze ionizovat (sekundární a terciární ionizace). Na totální ionizaci při průchodu rychlých elektronů tkání má primární ionizace podíl  $1/3$ , sekundární a terciární ionizace asi  $2/3$ .

**Vznik brzděného záření.** Při zabrzdění elektronu v silovém poli jádra

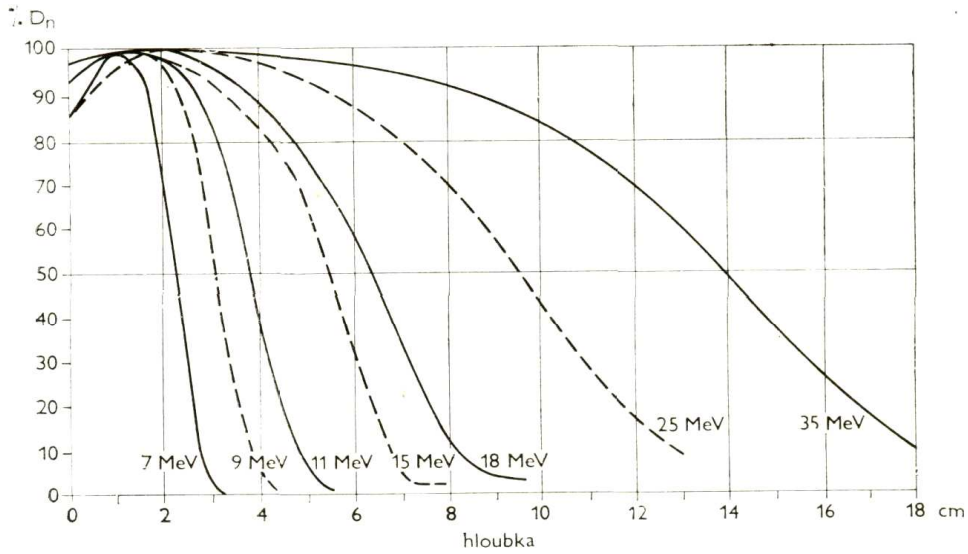
atomu se uvolní kinetická energie primárního elektronu ve formě elektromagnetického záření, jehož intenzita stoupá se zvyšující se energií elektronu a se zvyšujícím se atomovým číslem látky, kterou prochází (okolo energie elektronů 100 MeV a při vysokoatomovém čísle absorpčního materiálu - W, Pb - připadá skoro 100 % absorbované energie na brzdné záření). S přibývajícím energií elektronů přibývá brzdného záření ve směru primárního svazku elektronů. Toto má význam při ochraně před elektronovým zářením o vysoké energii, kdy dáváme přednost větší tloušťce ochranného materiálu o středním atomovém čísle před tenčí vrstvou materiálu o vysokém atomovém čísle.

### **Fyzikální charakteristiky elektronového svazku záření**

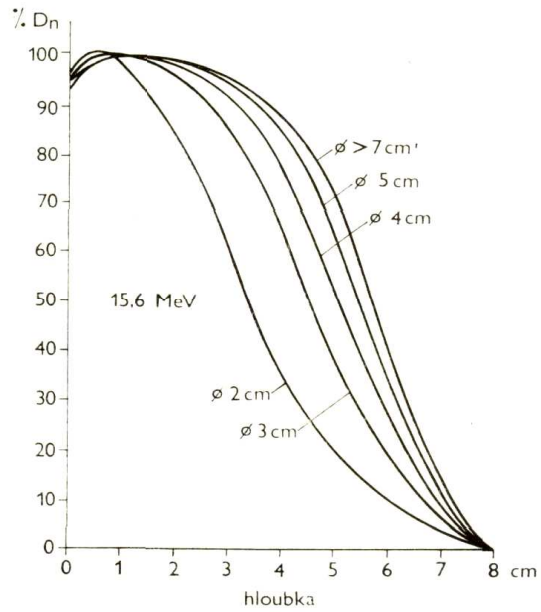
**Povrchová dávka** je závislá na mnoha faktorech: na energii elektronů, na velikosti pole, na kolimačním systému (otevřené pole nebo tubus) a na vyrovnávacích filtrech. Dále na tom, zda je použita rozptylovací fólie (z urychlovačů a betatronů vychází elektronové záření v úzkém svazku), anebo zda se ozařuje tzv. scanning-systémem, tj. že se úzký svazek elektronů pohybuje, jako by zapisoval jednu řádku za druhou (obdoba katodového paprsku na televizní obrazovce). Tzv. build-up effect je u elektronového záření málo výrazný. Tato zóna nižší dávky na povrchu a těsně pod povrchem může činit několik mm a rovná se asi 90 % maximální dávky. Čím je pole větší nebo energie elektronů vyšší, tím je vyšší relativní povrchová dávka. Okolo 18 MeV je již prakticky 95 %.

**Hloubková dávka** dosahuje maxima pod povrchem a podle energie elektronů je maximální dávka uložena v různé hloubce a vytváří na spádovém grafu hloubkových dávek různě široké plató. Čím vyšší energie elektronů, tím je toto plató maximální dávky širší a zasahuje do větší hloubky (viz obr. 4.28). Za maximem hloubkové dávky dochází k prudkému (lineárnímu) poklesu. Tento strmý pokles dávky do hloubky prozařovaného objemu je výraznější u nižších energií elektronů. Na tvar spádové křivky hloubkové dávky (i maximální dávky) má vliv též velikost pole, jak je uvedeno na obr. 4.29. Průběh hloubkových dávek je velmi dobře patrný z izodozních křivek (viz obr. 4.27). Je na nich vidět výrazný prudký spád procentuální dávky do hloubky, zejména u nižších energií, ale i průběh 80% izodozy, která se v hloubce nekryje s velikostí geometrického pole.

Obr. 4.28, 4.29



**Procentuální hloubkové dávky urychlených elektronů v závislosti na energii.**  $\%D_n$  klesá prudce se zvětšující se hloubkou zejména u nižších energií urychlených elektronů. Pokles dávky závisí na velikosti pole (viz obr. 167) a na materiálu rozptylových fólií a tubusů



**Závislost průběhu relativní hloubkové dávky urychlených elektronů 15,6 MeV na velikosti pole**

## Generátory Roentgenova záření

Důležitou skupinu zdrojů ionizujícího záření představují urychlovače nabitých částic, v nichž jsou elektrony urychlovány elektrickým polem.

Využívá se buď svazku těchto nabitých částic nebo sekundárních částic vznikajících při interakčních procesech na vhodných terčích.



Wilhelm Konrád Roentgen (1845 – 1923)

Jedním z nejjednodušších takovýchto zařízení je rentgenová lampa (rentgenka).

Její základní části jsou **katoda** emitující elektrony, kterou obvykle tvoří wolframové vlákno žhavené na teplotu 2000 - 2500 °C, a **anoda**, zhotovená obvykle buď z wolframu nebo z molybdenu či rhodia (mamografy).

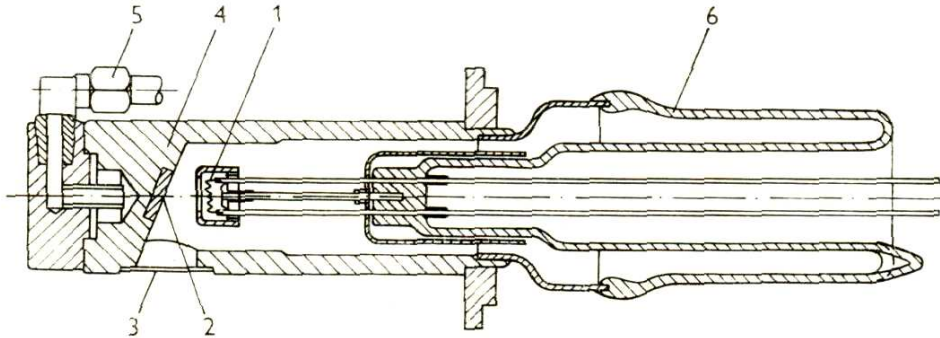
V některých impulsních rentgenkách (tzv. zábleskových) vzniká emise elektronů ze studené katody na kterou se přivede vhodně tvarovaný impuls vysokého napětí.

Mezi katodou a anodou je udržován velký potenciálový rozdíl  $U \in \langle 10 \text{ kV} ; 500 \text{ kV} \rangle$  v němž se emitované elektrony pohybují se značným zrychlením směrem k anodě, na níž dopadají vysokou rychlostí s energií  $E = U \cdot e$  [J] za vzniku brzdného, případně i charakteristického záření.

Ve skleněné baňce s maximální tloušťkou stěn 2,5 mm, s vakuem  $10^{-5} - 5 \cdot 10^{-6}$  Pa, se nalézají katoda s anodou v konstantní vzdálenosti. Sklo rentgenky musí mít vhodné tepelné, vakuové a dielektrické vlastnosti.

Experimentálně bylo zjištěno, že ve skle o tloušťce 2 – 3 mm se při napětí 50 kV pohlcuje 20 - 25 % rentgenového záření, při napětí 25 kV je to již 60 - 70 %.

V rentgenkách používaných při napětí  $U > 30$  kV se někdy používá výstupní okénko vyrobené z berilia, které má pro rentgenové záření nízkou pohltivost.



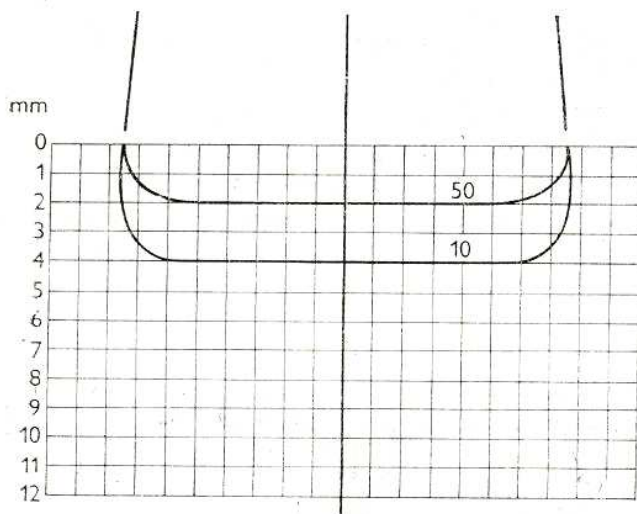
Obr. 4.30: Řez rentgenkou s beryliovým okénkem chlazené vodou 50 kV, 25 m A. Typ AEG 50 (Maohlett): 1 — katoda, 2 — anoda, 3 — beryliové okénko, 4 — anodová hlavice, 5 — přípoj na vodu ke chlazení, 6 — skleněná baňka



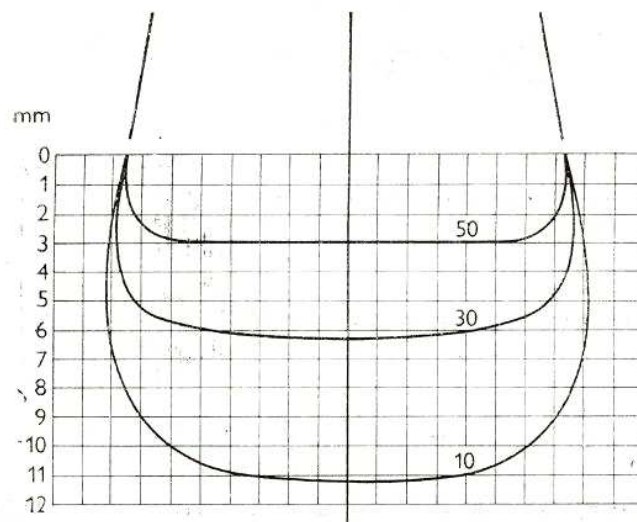
Obr. 4.31: Radioterapeutický zákrok prováděný rentgenkou s beryliovým okénkem



## 4.32



Izodoze rentgenky  
s beryliovým okénkem  
50 kV, OK 10 cm, bez filtru

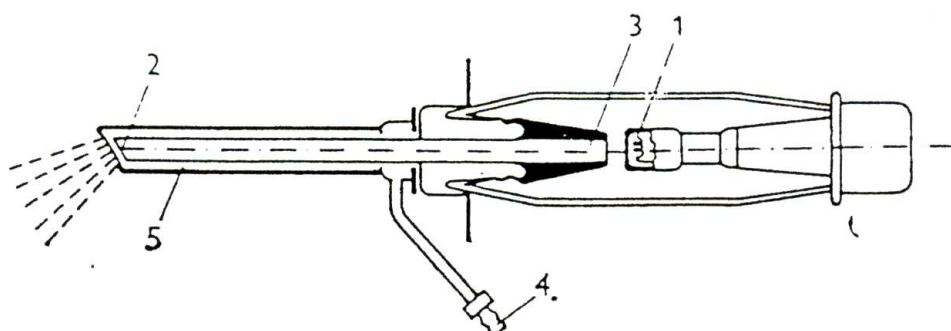


Izodoze rentgenky  
s beryliovým okénkem  
50 kV, OK 10 cm, filtr 0,1  
mm Al

U rentgenek pro napětí  $U < 30$  kV se ve skle baňky v místě výstupu rentgenova paprsku vybrušuje ploška o tloušťce 1 - 1,5 mm aby se snížilo zeslabení vystupujícího rentgenova záření.

Rentgenové lampy rozdělujeme na :

- 1) **S pevnou anodou** : její anoda se při expozici nepohybuje



**Obr. 4.33:: Schéma rentgenky Metalix pro kontaktní a endoterapii:**

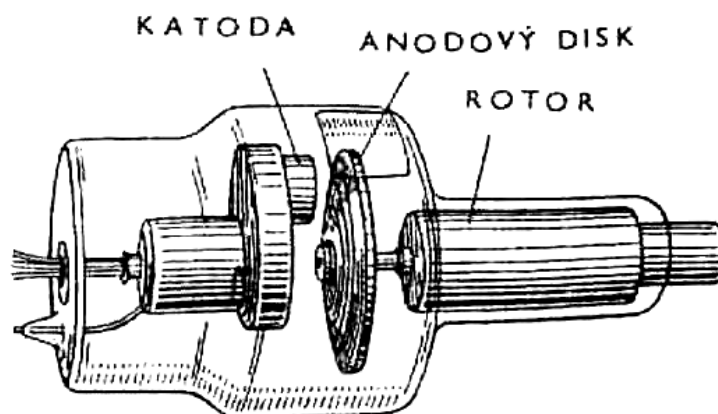
1 — rukojet a 2 — přívodní hadice, kterou je veden vzduch pro chlazení rentgenky a vysokonapěťový kabel; 3 — anoda s napětím 10 — 50 kV proti uzemněné kruhové katodě, 4 — přívod chladícího plynu, 5 — skleněná trubice.

2) **S rotační anodou** : její anoda se při snímkování otáčí s frekvencí závislou na kmitočtu napětí přiváděného na stator rentgenky (50, 100, 150 a 300 Hz) - je to nejčastěji 2800, 5600, 8500, 17000 ot/min.

V rentgenkách s rotační anodou se dosahuje pulsní výkon 50 - 100 kW (krátkodobý výkon během 100 ms. dosahuje až 200 kW).

Maximální provozní napětí u tohoto typu rentgenky bývá zpravidla 25 - 150 kV.

Obr. 4.34



3) **Spínací rentgenka** : má pomocnou mřížku takže napětím na této mřížce lze spínat anodový proud.

4) **Řízená rentgenka** : má velikost a tvar impulsu anodového proudu určený časovou změnou napětí na pomocné mřížce.

Proud elektronů závisí na materiálu, teplotě a ploše povrchu katody.

Např. rentgenky pro lékařskou rentgenografii pracují při proudech  $I \in \langle 50 \text{ mA} ; 1 \text{ A} \rangle$ .

Detailní tvar spektra emitovaných fotonů závisí na materiálu terčíku anody jakož i na použitém napětí.

Procházejí-li elektrony látkou, interagují s jejími atomy či molekulami elektromagneticky čímž ztrácejí energii.

Vzhledem k tomu, že mají stejnou hmotnost jako elektrony v obalu těchto atomů, bude na jejich zbrzdění v látce mít podstatný vliv jejich interakce s těmito elektrony.

Procházející elektron bude ztrácet svoji energii jednak tím, že bude atomy či molekuly ionizovat, a jednak tím, že bude vysílat tzv.

**brzdné záření.**

Brzdné záření může vzniknout jak při interakci elektronu s elektronem v atomu či molekule, tak i při interakci s jádrem o atomovém čísle  $Z$ .

Tyto tzv. **radiační ztráty** energie jsou z klasického hlediska úměrné čtverci zrychlení částice, a proto jsou výraznější pro částice lehké než pro částice těžké.

Radiační ztráty lze velmi přesně spočítat na základě kvantové elektrodynamiky.

Přibližné vyjádření těchto ztrát v závislosti na energii udává následující formule:

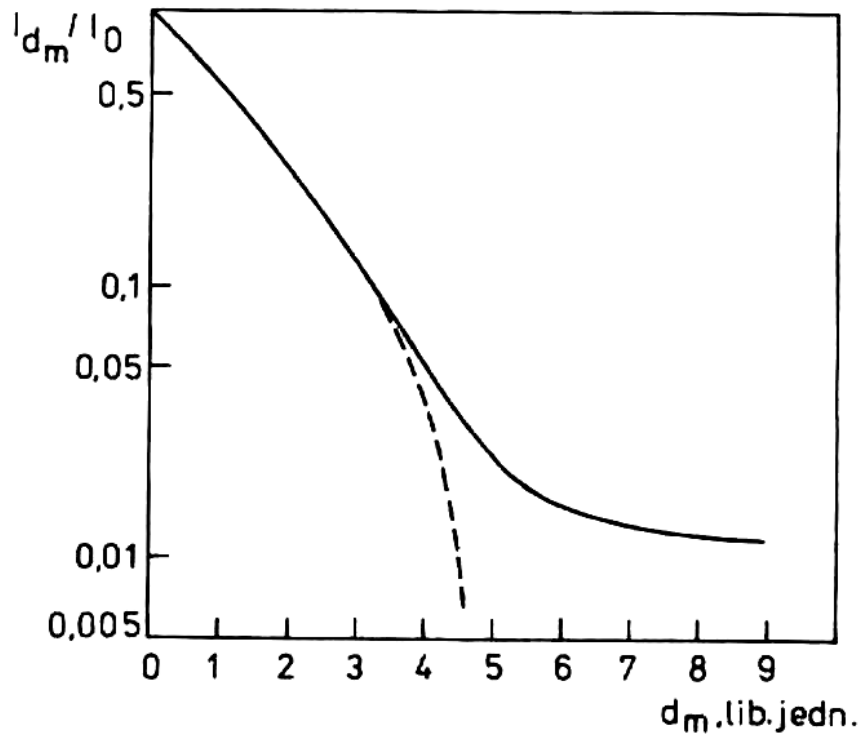
$$-\left(\frac{dE_k}{dx}\right)_{rad} = n \cdot E_k \cdot \frac{Z^2 \cdot r_0^2}{137} \cdot \left(4 \ln \frac{183}{Z^{1/3}} + \frac{2}{9}\right), \quad (4.771)$$

kde

$$r_0 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{m_e \cdot c^2} [m], \quad (4.772)$$

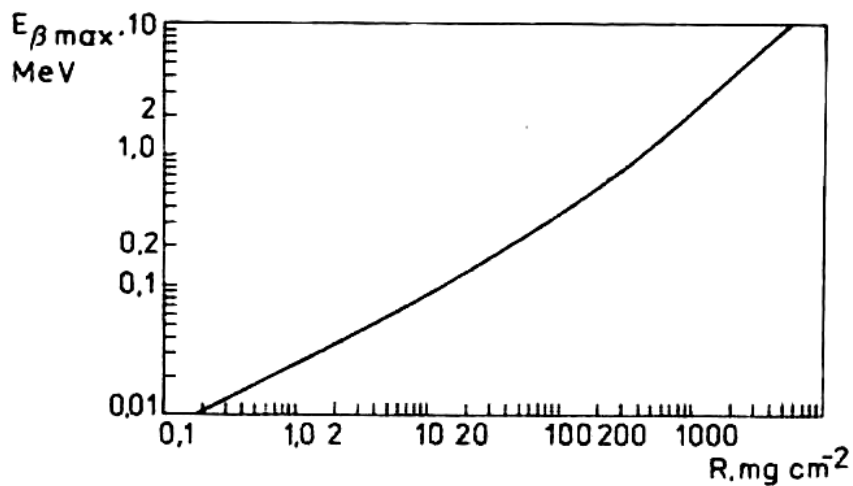
je tzv. **klasický poloměr elektronu**,  $n$  je počet atomů v objemové jednotce látky.

Obr. 4.35



Idealizovaná absorpční křivka pro monoenergetické částice  $\beta$  (intenzita  $I$  záření jako funkce plošné hmotnosti  $d_m$  absorbujícího materiálu)

Obr. 4.36



Závislost dosahu  $R$  částic  $\beta$  v hliníku na maximální energii  $E_{\beta \max}$  jejich spektrálního rozdělení

Zavedeme ještě délku  $X_0$  tak, aby platilo

$$E_k(x) = E_{k0} \cdot \exp\left(-\frac{x}{X_0}\right), \quad (4.773)$$

kde  $E_{k0}$  je počáteční energie elektronu,  $E_k(x)$  je kinetická energie elektronu měřená po průletu dráhy  $x$  v daném prostředí.

Potom je  $X_0$  délkou dráhy, na které klesne energie elektronu na  $1/e$  původní velikosti.  $X_0$  se nazývá **radiační délkou**.

Přibližně platí:

$$X_0 = \frac{const}{\rho \cdot Z^2}, \quad (4.774)$$

Kde  $\rho$  je hustota prostředí.

Brzdné záření elektronu vede při vysokých energiích k jeho rozhodujícím energetickým ztrátám.

Přitom elektron může ztratit velkou část své energie při vzniku jednoho tvrdého fotonu, nebo v několika následných interakcích.

Pro celý děj platí zákony zachování relativistické energie a hybnosti.

Protože elektron vstupuje do reakce s atomem jako volný a jako volný z ní rovněž vystupuje, nejsou jeho energie kvantovány.

Proto leží i energie vyzářených fotonů ve spojitém spektru.

Při zvyšujícím se potenciálovém rozdílu  $U$  mezi elektrodami se kromě brzdného záření objevuje v RTG spektru diskrétní složka, složená z nevelkého počtu spektrálních čar.

Zvyšuje-li se dále energie elektronů, počet a intenzita čar roste.

Poloha čar závisí na materiálu anody.

V tomto spektru se čáry sdružují do sérií, Vzdálenosti čar se přitom zmenšují směrem ke krátkovlnné hraně série.

RTG série se označují velkými písmeny abecedy K,L,M,N, ... s postupně rostoucí vlnovou délkou.

čáry uvnitř série se označují řeckými indexy podle abecedy, a to tak, že  $\alpha$  přísluší nejdelší vlnové délce.

Buzení jednotlivých sérií závisí na energii elektronů.

Tak např. na rhodiové elektrodě používané v mamografii pozorujeme pro následující potenciálové rozdíly tyto série:

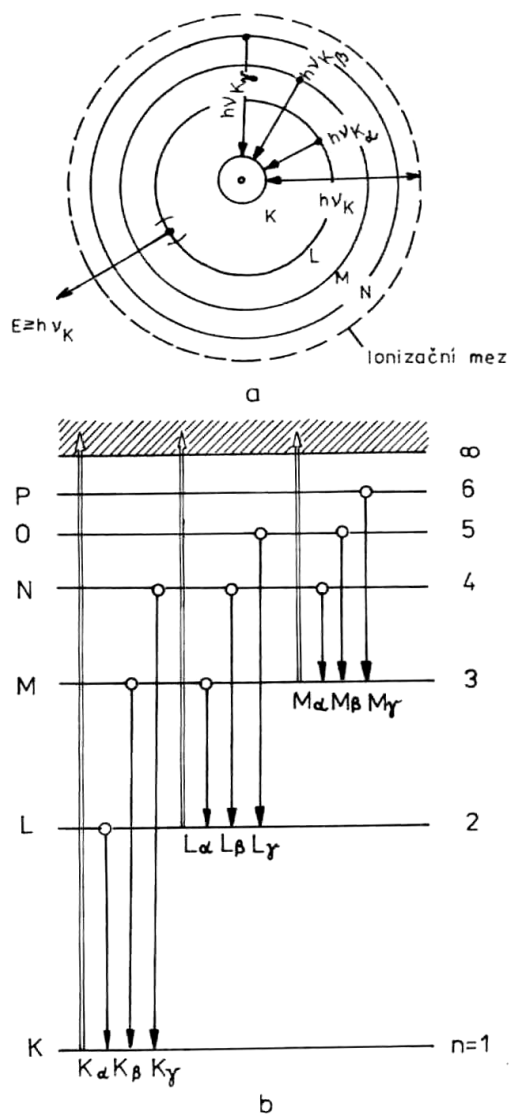
> 0,5 kV — M

> 3,0 kV — M, L

> 23 kV — M, L, K.

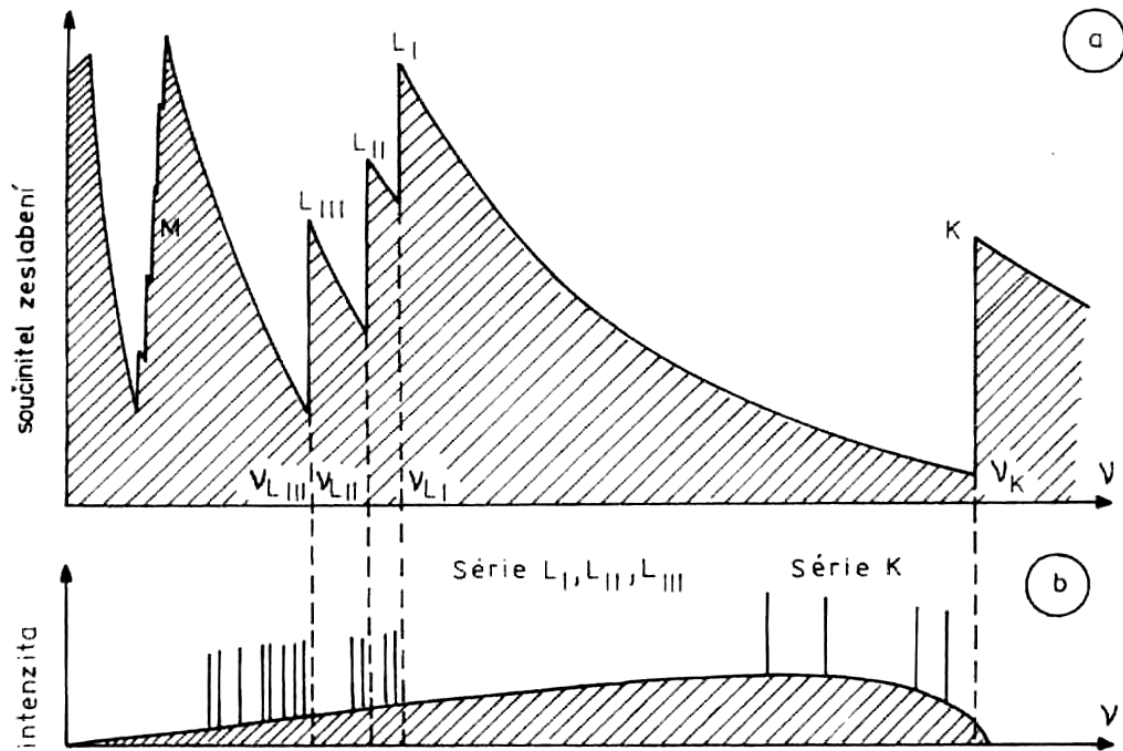
Čáry emisního RTG spektra vykazují multipletní strukturu a jejich poloha závisí na atomovém čísle  $Z$  anody.

Obr. 4.37



a – schematický obraz vzniku série K, b – odpovídající zjednodušený diagram RTG termů,  $h = 2\pi\hbar$ . Čárkovaně je vyznačena ionizační mez. V diagramu termů není zobrazena jejich jemná struktura.

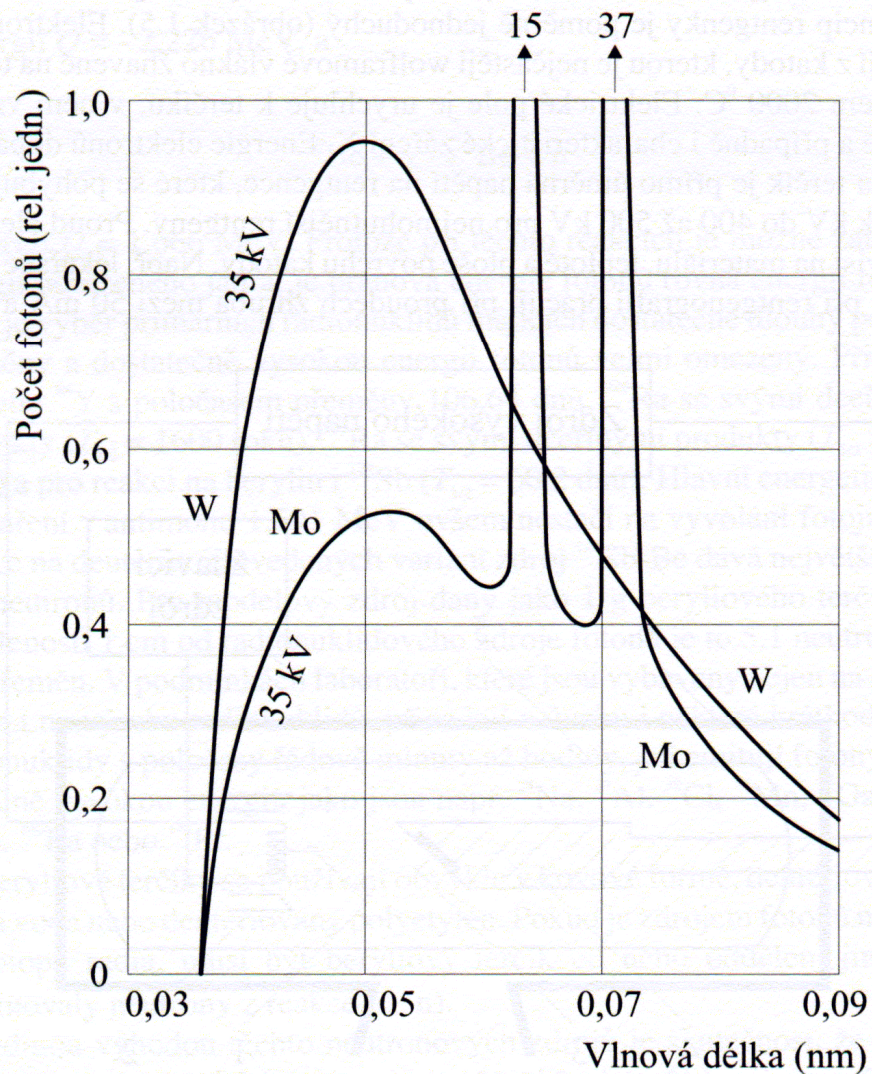
Obr. 4.38



a – absorpční RTG spektrum platiny jako závislost součinitele zeslabení na kmitočtu  $\nu$  absorbovaného záření, b – zjednodušené spektrum emisní v závislosti na energii excitace  $E = h\nu = 2\pi h\nu$  (v případě, že  $E > h\nu_K$ ).

Na obr. 4.39 jsou znázorněna spektra pro wolframový a molybdenový terčik při napětí 35 kV, které stačí k tomu, aby byly buzeny K-čáry molybdenu, ale nikoli wolframu.

Obr. 4.39



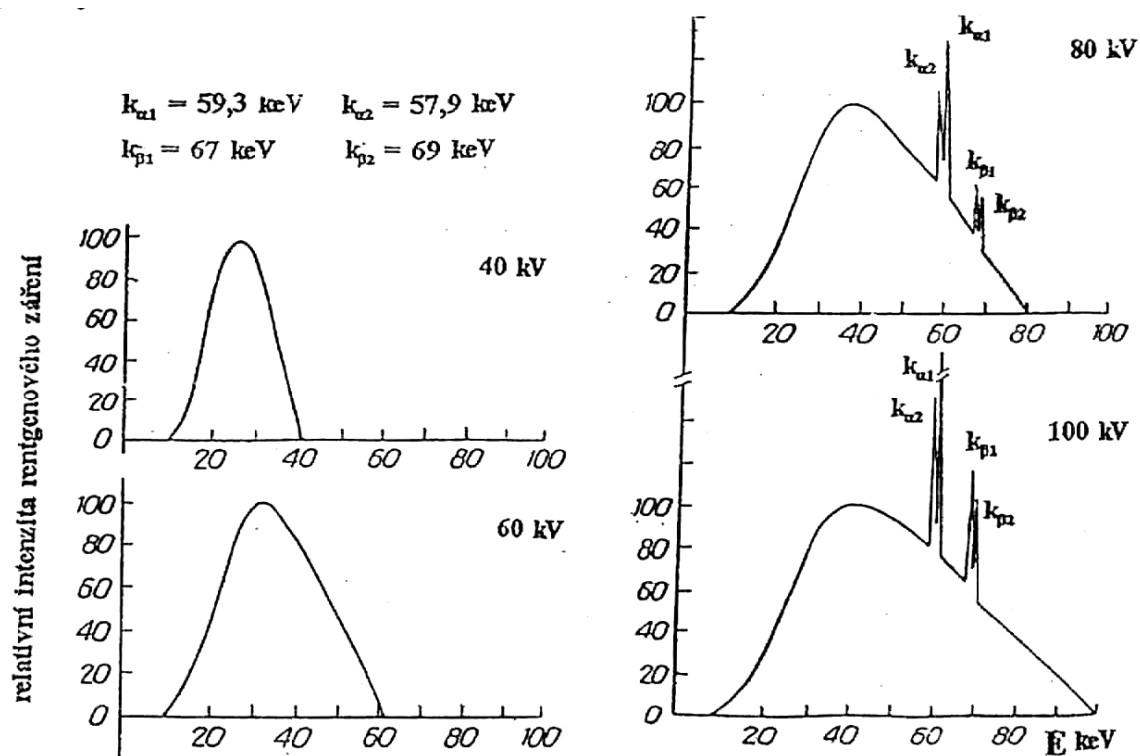
Na obr. 4.40 jsou uvedena spektra jedné a téže rentgenky pro čtyři různé hodnoty anodového napětí.

První částí spektra je *spojitá část*, jejíž původ je v brzděném záření, a druhou je *diskrétní část* projevující se rezonančními vrcholy, kterou nazýváme **charakteristickým spektrem anody**.

Spektrální čáry  $k_{\alpha}$  a  $k_{\beta}$  jsou částí podstatně bohatšího charakteristického spektra.



Obr. 4.40



Pro prvky důležité z hlediska konstrukce anod rentgenek jsou spolu s atomovými čísly  $Z$  uvedeny v tabulce 4.13 hodnoty budících potenciálů a vlnové délky dominantních spektrálních čar charakteristického záření:

Tab. 4.13

DOMINANTNÍ VLNOVÉ DÉLKY [pm] CHARAKTERISTICKÉHO ZÁŘENÍ

Prvek	At. číslo $Z$	Potenciál buzení, [kV]	$\alpha_1$	$\alpha_2$	$\beta_1$	$\beta_2$
Pb	82	87,6	16,5	17,0	14,6	14,1
W	74	69,3	20,9	21,3	18,4	17,9
Ag	47	25,5	55,8	56,2	49,6	48,6
Mo	42	20,0	70,8	71,2	63,1	62,0
Cu	29	8,86	153,7	154,1	138,9	137,8
Fe	26	7,10	193,2	193,6	175,3	174,0
Cr	24	5,98	228,5	228,9	208,0	206,7

Rychlost elektronů které uvnitř rentgenky narážejí na anodu je obrovská.

Např. při napětí 200 kV již převyšuje 2/3 rychlosti světla.

Pouze 1 - 2 % elektronů však proniknou až do blízkosti atomových jader materiálu anody kde se nalézá slupka K.

Zde jsou elektrony náhle prudce zabrzděny a jejich kinetická energie se změní v rentgenové záření zvané **nárazové záření**.

Nárazové záření má spojité spektrum, které začíná na nejkratší vlnové délce  $\lambda_{\min}$  určené Duaneovým - Huntovým zákonem:

$$\lambda_{\min} = \frac{1,234}{U} , \quad ( 4.775 )$$

kde  $\lambda_{\min}$  je v jednotkách nm,  $U$  je v kV.

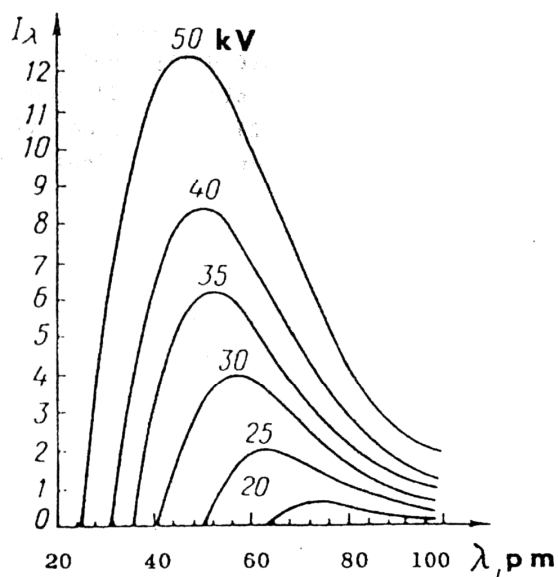
Intenzita  $I$  nárazového záření v celém oboru vlnových délek je určena vztahem

$$I = \int_{\lambda_{\min}}^{\infty} I_{\lambda} d\lambda , \quad ( 4.776 )$$

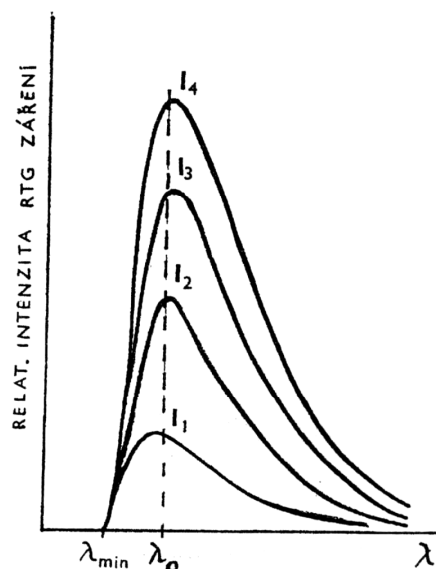
kde  $I_{\lambda} = f(\lambda)$  vyjadřuje závislost spektrální hustoty intenzity nárazového záření na vlnové délce.

Rozdělení intenzity rentgenového záření ve spektru nárazového záření je pro různé hodnoty anodového napětí znázorněna na obr. 4.41, při různých hodnotách anodového proudu na obr. 4.42:

Obr. 4.41



Obr. 4.42



kde  $I_4 > I_3 > I_2 > I_1$ .

Pro intenzitu nárazového záření platí empirický vztah

$$I = k \cdot I_a \cdot Z \cdot U_a^2, \quad (4.777)$$

kde  $k$  je konstanta úměrnosti,  $I_a$  je anodový proud,  $Z$  je atomové číslo materiálu anody a  $U_a$  je anodové napětí.

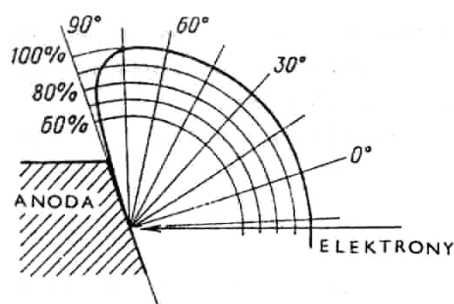
U většiny rentgenek dopadají elektrony na rovinu anody pod úhlem odlišným od kolmice.

Poněvadž k brzdění elektronů, tj. ke generování nárazového záření dochází zejména v povrchové vrstvě anody, má tato vrstva vliv na jeho intenzitu  $I$ .

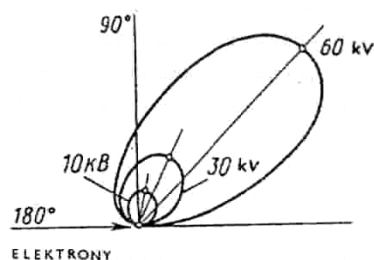
Nárazové záření se průchodem k povrchu anody zeslabuje a poněvadž zeslabování rentgenových paprsků závisí na délce dráhy jíž musí záření uvnitř materiálu anody projít, je rozdělení intenzity nárazového záření vystupujícího z anody značně prostorově nesymetrické - viz obr. 4.43.

Teoretická azimutální rozdělení intenzit nárazového záření pro různá anodová napětí uvádí obr. 4.44:

Obr. 4.43



Obr. 4.44



Z obrázku je patrné, že směrovost nárazového záření se začíná výrazněji projevovat při anodových napětích  $U > 30$  kV. Pro ionizační ztráty energie elektronu při průchodu hmotným prostředím platí:

$$-\left(\frac{dE_k}{dx}\right)_{ion} = \frac{2\pi \cdot e^4}{m_e \beta^2 c^2} \cdot n \cdot Z \cdot \left[ \ln \frac{m_e \beta^2 E_k c^2}{2I^2 \cdot \gamma^2} - \ln 2 \cdot (2 \cdot \gamma - 1 + \beta^2) + 1 - \beta^2 + \frac{(1 - \gamma)^2}{8} \right] \quad (4.778)$$

Porovnáme-li výrazy ( 4.771 ) a ( 4.778 ), zjistíme, že

$$\frac{\left(\frac{dE_k}{dx}\right)_{rad}}{\left(\frac{dE_k}{dx}\right)_{ion}} \approx \frac{E_k \cdot Z}{1600 m_e c^2} \quad (4.779)$$

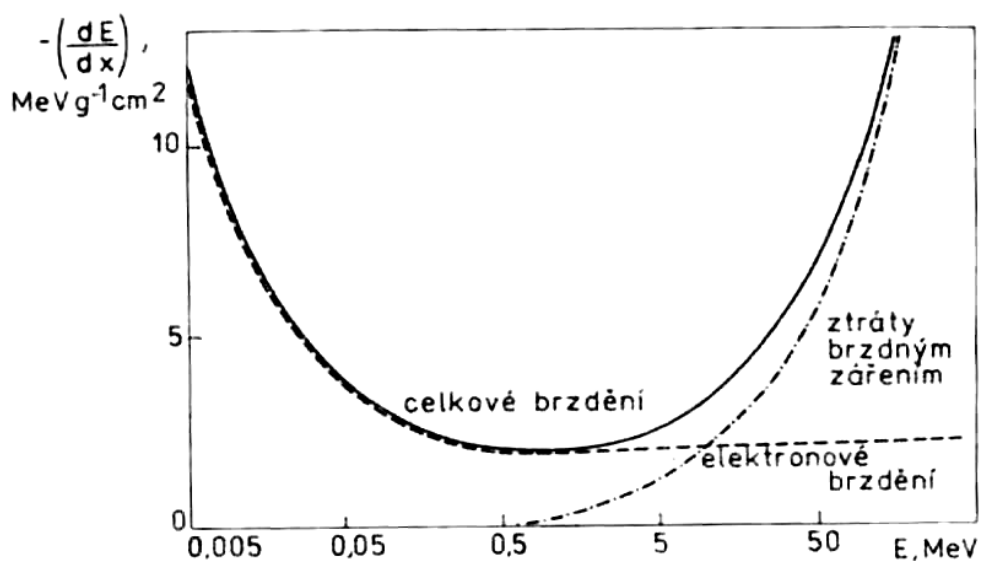
Energii, při které dochází k vyrovnání obou druhů ztrát, nazýváme **kritickou energií**.

Její hodnoty pro různé látky uvádí tabulka 4.14.

Látka	Protonové číslo Z	Radiační délka $X_0$ [mm]	Kritická energie [MeV]
H	1	$15 \cdot 10^3$	1000
C	6	0,224	140
N	7	360	120
O	8	280	100
Al	13	0,0969	60
Ar	18	120	40
Fe	26	0,0182	30
Cu	29	0,0147	25
Pb	82	0,00517	10
vzduch	7,3	330	120

Tab. 4.14: hodnoty radiální délky a kritické energie pro různé materiály

Obr. 4.45



Podíl ztrát energie brzděním zářením (čerchovaná křivka) a elektronovým zářením (čárkovaná křivka) při různé energii  $E$  elektronů. Plná křivka vyznačuje celkové brzdění.

$-dE/dx$  je vyjádřeno v  $\text{MeV g}^{-1} \text{cm}^2$

Vidíme tedy, že na produkci fotonového záření se spotřebuje jen malá část energie nesené elektrony dopadajícími na terčik.

Poměr mezi energií fotonů brzděného záření a energií ve svazku elektronů  $K_{ef}$  je možné vyjádřit aproximativním vztahem vyplývajícím z ( 4.779 ):

$$K_{ef} \approx 10^{-6} U \cdot Z, \quad ( 4.780 )$$

kde  $U$  je urychlující napětí v kV,  $Z$  je protonové číslo materiálu terčíku.

Vezmeme-li tedy např. wolfram, kde  $Z = 74$  a dosadíme napětí  $U = 100$  kV, dostaneme účinnost převodu energie elektronů na energii fotonů  $K_{ef} = 0.0074$ , tj. méně než 1 %.

Zbývající energie tedy zůstane absorbována v terčíku a přemění se na teplo.

V důsledku toho se anoda intenzívně zahřívá často na teplotu převyšující 400 °C.

Odtud vyplývají značné nároky na odvod tepla, řešené buď mědí jako materiálem anody, nebo se u rentgenek na vyšší výkony, jak již bylo uvedeno výše, velmi často používají rychle rotující terčíky, kde svazek elektronů postupně zasahuje různá místa terčíku čímž dochází k rozložení dopadající energie po celém jeho povrchu.

Terčíky lze rovněž chladit vodou nebo olejem.

Rentgenka se připojuje na velmi krátkou dobu (obvykle při největším přípustném výkonu).

Během této expoziční doby se rozptýlený výkon na ohniskové dráze rentgenky snižuje tak, aby teplota ohniskové dráhy zůstala konstantní.

Dosahuje se toho tzv. klesající zátěží  $P_{kl} = f(t)$ .

Anoda rentgenky během expozice obdrží celkové množství energie

$$W = \int_0^t P_{kl} dt . \quad ( 4.781 )$$

Při spojitě klesající zátěži  $P_{kl}$  dochází ke spojitě změně anodového proudu.

Klesající zátěž  $P_{kl}$  se obvykle zadává graficky.

Zaostření elektronového svazku se dosahuje optimalizací elektrického pole v mezielektrodevém prostoru (v blízkosti anody má na tvar trajektorie elektronů pochopitelně rozhodující vliv tvar anody).

Při bombardování ohniska rentgenky svazkem elektronů se část primárních elektronů odráží od povrchu anody pod různými úhly.

Odražené elektrony mají různou rychlost.

Rychlé elektrony při srážce svoji kinetickou energii téměř nemění, kdežto pomalejší elektrony při neelastické srážce ztrácejí část své pohybové energie.

Koeficient sekundární emise  $\sigma$  se s růstem anodového napětí postupně snižuje a při dosažení určitého minima se jeho hodnota s dalším zvyšováním  $U$  již nemění.

Sekundární elektrony, brzděné elektrickým polem, mění svoji dráhu a převážně se znovu vrací na anodu, kde vyvolávají tzv. **afokální záření**, které snižuje ostrost zobrazení vyšetřovaného objektu.

Jestliže u wolframové anody činí podíl afokálního záření při napětí 100 kV cca. 20 %, pak s poklesem  $U$  velikost afokálního záření klesá: 90 kV - 18 %, 60 kV - 14 %, 40 kV - 11 %, 20 kV - 8,5 %.

Aby se jakost rentgenogramu příliš nesnížila, je třeba co nejvíce potlačit vliv sekundárních elektronů, např. volbou optimální geometrie baňky a jakosti jejího skla, popř. kovovou střední částí.

Dále je třeba dodržet podmínku

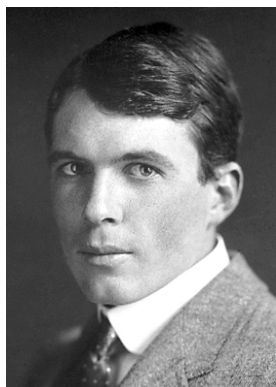
$$R_a = R_f + 2d, \quad (4.782)$$

kde  $R_a$  je poloměr anody,

$R_f$  je poloměr ohniska,

$d$  je mezielektrodevá vzdálenost.

### c) Interakce těžkých nabitých částic s látkou



William Lawrence Bragg (1890 – 1971)

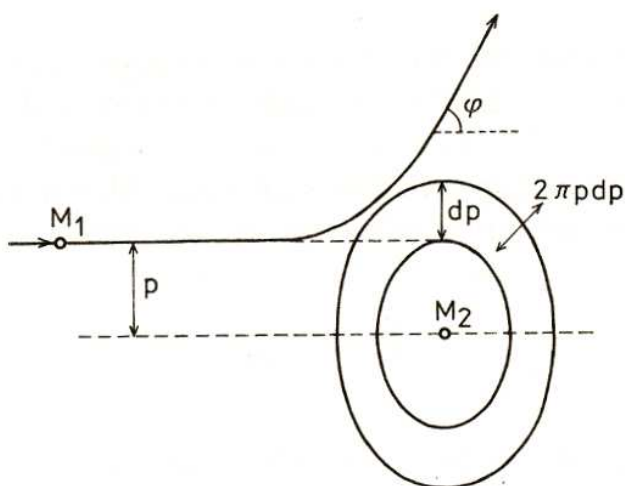
Mikroobjekty procházející danou látkou interagují s jejími atomy či molekulami známými interakcemi. Z nich nejpodstatnější bude interakce elektromagnetická, neboť atomy mají elektronový obal a jádra jsou nabitá, dále interakce silná, která se uplatní při srážkách hadronů, iontů či atomových jader s jádru atomů dané látky, a konečně i interakce slabá mezi leptony, případně mezi leptony a hadrony. V této kapitole se soustředíme na elektromagnetickou interakci a pojednáme nejdříve o základních procesech, s nimiž se při průchodu mikroobjektů látkou ve sféře této interakce setkáváme.

Těžká nabitá mikročástice je částice, jejíž klidová hmotnost je srovnatelná s hmotností protonu nebo je větší než hmotnost protonu. Vzhledem k její veliké hmotnosti ve srovnání s hmotností elektronu bude při průchodu látkou jistě interagovat s jádru atomů, z nichž je látka složena. Dojde tedy k jejím srážkám s jádru a k rozptylu. Při každé individuální srážce je možné použít Rutherfordův vzorec pro rozptyl, neboť bariéra vytvořená přítomností členu s momentem hybnosti v hamiltoniánu popisující tento děj nedovolí většinou částici přiblížit se natolik k jádru atomu, aby se viditelně projevila silná interakce. V Rutherfordově rozptylu převládá rozptyl na malé úhly. Tedy v individuální srážce nedojde k velkému odklonu dráhy částice od původního směru. Částice se však s velkou pravděpodobností při průchodu látkou srazí ještě s dalšími atomovými jádru, bude procházet, jak se říká, *mnohonásobným rozptylem*. Při něm se odchylky od původního směru postupně skládají, ale v průměru se prakticky anulují, takže, jak se dá ukázat, střední úhel odchylky "trajektorie" od původního směru je přibližně nepřímo úměrný druhé



mocnině kinetické energie částic. Odchylka je proto tím menší, čím částice bude mít vyšší energii.

Obr. 4.46



Uvažujme srážku těžké částice, jejíž hmotnost je  $M_1$  a energie  $E_1$ , s terčovým atomovým jádrem o hmotnosti  $M_2$  a energii  $E_2 = 0$ . Při srážce se část kinetické energie částice přeneše na terčové jádro a směr letu částice se při tom změni o úhel  $\varphi$  (viz obr. 4.46). Ze zákonů zachování energie a hybnosti lze vypočítat energie obou částic po srážce. Jestliže  $M_1 < M_2$  (což je u jaderného záření nejběžnější případ), je energie  $E'_1$  částice po srážce spojené s rozptylem o úhel  $\varphi$  dána vztahem

$$E'_1 = E_1 \left[ \frac{M_1 \cos \varphi + (M_2^2 - M_1^2 \sin^2 \varphi)^{1/2}}{M_1 + M_2} \right]^2. \quad (4.783)$$

Analogický vzorec lze odvodit i pro  $M_1 > M_2$ . Ze vzorce vyplývá, že částice ztratí relativně tím více energie, čím větší je úhel rozptylu  $\varphi$ . Pro popis brzděného procesu je nutné znát pravděpodobnost srážek částice s atomovými jádry vedoucích k rozptylem o různé úhly (způsobujících různé relativní ztráty energie), a to v závislosti na energii částice. Při srážkách s atomovým jádrem se ovšem částice obecně nechová jako pružná koule a je nutno vzít v úvahu složitější

silové působení mezi oběma partnery, které je charakterizováno tzv. interakčním potenciálem. U jaderného záření se podle vzájemné energie interagujících částic a jejich geometrického přiblížení uplatňují různé interakční potenciály. Forma interakčního potenciálu bude vedle energie částice záviset i na srážkovém impakčním parametru  $p$ , tj. na kolmé vzdálenosti původního směru dráhy částice od terčového jádra, a na tomto parametru bude za daných podmínek záviset i úhel rozptylu  $\varphi$ . Z obr. 4.46 je zřejmé, že rozptylem o úhel  $\varphi$  budou z původního rovnoběžného svazku odchýleny ty částice, jejichž impakční oblast je vyznačena šrafovaně, a tedy diferenciální (vztažený k určitému úhlu  $\varphi$ ) srážkový účinný průřez bude dán výrazem

$$d\sigma = 2\pi p dp \quad (4.784)$$

Ze souvislosti srážkového parametru s úhlem rozptylu vyplývá dále, že i energie přenesená při srážce na terčové jádro bude záviset na  $p$  (k největšímu přenosu energie dojde při  $p = 0$ , kdy  $\varphi = 180^\circ$ ). Je-li znám průběh interakčního potenciálu, lze integrací příspěvků daných diferenciálními účinnými průřezy pro danou energii získat hodnotu celkového srážkového účinného průřezu (pro pružný rozptyl)

$$\sigma_{sp} = 2\pi \int \sigma_{\Omega}(\varphi) \sin \varphi d\varphi \quad (4.785)$$

kde úhlový účinný průřez  $\sigma_{\Omega}(\varphi) = d\sigma/d\Omega$  je měrou počtu částic rozptýlených do prostorového úhlu  $\Omega$  odchýleného od původního směru o úhel  $\varphi$ . Prolétá-li svazek částic vrstvou prostředí plošné hmotnosti  $d_m$  ( $\text{g cm}^{-2}$ ), ve kterém připadá  $N_{(A)}$  atomů na 1 g, pak střední podíl částic, který ve vrstvě interaguje, je dán vztahem.

$$N_i = N_{(A)} d_m \sigma_{sp}. \quad (4.786)$$

Střední volná dráha částice mezi srážkami následujícími za sebou je nepřímou úměrná  $\sigma_{sp}$ .

Obecně je účinný průřez  $\sigma$  dán podílem pravděpodobnosti interakce pro jednu terčovou entitu (jádro, atom apod.) a fluence  $\phi$  prošlých

částic (rozměrem jednotky  $\sigma$  je  $m^2$ , resp.  $cm^2$ ); fluencí částic rozumíme  $dN/da$ , kde  $dN$  je počet částic, které dopadly na kouli s plochou hlavního řezu  $da$  (rozměrem jednotky  $\phi$  je  $m^{-2}$ , resp.  $cm^{-2}$ ).

Řadou následných srážek bude tedy docházet k postupnému brzdění částice a tzv. lineární brzdná schopnost (tj. diferenciální úbytek energie najednotkovém úseku dráhy  $x$ ) je rovna

$$S_{sp} = -\left(\frac{dE}{dx}\right)_{sp} = N_{(A)}\sigma_{sp}(E), \quad (4.787)$$

kde  $\sigma_{sp}(E)$  je účinný průřez pro brzdění částice pružnými srážkami. Jakmile energie těžké nabitě částice v důsledku těchto srážek dostatečně klesne, anebo je z jiných důvodů dostatečně malá, začne rychleji ztrácet energii jiným způsobem, a to nepružnými srážkami s atomy či molekulami dané látky jako celky. Tyto atomy nebo molekuly se při srážce *excitují* a *ionizují*. Při excitaci předá částice část své energie na zvýšení energie atomového či molekulárního obalu. Po excitaci dojde k vyzáření fotonu daným atomem nebo molekulou. Jednotlivé úbytky energie částice jsou však relativně malé, leží, jak je známo, v intervalu (1 eV, 10 eV). Při ionizaci dojde k uvolnění elektronu a ztráta energie u mikročástice je větší.

Při brzdění těžkých jaderných částic se v různých oblastech jejich dráhy (podle energie částic) uplatňují interakční potenciály, jež lze aproximovat různými výrazy. Např. při vyšších energiích (u částic  $\alpha$  nebo protonů s energií řádu MeV) se uplatňuje Coulombův potenciál elektrostatického odpuzování jádrem daný rovnicí

$$V_c = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}, \quad (4.788)$$

kde  $Z_1$  a  $Z_2$  je příslušný počet elementárních nábojů částice a terčového jádra,  $e$  elementární náboj a  $r$  vzdálenost mezi interagujícími částicemi. Rozptyl uskutečňující se v tomto silovém poli se nazývá **Rutherfordovým rozptylem**.

V oblastech nižších energií těžkých částic (řádu desítek až stovek

keV) se při interakcích uplatňuje i částečné stínění jaderného potenciálu elektronovým obalem a při popisu interakce se používá tzv. stíněného potenciálu  $V(r)$  vyjádřeného vztahem

$$V(r) = \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r} \Phi(r) \quad . \quad (4.789)$$

Stínící faktor  $\Phi(r)$  lze aproximovat např. různými formami tzv. mocninových potenciálů typu  $\Phi(r) = a/r^s$ , kde  $a$  je konstanta a  $s$  celé číslo.

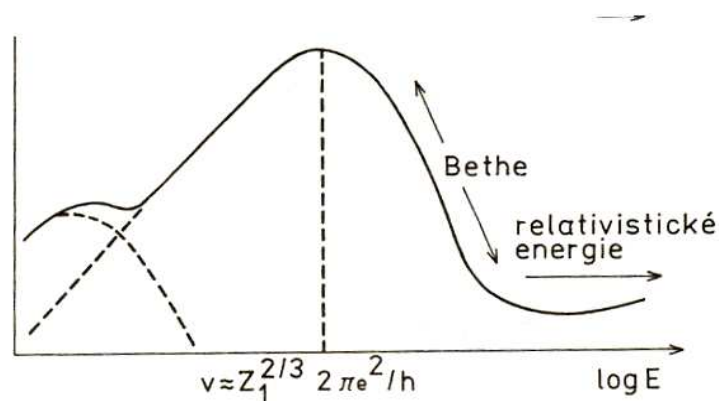
V oboru energií řádu keV a nižších se srážky těžké částice blíží rázu pružných koulí a jako interakčního potenciálu se používá potenciálu tvrdé koule (s poloměrem nepřímo závislým na energii).

V oboru vyšších energií (desetiny až jednotky MeV a výše) se při brzdění těžkých částic uplatňují i interakce s orbitálními elektrony atomů brzdného prostředí. Vzhledem k relativně malé hmotnosti elektronů jsou ztráty energie při těchto jednotlivých interakcích malé a nedochází při nich k významnější změně směru pohybu letící částice. Energie předaná částicí se zde projeví ionizací a elektronovou excitací atomů prostředí. Určité procento elektronů přitom však získá energii dostatečnou k tomu, aby se po uvolnění z terčového atomu chovaly jako sekundární částice (označované jako záření delta) schopné podél vlastní krátké dráhy vyvolat další ionizace a excitace.

Vzhledem k tomu, že jednotlivé akty ionizace a excitace podél dráhy částice následují za sebou v malých vzdálenostech, je částice účinně brzděna i těmito procesy a analogickým způsobem jako při brzdění jaderném lze i zde definovat příslušný účinný průřez pro elektronové brzdění  $\sigma_e(E)$  a elektronovou složku lineární brzdné schopnosti

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = N_{(A)} \sigma_e(E) \quad (4.790)$$

S rostoucí energií elektronová složka brzdné schopnosti zpočátku roste a dosahuje maxima při rychlosti  $u$ , která je



Obr. 4.47: Složky jaderného a elektronového brzdění těžké částice v závislosti na její energii  $E$

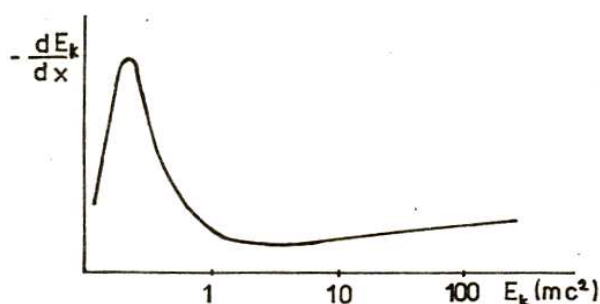
závislá na náboji částice  $\left(u \sim \frac{Z_1^{2/3} e^2}{\hbar}\right)$  - viz obr. 4.47. V oblasti ještě vyšších energií pak elektronová brzdná schopnost opět klesá a je dána Betheho formulí

$$-\left(\frac{dE}{dx}\right)_e = \frac{4\pi N_{(A)} Z_1^2 Z_2 e^4}{m_e u^2} \left[ \ln \frac{2m_e c^2}{U} - \ln(1 - \beta^2) - \beta^2 \right], \quad (4.791)$$

kde  $\beta = u/c$ ,  $c$  je rychlost světla,  $u$  je rychlost těžké částice,  $m$  klidová hmotnost elektronu a  $U$  střední excitační energie atomů prostředí.

Tato funkční závislost ukazuje, že elektronová brzdná schopnost je zhruba nepřímo úměrná energii částice a čtverci jejího náboje. Brzdná schopnost deuteronu určité energie je tedy např. rovna brzdě schopnosti protonu s energií poloviční a u částice  $\alpha$  je rovna čtyřnásobku brzdě schopnosti protonu s energií čtvrtinovou.

Obr. 4.48



Závislost ionizačních ztrát energie  $dE_k/dx$  na energii částice  $E_k$  v jednotkách klidové energie částice  $mc^2$ .

Výsledkem elektronového i jaderného brzdění je postupný pokles energie částice při průletu prostředím. Při tom je však četnost jednotlivých interakcí na jednotkovém úseku dráhy ovlivňována i statistickými zákonitostmi. To znamená, že jednotlivé částice z určitého statistického souboru ztratí po prolétnutí shodných drah obecně různé hodnoty energie.

Konečným výsledkem brzdného procesu je tedy to, že energie částice posléze klesne k hodnotám řádu eV, při kterých těmito způsoby nedochází k její interakci s prostředím (neionizuje, neexcituje elektronové obaly). Celkovou délku dráhy částice od počátečního bodu, kde vnikla do prostředí, až po koncový bod, kde přestala interagovat (měřeno podél skutečné dráhy se všemi případnými odchylkami), označujeme jako **lineární (celkový) dosah (dolet)  $R$** , přímou vzdálenost počátečního a koncového bodu jako tzv. **vektorový dosah** a jeho průmět na směr původního letu částice jako **dosah promítnutý ( $R_p$ )**.

Jestliže známe průběhy závislostí obou složek brzdné schopnosti na energii, lze celkový dosah  $R$  vypočítat integrací postupných ztrát energie od  $E_1$  do nuly, tj. .

$$R = \frac{1}{N_{(A)}} \int_0^{E_1} \frac{dE}{\left(\frac{dE}{dx}\right)_{sp} \left(\frac{dE}{dx}\right)_e}. \quad (4.792)$$

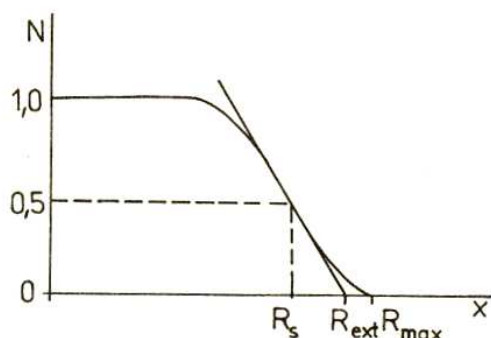
U protonů a částic  $\alpha$  je dominantním brzdícím procesem podél dráhy elektronové brzdění, brzdné dráhy jsou prakticky přímé, promítnutý i

vektorový dosah jsou v podstatě totožné s celkovým. U energetických těžkých iontů se větší měrou uplatňuje jaderné brzdění a brzdná dráha je odlišná od přímky. Pro poměr promítnutého a celkového dosahu zde platí přibližný vztah

$$\frac{R_p}{R} = \left( 1 + \frac{M_2}{3M_1} \right)^{-1}. \quad (4.793)$$

Podobně jako ztráty energie jeví i dosahy souboru částic s danou počáteční energií určitý rozptyl.

Obr. 4.49



Závislost počtu těžkých nabitých částic  $N$  prošlých vrstvou látky na tloušťce vrstvy  $x$ . Na obr. je definován střední dolet  $R_s$ , extrapolovaný dolet  $R_{ext}$  a maximální dolet  $R_{max}$ .

Dosah je určen inflexním bodem; někdy je zaváděn extrapolovaný dosah ( $R_{ext}$ ). Rozptyl dosahů částic  $\alpha$  s energiemi řádu MeV je poměrně malý, příslušná hodnota FWHM v diferenciální formě distribuce je řádu 2 – 3%. To ukazuje, že u částic tvořených ionty lehkých prvků jsou jejich dosahy charakteristické a poměrně dobře definované veličiny. Hodnoty dosahů závisí na brzděném prostředí a energii částic a pokud jsou známy příslušné brzděné schopnosti, lze je vypočítat integrací podle vztahu (4.792).

Z výsledků experimentálních měření dosahů částic  $\alpha$  ve vzduchu s různou počáteční energií (v centimetrech za normálního tlaku a teploty)  $E_1$  (v MeV) vypolynul následující empirický vztah

$$R_{vzd} = \left( \frac{E_1}{200} + 0,28 \right) E_1^{3/2}. \quad (4.794)$$

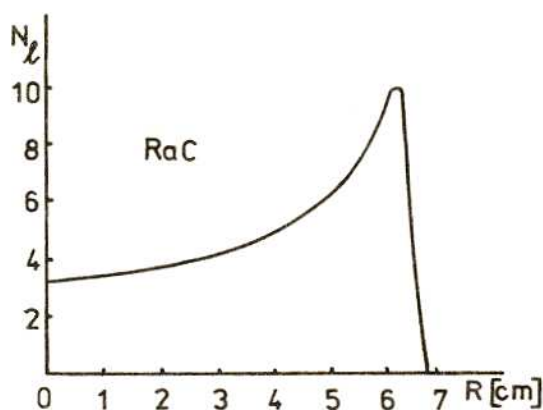
Vedle srážek s atomovými jádry vedoucích k rozptylu a brzdění těžkých částic, mohou probíhat na jádrech při dopadu těchto částic i jaderné reakce. Jejich důsledkem je plná absorpce příslušné částice za případného uvolnění sekundárního záření štěpných produktů.

Pravděpodobnost, že k reakci dojde charakterizujeme příslušným účinným průřezem jaderné reakce  $\sigma_j$ , který závisí na druhu a energii dopadajících částic i na terčovém jádru. Udává se v jednotkách  $m^2$ .

Účinné průřezy jaderných reakcí se pohybují od nepatrných hodnot řádu  $10^{-31} m^2$ , až po hodnoty  $10^{-28} m^2$  mnohonásobně převyšující geometrický průřez jader.

V praxi se často nahrazuje popis závislosti ionizačních ztrát na energii tzv. **Braggova křivku**, která udává závislost ionizační schopnosti částice na délce dráhy  $R$ , jíž částice urazí.

Obr. 4.50



Braggova křivka, která udává počet iontů  $N_l$  vytvořených na jednotkové dráze částice.



### c) Čerenkovovo záření



Maria Curie-Skłodowska (1867 – 1934)



Pavel Alexandrovič Čerenkov (1904 – 1990)

Čerenkovovo záření bylo nejspíše pozorováno již M. Curie Skłodowskou v roce 1910 v roztocích s vysokou aktivitou radia. Čerenkov v roce 1934 zjistil, že se jedná o velmi slabé záření z modré a UV oblasti a vyznačuje se výraznou směrovostí vzhledem k dráze částice, která jej způsobila.

Záření vzniká při průchodu nabitě částice průzračným dielektrickým prostředím jako důsledek polarizace atomů prostředí částicí a následné depolarizace těchto atomů.

Teoreticky byl jev popsán v roce 1937 Frankem a Tammem Frank, Tamm a Čerenkov za tento objev získali roku 1958 Nobelovu cenu za fyziku.

K polarizaci dochází v těsné blízkosti dráhy prolétající částice coulombovskými silami. Jednotlivé depolarizující atomy představují elementární izotropní zdroje sférických světelných vln.

Podle Huygensova principu, mají všechny body nacházející se na společné vlnoploše stejnou fázi.

V prostředí s relativním indexem lomu  $n > 1$  se může nabitá částice s rychlostí  $\beta c$  pohybovat rychleji, než se šíří elektromagnetické záření v tomto prostředí. Rychlost elektromagnetického signálu je  $v = c/n$ , kde  $n$  je index lomu. Budeme uvažovat o případě, kdy

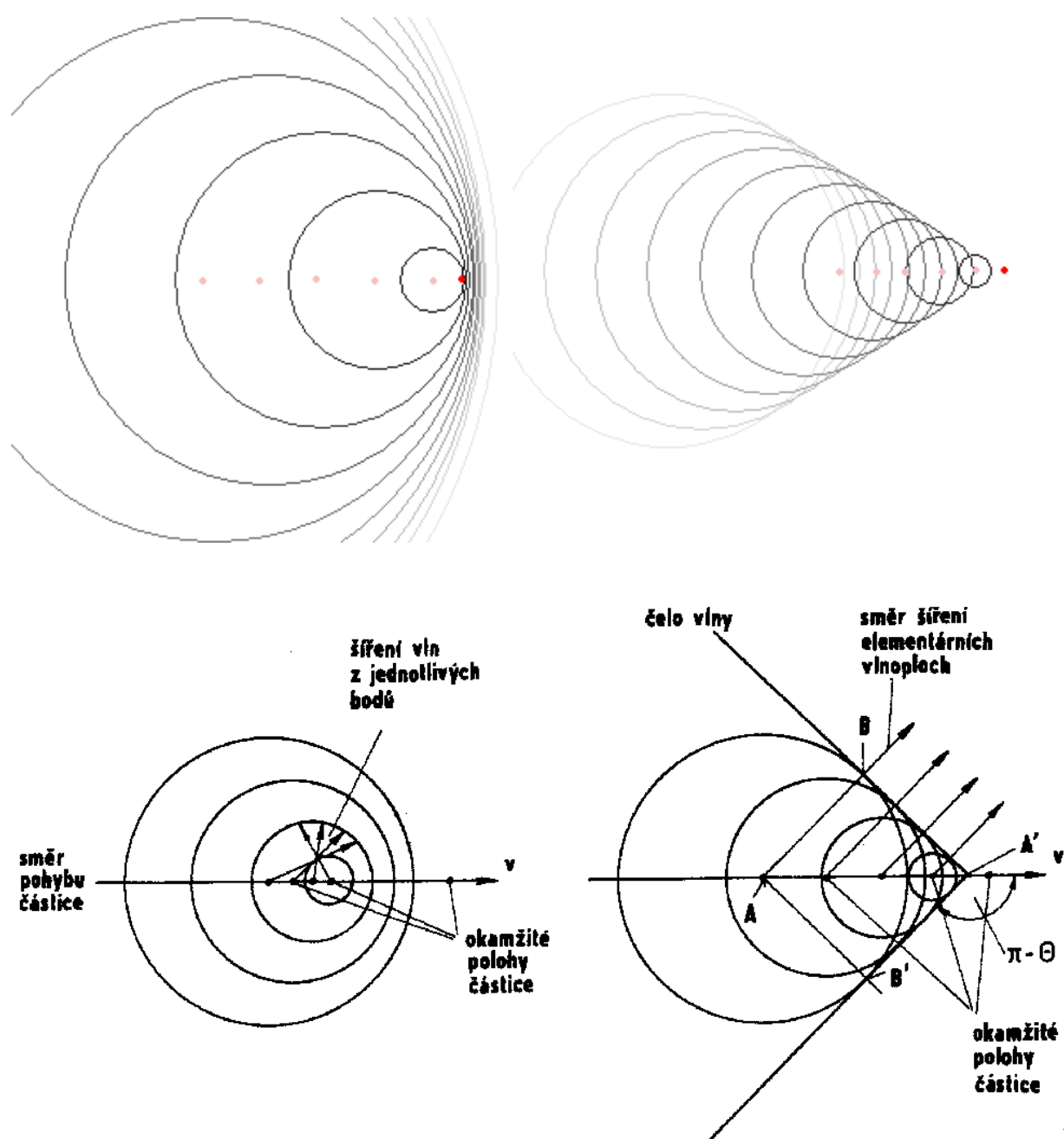
$$v < \beta c.$$

( 4.795 )

Pokud  $v < c/n$ , vlny se šíří různými směry s různou fází a jsou nekoherentní – při interferencích se navzájem ruší – emise světla není pozorována.

Pokud  $v > c/n$ , existuje společný tečný povrch ke všem jednotlivým elementárním vlnoplochám, na němž jsou tyto vlnoplochy ve stejné fázi – dochází k interferenčnímu zesilování – emise koherentního světla. Platí-li ( 4.795 ), nabitá částice vysílá elektromagnetické záření v oblasti viditelného spektra – Čerenkovovo záření.

Obr. 4.51



Obr. 4.51 ukazuje Huygensovu konstrukci vlnoplochy elektromagnetických vln vysílaných pohybující se částicí. Čelo vlny je obálkou vlnoploch vysílaných částicí v různých bodech její dráhy a je definováno kuželem s vrcholovým úhlem  $\varphi = 2 \arcsin 1/(\beta n)$ . Světlo se šíří pod úhlem  $\vartheta$  vzhledem ke směru pohybu částice. Pro  $\vartheta$  platí

$$\cos \vartheta = \frac{c't}{c\beta t} = \frac{c}{cn\beta} = \frac{1}{n\beta}. \quad (4.796)$$

Tato konstrukce předpokládá, že se rychlost částice  $v$  během jejího průchodu dielektrikem z bodu nemění.

Za čas  $t = AA'/v$  dorazí čelo vlny vybuzené v místě A do vzdálenosti

$$AB = AB' = \frac{ct}{n}. \quad (4.797)$$

Přímky  $BA'$  a  $B'A'$  tohoto rovinného modelu jsou čelem vlny interferenčně zesíleného světla a svírají se směrem pohybu částice  $AA'$  úhel  $\vartheta$ .

Vzhledem k prostorové symetrii vůči dráze částice má čelo vlny Čerenkovova záření tvar pláště kužele s vrcholovým úhlem  $2\vartheta$ , přičemž osou kužele je trajektorie částice.

Měřením úhlu  $\vartheta$  je možno stanovit rychlost a tedy i energii částice. Minimální prahová rychlost nezbytná pro vznik Čerenkovova záření závisí pouze na indexu lomu dielektrika  $n$

$$v_{\min} = \frac{c}{n}. \quad (4.798)$$

Minimální rychlosti odpovídá  $\vartheta = 0^\circ$  – emise Čerenkovova záření má směr částice. Pro organické sklo s indexem lomu  $n = 1,5$  je  $v = 0,67c$ . Ultrarelativistickým částicím, jejichž rychlost se blíží rychlosti světla ve vakuu ( $\beta \approx 1$ ), odpovídá maximální úhel:

$$\vartheta_{\max} = \arccos \frac{1}{n}. \quad (4.799)$$

Interval rychlostí částic, ve kterém dochází ke vzniku Čerenkovova záření je tedy dán nerovností

$$\frac{c}{n} \leq v \leq c \quad (4.800)$$

Pro každé prostředí tedy existuje prahová rychlost  $\beta_{\min} = 1/n$  pro vznik Čerenkovova záření. Pro vodu je  $n = 1,33$ , její  $\beta_{\min} = 0,75$ , čemuž odpovídá relativně malá kinetická energie elektronu

$$E_k = E - mc^2 = 0,26 \text{ MeV}.$$

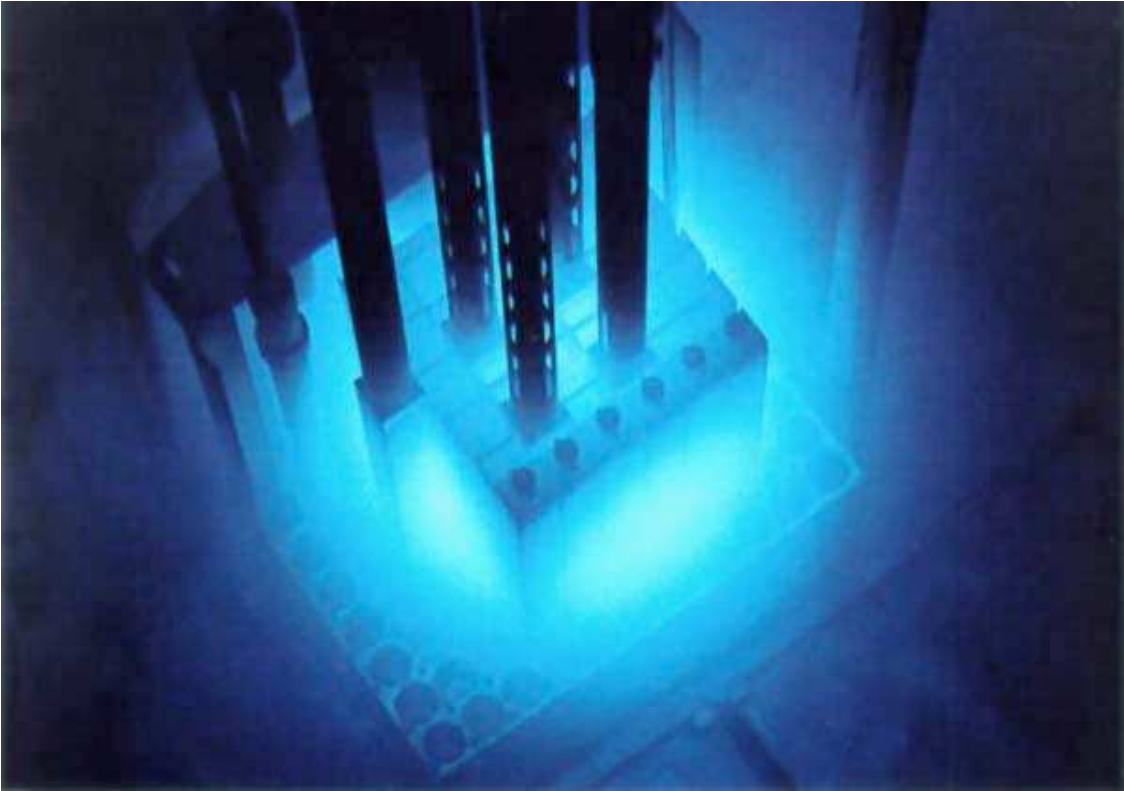
Maximální úhel, pod kterým se pozoruje záření ve vodě, je  $\vartheta_{\max} = 41,5^\circ$ . Počet fotonů Čerenkovova záření  $N(v)dv$  vyslaných v intervalu kmitočtů  $(v, v + dv)$  je charakterizován úměrností

$$N(v) dv \sim Z^2 \sin^2 \vartheta dv, \quad (4.801)$$

která implicitně obsahuje závislost na  $\beta$ . Vyplývá z něho, že spektrum je spojitě a stejné pro částice se shodným nábojem.

Na následujících obrázcích je zachyceno Čerenkovovo záření vydávané aktivní zónou jaderného reaktoru (obr. 4.52) a nabitými částicemi emitovanými z vyhořelých palivových článků jaderné elektrárny ve **vymíracím bazénu** s vodou (obr. 4.53).

Obr. 4.52



Obr. 4.53



### d) Interakce neutronů s látkou

Interakce způsobující brzdění neutronů jsou do jisté míry analogické absorpci záření  $\gamma$ . Ani neutrony samy neionizují prostředí a interagují s atomovými jádry prostředí srážkami, při nichž ztrácejí poměrně velký zlomek své energie. Ionizace prostředí je vyvolávána až sekundárně při brzdění atomů, na něž při srážkách byla předána kinetická energie. Neutrony mohou být ovšem atomovými jádry také absorbovány a vyvolat v nich jaderné reakce (případně jsou přitom emitovány částice, které sekundárně způsobují ionizaci).

Základem vlastního brzdného procesu neutronů jsou však již zmíněné srážky, při nichž se neutron a terčové jádro velmi přibližně chovají jako pružné koule (řídí se zákony zachování energie a hybnosti). Při tom relativní část energie, která se při jednotlivé srážce přenesou z neutronu na terčový atom, závisí vedle geometrie srážky především na poměru hmotnosti neutronu a srážkového partnera. Je-li energie neutronu před srážkou  $E_1$ , bude jeho střední energie po srážce  $\bar{E}_1$  a střední energie terčového atomu (s nukleonovým číslem  $A$ ) po srážce  $E_2$  dána vztahem

$$\bar{E}_1 = E_1 \frac{A^2 + 1}{(A + 1)^2} \quad (4.802)$$

a

$$\bar{E}_2 = E_1 \frac{2A}{(A + 1)^2}. \quad (4.803)$$

V řadě za sebou následujících srážek se stejnými terčovými atomy bude energie neutronu s počtem srážek klesat exponenciálně. Pro střední logaritmickou ztrátu  $\xi$  energie neutronu při jedné srážce platí

$$\xi = \ln \frac{\bar{E}_1}{E_1} = \frac{(A - 1)^2}{2A} \ln \frac{A + 1}{A - 1} - 1. \quad (4.804)$$

Po  $n$  srážkách bude tedy energie neutronu rovna

$$\bar{E}_{1,n} = E_1 e^{\xi n}. \quad (4.805)$$

Pro vodík ( $A = 1$ ) se hodnota  $\xi$  limitně blíží 1 a ze vzorce lze určit, že ke snížení energie neutronu z několika MeV na energii odpovídající tepelnému pohybu (0,0025 eV) je zapotřebí zhruba 20 srážek. Počet srážek potřebný k analogickému snížení energie neutronu v prvcích s vyšším  $A$  je vyšší, protože hodnota  $\xi$  klesá s rostoucím  $A$ .

## Druhé kvantování

Předpokládejme, že máme  $N$  stejných částic, které obsazují stavy nějaké dynamické proměnné,  $N_1$  částic nechť je v prvním stavu (hodnota  $a_1$ ),  $N_2$  částic nechť je ve druhém stavu (hodnota  $a_2$ ), atd. Čísla  $N_k$  nazýváme obsazovací čísla stavu  $n$ . Součet všech obsazovacích čísel je roven počtu částic:

$$\sum_k N_k = N. \quad (5.1)$$

Pro bosony je  $N_k = 0, 1, 2, \dots$ . Pro fermiony je situace jednodušší – v daném stavu může být nejvýše jeden fermion, tj  $N_k = 0, 1$ . Příslušný stav soustavy  $N$  stejných částic s danými obsazovacími čísly označíme

$$|\psi\rangle = |N_1, N_2, \dots, N_k, \dots\rangle. \quad (5.2)$$

Tomuto zápisu říkáme **reprezentace obsazovacích čísel**. Při studiu systémů obsahujících stejné částice nutno mít neustále na paměti, že vlnové funkce musí být invariantní vůči vzájemné záměně dvou stejných bosonů a pouze změnit znaménko při záměně dvou stejných fermionů. Pracujeme-li v reprezentaci obsazovacích čísel, potom nám tato starost odpadá. Uvidíme, že je výhodné zavést opět kreační a anihilační operátory. Rozdíl mezi bosony a fermiony nalezneme v tomto formalismu jednoduché algebraické vyjádření.

### *Bosony*

Hilbertův prostor  $N$  nerozlišitelných bosonů označíme jako  $\mathbf{H}_S^N$ . Nechť  $C$  je úplná množina pozorovatelných jediné z těchto částic a  $\{|c_k\rangle\}$  množina odpovídajících normalizovaných vlastních vektorů. Je zřejmé, že vektory  $\{|c_k\rangle\}$  tvoří ortonormální bázi v  $\mathbf{H}_S^1$ . Užijeme-li symboliky obsazovacích čísel, můžeme identifikovat

$$|c_k\rangle \equiv |N_1 = 0, N_2 = 0, \dots, N_k = 1, \dots; S, 1\rangle, \quad (5.3)$$



kde jednotka stojící za písmenem  $S$  zdůrazňuje, že jde o vektor z prostoru  $\mathbf{H}_S^N$  s  $N = 1$ . Tak např.

$$\begin{aligned} |c_1\rangle &\equiv |1,0,0,\dots;S,1\rangle, \\ |c_2\rangle &\equiv |0,1,0,\dots;S,1\rangle, \\ |c_3\rangle &\equiv |0,0,1,\dots;S,1\rangle, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (5.4)$$

Podobně množina všech vektorů

$$|N_1, N_2, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle = \left( \frac{N!}{N_1! \dots N_k! \dots} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{S}} |c_{k_1}\rangle |c_{k_2}\rangle \dots |c_{k_N}\rangle, \quad (5.5)$$

určovaných nezápornými celými čísly  $N_1, N_2, \dots, N_k, \dots$ ,  
vyhovujícími podmínce ( 5.1 ), tvoří ortonormální bázi  $\mathbf{H}_S^N$ .  
Pro další úvahy je výhodné zavést Hilbertův prostor

$$\mathbf{H}_S \equiv \sum_{N=0}^{\infty} \oplus \mathbf{H}_S^N, \quad (5.6)$$

kde  $\mathbf{H}_S^0$  je jednorozměrný prostor generovaný normalizovaným  
vakuum  $|0\rangle$

$$\langle 0|0\rangle = 1. \quad (5.7)$$

Je zřejmé, že prostor ( 5.6 ) můžeme identifikovat s Hilbertovým  
prostorem systému, který lze připravit ve stavech s libovolným  
počtem bosonů uvažovaného druhu.

Definujme kreační operátor  $\hat{a}_k^+$  částice ve stavu  $c_k$  tak, že každému  
vektoru z  $\mathbf{H}_S^N$  přiřazuje vektor z  $\mathbf{H}_S^{N+1}$ . Ortonormální bázi podprostoru  
 $\mathbf{H}_S^N$  pak můžeme utvořit z vektorů

$$\hat{S}|c_{k_1}\rangle \cdots |c_{k_N}\rangle = \frac{\hat{a}_{k_1}^+ \cdots \hat{a}_{k_N}^+}{\sqrt{N!}}|0\rangle. \quad (5.8)$$

Definujme dále anihilační operátor  $\hat{a}_k^-$  jako operátor sdružený k operátoru  $\hat{a}_k^+$ .

V analogii s výsledky, které jsme našli v případě lineárního harmonického oscilátoru bude po zapůsobení kreačním operátorem stav popisovaný výsledným vektorem obsahovat o jednu částici víc, nežli stav výchozí, zatímco po zapůsobení anihilačním operátorem tomu bude právě naopak:

$$\begin{aligned} \hat{a}_k^+ |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle &= \sqrt{N_k + 1} |N_1, \dots, N_k + 1, \dots; S, N + 1\rangle, \\ \hat{a}_k^- |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle &= \sqrt{N_k} |N_1, \dots, N_k - 1, \dots; S, N - 1\rangle. \end{aligned} \quad (5.9)$$

V reprezentaci obsazovacích čísel budou tedy kreační a anihilační operátor popsány maticí

$$\begin{aligned} \langle N'_1, \dots, N'_k, \dots; S, N' | \hat{a}_k^+ | N_1, \dots, N_k, \dots; S, N \rangle &= \\ &= \sqrt{N_k + 1} \delta_{N+1, N'} \delta_{N_1 N'_1} \cdots \delta_{N_k+1, N'_k} \cdots, \\ \langle N'_1, \dots, N'_k, \dots; S, N' | \hat{a}_k^- | N_1, \dots, N_k, \dots; S, N \rangle &= \\ &= \sqrt{N_k} \delta_{N-1, N'} \delta_{N_1 N'_1} \cdots \delta_{N_k-1, N'_k} \cdots \end{aligned} \quad (5.10)$$

Přímo z relací (5.9) snadno spočteme komutační relace kreačních a anihilačních operátorů

$$\begin{aligned} [\hat{a}_k^+, \hat{a}_l^+] &= 0, \\ [\hat{a}_k^-, \hat{a}_l^-] &= 0. \end{aligned} \quad (5.11)$$

Z formulí (5.9) snadno nalezneme, že pro  $j \neq k$  platí

$$\begin{aligned}
& \hat{a}_j^- \hat{a}_k^+ |N_1, \dots, N_j, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle = \\
& = \sqrt{N_j(N_k + 1)} |N_1, \dots, N_j - 1, \dots, N_k + 1, \dots; S, N\rangle = \quad (5.12) \\
& = \hat{a}_k^+ \hat{a}_j^- |N_1, \dots, N_j, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle,
\end{aligned}$$

neboli

$$[\hat{a}_k^-, \hat{a}_l^+] = \delta_{kl}. \quad (5.13)$$

Podobně nalezneme

$$\begin{aligned}
& \hat{a}_k^- \hat{a}_k^+ |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle = \sqrt{N_k + 1} \hat{a}_k^- |N_1, \dots, N_k + 1, \dots; S, N - 1\rangle = \\
& = \sqrt{N_k + 1} \sqrt{N_k + 1} |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle = (N_k + 1) |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle, \\
& \hat{a}_k^+ \hat{a}_k^- |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle = \sqrt{N_k} \hat{a}_k^+ |N_1, \dots, N_k - 1, \dots; S, N - 1\rangle = \\
& = \sqrt{N_k} \sqrt{N_k} |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle = N_k |N_1, \dots, N_k, \dots; S, N\rangle. \quad (5.14)
\end{aligned}$$

odkud okamžitě plyne komutační relace

$$[\hat{N}_j, \hat{N}_k] = 0. \quad (5.15)$$

Zavedeme-li operátor počtu kvant ve stavu  $c_k$  obdobně, jako u lineárního harmonického oscilátoru:

$$\hat{N}_k \equiv \hat{a}_k^+ \hat{a}_k^-, \quad (5.16)$$

pak operátor celkového počtu částic bude vzhledem k ( 5.1 )

$$\hat{N} \equiv \sum_k \hat{a}_k^+ \hat{a}_k^-. \quad (5.17)$$

Z komutačních relací ( 5.11 ) a ( 5.13 ) snadno nalezneme, že

$$\begin{aligned} [\hat{N}_j, \hat{a}_k^+] &= \delta_{jk} \hat{a}_k^+ \Rightarrow [\hat{N}, \hat{a}_k^+] = \hat{a}_k^+, \\ [\hat{N}_j, \hat{a}_k^-] &= -\delta_{jk} \hat{a}_k^- \Rightarrow [\hat{N}, \hat{a}_k^-] = -\hat{a}_k^-, \end{aligned} \quad (5.18)$$

Jeli úplná množina pozorovatelných spojitá, můžeme celý postup zopakovat pro spojitě proměnné. Např. v  $x$ -reprezentaci lze zavést vlnové funkce  $\hat{\psi}^+(x)$  a  $\hat{\psi}^-(x)$ , fungující jako kreační operátor do polohy  $x$  a anihilační operátor z polohy  $x$ . Komutační relace budou obdobné (5.11) a (5.13), pouze namísto Kroneckerova tenzoru vystupuje na pravé straně Diracova delta funkce:

$$\begin{aligned} [\hat{\psi}^+(x_k), \hat{\psi}^+(x_l)] &= 0, \\ [\hat{\psi}^-(x_k), \hat{\psi}^-(x_l)] &= 0, \\ [\hat{\psi}^-(x_k), \hat{\psi}^+(x_l)] &= \delta(x_k - x_l). \end{aligned} \quad (5.19)$$

Celý postup nyní snadno zobecníme na 3 dimenze a  $(x, s_z)$ -reprezentaci, která vychází z báze tvořené vektory  $|\mathbf{x}\xi\rangle$ , vyhovující normalizační podmínce

$$\langle \mathbf{x}\xi | \mathbf{x}'\xi' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta_{\xi\xi'}, \quad (5.20)$$

a zahrnující tedy kromě prostorové části vlnové funkce i spinovou část. Zavedeme tedy kreační a anihilační operátory  $\hat{\Psi}^+$ ,  $\hat{\Psi}^-$  i pro tyto stavy.

K tomu, aby reprezentace obsazovacích čísel měla smysl, musíme vždy specifikovat, z jaké báze jednočásticového podprostoru vycházíme, tj. jaké jednočásticové stavy jsou kreovány kreačními operátory.

Nechť  $X$  je jinou úplnou množinou pozorovatelných uvažovaného bosonu a  $\{|\mathbf{x}\xi\rangle\}$  je množinou odpovídajících normalizovaných vlastních vektorů. Vektor (5.5) označíme nyní detailněji jako

$$|N(c_1), \dots, N(c_k), \dots; S, N\rangle. \quad (5.21)$$

Podobně

$$|N(\mathbf{x}_1 \xi_1), \dots, N(\mathbf{x}_k \xi_k), \dots; S, N\rangle \quad (5.22)$$

je vektor definovaný pravou stranou formule ( 5.5 ) po záměně

$$|c_{k_j}\rangle \rightarrow |\mathbf{x}_{k_j} \xi_{k_j}\rangle. \quad (5.23)$$

Protože

$$|\mathbf{x}_k \xi_k\rangle = \sum_m \langle c_m | \mathbf{x}_k \xi_k \rangle |c_m\rangle, \quad (5.24)$$

platí

$$|\mathbf{x}_{k_1} \xi_{k_1}\rangle \cdots |\mathbf{x}_{k_N} \xi_{k_N}\rangle = \sum_{m_1, \dots, m_N} \langle c_{m_1} | \mathbf{x}_{k_1} \xi_{k_1} \rangle \cdots \langle c_{m_N} | \mathbf{x}_{k_N} \xi_{k_N} \rangle |c_{m_1}\rangle \cdots |c_{m_N}\rangle, \quad (5.25)$$

odkud ihned vidíme, že

$$\begin{aligned} |N(\mathbf{x}_1 \xi_1), \dots, N(\mathbf{x}_k \xi_k), \dots; S, N\rangle = \\ \sum_{m_1, \dots, m_N} \left( \frac{N(c_1)! \cdots N(c_k)! \cdots}{N(\mathbf{x}_1 \xi_1)! \cdots N(\mathbf{x}_k \xi_k)! \cdots} \right)^{\frac{1}{2}} \langle c_{m_1} | \mathbf{x}_{k_1} \xi_{k_1} \rangle \cdots \langle c_{m_N} | \mathbf{x}_{k_N} \xi_{k_N} \rangle \cdot \\ \cdot |N(c_1), \dots, N(c_k), \dots; S, N\rangle, \end{aligned} \quad (5.26)$$

kde  $N(c_j)$  udává, kolik indexů  $m_1, \dots, m_N$  má hodnotu  $j$ .

Abychom zdůraznili, že operátor  $\hat{\Psi}_k^+$  kreuje částici ve stavu např.  $c_k$  budeme ho zde značit jako  $\hat{\Psi}_k^+(c_k)$ . Potom

$$|N(\mathbf{x}_1\xi_1), \dots, N(\mathbf{x}_k\xi_k), \dots; S\rangle = \frac{(\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}_1\xi_1))^{N(\mathbf{x}_1\xi_1)} (\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}_2\xi_2))^{N(\mathbf{x}_2\xi_2)} \dots}{\sqrt{N(\mathbf{x}_1\xi_1)! N(\mathbf{x}_2\xi_2)! \dots}} |0\rangle. \quad (5.27)$$

Porovnáním ( 5.27 ) a ( 5.26 ) vidíme, že operátor

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}\xi) \equiv \sum_j \langle c_j | \mathbf{x}\xi \rangle \hat{a}^+(c_j) \quad (5.28)$$

kreuje částici v místě  $\mathbf{x}$  s třetí komponentou spinu rovnou  $\xi$ . Tak např.

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}\xi)|0\rangle \equiv \sum_j \langle c_j | \mathbf{x}\xi \rangle \hat{a}^+(c_j)|0\rangle = \sum_j |c_j\rangle \langle c_j | \mathbf{x}\xi \rangle = |\mathbf{x}\xi\rangle. \quad (5.29)$$

Odpovídající anihilační operátor má tvar

$$\hat{\Psi}^-(\mathbf{x}\xi) \equiv \sum_j \langle \mathbf{x}\xi | c_j \rangle \hat{a}^-(c_j). \quad (5.30)$$

Tyto operátory splňují komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}'\xi')] &= 0, \\ [\hat{\Psi}^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}'\xi')] &= 0, \\ [\hat{\Psi}^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}'\xi')] &= \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad (5.31)$$

Formuli ( 5.8 ) pak zapíšeme jako

$$\hat{S}|\mathbf{x}_1\xi_1, \dots, \mathbf{x}_N\xi_N\rangle = \frac{\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}_1\xi_1) \dots \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}_N\xi_N)}{\sqrt{N!}} |0\rangle \quad (5.32)$$

Operátor

$$\hat{N}(\mathbf{x}) \equiv \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}\xi) \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}\xi) \quad (5.33)$$

můžeme interpretovat jako operátor hustoty počtu částic s třetí komponentou spinu rovnou  $\xi$ , v místě  $\mathbf{x}$ . Operátor

$$\hat{N}(\mathbf{x}) \equiv \sum_{\xi=-s}^s \hat{N}(\mathbf{x}\xi), \quad (5.34)$$

kde  $s$  je spin uvažovaného bosonu, je operátorem hustoty počtu částic v místě  $\mathbf{x}$  bez ohledu na jejich orientaci.

Kreační, resp. anihilační operátory můžeme uspořádat do jednořádkové, resp. Jednosloupcové matice

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}) \equiv \left( \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}, s) \quad \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}, s-1) \quad \dots \quad \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}, -s) \right),$$

$$\hat{\Psi}^-(\mathbf{x}) \equiv \begin{pmatrix} \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}, s) \\ \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}, s-1) \\ \vdots \\ \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}, -s) \end{pmatrix}. \quad (5.35)$$

Operátor hustoty ( 5.33 ) potom můžeme zapsat jako součin matic

$$\hat{N}(\mathbf{x}) = \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}). \quad (5.36)$$

Podobně lze vyjádřit operátor celkového počtu částic

$$\hat{N} = \int \hat{N}(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x} = \int \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}) \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}) d^3\mathbf{x}. \quad (5.37)$$

### *Fermiony*

Hilbertův prostor  $N$  nerozlišitelných fermionů označíme jako  $\mathbf{H}_A^N$  a definujeme

$$\mathbf{H}_A \equiv \sum_{N=0}^{\infty} \oplus \mathbf{H}_A^N. \quad (5.38)$$

Dále postupujeme analogicky jako v případě bosonů. Ortonormální bázi podprostoru  $\mathbf{H}_A^N$  utvoříme z vektorů

$$\hat{\mathcal{A}}|c_{m_1}\rangle \cdots |c_{m_N}\rangle = \frac{\hat{b}_{m_1}^+ \cdots \hat{b}_{m_N}^+}{\sqrt{N!}}|0\rangle. \quad (5.39)$$

Z definice antisymetrizátoru vidíme, že

$$\hat{\mathcal{A}}|c_{m_1} \cdots c_j \cdots c_k \cdots c_{m_N}\rangle = -\hat{\mathcal{A}}|c_{m_1} \cdots c_k \cdots c_j \cdots c_{m_N}\rangle, \quad (5.40)$$

a tedy kreační operátory pro fermiony musí antikomutovat

$$\{\hat{b}_j^+, \hat{b}_k^+\} = 0. \quad (5.41)$$

Specielně pro  $j = k$  odtud plyne

$$(\hat{b}_k^+)^2 = 0, \quad (5.42)$$

což zaručuje splnění Pauliho principu. Sdružením relace ( 5.41 ) dostáváme obdobnou relaci rovněž pro anihilační operátor

$$\{\hat{b}_j^-, \hat{b}_k^-\} = 0. \quad (5.43)$$

Z antikomutačních relací ( 5.41 ) a fázové podmínky

$$m_1 < m_2 < \cdots < m_N \quad (5.44)$$

snadno nalezneme, že platí

$$\hat{b}_k^+ |N_1, \dots, N_k, \dots; A, N\rangle = \hat{\Pi}_k (1 - N_k) |N_1, \dots, N_k + 1, \dots; A, N + 1\rangle, \quad (5.45)$$

kde



$$\hat{\Pi}_k \equiv \prod_{j=1}^{k-1} (-1)^{N_j} \quad (5.46)$$

je operátor parity. Odtud pak bezprostředně plyne

$$\hat{b}_k^- |N_1, \dots, N_k, \dots; A, N\rangle = \hat{\Pi}_k N_k |N_1, \dots, N_k - 1, \dots; A, N - 1\rangle. \quad (5.47)$$

Z formulí ( 5.45 ), ( 5.47 ) dostáváme třetí antikomutační relace

$$\{\hat{b}_j^-, \hat{b}_k^+\} = \delta_{jk}. \quad (5.48)$$

Z těchto formulí také nalezneme

$$\hat{b}_k^+ \hat{b}_k^- |N_1, \dots, N_k, \dots; A, N\rangle = N_k (2 - N_k) |N_1, \dots, N_k, \dots; A, N\rangle. \quad (5.49)$$

Analogicky jako v případě bosonů definujeme

$$\hat{N}_k = \hat{b}_k^+ \hat{b}_k^- \quad (5.50)$$

Z formulí ( 5.42 ) a ( 5.48 ) plyne, že

$$\hat{N}_k^2 = \hat{N}_k, \quad (5.51)$$

a tedy operátor  $N_k$  může skutečně mít pouze dvě vlastní hodnoty

$$N_k = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad (5.52)$$

v souladu s Pauliho principem. Odtud vidíme, že

$$N_k (2 - N_k) = N_k. \quad (5.53)$$

Tedy  $\hat{N}_k$  je vskutku operátorem počtu částic ve stavu  $c_k$ .

Zavedeme-li ještě operátor celkového počtu částic ve shodě s ( 5.1 ), pak z antikomutačních relací snadno odvodíme komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{N}_j, \hat{N}_k] &= 0, \\ [\hat{N}_j, \hat{b}_k^+] &= \delta_{jk} \hat{b}_k^+ \Rightarrow [\hat{N}, \hat{b}_k^+] = \hat{b}_k^+, \\ [\hat{N}_j, \hat{b}_k^-] &= -\delta_{jk} \hat{b}_k^- \Rightarrow [\hat{N}, \hat{b}_k^-] = -\hat{b}_k^-, \end{aligned} \quad ( 5.54 )$$

zcela obdobné, jako v případě bosonů.

Stejně jako u bosonů můžeme také definovat operátor kreace fermionu v místě  $\mathbf{x}$  se třetí komponentou spinu  $\xi$ :

$$\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}\xi) \equiv \sum_j \langle c_j | \mathbf{x}\xi \rangle \hat{b}^+(c_j) \quad ( 5.55 )$$

Odpovídající anihilační operátor má tvar

$$\hat{\Psi}^-(\mathbf{x}\xi) \equiv \sum_j \langle \mathbf{x}\xi | c_j \rangle \hat{b}^-(c_j). \quad ( 5.56 )$$

Tyto operátory splňují komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}'\xi')] &= 0, \\ [\hat{\Psi}^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}^-(\mathbf{x}'\xi')] &= 0, \\ [\hat{\Psi}^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}'\xi')] &= \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \end{aligned} \quad ( 5.57 )$$

shodné s ( 5.31 ).

V analogii s formulí ( 5.32 ) pro fermiony platí

$$\hat{\mathcal{A}} | \mathbf{x}_1 \xi_1, \dots, \mathbf{x}_N \xi_N \rangle = \frac{\hat{\Psi}^+(\mathbf{x}_1 \xi_1) \dots \hat{\Psi}^+(\mathbf{x}_N \xi_N)}{\sqrt{N!}} | 0 \rangle. \quad ( 5.58 )$$

## Směsná pole

Zatím jsme diskutovali druhé kvantování v souvislosti s popisem systémů sestávajících z jediného druhu částic. Uvedenou metodu však lze použít i pro případ systémů sestávajících z více druhů částic. Stavové vektory je opět možno generovat aplikací příslušných kreačních operátorů na vektor vakua. Kreační a anihilační operátory pro každou pevně zvolenou částici splňují výše uvedené komutační, resp. Antikomutační relace v závislosti na tom, zda se jedná o boson či fermion. Operátory popisující dynamické proměnné vztahující se k různým částicím musí navzájem komutovat. Z předchozího je zřejmé, že tato podmínka bude splněna, pokud kreační a anihilační operátory každé částice budou komutovat či antikomutovat s kreačními a anihilačními operátory ostatních částic. V souladu s běžně užívanou konvencí se rozhodneme pro komutaci, když půjde o operátory dvou fermionů a pro komutaci v případech bosonů, nebo směsných polí bosonů s fermiony. Relace ( 5.31 ) – ( 5.57 ) pak zobecníme na

$$\begin{aligned} [\hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{x}'\xi')] &= 0, \\ [\hat{\Psi}_\alpha^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}_\beta^-(\mathbf{x}'\xi')] &= 0, \\ [\hat{\Psi}_\alpha^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{x}'\xi')] &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \end{aligned} \quad ( 5.59 )$$

$$\begin{aligned} \{\hat{\Psi}_\alpha^+(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{x}'\xi')\} &= 0, \\ \{\hat{\Psi}_\alpha^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}_\beta^-(\mathbf{x}'\xi')\} &= 0, \\ \{\hat{\Psi}_\alpha^-(\mathbf{x}\xi), \hat{\Psi}_\beta^+(\mathbf{x}'\xi')\} &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \end{aligned} \quad ( 5.60 )$$

kde jsme dolním indexem u operátorů vyznačili, ke které částici se vztahují. Relace ( 5.59 ) platí pro bosony nebo směsné boson – fermionové pole, relace ( 5.60 ) jestliže částice  $\alpha$  i  $\beta$  jsou fermiony.

Na závěr si všimněme, že normalizovaný vektor  $|\psi\rangle$  popisující stav jediné částice je v  $(x, s_z)$ -reprezentaci určen vlnovou funkcí, kterou můžeme vyjádřit rozvojem

$$\psi(\mathbf{x}, \xi) \equiv \langle \mathbf{x} \xi | \psi \rangle = \sum_j \langle \mathbf{x} \xi | c_j \rangle a_j. \quad (5.61)$$

Kde koeficienty  $a_j \equiv \langle c_j | \psi \rangle$  vyhovují normalizační podmínce

$$\sum_j |a_j|^2 = 1. \quad (5.62)$$

Přitom operátor operátor  $\hat{\Psi}(\mathbf{x}, \xi)$  anihilující částici nacházející se v místě  $\mathbf{x}$  se třetí komponentou  $\xi$ , obdržíme z rozvoje (5.61) prostou záměnou  $a_j \rightarrow \hat{a}_j^-$  resp.  $a_j \rightarrow \hat{b}_j^-$ , v závislosti na tom, zda se jedná o boson či fermion. V tomto smyslu kvantujeme samotnou vlnovou funkci – vlnové funkce popisující systém se samy stávají operátory. Proto se o této proceduře hovoří jako o **druhém kvantování**. Jak ukážeme ihned v následujícím paragrafu, procedura umožňuje velice jednoduchý přechod od Hilbertova prostoru jediné částice k Hilbertovu prostoru systému, který může být připraven ve stavech s nejrůznějším počtem částic, popř. ve stavech, v nichž počet částic nemá ostrou hodnotu. Proto nepřekvapuje, že metoda druhého kvantování tvoří základní pilíř v kvantové teorii pole, kde jsou veličiny popisující klasická spojitá pole nahrazovány operátory.

### *Operátory dynamických proměnných*

Libovolný operátor  $\hat{F}$  v prostoru  $N$  podobných bosonů  $\mathbf{H}(N)$  můžeme vyjádřit jako

$$\hat{F} = \sum_{\substack{n_1 \dots n_N \\ m_1 \dots m_N}} \langle c_{n_1} \dots c_{n_N} | \hat{F} | c_{m_1} \dots c_{m_N} \rangle | c_{n_1} \dots c_{n_N} \rangle \langle c_{m_1} \dots c_{m_N} |, \quad (5.63)$$

neboť vektory

$$|c_{n_1} \dots c_{n_N}\rangle \equiv |c_{n_1}\rangle |c_{n_N}\rangle \quad (5.64)$$

tvorí ortonormální bázi v  $\mathbf{H}(N)$ .

Má-li  $\hat{F}$  nějakou dynamickou proměnnou soustavy  $N$  stejných bosonů, musí nechávat invariantním podprostor  $\mathbf{H}_S^N \subset \mathbf{H}(N)$ .

Operátor  $\hat{F}$  v  $\mathbf{H}_S^N$  pak můžeme identifikovat s operátorem  $\hat{S}\hat{F}\hat{S}$ , tj.

$$\hat{F} = \sum_{\substack{n_1 \dots n_N \\ m_1 \dots m_N}} \langle c_{n_1} \dots c_{n_N} | \hat{F} | c_{m_1} \dots c_{m_N} \rangle \frac{1}{N!} \hat{a}_{n_1}^+ \dots \hat{a}_{n_N}^+ |0\rangle \langle 0| \hat{a}_{m_N}^- \dots \hat{a}_{m_1}^-, \quad (5.65)$$

kde jsme využili vztahu (5.8). Projekční operátor  $|0\rangle\langle 0|$  můžeme z formule (5.65) vypustit, neboť pro libovolný vektor  $|\psi\rangle \in \mathbf{H}_S^N$  platí

$$\hat{a}_{m_N}^- \dots \hat{a}_{m_1}^- |\psi\rangle \in \mathbf{H}_S^0. \quad (5.66)$$

Pro hledané vyjádření libovolného operátoru  $\hat{F}$  v Hilbertově prostoru  $N$  stejných bosonů pomocí kreačních a anihilačních operátorů tak máme

$$\hat{F} = \frac{1}{N!} \sum_{\substack{n_1 \dots n_N \\ m_1 \dots m_N}} \langle c_{n_1} \dots c_{n_N} | \hat{F} | c_{m_1} \dots c_{m_N} \rangle \hat{a}_{n_1}^+ \dots \hat{a}_{n_N}^+ \hat{a}_{m_N}^- \dots \hat{a}_{m_1}^-. \quad (5.67)$$

V  $(x, s_z)$ -reprezentaci platí

$$\langle \mathbf{x}_1 \xi_1 \dots \mathbf{x}_N \xi_N | \hat{F} | \mathbf{x}'_1 \xi'_1 \dots \mathbf{x}'_N \xi'_N \rangle = \delta(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}'_1) \dots \delta(\mathbf{x}_N - \mathbf{x}'_N) \hat{F}_{\xi_1 \dots \xi_N, \xi'_1 \dots \xi'_N}^x, \quad (5.68)$$

kde  $\hat{F}_{\xi_1 \dots \xi_N, \xi'_1 \dots \xi'_N}^x$  je operátor působící na funkce proměnných  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ .

S využitím relace úplnosti

$$\sum_{\xi_1 \dots \xi_N} \int d^3 \mathbf{x}_1 \dots d^3 \mathbf{x}_1 | \mathbf{x}_1 \xi_1 \dots \mathbf{x}_N \xi_N \rangle \langle \mathbf{x}_1 \xi_1 \dots \mathbf{x}_N \xi_N | = 1, \quad (5.69)$$

kde jednotka představuje operátor identity v  $\mathbf{H}(N)$ , můžeme formuli (5.67) přepsat jako

$$\hat{F} = \frac{1}{N!} \sum_{\substack{n_1 \dots n_N \\ m_1 \dots m_N}} \int d^3 \mathbf{x}_1 \dots d^3 \mathbf{x}_1 \cdot \\ \cdot \hat{\Psi}^+ (\mathbf{x}_1, \xi_1) \dots \hat{\Psi}^+ (\mathbf{x}_N, \xi_N) \hat{F}_{\xi_1 \dots \xi_N, \xi'_1 \dots \xi'_N}^x \hat{\Psi}^- (\mathbf{x}_N, \xi_N) \dots \hat{\Psi}^- (\mathbf{x}_1, \xi_1) \quad (5.70)$$

Což se dá zapsat ve zkráceném maticovém tvaru

$$\hat{F} = \frac{1}{N!} \int d^3 \mathbf{x}_1 \dots d^3 \mathbf{x}_1 \hat{\Psi}^+ (\mathbf{x}_1) \dots \hat{\Psi}^+ (\mathbf{x}_N) \hat{\mathcal{F}}^x \hat{\Psi}^- (\mathbf{x}_N) \dots \hat{\Psi}^- (\mathbf{x}_1), \quad (5.71)$$

kde  $\hat{\mathcal{F}}^x$  je nyní čtvercová matice rozměru  $(2S+1)^N$ , jejíž elementy jsou operátory působící na funkce proměnných  $\mathbf{x}_1, \dots, \mathbf{x}_N$ .

V praxi se nejčastěji setkáváme s operátory  $\hat{F}$  které jsou buď součinem jednočásticových operátorů

$$\hat{F}_1 \equiv \sum_{j=1}^N \hat{f}^{(j)} \quad (5.72)$$

nebo operátorů dvoučásticových

$$\hat{F}_1 \equiv \sum_{j < k} \hat{f}^{(j,k)}. \quad (5.73)$$

Přitom  $\hat{f}^{(j)}$  je operátorem působícím pouze na  $j$ -tou částici, neboli direktním součinem operátoru  $\hat{f}$  v  $\mathbf{H}^{(j)}$  s operátory identity v podprostorech  $\mathbf{H}^{(k \neq j)}$ . V podobném smyslu je  $\hat{f}^{(j,k)}$  dvoučásticovým operátorem působícím pouze na  $j$ -tou a  $k$ -tou částici.

Příkladem operátorů typu  $\hat{F}_1$  je třeba operátor spinu, orbitálního momentu, celkového impulsmomentu, kinetické energie atd. soustavy  $N$  částic. Jestliže v soustavě neexistují vícečásticové síly, je interakce mezi částicemi popsána operátorem  $\hat{F}_2$ .

Vzhledem k tomu, že

$$\begin{aligned} \langle c_{n_1} \cdots c_{n_N} | \hat{f}^{(j)} | c_{m_1} \cdots c_{m_N} \rangle &= \langle c_{n_1} | c_{m_1} \rangle \cdots \langle c_{n_j} | \hat{f} | c_{m_j} \rangle \cdots \langle c_{n_N} | c_{m_N} \rangle = \\ &= \langle c_{n_j} | \hat{f} | c_{m_j} \rangle \prod_{k \neq j} \delta_{n_k, m_k}, \end{aligned} \quad (5.74)$$

dostáváme z formule ( 5.67 )

$$\hat{F}_1 = \frac{1}{N!} \sum_{j=1}^N \sum_{n_j, m_j} \langle c_{n_j} | \hat{f} | c_{m_j} \rangle \sum \hat{a}_{n_1}^+ \cdots \hat{a}_{n_j}^+ \cdots \hat{a}_{n_N}^+ \hat{a}_{m_N}^- \cdots \hat{a}_{m_j}^- \cdots \hat{a}_{m_1}^-, \quad (5.75)$$

kde v poslední sumě se sčítá přes všechna  $n_k$ ,  $k = 1, \dots, N$  s výjimkou  $k = j$ . Vzhledem ke komutačním relacím ( 5.11 ), můžeme místo formule ( 5.75 ) psát

$$\hat{F}_1 = \frac{1}{(N-1)!} \sum_{n_j, m_j} \langle c_{n_j} | \hat{f} | c_{m_j} \rangle \hat{a}_n^+ \sum_{n_1 \cdots n_{N-1}} \hat{a}_{n_1}^+ \cdots \hat{a}_{n_{N-1}}^+ \hat{a}_{n_{N-1}}^- \cdots \hat{a}_{n_1}^- \hat{a}_m^-. \quad (5.76)$$

Pomocí definice ( 5.17 ) a komutačních relací ( 5.15 ), ( 5.18 ) snadno upravíme poslední sumu na tvar

$$\begin{aligned} \sum_{n_1 \cdots n_{N-2}} \hat{a}_{n_1}^+ \cdots \hat{a}_{n_{N-2}}^+ \hat{N} \hat{a}_{n_{N-2}}^- \cdots \hat{a}_{n_1}^- \hat{a}_m^- &= \\ = \sum_{n_1 \cdots n_{N-3}} \hat{a}_{n_1}^+ \cdots \hat{a}_{n_{N-3}}^+ \hat{N} \hat{a}_{n_{N-3}}^- \cdots \hat{a}_{n_1}^- \hat{a}_m^- [\hat{N} - (N-1)] &= \prod_{j=1}^{N-1} \hat{a}_m [\hat{N} - (N-j)]. \end{aligned} \quad (5.77)$$

Uvědomíme-li si, že každý vektor z  $\mathbf{H}_S^N$  je vlastním vektorem operátoru  $\hat{N}$  příslušným k vlastní hodnotě  $N$ , vidíme, že poslední sumu ve formuli ( 5.76 ) můžeme nahradit faktorem  $(N - 1)!$ , a tedy

$$\hat{F}_1 = \sum_{n,m} \langle c_n | \hat{f} | c_m \rangle \hat{a}_n^+ \hat{a}_m^-. \quad ( 5.78 )$$

Postupem, který nás přivedl od formule ( 5.67 ) k formuli ( 5.70 ) nalezneme, že současně platí

$$\hat{F}_1 = \int d^3 \mathbf{x} \hat{\Psi}^+ (\mathbf{x}) \hat{\mathbf{f}}^{(x)} \hat{\Psi}^- (\mathbf{x}), \quad ( 5.79 )$$

kde  $\hat{\mathbf{f}}^{(x)}$  je čtvercová matice rozměru  $(2s + 1)$ , která v  $(x, s_z)$ -reprezentaci popisuje jednočásticový operátor  $\hat{f}$ .

Zcela analogickým způsobem dostaneme pro dvoučásticové operátory

$$\hat{F}_2 = \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m \\ p,q}} \langle c_n c_m | \hat{f} | c_p c_q \rangle \hat{a}_n^+ \hat{a}_m^+ \hat{a}_p^- \hat{a}_q^-, \quad ( 5.80 )$$

což je totéž, jako

$$\hat{F}_2 = \frac{1}{2} \int d^3 \mathbf{x}_1 d^3 \mathbf{x}_2 \hat{\Psi}^+ (\mathbf{x}_1) \hat{\Psi}^+ (\mathbf{x}_2) \hat{\mathbf{f}}^{(x)} \hat{\Psi}^- (\mathbf{x}_2) \hat{\Psi}^- (\mathbf{x}_1). \quad ( 5.81 )$$

Obdobně lze nalézt i vyjádření operátorů vícečásticového charakteru. Podobně jako u bosonů můžeme operátory působící v prostoru  $\mathbf{H}_A^N$  vyjádřit pomocí kreačních a anihilačních operátorů. Zcela analogickým postupem nalezneme

$$\hat{F} = \frac{1}{N!} \sum_{\substack{n_1 \dots n_N \\ m_1 \dots m_N}} \langle c_{n_1} \dots c_{n_N} | \hat{F} | c_{m_1} \dots c_{m_N} \rangle \hat{b}_{n_1}^+ \dots \hat{b}_{n_N}^+ \hat{b}_{m_N}^- \dots \hat{b}_{m_1}^-, \quad ( 5.82 )$$



a formule ( 5.71 ), ( 5.79 ), ( 5.80 ) zůstávají formálně beze změny. Na rozdíl od bosonů však u fermionů záleží na pořadí, v němž po sobě následují jednotlivé kreační a zrovna tak i anihilační operátory. Ve formulích

( 5.78 ) a ( 5.80 ) je pak pouze potřeba provést záměnu  $\hat{a} \rightarrow \hat{b}$ , neboli

$$\begin{aligned}\hat{F}_1 &= \sum_{n,m} \langle c_n | \hat{f} | c_m \rangle \hat{b}_n^+ \hat{b}_m^-, \\ \hat{F}_2 &= \frac{1}{2} \sum_{\substack{n,m \\ p,q}} \langle c_n c_m | \hat{f} | c_p c_q \rangle \hat{b}_n^+ \hat{b}_m^+ \hat{b}_p^- \hat{b}_q^-. \end{aligned} \quad ( 5.83 )$$

### Kontrakce operátorů

Obvykle se zavádí konvence, ve které indexy  $i, j, k, \dots$  značí obsazené spinorbitaly,  $a, b, c, \dots$  neobsazené spinorbitaly a  $p, q, r, \dots$  libovolné spinorbitaly.

**Normální součin**  $[\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_r]$  kreačních a anihilačních operátorů

$\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_r$  je takový jejich součin, ve kterém všechny kreační operátory stojí nalevo od anihilačních a který je vynásobený znaménkem permutace

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & r \\ j_1 & j_2 & \dots & j_r \end{pmatrix} \quad ( 5.84 )$$

která převádí původní uspořádání operátorů na nové:

$$[\hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_r] = (-1)^p \hat{b}_{j_1}^+ \dots \hat{b}_{j_q}^+ \hat{b}_{j_{q+1}}^- \dots \hat{b}_{j_r}^-. \quad ( 5.85 )$$

Pro úplnost ještě definujeme

$$[\emptyset] = 1 \quad ( 5.86 )$$

kde  $\emptyset$  je prázdná množina. Z ( 3.122 ) a ( 5.85 ) dále plyne

$$\left[ \hat{M}_1, \hat{M}_2, \dots, \hat{M}_r \right] |0\rangle = 0, \quad (5.87)$$

je-li alespoň jeden z operátorů  $\hat{M}_i$  anihilační.

**Kontrakcí dvou operátorů  $\hat{M}_i$  a  $\hat{M}_j$**  rozumíme výraz

$$\hat{M}_i \hat{M}_j = \hat{M}_i \hat{M}_j - \left[ \hat{M}_i \hat{M}_j \right]. \quad (5.88)$$

Z antikomutačních relací ( 5.41 ) ( 5.43 ), ( 5.48 ) vyplývá

$$\begin{aligned} \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ &= \hat{b}_i^- \hat{b}_j^- = \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- = 0, \\ \hat{b}_i^- \hat{b}_j^+ &= \langle i | j \rangle. \end{aligned} \quad (5.89)$$

Dále definujeme **normální součin s kontrakcemi** vztahem

$$\begin{aligned} &\left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_{i_1} \cdots \hat{M}_{i_2} \cdots \hat{M}_{j_1} \cdots \hat{M}_{j_2} \cdots \hat{M}_{i_q} \cdots \hat{M}_{j_q} \cdots \hat{M}_r \right] = \\ &= (-1)^p \hat{M}_{i_1} \hat{M}_{j_1} \hat{M}_{i_2} \hat{M}_{j_2} \cdots \hat{M}_{i_q} \hat{M}_{j_q} \left[ \hat{M}_{s_1} \cdots \hat{M}_{s_l} \right], \end{aligned} \quad (5.90)$$

kde  $(-1)^p$  je parita permutace

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & 2q & (2q+1) & \cdots & r \\ i_1 & j_1 & \cdots & j_q & s_1 & \cdots & s_l \end{pmatrix}, \quad 2q+l=r \quad (5.91)$$

za předpokladu, že  $2q$  operátorů je kontrahovaných,  $l$  nektrahovaných.

## Wickova věta



Gian-Carlo Wick (1909 – 1992)

$$\begin{aligned}
 \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r = & \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_r \right] + \\
 & + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_r \right] + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_1 \hat{M}_3 \cdots \hat{M}_r \right] + \cdots + \\
 & + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \hat{M}_3 \hat{M}_4 \cdots \hat{M}_r \right] + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \hat{M}_3 \hat{M}_4 \cdots \hat{M}_r \right] + \cdots + \\
 & + \dots + \\
 & + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_{r-1} \hat{M}_r \right] + \cdots + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_{r-1} \hat{M}_r \right].
 \end{aligned}
 \tag{5.92}$$

### Důkaz:

Pro  $r = 2$  přechází Wickova věta na definici kontrakce

$$\hat{M}_1 \hat{M}_2 = \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \right] + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \right] = \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \right] + \hat{M}_1 \hat{M}_2.
 \tag{5.93}$$

Je-li  $\hat{M}_s = \hat{b}_s^-$ ,  $\hat{M}_i$ , ( $i = 1, \dots, r$ ) libovolné, nebo

$\hat{M}_s = \hat{b}_s^+$ ,  $\hat{M}_i = \hat{b}_i^+$ , ( $i = 1, \dots, r$ ), je identicky splněna rovnost

$$\left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \right] \hat{M}_s = \left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \hat{M}_s \right] + \sum_{1 \leq i \leq r} \left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_i \cdots \hat{M}_r \cdots \hat{M}_s \right] \quad (5.94)$$

pakliže platí

$$\left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] \hat{b}_s^+ = \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right] + \sum_{1 \leq i \leq r} \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_i^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right]. \quad (5.95)$$

Pro  $r = 1$  dostáváme opět definici kontrakce

$$\left[ \hat{b}_1^- \right] \hat{b}_s^+ = \left[ \hat{b}_1^- \hat{b}_s^+ \right] + \left[ \hat{b}_1^- \hat{b}_s^+ \right] \quad (5.96)$$

neboli

$$\hat{b}_1^- \hat{b}_s^+ = \left[ \hat{b}_1^- \hat{b}_s^+ \right] + \hat{b}_1^- \hat{b}_s^+. \quad (5.97)$$

Vynásobme ( 5.95 ) zleva  $\hat{b}_0^-$ :

$$\hat{b}_0^- \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] \hat{b}_s^+ = \hat{b}_0^- \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right] + \sum_{1 \leq i \leq r} \hat{b}_0^- \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_i^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right]. \quad (5.98)$$

Protože kontrakce  $\hat{b}_i^- \hat{b}_s^+$  je konstanta (0 nebo 1), lze  $\hat{b}_0^-$  zahrnout do

normálního součinu. První člen napravo ( 5.98 ) upravíme pomocí ( 5.85 ) a ( 5.88 ) takto:

$$\begin{aligned}
\hat{b}_0^- \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right] &= (-1)^r \hat{b}_0^- \left[ \hat{b}_s^+ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] = (-1)^r \hat{b}_0^- \hat{b}_s^+ \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] = \\
&= (-1)^r \left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_s^+ \right] \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] + (-1)^r \hat{b}_0^- \hat{b}_s^+ \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] = \\
&= (-1)^{r+1} \left[ \hat{b}_s^+ \hat{b}_0^- \right] \left[ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] + (-1)^r \left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_s^+ \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] = \\
&= (-1)^{r+1} \left[ \hat{b}_s^+ \hat{b}_0^- \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] + (-1)^{2r} \left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right] = \\
&= \left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right] + \left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right].
\end{aligned} \tag{5.99}$$

Dosazením ( 5.99 ) do ( 5.98 ) dostáváme vztah pro  $r + 1$  operátorů v normálním součinu na levé straně ( 5.95 )

$$\left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \right] \hat{b}_s^+ = \left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right] + \sum_{1 \leq i \leq r} \left[ \hat{b}_0^- \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_i^- \cdots \hat{b}_r^- \hat{b}_s^+ \right]. \tag{5.100}$$

Není obtížné ukázat, že smýšlený případ, kdy se na levé straně ( 5.95 ) vyskytuje kreační operátor, se redukuje opět na ( 5.95 ). Rovnost ( 5.94 ) si zachová platnost zřejmě i tehdy, jsou-li některé operátory v normálním součinu kontrahovány.

Vynásobíme-li tedy Wickovu větu zprava  $\hat{M}_s$  :

$$\begin{aligned}
\hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r = & \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_r \right] \hat{M}_s + \\
& + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_r \right] \hat{M}_s + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_1 \hat{M}_3 \cdots \hat{M}_r \right] \hat{M}_s + \cdots + \\
& + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \hat{M}_3 \hat{M}_4 \cdots \hat{M}_r \right] \hat{M}_s + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \hat{M}_3 \hat{M}_4 \cdots \hat{M}_r \right] \hat{M}_s + \cdots + \\
& + \dots + \\
& + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_{r-1} \hat{M}_r \right] \hat{M}_s + \cdots + \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_{r-1} \hat{M}_r \right] \hat{M}_s,
\end{aligned} \tag{5.101}$$

a použijeme-li pro každý člen napravo v ( 5.101 ) rovnost ( 5.94 ), pak po sečtení členů vždy se stejným počtem kontrakcí dostáváme Wickovu větu pro součin  $r + 1$  operátorů. Tím je věta dokázána Z ( 5.85 ) a ( 5.87 ) je vidět, že

$$\left\langle 0 \left\| \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_i \cdots \hat{M}_j \cdots \hat{M}_r \right\| 0 \right\rangle, \tag{5.102}$$

nejsou-li všechny operátory v normálním součinu zkontrahovány. Z Wickovy věty, definice normálního součinu s kontrakcemi a ( 5.102 ) plyne

$$\left\langle 0 \left\| \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \right\| 0 \right\rangle = \left\langle 0 \left\| \sum \left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \right] \right\| 0 \right\rangle = \sum (-1)^p \prod_{m=1}^q \langle i_m | j_m \rangle, \tag{5.103}$$

kde sumace probíhá přes všechny možné plně kontrahované členy. To znamená, že střední hodnota součinu kreačních a anihilačních operátorů ve vakuovém stavu je rovna součinu Kroneckerových tenzorů opatřených vhodným znaménkem.

Dá se ukázat, že platí též tzv. **zobecněná Wickova věta**:

$$\begin{aligned}
& \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_i \left[ \hat{M}_{i+1} \cdots \hat{M}_j \right] \left[ \hat{M}_{j+1} \cdots \hat{M}_k \right] \hat{M}_{k+1} \cdots \hat{M}_r = \\
& = \left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \right] + \sum \left[ \underset{\square}{\hat{M}_1} \cdots \hat{M}_r \right] + \cdots + \sum \left[ \underset{\square}{\hat{M}_1} \cdots \underset{\square}{\hat{M}_r} \right], \quad (5.104)
\end{aligned}$$

kde v jednotlivých sumách vynecháváme členy zahrnující kontrakce mezi operátory uvnitř každého normálního součinu na levé straně ( 5.104 ), neboť podle ( 5.90 ) a ( 5.48 ) máme

$$\left[ \cdots \hat{b}_i^- \cdots \hat{b}_j^+ \cdots \right] = (-1)^p \hat{b}_j^+ \hat{b}_i^- \left[ \cdots \right] = 0, \quad i \neq j. \quad (5.105)$$

### Slaterova – Condonova pravidla ve druhém kvantování

Uvažujme maticové elementy operátoru  $\hat{Z}$  mezi dvěma stavy

$$\begin{aligned}
|D_K\rangle \equiv |K\rangle &= \hat{b}_N^+ \cdots \hat{b}_2^+ \hat{b}_k^+ |0\rangle, \\
|D_L\rangle \equiv |L\rangle &= \hat{b}_N^+ \cdots \hat{b}_2^+ \hat{b}_l^+ |0\rangle,
\end{aligned} \quad (5.106)$$

kteří se liší v jednom spinorbidalu  $k \neq l$ :  $K = \{k, 2, \dots, N\}$ ,  
 $L = \{l, 2, \dots, N\}$

$$\begin{aligned}
\langle K | \hat{Z} | L \rangle &= \langle 0 | \hat{b}_k^- \hat{b}_2^- \cdots \hat{b}_N^- \hat{Z} \hat{b}_N^+ \cdots \hat{b}_2^+ \hat{b}_l^+ | 0 \rangle = \\
&= \sum_{i,j} \langle 0 | \hat{b}_k^- \hat{b}_2^- \cdots \hat{b}_N^- \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \hat{b}_N^+ \cdots \hat{b}_2^+ \hat{b}_l^+ | 0 \rangle \langle i | \hat{z} | j \rangle.
\end{aligned} \quad (5.107)$$

Podle ( 5.103 ) jsou nenulové pouze ty maticové elementy, v nichž jsou všechny operátory zkontrahovány, přičemž nenulové kontrakce jsou typu

$$\hat{b}_i^- \hat{b}_j^+ = \langle i | j \rangle. \quad (5.108)$$

Ze součtu na pravé straně ( 5.103 ) dostáváme jeden nenulový příspěvek

$$\begin{aligned} \langle K | \hat{Z} | L \rangle &= \sum_{i,j} \langle 0 | \hat{b}_k^- \hat{b}_2^- \cdots \hat{b}_N^- \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \hat{b}_N^+ \cdots \hat{b}_2^+ \hat{b}_l^+ | 0 \rangle \langle i | \hat{z} | j \rangle = \\ &= \sum_{i,j} \langle k | i \rangle \langle j | l \rangle \langle i | \hat{z} | j \rangle = \langle k | \hat{z} | l \rangle. \end{aligned} \quad (5.109)$$

Spočtěme maticový element  $\langle K | \hat{Z} | L \rangle, \{1, 2, \dots, N\}$ :

$$\begin{aligned} \langle K | \hat{Z} | L \rangle &= \sum_{i,j} \left\{ \left\langle 0 \left| \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_{N-1}^- \underbrace{\hat{b}_N^- \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \hat{b}_N^+}_{\text{---}} \hat{b}_{N-1}^+ \cdots \hat{b}_1^+ \right| 0 \right\rangle + \right. \\ &+ \left\langle 0 \left| \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_{N-1}^- \hat{b}_N^- \underbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \hat{b}_N^+}_{\text{---}} \hat{b}_{N-1}^+ \cdots \hat{b}_1^+ \right| 0 \right\rangle + \\ &+ \cdots + \\ &+ \left. \left\langle 0 \left| \hat{b}_1^- \cdots \hat{b}_{N-1}^- \hat{b}_N^- \hat{b}_i^+ \underbrace{\hat{b}_j^- \hat{b}_N^+}_{\text{---}} \hat{b}_{N-1}^+ \cdots \hat{b}_1^+ \right| 0 \right\rangle \right\} \langle i | \hat{z} | j \rangle = \\ &= \sum_{i,j} [\langle N | i \rangle \langle j | N \rangle + \langle N-1 | i \rangle \langle j | N-1 \rangle + \cdots + \langle 1 | i \rangle \langle j | 1 \rangle] \langle i | \hat{z} | j \rangle = \\ &= \sum_{i=1} \langle i | \hat{z} | i \rangle. \end{aligned} \quad (5.110)$$



V případě, že se  $N$ -elektronové stavy liší ve dvou spinorbitalech, je zřejmě maticový element operátoru  $\hat{Z}$  roven nule.

Uvažujme maticový element dvouelektronového operátoru  $\hat{V}$  mezi stavy  $K = \{p, q, 3, \dots, N\}$ ,  $L = \{r, s, 3, \dots, N\}$ :

$$\langle K | \hat{V} | L \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \langle 0 | \hat{b}_p^- \hat{b}_q^- \dots \hat{b}_N^- \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_k^- \hat{b}_l^+ \hat{b}_N^+ \dots \hat{b}_s^+ \hat{b}_r^+ | 0 \rangle. \quad (5.111)$$

Součin operátorů  $\hat{b}_p^- \dots \hat{b}_r^+$  upravíme s použitím Wickovy věty

$$\begin{aligned} & \hat{b}_p^- \hat{b}_q^- \dots \hat{b}_N^- \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_k^- \hat{b}_l^+ \hat{b}_N^+ \dots \hat{b}_s^+ \hat{b}_r^+ = \left[ \hat{b}_p^- \hat{b}_q^- \dots \hat{b}_N^- \right] \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right] \left[ \hat{b}_N^+ \dots \hat{b}_s^+ \hat{b}_r^+ \right] = \\ & = \underbrace{\hat{b}_p^- \hat{b}_q^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_l^- \hat{b}_k^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_N^+}_{\square} \dots \underbrace{\hat{b}_s^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_r^+}_{\square} - \underbrace{\hat{b}_p^- \hat{b}_q^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_l^- \hat{b}_k^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_N^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_3^- \hat{b}_3^+}_{\square} \dots \underbrace{\hat{b}_N^+}_{\square} - \dots + \\ & + \underbrace{\hat{b}_p^- \hat{b}_q^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_l^- \hat{b}_k^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_s^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_r^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_3^- \hat{b}_3^+}_{\square} \dots \underbrace{\hat{b}_N^+}_{\square} + \dots - \underbrace{\hat{b}_p^- \hat{b}_q^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_l^- \hat{b}_k^-}_{\square} \underbrace{\hat{b}_s^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_r^+}_{\square} \underbrace{\hat{b}_3^- \hat{b}_3^+}_{\square} \dots \underbrace{\hat{b}_N^+}_{\square} \end{aligned} \quad (5.112)$$

a po dosazení do ( 5.111 ) dostaneme

$$\begin{aligned} \langle K | \hat{V} | L \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \left[ \langle p | i \rangle \langle q | j \rangle \langle l | s \rangle \langle k | r \rangle - \langle p | i \rangle \langle q | j \rangle \langle l | r \rangle \langle k | s \rangle + \right. \\ & \quad \left. + \langle p | j \rangle \langle q | i \rangle \langle l | r \rangle \langle k | s \rangle + \langle p | j \rangle \langle q | i \rangle \langle l | s \rangle \langle k | r \rangle \right] = \\ &= \frac{1}{2} \left[ \langle pq | \hat{v} | rs \rangle - \langle pq | \hat{v} | sr \rangle + \langle qp | \hat{v} | sr \rangle - \langle qp | \hat{v} | rs \rangle \right] = \\ &= \langle pq | \hat{v} | rs \rangle - \langle pq | \hat{v} | sr \rangle. \end{aligned} \quad (5.113)$$

V případě, že se konfigurace  $K$  a  $L$  liší v jediném spinorbitalech

$p \neq r$ ,  $K = \{p, 2, 3, \dots, N\}$ ,  $L = \{p, 2, 3, \dots, N\}$ , pak z ( 5.111 ) plyne

$$\langle K|\hat{V}|L\rangle = \sum_i [\langle iq|\hat{v}|ip\rangle - \langle iq|\hat{v}|pi\rangle], \quad (5.114)$$

což je ve shodě se Slaterovým – Condonovým pravidlem ( 4.191 ).

## Děročástečkový formalismus

Z předešlých odstavců víme, že jakýkoliv operátor  $\hat{O}_1$  jednoelektronové fyzikální veličiny, který je vyjádřen jako suma jednoelektronových příspěvků  $\sum_i^N \hat{o}_i(i)$  (např. operátor celkové kinetické energie elektronů), můžeme s použitím formalismu druhého kvantování vyjádřit jako

$$\hat{O}_1 = \sum_{pq} \langle p|\hat{o}_1|q\rangle \hat{b}_p^+ \hat{b}_q^-. \quad (5.115)$$

Operátor  $\hat{O}_2$  libovolné dvouelektronové veličiny, který je vyjádřen jako suma dvouelektronových příspěvků  $\sum_{i<j}^N \hat{o}_2(ij)$  (např. operátor potenciální energie elektronové repulze lze vyjádřit jako

$$\hat{O}_2 = \frac{1}{2} \sum_{pqrs} \langle pq|\hat{o}_2|rs\rangle \hat{b}_p^+ \hat{b}_q^+ \hat{b}_s^- \hat{b}_r^-. \quad (5.116)$$

Abychom výrazně snížili počet kreačních a anihilačních operátorů, např. ve výrazech pro střední hodnoty operátorů  $\hat{Z}$  a  $\hat{V}$ , zavádíme místo fyzikálního vakua  $|0\rangle$  tzv. **Fermiho vakuum**  $|D_0\rangle$  obsahující spinorbitaly obsazené v základním stavu.

Jako stav, vůči němuž se posuzuje působení kreačních a anihilačních operátorů se pak volí právě Fermiho vakuum a používá se tzv. děročástečkový formalismus. Fermiho vakuum je Slaterův determinant odpovídající referenčnímu stavu  $\Phi$ . Spinorbitalům, které jsou

obsazené v  $|D_0\rangle$  říkáme **děrové stavy** a značíme je čárkovaně ( $|i'\rangle$ ), neobsazené (virtuální) spinorbitaly  $|D_0\rangle$  nazveme **částicové stavy** a označíme je dvěma čárkami ( $|i''\rangle$ ). V obecném výrazu budeme psát spinorbitaly jako původně ( $|i\rangle$ ).

Jestliže se budeme držet zmíněné konvence týkající se indexů, pak jsou vůči Fermiho vakuu operátory  $\hat{b}_a^+$  a  $\hat{b}_i^-$  kreační, protože první kreira elektron ve virtuálním spinorbitalu a druhý anihilací elektronu z obsazeného spinorbitalu

kreira díru. Operátory  $\hat{b}_a^-$  a  $\hat{b}_i^+$  jsou vůči Fermiho vakuu naopak anihilační.

Slaterovy determinanty, které jsou vůči Fermiho vakuu excitované, označujeme

$$\begin{aligned} |\Phi_i^a\rangle &= \hat{b}_a^+ \hat{b}_i^- |\Phi\rangle, \\ |\Phi_{ij}^{ab}\rangle &= \hat{b}_a^+ \hat{b}_b^+ \hat{b}_j^- \hat{b}_i^- |\Phi\rangle, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (5.117)$$

Definujme novou množinu kreačních a anihilačních operátorů vztažených k Fermiho vakuu  $|D_0\rangle$ :

$$\begin{aligned} c_{i'}^+ &= b_{i'}^+, & c_{i'}^- &= b_{i'}^-, \\ c_{i'}^+ &= b_{i'}^-, & c_{i'}^- &= b_{i'}^+. \end{aligned} \quad (5.118)$$

Odtud plyne, že pro obsazené spinorbitaly (děrové stavy) je úloha kreačních a anihilačních operátorů změněna, pro virtuální spinorbitaly (částicové stavy) zůstává beze změny.  $\hat{c}_{i'}^+$  můžeme interpretovat jako operátor kreace díry (anihilace částice) v  $|D_0\rangle$ ,  $\hat{c}_{i'}^-$  jako operátor anihilace díry (kreace částice) v  $|D_0\rangle$ .

V následujících kapitolách uvidíme analogii tohoto přístupu s kvantovou teorií pole: zavedeme – li namísto Fermiho vakuu tzv. **Diracovo vakuum**, potom částice ve virtuálním (excitovaném)

spinorbitalu bude odpovídat elektronu, zatímco díra v obsazeném stavu bude odpovídat pozitronu.

Je-li Slaterův determinant v uvedené notaci

$$|D_0\rangle = |\{k'_1 k'_2 \cdots k'_N\}\rangle, \quad (5.119)$$

pak pro determinant  $|D_i^a\rangle$  příslušející monoexcitovanému stavu máme

$$|D_i^a\rangle = \hat{b}_{a'}^+ \hat{b}_{i'}^- |D_0\rangle = \hat{c}_{a'}^+ \hat{c}_{i'}^+ |D_0\rangle, \quad (5.120)$$

tj. elektronovou excitaci chápeme jako kreaci díry v obsazeném spinorbitalu  $|i'\rangle$  následovanou kreací elektronu ve virtuálním spinorbitalu  $|a''\rangle$ . Podobně jako v případě (3.122) je

$$\hat{c}_{i''}^- |D_0\rangle = 0. \quad (5.121)$$

Snadno lze ukázat, že operátory  $\hat{c}^+$  a  $\hat{c}^-$  splňují tytéž antikomutační relace jako operátory  $\hat{b}^+$  a  $\hat{b}^-$ :

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_i^-, \hat{c}_j^-\} &= \{\hat{c}_i^+, \hat{c}_j^+\} = 0, \\ \{\hat{c}_i^+, \hat{c}_{j'}^-\} &= \hat{c}_i^+ \hat{c}_{j'}^- + \hat{c}_{j'}^- \hat{c}_i^+ = \hat{b}_{i'}^- \hat{b}_{j'}^+ + \hat{b}_{j'}^+ \hat{b}_{i'}^- = \delta_{ij'} \equiv \delta_{i'j'}, \\ \{\hat{c}_{i''}^+, \hat{c}_{j''}^-\} &= \hat{c}_{i''}^+ \hat{c}_{j''}^- + \hat{c}_{j''}^- \hat{c}_{i''}^+ = \hat{b}_{i''}^+ \hat{b}_{j''}^- + \hat{b}_{j''}^- \hat{b}_{i''}^+ = \delta_{i''j''}. \end{aligned} \quad (5.122)$$

Abychom odlišili veličiny definované vzhledem k Fermiho vakuu  $|D_0\rangle$  od veličin vztažených k fyzikálnímu vakuu  $|0\rangle$ , budeme označovat kontrakci operátorů, normální součin a normální součin s kontrakcemi definované vzhledem k  $|D_0\rangle$  takto:

$$\overline{\hat{M}_i \hat{M}_j}, \quad \left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \right], \quad \left[ \hat{M}_1 \cdots \overline{\hat{M}_i \cdots \hat{M}_j} \cdots \hat{M}_r \right]. \quad (5.123)$$

Pro kontrakci operátoru typu  $\hat{c}$  definovanou podobně jako v ( 5.88 )

$$\overline{\hat{M}_i \hat{M}_j} = \hat{M}_i \hat{M}_j - \left[ \hat{M}_i \hat{M}_j \right] \quad ( 5.124 )$$

dostáváme formálně stejný výsledek jako pro operátory typu  $\hat{b}$

$$\begin{aligned} \overline{\hat{c}_i^+ \hat{c}_j^+} &= \overline{\hat{c}_i^- \hat{c}_j^-} = \overline{\hat{c}_i^+ \hat{c}_j^-} = 0, \\ \overline{\hat{c}_i^- \hat{c}_j^+} &= \langle i | j \rangle. \end{aligned} \quad ( 5.125 )$$

Někdy není vhodné transformovat operátory v normálním součinu na operátory typu  $\hat{c}$ , neboť nemusíme a priori vědět, zda je daný spinorbital obsazený nebo neobsazený. Je proto účelné odvodit příslušné výrazy pro kontrakce ve smýšlené operátorové reprezentaci vztahované k  $|D_0\rangle$ . Definujeme-li funkce

$$\begin{aligned} \varepsilon(i') &= 0, \quad \varepsilon(i'') = 1, \\ \omega(i') &= 1, \quad \omega(i'') = 0, \end{aligned} \quad ( 5.126 )$$

můžeme vyjádřit kontrakce operátorů  $\hat{c}$  prostřednictvím operátoru typu  $\hat{b}$ :

$$\begin{aligned} \overline{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+} &= \overline{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^-} = \overline{\hat{b}_i^+ \hat{c}_j^-} = \overline{\hat{b}_i^- \hat{c}_j^-} = \overline{\hat{c}_i^+ \hat{b}_j^-} = \overline{\hat{c}_i^+ \hat{b}_j^+} = 0, \\ \overline{\hat{b}_i^- \hat{b}_j^+} &= \overline{\hat{b}_i^- \hat{c}_j^+} = \overline{\hat{c}_i^- \hat{b}_j^+} = \varepsilon(i) \langle i | j \rangle, \\ \overline{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^-} &= \overline{\hat{b}_i^+ \hat{c}_j^+} = \overline{\hat{c}_i^- \hat{b}_j^-} = \omega(i) \langle i | j \rangle. \end{aligned} \quad ( 5.127 )$$

Wickovu větu, výraz pro střední hodnotu součinu operátorů a zobecněnou Wickovu větu vztahované k Fermiho vakuu, lze vyjádřit ve formálně obdobném tvaru, jako v původním formalismu vztahovém k fyzikálnímu vakuu.

$$\begin{aligned}
\hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r &= \left[ \hat{M}_1 \hat{M}_2 \cdots \hat{M}_r \right] + \\
&+ \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \hat{M}_2} \cdots \hat{M}_r \right] + \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \hat{M}_1 \hat{M}_3} \cdots \hat{M}_r \right] + \cdots + \\
&+ \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \hat{M}_2} \overbrace{\hat{M}_3 \hat{M}_4} \cdots \hat{M}_r \right] + \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \hat{M}_2 \hat{M}_3} \overbrace{\hat{M}_4} \cdots \hat{M}_r \right] + \cdots + \\
&+ \cdots \cdots \cdots + \\
&+ \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \hat{M}_2} \cdots \overbrace{\hat{M}_{r-1} \hat{M}_r} \right] + \cdots + \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \hat{M}_2} \cdots \overbrace{\hat{M}_{r-1} \hat{M}_r} \right],
\end{aligned} \tag{5.128}$$

$$\langle 0 | \left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \right] | 0 \rangle = \langle 0 | \sum \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r} \right] | 0 \rangle = \sum (-1)^p \prod_{m=1}^q \langle i_m | j_m \rangle,$$

$$\begin{aligned}
&\hat{M}_1 \cdots \hat{M}_i \left[ \hat{M}_{i+1} \cdots \hat{M}_j \right] \left[ \hat{M}_{j+1} \cdots \hat{M}_k \right] \hat{M}_{k+1} \cdots \hat{M}_r = \\
&= \left[ \hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r \right] + \sum \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r} \right] + \cdots + \sum \left[ \overbrace{\hat{M}_1 \cdots \hat{M}_r} \right].
\end{aligned} \tag{5.129}$$

Ze zobecněné Wickovy věty ( 5.129 ) plyne, že je účelné transformovat operátory, jejichž maticové elementy počítáme, na tvar normálního součinu kreačních a anihilačních operátorů, což vede k výraznému snížení kontrakčních schémat.

Uvažujme nejprve jednoelektronový operátor

$$\hat{Z} = \sum_{i,j} \langle i | \hat{z} | j \rangle \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^-. \tag{5.130}$$

Součin operátorů  $\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^-$  můžeme vyjádřit s použitím Wickovy věty

( 5.128 ) a antikomutačních relací ( 5.127 ), jako

$$\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- = \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] + \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] = \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] + \langle i | j \rangle \omega(i). \quad (5.131)$$

S přihlédnutím k ( 5.129 ) snadno odvodíme výraz pro střední hodnotu operátoru  $\hat{Z}$  ve stavu  $|D_0\rangle$ :

$$\begin{aligned} \langle D_0 | \hat{Z} | D_0 \rangle &= \sum_{i,j} \langle i | \hat{z} | j \rangle \langle D_0 | \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- | D_0 \rangle = \sum_{i,j} \langle i | \hat{z} | j \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] = \\ &= \sum_{i,j} \langle i | \hat{z} | j \rangle \langle i | j \rangle \omega(i) = \sum_{i'} \langle i' | \hat{z} | j' \rangle, \end{aligned} \quad (5.132)$$

který je ve shodě se Slaterovým – Condonovým pravidlem ( 4.187 ).  
Z ( 5.130 ) až ( 5.132 ) plyne hledané vyjádření:

$$\hat{Z} = \sum_{i,j} \langle i | \hat{z} | j \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] + \langle D_0 | \hat{Z} | D_0 \rangle. \quad (5.133)$$

Abychom odvodili výraz pro dvouelektronový operátor

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^-, \quad (5.134)$$

upravíme nejprve pomocí zobecněné Wickovy věty součin operátorů vystupujících v ( 5.134 )

$$\begin{aligned}
\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- &= \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right] + \left[ \overbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^-} \right] + \left[ \overbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^-} \right] + \left[ \overbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^-} \right] + \\
&= \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right] + \left[ \overbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^-} \right] + \left[ \overbrace{\hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^-} \right] = \\
&= \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right] + \omega(i) \left( \langle i|k \rangle \left[ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \right] - \langle i|l \rangle \left[ \hat{b}_j^+ \hat{b}_k^- \right] \right) + \\
&+ \omega(j) \left( \langle j|l \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_k^- \right] - \langle j|k \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_l^- \right] \right) + \\
&+ \omega(i) \omega(j) \left( \langle i|k \rangle \langle j|l \rangle - \langle i|l \rangle \langle j|k \rangle \right).
\end{aligned} \tag{5.135}$$

Po dosazení do ( 5.134 ) máme

$$\begin{aligned}
\hat{V} &= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|\hat{v}|kl \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right] + \frac{1}{2} \sum_{i',j,l} \langle i'j|\hat{v}|i'l \rangle \left[ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \right] - \\
&- \frac{1}{2} \sum_{i',j,k} \langle i'j|\hat{v}|ki' \rangle \left[ \hat{b}_j^+ \hat{b}_k^- \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j',k} \langle ij'|\hat{v}|kj' \rangle \left[ \hat{b}_j^+ \hat{b}_k^- \right] - \\
&- \frac{1}{2} \sum_{i,j',l} \langle ij'|\hat{v}|j'l \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_l^- \right] + \frac{1}{2} \sum_{i',j'} \left[ \langle i'j'|\hat{v}|i'j' \rangle - \langle i'j'|\hat{v}|j'i' \rangle \right],
\end{aligned} \tag{5.136}$$

což spolu s ( 5.129 ) dává Slaterovo – Condonovo pravidlo ( 4.190 ) pro dvouelektronový operátor

$$\langle D_0 | \hat{V} | D \rangle = \frac{1}{2} \sum_{i',j'} \left[ \langle i'j'|\hat{v}|i'j' \rangle - \langle i'j'|\hat{v}|j'i' \rangle \right]. \tag{5.137}$$

Ve druhém až pátém členu na pravé straně ( 5.136 ) přejmenujeme sčítací indexy tak, abychom v nich sčítali přes stejné indexy, ve druhém a třetím členu zaměníme označení proměnných  $\mathbf{x}_1$ ,  $\mathbf{x}_2$ .

Vezmeme-li ještě v úvahu ( 5.137 ), dostáváme



$$\begin{aligned}
\hat{V} = & \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|\hat{v}|kl\rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right] + \\
& + \frac{1}{2} \sum_{i,j,i'} \left( \langle ii'|v|ji'\rangle - \langle ii'|v|i'j\rangle + \langle ii'|v|ji'\rangle - \langle ii'|v|i'j\rangle \right) \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] + \\
& + \langle D_0|\hat{V}|D_0\rangle.
\end{aligned} \tag{5.138}$$

Definujeme-li nový jednoelektronový operátor  $\hat{g}$  vztahem

$$\langle i|\hat{g}|j\rangle = \sum_{i'} \left[ \langle ii'|\hat{v}|ji'\rangle - \langle ii'|\hat{v}|i'j\rangle \right], \tag{5.139}$$

můžeme vyjádřit  $\hat{V}$  jako lineární kombinaci normálních součinů kreačních a anihilačních operátorů

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij|\hat{v}|kl\rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right] + \sum_{i,j} \langle i|\hat{g}|j\rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] + \langle D_0|\hat{V}|D_0\rangle. \tag{5.140}$$

## Hamiltonián ve druhém kvantování

Elektronová část hamiltoniánu, pokud z ní vynecháme pro danou geometrii konstantní člen jaderné repulze, obsahuje jednoelektronové a dvouelektronové členy. Jednoelektronové členy jsou kinetická energie elektronů  $\hat{T}_e$  a potenciální energie coulombické repulze mezi elektrony a jádry  $\hat{V}_{en}$ . Dvouelektronový člen odpovídá potenciální energii repulze mezi elektrony  $\hat{V}_{ee}$ . V následujícím textu budeme značit elektronovou část hamiltoniánu s vynecháním konstantního členu jaderné repulze jako  $\hat{H}$ .

S využitím vztahu (5.83) a můžeme hamiltonián zapsat ve formalismu druhého kvantování jako

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \sum_{pq} \hat{h}_{pq} \hat{b}_p^+ \hat{b}_q^- + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} \langle pq|rs\rangle \hat{b}_p^+ \hat{b}_q^+ \hat{b}_s^- \hat{b}_r^-, \tag{5.141}$$

kde  $h_{pq}$  značí maticový prvek jednoelektronové části hamiltoniánu v bázi spinorbitalů a člen  $\langle pq|rs\rangle$  představuje následující dvouelektronový integrál

$$\langle pq|rs\rangle = \int \chi_p^*(x_1) \chi_q^*(x_2) \frac{1}{r_{12}} \chi_r(x_1) \chi_s(x_2) dx_1 dx_2. \quad (5.142)$$

Hamiltonián můžeme vůči Fermiho vakuu převést na normálně uspořádaný tvar

$$\hat{H} = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle + \hat{H}_{N_1} + \hat{H}_{N_2} \quad (5.143)$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{H}_{N_1} &= \sum_{pq} f_{pq} N \{ b_p^+ b_q^- \}, \\ \hat{H}_{N_2} &= \frac{1}{2} \sum_{pqrs} \langle pq|rs\rangle N \{ \hat{b}_p^+ \hat{b}_q^+ \hat{b}_s^- \hat{b}_r^- \}, \end{aligned} \quad (5.144)$$

$f_{pq}$  jsou prvky Fockovy matice v bázi spinorbitalů a člen  $\langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle$  odpovídá H-F-energii.

V dalším textu budeme pod pojmem normálně uspořádaný hamiltonián  $\hat{H}_N$  rozumět součet členů  $\hat{H}_{N_1}$  a  $\hat{H}_{N_2}$ .

Z ( 5.143 ) a ( 5.144 ) okamžitě plyne

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \hat{Z} + \hat{V} = \\ &= \langle D_0 | \hat{H} | D_0 \rangle + \sum_{i,j} \langle i | \hat{z} + \hat{g} | j \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^- \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | \hat{v} | kl \rangle \left[ \hat{b}_i^+ \hat{b}_j^+ \hat{b}_l^- \hat{b}_k^- \right]. \end{aligned} \quad (5.145)$$

## Metoda konfigurační interakce ve druhém kvantování

Metoda konfigurační interakce je variační metoda, která se na rozdíl od Hartreeho-Fockovy metody neomezuje na tvar vlnové funkce v podobě jednoho Slaterova determinantu (nebo jejich spinově adaptované lineární kombinace s konstantními koeficienty), ale používá tvar vlnové funkce ve formě lineární kombinace základního a excitovaných Slaterových determinantů obvykle vytvořených z kanonických H-F orbitalů.

Vlnová funkce úplné konfigurační interakce má tvar

$$|\psi\rangle = c|\Phi\rangle + \sum_{ia} c_i^a |\Phi_i^a\rangle + \sum_{\substack{a<b \\ i<j}} c_{ij}^{ab} |\Phi_{ij}^{ab}\rangle + \dots, \quad (5.146)$$

kde  $c, c_i^a, c_{ij}^{ab}, \dots$  jsou příslušné variační parametry. Pokud je vlnová funkce normalizovaná, pak jejich druhá mocnina udává váhu jednotlivých Slaterových determinantů. Výpočty korelační energie se zabývají tzv. **post-Hartree-Fockovské metody**. Tyto metody vycházejí z referenční vlnové funkce  $\Phi$  a určují z ní přesnou vlnovou funkci  $\psi$ . Přejít od referenční vlnové funkce k přesné lze formálně vyjádřit pomocí vlnového operátoru  $\hat{\Omega}$

$$\psi = \hat{\Omega}\Phi \quad (5.147)$$

V souladu s rovnicí ( 5.147 ) má vlnový operátor tvar

$$\hat{\Omega} = c + \sum_a \hat{C}_a, \quad (5.148)$$

kde

$$\begin{aligned}
\hat{C}_1 &= \sum_{ia} c_i^a \hat{b}_a^+ \hat{b}_i^-, \\
\hat{C}_2 &= \sum_{\substack{a < b \\ i < j}} c_{ij}^{ab} \hat{b}_a^+ \hat{b}_b^+ \hat{b}_j^- \hat{b}_i^-, \\
&\vdots
\end{aligned} \tag{5.149}$$

Protože množina Slaterových determinantů vytvořených z úplného systému jednoelektronových funkcí tvoří úplný systém mnohaelektronových funkcí, platí, že energie úplné konfigurační interakce v limitě s nekonečně velkou bází atomových orbitalů odpovídá přesné nerelativistické energii.

Výpočet metodou konfigurační interakce vede na diagonalizaci matice hamiltoniánu v bázi jednotlivých Slaterových determinantů z rovnice (5.146). Prvky matice hamiltoniánu lze spočítat s využitím Slaterových-Condonových pravidel, techniky druhého kvantování nebo metody unitární, či symetrické grupy.

V případě intermediální normalizace vlnové funkce platí pro korelační energii následující vztah

$$\Delta E = \sum_{\substack{a < b \\ i < j}} c_{ij}^{ab} \langle \Phi | \hat{H} | \Phi_{ij}^{ab} \rangle. \tag{5.150}$$

Z této rovnice by se mohlo zdát, že pro výpočet korelační energie stačí do vlnové funkce zahrnout jen biexcitované konfigurace. To je však mylná představa, protože rozvojové koeficienty biexcitací jsou pochopitelně ovlivněny přítomností ostatních excitací. Nicméně je pravda, že biexcitace dávají dominantní příspěvek ke korelační energii.

Metoda úplné konfigurační interakce, ve které jsou pro danou bázi atomových orbitalů (velikost báze určuje počet virtuálních molekulových orbitalů) zahrnuty všechny možné excitace, je výpočetně velmi náročná a ve skutečnosti realizovatelná jen pro nejmenší systémy. V praxi se rozvoj vlnové funkce z rovnice (5.146) omezuje jen na určité excitace, např. pouze na biexcitace (CID), či mono- a biexcitace (CISD).

Výhodou metody konfigurační interakce je fakt, že se jedná o variační metodu, naopak nevýhodou je její vysoká výpočetní náročnost a to, že v případě omezeného rozvoje vlnové funkce (např. metoda CISD) není size-extensivní. Pro alespoň částečnou opravu chyby způsobené size-nonextensivitou byla vyvinuta tzv. **Davidsonova korekce**.



Ernest Roy Davidson (1936)

### Hartreeho – Fockova metoda ve druhém kvantování

Jak víme z předešlé kapitoly, osvědčila se tato metoda zejména při studiu atomů, kdy je soustava  $Z$  nerozlišitelných fermionů tvořena elektronovým obalem atomu a za její hamiltonián le v první aproximaci považovat součet jednoelektronového a dvouelektronového operátoru

$$\hat{H} = \hat{H}_1 + \hat{H}_2 = \sum_{j=1}^Z \left( \frac{\hat{\mathbf{P}}_j^2}{2M} - Ze^2 |\hat{\mathbf{X}}_j|^{-1} \right) + \sum_{1 \leq j < k \leq Z} e^2 |\hat{\mathbf{X}}_j - \hat{\mathbf{X}}_k|^{-1}. \quad (5.151)$$

Odpovídající Hartreeho – Fockovy rovnice ( 4.302 ) pak můžeme ve formalizmu druhého kvantování vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned}
& \left[ -\frac{\hbar^2}{2M} \Delta - \frac{Ze^2}{r} \right] \Psi_j^-(\mathbf{x}) + \\
& + \sum_{i \neq j} \int \frac{e^2}{|\mathbf{x} - \mathbf{x}'|} \left[ \Psi_i^+(\mathbf{x}') \Psi_i^-(\mathbf{x}') \Psi_j^-(\mathbf{x}) - \Psi_i^+(\mathbf{x}') \Psi_j^-(\mathbf{x}') \Psi_j^-(\mathbf{x}) \right] d^3 \mathbf{x}' = \\
& = \varepsilon_j \Psi_j^-(\mathbf{x}).
\end{aligned}
\tag{5.152}$$

### Møllerova-Plessetova metoda



Christian Møller (1904 – 1980)



Milton Spinoza Plesset (1908 – 1991)

Møllerova-Plessetova metoda je založena na Rayleighově-Schrödingerově poruchovém rozvoji.

Jako neporušený stav se uvažuje Hartreeho-Fockova vlnová funkce a hamiltonián se dělí na neporušený hamiltonián a poruchu následujícím způsobem

$$\begin{aligned}
\hat{H}_0 &= \sum_{i=1}^N \hat{f}(x_i), \\
\hat{V} &= \hat{H} - H_0 = \sum_{i=1}^N \sum_{i < j}^N \frac{1}{r_{ij}} - \sum_{i=1}^N \hat{v}_{HF}(x_i),
\end{aligned}
\tag{5.153}$$

kde  $\hat{v}_{HF}(x_i)$  představuje operátor středního potenciálu ostatních elektronů působících na  $i$ -tý elektron. S použitím formalismu druhého kvantování lze tyto rovnice přepsat do normálně uspořádaného tvaru

$$\hat{H}_0 = \langle \Phi | \hat{H} | \Phi \rangle + \sum_p f_{pp} N \{ \hat{b}_p^+ \hat{b}_p^- \},$$

$$V_N = \hat{H}_N - \sum_p f_{pp} N \{ \hat{b}_p^+ \hat{b}_p^- \} = \sum_{p \neq q} N \{ \hat{b}_p^+ \hat{b}_p^- \} + \frac{1}{2} \sum_{pqrs} \langle pq | rs \rangle N \{ \hat{b}_p^+ \hat{b}_q^+ \hat{b}_s^- \hat{b}_r^- \}$$

( 5.154 )

Při použití kanonických hartree-fockovských orbitalů je příspěvek ke korelační energii v prvním řádu Møllerovy-Plessetovy poruchové metody nulový. První příspěvek ke korelační energii se tedy objeví až v druhém řádu Møllerovy-Plessetovy poruchové metody a z rovnice ( 5.154 ) se získá ve tvaru

$$E_2 = \sum_{\substack{a < b \\ i < j}} \frac{|\langle ij | ab \rangle - \langle ij | ba \rangle|^2}{f_{ii} + f_{jj} - f_{aa} - f_{bb}}.$$

( 5.155 )

Podle řádu poruchového rozvoje  $n$  se metoda označuje jako  $MP_n$ . Pravděpodobně nejčastěji používanou je díky své nízké výpočetní náročnosti metoda  $MP_2$ .

## Metoda spřažených klastrů



Jiří Čížek (1938)

Metoda spřažených klastrů (CC, coupled cluster) byla na přelomu 50. a 60. let 20. století poprvé navržena pro atomová jádra v rámci jaderné

fyziky. Pro kvantovou chemii ji v roce 1966 objevil Čech Jiří Čížek (tato práce má v současnosti přibližně 1300 citací, což svědčí o důležitosti této metody). Metoda spřažených klastrů spočívá v exponenciálním rozvoji vlnové funkce. Vlnový operátor má tvar

$$\hat{\Omega} = e^{\hat{T}}, \quad (5.156)$$

kde pro klastrový operátor  $\hat{T}$  platí tzv. **klastrový rozvoj**:

$$\hat{T} = \sum_{\alpha} \hat{T}_{\alpha} \quad (5.157)$$

a operátory  $\hat{T}_{\alpha}$  jsou dány vztahy

$$\begin{aligned} T_1 &= \sum_{ia} t_i^a \hat{b}_a^+ \hat{b}_i^-, \\ T_2 &= \sum_{\substack{a < b \\ i < j}} t_{ij}^{ab} \hat{b}_a^+ \hat{b}_b^+ \hat{b}_j^- \hat{b}_i^-, \\ &\vdots \end{aligned} \quad (5.158)$$

Koeficienty  $t_i^a$  a  $t_{ij}^{ab}$  se nazývají klastrové amplitudy.

Exponenciální tvar vlnového operátoru v rovnici ( 5.156 ) mimo jiné zajišťuje, že metoda vázaných klastrů je size-extensivní.

Pokud vyjdeme ze Schrödingerovy rovnice, použijeme hamiltonián v normálně uspořádaném tvaru, za vlnový operátor dosadíme z rovnice ( 5.156 ), celou rovnici vynásobíme zleva operátorem  $e^{-\hat{T}}$  a následně bra vektorem referenčního stavu (který je normalizován), dostaneme vztah pro korelační energii (rovnice ( 5.150 ))



$$\begin{aligned}
\hat{H}_N \psi &= \Delta E \psi \\
H_N e^{\hat{T}} \Phi &= \Delta E e^{\hat{T}} \Phi \\
e^{-\hat{T}} \hat{H}_N e^{\hat{T}} \Phi &= \Delta E \Phi \\
\langle \Phi | e^{-\hat{T}} H e^{\hat{T}} | \Phi \rangle &= \Delta E
\end{aligned}
\tag{5.159}$$

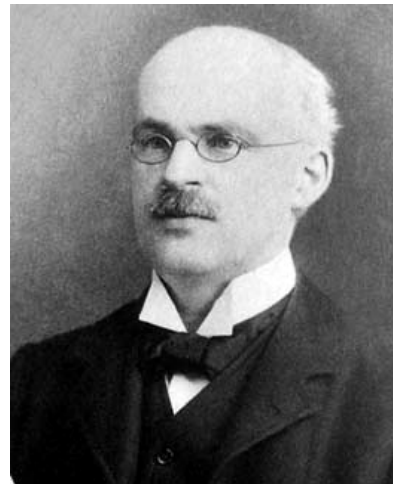
Abychom se od těchto formálních vztahů dostali k numericky řešitelným rovnicím, můžeme za operátor  $\bar{H} = e^{-\hat{T}} \hat{H}_N e^{\hat{T}}$  dosadit z Bakerova-Campbellova-Hausdorffova rozvoje

$$\begin{aligned}
\bar{H} = e^{-\hat{T}} H_N e^{\hat{T}} &= \hat{H}_N + [\hat{H}_N, \hat{T}] + \frac{1}{2!} [[H_N, \hat{T}], \hat{T}] + \\
&+ \frac{1}{3!} [[[H_N, \hat{T}], \hat{T}], \hat{T}] + \frac{1}{4!} [[[[\hat{H}_N, \hat{T}], \hat{T}], \hat{T}], \hat{T}] \\
\end{aligned}
\tag{5.160}$$

a s využitím formalismu druhého kvantování a Wickovy věty provést příslušné algebraické úpravy.



Henry Frederick Baker (1866 – 1956)



John Edward Campbell (1862 – 1924)



Felix Hausdorff (1868 – 1942)

## Kvazičástice

Při kvantověmechanickém rozboru soustav s nekonečným počtem stupňů volnosti (kmity krystalové mříže, elektromagnetické pole, ...) se rovněž s výhodou používají metody druhého kvantování.

Intenzitu vlnového pole  $u(\mathbf{r}, t)$  zde chápeme jako nekonečnou množinu souřadnic spojitě kvantověmechanické soustavy. Zavedeme-li zobecněné impulsy odpovídající těmto souřadnicím a požadujeme-li, aby pro ně platily obvyklé komutační relace, můžeme důsledně vytvořit kvantovou teorii takovýchto polí. V této teorii jsou souřadnice  $u(\mathbf{r}, t)$  operátory, neboť nekomutují s příslušnými zobecněnými impulsy. Tímto postupem logicky dospějeme ke kvazičásticím jako jsou fonony, fotony, ... , s energií  $\hbar\omega_{j\mathbf{q}}$  a impulsem  $\hbar\mathbf{q}$ .

Protože se veličiny  $u$  stávají při této metodě studia kmitů operátory, jsou i komplexní normální souřadnice  $a_j(\mathbf{q}) \equiv \hat{a}_{j\mathbf{q}}^-$  operátory.

Komplexně sdružené souřadnici  $a_j^*(\mathbf{q})$  odpovídá hermitovsky sdružený operátor  $\hat{a}_{j\mathbf{q}}^+$ .

Snadno lze ukázat, že hermitovský operátor

$$\hat{a}_{j\mathbf{q}}^+ \hat{a}_{j\mathbf{q}}^- = \hat{N}_{j\mathbf{q}} \quad (5.161)$$

má vlastnosti operátoru počtu kvazičástic ve stavu  $(j, \mathbf{q})$  a má tudíž vlastní hodnotu  $n_{j\mathbf{q}}$ .

Snadno lze ukázat, že působením operátorem  $\hat{a}_{j\mathbf{q}}^-$  na vlastní funkci operátoru  $\hat{N}_{j\mathbf{q}}$  dostaneme opět vlastní funkci operátoru  $\hat{N}_{j\mathbf{q}}$ , avšak s vlastní hodnotou  $n_{j\mathbf{q}} - 1$ . Operátor  $\hat{a}_{j\mathbf{q}}^-$  má tedy charakter operátoru anihilujícího kvazičástice. Podobně, působením  $\hat{a}_{j\mathbf{q}}^+$  na vlastní funkci operátoru  $\hat{N}_{j\mathbf{q}}$  se počet kvazičástic zvětší o jednotku. Operátor  $\hat{a}_{j\mathbf{q}}^+$  má tedy charakter kreačního operátoru.

Konkrétně při studiu např. tepelných kmitů krystalové mříže se jedná o kreaci a anihilaci fononů – kvazičástic reprezentujících akustické vlny v látkovém prostředí.

## Kvantová teorie pole

Obecné vektorové pole, charakterizované veličinou  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ , lze rozdělit na vírové (příčné) a nevírové (podélné), přičemž vírová a nevírová složka charakteristické veličiny  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  jsou definovány vztahy:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \mathbf{F}_{\parallel}(\mathbf{r}) + \mathbf{F}_{\perp}(\mathbf{r}), \quad (6.1)$$

přičemž

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{F}_{\parallel} &= 0; & \text{div } \mathbf{F}_{\parallel} &= \text{div } \mathbf{F}, \\ \text{div } \mathbf{F}_{\perp} &= 0; & \text{rot } \mathbf{F}_{\perp} &= \text{rot } \mathbf{F}, \end{aligned} \quad (6.2)$$

kde  $\mathbf{F}_{\perp}$  je vírová složka pole,  $\mathbf{F}_{\parallel}$  nevírová složka pole.

Uvažujme nejprve elektromagnetické pole bez zdrojů, pro které platí Maxwellovy rovnice

$$\begin{aligned} \text{rot } \mathbf{H} &= \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}; & \text{div } \mathbf{E} &= 0; \\ \text{rot } \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}; & \text{div } \mathbf{H} &= 0. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Vektorový potenciál  $\mathbf{A}$  jsme definovali jako

$$\mathbf{H} = \text{rot } \mathbf{A}. \quad (6.4)$$

Z Maxwellových rovnic přitom plyne, že

$$\text{rot} \left( \mathbf{E} + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \right) = 0. \quad (6.5)$$

Tento vztah bude splněn, bude-li

$$\mathbf{E} + \mu_0 \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = \text{grad } \varphi, \quad (6.6)$$

kde  $\varphi$  je libovolná skalární funkce.

Nechť  $\varphi = 0$ , pak

$$\mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (6.7)$$

Z první Maxwellovy rovnice lze odvodit, že

$$\operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A} = \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \quad (6.8)$$

z čehož, uvážíme-li (6.7), plyne

$$\operatorname{grad} \operatorname{div} \mathbf{A} - \Delta \mathbf{A} = -\varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}. \quad (6.9)$$

Zavedme na základě gradientní invariance takový vektorový potenciál  $\mathbf{A}'$ , o němž platí, že

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \operatorname{grad} \psi, \quad (6.10)$$

kde  $\psi$  je libovolná skalární funkce.

Budeme-li požadovat, aby zavedený vektorový potenciál měl jen příčný charakter, musí být

$$\operatorname{div} \mathbf{A}' = \operatorname{div} \mathbf{A} + \operatorname{div} \operatorname{grad} \psi = 0, \quad (6.11)$$

z čehož

$$\Delta \psi = -\operatorname{div} \mathbf{A}. \quad (6.12)$$

To je Poissonova rovnice pro hledanou skalární funkci  $\psi$ , kdy má vektorový potenciál  $\mathbf{A}'$  příčný charakter.

Partikulárním řešením Poissonovy rovnice bude

$$\psi = -\frac{1}{4\pi} \int_V \frac{\operatorname{div} \mathbf{A}}{\mathbf{r}} dV. \quad (6.13)$$

Na základě gradientní invariance tak můžeme zvolit skalární funkci  $\psi$  při daném vektorovém potenciálu  $\mathbf{A}$  tak, aby platilo

$$\operatorname{div} \mathbf{A}' = 0. \quad (6.14)$$

Pak

$$\mathbf{H} = \operatorname{rot} \mathbf{A}'; \quad \mathbf{E} = -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t}; \quad \operatorname{div} \mathbf{A}' = 0. \quad (6.15)$$

Z posledních tří vektorových vztahů vyplývá, že při uvedené kalibraci vektorového potenciálu lze dosáhnout příčného charakteru vektorového potenciálu, intenzity elektrického a magnetického pole.

Jsou to tedy veličiny vírové.

Budou-li v oblasti elektromagnetického pole proudové a nábojové zdroje, získají Maxwellovy rovnice tvar

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\varepsilon}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} + \mathbf{j}. \end{aligned} \quad (6.16)$$

V tomto případě může mít intenzita elektrického pole obecný charakter

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_\perp + \mathbf{E}_\parallel, \quad (6.17)$$

kde  $\mathbf{E}_\perp$  je příčná složka intenzity elektrického pole totožná s intenzitou elektrického pole bez nábojů.

Přitom

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E}_\perp &= 0, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}_\parallel &= 0. \end{aligned} \quad (6.18)$$

Ze druhé rovnosti ( 6.18 ) plyne

$$\mathbf{E}_{\parallel} = -grad \varphi, \quad ( 6.19 )$$

Výsledné elektrické pole pak je

$$\mathbf{E} = \mu \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - grad \varphi, \quad ( 6.20 )$$

příčemž

$$\Delta \varphi = -\frac{\rho}{\epsilon_0}. \quad ( 6.21 )$$

Řešením Poissonovy rovnice ( 6.20 ) je integrál

$$\varphi(\mathbf{r}) = -\frac{1}{4\pi\epsilon} \int_V \frac{\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} dV'. \quad ( 6.22 )$$

Na základě gradientní invariance můžeme opět, podobně jako v případě pole bez nábojů, zavést předpoklad

$$\mathbf{A} \equiv \mathbf{A}_{\perp}. \quad ( 6.23 )$$

Dosadíme-li za

$$\mathbf{H} = rot \mathbf{A}, \quad ( 6.24 )$$

pak s uvážením ( 6.20 ), ( 6.22 ), ( 6.23 ) dostáváme

$$\Delta \mathbf{A} - \epsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = \epsilon_0 \cdot grad \frac{\partial \varphi}{\partial t} - \mathbf{j}. \quad ( 6.25 )$$

Proudová hustota může mít obecný charakter, tedy

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_{\perp} + \mathbf{j}_{\parallel}. \quad ( 6.26 )$$

rovnice ( 6.25 ) pak po rozdělení příčných a podélných složek dává

$$\Delta \mathbf{A} - \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = -\mathbf{j}_\perp, \quad ( 6.27 )$$

$$\varepsilon_0 \cdot \text{grad} \frac{\partial \varphi}{\partial t} = \mathbf{j}_\parallel.$$

U elektromagnetického pole se zdroji lze tedy provést takovou kalibraci, aby měl vektorový potenciál pouze příčný charakter.

Přitom je příčná a podélná složka intenzity elektrického pole určena jen průběhem vektorového potenciálu, zatímco podélná složka intenzity elektrického pole závisí jen na prostorovém uspořádání nábojových zdrojů.

Intenzita magnetického pole má od přírody vírový charakter a má tedy jen příčnou složku.

Lorentzova síla je popsána vztahem

$$\mathbf{F} = q [\mathbf{E} + \mu_0 (\mathbf{v} \times \mathbf{H})], \quad ( 6.28 )$$

a může mít rovněž obecně příčný i podélný charakter:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}_\perp + \mathbf{F}_\parallel. \quad ( 6.29 )$$

Platí

$$\mathbf{F}_\perp = q [\mathbf{E}_\perp + \mu_0 (\mathbf{v} \times \mathbf{H})], \quad ( 6.30 )$$

$$\mathbf{F}_\parallel = q \cdot \mathbf{E}_\parallel = -q \cdot \text{grad} \varphi.$$

Platnost ( 6.30 ) plyne z příčného charakteru vektorového součinu  $\mathbf{v} \times \mathbf{H}$ , tj.

$$\text{div} (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) = (\mathbf{v} \cdot \text{rot} \mathbf{H}) - (\mathbf{H} \cdot \text{rot} \mathbf{v}) = 0. \quad ( 6.31 )$$



Integrujeme-li levou i pravou stranu ( 6.31 ) přes celý prostor, pak

$$\begin{aligned} \int_{V \rightarrow \infty} \operatorname{div}(\mathbf{v} \times \mathbf{H}) dV &= \int_{S \rightarrow \infty} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) dS = \\ &= \int_{V \rightarrow \infty} (\mathbf{v} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{H}) - (\mathbf{H} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{v}) dV. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Nechť je  $S$  kulová plocha s poloměrem blížícím se nekonečnu. Pak s ohledem na konečnou velikost rychlosti  $\mathbf{v}$  a vzhledem k tomu, že intenzita magnetického pole konverguje pro poloměr blížící se nekonečnu tak rychle, že

$$\int_{S \rightarrow \infty} \mathbf{n} \cdot (\mathbf{v} \times \mathbf{H}) dS \rightarrow 0, \quad (6.33)$$

dostaneme

$$\int_{V \rightarrow \infty} (\mathbf{v} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{H}) - (\mathbf{H} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{v}) dV = 0. \quad (6.34)$$

To může nastat identicky při obecném průběhu  $\mathbf{v}$  a  $\mathbf{H}$  jen tehdy, bude-li platit ( 6.31 ).

Energii záření definujeme jako energii elektrického a magnetického pole příčných složek, tj.

$$W = \frac{1}{2} \int_V (\varepsilon_0 E_{\perp}^2 + \mu_0 H^2) dV. \quad (6.35)$$

V kvantové teorii pole pokládáme za výchozí veličinu elektromagnetického pole vektorový potenciál  $\mathbf{A}$ .

Je ho prostřednictvím nyní vyjádříme energii záření  $W$ .

Uvažujme nejprve pole bez zdrojů.

Potom

$$\int_V H^2 dV = \int_V |\operatorname{rot} \mathbf{A}|^2 dV = \int_V (\operatorname{rot} \mathbf{A} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{A}) dV. \quad (6.36)$$

Podle Greenovy věty (George Green (1793 – 1841))

$$\int_V (\mathbf{A} \operatorname{rot} \operatorname{rot} \mathbf{A}) dV - \int_V (\operatorname{rot} \mathbf{A} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{A}) dV = \int_S [(\mathbf{A} \times \operatorname{rot} \mathbf{A}) \cdot \mathbf{n}] dS \quad (6.37)$$

Uvažujme neomezený prostor, kde  $S \rightarrow \infty$ .

Protože vektorový potenciál má vírový charakter, máme

$$\int_{S \rightarrow \infty} [(\mathbf{A} \times \operatorname{rot} \mathbf{A}) \cdot \mathbf{n}] dS \rightarrow 0, \quad (6.38)$$

neboť pro  $\mathbf{r} \rightarrow \infty$  konverguje vektorový potenciál velmi rychle.

Pak

$$\int_V (\operatorname{rot} \mathbf{A} \cdot \operatorname{rot} \mathbf{A}) dV = - \int_V (\mathbf{A} \cdot \Delta \mathbf{A}) dV = \sum_{i=1}^3 \int_V A_i \Delta A_i dV. \quad (6.39)$$

Podle Greenovy věty

$$\int_V A_i \Delta A_i dV + \int_V (\operatorname{grad} A_i)^2 dV = \int_S A_i \frac{\partial A_i}{\partial n} dS. \quad (6.40)$$

Pro  $S \rightarrow \infty$  je podobně jako v předešlém případě

$$\int_V A_i \Delta A_i dV = - \int_V (\operatorname{grad} A_i)^2 dV. \quad (6.41)$$

Pak

$$\int_V H^2 dV = \sum_{i=1}^3 \int_V |\operatorname{grad} A_i|^2 dV, \quad (6.42)$$

Uvážíme-li (6.15), pak

$$\begin{aligned}
 W &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \int_V \left( \varepsilon_0 E_{\perp i}^2 + \mu_0 |\text{grad } A_i|^2 \right) dV = \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \int_V \left[ \varepsilon_0 \left( \frac{\partial A_i}{\partial t} \right)^2 + \mu_0 |\text{grad } A_i|^2 \right] dV.
 \end{aligned}
 \tag{6.43}$$

Vztahem ( 6.43 ) je určena energie záření elektromagnetického pole, vyjádřená pomocí složek vektorového potenciálu.

Z rovnice ( 6.28 ) vyplývá, že hustota impulsu elektromagnetického pole připadající na objemovou jednotku je definována vztahem

$$\mathbf{x} = \frac{1}{c^2} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}).
 \tag{6.44}$$

Impuls elektromagnetického pole připadající na objem  $V$ , ve kterém je soustředěno elektromagnetické pole pak je

$$\mathbf{X} = \frac{1}{c^2} \int_V (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) dV.
 \tag{6.45}$$

Definujme impuls záření elektromagnetického pole pomocí příčných složek intenzity elektrického a magnetického pole tak, že

$$\mathbf{X}_z = \frac{1}{c^2} \int_V (\mathbf{E}_{\perp} \times \mathbf{H}) dV,
 \tag{6.46}$$

Vyjádřeme opět všechny složky pole pomocí vektorového potenciálu:

$$\mathbf{X}_z = \frac{1}{c^2} \int_V (\mathbf{E}_{\perp} \times \text{rot } \mathbf{A}) dV.
 \tag{6.47}$$

Protože

$$\text{rot } \mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 \text{rot} (A_i \mathbf{u}_i) = \sum_{i=1}^3 (\text{grad } A_i \times \mathbf{u}_i),
 \tag{6.48}$$

kde  $\mathbf{u}_i$  je jednotkový vektor ve směru souřadnicové osy.

Protože

$$\mathbf{E}_\perp \times (\text{grad } A_i \times \mathbf{u}_i) = \text{grad } A_i (\mathbf{E}_\perp \mathbf{u}_i) - \mathbf{u}_i (\text{grad } A_i \mathbf{E}_\perp), \quad (6.49)$$

bude

$$\mathbf{X}_z = \frac{1}{c^2} \sum_{i=3}^3 \int_V \text{grad } A_i \cdot E_{i\perp} dV + \frac{1}{c^2} \sum_{i=3}^3 \int_V \mathbf{u}_i \text{div} (A_i \mathbf{E}_\perp) dV. \quad (6.50)$$

Avšak

$$\text{grad } A_i \mathbf{E}_\perp = \text{div} (A_i \mathbf{E}_\perp) - A_i \text{div} \mathbf{E}_\perp = \text{div} (A_i \mathbf{E}_\perp). \quad (6.51)$$

$$\mathbf{X}_z = \frac{1}{c^2} \sum_{i=3}^3 \int_V \text{grad } A_i \cdot E_{i\perp} dV + \frac{1}{c^2} \sum_{i=3}^3 \mathbf{u}_i \int_S A_i (\mathbf{E}_\perp \mathbf{n}) dS. \quad (6.52)$$

Pro  $S \rightarrow \infty$  plošný integrál konverguje k nule a

$$\mathbf{X}_z = \frac{1}{c^2} \sum_{i=3}^3 \int_V E_{i\perp} \text{grad } A_i dV + \frac{1}{c^2} \sum_{i=3}^3 \int_V \frac{\partial A_i}{\partial t} \text{grad } A_i dV. \quad (6.53)$$

Impulsmoment záření definujeme jako v mechanice vztahem

$$\mathbf{I} = \frac{1}{c^2} \int_V \mathbf{r} \times \mathbf{x}_z dV = \frac{1}{c^2} \int_V \mathbf{r} \times (\mathbf{E}_\perp \times \mathbf{H}) dV = \frac{1}{c^2} \int_V \mathbf{r} \times (\mathbf{E}_\perp \times \text{rot } \mathbf{A}) dV. \quad (6.54)$$

Nechť

$$\mathbf{A} = \sum_{i=1}^3 A_i \mathbf{u}_i. \quad (6.55)$$

Pak

$$\text{rot} (A_i \mathbf{u}_i) = \text{grad} A_i \times \mathbf{u}_i \quad (6.56)$$

a

$$\mathbf{I} = \frac{1}{c^2} \sum_{i=1}^3 \int_V \mathbf{r} \times [\mathbf{E}_\perp \times (\text{grad} A_i \times \mathbf{u}_i)] dV \quad (6.57)$$

Platí

$$\mathbf{r} \times [\mathbf{E}_\perp \times (\text{grad} A_i \times \mathbf{u}_i)] = (\mathbf{r} \times \text{grad} A_i) (\mathbf{E}_\perp \mathbf{u}_i^2) - (\mathbf{r} \times \mathbf{u}_i) (\mathbf{E}_\perp \text{grad} A_i). \quad (6.58)$$

Proto

$$\begin{aligned} \mathbf{I} &= \frac{1}{c^2} \sum_{i=1}^3 \int_V E_{\perp i} (\mathbf{r} \times \text{grad} A_i) dV + \frac{1}{c^2} \sum_{i=1}^3 \int_V (\mathbf{u}_i \times \mathbf{r}) (\mathbf{E}_\perp \text{grad} A_i) dV = \\ &= \frac{1}{c^2} \sum_{i=1}^3 \int_V \frac{\partial A_i}{\partial t} (\mathbf{r} \times \text{grad} A_i) dV - \frac{1}{c^2} \sum_{i=1}^3 \int_V (\mathbf{u}_i \times \mathbf{r}) \left( \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} \text{grad} A_i \right) dV. \end{aligned} \quad (6.59)$$

Vztahem ( 6.59 ) je určen impulsmoment záření elektromagnetického pole, rozdělený na dvě části – na orbitální moment záření a spin záření. Impuls podélného pole definujeme analogicky podle vztahu

$$\mathbf{X}' = \frac{1}{c^2} \int_V (\mathbf{E}_\parallel \times \mathbf{H}) dV. \quad (6.60)$$

Protože

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\parallel \times \mathbf{H} &= -\text{grad} \varphi \times \mathbf{H} = -\text{rot} (\varphi \mathbf{H}) + \varphi \text{rot} \mathbf{H} = \text{rot} (\varphi \mathbf{H}) + \varphi \text{rot} \text{rot} \mathbf{A} = \\ &= -\text{rot} (\varphi \mathbf{H}) + \varphi \text{grad} \text{div} \mathbf{A} - \varphi \cdot \Delta \mathbf{A} = -\text{rot} (\varphi \mathbf{H}) - \varphi \cdot \Delta \mathbf{A}. \end{aligned} \quad (6.61)$$

Pak

$$\begin{aligned}\mathbf{X}' &= \frac{1}{c^2} \int_V \mathbf{E}_{\parallel} \times \mathbf{H} dV = -\frac{1}{c^2} \int_V \text{rot}(\varphi \mathbf{H}) dV - \frac{1}{c^2} \int_V \varphi \Delta \mathbf{A} dV = \\ &= \frac{1}{c^2} \int_S \varphi (\mathbf{H} \times \mathbf{n}) dS - \frac{1}{c^2} \int_V \varphi \Delta \mathbf{A} dV.\end{aligned}\quad (6.62)$$

Pro

$$S \rightarrow \infty \Rightarrow \int_S \varphi (\mathbf{H} \times \mathbf{n}) dS \rightarrow 0, \quad (6.63)$$

a tedy

$$\mathbf{X}' = -\frac{1}{c^2} \int_V \varphi \Delta \mathbf{A} dV. \quad (6.64)$$

Podle Greenovy věty

$$\int_V \varphi \Delta A_j - A_j \Delta \varphi dV = \int_S \varphi \frac{\partial A_j}{\partial n} - A_j \frac{\partial \varphi}{\partial n} dS. \quad (6.65)$$

Pro  $S \rightarrow \infty$  odpadne plošný integrál a

$$\int_V \varphi \Delta A_j \Delta V = \int_V A_j \Delta \varphi \Delta V. \quad (6.66)$$

Souhrnně

$$\int_V \varphi \Delta \mathbf{A} \Delta V = \int_V \mathbf{A} \Delta \varphi \Delta V. \quad (6.67)$$

Proto

$$\mathbf{X}' = -\frac{1}{c^2} \int_V \mathbf{A} \Delta \varphi dV. \quad (6.68)$$

V případě diskrétně rozložených nábojů

$$\Delta\varphi = -\frac{1}{\varepsilon} \sum_n q_n \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}), \quad (6.69)$$

kde  $\mathbf{r}_n$  je polohový vektor  $n$ -té částice,  
 $\mathbf{r}$  je obecný polohový vektor.

Pak

$$\mathbf{X}' = -\frac{1}{c^2} \frac{1}{\varepsilon} \sum_n \int_V \mathbf{A} q_n \delta(\mathbf{r}_n - \mathbf{r}) dV = \frac{1}{\varepsilon c^2} \sum_n q_n \mathbf{A}(n). \quad (6.70)$$

Vztahem ( 6.70 ) je určen impuls podélného elektromagnetického pole. Úplný impuls elektromagnetického pole s nabitými částicemi je dán součtem impulsů částic a impulsů záření a podélného pole.

$$\mathbf{P}_c = \mathbf{X}_z + \mathbf{X}_{\parallel} + \sum_n \mathbf{P}_n, \quad (6.71)$$

kde  $\mathbf{P}_n$  je impuls  $n$ -té částice.

Po dosazení

$$\mathbf{P}_c = \mathbf{X}_z + \frac{1}{\varepsilon c^2} \sum_n q_n \mathbf{A}(n) + \sum_n \mathbf{P}_n. \quad (6.72)$$

Celkový impuls vztahující se na  $n$ -tou částici označíme

$$\mathbf{P}_{cn} = \mathbf{P}_n + \frac{q_n \mathbf{A}(n)}{\varepsilon c^2}, \quad (6.73)$$

odkud

$$\mathbf{P}_c = \sum_n \mathbf{P}_{cn} + \mathbf{X}_z. \quad (6.74)$$

Vztahem ( 6.74 ) je určen úplný impuls elektromagnetického pole s nabitými částicemi.

Pro celkovou bilanci pondermotorického působení elektromagnetického pole platí

$$\operatorname{div} \hat{\mathbf{S}} = \mathbf{E}q + \mu_0 (\mathbf{J} \times \mathbf{H}) + \varepsilon_0 \mu_0 \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}), \quad ( 6.75 )$$

kde  $\hat{\mathbf{S}}$  je tzv. **tenzor Maxwellova pnutí ve třírozměrném prostoru**,  
 $\mathbf{J}$  proudová hustota.

Platí:

$$\hat{\mathbf{S}} = \hat{\mathbf{S}}_e + \hat{\mathbf{S}}_m, \quad ( 6.76 )$$

kde

$$\hat{\mathbf{S}}_e = \begin{pmatrix} \varepsilon_0 E_1^2 - \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 & \varepsilon_0 E_1 E_2 & \varepsilon_0 E_1 E_3 \\ \varepsilon_0 E_1 E_2 & \varepsilon_0 E_2^2 - \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 & \varepsilon_0 E_2 E_3 \\ \varepsilon_0 E_1 E_3 & \varepsilon_0 E_2 E_3 & \varepsilon_0 E_3^2 - \frac{\varepsilon_0}{2} E^2 \end{pmatrix}, \quad ( 6.77 )$$

je tenzor elektrického pole, a

$$\hat{\mathbf{S}}_m = \begin{pmatrix} \mu_0 H_1^2 - \frac{\varepsilon_0}{2} H^2 & \mu_0 H_1 H_2 & \mu_0 H_1 H_3 \\ \mu_0 H_1 H_2 & \mu_0 H_2^2 - \frac{\varepsilon_0}{2} H^2 & \mu_0 H_2 H_3 \\ \mu_0 H_1 H_3 & \mu_0 H_2 H_3 & \mu_0 H_3^2 - \frac{\varepsilon_0}{2} H^2 \end{pmatrix}, \quad ( 6.78 )$$

je tenzor magnetického pole.

Pro objemovou hustotu Lorentzovy síly platí



$$\mathbf{f} = \mathbf{E}q + \mu_0 (\mathbf{J} \times \mathbf{H}), \quad (6.79)$$

a srovnáním s ( 6.75 ) pro ni dostáváme vztah

$$\mathbf{f} = \operatorname{div} \mathbf{S} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}). \quad (6.80)$$

Čtyřvektor objemové hustoty Lorenzovy síly má složky

$$\mathbf{f}^{(4)} = \left( f_1, f_2, f_3, ic \frac{dm}{dt} \right) = \left( \mathbf{f}, ic \frac{dm}{dt} \right) = \left( \mathbf{f}, \frac{i}{c} q (\mathbf{E} \cdot \mathbf{v}) \right), \quad (6.81)$$

jde-li o vnější sílu vztahující se k nabitě částici s nábojem  $q$  a rychlostí  $\mathbf{v}$ .  
Z Maxwellovy – Lorenzovy rovnice vyplývá

$$\operatorname{rot} \mathbf{H} = -\varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t} = q\mathbf{v}, \quad (6.82)$$

kde  $q\mathbf{v}$  je hustota konvekčního proudu jedné částice s nábojem  $q$ , a proto

$$f_4 = \frac{i}{c} \left[ (\mathbf{E} \operatorname{rot} \mathbf{H}) - \frac{\varepsilon_0}{2} \frac{\partial E^2}{\partial t} \right]. \quad (6.83)$$

S použitím vektorové identity

$$(\mathbf{E} \operatorname{rot} \mathbf{H}) = \operatorname{div} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) - \frac{\mu_0}{2} \frac{\partial H^2}{\partial t} \quad (6.84)$$

a při zavedení čtvrtého rozměru předpisem

$$x_4 = ict, \quad (6.85)$$

dostaneme pro čtvrtou komponentu objemové hustoty vnější síly

$$f_4 = \frac{i}{c} \operatorname{div}(\mathbf{E} \times \mathbf{H}) + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_4} (\varepsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2). \quad (6.86)$$

Rozepíšeme vztahy ( 6.80 ) a ( 6.86 ) do složek

$$\begin{aligned} f_1 &= \frac{\partial S_{11}}{\partial x_1} + \frac{\partial S_{12}}{\partial x_2} + \frac{\partial S_{13}}{\partial x_3} - \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial x_4} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_1, \\ f_2 &= \frac{\partial S_{21}}{\partial x_1} + \frac{\partial S_{22}}{\partial x_2} + \frac{\partial S_{23}}{\partial x_3} - \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial x_4} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_2, \\ f_3 &= \frac{\partial S_{31}}{\partial x_1} + \frac{\partial S_{32}}{\partial x_2} + \frac{\partial S_{33}}{\partial x_3} - \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial x_4} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_3, \\ f_4 &= \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial x_1} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_1 + \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial x_2} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_2 + \\ &= \frac{i}{c} \frac{\partial}{\partial x_3} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_3 + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial x_4} (\varepsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2), \end{aligned} \quad (6.87)$$

kteřoužto soustavu můžeme zapsat v kompaktní formě jako

$$\mathbf{f}_4 = \operatorname{div} \hat{\Theta}, \quad (6.88)$$

kde  $\hat{\Theta}$  je **tenzor Maxwellova pnutí ve čtyřrozměrném prostoru**

$$\hat{\Theta} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} & S_{13} & \frac{i}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_1 \\ S_{21} & S_{22} & S_{23} & \frac{i}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_2 \\ S_{31} & S_{32} & S_{33} & \frac{i}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_3 \\ \frac{i}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_1 & \frac{i}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_2 & \frac{i}{c} (\mathbf{E} \times \mathbf{H})_3 & \frac{1}{2} (\varepsilon_0 E^2 + \mu_0 H^2)_1 \end{pmatrix}. \quad (6.89)$$

Vztahem ( 6.89 ) je popsána v kovariantní formě závislost Maxwellova pnutí a impulsu elektromagnetického pole na složkách vnější síly a změně hmotnosti částice.

Ze silové rovnice tedy dostáváme

$$\frac{d\mathbf{P}_c}{dt} = \int_V \mathbf{f} dV = \int_V \operatorname{div} \hat{\Theta} - \frac{1}{c^2} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) dV, \quad (6.90)$$

kde

$$\int_V \operatorname{div} \mathbf{S} dV = \int_S \mathbf{S}_n \mathbf{n} dS. \quad (6.91)$$

Pak

$$\frac{d}{dt} \left( \mathbf{P}_c + \frac{1}{c^2} \int_V (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) dV \right) = \int_S \mathbf{S}_n \mathbf{n} dS. \quad (6.92)$$

Pro

$$S \rightarrow \infty \Rightarrow \int_S \mathbf{S}_n \mathbf{n} dS \rightarrow 0, \quad (6.93)$$

Odkud

$$\frac{d}{dt} (\mathbf{P}_c + \mathbf{P}_p) = 0, \quad (6.94)$$

tj.

$$\mathbf{P}_c + \mathbf{P}_p = \text{konst.} \quad (6.95)$$

Tímto vztahem je popsán zákon zachování impulsu v neomezeném prostoru.

Čtvrtou složku objemové hustoty vnější síly danou vztahem ( 6.86 ) rozepíšeme v ekvivalentní podobě

$$ic \frac{dm_c}{dt} = ic \operatorname{div} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) + \frac{1}{2ic} \frac{\partial}{\partial t} (\epsilon E^2 + \mu H^2), \quad (6.96)$$

kde

$$m_c = \int_V m dV \quad (6.97)$$

je celková hmotnost částic v prostoru.

Pak

$$ic \frac{dm_c}{dt} = \frac{i}{c} \int_V \operatorname{div} (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) dV + \frac{1}{2ic} \frac{d}{dt} \int_V (\epsilon E^2 + \mu H^2) dV, \quad (6.98)$$

z čehož

$$ic \frac{dm_c}{dt} = \frac{i}{c^2} \int_S (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{n} dS + \frac{1}{2c^2} \frac{d}{dt} \int_V (\epsilon E^2 + \mu H^2) dV. \quad (6.99)$$

Pro

$$S \rightarrow \infty \Rightarrow \int_S (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) \cdot \mathbf{n} dS \rightarrow 0, \quad (6.100)$$

takže

$$\frac{d}{dt} (m_c c^2 + W_c) = 0, \quad (6.101)$$

kde

$$W_c = \frac{1}{2} \int_V (\epsilon E^2 + \mu H^2) dV, \quad (6.102)$$

je celková energie elektromagnetického pole a  $m_c c^2$  je energie částic.

Odtud plyne Zákon zachování energie elektromagnetického pole v neomezeném prostoru:

$$m_c c^2 + W_c = konst. \quad (6.103)$$

Podobným způsobem bychom dokázali platnost zákona zachování impulsmomentu elektromagnetického pole s nabitými částicemi v neomezeném prostoru:

$$\mathbf{r} \times \mathbf{P} + \mathbf{I}_c = konst. \quad (6.104)$$

kde

$$\mathbf{I}_c = \frac{1}{c^2} \int_V \mathbf{r} \times (\mathbf{E} \times \mathbf{H}) dV, \quad (6.105)$$

$\mathbf{P}$  je impuls částic,  $\mathbf{r}$  polohový vektor.

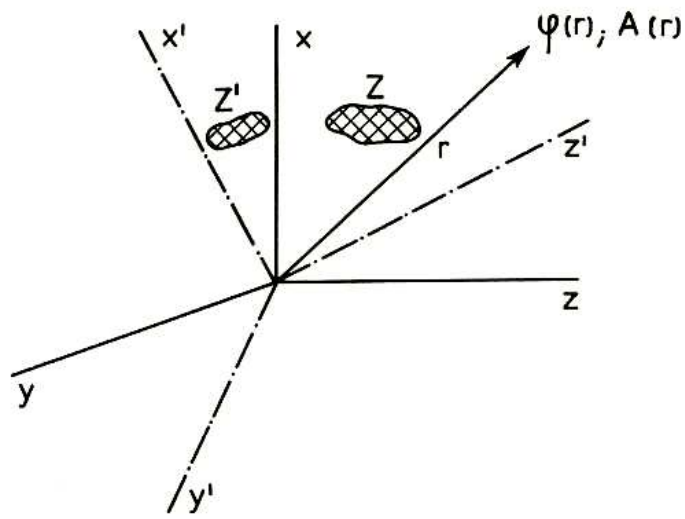
Uvažujme zdroj elektromagnetického pole o skalárním potenciálu  $\varphi(\mathbf{r})$  a vektorovém potenciálu  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ .

Nechť se zdroj elektromagnetického pole (zdroj nábojů a proudů) pootočí kolem počátku souřadného systému (viz obr. 6.1).

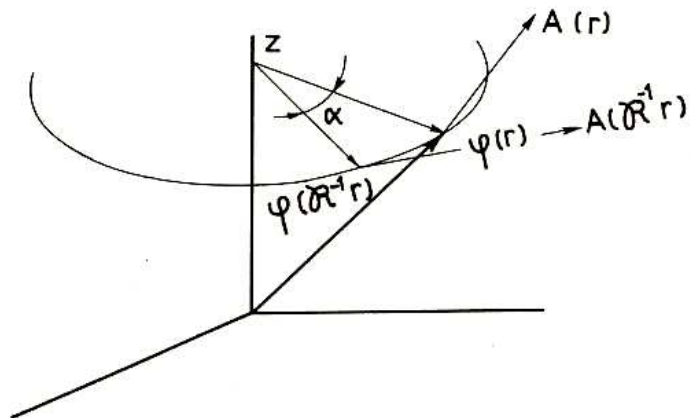
Zdroj v pootočené souřadné soustavě vybudí pole určené skalárním potenciálem  $\varphi'(\mathbf{r})$ .

Velikost tohoto potenciálu bude stejná, jakou by zdroj pole vybudil v původní, nečárkované soustavě.

Obr. 6.1



Obr. 2.



Necht' je rotace generována operátorem  $\hat{\mathbf{R}}$ .

Pak

$$\varphi'(\mathbf{r}) = \hat{\mathbf{R}}\varphi(\mathbf{r}) = \varphi(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}), \quad (6.106)$$

kde  $\hat{\mathbf{R}}^{-1}$  je operátor zpětné rotace.

Budeme-li uvažovat jednodušší případ otáčení okolo osy z o úhel  $\alpha$ ,

bude mít operátor  $\hat{\mathbf{R}}$  tvar

$$\hat{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (6.107)$$

a operátor  $\hat{\mathbf{R}}^{-1}$

$$\hat{\mathbf{R}}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & \sin \alpha & 0 \\ -\sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (6.108)$$

Pak podle ( 6.25 ) platí

$$\begin{aligned} \varphi(\mathbf{r}) &= \varphi(x, y, z) \\ \varphi'(\mathbf{r}) &= \varphi(x \cos \alpha + y \sin \alpha, -x \sin \alpha + y \cos \alpha, z). \end{aligned} \quad (6.109)$$

Nechť vybudí zdroj v místě  $\mathbf{r}$  vektorový potenciál  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ .

Při otočení se dostane bod o polohovém vektoru  $\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}$  do bodu o polohovém vektoru  $\mathbf{r}$ .

Měl-li vektorový potenciál v bodě  $\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}$  složky  $A_i(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r})$ , bude mít po pootočení složky

$$\begin{aligned} A'_x &= A_x(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}) \cos \alpha - A_y(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}) \sin \alpha, \\ A'_y &= A_x(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}) \sin \alpha + A_y(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}) \cos \alpha, \\ A'_z &= A_z, \end{aligned} \quad (6.110)$$

což lze vyjádřit v kompaktním operátorovém tvaru

$$\mathbf{A}' = \hat{\mathbf{R}}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}). \quad (6.111)$$

Uvažujme nyní otočení o velmi malý úhel  $\varepsilon$ .

Rozložíme goniometrické funkce v Taylorovu řadu a při velmi malém úhlu zanedbáme členy vyšších řádů:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{R}}_z(\alpha)[\varphi(x, y, z)] &\cong \varphi(x + \varepsilon y; -x\varepsilon + y; z) = \\
&= \varphi(x, y, z) + \varepsilon y \frac{\partial \varphi}{\partial x} - \varepsilon x \frac{\partial \varphi}{\partial x} = \\
&= \varphi(x, y, z) + \varepsilon \left( y \frac{\partial \varphi}{\partial x} - x \frac{\partial \varphi}{\partial x} \right).
\end{aligned} \tag{6.112}$$

Vlnová funkce  $\Psi$  v kvantové mechanice odpovídá výchylce vlnění v klasické mechanice.

Rozdíl je však v tom, že  $\Psi$  není sama o sobě přímo měřitelnou veličinou a může být proto komplexní.

Proto ji budeme ve směru  $z$  psát ve tvaru

$$\Psi = A \exp \left[ -i\omega \left( t - \frac{z}{v} \right) \right]. \tag{6.113}$$

Dosadíme-li v tomto výrazu  $2\pi\nu$  za  $\omega$  a  $\lambda f$  za  $v$ , dostaneme

$$\Psi = A \exp \left[ -2\pi i \left( f \cdot t - \frac{z}{\lambda} \right) \right]. \tag{6.114}$$

protože

$$E = h \cdot f = 2\pi\hbar f \tag{6.115}$$

a

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{2\pi\hbar}{p}, \tag{6.116}$$

máme

$$\Psi = A \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} (Et - pz) \right]. \tag{6.117}$$



Výraz ( 6.117 ) je matematickým popisem vlnového ekvivalentu volné částice s celkovou energií  $E$  a hybností  $p$ , pohybující se ve směru  $+z$ , stejně, jako je výraz ( 6.113 ) matematickým popisem výchylky harmonické vlny šířící se volně podél napjaté struny. Zderivováním ( 6.117 ) podle  $z$  a  $t$  dostaneme

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Psi}{\partial z} &= \frac{i}{\hbar} p\Psi, \\ \frac{\partial\Psi}{\partial t} &= -\frac{i}{\hbar} E\Psi,\end{aligned}\tag{ 6.118 }$$

což lze přepsat v podnětném tvaru

$$\begin{aligned}p\Psi &= \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z} \Psi, \\ E\Psi &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi.\end{aligned}\tag{ 6.119 }$$

Dynamická veličina  $p$  odpovídá diferenciálnímu operátoru  $\frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z}$  a podobně dynamická veličina  $E$  odpovídá diferenciálnímu operátoru  $i\hbar \frac{\partial}{\partial t}$ .

Operátor hybnosti má tedy tvar

$$\hat{\mathbf{p}} = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z},\tag{ 6.120 }$$

a operátor celkové energie

$$\hat{\mathbf{E}} = i\hbar \frac{\partial}{\partial t}.\tag{ 6.121 }$$

Definujme **kinetický moment** jako

$$\mathbf{l} = \mathbf{r} \times \hat{\mathbf{p}}. \quad (6.122)$$

Pak

$$\begin{aligned} \mathbf{l} &= \mathbf{x}_0 (yp_z - zp_y) + \mathbf{y}_0 (zp_x - xp_z) + \mathbf{z}_0 (xp_y - yp_x) = \\ &= -i\hbar \mathbf{x}_0 \left( y \frac{\partial}{\partial z} - z \frac{\partial}{\partial y} \right) - i\hbar \mathbf{y}_0 \left( z \frac{\partial}{\partial x} - x \frac{\partial}{\partial z} \right) - i\hbar \mathbf{z}_0 \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (6.123)$$

Srovnáme-li vztahy ( 6.112 ) a ( 6.123 ), zjistíme, že

$$\hat{\mathbf{R}}_z(\varepsilon) [\varphi(x, y, z)] \rightarrow \varphi(x, y, z) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} l_z \varphi(x, y, z) = \left( 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} l_z \right) \varphi(x, y, z). \quad (6.124)$$

Obecně lze dokázat, že

$$\lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \hat{\mathbf{R}}_z(\varepsilon) \equiv \hat{\mathbf{R}}_u(\varepsilon) = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} (\mathbf{l} \cdot \mathbf{u}), \quad (6.125)$$

kde  $\hat{\mathbf{R}}_u(\varepsilon)$  je operátor infinitesimálního otočení okolo osy, jejíž směr je určen jednotkovým vektorem  $\mathbf{u}$ .

Vztah ( 6.125 ) platí i pro soustavu  $N$  částic s celkovým kinetickým momentem  $\mathbf{L}$ .

Transformace skalární funkce v  $N$ -rozměrném prostoru pak bude

$$\hat{\mathbf{R}}_z(\varepsilon) [\varphi(r_1, r_2, \dots, r_N)] = \left( 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{u}) \right) \varphi(r_1, r_2, \dots, r_N), \quad (6.126)$$

takže

$$\hat{\mathbf{R}}_u(\varepsilon) = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} (\mathbf{L} \cdot \mathbf{u}). \quad (6.127)$$

Obecně platí: je-li  $\mathbf{J}$  celkový kinetický moment soustavy, pak  $\hat{\mathbf{R}}_u(\varepsilon)$  je operátor infinitesimální rotace okolo osy, jejíž směr je určen jednotkovým vektorem  $\mathbf{u}$ , platí-li:

$$\hat{\mathbf{R}}_u(\varepsilon) = 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar}(\mathbf{J} \cdot \mathbf{u}). \quad (6.128)$$

Nechť každému bodu prostoru, určenému polohovým vektorem  $\mathbf{r}$ , přísluší vektorová funkce  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$ .

Pak prostorovou závislostí této vektorové funkce je definováno vektorové pole.

Pro transformaci vektorové funkce jsme odvodili vztah (6.111).

Při otáčení okolo osy  $z$  platí:

$$\mathbf{A}' = \hat{\mathbf{R}}\mathbf{A}(\hat{\mathbf{R}}^{-1}\mathbf{r}). \quad (6.129)$$

Při infinitesimální transformaci  $\varepsilon \rightarrow 0$  pak po rozepsání do složek dostaneme:

$$\begin{aligned} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} A'_x(r) &= A_x(x + \varepsilon y, -\varepsilon x + y, z) - A_y(x + \varepsilon y, -\varepsilon x + y)\varepsilon, \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} A'_y(r) &= A_x(x + \varepsilon y, -\varepsilon x + y, z)\varepsilon + A_y(x + \varepsilon y, -\varepsilon x + y, z), \\ \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} A'_z(r) &= A_z(x + \varepsilon y, -\varepsilon x + y, z), \end{aligned} \quad (6.130)$$

z čehož

$$\begin{aligned} A'_x &= A_x(x, y, z) + \varepsilon y \frac{\partial A_x}{\partial x} - \varepsilon x \frac{\partial A_y}{\partial y} - \varepsilon A_y(x, y, z) - \varepsilon^2 y \frac{\partial A_x}{\partial x} + \varepsilon^2 x \frac{\partial A_y}{\partial y}, \\ A'_y &= \varepsilon A_x(x, y, z) + \varepsilon^2 y \frac{\partial A_x}{\partial x} - \varepsilon^2 x \frac{\partial A_x}{\partial y} + A_y(x, y, z) + \varepsilon y \frac{\partial A_y}{\partial x} - \varepsilon y \frac{\partial A_y}{\partial y}, \\ A'_z &= A_z(x, y, z) + \varepsilon y \frac{\partial A_z}{\partial x} - \varepsilon x \frac{\partial A_z}{\partial y}. \end{aligned} \quad (6.131)$$

Uvážíme-li definici kinetického momentu podle infinitesimálního otočení, upravíme ( 6.131 ) tak, že po zanedbání veličin druhého řádu

$$\begin{aligned} A'_x &= A_x(x, y, z) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} l_z A_x(x, y, z) - \varepsilon A_y(x, y, z), \\ A'_y &= A_x(x, y, z) + A_y(x, y, z) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} l_z A_y(x, y, z), \\ A'_z &= A_z(x, y, z) - \frac{i\varepsilon}{\hbar} l_z A_z(x, y, z). \end{aligned} \quad (6.132)$$

Tyto tři rovnice lze souhrnně psát tak, že

$$\hat{\mathbf{R}}_z(\varepsilon)[\mathbf{A}] = \left( 1 - \frac{i\varepsilon}{\hbar} (\mathbf{1}_z + \mathbf{s}_z) \right) \mathbf{A}, \quad (6.133)$$

kde operátor  $\mathbf{s}_z$  je reprezentován maticí

$$\mathbf{s}_z = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (6.134)$$

a

$$\mathbf{s}_z \mathbf{A} = \frac{1}{\hbar} (-iA_y \mathbf{x}_0 + iA_x \mathbf{y}_0). \quad (6.135)$$

Operátor  $\mathbf{s}_z$  je operátorem přídavného kinetického momentu nazývaného **spin** vektorového pole.

Podobně bychom dokázali, že

$$\mathbf{s}_x = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (6.136)$$

$$\mathbf{s}_y = \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Ze vztahů ( 6.134 ), ( 6.136 ) odvodíme operátor  $\hat{\mathbf{s}}^2$ :

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = \mathbf{s}_x^2 + \mathbf{s}_y^2 + \mathbf{s}_z^2. \quad (6.137)$$

Po dosazení zjistíme, že

$$\hat{\mathbf{s}}^2 = \frac{2}{\hbar}. \quad (6.138)$$

Pak

$$\hat{\mathbf{s}}^2 \mathbf{A}(x, y, z) = \frac{2}{\hbar} \mathbf{A}(x, y, z). \quad (6.139)$$

Protože vlastní hodnotu operátoru kvadrátu kinetického momentu a tedy i spinu vyjadřujeme ve tvaru

$$\frac{1}{\hbar} s(s+1), \quad (6.140)$$

přísluší operátoru spinu  $\hat{\mathbf{s}}^2$  vektorového pole spinové číslo  $s = 1$ . Vektorové pole je charakterizováno operátorem polohy  $\mathbf{r}$ , impulsu  $\mathbf{p} = i\hbar\nabla$  a spinem  $\mathbf{s}$ .

Platí při tom důležité identity:

$$rot \equiv (\mathbf{s} \cdot \mathbf{p}), \quad (6.141)$$

$$(\mathbf{s} \cdot \mathbf{p})^2 - p^2 = \text{grad div}, \quad (6.142)$$

s definicí rotoru

$$\begin{aligned} \text{rot}_x \mathbf{A} &= \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ p_y A_z \\ p_z A_y \end{pmatrix}, \\ \text{rot}_y \mathbf{A} &= \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_z A_x \\ 0 \\ p_x A_z \end{pmatrix}, \\ \text{rot}_z \mathbf{A} &= \frac{1}{\hbar} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} p_x A_y \\ p_y A_x \\ 0 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (6.143)$$

Podle uvedených vztahů můžeme vyjádřit klasické vektorové diferenciální operátory v Maxwellových rovnicích operátorem spinu a impulsu elektromagnetického pole.

Definujme **operátor parity P**:

$$\mathbf{P}\mathbf{B}(\mathbf{r}) = -\mathbf{B}(-\mathbf{r}), \quad (6.144)$$

kde  $\mathbf{B}(\mathbf{r})$  je veličina vektorového pole,  $\mathbf{r}$  polohový vektor.

Aplikujeme-li ještě jednou operátor  $\mathbf{P}$  na obě strany rovnosti (6.144), dostaneme

$$\mathbf{P}^2 \mathbf{B}(\mathbf{r}) = \mathbf{B}(\mathbf{r}), \quad (6.145)$$

a proto

$$\mathbf{P}^2 = 1. \quad (6.146)$$

Vlastní hodnota operátoru  $\mathbf{P}^2$  je tedy 1 a vlastní hodnoty operátoru  $\mathbf{P}$  jsou  $\pm 1$ .

Prvnímu z nich přísluší sudá parita, druhému lichá.

Maxwellovy rovnice rozepsané do složek tvoří soustavu simultánních diferenciálních rovnic prvního řádu.

Na základě gradientní invariance je lze převést na diferenciální rovnici druhého řádu pro pomocnou skalární veličinu, ze které umíme s pomocí diferenciálních operátorů určit jednotlivé složky elektromagnetického pole.

Přitom podmínky, za kterých jest to možno provést závisí na vlastnostech příslušných Laméových koeficientů charakterizujících daný souřadný systém.



**Père de Gabriel Léon Jean Baptiste Lamé**  
(1795 – 1870)

Označíme-li  $u_1, u_2, u_3$  obecné ortogonální souřadnice a  $h_1, h_2, h_3$  odpovídající Laméovy koeficienty, lze tyto podmínky vyjádřit ve tvaru

$$\frac{\partial}{\partial u_1} \left( \frac{h_1}{h_3} \right) = 0, \quad (6.147)$$

$$\frac{\partial}{\partial u_1} \left( \frac{h_3}{h_2} \right) = 0,$$

přičemž Laméův koeficient  $h_1 = 1$ .

Za těchto podmínek lze zavést pomocnou skalární veličinu a sestavit pro ni diferenciální rovnici druhého řádu (pro izotropní prostředí), která nemusí být totožná s vlnovou nebo Poissonovou rovnicí.

Má-li být vlnovou rovnicí, musí Laméovy koeficienty splňovat další podmínku:

$$\frac{\partial}{\partial u_1} = (h_2 h_3) = 0. \quad (6.148)$$

U ortogonální a cylindrické soustavy souřadnic jsou splněny všechny 3 uvedené podmínky kladené na Laméovy koeficienty, a proto příslušná diferenciální rovnice pomocné veličiny, která se nazývá **Hertzův vektor**, je totožná s vlnovou rovnicí.

Ve sférických souřadnicích není splněna podmínka ( 6.148 ) a příslušná diferenciální rovnice není totožná s vlnovou rovnicí.

Protože při studiu parity elektromagnetického pole bude výhodné zavést právě sférické souřadnice, vyšetříme tento případ podrobněji.

Předpokládejme, že intenzita elektrického a magnetického pole jsou vektorové funkce závislé na polohovém vektoru a na čase.

V izotropním prostředí bez proudových a nábojových zdrojů platí Maxwellovy – Lorenzovy rovnice

$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H} &= \varepsilon_0 \frac{\partial \mathbf{E}}{\partial t}, \\ \operatorname{rot} \mathbf{E} &= -\mu_0 \frac{\partial \mathbf{H}}{\partial t}. \end{aligned} \quad (6.149)$$

Proveďme Fourierovu transformaci levých a pravých stran podle obecného vztahu

$$\begin{aligned} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \exp(-i\omega t) dt &= f(\mathbf{r}, \omega), \\ \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \mathbf{F}(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \exp(-i\omega t) dt &= i\omega f(\mathbf{r}, \omega), \end{aligned} \quad (6.150)$$

kde  $\mathbf{f}(\mathbf{r}, \omega)$  je Fourierův obraz vektorové funkce  $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ .

Přitom předpokládáme, že integrály na levé straně ( 6.150 ) jsou konečné. Pak



$$\begin{aligned} \operatorname{rot} \mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega) &= i\omega\varepsilon\mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega), \\ \operatorname{rot} \mathbf{E}(\mathbf{r}, \omega) &= -i\omega\varepsilon\mathbf{H}(\mathbf{r}, \omega). \end{aligned} \quad (6.151)$$

podají-li se vyřešit tyto rovnice, určíme časovou závislost obecné veličiny  $\mathbf{F}$  zpětnou Fourierovou transformací.

Vyjádříme-li vektorové vztahy (6.151) ve sférických souřadnicích a uvážíme-li, že v prostředí bez zdrojů

$$\begin{aligned} \operatorname{div} \mathbf{E} &= 0, \\ \operatorname{div} \mathbf{H} &= 0, \end{aligned} \quad (6.152)$$

odvodíme pro pomocnou skalární veličinu  $\phi$  diferenciální rovnici ve sférických souřadnicích

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2 \sin \delta} \left[ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{1}{\sin \delta} \frac{\partial \phi}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \sin \delta \frac{\partial \phi}{\partial \delta} \right) \right] + k^2 \phi = 0, \quad (6.153)$$

kde  $r$  je velikost polohového vektoru,  $\varphi$  azimutální souřadnice a  $\delta$  doplněk úhlové výšky.

Známe-li průběh pomocné skalární veličiny  $\phi$ , určíme Fourierův obraz intenzity elektrického a magnetického pole příčné elektrické (TE) a magnetické (TM) vlny:

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_{\text{TM}} &= \operatorname{grad} \frac{\partial \phi}{\partial r} + k^2 \phi \mathbf{r}, \\ \mathbf{H}_{\text{TM}} &= i\omega\varepsilon \operatorname{rot}(\phi \mathbf{r}), \\ \mathbf{E}_{\text{TE}} &= -i\omega(\psi \mathbf{r}), \\ \mathbf{H}_{\text{TE}} &= \operatorname{grad} \frac{\partial \psi}{\partial r} + k^2 \psi \mathbf{r}, \end{aligned} \quad (6.154)$$

kde  $\mathbf{E}_{\text{TM}}$ ,  $\mathbf{H}_{\text{TM}}$  je intenzita elektrického, resp. magnetického pole příčné magnetické vlny,  $\mathbf{E}_{\text{TE}}$ ,  $\mathbf{H}_{\text{TE}}$  intenzita elektrického, resp. magnetického pole příčné elektrické vlny. Přitom u příčného elektrického resp.

magnetického pole nemá intenzita elektrického resp. magnetického pole složku ve směru jednotkového vektoru  $\mathbf{r}$ .

$\phi$ ,  $\psi$  jsou pomocné skalární veličiny vyhovující diferenciální rovnici ( 6.153 ).

Obecné elektromagnetické pole se skládá z pole příčně magnetického a příčně elektrického.

Proto

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \text{grad} \frac{\partial \phi}{\partial r} + k^2 \phi \mathbf{r} - i\omega\mu \text{rot}(\psi \mathbf{r}), \\ \mathbf{H} &= \text{grad} \frac{\partial \psi}{\partial r} + k^2 \psi \mathbf{r} - i\omega\varepsilon \text{rot}(\phi \mathbf{r}).\end{aligned}\tag{ 6.155 }$$

Uvážíme-li Maxwellovy rovnice ( 6.151 ), lze předešlé vztahy upravit do tvaru

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \text{rot rot}(\phi \mathbf{r}) - i\omega\mu \text{rot}(\psi \mathbf{r}), \\ \mathbf{H} &= \text{rot rot}(\psi \mathbf{r}) - \frac{1}{i\omega\mu} \text{rot rot rot}(\phi \mathbf{r}).\end{aligned}\tag{ 6.156 }$$

Protože je magnetické pole vždy vírové, předpokládejme, že

$$\mathbf{H} = \text{rot} \mathbf{A},\tag{ 6.157 }$$

kde  $\mathbf{A}$  je vektorový potenciál.

Pak, srovnáme-li tento vztah s druhým vztahem ( 6.156 ), zjistíme, že při vhodné kalibraci je

$$\mathbf{A} = \text{rot}(\psi \mathbf{r}) - \frac{1}{i\omega\mu} \text{rot rot}(\phi \mathbf{r}).\tag{ 6.158 }$$

Ze vztahů ( 6.156 ), ( 6.158 ) vyplývá, že v případě pole bez zdrojů má intenzita elektrického a magnetického pole i vektorový potenciál vírový charakter.

Označme

$$\begin{aligned}\mathbf{M} &= \text{rot}(\phi \mathbf{r}), \\ \mathbf{N} &= \text{rot}(\psi \mathbf{r}).\end{aligned}\tag{6.159}$$

Pak

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \text{rot} \mathbf{M} - i\omega\mu \mathbf{N}, \\ \mathbf{H} &= \text{rot} \mathbf{N} - \frac{1}{i\omega\mu} \text{rot rot} \mathbf{M}, \\ \mathbf{A} &= \mathbf{N} - \frac{1}{i\omega\mu} \text{rot} \mathbf{M}.\end{aligned}\tag{6.160}$$

Srovnáním první a třetí rovnice ( 6.160 ) vidíme, že

$$\mathbf{E} = -i\omega\mu \mathbf{A}.\tag{6.161}$$

Všechny veličiny v předešlých vztazích jsou Fourierovy obrazy.  
Budou-li v prostoru proudové a nábojové zdroje, pak

$$\text{div} \mathbf{E} = \frac{\rho}{\varepsilon}.\tag{6.162}$$

V tomto případě platí vztahy ( 6.17 ), ( 6.18 ), ( 6.19 ).

Nechť skalární funkce  $\varphi$  v rovnosti ( 6.19 ) vyhovuje diferenciální rovnici ( 6.153 ).

Označme

$$\mathbf{L} = \text{grad} \varphi.\tag{6.163}$$

Pak soustava vektorů  $\mathbf{L}$ ,  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{N}$  určuje zcela průběh elektromagnetického pole ve sférických souřadnicích.

Intenzita elektrického pole vyhovuje ve všech ortogonálních bázích operátorové rovnici

$$\text{rot rot} \mathbf{E} = k^2 \mathbf{E},\tag{6.164}$$

kde  $k$  je vlnové číslo.

Dosadíme-li do této rovnice za intenzitu elektrického pole příslušný výraz z ( 6.160 ), dostaneme

$$\text{rot rot rot } \mathbf{M} - i\omega\mu \text{ rot rot } \mathbf{N} = k^2 \text{ rot } \mathbf{M} - k^2 i\omega\mu \mathbf{N}, \quad ( 6.165 )$$

přičemž vektory  $\mathbf{M}$ ,  $\mathbf{N}$  vyhovují stejné diferenciální rovnici, avšak liší se integračními konstantami (okrajovými podmínkami).

Rovnice ( 6.165 ) musí platit identicky pro všechny polohové vektory  $\mathbf{r}$ . Proto musí být

$$\begin{aligned} \text{rot rot rot } \mathbf{M} &= k^2 \text{ rot } \mathbf{M}, \\ \text{rot rot } \mathbf{N} &= k^2 \mathbf{N}. \end{aligned} \quad ( 6.166 )$$

Z první rovnice ( 6.166 ) vyplývá, že při vhodné kalibraci také

$$\text{rot rot } \mathbf{M} = k^2 \mathbf{M}. \quad ( 6.167 )$$

Z rovnic ( 6.166 ), ( 6.167 ) vyplývá, že vektory  $\mathbf{M}$  a  $\mathbf{N}$  jsou vlastními vektory operátoru  $\text{rot rot}$  a že jim přísluší vlastní hodnota  $k^2$ .

Z rovnic ( 6.19 ), ( 6.163 ) lze odvodit, že vektor  $\mathbf{L}$  je rovněž vlastním vektorem operátoru  $\text{rot rot}$ , že mu však přísluší vlastní číslo  $k = 0$ .

Diferenciální rovnici ( 6.153 ) přetransformujeme tak, že za funkci  $\Phi$  budeme pokládat závisle proměnnou  $r\phi$ .

Pak

$$\frac{\partial^2 (r\Phi)}{\partial r^2} + \frac{1}{r^2 \sin \delta} \left[ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{1}{\sin \delta} \frac{\partial (r\Phi)}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \delta} \left( \sin \delta \frac{\partial (r\Phi)}{\partial \delta} \right) \right] + k^2 r\Phi = 0. \quad ( 6.168 )$$

Z této diferenciální rovnice odvodíme pro  $\Phi$  diferenciální rovnici

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Phi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \delta} \left[ \frac{\partial}{\partial \varphi} \left( \frac{1}{\sin \delta} \frac{\partial \Phi}{\partial \varphi} \right) + \frac{\partial}{\partial \delta} \left( \sin \delta \frac{\partial \Phi}{\partial \delta} \right) \right] + k^2 \Phi = 0. \quad ( 6.169 )$$

To je vlnová rovnice skalární funkce  $\Phi$ , vyjádřená ve sférických souřadnicích.



**Friedrich Wilhelm Bessel (1784 - 1846)**

Její řešení je

$$\Phi(r, \delta, \varphi) = C_1 \frac{1}{\sqrt{kr}} Z_{l+1/2}(kr) P_l^{(m)}(\cos \delta)_{\sin(m\varphi)}^{\cos(m\varphi)}, \quad (6.170)$$

kde  $C_1$  je integrační konstanta,  $Z_{l+1/2}(kr)$  obecná Besselova funkce  $\left(l + \frac{1}{2}\right)$ -tého řádu,  $P$  přidružené Legendreovy polynomy,

$$l = 0, 1, 2, \dots, \\ m = -l, -(l+1), \dots, l.$$

Známe-li funkci  $\Phi$ , určíme  $\phi$  podle vztahu:

$$\phi = r\Phi = C_1 \sqrt{\frac{r}{k}} Z_{l+1/2}(kr) P_l^{(m)}(\cos \delta)_{\sin(m\varphi)}^{\cos(m\varphi)}. \quad (6.171)$$

Podobně

$$\psi = C_2 \sqrt{\frac{r}{k}} Z_{l+1/2}(kr) P_l^{(m)}(\cos \delta)_{\sin(m\varphi)}^{\cos(m\varphi)}. \quad (6.172)$$

kde  $C_2$  je integrační konstanta odlišná od  $C_1$ .

Obecné elektromagnetické pole se tedy skládá s pole příčně elektrického a příčně magnetického, přičemž pole příčně elektrické je popsáno vektorem  $\mathbf{N}$ , a příčně elektrické vektorem  $rot \mathbf{M}$ .

Zjistíme nyní paritu těchto vektorů.

Podle ( 6.159 )

$$\mathbf{N} = rot(\psi r) = \frac{1}{r^2 \sin \delta} \begin{vmatrix} \mathbf{r}_0 & \boldsymbol{\delta}_0 & r \sin(\delta \boldsymbol{\varphi}_0) \\ \frac{\partial}{\partial r} & \frac{\partial}{\partial \delta} & \frac{\partial}{\partial \varphi} \\ \psi & 0 & 0 \end{vmatrix}, \quad (6.173)$$

kde  $\mathbf{r}_0$ ,  $\boldsymbol{\delta}_0$ ,  $\boldsymbol{\varphi}_0$  jsou jednotkové vektory ve směru odpovídajících sférických souřadnic.

Z předešlého vyplývá, že

$$\begin{aligned} N_r &= 0, \\ N_\delta &= C_1 \frac{\pm m}{\sin \delta} \sqrt{\frac{r}{k}} Z_{l+1/2}(kr) P_l^{(m)}(\cos \delta)_{\cos(m\varphi)}^{\sin(m\varphi)}, \\ N_\varphi &= -C_1 \sqrt{\frac{r}{k}} Z_{l+1/2}(kr) \frac{1}{2} \cdot \\ &\quad \cdot \left[ (l-m+1)(l+m) P_l^{(m)}(\cos \delta) - P_l^{(m)}(\cos \delta) \right]_{\sin(m\varphi)}^{\cos(m\varphi)}. \end{aligned} \quad (6.174)$$

Protože operátor parity je definován ve sférických souřadnicích vztahem

$$\mathbf{PN} = -\mathbf{N}(-\mathbf{r}) = -\mathbf{N}(r, \pi - \delta, \varphi + \pi), \quad (6.175)$$

zjistíme, při použití identity

$$\frac{\partial P_l^{(m)}(\cos \delta)}{\partial \delta} = \frac{1}{2} \left[ (l-m+1)(l+m) P_l^{(m-1)}(\cos \delta) - P_l^{(m+1)}(\cos \delta) \right], \quad (6.176)$$

že

$$\mathbf{PN} = (-1)^l \mathbf{N}. \quad (6.177)$$

Podobným způsobem bychom dokázali, že

$$P(\text{rot} \mathbf{M}) = (-1)^{l+1} \text{rot} \mathbf{M}. \quad (6.178)$$

Ze vztahů ( 6.177 ), ( 6.178 ) vyplývá, že příčné elektrické a magnetické pole se liší paritou.

Je-li u vidu TE sudá parita, bude u vidu (tm) se stejnými indexy lichá parita a obráceně.

V obecném případě můžeme namísto pole příčně elektrického a příčně magnetického zavést třídění podle sudé a liché parity.

Z ( 6.120 ) plyne, že

$$\hat{\mathbf{p}}^2 = -\hbar^2 \Delta. \quad (6.179)$$

Kvadrát impulsu je tedy totožný s Laplaceovým operátorem, až na Planckovou konstantu.

Příslušná operátorová rovnice je vlnovou rovnicí a vlastní číslo

Laplaceova operátoru je kvadrátem vlnového čísla  $k$ .

Ve sférických souřadnicích je vlnová rovnice vyjádřena vztahem ( 6.169 ). Operátor impulsmomentu je definován vztahem

$$\mathbf{I} = \mathbf{r} \times \mathbf{p} = -i\hbar(\mathbf{r} \times \nabla). \quad (6.180)$$

Vyjádříme-li kvadrát impulsmomentu  $\mathbf{I}$  ve sférických souřadnicích, dostaneme diferenciální operátor

$$\mathbf{I}^2 = \frac{1}{\sin \delta} \frac{\partial}{\partial \delta} \left( \sin \delta \frac{\partial}{\partial \delta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \delta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2}. \quad (6.181)$$

Jeho vlastní funkce je

$$Y_{l,m} = P_l^{(m)}(\cos \delta) \frac{\cos(m\varphi)}{\sin(m\varphi)}, \quad (6.182)$$

a vlastní hodnota  $l(l+1)$ .

Ze vztahů (6.182), (6.171) vyplývá, že část vlastní funkce vztahující se k souřadnicím  $\delta$  a  $\varphi$  je totožná.

Vzhledem k tomu, že operátor (6.181) nezávisí na souřadnici  $r$ , je možno učinit závěr, že operátory  $\mathbf{p}^2$  a  $\mathbf{I}^2$  vzájemně komutují.

Kvadrát operátoru spinu elektromagnetického pole má, jak jsme již dokázali, vlastní hodnotu  $2/\hbar$ .

Rozepsáním nejlépe v pravouhlých souřadnicích lze dokázat, že operátor  $s^2$  komutuje s operátory  $\mathbf{p}^2$  a  $\mathbf{I}^2$ .

Výsledný impulsmoment elektromagnetického pole je dán součtem

$$\mathbf{j} = \mathbf{l} + \mathbf{s}. \quad (6.183)$$

Přitom platí operátorová rovnice příslušející kvadrátu impulsmomentu  $\mathbf{j}^2$  a jeho složce do směru osy sférické soustavy souřadnic:

$$\begin{aligned} \mathbf{j} Y_{j,m}(\delta, \varphi) &= j(j+1) Y_{j,m}(\delta, \varphi), \\ \mathbf{j}_z Y_{j,m}(\delta, \varphi) &= m Y_{j,m}(\delta, \varphi). \end{aligned} \quad (6.184)$$

Na základě sčítání impulsmomentů platí, že při spinovém čísle elektromagnetického pole  $s = 1$  a při dané vlastní hodnotě impulsmomentu  $\mathbf{I}$ , kterou jsme označili  $l$ , mohou nastat tři stavy, jimž přísluší tři možná čísla  $j$ :

$$j = l + 1; \quad j = l; \quad j = l - 1. \quad (6.185)$$

Každému z čísel  $j$  přísluší pak soustava  $(2j + 1)$  čísel  $m$ :

$$-j; \quad -j+1; \quad \dots; \quad j. \quad (6.186)$$



Přítom pro vlastní funkci  $Y_{j,m}(\delta, \varphi)$  platí:

$$Y_{j,m}(\delta, \varphi) = P_j^{(m)}(\cos \delta) \frac{\sin(m\varphi)}{\cos(m\varphi)}. \quad (6.187)$$

Při aplikaci operátoru parity na tuto funkci platí, že

$$PY_{j,m}(\delta, \varphi) = -Y_{j,m}(\pi - \delta, \varphi + \pi) = (-1)^j Y_{j,m}(\delta, \varphi). \quad (6.188)$$

Po dosazení za  $j$  z ( 6.185 ) dostaneme tři možné stavy parity:

$$(-1)^{l+1}; \quad (-1)^l; \quad (-1)^{l-1}. \quad (6.189)$$

Dosaďme za  $(l-1) = \varepsilon$ .

Potom lze ( 6.189 ) vyjádřit v ekvivalentním tvaru jako

$$(-1)^\varepsilon; \quad (-1)^{\varepsilon+1}; \quad (-1)^\varepsilon, \quad (6.190)$$

neboť  $(-1)^{\varepsilon+2} = (-1)^\varepsilon$ .

Z předešlého je zřejmé, že lze elektromagnetické pole pokládat za dynamickou soustavu, charakterizovanou kvantovými čísly  $k^2, j, m$ , kde  $k$  je vlnové číslo,  $j$  kvantové číslo příslušející celkovému impulsmomentu elektromagnetického pole,  $m$  je kvantové číslo příslušející projekci impulsmomentu  $j_z$ .

Další charakteristickou veličinou je parita elektromagnetického pole.

Mohou nastat tři stavy parity pole, z nichž při  $j \neq 0$  dva z nich, a to stav s

$(-1)^{l+1}$  a  $(-1)^l$ , příslušejí vírovým složkám pole a jeden se stavem

$(-1)^{l-1}$  nevírové složce pole.

Při tom při vírových složkách  $k^2 \neq 0$  a při nevírové  $k^2 = 0$ .

Bude-li  $j = 0$ , může nastat jediný případ s paritou  $P = 1$ .

Přítom

$$j^2 Y_{l,m}(\delta, \varphi) = 0, \quad (6.191)$$

z čehož srovnáním s vlnovou rovnicí vyplyne, že to nastane tehdy, je-li  $k^2 = 0$ .

Paritě  $P = 1$  tak přísluší jen nevírové pole.

Intenzita elektrického a magnetického pole vírové složky jsou (pokud jde o jejich směr) určeny vektory, které jsou kolmé na směr šíření.

Tyto vektory mohou s časem měnit svůj směr i velikost.

Abychom mohli specifikovat časovou změnu směru, určíme dva základní vektory  $\mathbf{e}_1$  a  $\mathbf{e}_2$ , kolmé na směr šíření, které určují polarizaci elektrického pole.

Složky intenzity elektrického pole do směru  $\mathbf{e}_1$  a  $\mathbf{e}_2$  mohou být časově obecně závislé.

Budou-li harmonicky časově závislé, půjde obecně o eliptickou polarizaci.

Bude-li rozdíl fáze  $\pi/2$ , jde o polarizaci kruhovou.

Obyčejně jsou vektory  $\mathbf{e}_1$  a  $\mathbf{e}_2$  na sebe kolmé a tvoří se směrem šíření ortogonální bázi:

$$\mathbf{e}_1 \times \mathbf{e}_2 = \frac{\mathbf{k}}{k}, \quad (6.192)$$

K určení polarizace můžeme vzít rovněž za základ dva jednotkové vektory, definující kruhovou polarizaci:

$$\begin{aligned} \mathbf{e}^+ &= -\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 + i\mathbf{e}_2), \\ \mathbf{e}^- &= +\frac{1}{\sqrt{2}}(\mathbf{e}_1 - i\mathbf{e}_2), \end{aligned} \quad (6.193)$$

kde  $\mathbf{e}^+$  je jednotkový vektor určující pravotočivou kruhovou polarizaci,  $\mathbf{e}^-$  jednotkový vektor určující levotočivou kruhovou polarizaci.

Přepíšme nyní vztah ( 2.32 ) pro energii osamocené hmotné bodu s klidovou hmotou  $m_0$  do podoby

$$\frac{W^2}{c^2} = p^2 + m_0^2 c^2. \quad (6.194)$$

Vynásobením obou stran rovnice ( 6.194 ) vlnovou funkcí ( 6.117 ) a po dosazení operátoru energie ( 6.121 ) a hybnosti ( 6.120 ), se nám rovnice ( 6.194 ) upraví na tvar

$$\frac{1}{c^2} \left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \right)^2 \psi = (-i\hbar \nabla)^2 \psi + m_0^2 c^2, \quad ( 6.195 )$$

což lze dále upravit na

$$-\frac{\hbar^2}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = (-\hbar^2 \Delta + m_0^2 c^2) \psi, \quad ( 6.196 )$$

nebo na tvar s nulovou pravou stranou

$$\Delta \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} - \left( \frac{m_0 c}{\hbar} \right)^2 \psi = 0. \quad ( 6.197 )$$

Rovnice ( 6.197 ) je známá **Klein – Gordonova rovnice** (Walter Gordon (1893 – 1939)), která tvoří relativistickou kvantovou rovnici pro všechny bosony, tj. částice s celočíselným spinem.

Pro foton ( $m_0 = 0$ ) se rovnice ( 6.197 ) zjednoduší na tvar

$$\square \psi = \Delta \psi - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \psi}{\partial t^2} = 0 \quad ( 6.198 )$$

známé vlnové rovnice elektromagnetického pole (srov. ( 2.139 )).

Dynamický stav záření je určen v každém okamžiku a v každém bodu prostoru vektorovým čtyřpotenciálem  $\mathbf{A}$  a jeho časovou změnou.

Přitom platí rovnice

$$\square \mathbf{A} = \Delta \mathbf{A} + \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = 0, \quad ( 6.199 )$$

$$\operatorname{div} \mathbf{A} = 0.$$

Vlnovou rovnici ( 6.199 ) řešíme metodou separací proměnných.

Předpokládejme řešení ve tvaru:

$$\mathbf{A}(\mathbf{r}, t) = \sum_n q_n(t) \mathbf{T}_n(\mathbf{r}). \quad (6.200)$$

Přitom  $\mathbf{T}_n(\mathbf{r})$  tvoří úplnou soustavu ortogonálních normovacích funkcí, tj.

$$\mathbf{T}_n(\mathbf{r}) = \mathbf{T}_n^*(\mathbf{r}). \quad (6.201)$$

Po dosazení do rovnice (6.199) máme

$$\sum_n \left[ q_n(t) \Delta \mathbf{T}_n(\mathbf{r}) - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 q_n(t)}{\partial t^2} \mathbf{T}_n(\mathbf{r}) \right] = 0. \quad (6.202)$$

Má-li předešlý vztah platit ve kterémkoli světobodě, musí být

$$q_n(t) \Delta T_n(\mathbf{r}) - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 q_n(t)}{\partial t^2} T_n(\mathbf{r}) = 0. \quad (6.203)$$

Dělme předešlou rovnici výrazem  $q_n(t) T_n(\mathbf{r})$ .

Pak po separaci proměnných dostáváme

$$\frac{1}{T_n} \Delta T_n(\mathbf{r}) - \frac{1}{q_n} \mu \varepsilon \frac{\partial^2 q_n(t)}{\partial t^2} = 0. \quad (6.204)$$

V souladu s metodou separace proměnných necht'

$$\frac{1}{T_n} \Delta T_n = -k_n^2. \quad (6.205)$$

Pak

$$\Delta T_n + k_n^2 T_n = 0, \quad (6.206)$$

$$\frac{d^2 q_n}{dt^2} + \frac{k_n^2}{\mu \varepsilon} q_n = 0.$$

Označme

$$\frac{k_n^2}{\mu \varepsilon} = \omega_n^2. \quad (6.207)$$

Pak

$$\frac{d^2 q_n}{dt^2} + \omega_n^2 q_n = 0, \quad (6.208)$$

kde  $\omega_n$  je vlastní frekvence kmitů elektromagnetického pole, označených indexem  $n$ , charakterizovaných prostorovou funkcí  $\mathbf{T}_n(\mathbf{r})$ .

Kmity elektromagnetického pole, jimž přísluší prostorové uspořádání funkcí  $\mathbf{T}_n(\mathbf{r})$ , nazýváme vidy elektromagnetického pole.

Rovnice ( 6.127 ) je diferenciální rovnicí určující časový průběh kmitů harmonického oscilátoru o frekvenci  $\omega_n^2$ .

Takovému harmonickému pohybu přísluší hamiltonián

$$h_n = \frac{1}{2} (p_n^2 + \omega_n^2 q_n^2), \quad (6.209)$$

kde

$$p_n = \frac{dq_n}{dt}. \quad (6.210)$$

Přitom pokládáme  $q_n(t)$  za zobecněnou souřadnici a  $p_n$  za zobecněný impuls.

Budeme-li znát funkci  $\mathbf{T}_n(\mathbf{r})$ , určíme vektorový potenciál podle ( 6.200 ).

Předpokládejme, že vektorová funkce  $\mathbf{T}_n(\mathbf{r})$  tvoří ortogonální posloupnost funkcí.

Pak lze z ( 6.200 ) odvodit, že

$$q_n(t) = \frac{1}{M_n} \int_V (\mathbf{T}_n \mathbf{A}) dV, \quad (6.211)$$

$$p_n(t) = \frac{dq_n(t)}{dt} = \frac{1}{M_n} \int_V \left( \mathbf{T}_n \frac{d\mathbf{A}}{dt} \right) dV, \quad (6.212)$$

kde  $V$  je definiční objem vlastních funkcí  $\mathbf{T}_n(\mathbf{r})$ ,  $M_n$  jejich norma. Úplný hamiltonián záření elektromagnetického pole je určen součtem dílčích hamiltoniánů jednotlivých vidů.

$$\mathbf{H}_z = \sum_n \mathbf{h}_n. \quad (6.213)$$

Přitom

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \sum_n q_n \mathbf{T}_n, \\ \mathbf{E}_\perp &= -\mu \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} = -\mu \sum_n p_n \mathbf{T}_n. \end{aligned} \quad (6.214)$$

O soustředěné energii elektrického vírového pole záření jsme odvodili, že

$$\begin{aligned} W_e &= \frac{1}{2} \varepsilon \int_V E_\perp^2 dV = \frac{1}{2} \varepsilon \mu \sum_n p_n^2 \int_V T_n^2 dV = \\ &= \frac{1}{2} \frac{\mu}{c^2} \sum_n p_n^2 \int_V T_n^2 dV = \frac{1}{2} \sum_n p_n^2, \end{aligned} \quad (6.215)$$

kde jsme provedli normování tak, aby

$$\frac{\mu}{c^2} \int_V T_n^2 dV = 1, \quad (6.216)$$

kde  $c$  je rychlost šíření elektromagnetické vlny v prostředí s permitivitou  $\varepsilon$  a permeabilitou  $\mu$ .

O soustředěné energii magnetického pole záření platí

$$W_h = \frac{1}{2} \mu \int_V H^2 dV = \frac{1}{2} \mu \int_V |\text{rot } \mathbf{A}|^2 dV. \quad (6.217)$$

Podle Greenovy věty

$$\int_V \mathbf{A} \text{ rot rot } \mathbf{A} dV - \int_V |\text{rot } \mathbf{A}|^2 dV = \int_S (\mathbf{A} \times \text{rot } \mathbf{A}) \cdot \mathbf{n} dS, \quad (6.218)$$

kde  $S$  je plocha ohraničující objem  $V$ ,  $\mathbf{n}$  jednotkový vektor normály na plochu  $S$ .

Nechť elektromagnetické pole zaujímá celý prostor.

Pak pro  $r \rightarrow \infty$  konverguje plošný integrál k nule (na základě principu nevyzařování z nekonečna), a tedy

$$\int_V |\text{rot } \mathbf{A}|^2 dV = \int_S (\mathbf{A} \cdot \Delta \mathbf{A}) dV, \quad (6.219)$$

neboť

$$\text{rot rot } \mathbf{A} = \text{grad div } \mathbf{A} - \Delta \mathbf{A} \quad (6.220)$$

a při zavedené kalibraci je  $\text{div } \mathbf{A} = 0$ .

Uvážíme-li identity ( 6.218 ), ( 6.219 ), ( 6.208 ), dostaneme po dosazení do ( 6.218 )

$$\begin{aligned} W_h &= -\frac{\mu}{2} \int_V (\mathbf{A} \cdot \Delta \mathbf{A}) dV = -\frac{\mu}{2} \int_V \left( \sum_n q_n T_n \sum_m k^2 q_m T_m \right) dV = \\ &= \frac{1}{2} \sum_n \omega_n^2 q_n^2, \end{aligned} \quad (6.221)$$

Platí-li ortogonalita a normování vlastních funkcí  $T_n$ .

Celková energie záření elektromagnetického pole se rovná součtu elektrické a magnetické energie.

Proto podle ( 6.215 ) a ( 6.219 )

$$W = \frac{1}{2} \mu \int_V H^2 dV + \frac{1}{2} \varepsilon \int_V E_{\perp}^2 dV = \frac{1}{2} \sum_n (p_n^2 + \omega_n^2 q_n^2). \quad ( 6.222 )$$

Energii záření přísluší Hamiltonův operátor  $\mathbf{H}_z$ .

Proto platí pro operátor záření elektromagnetického pole:

$$\mathbf{H}_z = \frac{1}{2} \sum_n (\mathbf{p}_n^2 + \omega_n^2 \mathbf{q}_n^2), \quad ( 6.223 )$$

kde  $\mathbf{q}_n$  je operátor zobecněné souřadnice vidu  $n$ ,  $\mathbf{p}_n$  je operátor zobecněného impulsu vidu  $n$ .

Přitom je nutno si uvědomit, že operátoru zobecněné souřadnice přísluší amplituda intenzity magnetického pole vidu  $n$  a operátoru impulsu amplituda intenzity elektrického pole vidu  $n$ .

Bude-li v prostoru elektromagnetického pole přítomen soubor nabitých částic, bude příslušné elektromagnetické pole popsáno nehomogenní vlnovou rovnicí vektorového potenciálu.

V případě diskrétního rozložení nabitých částic:

$$\Delta \mathbf{A} + \mu \varepsilon \frac{\partial^2 \mathbf{A}}{\partial t^2} = - \sum_n e_n \mathbf{v}_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n), \quad ( 6.224 )$$

kde  $e_n$  je náboj  $n$ -té částice,  $\mathbf{v}_n$  rychlost  $n$ -té částice,  $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n)$  Diracova delta funkce,  $\mathbf{r}$  obecný polohový vektor,  $\mathbf{r}_n$  polohový vektor  $n$ -té částice. Dosadíme-li za  $\mathbf{A}$  příslušný výraz z ( 6.200 ), dostaneme

$$\sum_m \left( q_m \Delta \mathbf{T}_m - \mu \varepsilon \frac{\partial^2 q_m}{\partial t^2} \mathbf{T}_m \right) = - \sum_n e_n \mathbf{v}_n \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_n). \quad ( 6.225 )$$



Vynásobíme-li tuto nerovnici skalárním vektorem  $\mathbf{T}_q$  a integrujeme přes objem  $V$ , dostaneme s uvážením ( 6.206 )

$$\frac{d^2 q_m}{dt^2} + \omega_m^2 q_m = \mu \sum_n e_n (\mathbf{v}_n \mathbf{T}_m(n)), \quad ( 6.226 )$$

kde  $\mathbf{T}_m(n)$  je vektor vlastní funkce  $\mathbf{T}_m$  v místě  $n$ -té částice.

Rovnice ( 6.226 ) je diferenciální rovnicí pro zobecněnou souřadnici  $q_m$  elektromagnetického pole, v jehož prostoru jsou umístěny diskrétně rozložené nabitě částice.

Rovnici ( 6.226 ) lze rovněž odvodit z kanonických rovnic výsledného hamiltoniánu.

Nechť je výsledný hamiltonián  $\mathbf{H}$  funkcí zobecněné souřadnice  $q_m$  a impulsu  $p_m$  elektromagnetického pole a polohového vektoru  $\mathbf{r}$  celkového impulsu  $\mathbf{P}_{cn}$  nabitých částic.

Potom

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}(q_m, p_m, r_n, P_{cn}) = \mathbf{H}_z + \mathbf{H}_c + \sum_n \mathbf{H}_n, \quad ( 6.227 )$$

kde  $\mathbf{H}_z$  je hamiltonián záření elektromagnetického pole,  $\mathbf{H}_c$  je hamiltonián vzájemné coulombické interakce mezi částicemi,

$$\mathbf{H}_n = m_n c^2, \quad ( 6.228 )$$

kde  $m_n$  je hmotnost  $n$ -té částice.

Vztah ( 6.228 ) upravíme do vhodnějšího tvaru

$$\mathbf{H}_n = m_n c^2 = c^2 \frac{m_{0n}}{\sqrt{1 - \frac{v_n^2}{c^2}}}, \quad ( 6.229 )$$

kde  $m_{0n}$  je klidová hmotnost  $n$ -té částice.

Uvážíme-li, že impuls  $n$ -té částice

$$\mathbf{p}_n = m_n \mathbf{v}_n, \quad ( 6.230 )$$

odvodíme z ( 6.229 ), že

$$H_n = c^2 \sqrt{m_{0n}^2 + \frac{1}{c^2} \left| \mathbf{p}_{cn} - \frac{e_n}{\epsilon c^2} \mathbf{A}(n) \right|^2}, \quad ( 6.231 )$$

kde  $\mathbf{p}_{cn}$  je výsledný impuls určený vztahem ( 2.165 ).

Vztahem ( 6.231 ) je určen hamiltonián nabité částice, která je v interakci s elektromagnetickým polem.

Přejdeme-li na základě principu korespondence ke kvantování, nahradíme fyzikální veličiny příslušnými operátory:

$$\hat{\mathbf{h}}_{zm} = \frac{1}{2} (\hat{\mathbf{p}}_m^2 + \omega_m^2 \hat{\mathbf{q}}_m^2), \quad ( 6.232 )$$

$$\hat{\mathbf{H}}_z = \frac{1}{2} \sum_m (\hat{\mathbf{p}}_m^2 + \omega_m^2 \hat{\mathbf{q}}_m^2),$$

kde  $\hat{\mathbf{p}}_m$  resp.  $\hat{\mathbf{q}}_m$  je operátor impulsu resp. zobecněné souřadnice elektromagnetického pole vidu  $m$ .

Na základě kvantověmechanických pravidel pro jejich komutátor platí

$$[\hat{\mathbf{q}}_m, \hat{\mathbf{p}}_m] = i\hbar. \quad ( 6.233 )$$

Zavedme nyní zjednodušenou symboliku:

$$\hat{\mathbf{h}}_{zm} = \mathfrak{N}_m \hbar \omega_m, \quad ( 6.234 )$$

$$\hat{\mathbf{q}}_m = \left( \frac{\hbar}{\omega_m} \right)^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{Q}}_m, \quad ( 6.235 )$$

$$\hat{\mathbf{p}}_m = (\hbar \omega_m)^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{P}}_m. \quad ( 6.236 )$$

Pak lze Hamiltonián a komutátor ( 6.233 ) psát ve tvaru

$$\mathfrak{K}_m = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{P}}_m^2 + \hat{\mathbf{Q}}_m^2), \quad (6.237)$$

$$[\hat{\mathbf{Q}}_m, \hat{\mathbf{P}}_m] = i. \quad (6.238)$$

Operátory  $\mathfrak{K}_m$ ,  $\hat{\mathbf{P}}_m$ ,  $\hat{\mathbf{Q}}_m$  jsou transformované operátory hamiltoniánu, zobecněného impulsu a zobecněné souřadnice.

Při tom je nutno si uvědomit, že

$$\hat{\mathbf{p}}_m = -i\hbar \frac{\partial}{\partial q_m}, \quad (6.239)$$

a tedy při nově zvolené symbolice

$$\hat{\mathbf{P}}_m = -i \frac{\partial}{\partial Q_m}. \quad (6.240)$$

Zavedme nové kombinované operátory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{a}}_m^- &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{Q}}_m + i\hat{\mathbf{P}}_m), \\ \hat{\mathbf{a}}_m^+ &= \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{Q}}_m - i\hat{\mathbf{P}}_m). \end{aligned} \quad (6.241)$$

Platí

$$[\hat{\mathbf{a}}_m^-, \hat{\mathbf{a}}_m^+] = 1. \quad (6.242)$$

Dosadíme-li za  $\hat{\mathbf{P}}_m$  a  $\hat{\mathbf{Q}}_m$  operátory  $\hat{\mathbf{a}}_m^+$  a  $\hat{\mathbf{a}}_m^-$  do (6.188), dostaneme

$$\mathfrak{K}_m = \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{a}}_m^- \hat{\mathbf{a}}_m^+ + \hat{\mathbf{a}}_m^+ \hat{\mathbf{a}}_m^-). \quad (6.243)$$

Označme

$$\hat{N}_m = \hat{a}_m^+ \hat{a}_m^- , \quad (6.244)$$

Pak

$$\mathfrak{N}_m = \hat{N}_m + \frac{1}{2}, \quad (6.245)$$

Uvážíme-li ( 6.242 ), vyplývají nám odtud identity

$$\hat{N} \hat{a}^- = \hat{a}^+ \hat{a}^- \hat{a}^- = \hat{a}^- \hat{a}^+ \hat{a}^- - \hat{a}^- = \hat{a}^- (\hat{N} - 1), \quad (6.246)$$

$$\hat{N} \hat{a}^+ = \hat{a}^+ \hat{a}^- \hat{a}^+ = \hat{a}^+ (1 + \hat{a}^+ \hat{a}^-) = \hat{a}^+ (\hat{N} + 1).$$

Zavedené operátory  $\hat{a}_m^+$ ,  $\hat{a}_m^-$ ,  $\hat{N}$ , nazveme po řadě **kreačním operátorem, anihilačním operátorem, operátorem počtu částic**.

Nechť  $|\mathbf{v}\rangle$  je vlastní vektor operátoru  $\hat{N}$ :

$$\hat{N} |\mathbf{v}\rangle = \nu |\mathbf{v}\rangle , \quad (6.247)$$

kde  $\nu$  je vlastní hodnota operátoru  $\hat{N}$ , příslušející vlastnímu vektoru  $|\mathbf{v}\rangle$ .

Operátor  $\hat{N}$  je operátor pozorovatelné, a proto platí podmínka

$$\langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle > 0. \quad (6.248)$$

Z ( 6.244 ) pak vyplývá, že

$$\hat{N} \hat{a}^- |\mathbf{v}\rangle = \hat{a}^- (\hat{N} - 1) |\mathbf{v}\rangle = (\nu - 1) \hat{a}^- |\mathbf{v}\rangle , \quad (6.249)$$

$$\hat{N} \hat{a}^+ |\mathbf{v}\rangle = \hat{a}^+ (\hat{N} + 1) |\mathbf{v}\rangle = (\nu + 1) \hat{a}^+ |\mathbf{v}\rangle .$$

Z ( 6.249 ) plyne, že ketvektor  $\hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{v} \rangle$ , vzniklý aplikací anihilačního operátoru na ketvektor  $| \mathbf{v} \rangle$ , je rovněž vlastním vektorem operátoru  $\hat{\mathbf{N}}$ , jemuž přísluší vlastní hodnota  $(\nu - 1)$ .

Podobně je ketvektor  $\hat{\mathbf{a}}^+ | \mathbf{v} \rangle$  vlastním vektorem operátoru  $\hat{\mathbf{N}}$  s vlastní hodnotou  $(\nu + 1)$ .

Vytvořme posloupnost vektorů  $\hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{v} \rangle; (\hat{\mathbf{a}}^-)^2 | \mathbf{v} \rangle; \dots; (\hat{\mathbf{a}}^-)^p | \mathbf{v} \rangle$ .

Tyto vektory jsou vlastními vektory operátoru  $\hat{\mathbf{N}}$ .

Příslušejí jim vlastní hodnoty  $(\nu - 1), (\nu - 2), \dots, (\nu - p)$ .

Důkaz:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{N}}(\hat{\mathbf{a}}^-)^2 | \mathbf{v} \rangle &= \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{v} \rangle = (\hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^+ - 1) \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{v} \rangle = \\ &= \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^+ \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{v} \rangle - \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{v} \rangle = (\hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{N}} \hat{\mathbf{a}}^- - \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^-) | \mathbf{v} \rangle = \\ &= (\hat{\mathbf{a}}^- (\nu - 1) \hat{\mathbf{a}}^- - \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^-) | \mathbf{v} \rangle = (\hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^- (\nu - 1) - \hat{\mathbf{a}}^- \hat{\mathbf{a}}^-) | \mathbf{v} \rangle = \\ &= (\nu - 2) (\hat{\mathbf{a}}^-)^2 | \mathbf{v} \rangle. \end{aligned} \tag{ 6.250 }$$

Podobně bychom dokázali, že vektor  $(\hat{\mathbf{a}}^-)^p | \mathbf{v} \rangle$  je vlastním vektorem operátoru  $\hat{\mathbf{N}}$  s vlastní hodnotou  $(\nu - p)$ .

Vytvořme posloupnost vektorů  $\hat{\mathbf{a}}^+ | \mathbf{v} \rangle; (\hat{\mathbf{a}}^+)^2 | \mathbf{v} \rangle; \dots; (\hat{\mathbf{a}}^+)^p | \mathbf{v} \rangle$ .

Ekvivalentním způsobem jako v předešlém případě lze ukázat, že tyto vektory jsou rovněž vlastními vektory operátoru  $\hat{\mathbf{N}}$  a že jim příslušejí vlastní hodnoty  $(\nu + 1), (\nu + 2), \dots, (\nu + p)$ .

Posloupnost vektorů  $(\hat{\mathbf{a}}^-)^p$  je omezená, neboť vlastní hodnota pozorovatelného operátoru  $\hat{\mathbf{N}}$  nemůže být záporná.

Krajní případ nastane tehdy, když

$$\nu = p. \tag{ 6.251 }$$

Přitom je vlastní hodnota  $(\nu - p)$  nulová.

Nulovou vlastní hodnotu dostaneme tedy pro různé hodnoty  $\nu$  podle velikosti  $p$ .

Této nulové vlastní hodnotě může příslušet více vlastních ketvektorů. Označme je symbolem  $|\mathbf{vp}\rangle$ .

Nulové vlastní hodnotě tedy příslušejí ketvektory

$$|\mathbf{11}\rangle; |\mathbf{22}\rangle; |\mathbf{33}\rangle; \dots; |\mathbf{pp}\rangle. \quad (6.252)$$

Z toho plyne, že nulová vlastní hodnota je  $p$ -krát degenerována.

Vytvořme lineární kombinaci těchto vektorů a výsledný vektor označme  $|\mathbf{0}\rangle$ .

Pak

$$|\mathbf{0}\rangle = c_1^{(o)} |\mathbf{11}\rangle + c_2^{(o)} |\mathbf{22}\rangle + c_3^{(o)} |\mathbf{33}\rangle + \dots + c_p^{(o)} |\mathbf{pp}\rangle. \quad (6.253)$$

Zvolme nyní obecné vlastní číslo  $n$  o němž platí

$$n = \nu - o, \quad (6.254)$$

přičemž

$$\hat{N}(\hat{\mathbf{a}}^-)^{(o)} |\mathbf{v}\rangle = (\nu - o)(\hat{\mathbf{a}}^-)^{(o)} |\mathbf{v}\rangle = n(\hat{\mathbf{a}}^-)^{(o)} |\mathbf{v}\rangle. \quad (6.255)$$

Vytvořme, podobně jako u nulové vlastní hodnoty, lineární kombinaci vektorů s vlastní hodnotou  $n$  a touto lineární kombinací definujme ketvektor  $|\mathbf{n}\rangle$ :

$$|\mathbf{n}\rangle = \sum_{\nu} c_{\nu}^{(n)} |\mathbf{v}\mathbf{o}\rangle, \quad (6.256)$$

kde dílčí vektor  $|\mathbf{v}\mathbf{o}\rangle$  je jakýkoli ketvektor s takovými čísly  $\nu$  a  $o$ , pro něž je splněna rovnost (6.254).

Tímto způsobem lze sestavit posloupnost vektorů

$$|0\rangle, |1\rangle, |2\rangle, |3\rangle, \dots, |n\rangle, \dots \quad (6.257)$$

jež mohou tvořit bázi pro reprezentaci  $\{\hat{N}\}$ .

Součinitele  $c_\nu^{(o)}$  můžeme zvolit tak, aby vlastní vektory (6.254) byly ortonormální.

Operátory  $\hat{a}^+$  a  $\hat{a}^-$ , a z nich odvozený operátor  $\hat{N}$  nazýváme **Boseho operátory**, neboť s jejich pomocí popisujeme vlastnosti částic s **Boseho – Einsteinovou statistikou**.

Odvodili jsme, že

$$\hat{N}\hat{a}^-|\mathbf{v}\rangle = (\nu - 1)\hat{a}^-|\mathbf{v}\rangle. \quad (6.258)$$

Z definice operátoru  $\hat{N}$  navíc vyplývá:

$$\hat{N}|\mathbf{v} - \mathbf{1}\rangle = (\nu - 1)|\mathbf{v} - \mathbf{1}\rangle. \quad (6.259)$$

Srovnáme-li operátorové rovnice (6.258), (6.259), zjistíme, že

$$\hat{a}^-|\mathbf{v}\rangle = c_1|\mathbf{v} - \mathbf{1}\rangle, \quad (6.260)$$

kde  $c_1$  je konstanta.

Této rovnici přísluší duální rovnice

$$\langle \mathbf{v} | \hat{a}^+ = c_1^* \langle \mathbf{v} - \mathbf{1} |. \quad (6.261)$$

Vynásobíme-li rovnici (6.260) zleva rovnicí (6.261), dostaneme

$$\langle \mathbf{v} | \hat{a}^+ \hat{a}^- | \mathbf{v} \rangle = \langle \mathbf{v} | \hat{N} | \mathbf{v} \rangle = c_1^2 \langle \mathbf{v} - \mathbf{1} | \mathbf{v} - \mathbf{1} \rangle = c_1^2, \quad (6.262)$$

neboť vektory  $|\mathbf{v}\rangle$  jsou ortonormální.

Navíc

$$\langle \mathbf{v} | \hat{N} | \mathbf{v} \rangle = \nu \langle \mathbf{v} | \mathbf{v} \rangle = \nu. \quad (6.263)$$

Proto srovnáním s ( 6.262 ) vychází

$$c_1 = \sqrt{\nu}. \quad ( 6.264 )$$

Podobně máme

$$\hat{N}\hat{a}^+|\mathbf{v}\rangle = (\nu + 1)\hat{a}^+|\mathbf{v}\rangle, \quad ( 6.265 )$$

$$\hat{N}|\mathbf{v} + \mathbf{1}\rangle = (\nu + 1)|\mathbf{v} + \mathbf{1}\rangle. \quad ( 6.266 )$$

a tedy

$$\hat{a}^+|\mathbf{v}\rangle = c_2|\mathbf{v} + \mathbf{1}\rangle, \quad ( 6.267 )$$

$$\langle\mathbf{v}|\hat{a}^- = c_2^*\langle\mathbf{v} + \mathbf{1}|. \quad ( 6.268 )$$

Odsud vynásobením obou rovnic zleva

$$\langle\mathbf{v}|\hat{a}^-\hat{a}^+|\mathbf{v}\rangle = c_2^2\langle\mathbf{v} - \mathbf{1}|\mathbf{v} - \mathbf{1}\rangle = c_2^2. \quad ( 6.269 )$$

Protože

$$\hat{a}^-\hat{a}^+ = \hat{N} + 1, \quad ( 6.270 )$$

bude

$$\langle\mathbf{v}|\hat{a}^+\hat{a}^-|\mathbf{v}\rangle = \langle\mathbf{v}|\hat{N} + 1|\mathbf{v}\rangle = \langle\mathbf{v}|\hat{N}|\mathbf{v}\rangle + 1 = \nu\langle\mathbf{v}|\mathbf{v}\rangle + 1 = \nu + 1. \quad ( 6.271 )$$

Z toho po srovnání s ( 6.269 )

$$c_2 = \sqrt{\nu + 1}. \quad ( 6.272 )$$

Odtud nám vycházejí operátorové rovnice



$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{a}}^+ |\mathbf{n}\rangle &= (n+1)^{\frac{1}{2}} |\mathbf{n}+1\rangle, \\ \hat{\mathbf{a}}^- |\mathbf{n}\rangle &= n^{\frac{1}{2}} |\mathbf{n}-1\rangle.\end{aligned}\tag{6.273}$$

Z nich lze odvodit rekurentní vztah

$$|\mathbf{n}\rangle = \frac{(\hat{\mathbf{a}}^+)^n}{\sqrt{n!}} |\mathbf{0}\rangle.\tag{6.274}$$

O maticových členech operátoru  $\hat{\mathbf{N}}$  platí:

$$N_{n',n} = \langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{N}} | \mathbf{n} \rangle = n \langle \mathbf{n}' | \mathbf{n} \rangle = n \delta_{n',n},\tag{6.275}$$

kde  $\delta_{n',n}$  je Kroneckerova delta.

Operátor počtu částic je tedy reprezentován diagonální maticí

$$\hat{\mathbf{N}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 2 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.\tag{6.276}$$

Maticový člen operátoru  $\hat{\mathbf{a}}^-$  označme  $a_{n',n}$ .

Přitom

$$a_{n',n}^- = \langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{n} \rangle = n^{\frac{1}{2}} \langle \mathbf{n}' | \mathbf{n} \rangle = n^{\frac{1}{2}} \delta_{n',n+1}\tag{6.277}$$

z čehož

$$n' = n + 1.\tag{6.278}$$

Pak

$$\hat{\mathbf{a}}^- = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.279)$$

Podobně platí o maticových členech operátoru  $\hat{\mathbf{a}}^+$ :

$$a_{n',n}^+ = \langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{a}}^+ | \mathbf{n} \rangle = (n+1)^{\frac{1}{2}} \langle \mathbf{n}' | \mathbf{n} + \mathbf{1} \rangle = (n+1)^{\frac{1}{2}} \delta_{n',n+1}, \quad (6.280)$$

$$n' = n + 1.$$

V maticovém vyjádření

$$\hat{\mathbf{a}}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.281)$$

Odtud pro původní operátory vychází

$$\mathfrak{N} = \hat{\mathbf{N}} + \frac{1}{2}, \quad (6.282)$$

$$\hat{\mathbf{h}} = \hbar \omega \mathfrak{N} = \left( \hat{\mathbf{N}} + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega, \quad (6.283)$$

$$\hat{\mathbf{Q}} = \sqrt{2} (\hat{\mathbf{a}}^- + \hat{\mathbf{a}}^+), \quad (6.284)$$

$$\hat{\mathbf{P}} = i\sqrt{2} (\hat{\mathbf{a}}^+ - \hat{\mathbf{a}}^-), \quad (6.285)$$

$$\hat{\mathbf{q}} = \sqrt{2} \left( \frac{\hbar}{\omega} \right)^{\frac{1}{2}} (\hat{\mathbf{a}}^- + \hat{\mathbf{a}}^+), \quad (6.286)$$

$$\hat{\mathbf{p}} = i(\hbar\omega)^{\frac{1}{2}}(\hat{\mathbf{a}}^+ - \hat{\mathbf{a}}^-). \quad (6.287)$$

Odvodíme maticové členy těchto operátorů v reprezentaci  $\{\hat{\mathbf{N}}\}$ :

$$\langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{h}} | \mathbf{n} \rangle = \hbar\omega \langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{N}} + \frac{1}{2} | \mathbf{n} \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega \delta_{n',n},$$

$$\hat{\mathbf{h}} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}\hbar\omega & 0 & 0 & \dots \\ 0 & \frac{3}{2}\hbar\omega & 0 & \dots \\ 0 & 0 & \frac{5}{2}\hbar\omega & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.288)$$

$$\langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{q}} | \mathbf{n} \rangle = \left( \frac{2\hbar}{\omega} \right)^{\frac{1}{2}} (\langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{n} \rangle + \langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{a}}^+ | \mathbf{n} \rangle) =$$

$$= \left( \frac{2\hbar}{\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \left( n^{\frac{1}{2}} \delta_{n',n+1} + (n+1)^{\frac{1}{2}} \delta_{n',n-1} \right),$$

$$\hat{\mathbf{q}} = \left( \frac{2\hbar}{\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}. \quad (6.289)$$

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{n} \rangle &= i(2\hbar\omega)^{\frac{1}{2}} (\langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{a}}^+ | \mathbf{n} \rangle + \langle \mathbf{n}' | \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{n} \rangle) = \\
&= i(2\hbar\omega)^{\frac{1}{2}} \left[ (n+1)^{\frac{1}{2}} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n}+1} - n^{\frac{1}{2}} \delta_{\mathbf{n}', \mathbf{n}-1} \right], \\
\hat{\mathbf{q}} &= \left( \frac{2\hbar}{\omega} \right)^{\frac{1}{2}} \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{1} & 0 & 0 & \dots \\ \sqrt{1} & 0 & \sqrt{2} & 0 & \dots \\ 0 & \sqrt{2} & 0 & \sqrt{3} & \dots \\ 0 & 0 & \sqrt{3} & 0 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{6.290}$$

Maticemi ( 6.288 ), ( 6.289 ), ( 6.290 ), jsou popsány maticové reprezentace operátoru počtu částic  $\hat{\mathbf{N}}$ , anihilačního operátoru  $\hat{\mathbf{a}}^-$ , kreačního operátoru  $\hat{\mathbf{a}}^+$ , hamiltoniánu  $\hat{\mathbf{h}}$ , operátoru zobecněné souřadnice  $\hat{\mathbf{q}}$ , a zobecněného impulsu  $\hat{\mathbf{p}}$ .

Operátor  $\hat{\mathbf{N}}$  jsme nazvali operátorem počtu částic.

V našem případě jde o hypotetickou částici, která se nazývá foton.

Odvodili jsme operátorovou rovnici

$$\hat{\mathbf{h}}_m | \mathbf{v} \rangle = \hbar\omega_m \left( N + \frac{1}{2} \right) | \mathbf{v} \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar\omega_m | \mathbf{v} \rangle, \tag{6.291}$$

kde  $\mathbf{h}_m$  je Hamiltonův operátor, který se vztahuje k elektromagnetickému poli vidu  $m$ .

Veličina  $\hbar\omega_m$  určuje kvantum elektromagnetické energie, přičemž  $(n + \frac{1}{2})\hbar\omega_m$  je vlastní číslo Hamiltonova operátoru, a tedy celková energie elektromagnetického pole vidu  $m$ .

Protože  $\hbar\omega_m$  je energie jednoho fotonu, bude číslo  $(n + \frac{1}{2})$  udávat celkový počet fotonů elektromagnetického pole vidu  $m$ .

Stav určený ketvektorem

$$| \mathbf{v} \rangle \equiv | \mathbf{0} \rangle, \tag{6.292}$$

přísluší stavu vakua bez elektromagnetického pole.

Je nutno připomenout, že foton je částice podléhající Boseho – Einsteinově statistice a jeho rychlost je rychlostí šíření elektromagnetických vln, z čehož plyne, že jeho klidová hmotnost je nulová.

Z rovnice ( 6.260 ) a rovnosti ( 6.264 ) dále plyne, že operátor  $\hat{a}^-$  převádí kvantovou soustavu elektromagnetického pole ze stavu  $|\mathbf{v}\rangle$  do stavu  $|\mathbf{v}-\mathbf{1}\rangle$  a tedy snižuje počet fotonů o jeden.

Proto se nazývá anihilačním operátorem

Operátor  $\hat{a}^-$  naopak zvyšuje počet fotonů o jeden, a proto se nazývá kreačním operátorem.

Popíšeme-li elektromagnetické pole souborem oscilátorů s obsazenými  $N_i$ , pak pro jeho energii dostaneme

$$E = \sum_i \hbar \omega_i \left( N_i + \frac{1}{2} \right). \quad ( 6.293 )$$

Je zřejmé, že při všech  $N_i = 0$  bude mít vakuum našeho pole energii

$$E^0 = \sum_i \frac{\hbar \omega_i}{2} \rightarrow \infty. \quad ( 6.294 )$$

Existence této energie je čistě kvantový jev a je důsledkem netriviální nekomutativnosti operátorů.

Rozebereme jen případ operátorů zobecněné souřadnice  $\hat{\mathbf{q}}$  a impulsu  $\hat{\mathbf{p}}$

$$[\hat{\mathbf{p}}; \hat{\mathbf{q}}] = i\hbar. \quad ( 6.295 )$$

Platí, že

$$\begin{aligned} \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle &= \langle \mathbf{0} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{0} \rangle = 0, \\ \langle \hat{\mathbf{q}} \rangle &= \langle \mathbf{0} | \hat{\mathbf{q}} | \mathbf{0} \rangle = 0. \end{aligned} \quad ( 6.296 )$$

Střední hodnoty  $\hat{\mathbf{p}}$  i  $\hat{\mathbf{q}}$  jsou tedy nulové.

Střední kvadratické odchylky

$$\Delta q = \left[ \langle \hat{\mathbf{q}}^2 \rangle - \langle \hat{\mathbf{q}} \rangle^2 \right]^{\frac{1}{2}} = \left[ \frac{\hbar}{2\omega} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (6.297)$$

$$\Delta p = \left[ \langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle - \langle \hat{\mathbf{p}} \rangle^2 \right]^{\frac{1}{2}} = \left[ \frac{\hbar\omega}{2} \right]^{\frac{1}{2}}.$$

a tedy

$$\Delta q \Delta p = \frac{\hbar}{2}. \quad (6.298)$$

Střední hodnota kinetické energie vychází

$$\langle E \rangle = \frac{1}{2m} \langle \mathbf{0} | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{0} \rangle = \frac{\hbar\omega}{4m}. \quad (6.299)$$

I když se tedy  $\langle \hat{\mathbf{p}} \rangle$  a  $\langle \hat{\mathbf{q}} \rangle$  rovnají nule, jsou fluktuační vakuové  $\langle \hat{\mathbf{p}}^2 \rangle$  a  $\langle \hat{\mathbf{q}}^2 \rangle$  od nuly různé. Vakuum není v klidu a fluktuační nulové kinetické energie, úměrné  $(\Delta p)^2$ , jsou řádu  $\hbar\omega/2$  pro každý mód elektromagnetického pole.

Je zřejmé, že kdyby náš harmonický oscilátor byl tvořen oscilačním obvodem s kapacitou  $C$ , indukčností  $L$  a frekvencí  $\omega = \sqrt{LC}$ , pak bychom mohli za souřadnici  $q$  považovat náboj  $e$  a za impuls  $p$  proud  $\frac{de}{dt}$ .

Ihned je jasné, že ani náboj, ani proud nebudou mít nulové své fluktuační (obvod bude konat nenulovou práci), ačkoliv jejich střední hodnoty nulové budou.

Také nemůžeme znát současně jejich hodnoty s přesností lepší, než dovolují relace neurčitosti, což je velice důležité při kvantování náboje a proudu, např. v supravodivém Josephsonově přechodu.

I v klasické fyzice existují tzv. tepelné fluktuační, jejichž střední energie je  $k_B T$ .

Při absolutní termodynamické nule by však tyto fluktuační vymizely.



Brian David Josephson (1940)

Kvantová mechanika je však charakterizována právě tím, že fluktuace budou v soustavě existovat i při termodynamické nule – i ve vakuu za nepřítomnosti reálných částic.

I když se reálné fotony ve vakuu nevyskytují, ukázali jsme si, že existují nenulové elektromagnetické fluktuace vakua.

Jakési fotony zde tedy být musí.

Těmto fotonům, které existují jen po jistou dobu  $\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E}$ , a které nám

kvantují elektromagnetické fluktuace vakua, říkáme **virtuální fotony**. Jejich časová existence je na rozdíl od reálných fotonů, při jejichž interakci se energie zachovává, omezena relací neurčitosti.

O tomto vakuu hovoříme jako o **vakuu poruchovém**, protože tyto virtuální fotony vznikají ve vyšších řádech poruchové teorie.

Toto vakuum tedy může obsahovat libovolný počet virtuálních fotonů. Elektromagnetické vakuum je tedy plné virtuálních fotonů, s nimiž mohou částice interagovat.

Elektron může např. emitovat virtuální foton a opět jej v čase  $\Delta t$  absorbovat.

Díky těmto virtuálním procesům může elektron změnit hmotnost (tzv. **idea renormalizovatelnosti hmotnosti**).

Prostřednictvím této interakce s vakuem jsou reálné částice oblečeny do oblaku virtuálních fotonů.

Při  $\{\hat{\mathbf{Q}}\}$  reprezentaci vezmeme za základ vektorové soustavy vlastní vektory operátoru  $\hat{\mathbf{Q}}$ , který přísluší zobecněné souřadnici.

Pro operátor  $\hat{\mathbf{Q}}$  platí operátorová rovnice

$$\hat{Q}|\mathbf{q}\rangle = q|\mathbf{q}\rangle, \quad (6.300)$$

kde  $|\mathbf{q}\rangle$  je vlastní vektor operátoru  $\hat{Q}$ ,  $q$  jeho vlastní hodnota, tj. zobecněná souřadnice.

Ta, jak známo z kvantové mechaniky, tvoří pro neomezený prostor spojité spektrum.

O vektorové soustavě  $|\mathbf{q}\rangle$  přitom platí podmínka

$$\int |\mathbf{q}\rangle dq \langle \mathbf{q}| = 1 \quad (6.301)$$

a podmínka ortogonalita

$$\langle \mathbf{q}|\mathbf{q}'\rangle = \delta(q - q'), \quad (6.302)$$

kde  $\delta(q - q')$  je Diracova funkce.

V  $\{\hat{Q}\}$  reprezentaci bude operátor  $\hat{Q}$  reprezentován spojitou maticí o prvcích

$$\langle \mathbf{q}|\hat{Q}|\mathbf{q}'\rangle = \langle \mathbf{q}|\hat{q}|\mathbf{q}'\rangle = q\langle \mathbf{q}|\mathbf{q}'\rangle = q\delta(q - q'), \quad (6.303)$$

a operátor  $\hat{P}$  maticí

$$\langle \mathbf{q}|\hat{P}|\mathbf{q}'\rangle = -i\frac{\partial}{\partial q}\langle \mathbf{q}|\mathbf{q}'\rangle = -i\frac{\partial}{\partial q}\delta(q - q'), \quad (6.304)$$

tj. diagonální spojitou maticí o prvcích  $-i\frac{\partial}{\partial q}$ .

O Hamiltonově operátoru vidu  $m$  platí

$$\mathfrak{K}_m = \frac{1}{2}(\hat{P}_m^2 + \hat{Q}_m^2), \quad (6.305)$$

O maticových členech operátoru  $\mathfrak{K}_m$  platí v  $\{\hat{Q}\}$  reprezentaci:



$$\langle \mathbf{q} | \mathfrak{K}_m | \mathbf{q}' \rangle = \frac{1}{2} \left( q_m^2 - \frac{d^2}{dq_m^2} \right) \langle \mathbf{q} | \mathbf{q}' \rangle = \frac{1}{2} \left( q_m^2 - \frac{d^2}{dq_m^2} \right) \delta(q - q'), \quad (6.306)$$

neboť

$$\mathfrak{K}_m = \frac{1}{2} \left( q_m^2 - \frac{d^2}{dq_m^2} \right) \quad (6.307)$$

Uřídíme nyní složky vektoru  $\mathfrak{K}_m | \Psi \rangle$  v  $\{ \hat{\mathbf{Q}} \}$  reprezentaci. O těchto složkách obecně platí (srov. ( 6.301 ), ( 6.302 )):

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q} | \mathfrak{K}_m | \Psi \rangle &= \int_{q'} \langle \mathbf{q} | \mathfrak{K}_m | \mathbf{q}' \rangle dq' \langle \mathbf{q}' | \Psi \rangle = \\ &= \int_{q'} \mathfrak{K}_m \psi(q') \delta(q - q') dq' = \mathfrak{K}_m \psi(q). \end{aligned} \quad (6.308)$$

Přitom funkci  $\psi(q)$ , o níž platí

$$\psi(q) = \langle \mathbf{q} | \Psi \rangle \quad (6.309)$$

nazýváme vlnovou funkcí.

Vztahy ( 6.303 ), ( 6.304 ), ( 6.306 ) nám určují maticové členy operátorů  $\hat{\mathbf{Q}}$ ,  $\hat{\mathbf{P}}$ ,  $\mathfrak{K}_m$  v  $\{ \hat{\mathbf{Q}} \}$  reprezentaci.

Maticové členy přísluší spojitém maticím.

Vztahem ( 6.308 ) je definována vlnová funkce.

Při odvozování maticových členů uvedených operátorů jsme předpokládali spojité spektrum vlastních čísel operátoru zobecněné souřadnice.

Z ( 6.245 ) a ( 6.247 ) lze snadno odvodit operátorovou rovnici pro Hamiltonův operátor elektromagnetického pole vidu  $m$  ve tvaru:

$$\mathfrak{K}_m | \Psi_n \rangle = \left( n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega | \Psi_n \rangle \equiv \varepsilon_n | \Psi_n \rangle, \quad (6.310)$$

kde  $\varepsilon_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega$  a kde jsme označili ketvektory  $|\mathbf{v}\rangle$  symbolem  $|\Psi_n\rangle$ .

Levou i pravou stranu rovnice ( 6.310 ) vyjádříme v  $\{\hat{\mathbf{Q}}\}$  reprezentaci:

$$\langle \mathbf{q} | \mathfrak{K}_m | \Psi_n \rangle = \varepsilon_n \langle \mathbf{q} | \Psi_n \rangle . \quad ( 6.311 )$$

Uvážíme-li ( 6.308 ), dostaneme

$$\mathfrak{K}_m \psi_n(q) = \varepsilon_n \psi_n(q) , \quad ( 6.312 )$$

Vztahem ( 6.312 ) je určena Schrödingerova rovnice popisující kvantové vlastnosti soustavy elektromagnetického pole vidu  $m$ , přičemž  $\varepsilon_n$  je vlastní energie kvantové podsoustavy elektromagnetického pole. Dosadíme-li v ( 6.312 ) za  $\mathfrak{K}_m$  příslušný výraz ( 6.306 ), dostaneme Hermitovu diferenciální rovnici

$$-\frac{1}{2} \left( -\frac{d^2}{dq^2} + q^2 \right) \psi_n(q) = \varepsilon_n \psi_n(q), \quad ( 6.313 )$$

jejíž řešením určíme vlnovou funkci  $\psi_n(q)$ .

Vlnovou funkci  $\psi_n(q)$  je však možno určit také tak, že nejprve určíme funkci  $\psi_0(q)$ , příslušející stavu  $|\mathbf{0}\rangle$  a z ní použitím rekurentních vztahů ( 6.274 ) odvodíme obecnou vlnovou funkci  $\psi_n(q)$ .

Pro  $n = 0$ , tedy pro  $|\mathbf{0}\rangle$  ketvektor platí

$$\psi_0(q) = \langle \Psi | \mathbf{0} \rangle . \quad ( 6.314 )$$

Při  $\{\hat{\mathbf{Q}}\}$  reprezentaci, s uvážením ( 6.273 ),

$$\langle \mathbf{q} | \hat{\mathbf{a}}^- | \mathbf{0} \rangle = a^- \langle \mathbf{q} | \mathbf{0} \rangle = a^- \psi_0(q) = 0, \quad ( 6.315 )$$

Po dosazení za operátor  $\hat{\mathbf{a}}^-$ , s uvážením ( 6.300 )

$$\hat{\mathbf{a}}^- = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{Q}} + i\hat{\mathbf{P}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + \frac{d}{dq}\right), \quad (6.316)$$

a tedy

$$\left(q + \frac{d}{dq}\right)\psi_0(q) = 0. \quad (6.317)$$

To je diferenciální rovnice pro  $\psi_0(q)$ .  
Její řešení je funkce

$$\psi_0 = C \cdot \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right). \quad (6.318)$$

Integrační konstantu určíme z podmínky normování

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi_0^2(q) dq = C^2 \int_{-\infty}^{\infty} \exp(-q^2) dq = C^2 \pi^{\frac{1}{2}} = 1, \quad (6.319)$$

odkud

$$C = \pi^{-\frac{1}{4}} \quad (6.320)$$

a

$$\psi_0 = \pi^{-\frac{1}{4}} \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right). \quad (6.321)$$

Známe-li funkci  $\psi_0$ , určíme  $\psi_n$  z rekurentního vztahu (6.274).

V  $\{\hat{\mathbf{Q}}\}$  reprezentaci

$$\langle \mathbf{q} | \mathbf{n} \rangle = \psi_n = (n!)^{-\frac{1}{2}} (\hat{\mathbf{a}}^+)^n | \mathbf{n} \rangle. \quad (6.322)$$

přičemž

$$\hat{\mathbf{a}}^+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\mathbf{Q}} - i\hat{\mathbf{P}}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{d}{dq}\right). \quad (6.323)$$

Pak

$$\psi_n(q) = (n!)^{-\frac{1}{2}} 2^{-\frac{n}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} \left(q - \frac{d}{dq}\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right), \quad (6.324)$$

neboli

$$\psi_n(q) = (n!)^{-\frac{1}{2}} 2^{-\frac{n}{2}} \pi^{-\frac{1}{4}} \left[ (-1)^n \exp\left(\frac{1}{2}q^2\right) \frac{d^n}{dq^n} \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right) \right] \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right). \quad (6.325)$$

Hermitovy polynomy jsou definovány vztahem

$$H_n(z) = (-1)^n \exp(z^2) \frac{d^n}{dz^n} \exp(-z^2). \quad (6.326)$$

Srovnáme-li ( 6.326 ) s ( 6.325 ), zjistíme, že

$$\psi_n(q) = \left(\sqrt{\pi} \cdot 2^n \cdot n!\right)^{-\frac{1}{2}} \exp\left(-\frac{1}{2}q^2\right) H_n\left(\frac{q}{\sqrt{2}}\right). \quad (6.327)$$

Vztahem ( 6.327 ) je určena vlnová funkce kvantové soustavy elektromagnetického pole jednoho vidu.

Přísluší-li vidu  $m$  ketvektor stavu  $|\mathbf{n}_m\rangle$ , pak mnohovidové soustavě, vzniklé superpozicí jednotlivých vidů, přísluší ketvektor stavu  $|\mathbf{n}\rangle$ , který dostaneme tenzorovým součinem základních ketvektorů

$$|\mathbf{n}\rangle = |\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_m, \dots\rangle = |\mathbf{n}_1\rangle |\mathbf{n}_2\rangle \dots |\mathbf{n}_m\rangle \dots \quad (6.328)$$

Pak

$$\begin{aligned}
\aleph|\mathbf{n}\rangle &= \sum_m \aleph_m |\mathbf{n}_1\rangle |\mathbf{n}_2\rangle \dots |\mathbf{n}_m\rangle \dots = \\
&= \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)|\mathbf{n}\rangle + \left(n_2 + \frac{1}{2}\right)|\mathbf{n}\rangle + \dots + \left(n_m + \frac{1}{2}\right)|\mathbf{n}\rangle + \dots = \quad (6.329) \\
&= \left(n_1 + n_2 + \dots + n_p + \frac{1}{2}p\right),
\end{aligned}$$

je-li celkový počet vidů elektromagnetického pole  $p$ .

Označme

$$n = n_1 + n_2 + \dots + n_p. \quad (6.330)$$

Z ( 6.330 ) je patrné, že jistému vlastnímu číslu  $n$  Hamiltonova operátoru  $\aleph$  přísluší více ketvektorů  $|\mathbf{n}\rangle$ , neboť číslo  $n$  dostaneme různou kombinací čísel  $n_1, n_2, \dots$ .

Jde tedy o degenerovanou kvantovou soustavu.

Lze dokázat, že stupeň degenerace této soustavy je

$$d = \frac{(n + p + 1)!}{n!(p - 1)!}. \quad (6.331)$$

Pro základní ketvektor platí:

$$|\mathbf{0}\rangle = |\mathbf{0}, \mathbf{0}, \dots\rangle. \quad (6.332)$$

Dokázali jsme, že

$$\hat{\mathbf{a}}_1^- |\mathbf{0}\rangle = 0; \quad \hat{\mathbf{a}}_2^- |\mathbf{0}\rangle = 0; \dots; \hat{\mathbf{a}}_p^- |\mathbf{0}\rangle = 0. \quad (6.333)$$

Proto platí obecný rekurentní vztah

$$|\mathbf{n}\rangle = |\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_p\rangle = (n_1! n_2! \dots n_p!)^{-\frac{1}{2}} \left[ (\hat{\mathbf{a}}_1^+)^{n_1} \dots (\hat{\mathbf{a}}_1^+)^{n_p} \right] |\mathbf{0}\rangle. \quad (6.334)$$

Ze vztahu ( 6.329 ) vyplývá, že

$$\hat{N} = \sum_p \hat{N}_p, \quad ( 6.335 )$$

$$\mathfrak{K} = \left( \hat{N} + \frac{p}{2} \right), \quad ( 6.336 )$$

kde  $\hat{N}$  je operátor počtu fotonů vícevidové kvantové soustavy elektromagnetického pole,  $\hat{N}_p$  operátor počtu fotonů kvantové soustavy elektromagnetického pole vidu  $p$ .

Nahradíme-li operátor zobecněného impulsu  $\hat{\mathbf{p}}_\nu$  elektromagnetického pole vidu  $\nu$  příslušným kreačním a anihilačním operátorem, vycházejíc ze vztahů ( 6.235 ), ( 6.236 ), ( 6.241 ), dostaneme pro operátor intenzity elektrického pole vidu  $\nu$  (konstantu  $\mu$  jsme zahrnuli do  $\mathbf{T}_\nu(\mathbf{r})$ ):

$$\hat{\mathbf{E}}_\nu = i \left( \frac{1}{2} \hbar \omega_\nu \right)^{\frac{1}{2}} \left( \hat{\mathbf{a}}_\nu^- \mathbf{T}_\nu(\mathbf{r}) - \hat{\mathbf{a}}_\nu^+ \mathbf{T}_\nu^*(\mathbf{r}) \right). \quad ( 6.337 )$$

Přitom  $\hat{\mathbf{E}}_\nu$  je operátor intenzity elektrického pole záření vidu  $\nu$  ve Schrödingerově reprezentaci.

Z ( 6.337 ) vyplývá, že vlastní vektorové stavy operátoru intenzity elektrického pole záření budou totožné s vlastními vektorovými stavy anihilačního a kreačního operátoru.

V Heisenbergově reprezentaci bude mít operátor  $\hat{\mathbf{E}}_\nu$  tvar

$$\hat{\mathbf{E}}_\nu = i \left( \frac{1}{2} \hbar \omega_\nu \right)^{\frac{1}{2}} \left( \hat{\mathbf{a}}_\nu^-(t) \mathbf{T}_\nu(\mathbf{r}) e^{-i\omega_\nu t} - \hat{\mathbf{a}}_\nu^+(t) \mathbf{T}_\nu^*(\mathbf{r}) e^{i\omega_\nu t} \right). \quad ( 6.338 )$$

V případě rovinné elektromagnetické vlny bude

$$\mathbf{T}_\nu = \mu e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r})}, \quad ( 6.339 )$$

kde  $\mathbf{k}$  je vlnový vektor.

Pak po dosazení do ( 6.338 ) máme

$$\hat{\mathbf{E}}_\nu = i\mu \left( \frac{1}{2} \hbar \omega_\nu \right)^{\frac{1}{2}} \left( \hat{\mathbf{a}}_\nu^-(t) \mathbf{T}_\nu(\mathbf{r}) e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r})} e^{-i\omega_\nu t} - \hat{\mathbf{a}}_\nu^+(t) \mathbf{T}_\nu^*(\mathbf{r}) e^{-i(\mathbf{k}, \mathbf{r})} e^{i\omega_\nu t} \right). \quad ( 6.340 )$$

První člen na pravé straně přísluší přímé monochromatické elektromagnetické vlně, druhý člen zpětné vlně.

Označíme-li intenzitu elektrického pole přímé vlny  $\hat{\mathbf{E}}_\nu^+(\mathbf{r}, t)$ , pak

$$\hat{\mathbf{E}}_\nu^+(\mathbf{r}, t) = \hat{\mathbf{E}}_\nu = i\mu \left( \frac{1}{2} \hbar \omega_\nu \right)^{\frac{1}{2}} \left( \hat{\mathbf{a}}_\nu^-(t) e^{i(\mathbf{k}, \mathbf{r})} e^{-i\omega_\nu t} \right). \quad ( 6.341 )$$

Z předešlého plyne, že stavy operátoru  $\hat{\mathbf{E}}_\nu^+(\mathbf{r}, t)$  budou popsány stejnými vektory, jako stavy anihilačního operátoru  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^-$ .

Platí-li operátorová rovnice

$$\hat{\mathbf{a}}_\nu^- | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = \alpha_\nu | \mathbf{a}_\nu^- \rangle, \quad ( 6.342 )$$

kde  $| \mathbf{a}_\nu^- \rangle$  je stavový vektor operátoru  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^-$ ,  $\alpha_\nu$  vlastní hodnota operátoru  $\hat{\mathbf{a}}_\nu^-$ , pak platí operátorová rovnice

$$\hat{\mathbf{E}}_\nu^+ | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = \varepsilon_\nu | \mathbf{a}_\nu^- \rangle, \quad ( 6.343 )$$

kde  $\varepsilon_\nu$  je vlastní hodnota operátoru intenzity elektrického pole vidu  $\nu$  přímé monochromatické rovinné vlny.

Pro něj srovnáním s ( 6.341 ) platí:

$$\varepsilon_\nu = i\mu \left( \frac{1}{2} \hbar \omega_\nu \right)^{\frac{1}{2}} \exp[ i(\mathbf{k}, \mathbf{r}) \exp(-i\omega_\nu t) ]. \quad ( 6.344 )$$

Vyjádříme vlastní stavy anihilačního operátoru pomocí vlastních stavů operátoru počtu fotonů, které jsme označili  $| \mathbf{n} \rangle$ .

Vynásobíme –li operátorovou rovnicí ( 6.332 ) zleva bravektorem  $\langle \mathbf{n}_\nu |$ , tj. vlastním bravektorem operátoru počtu fotonů vidu  $\nu$ , pak

$$\langle \mathbf{n}_\nu | \hat{\mathbf{a}}_\nu^- | \mathbf{a}_\nu \rangle = \alpha_\nu \langle \mathbf{n}_\nu | \mathbf{a}_\nu^- \rangle. \quad ( 6.345 )$$

Z rekurentního vztahu ( 6.274 ) lze odvodit pro bravektor  $\langle \mathbf{n}_\nu |$  rovnost

$$\langle \mathbf{n}_\nu | = (n!)^{-\frac{1}{2}} \langle \mathbf{0} | (\hat{\mathbf{a}}_\nu^+)^n. \quad ( 6.346 )$$

Pak

$$\langle \mathbf{n}_\nu | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = (n!)^{-\frac{1}{2}} \langle \mathbf{0} | (\hat{\mathbf{a}}_\nu^+)^n | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = (n!)^{-\frac{1}{2}} \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_\nu^- \rangle (\alpha_\nu^*)^n. \quad ( 6.347 )$$

Rozložme ketvektor stavu  $|\mathbf{a}_\nu^- \rangle$  anihilačního operátoru do vlastních ketvektorů  $|\mathbf{n}_\nu \rangle$  operátoru počtu částic:

$$|\mathbf{a}_\nu^- \rangle = \sum_n |\mathbf{n}_\nu \rangle \langle \mathbf{n}_\nu | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = \sum_n |\mathbf{n}_\nu \rangle \frac{(\alpha_\nu^*)^n}{(n!)^{\frac{1}{2}}} \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_\nu^- \rangle \sum_n \frac{(\alpha_\nu^*)^n}{(n!)^{\frac{1}{2}}} |\mathbf{n}_\nu \rangle. \quad ( 6.348 )$$

Odtud, uvážíme-li ortogonalita vektorů  $|\mathbf{n}_\nu \rangle$ , platí pro normu

$$\langle \mathbf{a}_\nu^- | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_\nu^- \rangle^2 \sum_n \frac{|\alpha_\nu|^2n}{(n!)} = \langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_\nu^- \rangle^2 \exp |\alpha_\nu|^2. \quad ( 6.349 )$$

Provedme normování tak, aby

$$\langle \mathbf{a}_\nu^- | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = 1. \quad ( 6.350 )$$

Pak

$$\langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_\nu^- \rangle^2 \exp |\alpha_\nu|^2 = 1, \quad ( 6.351 )$$



z čehož

$$\langle \mathbf{0} | \mathbf{a}_\nu^- \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha_\nu|^2\right). \quad (6.352)$$

Po dosazení do ( 6.348 ):

$$|\mathbf{a}_\nu^- \rangle = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha_\nu|^2\right) \sum_n \frac{\alpha_\nu^{n_\nu}}{(n_\nu!)^{\frac{1}{2}}} |\mathbf{n}_\nu \rangle. \quad (6.353)$$

Podobně

$$\langle \mathbf{a}_\nu^- | = \exp\left(-\frac{1}{2}|\alpha_\nu|^2\right) \sum_n \frac{(\alpha_\nu^*)^{n_\nu}}{(n_\nu!)^{\frac{1}{2}}} \langle \mathbf{n}_\nu |. \quad (6.354)$$

Vztahy ( 6.353 ) a ( 6.354 ) jsou určeny ketvektor a bravektor stavu anihilačního operátoru, vyjádřené pomocí posloupnosti ketvektorů a bravektorů stavu operátoru počtu částic vidu  $\nu$ .

Protože tyto vektory popisují stav intenzity elektrického pole přímé monochromatické vlny s přesně definovanou frekvencí  $\omega_\nu$ , popisují tyto vektory koherentní stavy.

Vyjdeme-li z operátorové rovnice ( 6.342 ), dostaneme po dosazení za kreační a anihilační operátory příslušné vztahy pomocí operátoru zobecněné souřadnice a impulsu, vycházejíce z předešlých vztahů, operátorovou rovnicí

$$(2\hbar\omega_\nu)^{-\frac{1}{2}} (\omega_\nu \hat{\mathbf{q}}_\nu + i\hat{\mathbf{p}}_\nu) |\mathbf{a}_\nu^- \rangle = \alpha_\nu |\mathbf{a}_\nu^- \rangle. \quad (6.355)$$

Předpokládejme spojité spektrum vidů elektromagnetického pole (např. elektromagnetické pole v otevřeném prostoru).

Pak

$$(2\hbar\omega_\nu)^{-\frac{1}{2}} (\omega \hat{\mathbf{q}} + i\hat{\mathbf{p}}) |\mathbf{a}^- \rangle = \alpha |\mathbf{a}^- \rangle, \quad (6.356)$$

kde příslušné veličiny v předešlé operátorové rovnici jsou spojitými funkcemi frekvence.

Vynásobme rovnici ( 6.357 ) bravektorem  $\langle \mathbf{q}' |$ .

Pak

$$(2\hbar\omega_v)^{-\frac{1}{2}} \left( \omega \langle \mathbf{q}' | \hat{\mathbf{q}} | \mathbf{a}^- \rangle + i \langle \mathbf{q}' | \hat{\mathbf{p}} | \mathbf{a}^- \rangle \right) = \alpha \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle. \quad ( 6.357 )$$

Uvědomme si přitom, že s uvážením definice zobecněného impulsu platí:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{q}' | \hat{\mathbf{p}} &= -i\hbar \frac{d}{dq'} \langle \mathbf{q}' |, \\ \langle \mathbf{q}' | \hat{\mathbf{q}} &= q' \langle \mathbf{q}' |, \\ \langle \mathbf{q}' | \hat{\mathbf{q}} | \mathbf{a}^- \rangle &= q' \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle. \end{aligned} \quad ( 6.358 )$$

Odtud

$$\frac{\omega}{\sqrt{2\hbar\omega}} q' \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle + \frac{\hbar}{\sqrt{2\hbar\omega}} \frac{d}{dq'} \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle = \alpha \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle. \quad ( 6.359 )$$

Po úpravě

$$\frac{d}{dq'} \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle = -2 \left( \frac{\omega}{2\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} \left[ \left( \frac{\omega}{2\hbar} \right)^{\frac{1}{2}} q' - \alpha \right] \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle. \quad ( 6.360 )$$

Vlnovou funkci jsme definovali skalárním součinem vlastního operátoru zobecněné souřadnice s vektorem operátoru příslušné dynamické veličiny, v našem případě anihilačního operátoru.

Označme tuto vlnovou funkci  $\varphi$ .

Z ( 6.360 ) pak dostaneme

$$\frac{d\varphi}{dq'} = -\frac{\omega}{\hbar}q' + 2\left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\varphi, \quad (6.361)$$

kde  $\varphi = \langle \mathbf{q}' | \mathbf{a}^- \rangle$ .

Diferenciální rovnice ( 6.361 ) je upravená operátorová rovnice pro výpočet vlnové funkce příslušející anihilačnímu operátoru, tedy vlnové funkce koherentního stavu.

Její řešení je

$$\varphi = C \exp \left[ -\frac{\omega}{2\hbar}(q')^2 + 2\left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\alpha q' \right]. \quad (6.362)$$

integrační konstantu  $C$  určíme z podmínky normování vlnové funkce, tedy z podmínky

$$\int_0^{\infty} \varphi \varphi^* dq' = C^2 \int_0^{\infty} \exp \left\{ -2 \left[ \frac{\omega}{2\hbar}(q')^2 + 2\left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}}\alpha q' \right] \right\} dq' = 1. \quad (6.363)$$

Po integraci a po dosazení za  $C$  do ( 6.362 ) dostaneme

$$\varphi = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp \left\{ - \left[ \left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} q' - \alpha \right]^2 \right\}. \quad (6.364)$$

Vztahem ( 6.364 ) je určena vlnová funkce koherentního stavu o frekvenci  $\omega$  odvozená za předpokladu spojitého frekvenčního spektra.

Vlastní hodnotu  $\alpha$  může přitom nabývat libovolných hodnot.

Ze vztahu ( 6.364 ) vyplývá, že pravděpodobnost stavu, při němž je amplituda pole totožná se zobecněnou souřadnicí, je rovna  $q'$ , přičemž

$$\varphi\varphi^* = \left(\frac{\omega}{\pi\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \exp\left\{-2\left[\left(\frac{\omega}{2\hbar}\right)^{\frac{1}{2}} q' - \alpha\right]^2\right\} \quad (6.365)$$

má gaussovský průběh.

Již dříve jsme naznačili souvislost mezi rovinnou monochromatickou vlnou s vlnovým vektorem  $\mathbf{k}$  a fotony s impulsem

$$\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k} \quad (6.366)$$

a energií

$$E = cp = \hbar\omega. \quad (6.367)$$

dvěma nezávislým polarizačním stavům elektromagnetické vlny musejí odpovídat dva nezávislé polarizační stavy fotonu (spin fotonu je sice roven jedné, ale díky nulovosti jeho klidové hmoty může být orientován jen ve nebo proti směru jeho impulsu).

Vektorový potenciál volného elektromagnetického pole zapíšeme jako superpozici monochromatických polarizovaných vln

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}, t) = \sum_{\lambda=1}^2 \int d^3\mathbf{k} \mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}(\mathbf{q}, t), \quad (6.368)$$

kde

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_{\mathbf{k},\lambda}(\mathbf{q}, t) &= \mathbf{e}(\mathbf{k}, \lambda) \left\{ A(\mathbf{k}, \lambda) \exp[i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - \omega t)] + \right. \\ &= A^*(\mathbf{k}, \lambda) \exp[-i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} - \omega t)] \left. \right\}, \end{aligned} \quad (6.369)$$

kde pro každý vektor  $\mathbf{k}$  jsme dva vzájemně ortogonální vektory polarizace označili  $\mathbf{e}(\mathbf{k}, \lambda)$ .

Platí tedy

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \lambda) \cdot \mathbf{e}(\mathbf{k}, \lambda') = \delta_{\lambda\lambda'}, \quad (6.370)$$

$$\mathbf{e}(\mathbf{k}, \lambda) \cdot \mathbf{k} = 0. \quad (6.371)$$

Pro další postup je formálně výhodné uvažovat pole uzavřené v kvádru o hranách  $a_i$ , jehož objem označíme  $V$ .

Později přejdeme k limitě  $V \rightarrow \infty$ .

Komponenty vlnových vektorů monochromatických vln ve zmíněném kvádru mohou nabývat pouze hodnot

$$k_i^{(n)} = \frac{2\pi}{a_i} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.372)$$

a máme

$$\mathbf{A}(\mathbf{q}, t) = \sum_{\lambda=1}^2 \sum \mathbf{A}_{\mathbf{k}, \lambda}(\mathbf{q}, t), \quad (6.373)$$

kde suma probíhá přes všechny možné vlnové vektory vyhovující podmínce (6.372).

Snadno nalezneme, že celková energie elektromagnetického pole

$$E = \frac{\epsilon_0}{2} \int_V [\mathbf{E}^2(\mathbf{q}, t) + c^2 \mathbf{B}^2(\mathbf{q}, t)] d^3 \mathbf{q} \quad (6.374)$$

popsaného vektorovým potenciálem (6.373) je rovna

$$E = 2\epsilon_0 V c^2 \sum_{\lambda=1}^2 \sum \mathbf{k}^2 A^*(\mathbf{k}, \lambda) A(\mathbf{k}, \lambda). \quad (6.375)$$

Pokud lze volné pole identifikovat se systémem vzájemně neinteragujících fotonů, můžeme hamiltonián zapsat ve tvaru

$$\hat{\mathbf{H}} = c \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\mathbf{p}} p \hat{\mathbf{N}}(\mathbf{p}, \lambda). \quad (6.376)$$

Lze rovněž zavést kreační a anihilační operátory fotonu s impulsem  $\mathbf{p}$  a polarizací  $\lambda$  tak, že

$$\hat{\mathbf{N}}(\mathbf{p}, \lambda) = \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}, \lambda) \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda). \quad (6.377)$$

Přitom platí komutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda), \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}', \lambda')] &= [\hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}, \lambda), \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}', \lambda')] = 0, \\ [\hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda), \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}', \lambda')] &= \delta_{\mathbf{p}\mathbf{p}'} \delta_{\lambda\lambda'}. \end{aligned} \quad (6.378)$$

Porovnáme-li nyní hamiltonián ( 6.376 ) zapsaný pomocí kreačních a anihilačních operátorů:

$$\hat{\mathbf{H}} = c \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\mathbf{p}} p \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}, \lambda) \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda) \quad (6.379)$$

s klasickým výrazem ( 6.375 ), vidíme, že  $E \rightarrow \hat{\mathbf{H}}$ , když

$$(2\varepsilon_0 V)^{\frac{1}{2}} ck\mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda) \rightarrow (cp)^{\frac{1}{2}} \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda), \quad (6.380)$$

což s využitím vztahu ( 6.366 ) můžeme vyjádřit jako

$$\mathbf{A}(\mathbf{k}, \lambda) \rightarrow \frac{\hbar}{(2\varepsilon_0 V p)^{\frac{1}{2}}} \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda). \quad (6.381)$$

Tuto substituci můžeme považovat za formuli vyjadřující princip korespondence mezi klasickou a kvantovou teorií elektromagnetického pole.

Provedeme-li ji ve formulích ( 6.369 ), ( 6.373 ), obdržíme operátor

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}, t) = \frac{\hbar}{(2\epsilon_0 c V)^{\frac{1}{2}}} \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{e}(\mathbf{p}, \lambda)}{p^{\frac{1}{2}}} \left\{ \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - Et)\right] + \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}, \lambda) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q} - Et)\right] \right\}. \quad (6.382)$$

Snadno se přesvědčíme, že

$$\frac{\partial \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{1}{i\hbar} [\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}, t), \hat{\mathbf{H}}] \quad (6.383)$$

a

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}, t) = 0, \quad (6.384)$$

což nás utvrzuje v přesvědčení o oprávněnosti považovat  $\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}, t)$  za operátor popisující v Heisenbergově reprezentaci elektromagnetické pole.

Odpovídající operátor v reprezentaci Schrödingerově je dán formulí ( 6.382 ) pro nějaké pevně zvolené  $t = t_0$ .

Na volbě okamžiku  $t_0$  pochopitelně žádná fyzikální předpověď nezávisí.

Pro zjednodušení formulí vezmeme v dalším  $t_0 = 0$ .

Tedy ve Schrödingerově reprezentaci je vektorovému potenciálu přiřazen operátor

$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}, t) = \frac{\hbar}{(2\epsilon_0 c V)^{\frac{1}{2}}} \sum_{\lambda=1}^2 \sum_{\mathbf{p}} \frac{\mathbf{e}(\mathbf{p}, \lambda)}{p^{\frac{1}{2}}} \left\{ \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})\right] + \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}, \lambda) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})\right] \right\}. \quad (6.385)$$

Připomeňme, že v této formulí je

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) = \sum_{\mathbf{p}} f(p_1, p_2, p_3) = \sum_{i,j,k=-\infty}^{\infty} f\left(p_1^{(i)}, p_2^{(j)}, p_3^{(k)}\right), \quad (6.386)$$

kde (viz ( 6.372 ))

$$p_i^{(n)} = \frac{2\pi\hbar}{a_i} n, \quad n = 1, 2, 3, \dots \quad (6.387)$$

Označíme-li interval mezi sousedními možnými hodnotami  $i$ -té komponenty impulsu jako

$$\Delta p_i = \frac{2\pi\hbar}{a_i}, \quad (6.388)$$

můžeme formuli ( 6.386 ) zapsat jako

$$\sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} \sum_{i,j,k=-\infty}^{\infty} f\left(p_1^{(i)}, p_2^{(j)}, p_3^{(k)}\right) \Delta p_1 \Delta p_2 \Delta p_3. \quad (6.389)$$

Odtud vidíme, že v limitě  $V \rightarrow \infty$  platí

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{p}} f(\mathbf{p}) \rightarrow \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int f(\mathbf{p}) d^3\mathbf{p}, \quad (6.390)$$

kde suma probíhá přes celý třírozměrný impulsový prostor. Označíme-li

$$\Delta p \equiv \frac{(2\pi\hbar)^3}{V}, \quad (6.391)$$

potom v limitě  $V \rightarrow \infty$  přejde operátor ( 6.304 ) v



$$\hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}) = \frac{1}{4\pi} \frac{1}{(\pi\epsilon_0 c\hbar)^{\frac{1}{2}}} \sum_{\lambda=1}^2 \int \frac{d^3\mathbf{p}}{p^{\frac{1}{2}}} \mathbf{e}(\mathbf{p}, \lambda) \left[ \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \lambda) \exp\left[\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})\right] + \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \lambda) \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p} \cdot \mathbf{q})\right] \right], \quad (6.392)$$

kde

$$\hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \lambda) \equiv \lim_{V \rightarrow \infty} \frac{\hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}, \lambda)}{(\Delta p)^{\frac{1}{2}}}. \quad (6.393)$$

Snadno se přesvědčíme, že platí

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \lambda), \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}', \lambda')] &= [\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \lambda), \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}', \lambda')] = 0, \\ [\hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \lambda), \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}', \lambda')] &= \delta_{\lambda\lambda'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \end{aligned} \quad (6.394)$$

Princip korespondence nám říká, že operátor popisující ve Schrödingerově reprezentaci interakci kvantově mechanické soustavy s elektromagnetickým polem obdržíme z operátoru popisujícího interakci této soustavy s vnějším polem prostou záměnou

$$\mathbf{A}(\hat{\mathbf{Q}}^{(j)}, t) \rightarrow \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{Q}}^{(j)}). \quad (6.395)$$

Hledaným interakčním hamiltoniánem je pak časově nezávislý operátor

$$\hat{\mathbf{H}}_I = - \sum_{j=1}^Z \frac{e^{(j)}}{M^{(j)}} \left[ \hat{\mathbf{A}}(\hat{\mathbf{Q}}^{(j)}) \hat{\mathbf{P}}^{(j)} \right] \quad (6.396)$$

a celkový hamiltonián uvažovaného systému je roven

$$\hat{\mathbf{H}} = \hat{\mathbf{H}}_0 + \hat{\mathbf{H}}_I, \quad (6.397)$$

kde

$$\hat{\mathbf{H}}_0 = \hat{\mathbf{H}}_P + \hat{\mathbf{H}}_F. \quad (6.398)$$

Přítom  $\hat{\mathbf{H}}_P$  je hamiltonián uvažované kvantové soustavy při vypnuté interakci s elektromagnetickým polem a  $\hat{\mathbf{H}}_F$  je hamiltonián volného elektromagnetického pole (6.379), který v limitě  $V \rightarrow \infty$  můžeme zapsat jako

$$\hat{\mathbf{H}}_F = \sum_{\lambda=1}^2 \int c \cdot q \cdot \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \lambda) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \lambda) d^3\mathbf{p}. \quad (6.399)$$

Hilbertův prostor uvažovaného systému lze vyjádřit jako

$$H = H_P \otimes H_F, \quad (6.400)$$

kde  $H_P$  je Hilbertovým prostorem kvantově mechanické soustavy a Hilbertův prostor elektromagnetického pole jsme označili symbolem  $H_F$ . O všech operátorech vystupujících v poruše (6.396) víme, jak v prostoru (6.400) působí.

Můžeme tedy bez potíží provádět poruchové výpočty.

Pro větší názornost budeme zpočátku pracovat s operátory pole ve tvaru (6.385) a teprve ve výsledných formulích přejdeme k limitě  $V \rightarrow \infty$ .

V prostoru  $H_F$  přitom užijeme reprezentaci obsazovacích čísel, v níž

$$|n_1, n_2, \dots, n_j, \dots; n\rangle \quad (6.401)$$

je vlastním vektorem operátoru  $\hat{\mathbf{H}}_F$  popisujícím  $n$  fotonů, z nichž  $n_1$  má impuls  $\mathbf{q}_1$  a polarizaci  $\lambda_1$ ,  $n_2$  fotonů impuls  $\mathbf{q}_2$  a polarizaci  $\lambda_2$  atd.

Připomeňme, že platí

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{A}}^+(\mathbf{p}_j, \lambda_j) |n_1, \dots, n_j, \dots; n\rangle &= (n_j + 1)^{\frac{1}{2}} |n_1, \dots, n_j + 1, \dots; n + 1\rangle, \\ \hat{\mathbf{A}}^-(\mathbf{p}_j, \lambda_j) |n_1, \dots, n_j, \dots; n\rangle &= n_j^{\frac{1}{2}} |n_1, \dots, n_j - 1, \dots; n - 1\rangle. \end{aligned} \quad (6.402)$$

Odtud ihned vidíme, že nenulové maticové elementy operátoru ( 6.385 ) mají tvar

$$\begin{aligned}
 & \langle n_1, \dots, n_j + 1, \dots; n + 1 | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}) | n_1, \dots, n_j, \dots; n + 1 \rangle = \\
 & = (n_j + 1)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar}{(2\varepsilon_0 c V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathbf{e}(\mathbf{p}_j, \lambda_j)}{p_j^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_j \mathbf{q}\right), \\
 & \langle n_1, \dots, n_j - 1, \dots; n - 1 | \hat{\mathbf{A}}(\mathbf{q}) | n_1, \dots, n_j, \dots; n \rangle = \\
 & = (n_j)^{\frac{1}{2}} \frac{\hbar}{(2\varepsilon_0 c V)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathbf{e}(\mathbf{p}_j, \lambda_j)}{p_j^{\frac{1}{2}}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_j \mathbf{q}\right).
 \end{aligned} \tag{ 6.403 }$$

Počáteční stav systému připravíme tak, že v něm je kvantově mechanická soustava ve vlastním stavu hamiltoniánu  $\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{p}}$  popsaném normalizovaným vektorem  $|u_i\rangle$  a  $n$  fotonů, z nichž  $n_1$  má impuls  $\mathbf{q}_1$  a polarizaci  $\lambda_1$ ,  $n_2$  fotonů impuls  $\mathbf{q}_2$  a polarizaci  $\lambda_2$  atd. Tento počáteční stav je popsán normalizovaným vektorem

$$|u_i\rangle |n_1, \dots, n_j, \dots; n\rangle, \tag{ 6.404 }$$

který je vlastním vektorem operátoru ( 6.399 ).

Vlivem interakce ( 6.396 ) může uvažovaný systém přejít (odhlédneme-li od korekcí implikovaných vyššími řády poruchové teorie) pouze do stavů, v nichž je o jeden foton více či méně, zatímco všechny ostatní fotony si podrží původní hodnotu svého impulsu i polarizace.

Přitom pravděpodobnost připadající na jednotku času, že dojde k přechodu do stavu popsaného normalizovaným vlastním vektorem operátoru ( 6.399 )

$$|u_f\rangle |n_1, \dots, n_j \pm 1, \dots; n \pm 1\rangle \tag{ 6.405 }$$

je dána formulí

$$w_{(i, n_j) \rightarrow (f, n_j \pm 1)} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| M_{(f, n_j \pm 1), (i, n_j)} \right|^2 \delta(E_i - E_f \mp cp_i), \tag{ 6.406 }$$

kde  $E_i$ , resp.  $E_f$  je energie počátečního, resp. koncového stavu kvantově mechanické soustavy, tj.

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{p}} |u_i\rangle &= E_i |u_i\rangle, \\ \hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{p}} |u_f\rangle &= E_f |u_f\rangle,\end{aligned}\tag{6.407}$$

(v tomto smyslu popisují vektory  $|u_i\rangle, |u_f\rangle$  stacionární stavy kvantově mechanické soustavy) a

$$M_{(f, n'_j), (i, n_j)} = \langle n_1, \dots, n'_j, \dots; n' | \langle u_f | \hat{\mathbf{H}}_{\mathbf{I}} | u_i \rangle | n_1, \dots, n_j, \dots; n \rangle.\tag{6.408}$$

Pro poruchu (6.396) odtud s využitím formule (6.403) dostáváme

$$M_{(f, n_j+1), (i, n_j)} = \left( \frac{n_j + 1}{V} \right)^{\frac{1}{2}} M_{fi}(\mathbf{p}_j, \lambda_j),\tag{6.409}$$

kde

$$M_{fi}(\mathbf{p}_j, \lambda_j) \equiv - \frac{\hbar}{(2\mathcal{E}_0 c)^{\frac{1}{2}}} \frac{\mathbf{e}(\mathbf{p}_j, \lambda_j)}{p_j^{\frac{1}{2}}} \sum_{n=1}^Z \frac{e^{(n)}}{M^{(n)}} \langle u_f | \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p}_j \cdot \hat{\mathbf{Q}}^{(n)}\right) \hat{\mathbf{P}}^{(n)} | u_i \rangle.\tag{6.410}$$

Vzhledem k přítomnosti  $\delta$ -funkce ve formuli (6.406) je

$$p_j = \frac{E_j - E_f}{c}.\tag{6.411}$$

Jestliže jsou rozměry studované kvantové soustavy mnohem menší než  $\hbar p_j^{-1}$ , tj. jestliže

$$E_i - E_f \ll \frac{\hbar c}{a},\tag{6.412}$$

můžeme použít dipólového přiblížení a formule ( 6.410 ) se zjednoduší na

$$M_{fi}(\mathbf{p}_j, \lambda_j) = i \left( \frac{E_i - E_f}{2\epsilon_0} \right)^{\frac{1}{2}} \mathbf{e}(\mathbf{p}_j, \lambda_j) \langle u_f | \hat{\mathbf{d}} | u_i \rangle, \quad (6.413)$$

kde

$$\hat{\mathbf{d}} \equiv \sum_{j=1}^Z e^{(j)} \hat{\mathbf{Q}}^{(j)} \quad (6.414)$$

je operátor dipólového momentu uvažované kvantové soustavy. Zcela analogicky nalezneme, že

$$M_{(f, n_j-1), (i, n_j)} = \left( \frac{n_j}{V} \right)^{\frac{1}{2}} M_{fi}^*(\mathbf{p}_j, \lambda_j). \quad (6.415)$$

Povšimněme si, že pravděpodobnost absorpce či emise fotonu s daným impulsem a polarizací je nezávislá na přítomnosti fotonů s jinou polarizací nebo impulsem.

Pravděpodobnost absorpce je úměrná počtu fotonů se stejnou polarizací a impulsem v počátečním stavu. Pravděpodobnost vyzáření fotonu je složena ze dvou členů.

První z nich je úměrný počtu fotonů se stejnými kvantovými čísly přítomných v počátečním stavu – popisuje **stimulovanou emisi**, zatímco druhý je zcela nezávislý na fotonech počátečního stavu (je nenulovým, i když v počátečním stavu není žádný foton!) – popisuje **spontánní emisi**. Víme, že

$$n_j \equiv n(\mathbf{p}_j, \lambda_j) \quad (6.416)$$

udává počet fotonů, které v uvažovaném objemu  $V$  mají impuls  $\mathbf{p}_j$  a polarizaci  $\lambda_j$ .

Protože spektrum možných hodnot impulsu je v tomto případě diskrétní, udává veličina ( 6.416 ) také počet fotonů s polarizací  $\lambda_j$ , které mají impuls ležící uvnitř kvádrů o hranách velikosti ( 6.388 ) a středem v bodě  $\mathbf{p}_j$ .

Pro velké objemy  $V$  počet fotonů s danou polarizací  $\lambda$  a impulsem z okolí  $d^3\mathbf{p}$  bodu  $\mathbf{p}$  vyjádřit jako

$$\frac{n(\mathbf{p}, \lambda)}{\Delta p} d^3\mathbf{p} = \frac{V}{(2\pi\hbar)^3} n(\mathbf{p}, \lambda) p^2 dp d\Omega. \quad ( 6.417 )$$

Tedy hustota fotonů s polarizací  $\lambda$  s impulsem jehož velikost spadá do intervalu  $(p, p + dp)$  s jehož směr leží v prostorovém úhlu  $d\Omega$  kolem jednotkového vektoru  $\mathbf{n}$  je rovna

$$\frac{n(\mathbf{p}, \lambda)}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp d\Omega, \quad ( 6.418 )$$

kde

$$\mathbf{p} \equiv p\mathbf{n}. \quad ( 6.419 )$$

Tomu odpovídá hustota toku energie v elementu prostorového úhlu  $d\Omega$  ve směru  $\mathbf{n}$  připadající na fotony s energií z okolí  $d\hbar\omega$  bodu  $\hbar\omega$  :

$$I(\omega, \mathbf{k}) d\omega d\Omega = cpc \frac{n(\mathbf{p}, \lambda)}{(2\pi\hbar)^3} p^2 dp d\Omega, \quad ( 6.420 )$$

kde jsme využili formule ( 6.367 ) a faktu, že foton, jakožto částice s nulovou klidovou hmotou, se pohybuje rychlostí světla.

Uvážíme-li, že

$$p = \frac{\hbar\omega}{c}, \quad ( 6.421 )$$

dostaneme hledaný výraz pro spektrální hustotu záření

$$I(\omega, \mathbf{k}) = \frac{c}{(2\pi)^3} \frac{n(\mathbf{p}, \lambda)}{\hbar^2} p^3. \quad (6.422)$$

pravděpodobnost, že kvantově mechanický systém ve stacionárním stavu  $u_i$  za jednotku času přejde do stacionárního stavu  $u_f$  tím, že absorbuje jeden foton s polarizací  $\lambda_j$  a impulsem z oblasti  $\Delta\mathbf{p}$  je dána výrazem

$$w_{if}^{(ab)}(\lambda_j, \Delta\mathbf{p}) = \sum_{\Delta\mathbf{q}} w_{(i, n_j) \rightarrow (f, n_j-1)}, \quad (6.423)$$

kde suma probíhá přes všechny možné přípustné hodnoty  $\mathbf{p}_i$  (viz (1002)), ležící v oblasti  $\Delta\mathbf{p}$ .

$$w_{if}^{(ab)}(\lambda_j, \Delta\mathbf{p}) = \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{V} \sum_{\Delta\mathbf{p}} N_j |M_{if}(\mathbf{p}_j, \lambda_j)|^2 \delta(E_i - E_f + cp_j), \quad (6.424)$$

což po přechodu k limitě  $V \rightarrow \infty$  můžeme vyjádřit jako (srov. (6.390))

$$\begin{aligned} w_{if}^{(ab)}(\lambda_j, \Delta\mathbf{p}) &= \frac{2\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi\hbar)^3} \int_{\Delta\mathbf{p}} N(\mathbf{p}, \lambda) |M_{if}(\mathbf{p}, \lambda)|^2 \delta(E_i - E_f + cp) d^3\mathbf{p} = \\ &= \frac{p^2}{(2\pi)^2 \hbar^4 c} \int_{\Omega(\Delta\mathbf{p})} N(\mathbf{p}, \lambda) |M_{if}(\mathbf{p}, \lambda)|^2 d\Omega_{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (6.425)$$

Poslední rovnost platí za předpokladu, že v oblasti  $\Delta\mathbf{p}$  leží vektor velikosti

$$p \equiv \frac{E_f - E_i}{c}, \quad (6.426)$$

jinak je odpovídající pravděpodobnost nulová.

Příspěvek fotonů **absorbovaných** z prostorového úhlu  $d\Omega$  k pravděpodobnosti ( 6.425 ) je

$$\frac{dw_{i \rightarrow f}^{(ab)}(\lambda, \mathbf{p})}{d\Omega} = \frac{p^2}{(2\pi)^2 \hbar^4 c} N(\mathbf{p}, \lambda) |M_{if}(\mathbf{p}, \lambda)|^2, \quad (6.427)$$

což na základě ( 6.422 ) můžeme upravit do tvaru

$$\frac{dw_{i \rightarrow f}^{(ab)}(\lambda, \mathbf{p})}{d\Omega} = \frac{2\pi}{\hbar^3 c} \frac{I(\omega_{fi}, k)}{\omega_{fi}} |M_{if}(\mathbf{p}, \lambda)|^2. \quad (6.428)$$

Dosadíme-li do pravé strany formule ( 6.410 ), resp. ( 6.413 ), dostaneme pro pravděpodobnost excitace kvantově mechanické soustavy vnějším elektromagnetickým zářením

$$\frac{dw_{m \rightarrow n}^{(ex)}(\lambda, \mathbf{p})}{d\Omega} = \frac{\pi}{\varepsilon_0 \hbar^2 c} \frac{I(\omega_{nm}, \mathbf{k})}{\omega_{nm}^2} |U_{mn}(\mathbf{k})|^2, \quad (6.429)$$

kde

$$U_{mn}(\mathbf{k}) \equiv \mathbf{e} \cdot \sum_{j=1}^Z \frac{e^{(j)}}{M^{(j)}} \langle u_m | \exp(i\mathbf{k} \cdot \hat{\mathbf{Q}}^{(j)}) \hat{\mathbf{P}}^{(j)} | u_n \rangle, \quad (6.430)$$

resp.

$$\frac{dw_{nm}^{ex}}{d\Omega} = \frac{\pi}{\varepsilon_0 \hbar^2 c} I(\omega_{nm}, \mathbf{k}) |\langle u_m | \mathbf{e} \cdot \hat{\mathbf{d}} | u_n \rangle|^2 \quad (6.431)$$

v dipólovém přiblížení.

Jestliže maticový element dipólového momentu je nulovým, dává formule ( 6.431 ) předpověď nulové pravděpodobnosti přechodů



$$\begin{aligned} |u_n\rangle &\rightarrow |u_m\rangle, \\ |u_m\rangle &\rightarrow |u_n\rangle, \end{aligned} \quad (6.432)$$

a říkáme, že tyto **přechody jsou zakázané**.

To však ještě neznamena, že by elektromagnetické záření nemohlo vést k přechodům ( 6.432 ).

Nulovost maticového elementu dipólového momentu ještě neimplikuje nulovost veličiny ( 6.430 ).

Započtením dalších členů Taylorova rozvoje exponenciely dostáváme na pravé straně ( 6.430 ) výrazy úměrné maticovým členům vyšších elektrických a magnetických multipólů a tyto mohou být nenulové.

Říkáme-li tedy o nějakém přechodu, že je zakázaným, znamená to jen tolik, že není možný elektrický dipólový přechod.

Nevylučujeme tím ale elektrické přechody vyšších multipolarit (kvadrupólové atd.) a magnetické multipólové přechody (dipólové apod.).

Může se však stát, že i celá veličina ( 6.430 ) je nulovou.

Potom říkáme, že přechody ( 6.432 ) jsou **silně zakázané**.

Opět to však neznamena, že by kvantová teorie předpovídala nemožnost vyvolání přechodů ( 6.432 ) elektromagnetickým zářením.

Připomeňme, že formule ( 6.429 ) je odvozena v prvním řádu poruchové teorie.

Příspěvky vyšších řádů pak mohou vést k nenulové pravděpodobnosti uvažovaných přechodů.

Pro stimulovanou emisi dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{dw_{i \rightarrow f}^{(stim)}(\lambda, \mathbf{p})}{d\Omega} &= \frac{p^2}{(2\pi)^2 \hbar^4 c} N(\mathbf{p}, \lambda) |M_{fi}(\mathbf{p}, \lambda)|^2 = \\ &= \frac{2\pi I(\omega_{if}, k)}{\hbar^3 c \omega_{if}} |M_{fi}(\mathbf{p}, \lambda)|^2, \end{aligned} \quad (6.433)$$

a pro spontánní emisi

$$\frac{dw_{i \rightarrow f}^{(spon)}(\lambda, \mathbf{p})}{d\Omega} = \frac{p^2}{(2\pi)^2 \hbar^4 c} |M_{fi}(\mathbf{p}, \lambda)|^2, \quad (6.434)$$

či v dipólovém přiblížení

$$\frac{dw_{i \rightarrow f}^{(spon)}(\lambda, \mathbf{p})}{d\Omega} = \frac{\omega_{if}^3}{8\pi^2 \hbar c^3 \epsilon_0} |\mathbf{e}(\mathbf{p}, \lambda) \cdot \langle u_f | \hat{\mathbf{d}} | u_i \rangle|^2. \quad (6.435)$$

Všimněme si, že silně zakázané přechody nemohou být realizovány absorpcí či emisí jediného fotonu, vícefotonové přechody však pro ně vyloučeny nejsou.

## Matematický úvod do unitární teorie pole

### 1) Základy topologie

Vlastnosti prostoru můžeme rozdělit na kvantitativní - **metrické** (související s měřením vzdáleností, úhlů, ploch) - a na kvalitativní - **topologické**. Topologie, která se někdy též nazývá "kvalitativní geometrie", je velmi zhruba řečeno to, co zbude z geometrie, když si z ní odmyslíme všechno co má nějakou velikost (a v tomto smyslu i konkrétní tvar). Topologie studuje takové vlastnosti geometrických útvarů, které se při spojitých deformacích (tj. různých roztaženích, stlačeních nebo zprohýbáních za podmínky že nedochází k žádným roztržením nebo spojením různých částí) nemění. Jinak řečeno, topologie systematizuje naše intuitivní představy a zkušenosti o "možném" a "nemožném" v prostoru.

Z hlediska topologie jsou kružnice, elipsa, čtverec nebo trojúhelník stejné, jsou vzájemně **homeomorfní** - použitím topologického zobrazení lze deformovat kružnici na elipsu, čtverec nebo trojúhelník a naopak. Tím spíše jsou si topologicky ekvivalentní kružnice o různých poloměrech nebo čtverce s různými délkami strany. Podobně koule, elipsoid, krychle a jehlan. Takové vzájemně homeomorfní útvary jsou jen různými metrickými variantami téže topologické množiny bodů. Topologie tedy studuje nejzákladnější **globální** vlastnosti prostoru (a geometrických útvarů v něm) jako je souvislost, spojitost, počet rozměrů, omezenost nebo neomezenost a pod. V tomto smyslu je tedy topologie hlubší a obecnější než to, co se běžně pokládá za geometrii. Níže uvidíme příklady prostorů, které mají stejné geometrické (metrické) vlastnosti, avšak zcela odlišné vlastnosti topologické.

Část matematiky zvaná **topologie**, která vznikla při upřesňování intuitivních pojmů "spojitost", "blížkost", "limita", se zabývá jakýmsi "místopisem" bodových množin; studuje kvalitativní pojem "blížnosti" jednotlivých bodů tím, že specifikuje co se rozumí **okolím** každého bodu množiny. Říkáme, že na množině  $X$  je dána topologie, je-li určena soustava  $\mathcal{U}$  podmnožin  $U \subset X$  taková, že:

- a) Průnik dvou množin z  $\mathcal{U}$  patří rovněž do  $\mathcal{U}$ ;  
 b) Sjednocení libovolné soustavy množin z  $\mathcal{U}$  patří rovněž do  $\mathcal{U}$ .  
 Množina  $X$  (která je rovněž prvkem  $\mathcal{U}$ ) spolu s danou topologií se nazývá **topologický prostor**  $(X, \mathcal{U})$ . Okolím bodu  $x \in X$  pak rozumíme otevřenou množinu  $U \in \mathcal{U}$  která bod  $x$  obsahuje.

Ke vzájemnému porovnávání množin slouží operace **zobrazování**: zobrazení  $\varphi: X \rightarrow Y$  množiny  $X$  do množiny  $Y$  znamená, že každému bodu  $x \in X$  přiřadíme určitý bod

$$\varphi(x) \equiv y \in Y \quad (7.1)$$

Zobrazení  $\varphi$  topologického prostoru  $(X, \mathcal{U})$  do prostoru  $(Y, \mathcal{V})$  se nazývá **spojité**, jestliže ke každému bodu  $x \in X$  a ke každému okolí  $V \in \mathcal{V}$  bodu  $\varphi(x) \in Y$  existuje okolí  $U$  tak, že  $\varphi(U) \subset V$ . Vzájemně jednoznačné spojité zobrazení  $\varphi$  prostoru  $(X, \mathcal{U})$  na  $(Y, \mathcal{V})$  pro které je i inverzní zobrazení  $\varphi^{-1}$  spojité, se nazývá **homeomorfismus** (je zřejmé, že  $\varphi^{-1}$  je pak rovněž homeomorfní zobrazení prostoru  $Y$  na  $X$ ). Homeomorfní zobrazení je tedy takové vzájemně jednoznačné zobrazení množin  $X$  a  $Y$ , při kterém se blízké body jedné množiny převádějí na blízké body druhé množiny (otevřené podmnožiny v  $X$  a  $Y$  tvořící okolí bodů  $x \in X$  a  $\varphi(x) \in Y$  jsou ve vzájemně jednoznačném vztahu) - zachovává se při něm okolí bodů. Množiny  $X$  a  $Y$ , mezi nimiž existuje takový homeomorfismus, se nazývají homeomorfní a považují se z topologického hlediska za **ekvivalentní**.

Homeomorfismus je vyjádřením oněch "spojitých deformací" (stlačení nebo roztažení) zmíněných výše. Topologické pojmy a **topologické vlastnosti** jsou takové pojmy a vlastnosti, které zůstávají zachovány při homeomorfismu.

Například elektrický obvod je pojem topologický, protože pro jeho činnost není podstatné rozmístění jednotlivých součástí, ale jejich vzájemné propojení (neplatí to tak docela pro vysokofrekvenční techniku, kde se pro různá rozmístění součástí mohou různé uplatňovat jevy elektromagnetické indukce či vyzařování vln).

Nejnázornějším příkladem topologického prostoru je množina reálných čísel  $R^1$  s přirozenou topologií danou soustavou podmnožin  $A \subset R^1$ , které spolu s každým svým bodem obsahují vždy i určitý interval kolem něho: pro každý bod  $x \in A$  existují čísla  $a, b$  taková, že  $a < x < b$  a interval  $(a, b) \in A$ . Zobecněním je  $n$ -rozměrný Eukleidův prostor  $R^n$  všech  $n$ -tic reálných čísel  $(x^1, x^2, \dots, x^n)$  při  $-\infty < x^i < +\infty$  s obvyklou topologií. A právě dobře známé vlastnosti eukleidovského prostoru, "odkoukané" od chování makroskopických těles, umožňují (pomocí vhodného zobrazení) na jinak amorfním topologickém prostoru zavést dodatečné struktury a učinit jej tak vhodným nástrojem k **modelování fyzikálních dějů**.

**Varieta** dimenze  $n$  ( $n$  - rozměrná varieta)  $M^n$  je takový topologický prostor, jehož každý bod má okolí homeomorfní s  $R^n$  (s určitým okolím v  $R^n$ ). Homeomorfní zobrazení  $\varphi$  otevřené (pod)množiny  $A \subset M^n$  do  $R^n$  přiřazuje každému bodu  $x \in A$   $n$ -tici čísel

$$\varphi(x) = (x^1, x^2, \dots, x^n) \in R^n, \quad (7.2)$$

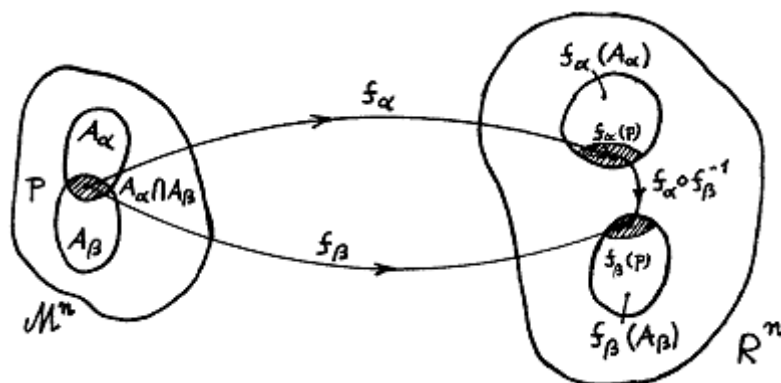
které se nazývají **souřadnice** bodu  $x$ . Říkáme, že na množině  $A$  je zavedena souřadnicová soustava (systém souřadnic)  $x^i$ . Zvolením jiného homeomorfního zobrazení  $\varphi'$  z  $A \subset M^n$  do  $R^n$  budou jednotlivým bodům  $x \in A$  přiřazeny jiné souřadnice

$$(x'^1, x'^2, \dots, x'^n) \in R^n, \quad (7.3)$$

přejdeme k jiné souřadnicové soustavě v podmnožině  $A$ .

Zobrazit celé  $M^n$  do  $R^n$  tímto způsobem však pro mnohé topologické prostory nelze (např. zobrazení  $S^2$  do  $R^2$  zavádějící na kulové ploše  $S^2$  sférické souřadnice  $\vartheta, \varphi$  přestává být vzájemně jednoznačné na pólech). Obecně tedy můžeme varietu  $M^n$  zobrazit do  $R^n$  po částech - vytvářet lokální souřadnicové "mapy"  $(A_\alpha, \varphi_\alpha)$  jednotlivých "domén" (souřadnicových okolí)  $A_\alpha \subset M$ . Soubor map jednotlivých domén  $A_\alpha \subset M$ , pokrývajících  $M$  (tj.  $\bigcup_\alpha A_\alpha = M$ ), tvoří "atlas" variety  $M$ .

Pouze variety topologicky ekvivalentní  $R^n$  lze celé pokrýt jedinou mapou  $(M, \varphi)$ . Zavedením systému souřadnic ztrácejí body variety  $M$  svoji "anonymitu" a varieta může být zkoumána pomocí dobře známých a rozvinutých matematických operací s reálnými čísly.



Obr.7.1.: V diferencovatelné varietě  $M^n$  jsou obrazy  $f_\alpha(p)$  a  $f_\beta(p)$  bodu  $p$  z průniku dvou domén  $A_\alpha$  a  $A_\beta$  svázány spojitými transformacemi včetně derivací do  $r$ -tého řádu.

Varieta  $M^n$  se nazývá **diferencovatelná** třídy  $C^r$ , jestliže je pro ni dán atlas map  $(A_\alpha, \varphi_\alpha)$  jednotlivých domén  $A_\alpha \subset M^n$  zobrazovaných vzájemně jednoznačnými zobrazeními  $\varphi_\alpha$  na otevřené množiny v  $R^n$  splňující podmínky:

**a)**  $A_\alpha$  tvoří pokrytí  $M$ , tj.  $\bigcup_\alpha A_\alpha = M$ ;

**b)** Mají-li dvě domény  $A_\alpha$  a  $A_\beta$  neprázdný průnik, pak bodům  $p \in A_\alpha \cap A_\beta$  této překrývající se části bude zobrazením  $\varphi_\alpha$  přiřazena  $n$ -tice souřadnic  $x^i_\alpha(p) \in R^n$  a zobrazením  $\varphi_\beta$  zároveň  $n$ -tice souřadnic  $x^k_\beta(p) \in R^n$  tak, že transformace

$$x^i_\beta(p) = x^i \left[ x^k_\alpha(p) \right] \quad (7.4)$$

jsou v  $R^n$  spojitě funkce se spojitými derivacemi do  $r$ -tého řádu (obr. 7.1).

Aplikujeme-li vlastnost **b)** na dvě domény

$$(A, \varphi: x \rightarrow x^i(x)) \quad (7.5)$$

**a**

$$(A', \varphi' : x \rightarrow x'^i(x)) \quad (7.6)$$

takové, že

$$A' = A = A \cap A' \quad (7.7)$$

ale

$$\varphi' \neq \varphi, \quad (7.8)$$

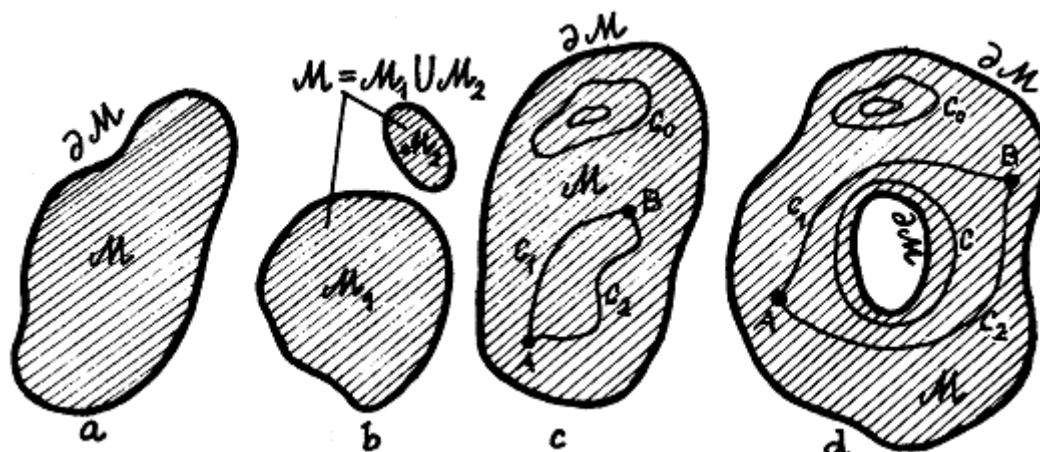
pak přechod od soustavy souřadnic  $x^i$  k jiné soustavě souřadnic  $x'^i$  bude dán regulární a spojitou transformací

$$x'^i(x) = x'^i[x^k(x)] \quad (7.9)$$

$r$ -krát derivovatelnou. V **diferenciální geometrii** se většinou zabýváme lokálními geometrickými vlastnostmi v rámci jedné lokální mapy, zatímco **globální geometrie** studuje strukturu celé variety.

Aby varieta měla obvyklé lokální vlastnosti (a mohla být použitelná pro klasický popis fyzikálních dějů), kladou se na ni ještě dva dodatečné požadavky: Hausdorffovost a parakompaktnost. Prostor se nazývá **Hausdorffův**, jestliže ke každým dvěma různým bodům existují jejich navzájem disjunktní okolí.

Požadavek **parakompaktnosti** znamená, že ke každému pokrytí variety  $\mathcal{M}$  soustavou otevřených podmnožin existuje takové jeho zjemnění, při němž každý bod variety má okolí protínající jen konečný počet podmnožin tohoto zjemněného pokrytí (tj. toto zjemnění je lokálně konečné). Při splnění Hausdorffovosti je parakompaktnost ekvivalentní požadavku, aby  $\mathcal{M}$  měla **spočetnou bázi**, tj. aby existovala taková spočetná soustava otevřených množin, jejichž sjednocením je libovolná otevřená množina v  $\mathcal{M}$  (prostory, jejichž topologie má spočetnou bázi, se nazývají separabilní). Parakompaktnost umožňuje zavedení **konexe** na  $\mathcal{M}$  (viz níže).



Obr.7.2.: Souvislost množin (variet).

- a) Souvislá množina. b) Nesouvislá množina, která je sjednocením dvou disjunktních částí. c) Jednoduše souvislá množina - všechny spojnice mezi dvěma body jsou topologicky ekvivalentní, každá uzavřená křivka je homologická nule. d) Dvojnásobně souvislá množina - existují dvě třídy spojníc mezi body, některé uzavřené křivky (např. C) nelze smrštít do bodu.

Pod **křivkou** (čarou)  $\lambda(t)$  na varietě  $M$  se rozumí zobrazení určitého úseku  $R^1 \rightarrow M$ , tj. množina bodů v  $M$ , které jsou zobrazením bodů křivky  $x^i = x^i(t)$  v  $R^n$  parametrizované proměnnou  $t \in R^1$ . Základní topologickou charakteristikou každé množiny (geometrického útvaru) je **souvislost**. Jako souvislou označujeme takovou varietu, která není tvořena sjednocením několika disjunktních neprázdných částí; potom každé její dva body lze spojit čarou, která je celá součástí této množiny (obr. 7.2a). V opačném případě se jedná o nesouvislou množinu (obr. 7.2b). Souvislá množina se nazývá **jednoduše souvislou**, jestliže pro každé dva body  $A$  a  $B$  jsou všechny spojnice mezi nimi vzájemně topologicky ekvivalentní (**homologické**); jinak vyjádřeno, každou uzavřenou křivku zde můžeme spojitě "stáhnout" do bodu (každá uzavřená křivka je homologická nule) - obr. 7.2c. Jestliže mezi některými body existuje více druhů spojníc které nejsou vzájemně topologicky ekvivalentní, jedná se o **vícenásobně souvislou** množinu (obr. 7.2d), kde některé uzavřené čáry nelze "stlačit" do vymizení v bodě. Přitom "násobnost" souvislosti je definována jako

$$s = c + 1, \quad (7.10)$$



kde  $c$  je počet topologicky nezávislých uzavřených čar, které nelze smrštít do bodu ( $c$  je zároveň rovno počtu "rozřezání", po kterých se daná množina stává jednoduše souvislou); veličina  $s$  udává, kolika topologicky **různými cestami** se lze dostat z jednoho místa variety do druhého místa.

Zobecněním jednorozměrné křivky ve varietě  $M^n$  je  **$p$ -rozměrná plocha**  $C^p$  ( $p \leq n$ ), která je zobrazením příslušného  $p$ -rozměrného podprostoru v  $R^n$ . Takovou plochu  $C^p$  lze považovat za součet (sjednocení) elementárních  $p$ -rozměrných "rovnoběžníků", resp. "krychlí"  $K^p$  (které jsou ovšem obecně "křivočaré")

$$0 \leq x^\alpha \leq 1 \quad (\alpha = 1, 2, \dots, p). \quad (7.11)$$

Vhodným způsobem se zde zavádí orientace a sčítání, což umožňuje studovat souvislosti mezi různými plochami  $C$  a jejich **hranicemi**  $\partial C$ , např. při integrování. Orientovaná  $p$ -rozměrná krychle  $K^p$  má  $(p-1)$ -rozměrnou hranici  $\partial K$  tvořenou jednotlivými stěnami. Tato plocha je uzavřená a proto nemá sama již žádnou hranici, takže  $(p-2)$ -rozměrná hranice  $(p-1)$ -rozměrné hranice  $p$ -rozměrné krychle je rovna nule:

$$\partial \partial K = 0. \quad (7.12)$$

Plyne to též z konstrukce hranice krychle pomocí sumy čtverců tvořících hranice jednotlivých stěn krychle, kde každá strana čtverce je započítávána dvakrát s opačnou orientací a proto se zruší.

Obecnou plochu  $S$  můžeme rozložit na řadu krychlí (patřičné dimenze)  $K_i$ :

$$S = \sum_i a^i K_i. \quad (7.13)$$

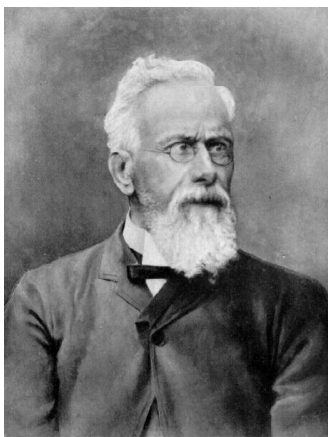
Potom hranici plochy  $S$  definujeme jako součet hranic "krychlí" z nichž je složena:

$$\partial S = \sum_i a^i \partial K_i \quad (7.14)$$

(ve skutečnosti se většina těchto příspěvků z vnitřních oblastí zruší, protože jsou započítávány dvakrát s opačnou orientací podobně jako u běžného odvozování Gaussovy nebo Stokesovy věty). Jestliže hranice nějaké  $p$ -rozměrné plochy  $S$  je rovna nule ( $\partial S = 0$ ), jedná se o **uzavřenou** (kompaktní) plochu. Hranice  $\partial S$  každé plochy (nejen uzavřené) je uzavřená plocha, která již nemá svou hranici, takže vždy platí

$$\partial \partial S = 0. \quad (7.15)$$

toto se označuje jako topologický princip "**hranice hranice je rovna nule**", který má velký význam pro zákony zachování v obecné teorii pole.



Enrico Betti (1823 – 1892)

Jestliže dvě uzavřené plochy  $C^p_1$  a  $C^p_2$  tvoří hranici  $(p+1)$ -rozměrné oblasti v  $\mathcal{M}$ , říkáme, že jsou vzájemně **homologické** (mohou být spojitou deformací převedeny jedna v druhou); pokud uzavřená plocha  $C^p$  samotná tvoří hranici ( $C^p = \partial A^{p+1}$ ) oblasti  $A \subset \mathcal{M}$ , nazývá se **homologická nule** (spojitou deformací může být stažena do jediného bodu). **Homologická třída**  $\{C^p_i\}$  sestává ze všech uzavřených  $p$ -rozměrných ploch  $C^p$  které jsou vzájemně homologické. Počet nezávislých homologických tříd  $\{C^p_1\}, \{C^p_2\}, \dots, \{C^p_{B_p}\}$  ploch

dimenze  $p$  se nazývá  $p$ -tým **Bettiho číslem** variety  $\mathbf{M}$  (nezapočítává se zde třída  $\{C^p_0\} = \{0\}$  ploch homologických nule). Veličina

$$\chi = \sum_{p=0}^n (-1)^p B_p \quad (7.16)$$

se nazývá **Eulerovou charakteristikou** této variety. V Eukleidově prostoru  $R^n$  mohou být všechny  $p$ -rozměrné ( $p \leq n$ ) uzavřené plochy stlačeny do bodu, takže všechny jsou homologické nule a patří do nulové homologické třídy  $\{C^p_0\} = \{0\}$ .

Protože mezi plochami  $C^p$  je definováno sčítání, tvoří soubor těchto ploch ve varietě  $\mathbf{M}$  **grupu**; množina tříd vzájemně homologických  $p$ -rozměrných uzavřených ploch pak tvoří  $p$ -rozměrnou grupu homologií daného prostoru. Vztahy mezi množinami a jejich hranicemi tak mohou být studovány algebraickými metodami v tzv. **algebraické topologii**.

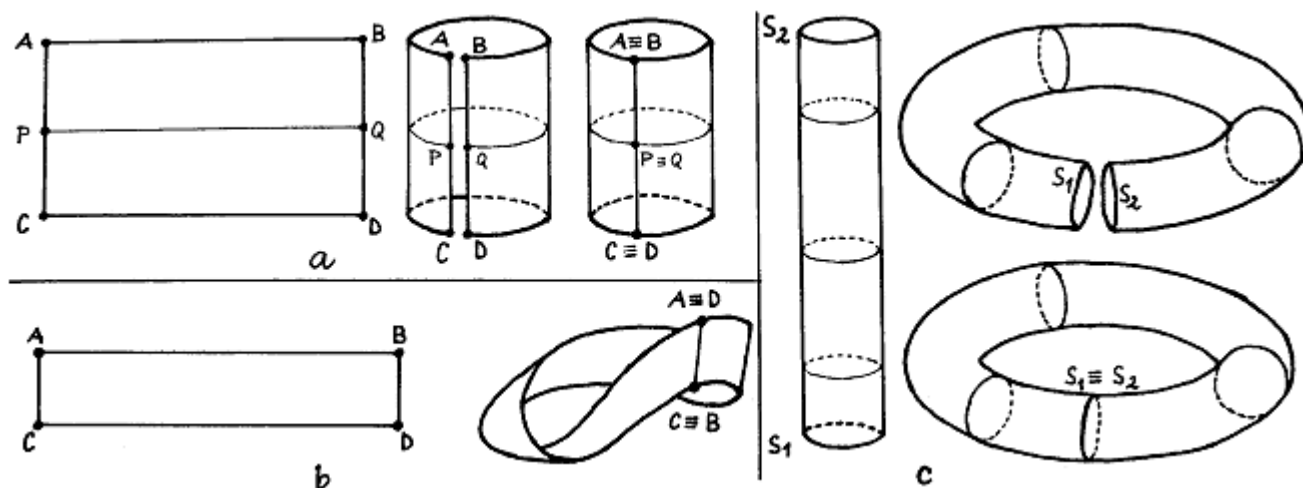
Důvod vícenásobné souvislosti oblasti podle obr. 7.2d je zřejmý: část z  $\mathbf{M}$  je "vyříznuta", takže daná oblast má kromě vnější hranice též vnitřní hranici, přes kterou žádná spojnice nesmí jít. Existují však útvary i celé prostory bez hranic, které jsou vícenásobně souvislé, jak si ukážeme na následujících jednoduchých příkladech.

Vezmeme rovný list papíru, který můžeme považovat za část Eukleidovské roviny  $R^2$  (obr. 7.3a). Tento list je jednoduše souvislý a platí zde axiomy Eukleidovy geometrie (proto např. součet úhlů v narýsovaném trojúhelníku bude roven  $180^\circ$ ). Stočíme-li tento list papíru a slepíme protější strany, tj. uděláme ztotožnění

$$(x + a, y) \equiv (x, y), \quad (7.17)$$

dostaneme **válcovou plochu**. Eukleidovský charakter geometrie se tím lokálně nezměnil - vzdálenosti mezi jednotlivými body zůstaly stejné, nezměnily se úhly ani plochy. Avšak svými globálními topologickými vlastnostmi je tato válcová plocha zcela jiným dvojrozměrným prostorem než byla původní Eukleidova rovina. Mezi každými dvěma

body existují dvě topologicky odlišné třídy spojníc, uzavřenou kružnici obepínající válec nelze nijak stáhnout do bodu, zatímco jiné uzavřené křivky ano; válcová plocha je **dvojnásobně souvislá** a v jednom směru (rozměru) konečná. Bettiho čísla zde jsou  $B_0=1$ ,  $B_1=1$ ,  $B_2=1$ .



Obr.7.3: Ke vztahu mezi (geo)metrickými a topologickými vlastnostmi.

- a) List papíru je částí Eukleidovy roviny. Jeho stočením a slepením dostaneme válcovou plochu s lokálně zachovanou Eukleidovou geometrií, ale jinou globální topologií.  
b) Jestliže se při stočení provede navíc překroucení o  $180^\circ$ , vznikne Möbiův list (proužek).  
c) Stočením a slepením úseku válcové plochy vznikne toroid (anuloid).

Nebo podobně ohnutím, zkroucením o  $180^\circ$  a slepením - tj. ztotožněním

$$(x + a, y) \equiv (x, -y) \quad (7.18)$$

papírové pásky s původně Eukleidovskou geometrií a topologií, dostaneme známý **Möbiův proužek** (obr. 7.3b), jehož lokální geometrie se opět neliší od Eukleidovy, ale topologické vlastnosti má jiné. Jedná se o **jednostrannou plochu** (známý neúspěšný pokus s obarvením "líce" i "rubu" jedním tahem stejnou barvou), na níž nelze zavést orientaci, protože po jednom oběhu "kolem dokola" se to, co bylo vlevo objeví vpravo, směr "nahoru" se změní na "dolů" a naopak.

Uvedené příklady ukazují, že pro úplné určení charakteru prostoru nestačí jeho (lokální) metrické vlastnosti, ale je třeba vzít v úvahu též jeho (globální) vlastnosti topologické. Kromě Eukleidova prostoru  $R^n$ ,

na němž je pojem variety založen, tedy existují i obecnější variety s jinými topologickými vlastnostmi. Uvedme si některé další případy.

Jedním z nejdůležitějších typů variety je **kulová plocha**.

Dvojměrná kulová plocha (sféra)  $S^2$  jednotkového poloměru je jak známo plocha v  $R^3$ , jejíž body jsou dány rovnicí

$$(x^1)^2 + (x^2)^2 + (x^3)^2 = 1. \quad (7.19)$$

Analogicky  **$n$ -rozměrná sféra**  $S^n$  (jako podprostor v  $R^{n+1}$ ) je geometrické místo bodů v  $R^{n+1}$  splňujících podmínku

$$\sum_{i=1}^{n+1} (x^i)^2 = 1. \quad (7.20)$$

Sféra  $S^n$  je **konečná** (kompaktní) jednoduše souvislá varieta. Pro dvojměrnou kulovou plochu  $S^2$  jsou Bettiho čísla  $B_0=1$ ,  $B_1=1$ ,  $B_2=1$  a Eulerova charakteristika  $\chi=1$ .

Stočíme-li dvojměrnou válcovou plochu (zhotovenou z elastického materiálu) a slepíme protější základny, vznikne **toroid** (anuloid, obr. 7.3c), který má na rozdíl od původní válcové plochy svou vnitřní geometrii zakřivenou. Tento toroid  $T^2$ , který vzniká ztotožněním

$$(x+a, y+b) \equiv (x, y) \quad (7.21)$$

bodů v  $R^2$ , je příkladem **trojnásobně souvislé** plochy. Jsou zde dvě třídy uzavřených křivek - kružnice podél "velkého" a "malého" obvodu toroidu - které nelze smrštít do bodu. Obecně,  $n$ -rozměrný toroid  $T^n$  je prostor, který vznikne ztotožněním

$$(x^i + a^i) \equiv (x^i), \quad i = 1, 2, \dots, n, \quad (7.22)$$

bodů v  $R^n$ . Dvojměrný toroid  $T^2$  má Bettiho čísla rovná  $B_0=1$  (odpovídá třídě všech bodů - všechny body jsou vzájemně homologické),  $B_1=2$  (jsou dvě nezávislé třídy  $\{C_1^1\}$  a  $\{C_1^2\}$  uzavřených křivek procházejících kolem menšího a většího obvodu

toroidu),  $B_2=1$  (odpovídá samotnému toroidu); Eulerova charakteristika  $\chi(T^2)=0$ .

Z  $n$ -rozměrné variety  $\mathbf{M}^n$  a  $m$ -rozměrné variety  $\mathbf{M}^m$  můžeme "kartézským součinem" sestrojít  $(n+m)$ -rozměrnou varietu  $\mathbf{M}^n \times \mathbf{M}^m$ , jejíž body jsou dvojicemi  $(x, y)$ , kde  $x$  je libovolný bod z  $\mathbf{M}^n$  a  $y$  libovolný bod z  $\mathbf{M}^m$ . Např. Eukleidův prostor  $R^3$  je součinem  $R^2 \times R^1$ ,  $R^n$  lze zapsat jako

$$R^n = R^1 \times R^1 \times \dots \times R^1 \quad (7.23)$$

(kartézský součin  $n$ -koeficientů). Válcovou plochu  $C^2$  lze považovat za součin kružnice a Eukleidovy přímky, tj.

$$C^2 = S^1 \times R^1. \quad (7.24)$$

Co se týče toroidu, je především zřejmé, že jednorozměrný toroid  $T^1$  a jednorozměrná sféra  $S^1$  (kružnice) jsou vzájemně homeomorfní, tj.

$$T^1 = S^1. \quad (7.25)$$

Proto  $n$ -rozměrný toroid  $T^n$  je z topologického hlediska kartézským součinem  $n$  kružnic:

$$T^n = S^1 \times S^1 \times \dots \times S^1. \quad (7.26)$$

Topologická struktura variety  $\mathbf{M}^n \times \mathbf{M}^m$  je přirozeným způsobem dána strukturou  $\mathbf{M}^n$  a  $\mathbf{M}^m$ : pro libovolné body  $x \in \mathbf{M}^n$  a  $y \in \mathbf{M}^m$  mající souřadnicová okolí  $A \subset \mathbf{M}^n$  a  $B \subset \mathbf{M}^m$  je bod  $(x, y) \in \mathbf{M}^n \times \mathbf{M}^m$  obsažen v souřadnicovém okolí  $A \times B \subset \mathbf{M}^n \times \mathbf{M}^m$  a má tam souřadnice  $(x^i, y^j)$ , kde  $x^i$  jsou souřadnice bodu  $x$  v doméně  $A$  a  $y^j$  souřadnice bodu  $y$  v doméně  $B$ .

Funkce  $f$  (skalární pole) na varietě  $\mathbf{M}^n$  je zobrazení z  $\mathbf{M}^n$  do  $R^1$ .

Říkáme, že tato funkce je **diferencovatelná** třídy  $C^r$  v bodě  $p \in \mathbf{M}$ , jestliže je definována v otevřeném okolí bodu  $p$  a její vyjádření

$$f(x) = f(x^1, x^2, \dots, x^n) \quad (7.27)$$

pomocí souřadnic  $x^i \in R^n$  v nějaké lokální souřadnicové soustavě má spojitě derivace do  $r$ -tého řádu podle  $x^i$ . Z této definice plyne, že v diferencovatelné varietě  $\mathbf{M}$  třídy  $C^s$  je souřadnice  $x^i(x)$  diferencovatelnou funkcí třídy  $C^s$ .

Dalšími geometrickými objekty, které přirozeným způsobem souvisejí se strukturou variety, jsou **tenzory** a **tenzorová** (speciálně též vektorová) **pole**. Tenzorem  $r$ -tého řádu v bodě " $p$ "  $n$ -rozměrné variety  $\mathbf{M}^n$  se rozumí souhrn  $n^r$  čísel

$$T_{j_1 j_2 \dots j_\beta}^{i_1 i_2 \dots i_\alpha}, i_1, i_2, \dots, i_\alpha, j_1, j_2, \dots, j_\beta = 1, 2, \dots, n \quad (7.28)$$

s  $\alpha \leq r$  kontravariantními (horními) a  $\beta = r - \alpha$  kovariantními (dolními) indexy, které se při transformaci souřadnic

$$x'^i(p) = x'^i(x^j(p)), \quad (7.29)$$

tj.

$$dx'^i = \frac{\partial x'^i}{\partial x^j} dx^j, \quad (7.30)$$

transformují v kontravariantních indexech jako součiny  $\alpha$ -diferenciálů souřadnic a v kovariantních indexech jako součiny  $\beta$ -inverzních diferenciálů v bodě  $p$ :

$$T_{j_1, j_2, \dots, j_\beta}^{i_1, i_2, \dots, i_\alpha} = \frac{\partial x'^{i_1}}{\partial x^{k_1}} \frac{\partial x'^{i_2}}{\partial x^{k_2}} \dots \frac{\partial x'^{i_\alpha}}{\partial x^k} \frac{\partial x^{l_1}}{\partial x'^{j_1}} \frac{\partial x^{l_2}}{\partial x'^{j_2}} \dots \frac{\partial x^{l_\beta}}{\partial x'^j} T_{l_1, l_2, \dots, l_\beta}^{k_1, k_2, \dots, k_\alpha} \quad (7.31)$$

Tyto transformační vlastnosti zaručují, že tenzorové rovnice jsou **invariantní** (kovariantní) vzhledem k transformacím souřadnic.

Pravidla pro aritmetické operace mezi tenzory jsou stejná jako v eukleidovském prostoru  $R^n$ .

Aby bylo možno porovnávat vektory a tenzory zadané v různých bodech variety, zavádí se **konexe**, tj. pravidlo (předpis) pro **paralelní přenos** vektorů a tenzorů mezi různými body; varieta se tím stává **prostorem afinní konexe**. A zde již může přijít ke slovu **diferenciální geometrie** - počítání kovariantních derivací tenzorových polí, kvantifikace zakřivení pomocí tenzoru křivosti, stanovení geodetických čar atd., jak to bylo nastíněno v 1. kapitole. Konečně se do variety zavádí **metrika**, tj. předpis pro stanovení vzdáleností mezi jednotlivými body, čímž vzniká **metrický prostor**. Pomocí souřadnic vyjádřená vzdálenost mezi bodem  $x^i$  a nekonečně blízkým bodem  $x^i + dx^i$  je dána diferenciální formou

$$ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k, \quad i, k = 1, 2, \dots, n, \quad (7.32)$$

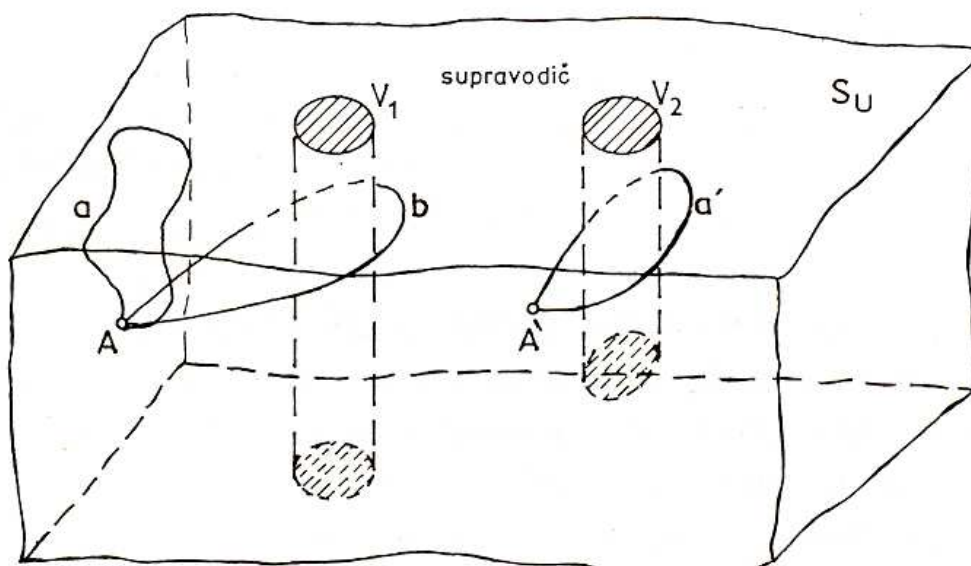
kde  $g_{ik}$  je **metrický tenzor** vyjadřující vztah mezi souřadnicemi a skutečnými vzdálenostmi. Aby konexe byla slučitelná s metrikou (konexe a metrika jsou obecně nezávislé struktury zaváděné do variety), musí se při paralelním přenosu zachovávat pravidla tenzorové algebry a velikost přenášeného vektoru. Vede to na zákon paralelního přenosu (2.8) a jednoznačný vztah (2.2b) mezi koeficienty konexe a složkami metrického tenzoru. Metrický prostor s konexí (slučitelnou s metrikou) se nazývá **Riemannův prostor**.

Možnost zavedení libovolného tenzorového pole na varietě je obecně podmíněna topologickými vlastnostmi variety. Např. každá nekompaktní varieta připouští existenci konstantního vektorového pole. Pro existenci konstantního vektorového pole na kompaktní varietě je však nutnou a postačující podmínkou, aby se Eulerova charakteristika  $\chi$  variety rovnala nule. Například válec nebo toroid připouští konstantní vektorové pole, zatímco kulová plocha nikoli (nelze hladce učesat vlasy na tenisovém míčku).

Představme si nyní, že v třírozměrném topologickém prostoru  $S$  uděláme dva otvory.



Jeden z nich –  $V_1$  – bude začínat a končit na povrchu tohoto prostoru a druhý –  $V_2$  – bude začínat sice na povrchu, ale končit někde uvnitř prostoru.



Obr. 7.4.:. Supravodivá oblast  $S$  se dvěma víry  $V_1$  a  $V_2$ . Jádru víru má nesupravodivou válcovou oblast schematicky znázorněnou na obrázku. Vír 1 začíná i končí na povrchu supravodiče. V prostoru supravodiče existují stažitelné i nestažitelné křivky (viz obr. 7.2d). Smyčky typu  $b$  nelze na rozdíl od smyček typu  $a$  v objemu supravodiče z víru stáhnout. Vír  $V_2$  ovšem končí v objemu supravodiče a křivka se z něj dá stáhnout do bodu  $A$ . Vír  $V_1$  má tedy netriviální topologii.

Je zřejmé, že otvor  $V_1$ , bude mít netriviální topologii zvanou **vírové vlákno**.

Uzavřenou křivku  $b$ , nemůžeme v prostoru z vírového vlákna stáhnout (dvojnásobně souvislý prostor).

V případě otvoru  $V_2$  můžeme uzavřenou křivku v prostoru  $S$  snadno stáhnout do bodu  $A$ .

Taková singularita je jednoduše souvislá a vlastně ji nebudeme singularitou vůbec nazývat (jedná se o odstranitelnou singularitu).

Pokud budeme v dalším hovořit o singularitách, budeme mít vždy na mysli singularitu neodstranitelnou, jdoucí napříč celým uvažovaným topologickým prostorem, tj. začínající i končící na jeho povrchu.

Protože **parametr pořádku** kvantové kapaliny definujeme jako komplexní skalár

$$\Psi(\mathbf{r}, t) = |\Psi| \exp[i\Theta(\mathbf{r}, t)], \quad (7.33)$$

můžeme v komplexní rovině sledovat změnu fáze podél uzavřené křivky  $\Gamma$ .

Při oběhu podél  $\Gamma$  se fáze vlnové funkce může měnit o  $2\pi n$ , kde  $n = 1, 2, \dots$ .

**Vírem** v kvantové kapalině nazýváme cirkulaci vektoru okolo osy zvané **jádro víru**.

Protože u kvantových vírů je rychlost  $\mathbf{v}_s$  proudění blízko jádra nepřímo úměrná vzdálenosti  $r$  od jádra,

$$|\mathbf{v}_s| \sim r^{-1}, \quad (7.34)$$

je jasné, že v ose víru by měla dosahovat nekonečné velikosti.

V ose víru tedy očekáváme topologickou singularitu.

Integrál rychlosti podél křivky  $\Gamma$  uvnitř víru nazýváme **cirkulace víru**.

Pro daný vír je konstantní, ale obecně to vůbec nemusí být celé číslo.

V případě kvantových kapalin však cirkulace víru je kvantována a je rovna  $2\pi n$ , kde  $n$  je celé číslo, nazývané **topologický náboj víru**, nebo též **navíjecí číslo**.

Např. v supratekutém  ${}^4\text{He}$  je supratekutá rychlost rovna gradientu makroskopické fáze  $\Theta$  parametru pořádku:

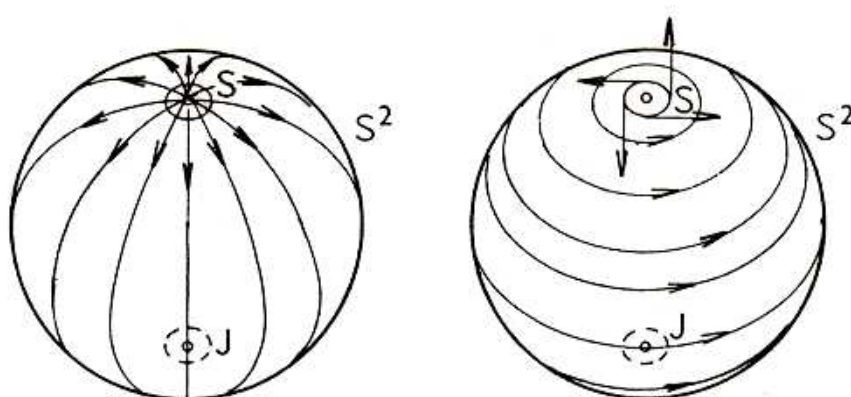
$$\mathbf{v}_s = \frac{\hbar \nabla \Theta}{m} \quad (7.35)$$

a cirkulace

$$\oint \mathbf{v}_s \cdot d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} \oint \nabla \Theta \cdot d\mathbf{l} = \frac{\hbar}{m} \int_{\Gamma} d\Theta = \frac{2\pi n \hbar}{m} = \frac{nh}{m}. \quad (7.36)$$

Ukažme si nyní na jednoduchých příkladech vektorových polí na ploše způsob určení topologického náboje.

Vezměme si rozložení vektorů ležících tangenciálně na povrchu koule.



Obr. 7.5: Rozdělení vektorového pole tangenciálního k povrchu koule  $S^2$ . Existují minimálně 2 singulární body S, J, v nichž vektory směřují do všech stran. Povrch koule s tangenciálním vektorovým polem se nedá „načesat“ bez singularit.

Snadno nahlédneme, že existují 2 způsoby jejich vzájemného uspořádání, které oba obsahují 2 singularity s navíjecím číslem  $n = \pm 1$  (vektor daného tangenciálního pole se při plném oběhu po kružnici kolem singularity otočí o úhel  $\pm 2\pi$ ).

Samozřejmě při této klasifikaci topologických defektů a singularit vzniká celá řada otázek.

Jde např. o stabilitu takových objektů, o jejich srážky, rozpad, slučování atd.

Tak např. energie víru s  $n = 2$  je větší, než energie dvou vírů s  $n = 1$ . Víry s  $n = 1$  a  $n = -1$  mohou při kolizi anihilovat.

Také zákony zachování některých topologických invariantů, jako např. topologického náboje, jsou velice silnými zákony.

V teorii elementárních částic se v současnosti rozvíjí velmi nadějná **teorie strun** (vírových vláken), která si klade za cíl sjednocení všech čtyř interakcí (budeme o ní hovořit v deváté kapitole).

V ní jsou částice považovány nikoliv za bodové objekty, jak tomu bylo dříve, ale za malé víry či struny s určitými náboji na koncích a s určitým topologickým nábojem (navíjecím číslem).

Kromě singularit ve formě jednodimenzionálních linií (strun) existují též singularity bodové (nuladimenzionální), plošné (dvojdimenzionální) a v teorii strun dokonce i vícedimenzionální, tzv.  $p$  – brány.

Nejjednodušším případem dvojdimenzionální singularity je membrána typu doménové stěny (např. feromagnetické domény reprezentující oblast mezi dvěma magnetizacemi  $\mathbf{M}$  a  $-\mathbf{M}$ ).

Podobné přechodové oblasti nejrůznějšího charakteru nazýváme také **solitony**.

Takový soliton se může v prostředí relativně volně pohybovat, procházet přes jiný soliton, aniž by anihiloval atd.

Bodové singularity nazýváme **monopóly**.

Tyto monopóly připomínají osamocené volný magnetický pól, tzv.

**Diracův monopól**.

Setkáváme se s nimi např. v elektricky neutrální formě, u supratekutého  $^3\text{He}$ .

S rozvojem inflační kosmologie se v posledním desetiletí minulého století začalo pátrat po topologických defektech typu kosmologická struna, doménová stěna a magnetický monopol, i v kosmologických měřítkách. Toto pátrání však dosud nebylo úspěšné.

## 2) Kalibrační teorie

Když jsme v předchozích kapitolách vyjádřili vektory  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  s pomocí skalárního a vektorového potenciálu coby

$$\mathbf{E} = -\text{grad } \varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \quad (7.37)$$

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A},$$

ihned zpočátku bylo jasné, že dané elektromagnetické pole ( $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$ ) můžeme získat z různých hodnot skalárního a vektorového potenciálu. To znamená, že potenciály neurčují dané elektromagnetické pole jednoznačně.

Vezměme např. nové potenciály  $\varphi'$ ,  $\mathbf{A}'$  ve tvaru

$$\varphi' = \varphi - \frac{\partial \Theta}{\partial t}, \quad (7.38)$$

$$\mathbf{A}' = \mathbf{A} + \text{grad } \Theta$$

a dosadíme je do vztahů ( 7.37 ):

$$\begin{aligned} \mathbf{E} &= -\text{grad } \varphi' - \frac{\partial \mathbf{A}'}{\partial t} = -\text{grad } \varphi + \frac{\partial \text{grad } \Theta}{\partial t} - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t} - \frac{\partial \text{grad } \Theta}{\partial t} = \\ &= -\text{grad } \varphi - \frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}, \end{aligned} \quad ( 7.39 )$$

$$\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}' = \text{rot } \mathbf{A} + \text{rot grad } \Theta = \text{rot } \mathbf{A} .$$

Funkce  $\Theta(\mathbf{r}, t)$  je libovolná skalární funkce, kterou budeme nazývat fází.

Zavedení skalárního a vektorového potenciálu nám v řadě případů umožnilo snadnější řešení úloh z elektrodynamiky.

Co však s jejich nejednoznačností?

Fyzikální význam se dříve připisoval pouze polím  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{B}$  a nikoliv potenciálům  $\mathbf{A}$ ,  $\varphi$ .

A přece moderní fyzika ukázala, že tyto potenciály jsou fundamentálnější charakteristikou elektromagnetického pole než vektory intenzit a indukcí, a že mohou mít pozorovatelné důsledky. Tento jejich význam byl dlouhou dobu urputně diskutován, ale byl posléze ještě podtržen novými, tzv. **kalibračními (cejchovacími) teoriemi**, které mají tu moc sjednotit na první pohled různé teorie pole do jedné jediné.

Určitou vybranou formu potenciálů z jejich nekonečného počtu nazýváme **kalibrací** a přechod od jedné kalibrace ( $\mathbf{A}$ ,  $\varphi$ ) k jiné kalibraci ( $\varphi'$ ,  $\mathbf{A}'$ ) nazýváme **kalibrační transformací**.

V předchozí kapitole jsme viděli, že kvantová teorie pole používá striktně jen elektromagnetických potenciálů a nikoliv polí.

Všechny pokusy formulovat kvantovou elektrodynamiku s poli  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  ztroskotaly na fyzikálních rozporech, k nimž tato formulace vedla.

Ale žádná měřitelná veličina nesmí záviset na výběru té či oné kalibrace, a to ani v klasické, ani v kvantové mechanice.

Říkáme, že klasická i kvantová mechanika jsou **kalibračně invariantní**.

Maxwellovy rovnice jsou samozřejmě invariantní vůči kalibraci ( 7.38 ).

H. Weyl v roce 1919 byl první, kdo pochopil význam kalibrační invariance pro fyziku.



**Hermann Klaus Hugo Weyl (1885 – 1955)**

Zobecněné ideje této invariance jsou dnes ve fyzice zcela dominantní a zdá se, že nám poskytují klíč k jednotnému pochopení sil působících mezi elementárními částicemi.

V této kapitole se proto budeme těmito idejemi zabývat poněkud podrobněji.

Schrödingerovu rovnici volné částice bez vnějších elektromagnetických polí můžeme napsat jako

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \frac{1}{2m} (-i\hbar \nabla)^2 \Psi(\mathbf{r}, t). \quad (7.40)$$

Tato rovnice je invariantní vůči transformaci vlnové funkce

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \Psi \exp(i\Theta_0), \quad (7.41)$$

kde  $\Theta_0$  je konstanta nezávislá na čase a na souřadnici.

Budeme ji nazývat **globální fází**.

Transformace (7.41) se nazývá **globální kalibrační transformací** a dotvrzuje nám, že globální fáze je neměřitelnou veličinou a vyjadřuje jen jakýsi konstantní posun daných řešení.

Budeme nyní požadovat invarianci Schrödingerovy rovnice vůči lokální kalibrační transformaci  $\Theta = \Theta(\mathbf{r}, t)$ .

V každém bodě prostoru budeme předpokládat jinou hodnotu fáze  $\Theta(\mathbf{r}, t)$ .

Transformace ( 7.41 ) bude nyní zobecněna na

$$\Psi \rightarrow \Psi' = \Psi \exp[i\Theta(\mathbf{r}, t)]. \quad ( 7.42 )$$

Jak si čtenář snadno odvodí, dosazením  $\Theta'$  z ( 7.42 ) do ( 7.40 ), není už teď Schrödingerova rovnice pro volnou částici invariantní vůči této lokální kalibrační transformaci, protože výrazy  $\Delta\Theta(\mathbf{r}, t)$  a  $\partial\Theta(\mathbf{r}, t)/\partial t$  nyní nejsou rovny nule.

Ukazuje se, že tato lokální transformace ( 7.42 ) vyžaduje přítomnost nových kompenzujících polí, která by vykompenzovala ony přírůstky  $\Delta\Theta(\mathbf{r}, t)$  a  $\partial\Theta(\mathbf{r}, t)/\partial t$ .

Požadavek lokální kalibrační invariance tak vede ke vzniku nových kompenzujících polí, která nazýváme **kalibrační pole**.

Snadno se dá ukázat, že tato invariance nám bude generovat

Maxwellovy rovnice elektromagnetického pole:

Napíšeme nyní místo ( 7.40 ) Schrödingerovu rovnici pro částici v elektromagnetickém poli ve tvaru, který vyžaduje tato lokální fázová kalibrační transformace:

$$\frac{1}{2m}(-i\hbar\nabla - e\mathbf{A})^2 \Psi + e\Theta\Psi = i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t}, \quad ( 7.43 )$$

kde  $e$  je elementární náboj.

Snadno se lze přesvědčit, že tato rovnice nezmění tvar při kalibračních transformacích

$$\begin{aligned}
\mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \frac{\hbar \nabla \Theta(\mathbf{r}, t)}{e}, \\
\varphi &\rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\hbar}{e} \frac{\partial \Theta(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \\
\Psi &\rightarrow \Psi'(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, t) e^{i\Theta(\mathbf{r}, t)}.
\end{aligned}
\tag{7.44}$$

Potenciály a vlnová funkce se tedy mění od místa k místu.

To je výsledek neobyčejně krásný.

Požadavek lokální fázové invariance se tak stal jedním ze základních pilířů současné částicové fyziky.

Lokální kalibrační invariance může generovat i další interakce, jako jsou interakce slabé a silné.

Odtud plyne ten ohromný úspěch současných **kalibračních teorií** jež jsou základem všech pokusů o sjednocení fyzikálních sil – elektromagnetických, slabých, silných i gravitačních.

Zatím se úspěšně podařilo sjednotit elektromagnetické a slabé síly do jediné, tzv. **elektroslabé interakce** (EW).

Za teoretické práce v této oblasti obdrželi v roce 1979 Nobelovu cenu A. Salam, S. Weinberg a S. Glashow.

Za fantasticky složité experimentální potvrzení existence intermediálních bosonů  $W^\pm$  a  $Z^0$  – prostředníků slabé interakce – obdrželi Van der Meer a C. Rubbia Nobelovu cenu v roce 1984.

Částečně úspěšně se též podařilo sloučit elektroslabou a silnou interakci do jediné síly prostřednictvím tzv. **grandunifikační teorie**, která však stále ještě čeká na své experimentální potvrzení, jež je nesmírně náročné a stalo se velikou výzvou nastupujícím generacím fyziků.

Ke všem těmto zásadním objevům promluvíme ještě podrobněji v následujících kapitolách.

Nyní však sledujme dále linii našich úvah o lokální kalibrační invarianci.

Fázový faktor  $\Theta(\mathbf{r}, t)$  je možné psát rovněž jako

$$\hbar \Theta(\mathbf{r}, t) = e \chi(\mathbf{r}, t). \tag{7.45}$$



Vztahy ( 7.44 ) pak můžeme psát v ekvivalentní podobě

$$\begin{aligned}\mathbf{A} &\rightarrow \mathbf{A}' = \mathbf{A} + \nabla\chi, \\ \varphi &\rightarrow \varphi' = \varphi - \frac{\partial\chi}{\partial t}, \\ \Psi &\rightarrow \Psi' = \Psi(\mathbf{r}, t) \exp\left(\frac{ie\chi}{\hbar}\right),\end{aligned}\tag{ 7.46 }$$

kde  $\chi$  má rozměr magnetického toku, kdežto  $\Theta$  bylo bezrozměrné. Smysl této transformace spočívá v tom, že v každém bodě prostoru si můžeme zvolit jinou souřadnicovou soustavu, v níž bychom určili fázový úhel.

Ve druhé kapitole jsme si ukázali, že požadavek mít v každém místě jinou souřadnou soustavu není formální věc, ale v celé řadě případů fyzikální nutnost.

H. Weyl chtěl spojit fáze v různých lokálních souřadnicích, a našel, že tuto transformaci mohou zajistit elektromagnetické potenciály. Ze srovnání rovnic ( 7.40 ) či ( 7.43 ) vidíme, že jsme v podstatě nahradili prostorovou a časovou derivaci výrazy

$$\begin{aligned}-i\hbar\nabla &\rightarrow (-i\hbar\nabla - e\mathbf{A}), \\ -i\hbar\frac{\partial}{\partial t} &\rightarrow \left(-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - e\varphi\right).\end{aligned}\tag{ 7.47 }$$

Tento nový typ derivace dobře známe již z našeho dřívějšího pojednání o fyzice gravitačního pole – obecné teorii relativity. Není to nic jiného, než naše stará známá kovariantní derivace. Nyní se ukazuje, že tato derivace má zásadní důležitost rovněž v teorii kalibračních polí.

Předpis pro kalibrační teorie pak zní: nahraď obyčejné derivace kovariantními.

V druhé kapitole jsme si ukázali, že kovariantní derivace spojuje geometrii v jednom místě prostoru s geometrií v jiném místě. Také jsme si ukázali, že v nezakřiveném prostoru se kovariantní derivace rovná běžné derivaci.

Prostor vnitřních stupňů volnosti elektromagnetického pole je tedy zakřiven.

Nabízející se paralela se zakřiveným prostoročasem OTR, jež je východiskem pro genezi gravitační interakce, se nám snaží naznačit, v jakém směru se moderní kalibrační teorie snaží najít společný jazyk. Hmota říká prostoru stavů kterak se má zakřivit a zakřivený prostor stavů zpětně diktuje hmotným částicím, jak se mají pohybovat. Nejedná se tedy o nic jiného, než o další a ještě důslednější geometrizaci fyziky.

Neměřitelná vlnová funkce určitého stavu závisí na kalibraci

$$\Psi' \rightarrow \Psi \exp\left(\frac{ie\chi(\mathbf{r},t)}{\hbar}\right), \quad (7.48)$$

tj. v každém místě prostoru je fázový faktor jiný.

Schrödingerova rovnice je kalibračně invariantní, ale např.

hamiltonián částice v elektromagnetickém poli nikoliv, neboť operátor potenciální energie, na rozdíl od operátoru kinetické energie, kalibračně invariantní není (oba operátory spolu nekomutují).

Proto jsme museli překalibrovat i vlnovou funkci (7.48), abychom získali kalibračně invariantní Schrödingerovu rovnici.

V klasické mechanice a elektrodynamice hraje rozhodující úlohu pojem síly  $\mathbf{F}$ :

$$\mathbf{F} = m \frac{d\mathbf{v}}{dt}, \quad (7.49)$$

$$\mathbf{F} = e\mathbf{E} + e(\mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

V kvantové mechanice však operujeme s potenciály  $\mathbf{A}$  a  $\varphi$ , nikoli s poli  $\mathbf{E} = \text{grad } \varphi$ ,  $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ , které jsou z nich odvozeny derivacemi.

Lorentzova síla se v kvantové elektrodynamice nikde neobjevuje.

V kvantové mechanice jsou fyzikálně relevantní pouze potenciály, a to i tehdy, pokud v místě, kde se částice nachází, neexistují žádná pole, jež by na částici působila.

Znalost polí  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  je tedy pro kvantovou mechaniku nedostačující, neboť síla sama má v kvantové mechanice velice nepřímý význam, a potenciálům  $\mathbf{A}$ ,  $\varphi$  je zde vyhrazena nová, zásadnější role.

Tuto roli poprvé důkladněji prozkoumali Y. Aharonov a D. Bohm. Ti ukázali, že smysl potenciálů není vyčerpán tím, že určují pole  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$  a že za určitých podmínek v mnohonásobně souvislých oblastech jsou integrály potenciálů po uzavřené dráze kalibračně invariantní, tj. nejsou určeny náhodně a mají tedy fyzikální význam.



Yakir Aharonov (1932)



David Joseph Bohm (1917 – 1992)

Jinak řečeno

$$\begin{aligned} \oint \mathbf{A}' \cdot d\mathbf{l} &= \oint \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}, \\ \oint \varphi' dt &= \oint \varphi dt, \end{aligned} \tag{7.50}$$

protože

$$\oint d\chi = 0. \tag{7.51}$$

Samy potenciály jsou nefyzikální, tj. neměřitelné veličiny. Jejich integrály však mají fyzikální důsledky v topologicky netriviálních mnohonásobně souvislých oblastech. Stejně tak i  $\Psi$  je nepozorovatelné, ale  $|\Psi|^2$  již ano.

Nyní budeme rozebírat pouze případ statického magnetického pole. Mějme tenký a nekonečně dlouhý solenoid s rotační osou totožnou s osou  $z$ , jímž protéká elektrický proud, vytvářející magnetické pole uvnitř solenoidu.

Vně solenoidu bude magnetické pole  $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$  rovno nule, nikoliv však potenciál  $\mathbf{A}$ .

Potenciál  $\mathbf{A}$  kolem osy solenoidu má nenulovou jedinou složku, a to azimutální složku  $A_\varphi$ , zatímco radiální a  $z$ -tové složky jsou nulové.

Nabitá částice obíhající kolem solenoidu po dráze  $\Gamma$ , se tedy nachází v místech, kde silové působení od solenoidu je rovno nule.

Pohyb částice v elektromagnetickém poli potenciálu  $\mathbf{A}$  povede ke změně fáze vlnové funkce o určitý fázový faktor  $\delta$ :

$$\delta = \frac{e}{\hbar} \int_1^2 \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}. \quad (7.52)$$

Elektromagnetické kvantové jevy závisejí na dráhových integrálech potenciálů.

Pokud částice oběhne celou uzavřenou dráhu  $\Gamma$ , pak celkový fázový posuv bude

$$\Delta_0 = \frac{e}{\hbar} \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{l}. \quad (7.53)$$

Po oběhu křivky  $\Gamma$  se dostaneme do stejného místa, takže vlnová funkce po oběhu musí splňovat požadavek jednoznačnosti

$$\Psi_{\Gamma} = \Psi_0 e^{i\Delta_0} = \Psi_0, \quad (7.54)$$

odkud

$$e^{i\Delta_0} = 1, \quad (7.55)$$

čili

$$\Delta_0 = \frac{e}{\hbar} \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \, d\mathbf{l} = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.56)$$

Celkový fázový faktor po oběhu křivky  $\Gamma$  tak bude buď roven nule, nebo celistvému násobku  $2\pi$ .

Poznamenejme, že fázový posuv způsobený potenciálem  $\mathbf{A}$  na neuzavřené dráze není kalibračně invariantní  $\delta' \neq \delta$ , ale celkový posuv na uzavřené dráze již ano, neboť

$$\Delta'_0 = \frac{e}{\hbar} \left( \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \, d\mathbf{l} - \oint_{\Gamma} \nabla\chi \, d\mathbf{l} \right) = \frac{e}{\hbar} \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \, d\mathbf{l} = \Delta_0. \quad (7.57)$$

Vztah ( 7.56 ) můžeme s použitím Stokesovy věty napsat též jako

$$\Delta_0 = \frac{e}{\hbar} \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \, d\mathbf{l} = \frac{e}{\hbar} \oint_S \mathbf{B} \, d\mathbf{S} = 2\pi n, \quad n = 0, 1, 2, \dots \quad (7.58)$$

neboli

$$\Phi = \oint_S \mathbf{B} \, d\mathbf{S} = \frac{2\pi n \hbar}{e} = \frac{n \hbar}{e}. \quad (7.59)$$

kde  $\Phi$  je magnetický indukční tok.

Formule ( 7.59 ) vyjadřuje podmínku **kvantování magnetického toku** a platí pro všechny ekvivalentní křivky  $\Gamma$ , nestažitelné do bodu.

Solenoid nám představuje vzhledem ke křivkám dvojnásobně souvislou oblast.

Kdybychom měli křivku  $\Gamma$  v jednoduše souvislé oblasti, obdrželi bychom výraz

$$\oint_{\Gamma} \mathbf{A} \, d\mathbf{l} = \oint_S \mathbf{B} \, d\mathbf{S}, \quad (7.60)$$

jehož hodnota není kvantována a může se pro  $S = 0$  rovnat i nule. V dvojnásobně souvislých oblastech však bude magnetický tok vždy kvantován a pro jeho elementární kvantum  $\Phi_0$  (tzv. fluxon) bude platit

$$\Phi_0 = \frac{\hbar}{e}. \quad (7.61)$$

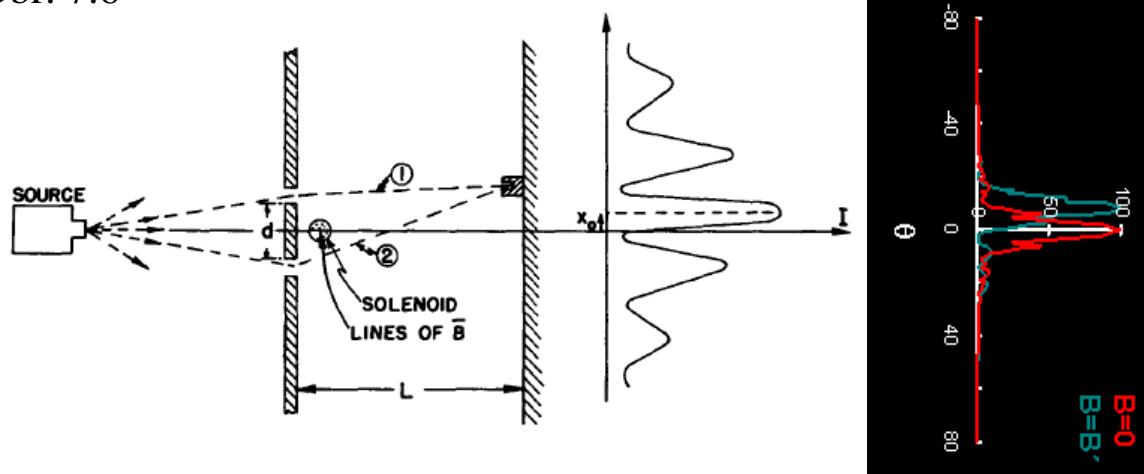
Aharonovův – Bohmův jev nám tedy ukázal, že v mnohonásobně souvislé oblasti platí vztah pro kvantování magnetického toku, a to i tehdy, pokud na částici nepůsobí žádná silová pole  $\mathbf{E}$  a  $\mathbf{B}$ .

Tento jev zřetelně ukazuje na kalibrační původ elektromagnetismu.

Je to skutečně paradoxní neklasický jev **nesilového a nelokálního působení**, kdy magnetické pole, v našem případě soustředěné v ose solenoidu, ovlivňuje chování elektronů vně solenoidu, aniž by se jich „dotklo“, jak by vyžadovala Lorenzova síla.

My však již víme, že tak činí skrze ovlivňování fáze jejich vlnové funkce.

Obr. 7.6



Všechny doposud známé interakce – gravitační, elektromagnetická, slabá, a silná – jsou v kvantové teorii zprostředkovány výměnou částic bosonového charakteru.

Odpudivé i přitažlivé síly mezi částicemi jsou způsobeny výměnou kvant příslušného pole mezi částicemi.

Tato kvanta jsou vždy virtuální, tj. existují jen po určitou dobu během níž se díky relacím neurčitosti

$$\Delta E \Delta t \geq \hbar \quad (7.62)$$

nezachovává energii.

Neurčitost v energii  $\Delta E$  může existovat jen po dobu

$$\Delta t \approx \frac{\hbar}{\Delta E}. \quad (7.63)$$

Za tuto dobu může částice proběhnout maximálně dráhu

$$l = c \Delta t \approx \frac{\hbar c}{\Delta E} = \frac{\hbar}{mc}, \quad (7.64)$$

což je tzv. **Comptonova délka** určující dosah interakce.

Na této dráze může dle poruchové teorie existovat virtuální kvantum o hmotnosti  $m$ .

Takové interakce, jako gravitační, či elektromagnetická, které jsou zprostředkovány částicemi, jejichž klidová hmotnost je rovna nule, mají dosah interakce  $l \rightarrow \infty$ .

Jinak tomu ovšem bude pro případ interakce slabé a silné. Ty jsou zprostředkovány výměnou hmotných kvant.

Objasnění nenulové hmotnosti těchto kvant se stalo jedním z vrcholů kalibračních teorií.

Mechanismus stvoření hmot si ukážeme nejprve na nejjednodušším případě elektromagnetické interakce.

Z Maxwellovy teorie plyne, že vektorový potenciál je určen klasickou vektorovou rovnicí ( 6.199 ) s řešením

$$\mathbf{A} \sim \exp(i\mathbf{k}\mathbf{r} - i\omega t), \quad (7.65)$$

kde mezi vlnovým vektorem  $\mathbf{k}$  a úhlovou frekvencí  $\omega$  platí vztah

$$\omega^2 = c^2 \mathbf{k}^2 = \frac{c^2 \mathbf{p}^2}{\hbar^2}. \quad (7.66)$$

Pro energii fotonu z ( 2.32 ) dostáváme

$$E = cp = \hbar \omega. \quad (7.67)$$

Chceme-li popsat skalární pole  $\varphi$ , které je kvantováno kvanty s nenulovou klidovou hmotností, musíme použít celý vztah ( 2.32 ). Relativistické vyjádření vztahu mezi  $\omega$  a  $\mathbf{k}$  pro hmotnou částici je tedy jiný, než de Broglieův vztah ( 3.6 ).

Je jím dobře známá Klein – Gordonova relativistická vlnová rovnice ( 6.197 ) pro skalární pole  $\varphi$ .

V roce 1933 zjistili W. Meißner a R.Ochsenfeld, že supravodivé materiály vytlačují magnetickou indukci  $\mathbf{B}$  ze svého vnitřku.



Walther Meißner (1882 – 1974)



Robert Ochsenfeld (1901 – 1993)

Je poněkud kuriózní, že tento jev byl objeven až tak pozdě.

Důvodem byla topologie použitého vzorku.

Při měření vlastností vodiče při nízkých teplotách se používaly totiž z úsporných důvodů vzorky ve tvaru tenkého prstence, namísto plného válce. Přitom se nějak pozapomnělo na fakt, že se jedná o různou topologii. Při snižování teploty tak nedošlo k vypuzení magnetického



pole z celého objemu válce, ale jen z objemu supravodiče tvořícího stěny válce.

Šlo tedy o malou změnu která byla snadno přehlédnuta.

Toto drobné opomenutí způsobilo, že tento důležitý jev byl odhalen až o desítky let později, když Meissner a Ochsenfeld použili pro svůj experiment monokrystal cínu a olova, tedy topologicky jednoduše souvislou oblast.

V případě, že máme vodivý prsteneček při  $T > T_c$  vložený do magnetického pole, pak při poklesu teploty pod  $T_c$  dojde k redistribuci magnetického toku v prstenci.

Z oblasti supravodiče bude magnetický tok vytlačen a při odstranění vnějšího pole se v prstenci zachytí magnetický tok

$$\Phi = \mathbf{B} \mathbf{S}, \quad (7.68)$$

kde  $\mathbf{B}$  je indukce v díře prstence a  $\mathbf{S}$  je plocha, kterou prsteneček obepíná.

Hodnota  $\Phi$  v prstenci musí být kvantována, jak jsme si již ukázali výše. Platí pro ni

$$\Phi = \mathbf{B} \mathbf{S} = n \Phi_0, \quad n = 1, 2, \dots, \quad (7.69)$$

kde

$$\Phi_0 = \frac{h}{q} \quad (7.70)$$

je fluxon a  $q$  je elementární náboj nosičů tzv. stínícího proudu. Ze standardní kvantové mechaniky víme, že proudová hustota vyvolaná částicí hmoty  $m$  s nábojem  $q$  je dána v přítomnosti elektromagnetického pole kalibračně invariantním výrazem

$$\mathbf{j} = \frac{q}{2m} \left[ \Psi^* (-i\hbar \nabla \Psi) + \Psi (-i\hbar \nabla \Psi^*) \right] - \frac{q^2}{m} |\Psi|^2 \mathbf{A}. \quad (7.71)$$

Tento výraz se dá pro vlnovou funkci (7.33)

kde  $\Theta(\mathbf{r}, t)$  je fáze, napsat také jako

$$\mathbf{j} = \frac{q}{2m} |\Psi|^2 (\hbar \nabla \Theta - q \mathbf{A}). \quad (7.72)$$

proudovou hustotu si pak rozložíme na

$$\mathbf{j} = \mathbf{j}_p + \mathbf{j}_d, \quad (7.73)$$

kde první člen odpovídá transportnímu proudu a je úměrný gradientu makroskopické fáze  $\Theta(\mathbf{r}, t)$  kondenzátu supravodivých nosičů

$$\mathbf{j}_s = \frac{q\hbar}{2m} |\Psi|^2 \nabla \Theta, \quad (7.74)$$

jehož časová derivace

$$\frac{\partial}{\partial t} \nabla \Theta \sim \mathbf{E} \quad (7.75)$$

je hnací silou transportního proudu.

Vytvoříme-li ve vzorku gradient fáze, poteče v supravodiči proud.

Bude-li  $\nabla \Theta = \text{konst.}$  bude  $\mathbf{j}_s$  na čase nezávislým proudem.

Druhý člen v (7.72) nám udává stínící diamagnetický proud úměrný potenciálu  $\mathbf{A}$

$$\mathbf{j}_d = -\frac{q^2}{2m} |\Psi|^2 \mathbf{A}. \quad (7.76)$$

Podle Maxwellových rovnic platí, že pro statické magnetické pole

$$\text{rot } \mathbf{B} = \text{rot rot } \mathbf{A} = \text{grad div } \mathbf{A} - \nabla^2 \mathbf{A} = \mu_0 \mathbf{j}. \quad (7.77)$$

Pro vybranou kalibraci  $\text{div } \mathbf{A} = 0$  platí

$$\nabla^2 \mathbf{A} = -\mu_0 \mathbf{j}. \quad (7.78)$$

Srovnáním ( 7.78 ) a ( 7.76 ), dostaneme pro  $\mathbf{j} \equiv \mathbf{j}_d$  rovnici

$$\nabla^2 \mathbf{A} = \frac{\mu_0 q^2}{2m} |\Psi|^2 \mathbf{A} = \lambda_L^2 \mathbf{A} = \frac{\hbar^2}{c^2 M^2} \mathbf{A}. \quad (7.79)$$

kde

$$\lambda_L = \left( \frac{\mu_0 q^2 |\Psi|^2}{2m} \right)^{-\frac{1}{2}} \quad (7.80)$$

je tzv. **Londonova hloubka** vniku magnetického pole do supravodiče, a

$$M = \frac{\hbar}{\lambda_L c} \quad (7.81)$$

bylo interpretováno jako zhmotnění fotonu v prostředí supravodiče.

Hustota supravodivých nosičů náboje  $|\Psi|^2 \approx 10^{28} \text{ m}^{-3}$ .

Vidíme, že statické magnetické pole nevnikne do supravodiče, protože foton, mající ve vakuu hmotnost  $M = 0$ , získá v supravodiči hmotnost  $M \neq 0$ .

Pro typickou hodnotu  $\lambda_L = 10^{-7} \text{ m}$ , činí hmotnost fotonu v supravodiči řádově  $10^{-36} \text{ kg}$ .

Za předpokladu  $\mathbf{B} = \text{rot } \mathbf{A}$ ,  $\text{div } \mathbf{B} = 0$ ,  $\nabla^2 (\text{rot } \mathbf{A}) = \text{rot } (\nabla^2 \mathbf{A})$ , můžeme rovnici ( 7.79 ) přepsat na tvar

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \lambda_L^{-2} \mathbf{B} = \frac{\hbar^2}{c^2 M^2} \mathbf{B}. \quad (7.82)$$

Rovnice ( 7.82 ) je slavnou vektorovou rovnicí vniku statického a hmotného magnetického pole do supravodiče.

V jednorozměrném případě lze rovnici ( 7.82 ) přepsat jako

$$\frac{d^2 B(x)}{dx^2} = \frac{B(x)}{\lambda_L^2}. \quad (7.83)$$

Řešením bude exponenciála

$$B(x) = B(0) \exp\left(-\frac{x}{\lambda_L}\right), \quad (7.84)$$

kde  $B(0) = B$  je vnější magnetické pole.

Hranice mezi normální fází či vakuem a supravodičem tedy není ostrá, alebrž rozmazaná na vzdálenosti  $\lambda_L$ .

Pokud je však vnější magnetické pole dostatečně silné, začne pronikat do nitra supravodiče ve formě tzv. vírových vláken. Každé toto vlákno má normální nesupravodivé jádro, jímž proniká magnetický tok až zhruba do vzdálenosti  $\lambda_L$  od jádra, tvořícího tak v supravodiči topologickou singularitu.

Tok pole jednotlivým vírem je rovný právě jednomu fluxonu  $\Phi_0$ .

Nosiči náboje v supravodiči jsou tzv. **dielektrony**, čili **Cooperovy páry**. Jedná se o bosony tvořené kondenzovaným stavem dvojice elektronů plovoucích volně ve **Fermiho moři**.



Leon Neil Cooper (1930) John Bardeen (1908 – 1991) John Robert Schrieffer (1931)

Tento pár bude mít nejvyšší stabilitu, jestliže vlnové vektory a spiny obou elektronů budou antiparalelní.

Podstatou Cooperova jevu je nestabilita Fermiho moře vzhledem k tvorbě Cooperových párů.

Z kvantové mechaniky víme, že každou interakci si lze znázornit jako výměnu virtuálních bosonů existujících po dobu  $\Delta t$ , která je slučitelná s principem neurčitosti ( 7.62 ).

V případě Cooperova párování jsou oněmi bosony kvazičástice zvané **fonony**.

Fonony se pohybují rychlostí zvuku v daném prostředí, s energií  $\hbar\omega$  a impulsem  $\hbar\mathbf{k}$ .

V této teorii chápeme intenzitu vlnového pole  $u(\mathbf{r}, t)$ , která je závislá na prostorových souřadnicích  $\mathbf{r}$ , jako nekonečnou množinu souřadnic spojitě kvantově-mechanické soustavy.

Jestliže zavedeme zobecněné impulsy odpovídající těmto souřadnicím, a požadujeme, aby pro ně platily obvyklé komutační relace kvantové mechaniky, můžeme důsledně vytvořit kvantovou teorii takovýchto polí.

Jedná se tedy o běžné druhé kvantování, jaké jsme již použili na elektromagnetické pole v 6. kapitole, kdy se souřadnice  $u(\mathbf{r}, t)$  stávají opět operátory, neboť nekomutují s příslušnými zobecněnými impulsy.

V  $\{ \hat{\mathbf{Q}} \}$  reprezentaci se tak stávají operátory i komplexní normální souřadnice  $a_j(\mathbf{k})$ .

Jak je naším zvykem z dřívějška, budeme je značit  $\hat{\mathbf{a}}_j^-(\mathbf{k})$ .

Komplexně sdružené souřadnici  $a_j^*(\mathbf{k})$  odpovídá hermitovskému sdružený operátor  $\hat{\mathbf{a}}_j^+(\mathbf{k})$ .

Snadno ukážeme, že hermitovský oprátor:

$$\hat{\mathbf{a}}_j^+(\mathbf{k})\hat{\mathbf{a}}_j^-(\mathbf{k}) = \hat{\mathbf{N}}_j(\mathbf{k}). \quad ( 7.85 )$$

má všechny vlastnosti operátoru počtu fononů ve stavu  $(j, \mathbf{k})$  a má tudíž vlastní hodnotu  $n_j(\mathbf{k})$ .

Působíme-li operátorem  $\hat{\mathbf{a}}_j^-(\mathbf{k})$  na vlastní funkci operátoru  $\hat{\mathbf{N}}_j(\mathbf{k})$ , dostaneme opět vlastní funkci operátoru  $\hat{\mathbf{N}}_j(\mathbf{k})$ , ale s vlastní hodnotou  $n_j(\mathbf{k}) - 1$ .

$\hat{\mathbf{a}}_j^-(\mathbf{k})$  má tedy vlastnosti anihilačního operátoru.

Analogické úvahy nás přivedou k poznání, že  $\hat{\mathbf{a}}_j^+(\mathbf{k})$  zvyšují vlastní hodnotu operátoru počtu fononů o 1 a mají tedy všechny atributy kreačního operátoru.

Podstatným rysem každého energetického kvanta je jeho úměrnost frekvenci.

Vysokofrekvenční fonony mohou zvyšovat svoji frekvenci jen po relativně velkých skocích.

Pravděpodobnost, že mód s frekvencí  $\omega$  bude vůbec vybuzen je dána Boltzmannovým faktorem

$$w = \exp\left(-\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right). \quad (7.86)$$

A proto módy s  $\hbar\omega \gg k_B T$  budou již zanedbatelně přispívat k celkové energii.

Jak teplota stoupne nad absolutní nulu, bude se zvětšovat počet užitečných módů (těch s  $\hbar\omega \leq k_B T$ ).

Počet přispívajících módů pak bude

$$n(T) \approx \frac{V}{6\pi^2 v^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar}\right)^3, \quad (7.87)$$

odkud obdržíme tzv. Debyeovu teplotu

$$\theta_D = \frac{\hbar\omega}{k_B} = \left(\frac{6\pi^2 n}{V}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar}{k_B} v = \left(\frac{6\pi^2}{a^3}\right)^{\frac{1}{3}} \frac{\hbar}{k_B} v, \quad (7.88)$$

kde  $a$  je mřížková konstanta.



Peter Joseph William Debye (1884 – 1966)

U fononů se tedy jedná se o kolektivní excitace krystalové mřížce, jež mají v mřížce jisté spektrální rozdělení a svůj maximální kmitočet daný vztahem

$$\nu_{\max} = \frac{k_b \theta_D}{h}. \quad (7.89)$$

Vyšší frekvence již nemají smysl, neboť by jejich vlnová délka byla menší, než vzdálenost mezi atomy.

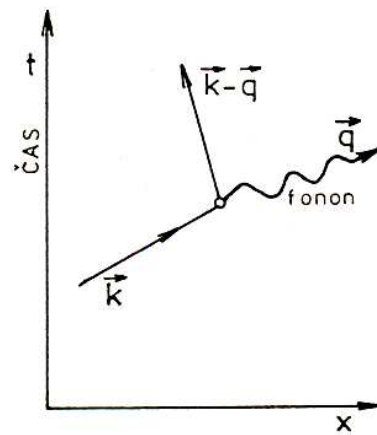
Elektrony si tedy mohou vyměňovat s mřížkou fonony o kmitočtu 0 až  $\nu_{\max}$ .

Na obrázku 7.7 je znázorněn Feynmanův diagram tohoto procesu.

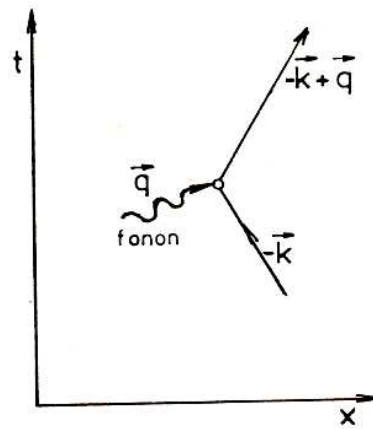
Elektron s vlnovým vektorem  $\mathbf{k}$  vyzáří během své dráhy fonon s vlnovým vektorem  $\mathbf{q}$  a změní svůj vektor na  $\mathbf{k} - \mathbf{q}$ .

Při tomto procesu musí platit zákon zachování hybnosti a energie.

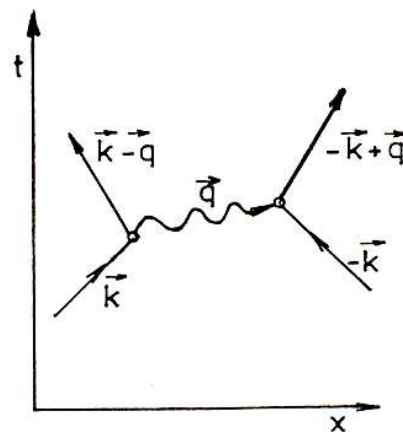
Vyzářený fonon bude poté absorbován dalším elektronem s vlnovým vektorem  $-\mathbf{k}$ .



a) Emise fononu



b) Absorbce fononu

c) Přitažlivá interakce  
v supravodiči

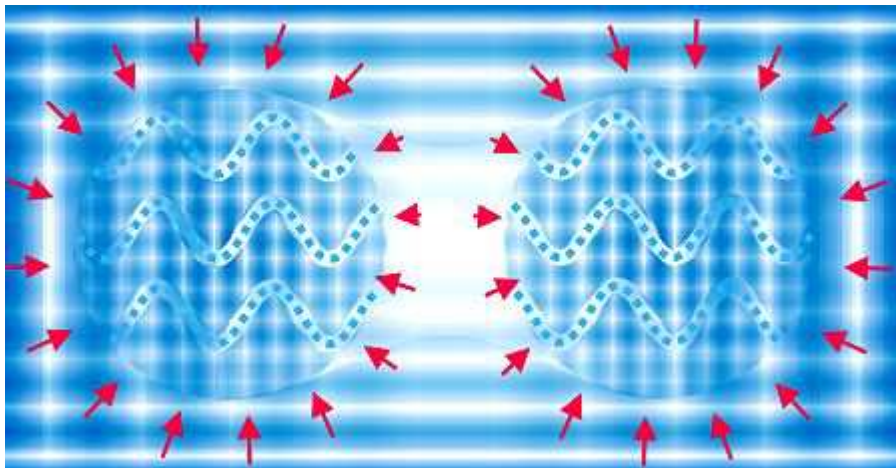
Obr. 7.7.: Feynmanovy diagramy pro emisi (a), absorpci (b) a výměnu fononu  $q$  mezi dvěma elektrony (c) s vlnovými vektory  $(\mathbf{k}, -\mathbf{k})$ . Převládne-li tato přitažlivá interakce (c) nad coulombovskou odpuzivou interakcí v kovové mřížce, vznikne supravodivý stav.



Zatímco ve vakuu, kde žádné fonony nejsou, se elektrony pouze elektrostaticky odpuzují, v krystalové mřížce kovu se mohou i přitahovat.

Je to podobná přitažlivá síla, která působí mezi loďkami na rozvlněné hladině. Když se k sobě přiblíží, vznikne mezi loďkami "stín", který omezuje šíření vln kratších vlnových délek, protože ty nedokáží obě lodi tak dobře "obcházet". V konečném důsledku je mezi loděmi hustota vln nižší a energie okolních vln stlačuje obě lodi k sobě. Staré námořnické příručky dokonce obsahovaly zákaz vplouvání více lodí do přístavu za rozbouřeného počasí současně. Přitažlivá síla by totiž mohla vzrůst při přiblížení lodí natolik, že by se navzájem roztříštily.

Obr. 7.8



Náboj supravodivých nosičů (dielektronů) je tedy ve skutečnosti  $q = 2e$  a jejich hmotnost  $m = 2m_e$ .

Hybnost dielektronů je dána výrazem

$$2m_e \mathbf{v}_s = \hbar \nabla \Theta - 2e \mathbf{A}. \quad (7.90)$$

protože

$$|\Psi|^2 = \rho = \frac{n}{2}, \quad (7.91)$$

bude

$$\mathbf{j} = n_s e \mathbf{v}_s = 2e \rho \mathbf{v}_s = \frac{n_s e \hbar \nabla \Theta}{2m_e} - \frac{en_s 2e \mathbf{A}}{2m_e} = \frac{n_s e (\hbar \nabla \Theta - 2e \mathbf{A})}{2m_e}. \quad (7.92)$$

nyní si zvolme v supravodiči nějakou uzavřenou dráhu  $\Gamma$  Obepínající vírové vlákno, jíž protéká magnetický tok  $\Phi = BS$ , kde  $B$  je magnetická indukce v jádře a  $S$  plocha vymezená křivkou  $\Gamma$ .

Z rovnice ( 7.11 ) plyne,

$$\hbar \nabla \Theta = \left( \frac{2m_e}{n_s e} \right) \mathbf{j} + 2e \mathbf{A}. \quad (7.93)$$

Pak dráhový integrál tohoto kanonického momentu po uzavřené křivce  $\Gamma$  bude

$$\hbar \oint_{\Gamma} \nabla \Theta \, d\mathbf{l} = \hbar \oint_{\Gamma} d\Theta = \oint_{\Gamma} \frac{2m_e}{en_s} \mathbf{j} \, d\mathbf{l} + 2e \oint_{\Gamma} \mathbf{A} \, d\mathbf{l} = nh, \quad (7.94)$$

neboli

$$\Psi_c = \frac{\hbar}{2e} \oint_{\Gamma} \nabla \Theta \, d\mathbf{l} = \frac{nh}{2e} = n\Theta_0. \quad (7.95)$$

výraz ( 7.95 ) se nazývá fluxoid.

Vidíme, že pro fluxoid zavedený vztahem ( 7.95 ) platí:

$$\Theta_0 = \frac{h}{2e}. \quad (7.96)$$

Při oběhu kolem magnetického vírového vlákna se mění fáze vlnové funkce.

Z kvantové mechaniky víme, že fyzikálně pozorovatelné jevy jsou dány pouze bilineární kombinací funkce  $\Psi$  a funkce k ní hermitovsky sdružené  $\Psi^*$ , tj. kvadrátem normy

$$\Psi\Psi^* = |\Psi|^2. \quad (7.97)$$

Nyní ale vidíme, že i samotná vlnová funkce, určující neklasické vlnové chování, bude mít v netriviální topologii pozorovatelné důsledky ekvivalentní Aharonovovu – Bohmovu jevu.

Kvantování fluxoidu nezávisí na křivce  $\Gamma$ , pokud ji můžeme spojitě deformovat v objemu supravodiče na jinou  $\Gamma'$ .

Víme již, že spojitě transformace (homotopie) nemění topologii. V případě magnetického toku to ovšem neplatí, neboť kdybychom křivku  $\Gamma$  deformovali tak, že by ležela v hloubce  $\lambda_L$ , kde existuje magnetické pole a proudy, pak by  $\Phi \neq \Phi_0$  a museli bychom vzít v úvahu i integrál těchto proudů přes křivku  $\Gamma$ , tj. fluxoid.

Přesně se tedy kvantuje fluxoid, nikoliv tok.

Odtud název fluxon pro jeho elementární kvantum, které nyní již můžeme spojit se zhmotnělým fotonem magnetického pole po fázovém přechodu z vodiče na supravodič.

Byli jsme tedy svědky toho, kterak se při poklesu teploty pod jistou kritickou hranici rozpadá elektromagnetická interakce na interakci elektrickou, zprostředkovanou i nadále nehmotným fotonem, a interakci magnetickou, zprostředkovanou nyní již zhmotnělou verzí fotonu – fluxonem.

Stálo by tedy za hřích pokusit se náš postup obrátit a položit si otázku, zda by nemohl vésti naopak ke sjednocení některých ze 4 nám dobře známých interakcí.

Jak jsme již naznačili výše, skutečně se toto sjednocení již podařilo u interakce elektromagnetické a slabé.

## Grupy transformací, kalibrační grupy

Pro lepší pochopení některých níže používaných pojmů a označení, typických pro unitární teorie pole, bude užitečné vložit sem krátkou

matematickou vsuvku s nastíněním popisu transformací pomocí teorie grup.

**Grupa** je taková (neprázdná) množina  $G$ , mezi jejímiž prvky je definována **binární operace** " $\bullet$ " přiřazující každým dvěma prvkům  $a, b \in G$  nový prvek

$$c = a \bullet b \in G, \quad (7.98)$$

který je rovněž prvkem  $G$ . Tato binární transformace je **asociativní**:

$$(a \bullet b) \bullet c = a \bullet (b \bullet c), \quad (7.99)$$

má **jednotkový prvek**

$$i \in G: a \bullet i = i \bullet a = a \quad (7.100)$$

pro každý prvek  $a \in G$ , a ke každému prvku  $a \in G$  existuje prvek **inverzní**

$$a^{-1} \in G: a \bullet a^{-1} = a^{-1} \bullet a = i. \quad (7.101)$$

Nejobvyklejším příkladem grupy je množina všech kladných racionálních čísel při obvyklé operaci násobení (" $\bullet$ " = " $\cdot$ "). Jestliže binární operace " $\bullet$ " je **komutativní**, tj.

$$a \bullet b = b \bullet a \quad (7.102)$$

pro každé prvky  $a, b \in G$ , nazývá se  **$G$  Abelova grupa**. Počet prvků  $g$  grupy  $G$  se nazývá *řád grupy*. Jestliže je  $g$  nekonečné, ale spočetné, nazývá se  **$G$  nekonečná diskrétní grupa**.

Pokud prvky grupy tvoří kontinuální množinu, řád grupy již není použitelný. Zato lze do spojitě množiny prvků grupy zavést určité **topologické vlastnosti** definující **varietu** popř. i metriku. Shora zavedenou binární operaci  $c = a \bullet b$ , definující grupu, lze pak zapsat jako funkční vztah

$$c = f(a, b). \quad (7.103)$$

Jestliže všechny tyto grupové operace (indukující zobrazení grupy  $G$  samé na sebe) jsou *spojité*, množina  $G$  tvoří *topologickou grupu*.

Topologická grupa, která je varietou, se nazývá **Lieova grupa**.

Typickým příkladem Lieovy grupy je Eukleidův prostor  $R^n$ . Rovněž množina spojitých transformací tvoří Lieovu grupu. Právě **grupy transformací**, při nichž se zachovávají určité veličiny, hrají důležitou úlohu ve fyzice polí a částic.

**Unitární grupa**  $U(N)$  je definována jako grupa všech transformací

$$x'^\alpha = A^\alpha_\beta x^\beta \quad (\alpha, \beta = 1, 2, \dots, N), \quad (7.104)$$

která zachovává invarianci unitární délky vektoru

$$|x| = x^{*\alpha} x_\alpha, \quad (7.105)$$

tj. pro transformační matici platí vztah

$$A^{*\alpha}_\beta A^\beta_\alpha = 1 \quad (7.106)$$

(hvězdička\* značí složku komplexně sdruženou). Platí-li další omezení  $\det \mathbf{A} = 1$ , jedná se o tzv. **unimodulární podgrupu**  $SU(N)$  grupy  $U(N)$ .

## Přehled grup

Mezi obvyklé symboly pro grupy patří:

- $S_n$ , grupa všech permutací  $n$ -prvkové množiny (má  $n!$  prvků).
- $A_n$ , její normální podgrupa všech sudých permutací (má  $\frac{n!}{2}$  prvků pro  $n > 1$ ).
- $\Delta_n$ , podgrupa  $S_n$ , grupa všech symetrií pravidelného  $n$ -úhelníka ( $2n$  prvků).
- nám již známé aditivní komutativní grupy  $Z, Z_n$ .

To byly grupy **diskrétní** (nespojité) a v prvních třech případech konečné. Další položky budou grupy Lieovy:

**$GL, SL, O, SO, U, SU \dots$**  ( 7.107 )

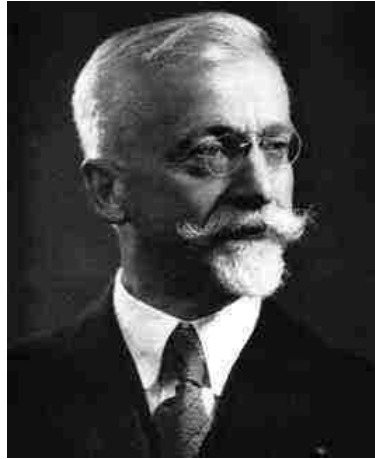
**$GL$**  je grupou všech regulárních matic,  **$SL$**  je podgrupou všech matic s determinanem jedna,  **$O$**  je grupou všech tzv. ortogonálních matic; pojem ortogonální matice můžeme definovat nejméně čtyřmi ekvivalentními způsoby:

- Matice, jejichž řádky mají normu jednotkovou a jsou vzájemně kolmé.
- Matice, pro které platí vztah  $\mathbf{A}^T = \mathbf{A}^{-1}$ . Jinými slovy,  $\mathbf{A}\mathbf{A}^T = \mathbf{1}$  (což je ekvivalentní se vztahem  $\mathbf{A}^T\mathbf{A} = \mathbf{1}$ ). (Tato vlastnost se nejlépe hodí k důkazu uzavřenosti na kompozici a inversi).
- Matice, které zachovávají skalární součin:  $\hat{\mathbf{b}}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \hat{\mathbf{b}}(\mathbf{A}\mathbf{x}, \mathbf{A}\mathbf{y})$ .
- Matice, které zachovávají velikost vektoru.

Konečně, grupou  **$SO$**  rozumíme grupu všech ortogonálních matic, jejichž determinant má hodnotu jedna.

Grupy  **$U$**  a  **$SU$**  tzv. unitárních matic jsou analogiemi grup  **$O$**  a  **$SO$** , užitečnými v komplexních prostorech. Pojem unitární matice lze opět definovat několika ekvivalentními způsoby: unitární matice zachovávají skalární součin v komplexním prostoru a další ekvivalentní podmínky lze formulovat analogicky jako výše.

Cartan ve své disertaci provedl klasifikaci prostých kompaktních spojitých grup a odpovídajících algeber. (Grupě říkáme **kompaktní**, pokud každá posloupnost jejích prvků obsahuje konvergentní podposloupnost; v případě grup matic lze říci, že kompaktní grupy jsou grupy matic, jejichž prvky jsou matice se stejně omezenými složkami a navíc jsou tyto grupy uzavřené jako podmnožiny patřičného vektorového prostoru.



Élie Joseph Cartan (1859 – 1951)

V dalším uvádíme některá základní data o tom, jak mohou obecně vypadat kompaktní grupy matic; uvedené výsledky i (gotická) označení pocházejí od Cartana. Použité indexy označují tzv. **rank** grupy, což je (podobně jako **dimenze** grupy) pojem, který zavedeme podrobněji až v kapitole o Lieových algebrách. Zhruba řečeno, rank grupy udává, kolik vzájemně komutujících a nezávislých kružnic ("kružnicí" rozumíme jednoparametrickou podgrupu) jsme schopni v grupě objevit - zatímco dimenze grupy je číslo, které udává, do kolikadimensionálního euklidovského prostoru jsme schopni danou grupu lokálně vzájemně jednoznačně a hladce zobrazit.

Rank grupy všech otočení v  $E^3$  (tuto grupu dále značíme jako  $SO(3)$ ) je roven jedné, tzn. neexistují dvě různá otočení prostoru podle neidentických os, která by komutovala.

- Algebra  $\mathfrak{A}_l$  a jí odpovídající grupa  $SU(l+1)$  mají dimenzi  $(l+1)^2 - 1$ ; grupa obsahuje všechny **unitární unimodulární** komplexní matice  $\mathbf{A}$  rozměru  $(l+1) \times (l+1)$ , to jest matice, splňující

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^* = 1 \quad , \quad \det \mathbf{A} = 1 \quad (7.108)$$

- Algebra  $\mathfrak{B}_l$  a jí odpovídající grupa  $SO(2l+1, \mathbb{R})$  mají dimenzi  $(2l+1)l$ ; grupa obsahuje reálné matice rozměru  $(2l+1) \times (2l+1)$  splňující

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^T = 1 \quad , \quad \det \mathbf{A} = 1 \quad (7.109)$$

- Algebra  $\mathfrak{C}_l$  a jí odpovídající grupa  $Sp(2l)$  mají dimenzi  $l(2l+1)$ ; grupa obsahuje komplexní unitární **symplektické** matice rozměru  $2l \times 2l$ , tj. matice splňující

$$\mathbf{A}\mathbf{A}^* = 1 \quad , \quad \mathbf{A}\mathbf{K}\mathbf{A}^T = \mathbf{K} \quad (7.110)$$

kde  $\mathbf{K}$  je nějaká regulární antisymetrická matice (antisymetrická matice lichého rozměru je vždy singulární, proto  $2l$ ).

Ani v tomto případě nečiní potíže ukázat, že jde o grupu (konkrétně "unitární grupu nad tělesem kvaternionů"). Na rozdíl od předchozích grup s jasnou geometrickou interpretací jejich prvků, pojem symplektické grupy lze motivovat jen čtenáři s alespoň minimální znalostí analytické mechaniky:

- Algebra  $\mathfrak{D}_l$  a odpovídající grupa  $SO(2l, \mathbb{R})$  mají dimenzi  $(2l-1)l$ .
- Další jsou Cartanovy vyňaté grupy, u nichž uvádíme dimenzi a počet rozměrů fundamentální reprezentace  $E_6$  má komplexní fundamentální reprezentaci a k ní sdruženou, ostatní mají jen reálné reprezentace).
- $\mathfrak{E}_6$  a grupa  $E_6$ , dimenze 78, fund.  $27/\overline{27}$ .
- $\mathfrak{E}_7$  a grupa  $E_7$ , dimenze 133, fund. 56.
- $\mathfrak{E}_8$  a grupa  $E_8$ , dimenze 248, fund. 248. (Fundamentální reprezentace této grupy splývá s přidruženou).
- $\mathfrak{F}_4$  a grupa  $F_4$ , dimenze 52, fund. 26.
- $\mathfrak{G}_2$  a grupa  $G_2$ , dimenze 14, fund. 7. (Jde o grupu symetrií **Oktonionů** jakožto algebry nad  $\mathbb{R}$ , které dostaneme jako ještě



větší "těleso" (dimenze osm) než jsou kvaterniony, nepožadujeme-li u "tělesa" asociativitu násobení.)



**Alfréd Haar (1885 – 1933)**

Nejen kompaktními grupami živa je teorie grup. (Ačkoli kompaktní grupy mají nesporné přednosti; mají "konečný objem", tzn. takzvané invariantní integrování po grupě (**Haarova míra**))

$$\int_{g \in G} f(g) d\mu = \int_{g \in G} f(gh) d\mu = \int_{g \in G} f(hg) d\mu \quad (7.111)$$

Ize normovat na jednotkový integrál z jednotkové funkce, o čemž nemůže být řeči u nekompaktních grup a což např. zaručuje, že každá lineární reprezentace kompaktní grupy se dá rozepsat jako přímý součet nerozložitelných podprostorů.)

- $GL(n, \mathbb{R}/\mathbb{C})$  jsou všechny regulární reálné/komplexní matice  $n \times n$ ; zkratka "general linear". Reálná dimenze je  $n^2$  v reálném případě, dvojnásobná v komplexním.
- $SL(n, \mathbb{R}/\mathbb{C})$  je podgrupa těch, které mají determinant roven jedné (tzv. **unimodulárních**); zkratka "special linear". Reálná dimenze je  $n^2 - 1$  v reálném a dvojnásobná v komplexním případě.
- $O(n, \mathbb{R}/\mathbb{C})$  je grupa všech **ortogonálních** matic  $\mathbf{A}$  (splňujících  $\mathbf{A}^{-1} = \mathbf{A}^T$ ); zkratka "orthogonal". Dimenze je  $n(n - 1)/2$  v reálném a dvojnásobná v komplexním.

- $SO(n, \mathbb{R}/\mathbb{C})$  je průnik  $SL$  a  $O$ ; z toho plyne zkratka. Dimenze je jako u  $O$ . Pro těleso  $\mathbb{R}$  je grupa kompaktní a zajímavější než v komplexním případě, kde je lepší studovat kompaktní grupy unitární (viz dále); neudáme-li tedy těleso, míníme tím  $SO(n, \mathbb{R})$ .
- $Spin(n)$ , což je grupa téměř izomorfní s  $SO(n)$ , ale každému prvku grupy  $SO(n)$  odpovídají dva prvky grupy  $Spin(n)$ , např. jednotkovému prvku  $SO(n)$  přísluší prvky, které nazveme "rotace o  $0^\circ$ " a "rotace o  $360^\circ$ ". V sekci o spinorech ujasníme, proč rozeznáme rotaci o  $2\pi$  od rotace o  $0^\circ$ . Příklad:  $Spin(3)$  je isomorfní  $SU(2)$ .
- Grupa  $U(n)$  všech komplexních **unitárních** matic  $A$  rozměru  $n \times n$ , splňujících  $A^{-1} = A^* \equiv \bar{A}^T$ ; zkratka "unitary". Dimenze je  $n^2$ .
- Grupa  $SU(n)$  všech unitárních unimodulárních matic.
- Grupa  $O(m, n)$  (a odpovídající unimodulární  $SO(m+n)$ ) reálných **pseudoortogonálních** matic  $A$  rozměru  $(m+n) \times (m+n)$ , splňujících

$$A G A^T = G \quad (7.112)$$

kde  $G$  je matice nulová kromě diagonály, na níž leží  $m$  jednotek a  $n$  minus jednotek. Vidíme, že  $SO(m, 0) \equiv SO(m)$ , a také grupa  $SO(m, n)$  má touž dimenzi jako  $SO(m+n)$ . Kupříkladu grupa  $O(3, 1)$  neboli  $O(1, 3)$  je známá **Lorentzova grupa** otočení relativistického časoprostoru, fixující **Minkowského čtverec normy** vektoru  $c^2 t^2 - x^2 - y^2 - z^2$  (za  $c$  si představte jednotku, jak činí i teoretičtí fyzici). Desetirozměrná Lorentzova grupa obohacená o libovolná posunutí nese jméno dalšího relativistického prince: **grupa Poincaré**.

Mnozí se rádi dovědí, že **konformní grupa** obsahuje všechny (i nelineární) transformace zachovávající úhly. (Ve dvou dimenzích je nekonečněrozměrná, zobrazení odpovídají

holomorfním funkcím komplexní proměnné a právě tato skutečnost povyšuje struny nad vícerozměrné objekty.)

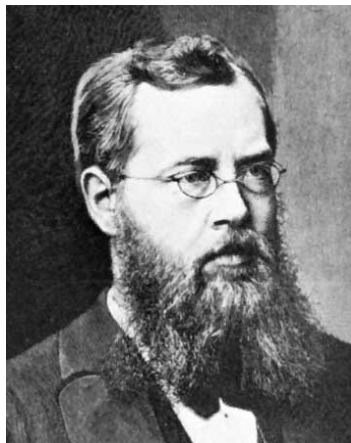
Všimněme si, že i taková grupa  $SO(3, 1)$  je nesouvislá; skládá se ze dvou komponent s maticemi s  $a^4_4 < 0$  resp.  $a^4_4 > 0$  (transformace převracující budoucnost na minulost resp. budoucnost).

Komplexní analogii nemá smysl uvažovat, neboť by vedla ke grupě isomorfní  $SO(m + n, \mathbb{C})$ : matici  $\mathbf{A}$  lze zastoupit podobnou maticí  $\mathbf{B}$  dle vztahu  $\mathbf{A} = \mathbf{C}\mathbf{B}\mathbf{C}^{-1}$ , kde matici  $\mathbf{C}$  získáme z  $\mathbf{G}$  náhradou  $-1$  za  $i$ , takže platí  $\mathbf{C}\mathbf{G}\mathbf{C}^T = 1$  a dosazením za  $\mathbf{A}$  získáme  $\mathbf{B}\mathbf{B}^T = 1$ .

- Zato má smysl uvažovat o grupě  $U(m, n)$  a  $SU(m, n)$  komplexních **pseudounitárních** matic

$$\mathbf{A}\mathbf{G}\mathbf{A}^* = \mathbf{G} \quad (7.113)$$

## Lieova algebra



Marius Sophus Lie (1842 – 1899)

Místo složitých objektů, jakými jsou grupy  $SU(n)$  a další, je možné zkoumat objekty jednodušší, totiž lineární, nezajímáme-li se právě o rozdíly mezi  $O(n, \mathbf{R})$  a  $SO(n, \mathbf{R})$ . Druhá z nich je **souvislá** - lze se

plynule dostat od jednoho jejího prvku ke kterémukoli jinému, první z nich je nesouvislá - skládá se ze dvou oddělených **komponent** (zrcadlící a nezrcadlící transformace).

**Definice:** Lineární prostor  $\mathfrak{g}$ , na němž je definována další bilineární operace  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}]$ , zvaná **komutátor**, splňující vztahy

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = -[\mathbf{B}, \mathbf{A}], \quad [\mathbf{A}, [\mathbf{B}, \mathbf{C}]] + [\mathbf{B}, [\mathbf{C}, \mathbf{A}]] + [\mathbf{C}, [\mathbf{A}, \mathbf{B}]] = 0 \quad (7.114)$$

(druhému se říká **Jacobiho identita**) nazveme **Lieovou algebrou**.

Např. v Lieově algebře matic s komutátorem definovaným jako  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA}$  je splněna (kromě triviálního vztahu  $[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = -[\mathbf{B}, \mathbf{A}]$ ) také Jacobiho identita.

Zkoumejme Lieovu algebru, které říkáme  $\mathfrak{so}_3$ , jejíž prvky píšeme jako antisymetrické matice s obvyklým komutátorem

$$\mathbf{A} = \begin{pmatrix} 0 & -c & b \\ c & 0 & -a \\ -b & a & 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{B} = \begin{pmatrix} 0 & -f & e \\ f & 0 & -d \\ -e & d & 0 \end{pmatrix}. \quad (7.115)$$

Ověřme podrobněji, že

$$[\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} = \begin{pmatrix} 0 & bd - ae & cd - af \\ ae - bd & 0 & ce - bf \\ af - cd & bf - ce & 0 \end{pmatrix} \quad (7.116)$$

Vzpomeneme-li si nyní na definici vektorového součinu  $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ , najdeme zajímavý izomorfismus

$$\left\{ (a, b, c) \mapsto \begin{pmatrix} 0 & -c & b \\ c & 0 & -a \\ -b & a & 0 \end{pmatrix} \right\} : (\mathbb{R}^3, +, \times) \rightarrow (\mathfrak{so}_3, +, [, ]). \quad (7.117)$$

Je vidět role dimenze ( 7.116 ) na hladký průběh. Lze samozřejmě mluvit i kupř. o šestiřozměrném prostoru antisymetrických matic  $4 \times 4$ , ale přeci jen již nebude izomorfní  $\mathbf{R}^4$  ( $4 \neq 6$ ). V řeči funkcionální analýzy je možné dát doslovný smysl komutátoru dvou matic i

vektorovému součinu vektoru nabra  $\left( \frac{\partial}{\partial x}, \frac{\partial}{\partial y}, \frac{\partial}{\partial z} \right)$  s vektorem

$\mathbf{v} = (\mathbf{v}_x, \mathbf{v}_y, \mathbf{v}_z)$ , čemuž říkáme **rotace vektoru**, pouze však s použitím nekonečnědimenzionálních prostorů.

Podívejme se na pár dalších příkladů Lieových algeber a začněme přemýšlet o jejich vazbách na stejnojmenné Lieovy grupy.

- $\mathfrak{gl}(n, \mathbf{R}/\mathbf{C})$  = reálné/komplexní matice  $n \times n$
- $\mathfrak{sl}(n, \mathbf{R}/\mathbf{C}) = \{ \mathbf{A} \in \mathfrak{gl} \mid \text{Tr } \mathbf{A} = 0 \}$
- $\mathfrak{o}(n, \mathbf{R}/\mathbf{C}) = \mathfrak{so}(n, \mathbf{R}/\mathbf{C}) = \{ \mathbf{A} \in \mathfrak{gl} \mid \mathbf{A} = -\mathbf{A}^\top \}$
- $\mathfrak{u}(n) = \{ \mathbf{A} \in \mathfrak{gl}(\mathbf{C}) \mid \mathbf{A} = -\mathbf{A}^* \}$
- $\mathfrak{su}(n) = \mathfrak{sl}(n, \mathbf{C}) \cap \mathfrak{u}(n)$
- $\mathfrak{spin}(n) = \{ \mathbf{A} \in \mathfrak{u}(n) \mid \mathbf{A}\mathbf{k} = (\mathbf{A}\mathbf{k})^\top \}$  v případě sudého  $n$ ;  $\mathbf{k}$  je zde nějaká antisymetrická regulární matice  $n \times n$
- $\mathfrak{so}(m, n) = \{ \mathbf{A} \in \mathfrak{gl}(m+n, \mathbf{R}) \mid \mathbf{A}\mathbf{G} = -(\mathbf{A}\mathbf{G})^\top \}$ ,  $\mathbf{G}$  je diagonální matice obsahující  $m$  jednotek a  $n$  minus jednotek

**Věta:** Uvedené lineární prostory jsou uzavřené na operaci komutování.

**Důkaz:** přesvědčme se, že platí např. implikace

$$\mathbf{A} = -\mathbf{A}^\top, \quad \mathbf{B} = -\mathbf{B}^\top \Rightarrow [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{A}\mathbf{B} - \mathbf{B}\mathbf{A} = -[\mathbf{A}, \mathbf{B}]^\top. \quad (7.118)$$

**Pojem:** Necht'  $G$  je grupa matic. **Infinitesimálním generátorem** grupy  $G$  nazveme množinu  $\mathfrak{g} = \mathfrak{L}(G)$  matic  $\mathbf{A}$ , pro něž

$$\{ \exp t\mathbf{A} \mid t \in \mathbb{R} \} \subset G. \quad (7.119)$$

**Poznámka:** V pokročilejších kursech geometrie se  $\mathfrak{g}$  obvykle definuje abstraktněji jako tečný prostor ke  $G$  v  $\mathbf{1}$  v prostoru všech matic: prvky grupy, které mají infinitesimálně blízko k jednotkové matici, se dají napsat jako ( $\mathfrak{g}_i$  je báze generátoru)

$$1 + \sum_i g_i \cdot d\lambda^i . \quad (7.120)$$

Infinitesimální generátor grupy matic  $G$  je Lieova algebra (a v uváděných případech právě ta stejnojmenná, psaná švabachem) a že lze navíc dobře vyložit roli komutátoru.

**Důkaz pro obecnou grupu:** Je třeba ukázat dvě zásadní věci: uzavřenost na sčítání a komutování.

- $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathfrak{g} \Rightarrow \mathbf{A} + \mathbf{B} \in \mathfrak{g}$  (není triviální!)
- $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathfrak{g} \Rightarrow [\mathbf{A}, \mathbf{B}] = \mathbf{AB} - \mathbf{BA} \in \mathfrak{g}$

1. Zkoumejme výrazy typu ( $N \rightarrow \infty$ )

$$\left( \exp \frac{t\mathbf{A}}{N} \cdot \exp \frac{t\mathbf{B}}{N} \right)^N = \left( 1 + t \frac{\mathbf{A} + \mathbf{B}}{N} + o \frac{1}{N} \right)^N \rightarrow \exp [t(\mathbf{A} + \mathbf{B})] \quad (7.121)$$

a uvědomme si, že  $\{ \exp t(\mathbf{A} + \mathbf{B}) \mid t \in \mathbb{R} \}$  tedy je podgrupa  $G$ , poněvadž pro každé  $t$  jde exponenciála aproximovat s libovolnou přesností (pomocí dostatečně velkého  $N$ ) součinem prvků typu  $\exp \frac{t\mathbf{A}}{N}$ , které leží (přesně) v  $G$  a předpokládáme cosi jako uzavřenost grupy v obvyklé topologii dané např. metrikou  $d(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \sup_{i,j} |a_j^i - b_j^i|$ .

2. Podívejme se na výrazy typu ( $N \rightarrow \infty$ )

$$\begin{aligned} & \left( \exp \frac{\sqrt{t}\mathbf{A}}{N} \cdot \exp \frac{\sqrt{t}\mathbf{B}}{N} \cdot \exp \frac{-\sqrt{t}\mathbf{A}}{N} \cdot \exp \frac{-\sqrt{t}\mathbf{B}}{N} \right)^{N^2} = \\ & = \left( 1 + \frac{t}{N^2} [\mathbf{A}, \mathbf{B}] + \mathfrak{o} \left( \frac{1}{N^2} \right) \right)^{N^2} \rightarrow \exp(t[\mathbf{A}, \mathbf{B}]). \end{aligned} \quad (7.122)$$

Lze tedy opět  $\exp(t[\mathbf{A}, \mathbf{B}])$  vyjádřit s jakoukoliv přesností pomocí součinu prvků z  $\mathbf{G}$ ; pokud je  $t < 0$ , stačí vyměnit písmena  $\mathbf{A}$  a  $\mathbf{B}$  nalevo.

Ilustrujme si to na příkladě algebry  $\mathfrak{so}_3$ : otočíme-li systém o malý úhel  $\alpha$  kolem osy  $x$ , poté o malý úhel  $\beta$  kolem osy  $y$  a pak zpět, ovšem v tomtéž pořadí (nejprve o  $-\alpha$  kolem  $x$  a pak o  $-\beta$  kolem  $y$ ), systém se nám otočí o malinký úhel  $\alpha\beta$  (až na konvenční znaménko) kolem osy  $z$ .

**Souvislost algeber se stejnojmennými grupami:** Abychom ukázali, v jakém smyslu Lieovy algebry odpovídají grupám stejného jména, předefinujme infinitesimální generátor grupy matic  $\mathbf{G}$  jako množinu všech možných  $\dot{\mathbf{A}}(0)$ , kde pro  $t \in \mathbf{R}$  je  $\mathbf{A}(t) \in \mathbf{G}$ , tj.  $\mathbf{A}(t)$  je diferencovatelná křivka po grupě, a  $\mathbf{A}(0) = \mathbf{1}$ . Ekvivalence plyne z toho, že za tuto křivku lze vždy zvolit  $\mathbf{A}(t) = \exp(t\dot{\mathbf{A}}(0))$ .

Tak například, křivka  $\mathbf{A}(t)$  po grupě  $\mathbf{SO}(n)$  matic splňujících  $\mathbf{A}(t)\mathbf{A}(t)^\top = \mathbf{1}$  po zderivování a dosazení  $t = 0$  dá

$$\dot{\mathbf{A}}(0)\mathbf{A}^\top(0) + \mathbf{A}(0)\dot{\mathbf{A}}^\top(0) = \dot{\mathbf{A}}(0) + \dot{\mathbf{A}}^\top(0) = \mathbf{0} \quad (7.123)$$

tj. nutnou podmínku antisymetrie  $\dot{\mathbf{A}}(0)$ , která je zároveň postačující.

$$\mathbf{B} = -\mathbf{B}^\top \Rightarrow \exp \mathbf{B} = \exp(-\mathbf{B}^\top) = \exp(\mathbf{B}^\top)^{-1} = \left[ (\exp \mathbf{B})^\top \right]^{-1}. \quad (7.124)$$

Zderivováním kritérií pro členství v dalších Lieových grupách získáme rovnice stejnojmenných Lieových algeber. Připomeňme si kupř. též následující vzorec, s nímž jsme se v pozměněných tvarech již setkali.

$$\frac{d}{dt} \det \mathbf{A} \Big|_{t=0} = \text{Tr } \dot{\mathbf{A}}(0) . \quad (7.125)$$

Mějme lineární prostor  $\mathfrak{gl}(n)$  všech matic  $n \times n$ . Přírozený izomorfismus do  $\mathbf{E}^{n^2}$  dává následující předpisy pro skalární součin dvou matic:

$$\mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \sum a^i_j b^i_j , \quad (7.126)$$

$$\mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \text{Tr } \mathbf{A} \mathbf{B}^T .$$

Z tohoto druhého vyjádření pro  $\mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B})$  vidíme některé význačné vlastnosti takto zavedeného skalárního součinu, např. vztahy

$$\mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \mathbf{b}(\mathbf{O} \mathbf{A}, \mathbf{O} \mathbf{B}) = \mathbf{b}(\mathbf{A} \mathbf{O}, \mathbf{B} \mathbf{O}) , \quad (7.127)$$

pro libovolnou ortogonální matici  $\mathbf{O}$  plynoucí z cykličnosti stopy. Tento vztah říká, že metrika

$$\rho(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \|\mathbf{A} - \mathbf{B}\| , \quad (7.128)$$

kde  $\|\mathbf{A}\|^2 = \mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{A})$  je invariantní vůči grupě  $\mathbf{O}(n)$ . Chápeme-li ji jako metriku na grupě  $\mathbf{O}(n) \subseteq \mathfrak{g}(n)$ , nazývá se Killingovou metrikou.

A co je Killingova forma na Lieově algebře?

Ta je opět, v konkrétním příkladě  $\mathfrak{o}(n)$ , dána vztahem

$$\mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = -\text{Tr } \mathbf{A} \mathbf{B} . \quad (7.129)$$

Nezapomeňme, že  $\mathbf{A}^T = -\mathbf{A}$  platí pro všechny  $\mathbf{A} \in \mathfrak{o}(n)$ .

Ukazuje se, že nejde o jen tak ledajaký skalární součin na  $\mathfrak{o}(n)$  (máme ho koneckonců stále na celém  $\mathfrak{g}(n)$ ), neboť tento skalární součin na  $\mathfrak{o}(n)$



"respektuje navíc strukturu Lieovy algebry" ve smyslu následujících tvrzení (které jsou ekvivalentní):

**Tvrzení 1:** Pro všechna  $\mathbf{X} \in \mathfrak{o}(n)$  a všechna  $\mathbf{A}, \mathbf{B} \in \mathfrak{o}(n)$  platí

$$\mathbf{b}([\mathbf{X}, \mathbf{A}], \mathbf{B}) + \mathbf{b}(\mathbf{A}, [\mathbf{X}, \mathbf{B}]) = 0 . \quad (7.130)$$

Říkáme, že Killingova forma je antisymetrická vůči operaci komutování s  $\mathbf{X}$ ; uvedená rovnost se ostatně bere za základ definice Killingovy formy i v případě obecné Lieovy algebry.

**Tvrzení 2:** Zobrazení

$$\mathbf{A} \mapsto \exp(-\mathbf{X}) \mathbf{A} \exp \mathbf{X} : \mathfrak{o}(n) \rightarrow \mathfrak{o}(n) \quad (7.131)$$

je izometrie pro každé  $\mathbf{X} \in \mathfrak{o}(n)$ .

Tvrzení 1 se dokáže prostým dosazením za  $\mathbf{b}(\overrightarrow{\dots}, \overrightarrow{\dots})$  i za komutátor a využitím toho, že  $\mathbf{A}^T = -\mathbf{A}$  apod.).

**Pojmy analogické grupě:** Lieovu algebru  $\mathfrak{g}$  nazýváme **komutativní**, pokud  $\forall x, y \in \mathfrak{g} : [x, y] = 0$  a taková algebra odpovídá komutativní grupě.

**Centrum** algebry Lieovy je (analogicky centru grupy) množina  $\mathbf{Z}(\mathfrak{g})$  těch prvků  $s \in \mathfrak{g}$ , že  $\forall t \in \mathfrak{g} : [s, t] = 0$ , tj. komutují se všemi prvky algebry.

**Lieovou podalgebrou** nazýváme (analogicky podgrupě) podprostor  $\mathfrak{g}$  uzavřený na komutování. Máme dokonce analogii normální podgrupy - říká se mu **ideál** Lieovy algebry a je to podprostor  $I$  takový, že  $\forall i \in I; \forall j \in \mathfrak{g} : [i, j] \in I$ . Elementárním příkladem ideálu je centrum algebry; jiným důležitým příkladem je **komutant** dané Lieovy algebry,

což je množina všech prvků tvaru  $[x, y]$ ,  $x, y \in \mathfrak{g}$ . Ideál je to proto, že  $[[x, y], j]$  opět leží v komutantu, neboť je tvaru komutátoru dvou prvků.

Zavedené pojmy mimo jiné implikují, že pokud je  $H$  normální podgrupou grupy  $G$ , pak je  $\mathfrak{L}(H)$  ideálem v  $\mathfrak{L}(G)$ . Jestliže je  $G$  souvislá, pak

$$\mathfrak{L}(\mathbb{Z}(G)) = \mathbb{Z}(\mathfrak{L}(G)) . \quad (7.132)$$

Pro dvě grupy  $G_1, G_2$  je infinitesimálním generátorem jejich direktního součinu direktní součet jejich infinitesimálních generátorů, kde prvky  $\mathfrak{L}(G_1)$  komutují s prvky z  $\mathfrak{L}(G_2)$ , a tak jsou  $\mathfrak{L}(G_i)$  ideály v  $\mathfrak{L}(G_1 \times G_2)$

$$\mathfrak{L}(G_1 \times G_2) = \mathfrak{L}(G_1) \oplus \mathfrak{L}(G_2) . \quad (7.133)$$

Nechť  $\mathbf{A}$  označuje jedno z klasických těles  $\mathbf{R}, \mathbf{C}$  nebo  $\mathbf{H}$  (kvaterniony) a  $G$  je nějaká grupa. Pak **lineární reprezentací** grupy  $G$  nazýváme konečněrozměrný lineární prostor  $\mathbf{V}$  nad tělesem  $\mathbf{A}$ , na němž je pro každý prvek  $g \in G$  definována (stejně značená) funkce, splňující

- $\mathbf{1}_G \mathbf{v} = \mathbf{v}$  a  $g(g' \mathbf{v}) = (gg') \mathbf{v}$
- $g \mathbf{v}$  je  $\mathbf{A}$ -lineární funkce  $\mathbf{v}$
- $g \mathbf{v}$  je spojitá funkce  $g$  a  $\mathbf{v}$

Jinými slovy, je zadán morfismus grup

$$\theta = \theta_{\mathbf{v}} : G \rightarrow \text{Aut } \mathbf{V} . \quad (7.134)$$

Vybereme-li bázi ve  $\mathbf{V}$ , lze si představit, že  $\theta$  nabývá hodnot v  $GL(n, \mathbf{A})$ . V tomto případě mluvíme o **maticové reprezentaci**.

Píšeme-li v případě kvaternionů matice vlevo od  $\mathbf{v}$ , je rozumné mít ve  $\mathbf{V}$  násobení skalárem zprava ( $\mathbf{V}$  je pak **pravý modul** nad  $\mathbf{H}$ ). Naštěstí lze ale definovat i násobení skalárem zleva (pruh musíme přidat na to, aby platilo  $q(q' \mathbf{v}) = (qq') \mathbf{v}$ )

$$q\mathbf{v} = \mathbf{v}\bar{q} \quad (7.135)$$

a tak lze levý modul převrátit na pravý a naopak. Využijeme toho, že  $\overline{qq'} = \overline{q'q}$ , kde  $\bar{q}$  je obvyklé sdružení kvaternionu

$$\overline{\alpha + \beta i + \gamma j + \delta k} = \alpha - \beta i - \gamma j - \delta k . \quad (7.136)$$

Máme-li reprezentace  $\mathbf{V}_i$ , lze generovat složitější reprezentace ve tvaru direktního součtu dvou (či více) prostorů, na nichž grupa účinkuje podle

$$g(\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2) = (g\mathbf{v}_1, g\mathbf{v}_2) \quad (7.137)$$

a podobně lze získat reprezentaci ve formě tenzorového (resp. symetrizovaného resp. antisymetrizovaného) součinu dvou prostorů, na který grupa účinkuje dle pravidla

$$g(\mathbf{v}_1 \otimes \mathbf{v}_2) = (g\mathbf{v}_1 \otimes g\mathbf{v}_2) . \quad (7.138)$$

Zde nejde o nic jiného, než jak se transformují spinory - resp. tenzory - s více indexy. Ale také lze získat reprezentaci na duálním prostoru  $\mathbf{V}'$  podle vzorce (zde zase jde o transformaci tenzorů/spinorů s indexy dole/nahoře)

$$[g(\mathbf{v}')] \mathbf{w} = \mathbf{v}' \circ g^{-1} \mathbf{w} . \quad (7.139)$$

**Strukturní zobrazení:** Nyní se podíváme, proč stačí pracovat s komplexními reprezentacemi. Reálnou reprezentaci  $\mathbf{R}^n$  lze převést na komplexní  $\mathbf{C}^n$ , přičemž působení grupy je podle přirozené formule ( $\mathbf{v}, \mathbf{w} \in \mathbf{R}^n$ )

$$g(\mathbf{v} + i\mathbf{w}) = g(\mathbf{v}) + ig(\mathbf{w}) . \quad (7.140)$$

Zdá se, že se ale o cosi okrádáme. Již "malý" prostor  $\mathbf{R}^n$  byl uzavřen na působení grupy a my jsme ho zbytečně zvětšili. Naučtujeme si to tak, že předpokládáme existenci **strukturního zobrazení**  $j : \mathbf{C}^n \rightarrow \mathbf{C}^n$  (v následujícím vzorci jsou  $\mathbf{v}, \mathbf{w}$  reálné vektory)

$$j : (\mathbf{v} + i\mathbf{w}) \mapsto (\mathbf{v} - i\mathbf{w}), \quad (7.141)$$

kteřé komutuje s působením grupy ( $g(j\mathbf{v}) = j(g\mathbf{v})$ ), je antilineární ( $j(z\mathbf{v}) = \bar{z} \cdot j(\mathbf{v})$ ,  $j(\mathbf{v} + \mathbf{w}) = j(\mathbf{v}) + j(\mathbf{w})$ ) a jeho druhá mocnina je plus minus identický operátor (v tomto případě plus) ( $j(j\mathbf{v}) = \pm \mathbf{v}$ , zkráceně  $j^2 = \pm 1$ ), což jsou tři vlastnosti, definující strukturní zobrazení.

Naopak, máme-li komplexní reprezentaci se strukturním zobrazením  $j$ , rekonstruujeme reálnou reprezentaci rozkladem komplexního prostoru  $\mathbf{C}^n$  považovaného za  $\mathbf{R}^{2n}$  na dva podprostory, odpovídající vlastním číslům 1 resp. -1 (operátor, splňující  $j^2 = 1$ , jiná vlastní čísla nemá).

Obdobně lze převést kvaternionickou reprezentaci  $\mathbf{H}^m$  na komplexní  $\mathbf{C}^{2m}$ ; kvaternionický vektor budeme psát jako  $\mathbf{v} + j\mathbf{w}$ , kde  $\mathbf{v}$  a  $\mathbf{w}$  jsou komplexní vektory.

I nyní se o cosi okrádáme: prostor jsme sice zbytečně nezvětšili, ale původní reprezentace byla  $\mathbf{H}$ -lineární, zatímco nová je jenom  $\mathbf{C}$ -lineární.  $\mathbf{H}$ -linearitu si zrekonstruujeme tak, že předpokládáme existenci strukturního zobrazení ( $\mathbf{v}$ ,  $\mathbf{w}$  jsou zde komplexní vektory)

$$j(\mathbf{v} + j\mathbf{w}) = -\bar{\mathbf{w}} + j\bar{\mathbf{v}}. \quad (7.142)$$

Lehce ověříte antilinearitu, komutování s působením grupy (zobrazení  $j$  je vlastně násobení  $j$  - shoda písmen čistě náhodná - zprava, což komutovalo s  $G$  díky  $\mathbf{H}$ -linearitě) a rovnost  $j^2 = -1$ .

Naopak lze zpětně zrekonstruovat reprezentaci  $\mathbf{H}^n$  z dané  $\mathbf{C}^{2n}$ , která připouští strukturní zobrazení s  $j^2 = -1$ .

Reprezentace, která je direktním součtem dvou prostorů (reprezentací)  $\mathbf{V}$ ,  $\mathbf{W}$ , disponujících strukturními zobrazeními se stejnými  $j_V^2 = j_W^2$ , připouští strukturní zobrazení  $j_V \oplus j_W$  se stejným  $j^2$ .

Tenzorový součin dvou reprezentací  $\mathbf{V} \otimes \mathbf{W}$  (může jít i o (anti)symetrisovaný) se strukturními zobrazeními  $j_V, j_W$  toleruje strukturní zobrazení  $j = j_V \oplus j_W$  se znakem  $j^2 = j_V^2 j_W^2$ .

Ukážeme si jednoduchý příklad. Grupa  $SU(2) = Spin(2)$  má fundamentální reprezentaci kvaternionickou (jde nakonec o grupu "jednotkových" kvaternionů (s jednotkovou normou)), kterou si představíme jako dvousložkové komplexní spinvektory  $\mathbf{s}_A$ ,  $A = 0, 1$ , mající strukturní zobrazení s  $j^2 = -1$ . Symetrizovaný tenzorový součin, obsahující dvouindexové spinory  $\mathbf{s}_{AB} = \mathbf{s}_{BA}$ , bude tedy disponovat strukturním zobrazením s  $j^2 = +1$ , tedy budeme moci požadovat podmínky reálnosti (invariantní vůči působení grupy)

$$\mathbf{s}_{00} = -\overline{\mathbf{s}_{11}}, \quad \mathbf{s}_{01}, \mathbf{s}_{10} \in \mathbb{R}. \quad (7.143)$$

Není se čemu divit, spinor  $\mathbf{s}_{AB}$ , který svážeme maximálními podmínkami (symetrie a uvedená samodružnost), je informačně totožný s (trojrozměrným) vektorem. Proto se částicím se spinem rovným jedné říká **vektorové**.

$$\mathbf{s}_{01} = z = \mathbf{s}_{10}, \quad \mathbf{s}_{11} = x + iy, \quad \mathbf{s}_{00} = -(x - iy). \quad (7.144)$$

Co možná nejstručněji vážené čtenáře přesvědčíme (dále s tímto budeme pracovat v sekci o spinorech), že algebry  $\mathfrak{so}(3, \mathbb{R})$  a  $\mathfrak{su}(2)$  jsou izomorfní, a to tak, že napíšeme prvky jejich bází a tiše vás vyzveme k verifikaci níže napsaných komutačních relací pro obě sady matic.

V případě struktury "algebra Lieova" požadujeme po izomorfismu  $\varphi$  zajisté i zachování komutátoru, tj.

$$\varphi([\mathbf{A}, \mathbf{B}]) = [\varphi(\mathbf{A}), \varphi(\mathbf{B})]. \quad (7.145)$$

Postačí zkontrolovat komutátory matic tvořících bázi, jako kombinace kterých lze prvek dané Lieovy algebry zapsat.

$$\begin{aligned}
\mathbf{S}_1^{SO(3)} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{S}_1^{SU(2)} &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{i}{2} \\ \frac{i}{2} & 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{S}_2^{SO(3)} &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{S}_2^{SU(2)} &= \begin{pmatrix} 0 & -\frac{1}{2} \\ \frac{1}{2} & 0 \end{pmatrix}, \\
\mathbf{S}_3^{SO(3)} &= \begin{pmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \mathbf{S}_3^{SU(2)} &= \begin{pmatrix} -\frac{i}{2} & 0 \\ 0 & \frac{i}{2} \end{pmatrix},
\end{aligned} \tag{7.146}$$

$$[\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2] = \mathbf{S}_3, \quad [\mathbf{S}_2, \mathbf{S}_3] = \mathbf{S}_1, \quad [\mathbf{S}_3, \mathbf{S}_1] = \mathbf{S}_2. \tag{7.147}$$

Z podobných důvodů jsou izomorfní i algebry  $\mathfrak{so}(1,3)$  a  $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{C})$ ,  $\mathfrak{sl}(2, \mathbf{R})$  a  $\mathfrak{su}(1,1)$ , ale také třeba  $\mathfrak{so}(6)$  a  $\mathfrak{su}(4)$ . Dalšími příklady jsou  $\mathfrak{so}(4)$  a  $\mathfrak{su}(2) \oplus \mathfrak{su}(2)$  nebo  $\mathfrak{so}(5)$  a  $\mathfrak{spin}(2 \cdot 2)$ .

Fundamentální reprezentace grupy  $Spin(n)$  je

- jedna samodružná o dimenzi  $2^k$  pro  $n = 2k+1$  (liché  $n$ ); je reálná, je-li  $[(k+1)/2]$  sudé, jinak je kvaternionická
- dvě komplexní vzájemně sdružené s dimenzí  $2^{k-1}$  pro  $n = 2k$ ,  $k$  liché
- dvě samodružné navzájem neekvivalentní, každá o dimenzi  $2^{k-1}$  pro  $n = 2k$ ,  $k$  sudé; je-li  $k$  násobkem čtyř, jsou reálné, jinak jsou kvaternionické

Tab. 7.1

$SO(n): n$	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Spinorové reprezentace	$2c$	$1q$	$2q$	$1q$	$2c$	$1r$	$2r$	$1r$	$2c$
Dimenze každé	1	2	2	4	4	8	8	16	16

Na tyto skutečnosti můžeme sami přijít, z definice grupy  $Spin(n)$ .

**Spinorová grupa:** Chceme získat Lieovu algebru izomorfní  $\mathfrak{so}(n)$ , jejíž grupa ale obsahuje (vzájemně rozlišitelné) prvky "rotace o 0" a "rotace o  $2\pi$ ". Algebra  $\mathfrak{so}(n)$  je lineárním obalem antisymetrických matic  $\mathbf{e}_{ij} = -\mathbf{e}_{ji}$ , které mají jednotku na místě  $(i, j)$  a minus jednotku na  $(j, i)$ , a tak splňují komutační relace

$$[\mathbf{e}_{ij}, \mathbf{e}_{kl}] = \delta_{jk} \mathbf{e}_{il} - \delta_{jl} \mathbf{e}_{ik} + \delta_{il} \mathbf{e}_{jk} - \delta_{ik} \mathbf{e}_{jl} . \quad (7.148)$$

Není těžké nahlédnout, že tytéž komutační relace budou mít i matice  $\mathbf{E}_{ij}$ , které získáme jako

$$\mathbf{E}_{ij} = \frac{1}{4} (\mathbf{E}_i \mathbf{E}_j - \mathbf{E}_j \mathbf{E}_i) , \quad (7.149)$$

pokud matice  $\mathbf{E}_i$  budou navzájem antikomutovat a čtvercem každé z nich bude jednotková matice (budou tedy Diracovými  $\gamma$ -maticemi pro eukleidovský prostor)

$$\mathbf{E}_i \mathbf{E}_j + \mathbf{E}_j \mathbf{E}_i = 2\delta_{ij} \mathbf{1} . \quad (7.150)$$

Takové matice opravdu umíme najít; budou např. tenzorovými součiny  $[n/2]$  **Pauliho matic** rozměru  $2 \times 2$ , tedy maticemi rozměru  $2^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor} \times 2^{\lfloor \frac{n}{2} \rfloor}$

$$\boldsymbol{\sigma}_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{\sigma}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} . \quad (7.151)$$

Společně s Pauliho maticemi budou i tyto jejich tenzorové součiny hermitovské (ve všech ortonormálních bázích), z čehož je zřejmá i antihermitovost  $\mathbf{E}_{ij}$ . Explicitně lze psát

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{2i-1} &= (\sigma_z)^{\otimes(i-1)} \otimes \sigma_x \otimes (\mathbf{1}_2)^{\otimes\left(\left[\frac{n}{2}\right]-i\right)}, \\
\mathbf{E}_{2i} &= (\sigma_z)^{\otimes(i-1)} \otimes \sigma_y \otimes (\mathbf{1}_2)^{\otimes\left(\left[\frac{n}{2}\right]-i\right)}, \\
\mathbf{E}_{2m+1} &= (\sigma_z)^{\otimes m}, \quad n = 2m + 1,
\end{aligned} \tag{7.152}$$

kde značí  $[x]$  celou část  $x$ ,  $\mathbf{1}_2$  jednotkovou matici  $2 \times 2$ . Zároveň vidíme, že jsme získali, co jsme chtěli, protože pro generátory  $\mathbf{e}_{ij}$  grupy  $SO(n)$  bylo nejmenší kladné číslo  $t$ , pro které

$$\exp(t\mathbf{e}_{ij}) = \mathbf{1} \tag{7.153}$$

rovno  $2\pi$ ; u matic  $\mathbf{E}_{ij}$  je to  $4\pi$  (tedy až rotací o  $4\pi$  dostaneme jednotkový prvek grupy).

Pro lepší názornost si lze operátory  $\mathbf{E}_k$  představit jako kombinace kreačních  $\mathbf{b}_k^+$  a anihilačních  $\mathbf{b}_k^-$  operátorů ( $k = 1, \dots, l$  pro  $Spin(2l - 1)$  - pak přehledně  $\mathbf{E}_{2k}$  pro  $k = l$  - a  $Spin(2l)$ )

$$\begin{aligned}
\mathbf{E}_{2k-1} &= (\mathbf{b}_k^- + \mathbf{b}_k^+), \\
\mathbf{E}_{2k} &= i(\mathbf{b}_k^- - \mathbf{b}_k^+).
\end{aligned} \tag{7.154}$$

Lehce zkontrolujeme rovnost

$$\{\mathbf{E}_j, \mathbf{E}_k\} = 2\delta_{jk}. \tag{7.155}$$

Operátory  $\mathbf{E}_{ij}$  pak převádějí bosonové stavy na bosonové a fermionové na fermionové (bosonovým míníme stav, vzniklý působením sudého počtu operátorů na vakuum). U  $Spin(2l - 1)$  jsou pak bosonové a fermionové prostory ekvivalentní, protože je lze na sebe převádět právě tím "přehlednutým" operátorem  $\mathbf{E}_{2l}$ , který komutuje se všemi  $\mathbf{E}_{ij}$  pro  $\{i, j\} \subseteq \{1, 2, \dots, 2l - 1\}$  a tak má grupa  $Spin(2l - 1)$  jen jednu fundamentální reprezentaci o dimenzi  $2^{l-1}$ .



Jistě sami najdete details o strukturních zobrazeních, pomocí nichž určíme reálnost, komplexnost nebo kvaternionovost reprezentace grupy  $Spin(n)$ . Jde o antilineární zobrazení, které například prvku báze  $\mathbf{b}_1^+ \mathbf{b}_3^+ | \mathbf{0} \rangle$  přiřadí stav  $\mathbf{b}_2^+ \mathbf{b}_4^+ \mathbf{b}_5^+ \mathbf{b}_6^+ | \mathbf{0} \rangle$  (např. pro  $n = 12$ ), ve kterém jsou obsazeny právě ty hladiny, které nebyly obsazeny ve vzoru. Vidíme, že v případě lichého počtu hladin - pro  $Spin(2l)$  s lichým  $l$ , tímto vyrobíme fermionový stav z bosonového či naopak, čili nedostaneme strukturní zobrazení uvnitř např. bosonového prostoru, ale jen důkaz, že bosonový a fermionový prostor tvoří vzájemně komplexně sdružené reprezentace (musíte si určit konzistentně znaménko).

Operátor chiralita je součinem všech  $\mathbf{E}$  matic (u lichého  $n$ , kde nehraje chiralita takovou roli, neboť je jen jedna spinorová reprezentace, je konvencí, zda vše ještě vynásobíme  $\mathbf{E}_{n+1}$ );

$$\bar{\gamma} = i^{[n/2]} \mathbf{E}_1 \mathbf{E}_2 \dots \mathbf{E}_n . \quad (7.156)$$

Mocninu imaginární jednotky jsme napsali proto, aby bylo  $\bar{\gamma}$  hermitovské a jeho čtvercem byl jednotkový operátor; aby tedy měl vlastní čísla  $\pm 1$ .

V Lieově algebře, příslušné dané kompaktní Lieově grupě  $\mathbf{G}$  nyní zavedeme skalární součin, invariantní vůči transformacím grupy. Chceme, aby skalární součin dvou matic algebry byl invariantní vůči transformacím grupy v tzv. **přidružené reprezentaci**, což je reprezentace, která jakožto prostor splývá s algebrou Lieovou (její dimenze je tedy rovna dimenzi grupy; matice z ní značíme  $\mathbf{A}$ ,  $\mathbf{B}$ , ...) a prvek grupy  $\mathbf{G}$  na ní účinkuje podle

$$\mathbf{G} : \mathbf{A} \mapsto G[\mathbf{A}] = \mathbf{G} \mathbf{A} \mathbf{G}^{-1} . \quad (7.157)$$

Zkontrolujme, že  $(GH)[\mathbf{A}] = G[H[\mathbf{A}]]$ . Invariance znamená požadavek, aby

$$\forall \mathbf{A}, \mathbf{B}, \quad \forall \mathbf{H}: \quad \mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \mathbf{b}(H[\mathbf{A}], H[\mathbf{B}]) . \quad (7.158)$$

Pomocí invariantní integrace lze takový skalární součin získat z libovolného (neinvariantního) skalárního součinu  $s$  "ustředněním přes grupu"

$$\mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B}) = \int_{\mathbf{G} \in \mathbf{G}} s(\mathbf{G}[\mathbf{A}], \mathbf{G}[\mathbf{B}]) . \quad (7.159)$$

Pak zjevně platí (první "rovná-se" je oprávněné díky invarianci integrace vůči substituci  $\mathbf{GH} \rightarrow \mathbf{G}$ )

$$\begin{aligned} \mathbf{b}(H[\mathbf{A}], H[\mathbf{B}]) &\equiv \int_{\mathbf{G} \in \mathbf{G}} s(\mathbf{GHAH}^{-1}\mathbf{G}^{-1}, \mathbf{GHBH}^{-1}\mathbf{G}^{-1}) = \\ &= \int_{\mathbf{G} \in \mathbf{G}} s(\mathbf{GAG}^{-1}, \mathbf{GBG}^{-1}) = \mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{B}). \end{aligned} \quad (7.160)$$

Abychom řekli něco konkrétního o způsobu invariantní integrace: zapíšeme-li matici  $\mathbf{R} \in \mathbf{SU}(2)$  ve tvaru

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \cos \gamma \cdot \exp(i\alpha) & \sin \gamma \cdot \exp(i\beta) \\ -\sin \gamma \cdot \exp(-i\beta) & \cos \gamma \cdot \exp(-i\alpha) \end{pmatrix}, \quad (7.161)$$

kde meze  $\alpha, \beta, \gamma$  jsou zřejmé z integrálu níže, lze invariantní integraci napsat jako

$$\int_{\mathbb{R} \in \mathbf{SU}(2)} = \frac{1}{4\pi^2} \int_0^{\pi/2} d\gamma \cdot \sin(2\gamma) \int_0^{2\pi} d\alpha \int_0^{2\pi} d\beta . \quad (7.162)$$

Co se týče jednoznačnosti invariantního skalárního součinu: lze ho vždy násobit nějakou konstantou, ale pro prosté grupy je jinak určen jednoznačně. Opravdu, kdybychom měli dva skalární součiny  $b_1, b_2$ , mohli bychom vzít (také invariantní) kombinaci

$$b = b_1 - \lambda b_2 \quad (7.163)$$

s nejmenším možným kladným  $\lambda$ , při němž všechny  $\mathbf{b}(\mathbf{A}, \mathbf{A})$  jsou ještě nezáporné, ale už pro některé nenulové  $\mathbf{A}$  jsou nulové. Pak by množina takových matic (s nulovou normou) tvořila ideál.

Dále zvolíme torus  $\mathbf{T} \subseteq \mathbf{G}$ , to jest maximální podgrupu izomorfní (Abelově)  $U(\mathbf{1})^l$  (někdy značenou jako  $\mathbf{T}^l$ , kde  $\mathbf{T} = \frac{\mathbb{R}}{\mathbb{Z}}$  je grupa intervalu  $\langle 0,1 \rangle$  se sčítáním "modulo jedna"). Mnohé věty nás ujišťují o tom, že příliš nezáleží na tom, který maximální torus vybereme. Jeho  $l$  nazýváme **rankem** dané grupy.

**Příklad:** V grupě  $SO(2l)$  a  $SO(2l + 1)$  lze vybrat maximální torus  $\mathbf{T}^l$  všech matic  $\mathbf{t}$  s  $l$  bloky na diagonále ( $i = 1, \dots, l$ )

$$\begin{pmatrix} \cos 2\pi x_i & -\sin 2\pi x_i \\ \sin 2\pi x_i & \cos 2\pi x_i \end{pmatrix} \quad (7.164)$$

(v případě  $SO(2l + 1)$  doplníme do pravého dolního rohu jednotku). Podobně v grupě  $SU(l + 1)$  umístíme na diagonálu čísla

$$\exp(2\pi x_i), \quad (7.165)$$

kde  $\sum x_i = 0$  (aby byl jednotkový determinant, neprostou grupou  $U(l)$  se zde nazabýváme). Infinitesimálním generátorem maximálního toru je prostor  $\mathbb{R}^l$ . V našich příkladech obsahuje matice, které mají na diagonále bloky

$$\begin{pmatrix} 0 & -x_i \\ x_i & 0 \end{pmatrix} \quad (7.166)$$

pro případ  $SO$  (u  $SO(2l + 1)$  umístíme do pravého dolního rohu nulu) a nebo čísla

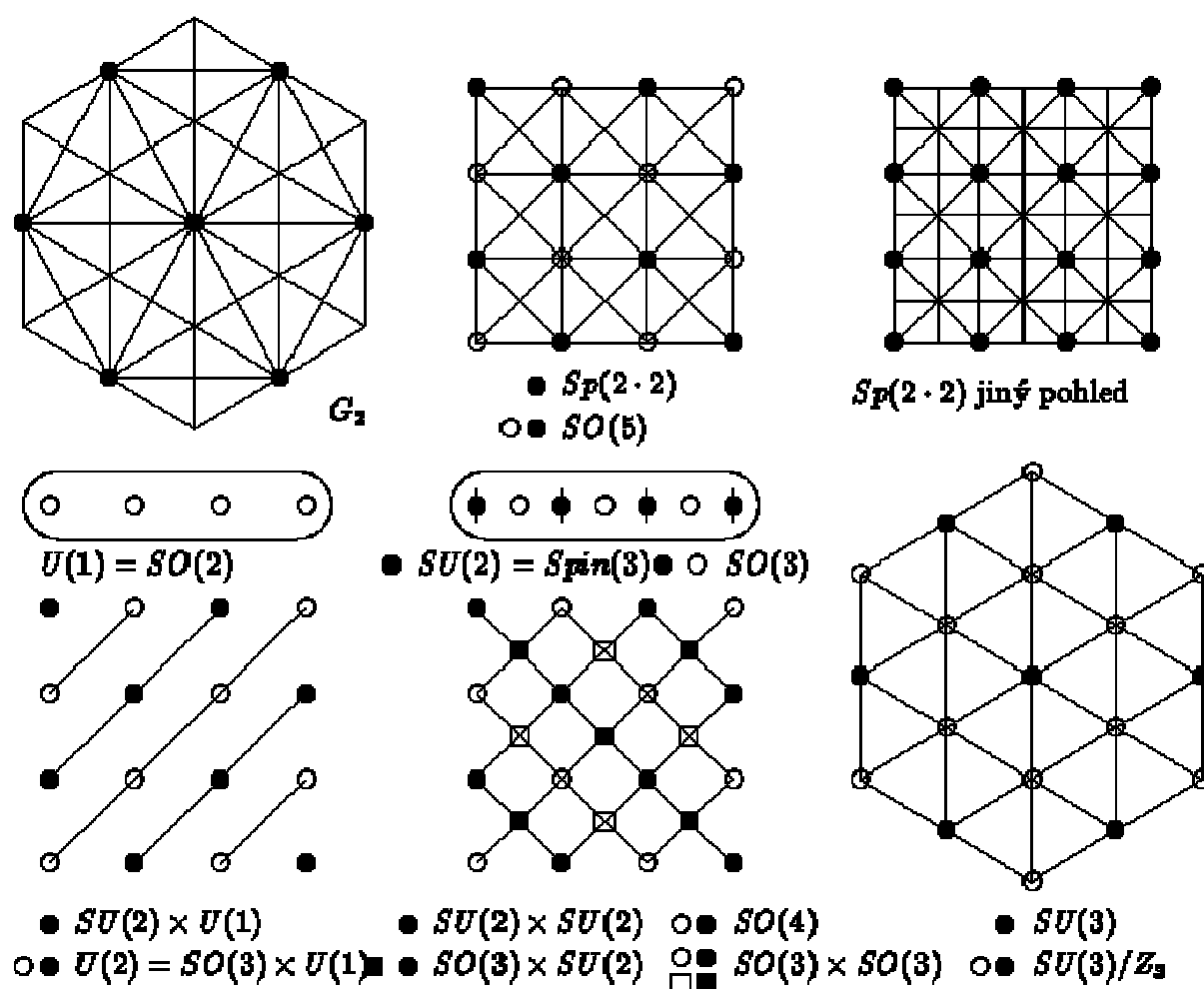
$$ix_i \quad (7.167)$$

v případě  $SU(l + 1)$ .  $\mathbf{T}$  je podgrupou  $\mathbf{G}$  a invariantní skalární součin z  $\mathfrak{g}$  lze zúžit na  $\mathfrak{t}$ .

**Stiefelovy diagramy** kreslíme do  $l$ -rozměrného prostoru, kde jsou souřadnice  $x_1, \dots, x_l$  zavedeny v souladu s tímto skalárním součinem a kolečky (resp. čtverečky) jsou vyznačeny prvky Lieovy algebry, jimž odpovídá jednotkový prvek  $T$  čili i  $G$ , to jest tzv. **celočíslná mřížka**. V našich příkladech jsou to body, kde jsou všechna  $x_i$  celá.

Na obrázku je celočíselnou mřížkou dané grupy množina všech koleček resp. čtverečků těch typů, které jsou u ní uvedeny. Rank vyznačených grup je 1 nebo 2.

Obr. 7.9



**Kořeny:** Zbývá vysvětlit, co znamenají ony přímky na diagramech. Vtip je v tom, že prvky  $T$  (značíme je zde  $t, u, \dots$ ) působí v přidružené reprezentaci  $\mathfrak{g}$  (algebry celé grupy) tak, že se  $\mathfrak{g}$  rozpadá na direktní součet

$$\mathfrak{g} = \bigoplus_{i=1}^r \mathbf{V}_i \oplus \mathbf{V}_0 \quad (7.168)$$

příčemž na prostoru  $\mathbf{V}_0$  (který splývá s  $\mathfrak{t}$ , je-li  $\mathbf{T}$  opravdu maximální torus) účinkují prvky  $\mathfrak{t}$  triviálně

$$\forall \mathbf{v}_0 \in \mathbf{V}_0 : \mathfrak{t} \mathbf{v}_0 \mathfrak{t}^{-1} = \mathbf{v}_0 \quad (7.169)$$

a  $\mathbf{V}_i$  jsou dvojrozměrné prostory (je jich  $r$ , což je - z důvodů rovnosti dimenzí - polovina rozdílu dimenze grupy a jejího ranku, čili bude dokázáno, že tento rozdíl je sudý) generované maticemi  $\mathbf{M}_i, \mathbf{N}_i$ , na nichž působí  $\mathfrak{t}$  podle

$$\begin{aligned} \mathfrak{t} \mathbf{M}_i \mathfrak{t}^{-1} &= \mathbf{M}_i \cos(2\pi\theta_i) - \mathbf{N}_i \sin(2\pi\theta_i), \\ \mathfrak{t} \mathbf{N}_i \mathfrak{t}^{-1} &= \mathbf{M}_i \sin(2\pi\theta_i) + \mathbf{N}_i \cos(2\pi\theta_i), \end{aligned} \quad (7.170)$$

kde  $\theta_i$  jsou nějaké kombinace  $x_i$  (např.  $x_1 - x_2$ ), to jest nějaké lineární formy na  $\mathfrak{t}$ , a nazýváme je **kořeny** dané grupy.



Eduard L. Stiefel (1909 – 1978)

Vidíme, že pokud např. vyměníme  $\mathbf{M}_i$  a  $\mathbf{N}_i$  (nebo třeba změníme znaménko u jedné z nich), bude poslední vysazená formule dále platná, změníme-li znaménko u  $\theta_i$ . Tedy spolu s  $+\theta_i$  říkáme kořen i formě  $-\theta_i$ .

Ještě výhodnější může být komplexifikovat Lieovu algebru (dosud jsme ji vždy považovali za prostor nad  $\mathbf{R}$ , prvky byly jen reálnými kombinacemi prvků báze, kterými - samozřejmě - mohly být i komplexní matice) a docílit tak, že se nám bude transformovat do sebe jen jedna matice  $\mathbf{Q}_i = \mathbf{M}_i + i\mathbf{N}_i$  resp.  $\mathbf{Q}'_i = \mathbf{M}_i - i\mathbf{N}_i$  místo dvou  $\mathbf{M}_i, \mathbf{N}_i$ :

$$\begin{aligned} \mathbf{tQ}_i\mathbf{t}^{-1} &= \exp(2\pi\theta_i)\mathbf{Q}_i, \\ \mathbf{tQ}'_i\mathbf{t}^{-1} &= \exp(-2\pi\theta_i)\mathbf{Q}'_i. \end{aligned} \quad (7.171)$$

Matice  $\mathbf{Q}_i$  pak prostě odpovídá kořenu  $\theta_i$  a matice  $\mathbf{Q}'_i$  kořenu  $-\theta_i$ .

**Příklady:** Grupa  $SU(2l + 1)$  (stejně jako  $U(l + 1)$ ) má kořeny  $\theta_{rs} = x_r - x_s$ , kde  $r \neq s \in \{1, 2, \dots, l\}$  a jako odpovídající matici  $\mathbf{Q}_{rs}$  si lze představit matici, která má všude nuly kromě pozice  $(r, s)$ , kde má cokoli nenulového. Každý může ověřit, že  $\mathbf{tQ}_{rs}\mathbf{t}^{-1}$  dá to, co má.

Podobně grupa  $SO(2l)$  má kořeny  $x_r - x_s$ , ale navíc má kořeny  $\pm(x_r + x_s)$ ,  $r \neq s$  a grupa  $SO(2l + 1)$  má proti  $SO(2l)$  další kořeny  $\pm x_r$ .

Do Stiefelových diagramů tedy zakreslíme navíc množiny bodů  $\mathbf{u}_i$  (dimenze o jednu menší, než je rank), v nichž kořeny nabývají celých hodnot. Kořeny nabývají celých hodnot na celočíselné mřížce, kde  $\mathbf{t} = \mathbf{1}$ . Obecněji, průnikem soustav rovnoběžných hyperrovin  $\mathbf{u}_i$  jsou body, odpovídající centru grupy.

Přenechme specialistům důkazy toho, že tzv. **Weylova grupa**, to jest grupa všech vnitřních automorfismů  $\mathbf{G}$  fixujících zvolený maximální torus, obsahuje pro každé  $i$  prvek, který ponechává systém hyperrovin  $\mathbf{u}_i$  na místě. Je-li tomu tak, musí jít o zrcadlení podle roviny kolmé na daný kořen (pomocí invariantního skalárního součinu jsme ztotožnili infinitesimální generátor toru s jeho duálem) v obyčejném geometrickém smyslu (podle invariantního skalárního součinu). Takové zrcadlení musí množině všech kořenů přiřadit tutéž množinu. Vyslovme tedy definici.

**Systémem kořenů** v eukleidovském prostoru  $E$  nazýváme konečnou podmnožinu  $\Sigma \subseteq E$  takovou, že

- neobsahuje nulový vektor
- pro  $\alpha \in \Sigma$  je  $c\alpha \in \Sigma$  právě když  $c = \pm 1$
- zrcadlení podle hyperroviny (nadroviny) kolmé na kterýkoli z kořenů převádí  $\Sigma$  na  $\Sigma$
- pro všechny dvojice kořenů  $\alpha, \beta$  je

$$\{\alpha, \beta\} = \frac{2\mathbf{b}(\alpha, \beta)}{\mathbf{b}(\beta, \beta)} \quad (7.172)$$

celé číslo.

Poslední bod je důsledkem toho, že zrcadlení kořenu  $\alpha$  podle roviny kolmé na  $\beta$  má samozřejmě tvar

$$\varphi_{\beta}(\alpha) = \alpha - \frac{2\mathbf{b}(\alpha, \beta)}{\mathbf{b}(\beta, \beta)}\beta, \quad (7.173)$$

Ize vybrat vektor  $\mathbf{v}$ , na němž forma  $\beta$  nabývá jednotky, zjistíme, že  $\varphi_{\beta}(\mathbf{v}) - \mathbf{v}$  náleží celočíselné mřížce (protože  $\varphi_{\beta}$  fixuje  $\mathbf{u}_{\beta}$ ). Z toho dále plyne, že

$$\alpha(\mathbf{v} - \varphi_{\beta}(\mathbf{v})) = \alpha\mathbf{v} - [\varphi_{\beta}(\alpha)](\mathbf{v}) \quad (7.174)$$

je celé (úprava vychází z toho, že při skalárním součinu je jedno, který činitel zrcadlíme), což po dosazení ( $\beta(\mathbf{v}) = 1$ ) dává uvedený výsledek.

Buď jak buď, poslední bod má silný důsledek.

**Věta:** Dva kořeny  $\alpha \neq \pm\beta$  jsou

- (0) buď kolmé
- (1) nebo svírají úhel  $60^\circ$  nebo  $120^\circ$  a mají stejnou normu
- (2) nebo svírají úhel  $45^\circ$  nebo  $135^\circ$  a poměr norem je  $\sqrt{2}$
- (3) nebo svírají úhel  $30^\circ$  nebo  $150^\circ$  a poměr norem je  $\sqrt{3}$

**Důkaz:** Čtyřnásobek kvadrátu kosinu úhlu kořeny sevřený

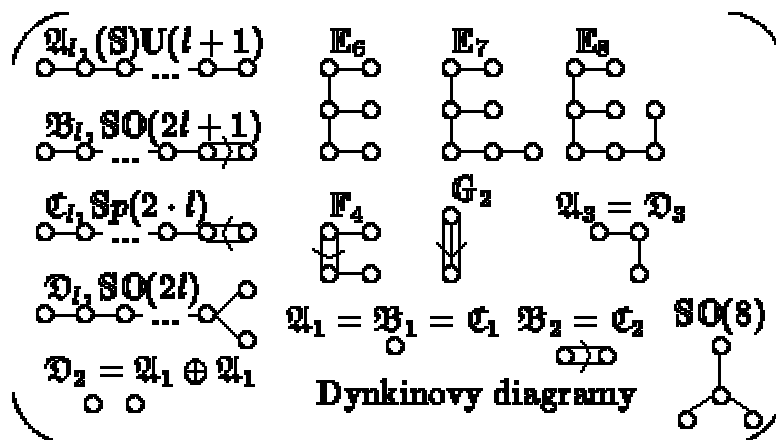
$$4 \cos^2 \omega = \frac{2\mathbf{b}(\alpha, \beta) \cdot 2\mathbf{b}(\beta, \alpha)}{\mathbf{b}(\alpha, \alpha) \cdot \mathbf{b}(\beta, \beta)} \quad (7.175)$$

je menší (díky nezávislosti  $\alpha, \beta$  ostře) než čtyři. Je to ale součin dvou celých čísel, a tak je jedno nulové (případ 0) nebo jedno rovné  $\pm 1$ . Možnosti pak lehce proberete.

Všechny kořeny daného systému lze získat jako celočíselné kombinace (lineárně nezávislých) **prostých kořenů**. Potom tento systém prostých kořenů lze buď rozdělit na sjednocení disjunktních a neprázdných množin kořenů, kde dvojice z různých podmnožin jsou vždy kolmé, a takové nerozložitelné systémy prostých kořenů lze znázornit pomocí **Dynkinova diagramu**. Prosté kořeny v něm spojíme tolika čarami, jaké je číslo varianty jejich vzájemné polohy podle poslední věty. V případech (2) a (3) je ještě slušné přikreslit na spojnici šipku, namířenou ke kratšímu kořenu (jako při obyčejném porovnávání  $<$ ). Pokud se (2) a (3) v Dynkinově diagramu nevyskytuje, mají všechny kořeny stejnou délku a dané algebře říkáme **jednoduše šněrovaná** (simply laced).

Jiné systémy prostých kořenů, než ty s následujícími Dynkinovými diagramy, neexistují a spolu s tím neexistují další prosté kompaktní grupy.

Obr. 7.10





Všimněte si, že na obrázku mají některé Dynkinovy diagramy určité symetrie: permutací různých kořenů dostaneme týž obrázek. Nebudeme to rozebírat, ale je to spojeno s existencí **vnějších automorfismů** dané algebry (vnější je takový, který nelze zapsat jako sdružení nějakým prvkem grupy  $\mathfrak{g}: \mathbf{A} \rightarrow \mathfrak{g}\mathbf{A}\mathfrak{g}^{-1}$ ). S vnějšími automorfismy lze očekávat symetrie mezi reprezentacemi; u grup s Dynkinovými diagramy, které mají symetrie, lze očekávat větší počet fundamentálních reprezentací ( $\mathbf{E}_6$  například nebo  $SU(l+1)$  pro  $l > 1$  má dvě vzájemně komplexně sdružené, symetrie **parity**, vyměňující pravé dva kořeny Dynkinova diagramu, u  $Spin(2l)$  garantuje existenci dvou "vzájemně zrcadlově sdružených" spinorových reprezentací). Grupa  $Spin(8)$  má dokonce symetrii **triality** : lze u ní permutovat tři kořeny a je s tím spojena skutečnost, že dvě reálné spinorové reprezentace (s dvěma různými chiralitami) a reprezentace vektorová mají stejnou dimenzi 8.



Evgenii Borisovič Dynkin (1924)

Naopak, pro každý z uvedených diagramů lze sestavit Lieovu algebru a z ní také kompaktní grupu. Několikrát jsme již diskutovali (a budeme) o tom, že  $SO(3)$  má stejnou algebru jako  $SU(2)$ , která má centrum  $\mathbf{Z}_2$  (plus minus jednotková matice), zatímco  $SO(3)$  má triviální jednoprvkové centrum. Nyní můžeme izomorfnost těchto algeber ukázat na shodnosti Dynkinových diagramů. Maximální centrum (poloprosté, neobsahující  $U(2) \times \dots$ ) grupy s danou algebrou, která lze vytvořit, vystihuje následující tabulka.

Tab. 7.2

$A_l$	$B_l, C_l, E_7$	$D_{2s}$	$D_{2s+1}$	$E_6$	$E_8, F_4, G_2$
$Z_{l+1}$	$Z_2$	$Z_2 \times Z_2$	$Z_4$	$Z_3$	$\{\mathbf{1}\}$

Tak například, grupa  $A_l = \mathbf{SU}(l + 1)$  má centrum  $Z_{l+1}$ .

Jako jednoduché cvičení ponecháváme čtenáři důkaz, že není možné získat grupy  $E_9$  atd., proč mají vyňaté grupy dimenzi, kterou jsme uváděli atd.

Poradíme vám, aby jste si zapsali v nějakých souřadnicích prosté kořeny. Např.

- $A_l$  má prosté kořeny  $x_1 - x_2, x_2 - x_3, \dots$ , kde pracujeme jen s hyperrovinou, kde  $\sum x_i = 0$
- $B_l$  má prosté kořeny  $x_1 - x_2, \dots, x_{l-1} - x_l, x_l$
- $C_l$  má prosté kořeny  $x_1 - x_2, \dots, x_{l-1} - x_l, 2x_l$
- $D_l$  má prosté kořeny  $x_1 - x_2, \dots, x_{l-1} - x_l, x_{l-1} + x_l$

**Váhy:** Kořeny byly speciálními případy vah. Obecně **vahou** máme na mysli lineární formu na Cartanově podalgebře, nabývající celých hodnot na celočíselné mřížce. Zajímavější jsou ale **váhy reprezentace**  $V$  dané algebry. Prvky Cartanovy podalgebry navzájem komutují, a tudíž můžeme hledat jejich společné vlastní vektory ve  $V$  a čísla. Váha dané (mluvíme o komplexní) reprezentace je tedy taková forma, která přiřadí prvku Cartanovy podalgebry jeho vlastní číslo příslušející nějakému vlastnímu vektoru celé podalgebry. Jestliže tedy počítáme každou váhu tolikrát, kolikarozměrný prostor jejich vlastních vektorů jí přísluší, bude vah právě tolik, jaká je dimenze  $V$ .

Kořeny lze tedy chápat jako váhy přidružené reprezentace; těchto vah je tedy tolik, kolik je dimenze dané algebry, ovšem jen proto, že počítáme i  $l$  (rank) nulových vah (vlastními vektory jsou prvky Cartanovy podalgebry), které obvykle za kořeny nepovažujeme.

Tak například grupa  $SO(2l)$  ( $l$  je rank) má v základní  $2l$ -rozměrné vektorové reprezentaci  $2l$  vah  $\pm \mathbf{e}_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, l$ .

**Samoduální mřížky:** Když už jsme došli tak daleko, můžeme si něco říci o vlastnostech mřížek (soustava diskrétních bodů v prostoru  $\mathbf{R}^n$ , zpravidla celočíselné kombinace základních mřížkových vektorů), a to z fyzikálního pohledu v současnosti nejnadějnějšího kandidáta na teorii všeho – heterotické struny.

Kvantová teorie bosonové struny funguje pouze v dimenzi časoprostoru 26, kvantová teorie superstruny jen v dimenzi 10. Navíc vlevojdoucí a vpravojdoucí módy uzavřené struny spolu navzájem komutují a generátory grupy Poincaré jsou součty vlevojdoucí a vpravojdoucí části. Lze pak tedy vzít levý sektor z bosonové struny a pravý ze superstruny. Přebytečných 16 vlevojdoucích bosonových dimenzí lze svinout na torus; aby z bosonových rozměrů zbyla jen vlevojdoucí část, je třeba, aby celková hybnost struny byla rovna celkovému obtáčení (ztotožníme-li body, které se liší o celočíselné kombinace mřížkových vektorů, je možné, aby při objíždění uzavřené struny jsme popojeli o nějakou takovou kombinaci - to nazýváme obtáčením). Aby vůbec existovaly nějaké stavy s nenulovou celkovou hybností ve směru svinutých souřadnic (což je nutné k dobrému chování interakcí), je třeba, aby **duální mřížka** (všech forem, nabývajících celých hodnot na původní mřížce) měla s původní společné body (při ztotožnění původního prostoru s duálem). Dokonce je dobré předpokládat, aby splývaly, to jest aby byla **mřížka samoduální**. Navíc se budeme zabývat jen **sudými** samoduálními mřížkami, kde čtverec délky každého jejího vektoru je sudý.

Je matematickou pravdou, že sudé samoduální mřížky existují jen v prostorech o dimenzi, která je násobkem osmi. Tak třeba v osmi rozměrech máme samoduální mřížku  $\Gamma_8$  všech celočíselných kombinací kořenů vyňaté grupy  $\mathbf{E}_8$ . Těmi jsou ( $i, j = 1, 2, \dots, 8$ )

$$\pm \mathbf{e}_i \pm \mathbf{e}_j, \quad i \neq j, \quad \frac{1}{2}(\pm \mathbf{e}_1 \pm \mathbf{e}_2 \dots \pm \mathbf{e}_8), \quad (7.176)$$

kde v druhém tvaru kořenů bereme jen ty se sudým počtem plusů. Lehce napočítáte, že je jich celkem  $112 + 128 = 240$  právě  $248 - 8$ , čili dimenze minus rank. Formy  $\mathbf{v}$  nabývající celých hodnot na všech těchto kořenech jsou pak kombinacemi těchto kořenů (ortonormální bázi  $\mathbf{e}_i$  ztotožňujeme s bázi k ní duální):

Lehce totiž ukážete, že souřadnice  $\mathbf{v}$  jsou buď všechny celé nebo všechny polocelé. Celočíslnost formy  $\mathbf{v}$  na  $\mathbf{r}_0 = \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \dots, \frac{1}{2}\right)$  pak říká,

že suma souřadnic  $\mathbf{v}$  musí být sudá, a tak je  $\mathbf{v}$  celočíselnou lineární kombinací  $\mathbf{e}_i \pm \mathbf{e}_j$  (v případě, že souřadnice  $\mathbf{v}$  jsou celé), a nebo toto platí pro  $\mathbf{v} - \mathbf{r}_0$ , čímž jsme ukázali, že i  $\mathbf{v}$  leží v  $\Gamma_8$ , neboli samodualitu  $\Gamma_8$ .

Samozřejmě lze vybrat osm základních mřížkových vektorů, jejichž celočíselnými kombinacemi jsou všechny ostatní, např.

$$\begin{aligned} & \mathbf{e}_1 - \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_2 - \mathbf{e}_3, \mathbf{e}_3 - \mathbf{e}_4, \mathbf{e}_4 - \mathbf{e}_5, \mathbf{e}_5 - \mathbf{e}_6, \mathbf{e}_6 - \mathbf{e}_7, \\ & \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_4 + \mathbf{e}_5 + \mathbf{e}_6 - \mathbf{e}_7 - \mathbf{e}_8), \quad (7.177) \\ & \frac{1}{2}(\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3 + \mathbf{e}_4 - \mathbf{e}_5 - \mathbf{e}_6 - \mathbf{e}_7 - \mathbf{e}_8). \end{aligned}$$

V šestnácti rozměrech najdeme kartézský součin  $\Gamma_8 \times \Gamma_8$  dvou kopií  $\Gamma_8$  a mřížku  $\Gamma_{16}$ , která obsahuje jako podmřížku kořenovou mřížku  $SO(32)$ . Jde o všechny celočíselné kombinace vektorů ( $i, j = 1, 2, \dots, 16$ )

$$\pm \mathbf{e}_i \pm \mathbf{e}_j, \quad i \neq j, \quad \frac{1}{2}(\pm \mathbf{e}_1 \pm \mathbf{e}_2 \dots \pm \mathbf{e}_{16}), \quad (7.178)$$

kde v druhé sadě je sudý počet plusů. Důkaz samoduality probíhá stejně jako u  $\Gamma_8$  a i zde je možné vybrat 16 základních mřížkových vektorů.

To jsou důvody, proč promýšlíme teorii heterotické struny jen

s kalibrační grupou  $\frac{Spin(32)}{\mathbb{Z}_2}$  (odpovídající mřížce  $\Gamma_{16}$ ) nebo

(zajímavější) grupou  $\mathbf{E}_8 \times \mathbf{E}_8$  (s mřížkou  $\Gamma_8 \times \Gamma_8$ ).

## Symetrie

### Grupy ve fyzice

Ve fyzice našly grupy své první uplatnění v krystalografii, kde se pomocí nich vyjadřují vlastnosti symetrie krystalové mřížky pevných látek. V relativistické fyzice se poprvé grupy objevily již v práci H.Poincaré, který ukázal, že transformace prostorových a časových souřadnic mezi inerciálními vztažnými soustavami (které nazval Lorentzovy) tvoří (Lieovu) grupu; tato grupa obecných Lorentzových transformací (nehomogenních, včetně translací) se nazývá **Poincarého grupa**. Při dalším rozvoji speciální a zvláště obecné teorie relativity se však s použitím grup můžeme setkat jen ojediněle a okrajově. Teorie grup se od konce 20. a začátku 30.let začala více uplatňovat v kvantové mechanice při analýze víceelektronových konfigurací atomů a v kvantové chemii.

### *Grupy unitární symetrie*

Nové obzory pro aplikaci grup se od 40. a 50. let otevřely v jaderné fyzice při popisu vlastností **elementárních částic**. Velký počet elementárních částic, které byly objeveny při vysokoenergetických interakcích, přirozeně vedl ke snahám o jejich **systematiku** a zavedení **unitarizačních schémat**. Především, každému baryonu a leptonu je přiřazeno **baryonové číslo B** a **leptonové číslo L** (částice +1, antičástice -1), které se zachovávají při všech interakcích. Byly zjištěny výrazné **podobnosti** a **symetrie** mezi některými elementárními částicemi, především hadrony.

Odhlédneme-li od elektrického náboje, lze např. protony a neutrony považovat za dva stavy (dublet) jedné částice - nukleonu. Podobně piony  $\pi^+, \pi^0, \pi^-$  tvoří triplet podobných částic. Při studiu samotných silných interakcí, které jsou nábojově nezávislé, můžeme od náboje odhlédnout. Pro popis těchto podobností a symetrií byla zavedena nová veličina **izotopický spin** neboli **izospin T**. Nukleony mají izospin  $T = 1/2$ , přičemž projekce izospinu  $T = +1/2$  odpovídá protonu a  $T = -1/2$  neutronu. Pionům se připsal izospin  $T = 1$ , s projekcemi -1,0,+1 pro  $\pi^-, \pi^0, \pi^+$ . V soustavě interagujících nukleonů a pionů pak

platí zákon zachování izospinu. Pro vyjádření těchto symetrií vznikla grupa  $SU(2)$  – speciální, unitární (unimodulární) grupa v komplexním 2-rozměrném prostoru; tato grupa je lokálně izomorfní grupě rotací  $O(3)$  v 3-prostoru, vyjadřující izotropii prostoru – symetrii vůči prostorovým rotacím, vedoucí k zákonu zachování momentu hybnosti. Vyšlo se z formální analogie s obyčejným spinem, kde částice se spinem  $1/2$  se vyskytuje ve dvou stavech s průmětem spinu  $-1/2, +1/2$  a částice se spinem  $1$  ve třech stavech s průměty spinu  $-1, 0, +1$ . Izospin  $T$  je vektorem v myšleném (pomocném) "izotopickém prostoru". Obecně částice s izospinem  $T$  se může vyskytovat v  $(2T + 1)$  stavech s projekcemi izospinu na vztažnou osu:

$$-T, (-T + 1), (-T + 2), \dots, -1, 0, 1, \dots, (T - 2), (T - 1), T. \quad (8.1)$$

Dalším důležitým krokem byl objev některých "podivných" (nečekaných) vlastností interakcí mesonů  $K$  a hyperonů při jejich sdružené párové produkci, které vedly k zavedení pojmu **podivnosti**, popsaného kvantovým číslem  $S$  ("Strange"). Později bylo zavedeno obecnější kvantové číslo zvané **hypernáboj**  $Y = B + S$ , dané součtem baryonového čísla  $B$  a podivnosti  $S$ . Ukázalo se, že při silných interakcích se zachovává jak izospin  $T$ , tak hypernáboj  $Y$ . To vedlo k hledání grupy  $SU(2) \times Y$ , popisující rozšířené vlastnosti symetrie hadromů. V r. 1964 navrhli M. Gellman a E. Neeman použít minimální Lieovu grupu, obsahující  $SU(2) \times Y$  jako podgrupu – **grupu unitární symetrie  $SU(3)$** . Tato rozšířená symetrie vedla k sestavení multipletu baryonů – dekapletu  $(3/2^+)$ , v němž však v té době chybělo jedno místo; byl tak předpovězen hyperon  $\Omega$ , který byl zanedlouho skutečně objeven.

Grupa symetrií hadronů je 4-parametrická grupa zachování izospinu a hypernáboje. Další analýza unitární symetrie ukázala, že systematiku hadronů lze velmi dobře vysvětlit hypotézou, že hadrony jsou složeny ze subčástic - tripletu kvarků. Vznikla tak kvantová chromodynamika jakožto teorie silných interakcí – grupy symetrií  $U(1), SU(2), SU(3), \dots, SO(\dots), \dots$ , Lieovy algebry, ... .

V terminologii teorie grup unitárních symetrií lze říci, že **částice jsou reprezentacemi grupy symetrií**. Přesněji, komponenty báze ireducibilní reprezentace grupy symetrie ztotožňujeme s množinou

fyzikálních stavů – částicemi (popř. jejich excitovanými stavy – rezonancemi).

### *Lorentzova grupa*



**Hendrik Antoon Lorentz (1853 – 1928)**

Světobod  $Q$  je v pevně zvolené inerciální soustavě určen okamžikem  $t$  a polohovým vektorem  $\mathbf{r}$ .

Jinými slovy řečeno, světobod  $Q$  je určen čtyřvektorem  $q$ , jehož kontravariantní komponenty

$$q^\mu \equiv \{ct, \mathbf{r}\}, \quad (8.2)$$

tj.

$$q^0 \equiv ct, \quad (8.3)$$

a

$$q^k \equiv \mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_k \quad (8.4)$$

je projekce vektoru  $\mathbf{r}$  na  $k$ -tou souřadnou osu.

Souřadnice  $q'^\mu$  téhož světobodu v libovolné jiné inerciální souřadné soustavě souvisejí s  $q^\mu$  lineární transformací

$$q'^\mu = \Lambda^\mu_\nu q^\nu + b^\mu. \quad (8.5)$$

Interval mezi dvěma světobody  $x, y$  je veličina, invariantní, tj. musí platit

$$(x_\mu - y_\mu)(x^\mu - y^\mu) = (x'_\mu - y'_\mu)(x'^\mu - y'^\mu) \equiv (x - y)^2, \quad (8.6)$$

kde kovariantní komponenty

$$x_\mu \equiv g_{\mu\nu} x^\nu. \quad (8.7)$$

Požadavek ( 8.6 ) je splněn právě tehdy, když reálné parametry transformace ( 8.5 ) vyhovují podmínce

$$g_{\mu\nu} \Lambda^\sigma{}_\nu \Lambda^\mu{}_\rho = g_{\nu\rho}. \quad (8.8)$$

Všechny takovéto transformace tvoří **Poincarého grupu**.

Nejprve se omezíme pouze na vyšetřování **Lorentzovy grupy**, která je tvořena těmi z uvažovaných transformací, pro něž je  $b_\mu = 0$ , tj transformace

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu x^\nu. \quad (8.9)$$

Povšimněme si, že díky relaci ( 8.8 ) je poslední formule ekvivalentní vztahu

$$x^\mu = \Lambda_\nu{}^\mu x'^\nu. \quad (8.10)$$

Pro další bude výhodné, transformaci ( 8.9 ) zapsat v maticovém tvaru jako

$$x' = \Lambda x, \quad (8.11)$$

kde jednosloupcová matice



$$x \equiv \begin{pmatrix} x^0 \\ x^1 \\ x^2 \\ x^3 \end{pmatrix} \quad (8.12)$$

a elementy čtvercové matice  $\Lambda$  jsou definovány jako

$$\Lambda_{(\mu,\nu)} = \Lambda_{\nu}^{\mu}, \quad (8.13)$$

kde závorkou zdůrazňujeme, že na levé straně nejde o tenzorové indexy, ale o indexy číslicující maticové elementy.

Zavedeme-li ještě čtvercovou matici  $g$  jejíž elementy

$$g_{(\mu,\nu)} \equiv g_{\mu\nu}, \quad (8.14)$$

můžeme podmínku ( 8.8 ) vyjádřit v maticovém tvaru jako

$$\Lambda^T \mathbf{g} \Lambda = \mathbf{g}, \quad (8.15)$$

což je ekvivalentní s

$$\Lambda^{-1} = \mathbf{g} \Lambda^T \mathbf{g}. \quad (8.16)$$

Porovnáním determinantů obou stran této rovnosti dostáváme

$$(\det \Lambda)^2 = 1. \quad (8.17)$$

Komponentu (0, 0) maticové rovnosti ( 8.15 ) lze přepsat do tvaru

$$\left( \Lambda_{(0,0)} \right)^2 = 1 + \sum_{i=1}^3 \left( \Lambda_{(i,0)} \right)^2, \quad (8.18)$$

z něhož vidíme, že

$$\left(\Lambda_{(0,0)}\right)^2 \geq 1 . \quad (8.19)$$

Na základě formulí ( 8.17 ), ( 8.19 ) můžeme všechny elementy Lorentzovy grupy rozdělit do čtyř podmnožin:  
Elementy, pro něž platí

$$\det \Lambda = 1, \quad \Lambda_{(0,0)} \geq 1, \quad (8.20)$$

tvoří tzv. **vlastní Lorentzovu grupu**  $SO(m,n)$ , což je grupa vlastních Lorentzových transformací v  $m + n$  dimenzionálním Minkowského prostoru, v němž čas je  $n$  dimenzionální.

My budeme prozatím operovat pouze ve čtyřrozměrném prostoročasu, tj. na grupě  $SO(3,1)$ .

Ostatní podmnožiny již nepředstavují podgrupy, avšak z  $SO(3,1)$  je obdržíme velice snadno:

Libovolný element Lorentzovy grupy, pro který platí

$$\det \Lambda = -1, \quad \Lambda_{(0,0)} \geq 1, \quad (8.21)$$

resp.

$$\det \Lambda = -1, \quad \Lambda_{(0,0)} \leq 1, \quad (8.22)$$

resp.

$$\det \Lambda = 1, \quad \Lambda_{(0,0)} \leq -1, \quad (8.23)$$

Můžeme vyjádřit jako součin nějakého elementu  $SO(3,1)$  s prostorovou inverzí  $\mathbf{P} \equiv \Lambda(P)$ :

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.24)$$

resp. časovou inverzí  $\mathbf{T} \equiv \Lambda(T)$ :

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.25)$$

resp. časoprostorovou inverzí  $\mathbf{PT} \equiv \Lambda(PT) \equiv \Lambda(P) \Lambda(T)$ :

$$\mathbf{PT} = \begin{pmatrix} -1 & & & \\ & -1 & & \\ & & -1 & \\ & & & -1 \end{pmatrix}. \quad (8.26)$$

Libovolný element  $\mathbf{SO}(3,1)$  lze získat složením speciální Lorentzovy transformace s pootočením souřadných os.

Pootočení souřadné soustavy o úhel  $\varphi$  kolem osy určené jednotkovým vektorem  $\mathbf{n}$  je popsáno transformační maticí

$$\Lambda(\mathbf{n}, \varphi) = \exp(i\varphi \mathbf{nM}), \quad (8.27)$$

kde

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & -i \\ \cdot & \cdot & i & \cdot \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & i \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & -i & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad \mathbf{M}_3 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -i & \cdot \\ \cdot & i & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (8.28)$$

jsou generátory rotací kolem příslušných souřadných os.

Všechna možná pootočení souřadné soustavy tvoří grupu  $\mathbf{SO}(3)$ , která je samozřejmě podgrupou grupy  $\mathbf{SO}(3,1)$ .

Přechodu k souřadné soustavě, která se vůči výchozí pohybuje rychlostí  $v$  ve směru jednotkového vektoru  $\mathbf{n}$ , odpovídá transformační matice

$$\Lambda(\mathbf{n}, v) = \exp(iu\mathbf{nN}) , \quad (8.29)$$

kde parametr

$$u = \operatorname{argtgh} \frac{v}{c} = \frac{1}{2} \ln \frac{c+v}{c-v} \quad (8.30)$$

nazýváme **rapidita**, a matice

$$\mathbf{N}_1 = \begin{pmatrix} \cdot & i & \cdot & \cdot \\ i & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad \mathbf{N}_2 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & i & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ i & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \quad \mathbf{N}_3 = \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot & i \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ i & \cdot & \cdot & \cdot \end{pmatrix} \quad (8.31)$$

jsou generátory speciálních Lorentzových transformací podél příslušných souřadných os.

Tento pohyb budeme nazývat **boost**.

Kompozicí dvou boostů podél stejné osy představuje opět boost podél téže osy, ale transformace vzniká složením boostů v různých směrech již bosostem být nemusí, tj. všechny možné boosty (na rozdíl od rotací) grupu netvoří.

Matici odpovídající libovolné vlastní Lorentzově transformaci lze jednoznačně určit pomocí šesti reálných parametrů tak, že

$$\Lambda(a_1, \dots, a_6) = \exp \left\{ i \sum_{j=1}^3 (a_j \mathbf{M}_j + a_{j+3} \mathbf{N}_j) \right\}. \quad (8.32)$$

$SO(3,1)$  je šestiparametrickou nekompaktní Lieovou grupou.

Odpovídající Lieova algebra je determinována komutačními relacemi mezi generátory (8.28), (8.31):

$$\begin{aligned}
[\mathbf{M}_j, \mathbf{M}_k] &= i\epsilon_{jkl}\mathbf{M}_l, \\
[\mathbf{N}_j, \mathbf{N}_k] &= -i\epsilon_{jkl}\mathbf{M}_l, \\
[\mathbf{N}_j, \mathbf{M}_k] &= [\mathbf{M}_j, \mathbf{N}_k] = i\epsilon_{jkl}\mathbf{N}_l.
\end{aligned} \tag{8.33}$$

definujeme-li

$$\mathbf{I}^{jk} \equiv -\mathbf{I}^{kj} \equiv \epsilon_{jkl}\mathbf{M}_l, \quad \mathbf{I}^{0k} \equiv -\mathbf{I}^{k0} \equiv \mathbf{N}_k, \tag{8.34}$$

můžeme komutační relace ( 8.33 ) zapsat jako

$$[\mathbf{I}^{\mu\nu}, \mathbf{I}^{\rho\sigma}] = i(g^{\mu\sigma}\mathbf{I}^{\nu\rho} - g^{\mu\rho}\mathbf{I}^{\nu\sigma} + g^{\nu\sigma}\mathbf{I}^{\mu\rho} - g^{\nu\rho}\mathbf{I}^{\mu\sigma}). \tag{8.35}$$

Zavedeme-li parametry

$$\omega_{kl} \equiv -\omega_{lk} \equiv \epsilon_{kli}a_i, \quad \omega_{0l} \equiv -\omega_{l0} \equiv a_{l+3}, \tag{8.36}$$

můžeme matici ( 8.32 ) zapsat jako

$$\Lambda(\omega) = \exp\left(\frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta}\mathbf{I}^{\alpha\beta}\right). \tag{8.37}$$

Snadno se lze přesvědčit, že transformace, pro které  $\omega_{j0} = 0$ , tvoří podgrupu vlastní Lorentzovy grupy, jíž je pochopitelně grupa  $SO(3)$  generovaná generátory třírozměrných rotací  $\mathbf{R}$ , jíž jsme se dostatečně věnovali již v UTU.

Odpovídající matice mají kvazidiagonální tvar

$$\Lambda(R) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & & & \\ 0 & \mathbf{R} & & \\ 0 & & & \end{pmatrix}. \tag{8.38}$$

Porovnáním s formulí ( 8.27 ), resp. ( 8.29 ) vidíme, že natočení o úhel  $\varphi$  kolem osy  $\mathbf{n}$  odpovídají parametry

$$\omega_{0k} = 0, \quad \omega_{jk} = \varphi \varepsilon_{jkl} n_l, \quad (8.39)$$

resp., že posouvání rychlostí  $v$  ve směru  $\mathbf{n}$  odpovídají parametry

$$\omega_{0k} = un_k, \quad \omega_{jk} = 0. \quad (8.40)$$

Z formulí ( 8.28 ), ( 8.31 ), ( 8.34 ) nalezneme, že elementy matic  $\mathbf{I}^{\alpha\beta}$  mají tvar

$$\left( \mathbf{I}^{\alpha\beta} \right)_{(\mu,\nu)} = \mathbf{I}^{\alpha\beta,\mu}_{\nu}, \quad (8.41)$$

kde na pravé straně vystupují elementy invariantního tenzoru 4. řádu

$$\mathbf{I}^{\alpha\beta,\mu}_{\nu} \equiv i \left( g^{\alpha\mu} g_{\nu}^{\beta} - g_{\nu}^{\alpha} g^{\beta\mu} \right). \quad (8.42)$$

povšimněme si, že platí

$$\mathbf{I}^{\alpha\beta,\mu\nu} = -\mathbf{I}^{\beta\alpha,\mu\nu} = -\mathbf{I}^{\alpha\beta,\nu\mu} = \mathbf{I}^{\mu\nu,\alpha\beta}. \quad (8.43)$$

Z formulí ( 8.37 ) až ( 8.42 ) vidíme, že v případě infinitesimálních transformací nabývá vztah ( 8.9 ) tvaru

$$x'^{\mu} = x^{\mu} - \omega_{\nu}^{\mu} x^{\nu}. \quad (8.44)$$

Na základě komutačních relací ( 8.35 ) snadno zjistíme, že matice

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \mathbf{I}_{\mu\nu} \mathbf{I}^{\mu\nu} &= \hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{N}}^2, \\ \frac{1}{2} \varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma} \mathbf{I}_{\mu\nu} \mathbf{I}_{\rho\sigma} &= \hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{N}} \end{aligned} \quad (8.45)$$

komutují se všemi generátory  $\mathbf{SO}(3,1)$ .

Těmto veličinám jsou v libovolné ireducibilní reprezentaci  $SO(3,1)$  přiřazeny násobky operátoru identity.

Hodnoty těchto násobků je možno využít ke klasifikaci ireducibilních reprezentací.

Ireducibilní reprezentace  $SO(3,1)$  se však častěji specifikují zadáním hodnot jiných parametrů.

K tomu zavedme veličiny

$$\begin{aligned}\mathbf{J}_{(1)}^l &\equiv \frac{1}{2}(\mathbf{M}_l + i\mathbf{N}_l), \\ \mathbf{J}_{(1)}^l &\equiv \frac{1}{2}(\mathbf{M}_l - i\mathbf{N}_l).\end{aligned}\tag{8.46}$$

Komutační relace (8.33) jsou pak ekvivalentní relacím

$$\begin{aligned}[\mathbf{J}_{(1)}^j, \mathbf{J}_{(1)}^k] &= i\epsilon_{jkl}\mathbf{J}_{(1)}^l, \\ [\mathbf{J}_{(2)}^j, \mathbf{J}_{(2)}^k] &= i\epsilon_{jkl}\mathbf{J}_{(2)}^l, \\ [\mathbf{J}_{(1)}^j, \mathbf{J}_{(2)}^k] &= 0.\end{aligned}\tag{8.47}$$

Veličiny  $\hat{\mathbf{J}}_{(1)}$ ,  $\hat{\mathbf{J}}_{(2)}$  tedy můžeme formálně identifikovat jako dva nezávislé impulsmomenty.

Ireducibilní reprezentace  $SO(3,1)$  pak určujeme zadáním velikostí těchto impulsmomentů.

Tj.  $D^{(j,j')}$  označuje  $(2j+1)(2j'+1)$  rozměrnou ireducibilní

reprezentaci  $SO(3,1)$ , v níž veličině  $\hat{\mathbf{J}}_{(1)}^2$ , resp.  $\hat{\mathbf{J}}_{(2)}^2$  je přiřazena

jednotková matice vynásobená faktorem  $j(j+1)$ , resp.  $j'(j'+1)$ .

Všechny konečněrozměrné ireducibilní reprezentace obdržíme, když necháme parametry  $j, j'$  nezávisle probíhat všechny nezáporné celé a polocelé hodnoty.

Přitom každá z veličin  $\hat{\mathbf{J}}_{(1)}^2$ ,  $\hat{\mathbf{J}}_{(2)}^2$  je reprezentována hermitovskou maticí.

Z definice ( 8.46 ) pak vidíme, že v libovolné konečněrozměrné reprezentaci jsou přiřazeny generátorům  $\mathbf{M}_l$  matice hermitovské, ale matice odpovídající generátorům  $\mathbf{N}_l$  se od hermitovských liší faktorem  $i$ . Tedy s výjimkou triviální reprezentace  $D^{(0,0)}$ , žádná konečněrozměrná reprezentace  $\mathbf{SO}(3,1)$  není unitární.

Jde o přímý důsledek nekompaktnosti  $\mathbf{SO}(3,1)$ : Až na triviální jednorozměrnou reprezentaci jsou všechny ireducibilní unitární reprezentace libovolné nekompaktní grupy nekonečněrozměrné.

Z definice ( 8.46 ) dostáváme

$$\hat{\mathbf{J}}_{(1)}^2 = \frac{1}{4} \left( \hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{N}}^2 + 2i\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{N}} \right), \quad ( 8.48 )$$

$$\hat{\mathbf{J}}_{(2)}^2 = \frac{1}{4} \left( \hat{\mathbf{M}}^2 - \hat{\mathbf{N}}^2 + 2i\hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{N}} \right).$$

Z formule ( 8.45 ) pak vidíme, že vektorová reprezentace je ireducibilní reprezentací  $D^{(\frac{1}{2}, \frac{1}{2})}$ .

Omezíme-li se v libovolné reprezentaci grupy  $\mathbf{SO}(3,1)$  pouze na operátory odpovídající elementům z její podgrupy  $\mathbf{SO}(3)$ , obdržíme reprezentaci grupy  $\mathbf{SO}(3)$ .

Z definice ( 8.46 ) dostáváme pro generátory této grupy vyjádření

$$\hat{\mathbf{M}} = \hat{\mathbf{J}}_{(1)} + \hat{\mathbf{J}}_{(2)}. \quad ( 8.49 )$$

Z komutačních relací ( 8.47 ) vidíme, že  $\hat{\mathbf{M}}$  představuje celkový impulsmoment, obdrženy komposicí dvou nezávislých impulsmomentů  $\hat{\mathbf{J}}_{(1)}, \hat{\mathbf{J}}_{(2)}$ .

Z pravidel o skládání impulsmomentů je pak zřejmé, že ireducibilní reprezentace  $D^{(j, j')}$  grupy  $\mathbf{SO}(3,1)$  představuje z hlediska grupy  $\mathbf{SO}(3)$  direktní součet

$$\sum_{J=|j-j'|}^{j+j'} \oplus D^{(J)} \quad ( 8.50 )$$

jejích ireducibilních reprezentací.



Nepřehlédněte, že žádná ireducibilní reprezentace grupy  $SO(3)$  není v ireducibilní reprezentaci grupy  $SO(3,1)$  zastoupena více než jednou.

Nakonec ještě uveďme vztahy mezi maticemi odpovídajícími čistému natočení, resp. boostu a maticemi odpovídajícími jednotlivým druhům inverze:

$$\begin{aligned} \mathbf{P}\Lambda(\mathbf{n}, \varphi)\mathbf{P} &= \Lambda(\mathbf{n}, \varphi), \\ \mathbf{P}\Lambda(\mathbf{n}, \nu)\mathbf{P} &= \Lambda(-\mathbf{n}, \nu), \end{aligned} \quad (8.51)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{T}\Lambda(\mathbf{n}, \varphi)\mathbf{T} &= \Lambda(\mathbf{n}, \varphi), \\ \mathbf{T}\Lambda(\mathbf{n}, \nu)\mathbf{T} &= \Lambda(-\mathbf{n}, \nu). \end{aligned} \quad (8.52)$$

### Globální a lokální symetrie; Kalibrační pole

Ve fyzice se uplatňují symetrie dvojího druhu :

a) **Globální symetrie** - ať již se jedná o symetrie prostoročasu (invariance vzhledem k posunům v prostoru a čase, prostorovým rotacím, Lorentzovým transformacím a pod.), nebo o vnitřní symetrie (invariance vůči jiným než prostoročasným stupňům volnosti - např. transformace izospinu).

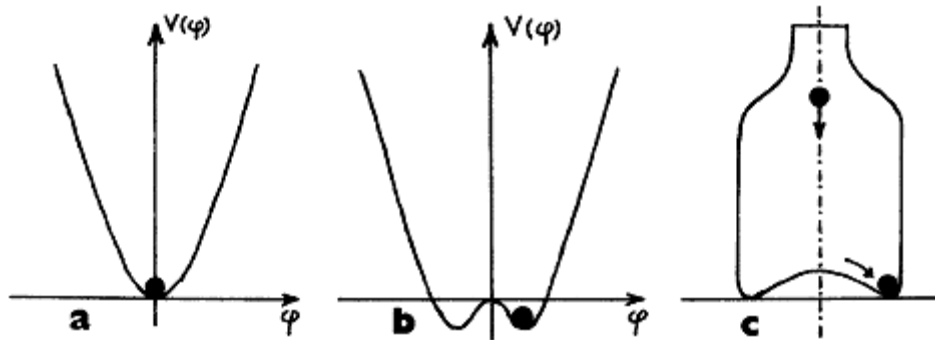
Z požadavku invariance vůči globálním symetriím plynou (podle věty Noetherové) různé zákony zachování, např. energie a hybnosti.

b) **Lokální symetrie** - invariance vůči transformacím, které jsou prostoročasně proměnné (závisí na světobodu, v němž kalibrační transformaci provádíme).

Při lokálních (kalibračních) transformacích se v rovnicích pole objevují určité přídatné členy obsahující derivace parametrů transformace. Požadujeme-li zachování invariance vůči takové transformaci, je třeba pro odstranění těchto členů zavést odpovídající kompensující členy, které je možno interpretovat jako nějaké pole. Požadavek invariance vzhledem ke kalibračním (lokálním) transformacím tak vede k přítomnosti "**kompensujících polí**" - **nových interakcí**.

Základním východiskem **kalibračních teorií** je theze, že všechny čtyři základní interakce v přírodě jsou důsledkem požadavku invariance teorie vůči příslušným kalibračním transformacím. V rámci kalibrační teorie lze formulovat kvantovou elektrodynamiku (kde elektromagnetické pole se obdrží jako kalibrační pole při požadavku invariance lagrangiánu volného spinorového pole vůči lokálním transformacím fáze z grupy  $U(1)$ ) i Einsteinovu gravitační teorii (gravitační pole zde vzniká z požadavku invariance vůči lokálním kalibračním transformacím prostoročasu - Poincaréova grupa).

Kalibrační pole v kalibračních teoriích jsou primárně "nehmotná" (jejich kvanta mají nulovou klidovou hmotnost), což je adekvátní pro pole elektromagnetické a gravitační. Při budování teorie např. slabých interakcí v rámci kalibračních teorií to však způsobuje určité potíže pramenící z toho, že tyto interakce jsou zprostředkovány intermediálními bosony ( $W^+, W^-, Z^0$ ), které mají díky krátkému dosahu interakce značně velkou hmotnost (desítky  $\text{GeV}/c^2$ ). Tuto potíž se podařilo překlenout mechanismem tzv. **spontánního narušení symetrie**, což je modifikace lagrangiánu, při níž sice lagrangián i pohybové rovnice mají nadále původní danou symetrii, ale vlastní fyzikální stavy tuto symetrii již nemají (není v tom žádný rozpor - např. pohyb v centrálně symetrickém poli nemusí být při nesymetrických počátečních podmínkách vůbec symetrický). Toto spontánní narušení symetrie pak způsobuje, že příslušné kalibrační pole bude efektivně vystupovat jako pole s nenulovou hmotností, aniž by se porušila kalibrační invariantnost.



**Obr.8.1: Znázornění mechanismu spontánního narušení symetrie v kalibračních teoriích.**

a) Pro efektivní potenciál tvaru jednoduché symetrické jámy s jediným minimem je i základní stav symetrický.

b) Pro takový tvar symetrického efektivního potenciálu základní stav pole  $\varphi$  již symetrii nemá.

c) Pohyb kuličky puštěné přesně po ose do sklenice s promáčknutým dnem ilustruje případ, kdy navzdory tomu, že rovnice pohybu kuličky, počáteční podmínky i tvar sklenice jsou symetrické, konečný stav tuto symetrii nemá: kulička se po dopadu do metastabilní polohy ve vyvýšeném středu dna vždy skutálí do prohlubně u stěny - předchozí symetrie se spontánně naruší.

Podstata mechanismu spontánního narušení symetrie je zhruba znázorněna na obr. 8.1. Na obr. 8.1a je znázorněna potenciální energie (efektivní potenciál) skalárního pole  $\varphi$  o hmotnosti  $\mu$  a vazbové konstantě  $\lambda$  s jednoduchým (modelovým) lagrangiánem

$$L = \frac{1}{2}(\dot{\varphi}_i)^2 - \frac{\mu^2}{2}\varphi^2 - \frac{\lambda}{4}\varphi^4. \quad (8.53)$$

Efektivní potenciál

$$V(\varphi) = \frac{\mu^2}{2}\varphi^2 - \frac{\lambda}{4}\varphi^4 \quad (8.54)$$

má (pro  $\mu^2 > 0$ ) tvar symetrické potenciálové jámy, v níž nejvýhodnější energetický stav odpovídá poli  $\varphi = 0$ . V případě, že efektivní potenciál by měl tvar

$$V(\varphi) = -\frac{\mu^2}{2}\varphi^2 - \frac{\lambda}{4}\varphi^4 \quad (8.55)$$

(odpovídající případu  $\mu^2 < 0$ ), bude mít potenciálová jáma tvar podle obr. 8.1b, takže minimum  $V(\varphi)$  již nebude odpovídat stav  $\varphi = 0$ , ale pole

$$\varphi = \varphi_0 = \pm \frac{\mu}{\sqrt{\lambda}}. \quad (8.56)$$

I když potenciál  $V(\varphi)$  je nadále symetrický vůči změně znaménka  $\varphi \rightarrow -\varphi$ , základní stav pole  $\varphi$  tuto symetrii již nerespektuje (kulička symbolicky představující stav pole se vždy skutálí do jednoho z minim - obr. 8.1c).

Po narušení symetrie se spektrum částic (hmotnosti excitací) mění. V uvedeném jednoduchém případě by se při  $\varphi = 0$ ,  $\mu^2 < 0$  jednalo o teorii tachyonů s imaginární hmotností

$$m^2(\varphi = 0) = \left. \frac{d^2V}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=0} = -\mu < 0 \quad (8.57)$$

zatímco po narušení symetrie se čtverec hmotnosti excitací skalárního pole stává kladný:

$$m^2(\varphi = \varphi_0) = \left. \frac{d^2V}{d\varphi^2} \right|_{\varphi=\varphi_0} = 2\mu^2. \quad (8.58)$$

Základní myšlenka **Higgsova – Kibbleova mechanismu** tedy spočívá v tom, že do lagrangiánu kalibrační teorie se zavede pomocné skalární pole (Higgsovo pole) s takovým interakčním potenciálem, aby došlo ke spontánnímu narušení symetrie, přičemž však lagrangián jako celek by zůstal kalibračně invariantní. Potom se kalibrační pole budou efektivně chovat jako pole s nenulovou hmotností. Kromě toho se v teorii objeví navíc tzv. **Higgsovy bosony** - skalární částice s nenulovou klidovou hmotností, pocházející z pomocných skalárních polí.

Ukazuje se tedy, že teorie všech fundamentálních interakcí lze jednotně vytvářet v rámci kalibračních teorií lišících se především

**kalibrační grupou.** Kalibrační teorie tak tvoří zároveň vhodnou základnu pro **sjednocování interakcí**: dva typy interakcí s kalibračními grupami  $G_1$  a  $G_2$  lze sjednotit tak, že vytvoříme kalibrační teorii s kalibrační grupou  $G$ , obsahující grupu  $G_1 \times G_2$  jako svoji podgrupu. Při konstrukci jednotných teorií slabých, silných a elektromagnetických interakcí je tato základní idea doplněna předpokladem, že před narušením symetrie všechny vektorové bosony zprostředkávající interakce byly nehmotné. Po spontánním narušení symetrie (vlivem vzniku konstantních skalárních polí v celém prostoru) však část vektorových bosonů získá hmotnost a příslušné interakce se stanou krátkodosahovými - symetrie mezi různými typy interakcí se poruší.

### a) Globální symetrie

S každou symetrií v přírodě se pojí některý zákon zachování, a tento zákon zachování je touto symetrií definován.

Energie je veličina, která se zachovává vzhledem k časovému posunutí, tj posunutí v ose  $t$ .

Protože obecně platí

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} = -\text{grad } W_p(t, \mathbf{r}) \quad (8.59)$$

kde  $W_p$  je potenciální energie, a při symetrii vzhledem k toku času (homogenita času)

$$W_p = W_p(\mathbf{r}), \quad (8.60)$$

čili

$$\frac{\partial W_p}{\partial t} = 0, \quad (8.61)$$

můžeme okamžitě psát

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} = - \frac{dW_p}{d\mathbf{r}}, \quad (8.62)$$

neboli

$$m \frac{\partial \mathbf{v}}{\partial t} = - \frac{dW_p}{d\mathbf{r}}. \quad (8.63)$$

Metodou separace proměnných postupně dostaneme

$$m \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial t} \partial \mathbf{v} = -dW_p, \quad (8.64)$$

a tedy

$$m \mathbf{v} \partial \mathbf{v} = -dW_p. \quad (8.65)$$

Integrací pak získáme zákon zachování celkové energie hmotného bodu:

$$\frac{mv^2}{2} + W_p = konst. \quad (8.66)$$

Zákon zachování hybnosti platí pouze tehdy, platí-li navíc symetrie vzhledem k posunutí v prostoru, tj. posunutí v osách  $x$ ,  $y$ ,  $z$  (izotropie prostoru):

$$\frac{\partial W_p}{\partial \mathbf{r}} = 0. \quad (8.67)$$

Pak ovšem

$$m \frac{\partial^2 \mathbf{r}}{\partial t^2} = 0, \quad (8.68)$$

což po integraci dá vskutku zákon zachování hybnosti:

$$m\mathbf{v} = \text{konst.} \quad (8.69)$$

V kvantové mechanice platí převodní vztah mezi zachovávanými se čtyřvektory popisujícími stav částice a stav vlny, ve tvaru:

$$\begin{pmatrix} E \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix} = \hbar \begin{pmatrix} \omega \\ k_x \\ k_y \\ k_z \end{pmatrix}. \quad (8.70)$$

Zákon zachování impulsmomentu je určen symetriemi vzhledem ke trojrozměrným rotacím, tj. rotacím  $\mathbf{SO}(3)$  v rovinách  $xy$ ,  $xz$ ,  $yz$ .

Spin částice je veličina určená Lorenzovou symetrií, tj. rotací  $\mathbf{SO}(3,1)$  v rovinách  $xt$ ,  $yt$ ,  $zt$ .

Máme tak v přírodě celkem 10 globálních symetrií.

### b) Lokální symetrie

K tomu, aby nějaká diferenciální rovnice mohla hrát roli pohybové rovnice v rámci kvantové teorie je nezbytné, aby se jednalo o rovnici prvního řádu v časové proměnné.

Tedy jestliže  $\psi(\mathbf{r}, t)$  má být vlnovou rovnicí popisující v  $\{\hat{\mathbf{Q}}\}$  reprezentaci stav jednočásticového systému v okamžiku  $t$ , potom musí vyhovovat rovnici typu

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \hat{\mathbf{H}} \psi(\mathbf{r}, t). \quad (8.71)$$

Kde hamiltonián již neobsahuje žádnou časovou derivaci.

Protože impuls volné částice je integrálem pohybu, musí hamiltonián splňovat komutační relaci

$$[\hat{\mathbf{H}}, \hat{\mathbf{P}}] = 0. \quad (8.72)$$

Energie volné částice je jejím impulsem jednoznačně určena. Tedy vlnová funkce  $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$  stacionárního stavu uvažované částice s impulsem  $\mathbf{p}$  musí vyhovovat rovnicím

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) &= \mathbf{p}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}), \\ \hat{\mathbf{H}}\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) &= E\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}),\end{aligned}\tag{8.73}$$

kde

$$E = c\sqrt{p^2 + m^2c^2}.\tag{8.74}$$

První z nich vyžaduje, aby

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{p}} \exp\left(\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\right),\tag{8.75}$$

jestliže jsme vlnovou funkcí  $\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r})$  popsali stav uvažované částice v čase  $t = 0$ , potom

$$\psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}, t) \equiv \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \exp\left(-\frac{i}{\hbar}Et\right) = \psi_{\mathbf{p}} \exp\left[-\frac{i}{\hbar}(\mathbf{p}\cdot\mathbf{r} - Et)\right],\tag{8.76}$$

je řešením rovnice ( 8.71 ) které jsme interpretovali jako vlnovou funkci stavu částice v čase  $t$ .

Snadno se přesvědčíme, že tato vlnová funkce vyhovuje Klein – Gordonově rovnici.

Na základě principu superpozice tak dospíváme k závěru, že řešení pohybové rovnice odpovídající jakémukoli stavu volné částice musí vyhovovat K-G rovnici ( 6.197 ).

Na druhé straně, derivujeme-li podle času obě strany rovnice ( 8.71 ), zjistíme, že libovolné její řešení vyhovuje rovnici

$$\left(\hbar^2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \hat{\mathbf{H}}^2\right)\psi(\mathbf{r}, t) = 0.\tag{8.77}$$



Tedy libovolné řešení pohybové rovnice ( 8.71 ) bude vyhovovat K-G rovnici, pokud pro Hamiltonův operátor platí

$$\hat{\mathbf{H}}^2 = -\hbar^2 c^2 \Delta + m^2 c^4, \quad ( 8.78 )$$

tj. pokud uvažovaný hamiltonián představuje druhou odmocninu z operátoru vystupujícího na pravé straně.

Pokud by poloha částice představovala úplnou množinu pozorovatelných, tj. pokud by  $\psi(\mathbf{r}, t)$  byla jednokomponentovou vlnovou funkcí, potom by tato odmocnina představovala nelokální operátor.

Pokud se tedy nechceme smířit s nelokálními operátory, musíme přijmout, že pro uvažovanou částici její poloha úplnou množinu pozorovatelných netvoří.

V této situaci se ukazuje nesmírně výhodným použít formalismus vícekomponentových vlnových funkcí.

Pod  $\psi(\mathbf{r}, t)$  budeme tedy v dalším rozumět jednosloupcovou  $n$ -řádkovou matici

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \begin{pmatrix} \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \psi_1(\mathbf{r}, t) \\ \vdots \\ \psi_1(\mathbf{r}, t) \end{pmatrix}. \quad ( 8.79 )$$

Ve formuli ( 8.78 ) je pak mlčky rozuměno, že na pravé straně stojí direktní součin operátoru explicitně uvedeného s jednotkovou maticí.

$\hat{\mathbf{H}}^2$  je tedy čtvercová  $n$ -řádková diagonální matice, jejíž všechny diagonální členy obsahují diferenciální operátor stojící na pravé straně ( 8.78 ).

Pokud nebude hrozit nedorozumění, budeme podobné zjednodušené označení používat i na další operátory.

Z veličin, které připadají v úvahu, mají rozměr energie pouze  $mc^2$  a

$$c\hat{\mathbf{P}} = -i\hbar c \nabla.$$

Možná závislost na  $\hat{\mathbf{P}}$  je požadavkem lokality omezena na polynomiální.

Výraz na pravé straně ( 8.78 ) představuje polynom druhého řádu, takže jeho omocnina je alespoň polynomem řádu prvního.

Snadno nahlédneme, že polynom prvního řádu v  $\hat{\mathbf{P}}$ , který by mohl reprezentovat operátor  $\hat{\mathbf{H}}$ , musí mít nutně tvar

$$\hat{\mathbf{H}} = \hbar c \left[ \left( \frac{\boldsymbol{\alpha} \cdot \hat{\mathbf{P}}}{\hbar} \right) + \boldsymbol{\beta} \frac{mc}{\hbar} \right] \equiv -i\hbar c \sum_{j=1}^3 \boldsymbol{\alpha}_j \frac{\partial}{\partial q^j} + \boldsymbol{\beta} mc^2, \quad (8.80)$$

kde elementy čtvercových matic  $\boldsymbol{\alpha}_j$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  jsou bezrozměrné konstanty nezávislé na  $\mathbf{q}$ , což zaručuje, že

$$[\boldsymbol{\alpha}_j, \hat{\mathbf{P}}_k] = [\boldsymbol{\beta}, \hat{\mathbf{P}}_k] = 0. \quad (8.81)$$

Samosdruženost hamiltoniánu tedy vyžaduje, aby také matice  $\boldsymbol{\alpha}_j$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  byly samosdružené:

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\alpha}_j^\dagger &= \boldsymbol{\alpha}_j, \\ \boldsymbol{\beta}^\dagger &= \boldsymbol{\beta}. \end{aligned} \quad (8.82)$$

z vyjádření ( 8.80 ) dostáváme

$$\hat{\mathbf{H}}^2 = -\hbar^2 c^2 \sum_{j,k=1}^3 \boldsymbol{\alpha}_j \boldsymbol{\alpha}_k \frac{\partial^2}{\partial q^j \partial q^k} + \boldsymbol{\beta}^2 mc^4 - i\hbar c \sum_{k=1}^2 (\boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\alpha}_k + \boldsymbol{\alpha}_k \boldsymbol{\beta}) \frac{\partial}{\partial q^k}, \quad (8.83)$$

odkud vidíme, že požadavek ( 8.78 ) je splněn právě tehdy, když matice  $\boldsymbol{\alpha}_k$ ,  $\boldsymbol{\beta}$  vyhovují relacím

$$\begin{aligned} \{\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\alpha}_k\} &= 2\delta_{jk}, \\ \{\boldsymbol{\alpha}_j, \boldsymbol{\beta}\} &= 0, \\ \boldsymbol{\beta}^2 &= 1. \end{aligned} \quad (8.84)$$

Pokusme se nyní zkonstruovat čtvercové  $n$ -řádkové matice vyhovující všem výše uvedeným požadavkům.

Jaká je minimální hodnota  $n$ , pro kterou lze tyto požadavky splnit?

Z formule ( 8.84 ) vidíme, že

$$\beta^2 = \alpha_j^2 = 1, \quad j = 1, 2, 3, \quad ( 8.85 )$$

a tedy vlastní hodnoty každé z hermitovských matic  $\alpha_j, \beta$  mohou být pouze  $\pm 1$ .

Navíc, s využitím invariance stopy vůči cyklickým permutacím faktorů z těchto relací dostáváme

$$\text{Tr } \beta = \text{Tr } \beta \alpha_1^2 = \text{Tr } \alpha_1 \beta \alpha_1 = -\text{Tr } \alpha_1^2 \beta = -\text{Tr } \beta, \quad ( 8.86 )$$

a tedy musí platit

$$\text{Tr } \beta = 0. \quad ( 8.87 )$$

Zcela analogicky zjistíme, že rovněž

$$\text{Tr } \alpha_j = 0, \quad j = 1, 2, 3. \quad ( 8.88 )$$

Tedy počet vlastních hodnot  $+1$  každé z matic  $\alpha_j, \beta$  musí být stejný jako počet jejích vlastních hodnot  $-1$ .

To je však možno splnit pouze pro sudé  $n$ .

Snadno se též přesvědčíme o lineární nezávislosti matic  $\alpha_j, \beta$ .

V opačném případě bychom mohli např. matici  $\beta$  vyjádřit jako lineární kombinaci

$$\beta = \sum_{j=1}^3 a_j \alpha_j. \quad ( 8.89 )$$

Díky ní by však musela platit relace

$$\boldsymbol{\beta}^2 = \sum_{j=1}^3 a_j \boldsymbol{\alpha}_j = \sum_{j=1}^3 a_j \boldsymbol{\beta} \boldsymbol{\alpha}_j = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 a_j \{ \boldsymbol{\beta}, \boldsymbol{\alpha}_j \}, \quad (8.90)$$

což ovšem není možné, neboť by nebyly splněny poslední 2 rovnice (8.84).

Libovolnou čtvercovou dvouřádkovou matici lze vyjádřit jako lineární kombinaci čtyř lineárně nezávislých matic, za které můžeme např. zvolit jednotkovou matici  $\mathbf{1}$  a Pauliho matice

$$\boldsymbol{\sigma}_1 \equiv \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 \equiv \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 \equiv \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (8.91)$$

pro které platí (srov. UTU)

$$\boldsymbol{\sigma}_j \boldsymbol{\sigma}_k = \delta_{ik} + i \varepsilon_{jkl} \boldsymbol{\sigma}_l, \quad (8.92)$$

a tedy vyhovují komutačním relacím

$$[\boldsymbol{\sigma}_j, \boldsymbol{\sigma}_k] = 2i \varepsilon_{jkl} \boldsymbol{\sigma}_l \quad (8.93)$$

a antikomutačním relacím

$$\{ \boldsymbol{\sigma}_j, \boldsymbol{\sigma}_k \} = 2\delta_{jk}. \quad (8.94)$$

Pauliho matice tak představují trojici lineárně nezávislých matic, které všechny vzájemně antikomutují, ale každá z nich komutuje s jednotkovou maticí.

Pro  $n = 2$  tak neexistuje čtveřice lineárně nezávislých a vzájemně antikomutujících matic, tj. nelze splnit požadavek (8.84).

Libovolnou čtvercovou čtyřřádkovou matici lze vyjádřit jako lineární kombinaci šestnácti lineárně nezávislých matic, za které lze zvolit např. direktní součiny výše uvedených matic dvouřádkových.

$$\mathbf{1} \otimes \mathbf{1}, \quad \boldsymbol{\sigma}_j \otimes \mathbf{1}, \quad \mathbf{1} \otimes \boldsymbol{\sigma}_j, \quad \boldsymbol{\sigma}_j \otimes \boldsymbol{\sigma}_k. \quad (8.95)$$

První z nich představuje matici jednotkovou.

Snadno nahlédneme (stačí si uvědomit, že Pauliho matice mají nulovou stopu a kvadrát každé z nich je jednotkovou maticí), že každá ze zbývajících patnácti je hermitovská, má nulovou stopu a kvadrát roven jednotkové matici.

Kteroukoli z matic  $\alpha_j$ ,  $\beta$  můžeme tedy bez újmy na obecnosti identifikovat s maticí

$$\beta \equiv \sigma_3 \otimes \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad (8.96)$$

kde každý element v posledním výrazu představuje submatici  $2 \times 2$ .

Z anikomutačních relací (8.94) vidíme, že s touto maticí antikomutuje trojice matic  $\sigma_1 \otimes \sigma_j$ .

Protože tyto matice také všechny navzájem antikomutují, můžeme identifikovat

$$\alpha_j \equiv \sigma_1 \otimes \sigma_j = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma_j \\ \sigma_j & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad j = 1, 2, 3, \quad (8.97)$$

což často zapisujeme jako

$$\alpha \equiv \sigma_1 \otimes \sigma = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \sigma \\ \sigma & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (8.98)$$

Matice definované formulemi (8.96), (8.97) představují tzv. Pauliho reprezentaci Diracovy algebry (8.84).

Explicitní konstrukcí jsme ukázali, že pro  $n = 4$  existují matice, vyhovující relacím (8.82), (8.84).

Samozřejmě, že také všechny matice, které s nimi souvisejí libovolnou unitární transformací, budou vyhovovat těmže relacím, neboť jde o vztahy invariantní vůči těmto transformacím.

Důležitou skutečností je, že v případě  $n = 4$  platí i tvrzení opačné: libovolná čtveřice matic  $\alpha_j$ ,  $\beta$  vyhovujících relacím (8.82), (8.84),

souvisí se čtveřicí matic definovaných formulemi ( 8.96 ), ( 8.97 ) unitární transformací.

Čtveřice matic  $\alpha_j, \beta$  vyhovujících relacím ( 8.82 ), ( 8.84 ) existuje právě tehdy, když  $n$  je celočíselným násobkem 4.

Každou takovouto čtveřicí lze unitární transformací převést na kvazidiagonální tvar, v němž každá ze submatic na diagonále je dána pravou stranou formule ( 8.96 ), resp. ( 8.97 ).

V případě  $n = 4$  představují vztahy ( 8.71 ), ( 8.80 ) slavnou **Diracovu rovnici** volné částice

$$i\hbar \frac{\partial \psi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = (-i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla + \beta mc^2) \psi(\mathbf{r}, t). \quad ( 8.99 )$$

Má-li Diracova rovnice představovat relativistickou pohybovou rovnici, musí mít stejný tvar ve všech ekvivalentních souřadných soustavách.



**Paul Adrien Maurice Dirac (1902 – 1984)**

Pro tuto vlastnost se užívá termín **kovariance rovnice**.

Pro vyšetření splnitelnosti této podmínky je výhodné rovnici ( 8.99 ) nejprve násobit nesingulární maticí  $\beta$ .

Můžeme ji pak napsat jako

$$\left( i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial q^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi(q) = 0, \quad ( 8.100 )$$

kde **Diracovy gama-matice**

$$\begin{aligned}\gamma^0 &\equiv \boldsymbol{\beta}, \\ \gamma^k &\equiv \boldsymbol{\beta}\boldsymbol{\alpha}_k.\end{aligned}\tag{8.101}$$

V termínech Diracových matic nabývají požadavky ( 8.84 ) tvaru antikomutačních relací

$$\{\gamma^\mu, \gamma^\nu\} = 2g^{\mu\nu}.\tag{8.102}$$

A hermicita ( 8.82 ) je ekvivalentní vztahům

$$\begin{aligned}\gamma^{0\dagger} &= \gamma^0, \\ \gamma^{k\dagger} &= -\gamma^k,\end{aligned}\tag{8.103}$$

které, díky ( 8.102 ) můžeme zapsat též jako

$$\gamma^0\gamma^{\mu\dagger}\gamma^0 = \gamma^\mu.\tag{8.104}$$

Uvažujme dvě inerciální vztažné soustavy, které spolu souvisejí Lorenzovou transformací  $\Lambda$ , tj. souřadnice, kterými v těchto soustavách popisujeme tentýž světobod, spolu souvisejí vztahem

$$q'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu q^\nu \Leftrightarrow q^\mu = \Lambda_\nu{}^\mu q'^\nu.\tag{8.105}$$

Jestliže nějaká fyzikální skutečnost je v nečárkované soustavě popsána funkcí  $\psi(q)$ , potom tutéž skutečnost popíše pozorovatel v soustavě čárkované funkcí

$$\psi'(q') = \mathbf{S}(\Lambda)\psi(q),\tag{8.106}$$

kde  $\mathbf{S}(\Lambda)$  je matice přiřazená transformaci  $\Lambda$  v nějaké reprezentaci Lorentzovy grupy.

Ekvivalence uvažovaných souřadných soustav pak vyžaduje, aby funkce  $\psi$  a  $\psi'$  vyhovovaly stejné pohybové rovnici.

Tedy Diracova rovnice může hrát úlohu relativistické pohybové rovnice, pokud existuje čtyřrozměrná reprezentace Lorentzovy grupy, v níž je elementu  $\Lambda$  přiřazena matice  $\mathbf{S}(\Lambda)$  taková, že funkce ( 8.106 ) vyhovuje rovnici

$$\left( i\gamma^\mu \frac{\partial}{\partial q^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(q') = 0, \quad ( 8.107 )$$

právě tehdy, když funkce  $\psi(q)$  je řešením rovnice ( 8.100 ).

V takovém případě totiž můžeme postulovat takové transformační vlastnosti čtyřkomponentové vlnové funkce, které ponechají tvar Diracovy rovnice nezměněn:

$$\left( i\mathbf{S}(\Lambda)\gamma^\mu\mathbf{S}^{-1}(\Lambda)\frac{\partial}{\partial q^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right) \psi'(q') = 0, \quad ( 8.108 )$$

je shodný s ( 8.107 ), pokud

$$\mathbf{S}(\Lambda)\gamma^\mu\mathbf{S}^{-1}(\Lambda)\frac{\partial}{\partial q^\mu} = \gamma^\nu \frac{\partial}{\partial q'^\nu}. \quad ( 8.109 )$$

Z formule ( 8.105 ) však víme, že

$$\frac{\partial}{\partial q'^\nu} = \Lambda_\nu^\mu \frac{\partial}{\partial q^\mu}, \quad ( 8.110 )$$

a tedy předcházející požadavek je splněn právě tehdy, když platí

$$\mathbf{S}(\Lambda)\gamma^\mu\mathbf{S}^{-1}(\Lambda) = \gamma^\nu \Lambda_\nu^\mu, \quad ( 8.111 )$$

což je ekvivalentní se vztahem

$$\mathbf{S}^{-1}(\Lambda)\gamma^\mu\mathbf{S}(\Lambda) = \Lambda^\mu_\nu \gamma^\nu. \quad ( 8.112 )$$



Každý element vlastní Lorentzovy grupy můžeme jednoznačně zadat ve tvaru ( 8.37 ) pomocí šesti nezávislých parametrů  $\omega_{\alpha\beta}$ .

Označíme-li, v souhlase s vžitou konvencí, matice odpovídající dvojnásobku generátorů  $\mathbf{I}^{\alpha\beta}$  v hledané reprezentaci jako  $\Sigma^{\alpha\beta}$ , potom Lorentzově transformaci  $\Lambda(\omega)$  je v této reprezentaci přiřazena matice

$$\mathbf{S}(\omega) \equiv \exp\left(\frac{i}{4}\omega_{\alpha\beta}\Sigma^{\alpha\beta}\right). \quad (8.113)$$

Vzhledem k tomu, že všechny konečné transformace můžeme obdržet iterací transformací infinitesimálních, stačí se při vyšetřování splnitelnosti podmínky ( 8.112 ) omezit na veličiny prvního řádu v  $\omega$ . Z formulí ( 8.112 ), ( 8.113 ), ( 8.37 ) pak vidíme, že tím se úloha vyšetření invariance Diracova rovnice vůči Lorentzovým transformacím redukuje na úlohu zjistit, zda existují matice  $\Sigma^{\alpha\beta}$ , které by (do veličin prvního řádu v  $\omega$ ) vyhovovaly vztahům

$$\left(1 + \frac{i}{4}\omega_{\alpha\beta}\Sigma^{\alpha\beta}\right)\gamma^\mu \left(1 - \frac{i}{4}\omega_{\alpha\beta}\Sigma^{\alpha\beta}\right) = \gamma^\mu - \frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta} \sum_{\nu} (\mathbf{I}^{\alpha\beta})_{(\mu,\nu)} \gamma^\nu. \quad (8.114)$$

S využitím formule ( 8.108 ) snadno zjistíme, že tento požadavek můžeme vyjádřit ve tvaru

$$[\Sigma^{\alpha\beta}, \gamma^\mu] = 2i(g^{\beta\mu}\gamma^\alpha - g^{\alpha\mu}\gamma^\beta). \quad (8.115)$$

Na základě antikomutačních relací ( 8.102 ) a algebraické identity

$$[AB, C] = A\{B, C\} - \{A, C\}B \quad (8.116)$$

pak zjistíme, že matice

$$\Sigma^{\mu\nu} \equiv \frac{i}{2}[\gamma^\mu, \gamma^\nu] \quad (8.117)$$

tomuto požadavku vyhovují.

Zbývá ovšem dokázat, že odpovídající matice ( 8.113 ) skutečně představují reprezentaci vlastní Lorentzovy grupy.

Zavedeme proto matice  $\hat{\mathbf{M}}, \hat{\mathbf{N}}$ , které by v uvažované reprezentaci měly odpovídat generátorům  $\mathbf{M}, \mathbf{N}$  vlastní Lorentzovy grupy:

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{M}}_k &\equiv \frac{1}{4} \varepsilon_{klj} \Sigma^{lj} \equiv \frac{1}{2} \Sigma_k = -\frac{i}{4} \varepsilon_{klm} \alpha_j \alpha_m, \\ \hat{\mathbf{N}}_k &\equiv \frac{1}{2} \Sigma^{0k} = \frac{i}{2} \alpha_k.\end{aligned}\tag{ 8.118 }$$

Z formulí ( 8.96 ), ( 8.98 ), ( 8.101 ) víme, že Pauliho reprezentace matice  $\gamma^\mu$  má tvar

$$\begin{aligned}\gamma^0 &= \sigma_3 \otimes \mathbf{1} = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}, \\ \gamma &= i\sigma_2 \otimes \boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{ 8.119 }$$

V této reprezentaci je tedy

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{M}} &= \frac{1}{2} \mathbf{1} \otimes \boldsymbol{\sigma} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathbf{N}} &= \frac{i}{2} \sigma_1 \otimes \boldsymbol{\sigma} = \frac{i}{2} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}.\end{aligned}\tag{ 8.120 }$$

S využitím relací ( 8.92 ) pak dostáváme

$$\begin{aligned}[\hat{\mathbf{M}}_j, \hat{\mathbf{M}}_k] &= \frac{1}{4} \mathbf{1} \otimes [\sigma_j, \sigma_k] = \frac{i}{2} \varepsilon_{jkl} \mathbf{1} \otimes \sigma_l = i\varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{M}}_l, \\ [\hat{\mathbf{N}}_j, \hat{\mathbf{N}}_k] &= -\frac{1}{4} \sigma_1^2 \otimes [\sigma_j, \sigma_k] = -\frac{i}{2} \varepsilon_{jkl} \mathbf{1} \otimes \sigma_l = -i\varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{M}}_l, \\ [\hat{\mathbf{M}}_j, \hat{\mathbf{N}}_k] &= [\hat{\mathbf{N}}_j, \hat{\mathbf{M}}_k] = \frac{i}{4} \sigma_1 \otimes [\sigma_j, \sigma_k] = -\frac{i}{2} \varepsilon_{jkl} \sigma_1 \otimes \sigma_l = i\varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{N}}_l,\end{aligned}$$

( 8.121 )

a tedy matice ( 8.118 ) skutečně reprezentují generátory vlastní Lorentzovy grupy.

Z těchž relací rovněž vidíme, že pokud  $\mathbf{n}$  je libovolný jednotkový vektor, potom

$$(2\mathbf{n}\hat{\mathbf{M}})^2 = (2i\mathbf{n}\hat{\mathbf{N}})^2 = \mathbf{1}. \quad ( 8.122 )$$

Tedy pootočení kolem osy  $\mathbf{n}$ , resp. speciální Lorentzově transformaci podél této osy je v uvažované reprezentaci přiřazena matice

$$\mathbf{S}(\mathbf{n}, \varphi) = \exp(i\varphi\mathbf{n}\hat{\mathbf{M}}) = \exp\left(i\frac{\varphi}{2}\mathbf{n}\boldsymbol{\Sigma}\right) = \cos\frac{\varphi}{2} + i\mathbf{n}\boldsymbol{\Sigma}\sin\frac{\varphi}{2}, \quad ( 8.123 )$$

resp.

$$\mathbf{S}(\mathbf{n}, v) = \exp(iu\mathbf{n}\hat{\mathbf{N}}) = \exp\left(i\frac{u}{2}\mathbf{n}\boldsymbol{\alpha}\right) = \cosh\frac{u}{2} - \mathbf{n}\boldsymbol{\alpha}\sinh\frac{u}{2}, \quad ( 8.124 )$$

tj.

$$\mathbf{S}(\mathbf{n}, v) = \sqrt{\frac{1+\xi}{2\xi}} \left[ 1 - \frac{1}{1+\xi} \frac{v}{c} \mathbf{n}\boldsymbol{\alpha} \right], \quad ( 8.125 )$$

kde

$$\xi \equiv \frac{1}{\cosh u} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \quad ( 8.126 )$$

Povšimněme si, že pro matice ( 8.120 ) platí

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{M}}^\dagger &= \hat{\mathbf{M}}, \\ \hat{\mathbf{N}}^\dagger &= \hat{\mathbf{N}}, \end{aligned} \quad ( 8.127 )$$

a

$$\left[ \hat{\mathbf{M}}, \gamma^0 \right] = \left\{ \hat{\mathbf{N}}, \gamma^0 \right\} = 0. \quad (8.128)$$

Tedy nalezená reprezentace vlastní Lorentzovy grupy sice není unitární, ale zato matice  $\mathbf{S}(\Lambda)$ , odpovídající libovolnému elementu této grupy vyhovují relaci

$$\gamma^0 \mathbf{S}^\dagger(\Lambda) \gamma^0 = \mathbf{S}^{-1}(\Lambda). \quad (8.129)$$

Ze vztahů ( 8.128 ), je vskutku evidentní, že této relaci vyhovují matice ( 8.123 ), ( 8.124 ).

Na druhé straně víme, že libovolnou Lorentzovu transformaci lze obdržet komposicí dvou natočení a jedné speciální Lorentzovy transformace, tj. libovolnou z matic ( 8.37 ) můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\Lambda(\omega) = \Lambda(\mathbf{n}_1, \varphi_1) \Lambda(\mathbf{n}_3, u) \Lambda(\mathbf{n}_2, \varphi_2). \quad (8.130)$$

To ovšem znamená, že také matice odpovídající této transformaci v libovolné reprezentaci musí být vyjádřitelná v analogickém tvaru, tj.

$$\mathbf{S}(\Lambda) = \mathbf{S}(\mathbf{n}_1, \varphi_1) \mathbf{S}(\mathbf{n}_3, u) \mathbf{S}(\mathbf{n}_2, \varphi_2). \quad (8.131)$$

A tedy ve zkonstruované reprezentaci vyhovuje relaci ( 8.129 ), neboť

$$\left( \gamma^0 \right)^2 = \mathbf{1}. \quad (8.132)$$

Podívejme se tedy, o jakou že reprezentaci vlastní Lorentzovy grupy se jedná.

K tomu stačí, když si uvědomíme, že matice

$$\begin{aligned} \mathbf{J}_{(1)} &\equiv \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{M}} + i \hat{\mathbf{N}} \right), \\ \mathbf{J}_{(2)} &\equiv \frac{1}{2} \left( \hat{\mathbf{M}} - i \hat{\mathbf{N}} \right) \end{aligned} \quad (8.133)$$

mají v Pauliho reprezentaci tvar

$$\mathbf{J}_{(1)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & -\boldsymbol{\sigma} \\ -\boldsymbol{\sigma} & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_{(2)} = \frac{1}{4} \begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \quad (8.134)$$

Odtud je ihned vidět, že matice

$$\mathbf{J}_{(1)}^2 = \frac{3}{8} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & -\mathbf{1} \\ -\mathbf{1} & \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{J}_{(2)}^2 = \frac{3}{8} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{1} \end{pmatrix} \quad (8.135)$$

nejsou násobkem matice jednotkové a nalezená reprezentace tedy není ireducibilní.

Snadno se však přesvědčíme, že je lze obě současně diagonalizovat pomocí matice

$$\mathbf{T} \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & -\mathbf{1} \end{pmatrix} = \mathbf{T}^{-1}, \quad (8.136)$$

a přitom

$$\mathbf{T} \mathbf{J}_{(1)}^2 \mathbf{T}^{-1} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{1} \end{pmatrix}, \quad \mathbf{T} \mathbf{J}_{(2)}^2 \mathbf{T}^{-1} = \frac{3}{4} \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (8.137)$$

Tedy maticemi  $\mathbf{S}(\omega)$  je realizována reprezentace

$$D^{(0, \frac{1}{2})} \oplus D^{(\frac{1}{2}, 0)}. \quad (8.138)$$

Veličiny, které se transformují podle této reprezentace, se nazývají **bispinory**.

Na základě relace ( 8.104 ) snadno zjistíme, že pokud bispinor  $\psi(q)$  je řešením Diracovy rovnice ( 8.100 ), potom diracovsky sdružený bispinor

$$\bar{\psi}(q) \approx \psi^\dagger(q) \gamma^0 \quad (8.139)$$

vyhovuje rovnici

$$-i \frac{\partial}{\partial q^\mu} \bar{\psi}(q) \gamma^\mu - \bar{\psi}(q) \frac{mc}{\hbar} = 0, \quad (8.140)$$

kterou můžeme ekvivalentně zapsat ve tvaru

$$\left[ i(-\gamma^\mu)^\top \frac{\partial}{\partial q^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right] \bar{\psi}^\top(q) = 0. \quad (8.141)$$

Transponováním obou stran rovnosti ( 8.102 ) dostaneme antikomutační relace

$$\left\{ (-\gamma^\mu)^\top, (-\gamma^\nu)^\top \right\} = 2g^{\mu\nu}. \quad (8.142)$$

Musí tedy existovat unitární matice **C** (zvaná **Schwingerova matice**), pro kterou platí:

$$\mathbf{C}(\gamma^\mu)^\top \mathbf{C}^\dagger = -\gamma^\mu. \quad (8.143)$$

Z formule ( 8.140 ) pak okamžitě vidíme, že

$$\psi_C(q) \equiv \mathbf{C} \bar{\psi}^\top(q) \quad (8.144)$$

vyhovuje Diracově rovnici

$$\left[ (i\gamma^\mu) \frac{\partial}{\partial q^\mu} - \frac{mc}{\hbar} \right] \psi_C(q) = 0. \quad (8.145)$$

Říkáme, že řešení  $\psi_C(q)$  je nábojově sdružené k řešení  $\psi(q)$ .

K tomu, abychom našli konkrétní vyjádření matice  $\mathbf{C}$ , si nejprve povšimněme toho, že již sama možnost přepisu antikomutačních relací ( 8.102 ) do tvaru

$$\{(-\gamma^\mu), (-\gamma^\nu)\} = 2g^{\mu\nu} \quad ( 8.146 )$$

zaručuje existenci unitární matice  $\gamma_5$ , takové, že platí

$$\gamma_5 \gamma^\mu \gamma_5^{-1} = -\gamma^\mu, \quad ( 8.147 )$$

což je totéž, jako

$$\{\gamma_5, \gamma^\mu\} = 0. \quad ( 8.148 )$$

Z antikomutačních relací ( 8.102 ), je zřejmé, že součin všech čtyř  $\gamma$ -matic (nezávisle na pořadí faktorů) antikomutuje s každou z matic  $\gamma^\mu$ , a tedy požadavku ( 8.147 ) jistě vyhovuje matice

$$\gamma_5 \equiv i\gamma^0\gamma^1\gamma^2\gamma^3 = -\frac{i}{4!}\varepsilon_{\mu\nu\rho\sigma}\gamma^\mu\gamma^\nu\gamma^\rho\gamma^\sigma = -i\mathbf{a}^1\mathbf{a}^2\mathbf{a}^3 = -\frac{i}{3!}\varepsilon_{jkl}\mathbf{a}^j\mathbf{a}^k\mathbf{a}^l. \quad ( 8.149 )$$

Každá unitární matice antikomutující se všemi čtyřmi  $\gamma$ -maticemi se od ní může lišit jen fázovým faktorem.

V dalším budeme pod  $\gamma_5$  rozumět matici definovanou formulí ( 8.149 ). Takto definovaná matice je nejen unitární, ale také hermitovská, tj. platí nejen

$$\gamma_5^\dagger = \gamma_5^{-1}, \quad ( 8.150 )$$

ale rovněž

$$\gamma_5^\dagger = \gamma_5, \quad ( 8.151 )$$

a tedy

$$(\gamma_5)^2 = \mathbf{1}. \quad (8.152)$$

V Diracově reprezentaci je

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \quad (8.153)$$

Porovnáním s formulí ( 8.147 ) vidíme, že matice nábojového sdružení je požadavkem ( 8.143 ) určena, až na libovolný fázový faktor.

V diracově reprezentaci dostáváme pro tuto matici vyjádření

$$\mathbf{C} = i\gamma^0\gamma^2 = i\alpha_2, \quad (8.154)$$

neboli

$$\mathbf{C} = i \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma}_2 \\ \boldsymbol{\sigma}_2 & \mathbf{0} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (8.155)$$

Z Pauliho teorému víme, že pokud matice  $\gamma^\mu$  představují jakoukoli reprezentaci Diracovy algebry a přitom vyhovují podmínkám hermicity vyjádřeným relacemi ( 8.103 ).

Potom existuje unitární matice  $\mathbf{A}$  taková, že

$$\gamma'^\mu = \mathbf{A}\gamma^\mu\mathbf{A}^\dagger, \quad (8.156)$$

kde  $\gamma^\mu$  jsou výše uvažované matice v Diracova reprezentaci.

Z definice matice  $\gamma_5$  je zřejmé, že při přechodu od Diracovy reprezentace k jiné reprezentaci definované unitární transformací

$$\gamma^\mu \rightarrow \gamma'^\mu, \quad (8.157)$$

přechází



$$\gamma_5 \rightarrow \gamma'_5 = \mathbf{A} \gamma_5 \mathbf{A}^\top. \quad (8.158)$$

Matice nábojového sdružení má v této nové reprezentaci tvar

$$\mathbf{C}' = \mathbf{A} \mathbf{C} \mathbf{A}^\top, \quad (8.159)$$

tj.

$$\mathbf{C}' = i \gamma'^0 \gamma'^2 \mathbf{A} \mathbf{A}^\top. \quad (8.160)$$

Matice (8.155) je antisymetrická, kterážto vlastnost je invariantní vzhledem k transformaci (8.159), a tedy v libovolné reprezentaci platí:

$$\mathbf{C}^\top = -\mathbf{C}. \quad (8.161)$$

Na základě této relace se pak snadno přesvědčíme, že

$$\mathbf{C} \bar{\psi}_c^\top(q) \equiv \psi(q), \quad (8.162)$$

a tedy výrok „první bispinor je nábojově sdružený ke druhému“ je ekvivalentní s výrokem „druhý bispinor je nábojově sdružený k prvnímu“.

Elektrický náboj se nám tak objevuje v teorii z ničehož nic, jakožto důsledek invariance kvantové vlnové funkce vzhledem k Lorenzově transformaci.

Analogicky tomu, nás Diracova rovnice informuje o existenci částic s poločíselným spinem.

To však ještě není zdaleka všechno. Zapišme si Diracovu rovnici ve tvaru

$$\left( i\hbar \frac{\partial}{\partial t} + i\hbar \boldsymbol{\alpha} \cdot \nabla - \boldsymbol{\beta} mc^2 \right) \begin{pmatrix} \psi_1(q) \\ \psi_2(q) \\ \psi_3(q) \\ \psi_4(q) \end{pmatrix} = 0. \quad (8.163)$$

Každé řešení rovnice

$$\hat{\mathbf{P}} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) = \mathbf{p} \psi_{\mathbf{p}}(\mathbf{r}) \quad (8.164)$$

Ize vyjádřit jako lineární kombinaci čtyř funkcí:

$$\psi_{\mathbf{p};j}(\mathbf{r}) = \mathbf{U}(\mathbf{p};j) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right), \quad j = 1, 2, 3, 4, \quad (8.165)$$

kde  $\mathbf{U}(\mathbf{p};j)$  je libovolná čtveřice lineárně nezávislých jednosloupcových matic.

Přítom skalární součin

$$\int \psi_{\mathbf{p};j}^{\dagger}(\mathbf{r}) \int \psi_{\mathbf{p}';k}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = (2\pi\hbar)^3 \mathbf{U}(\mathbf{p};j) \mathbf{U}(\mathbf{p}';k) \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'). \quad (8.166)$$

Každé nenulové řešení rovnice (8.164) je tedy také vlastní funkcí kvadrátu hamiltoniánu, příslušnou k vlastní hodnotě  $E^2$ .

Vlastní vektor hamiltoniánu, který je zároveň vlastním vektorem operátoru hybnosti, příslušným k vlastní hodnotě  $\mathbf{p}$ , musí splňovat rovnici

$$\hat{\mathbf{H}} \mathbf{U}(\mathbf{p}; p_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right) = c p_0 \mathbf{U}(\mathbf{p}; p_0) \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right), \quad (8.167)$$

a tedy  $\mathbf{U}(\mathbf{p}; p_0)$  musí být řešením algebraické rovnice

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}) \mathbf{U}(\mathbf{p}; p_0) = c p_0 \mathbf{U}(\mathbf{p}; p_0), \quad (8.168)$$

kde

$$\mathbf{H}(\mathbf{p}) \equiv c \boldsymbol{\alpha} \cdot \mathbf{p} + \boldsymbol{\beta} m c^2. \quad (8.169)$$

Je hermitovská matice, jejíž vlastní hodnoty jsou shodné s hledanými vlastními hodnotami hamiltoniánu.

Díky antikomutačním relacím, kterým vyhovují matice  $\alpha$ ,  $\beta$ , dostáváme

$$\mathbf{H}^2(\mathbf{p}) = c^2 \mathbf{p}^2 + m^2 c^4 = E^2, \quad (8.170)$$

srov. ( 8.73 ).

Nulovost stopy matic  $\alpha$ ,  $\beta$  zaručuje, že

$$\text{Tr } \mathbf{H}(\mathbf{p}) = 0. \quad (8.171)$$

Z posledních dvou rovností již vidíme, že vlastními hodnotami matice  $\mathbf{H}(\mathbf{p})$  jsou  $\pm E$ , a přitom každá z nich je dvakrát degenerovaná.

Dospíváme tak k závěru, že každý stav diracovské částice se zadaným impulsem  $\mathbf{p}$  je popsán čtyřkomponentovou vlnovou funkcí, kterou je možno vyjádřit jako superpozici dvou funkcí

$$\psi_{\mathbf{p};j}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{u}(\mathbf{p};j)}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3 \mathbf{N}(\mathbf{p};j)}} \exp\left(\frac{i}{\hbar} \mathbf{p} \cdot \mathbf{r}\right), \quad j = 1, 2, \quad (8.172)$$

kde jednosloupcové matice  $\mathbf{u}(\mathbf{p};j)$  vyhovují rovnici

$$\mathbf{H}(\mathbf{p})\mathbf{u}(\mathbf{p};j) = E\mathbf{u}(\mathbf{p};j) \quad (8.173)$$

a podmínce ortogonality

$$\mathbf{u}^\top(\mathbf{p};j)\mathbf{u}(\mathbf{p};j) = \mathbf{N}(\mathbf{p};j)\delta_{jk}, \quad (8.174)$$

díky níž je

$$\int \psi_{\mathbf{p};j}^\dagger(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{p}';k}(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r} = \delta_{jk}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \quad (8.175)$$

Ze vztahu ( 8.99 ) víme, že pokud je  $\psi_E(\mathbf{r})$  je jakýkoliv vlastní vektor hamiltoniánu příslušný k vlastní hodnotě  $E$ , potom nábojovým sdružením z něho obdržíme vektor téhož operátoru příslušný k vlastní hodnotě  $-E$ .

Specielně to musí platit o bispinorech ( 8.172 ), jež mají popisovat stav diracovské částice s impulsem  $\mathbf{p}$ .

Čtyřkomponentová funkce

$$\left(\psi_{\mathbf{p};j}(\mathbf{r})\right)_C = \frac{\mathbf{v}(\mathbf{p};j)}{\sqrt{(2\pi\hbar)^3 2E}} \exp\left(-\frac{i}{\hbar}\mathbf{p}\cdot\mathbf{r}\right), \quad j=1,2 \quad (8.176)$$

kde

$$\mathbf{v}(\mathbf{p};j) \equiv \mathbf{u}_C(\mathbf{p};j) \equiv \mathbf{C}\boldsymbol{\beta}^T \mathbf{u}^*(\mathbf{p};j) \quad (8.177)$$

je vlastním vektorem hamiltoniánu příslušejícím k vlastní hodnotě  $-E$ . Jako takový je nutně ortogonální ke všem vlastním vektorům tohoto operátoru patřícím ke kladným vlastním hodnotám.

Musí tedy platit

$$\int \psi_{\mathbf{p}';k}^T(\mathbf{r}) \left(\psi_{\mathbf{p};j}(\mathbf{r})\right)_C d^3\mathbf{r} = 0, \quad (8.178)$$

a tedy

$$\mathbf{u}^T(\mathbf{p}';k) \mathbf{v}(\mathbf{p};j) \delta(\mathbf{p} + \mathbf{p}') = 0, \quad (8.179)$$

neboli

$$\mathbf{u}^T(\mathbf{p}';k) \mathbf{v}(-\mathbf{p};j) = 0. \quad (8.180)$$

Z formulí ( 8.167 ), ( 8.168 ), vidíme, že jednosloupcová matice  $\mathbf{v}(\mathbf{p};j)$  vyhovuje algebraické rovnici

$$\mathbf{H}(-\mathbf{p}) \mathbf{v}(\mathbf{p};j) = -E \mathbf{v}(\mathbf{p};j). \quad (8.181)$$

$\mathbf{u}(\mathbf{p};j)$ , resp.  $\mathbf{v}(\mathbf{p};j)$  jsou tedy vlastními vektory hermitovské matice  $\mathbf{H}(\mathbf{p})$ , příslušející k vlastní hodnotě  $E$ , resp.  $-E$ .

Relativistická kvantová mechanika tak předpovídá existenci jakéhosi zrcadlového protějšku částic, vyznačujícího se zápornými frekvencemi (pohybem v inverzním čase) a opačným nábojem.

V předcházejícím jsme viděli, že bispinor přiřazený volné nehmotné diracovské částici s danou helicitou je vlastním vektorem matice  $\gamma_5$ . Právě proto se o matici  $\gamma_5$  hovoří jako o operátoru chiralidy.

Vyjděme z triviálního postřehu, že každý bispinor lze zapsat ve tvaru

$$\psi = \psi_R + \psi_L, \quad (8.182)$$

kde jednosloupcové matice

$$\begin{aligned} \psi_R &= \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)\psi, \\ \psi_L &= \frac{1}{2}(1 - \gamma_5)\psi, \end{aligned} \quad (8.183)$$

pokud jsou nenulové, představují vlastní vektory chiralidy příslušné k vlastním hodnotám  $+1$ , resp.  $-1$ :

$$\begin{aligned} \gamma_5 \psi_R &= \psi_R, \\ \gamma_5 \psi_L &= -\psi_L. \end{aligned} \quad (8.184)$$

Rozklad (8.183) je invariantní vůči libovolné vlastní Lorentzově transformaci, tj. platí:

$$(\psi_R)_\Lambda = (\psi_\Lambda)_R \quad \forall \Lambda \in \text{VLG}, \quad (8.185)$$

kde

$$\begin{aligned} (\psi_R)_\Lambda &\equiv \mathbf{S}(\Lambda)\psi_R, \\ (\psi_\Lambda)_R &\equiv \frac{1}{2}(1 + \gamma_5)\psi_\Lambda, \\ \psi_\Lambda &\equiv \mathbf{S}(\Lambda)\psi. \end{aligned} \quad (8.186)$$

Obdobné vzťahy platí medzi levotočivými časťmi bispinorů. K důkazu tvrzení si stačí uvědomit, že

$$[\gamma_5, \Sigma] = [\gamma_5, \mathbf{a}] = 0, \quad (8.187)$$

tj. že matice  $\gamma_5$  komutují jak s operátory rotací, tak s operátory boostů. Na druhé straně však matice  $\gamma_5$  a  $\gamma^0$  navzájem antikomutují, takže při prostorové inverzi si pravotočivá a levotočivá složka navzájem vymění roli, tj.

$$\begin{aligned} (\psi_R)_P &= (\psi_P)_L, \\ (\psi_L)_P &= (\psi_P)_R, \end{aligned} \quad (8.188)$$

kde

$$\psi_P \equiv \gamma^0 \psi. \quad (8.189)$$

Hermitovská matice  $\gamma_5$  má nulovou stopu a její kvadrát je roven matici jednotkové.

Díky tomu existuje reprezentace Diracovy algebry realizovaná maticemi

$$\gamma^\mu \equiv \mathbf{T} \gamma_D^\mu \mathbf{T}^\dagger, \quad (8.190)$$

kde  $\mathbf{T}$  je taková unitární matice, že

$$\gamma_5 = \begin{pmatrix} \mathbf{1} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\mathbf{1} \end{pmatrix}. \quad (8.191)$$

v takové reprezentaci mají matice  $\psi_R$ , resp.  $\psi_L$  nenulové pouze horní, resp. dolní dvě komponenty, takže mají tvar

$$\psi_R = \begin{pmatrix} \boldsymbol{\varphi} \\ \mathbf{0} \end{pmatrix}, \quad \psi_L = \begin{pmatrix} \mathbf{0} \\ \boldsymbol{\chi} \end{pmatrix}, \quad (8.192)$$

kde  $\boldsymbol{\varphi}$  a  $\boldsymbol{\chi}$  jsou dvouřádkové matice.

Tomuto požadavku vyhovuje např. matice ( 8.136 ), kterou můžeme napsat též jako

$$\mathbf{T} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\gamma}_D^0 + \boldsymbol{\gamma}_D^5) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\boldsymbol{\gamma}^0 + \boldsymbol{\gamma}^5). \quad (8.193)$$

Odpovídající reprezentace Diracovy algebry se nazývá **chirální**, neboli **Weylova**.

Matice ( 8.190 ) v ní mají tvar

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\gamma}^0 &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & \mathbf{1} \\ \mathbf{1} & \mathbf{0} \end{pmatrix}, \\ \boldsymbol{\gamma} &= \begin{pmatrix} \mathbf{0} & -\boldsymbol{\sigma} \\ \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.194)$$

Generátory rotací, resp. boostu ( 8.118 ) pak mají v této reprezentaci tvar

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{M}} &= \frac{1}{2}\boldsymbol{\Sigma} = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathbf{N}} &= \frac{i}{2}\boldsymbol{\alpha} = \frac{i}{2}\begin{pmatrix} \boldsymbol{\sigma} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & -\boldsymbol{\sigma} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (8.195)$$

Ve Weylově reprezentaci se tedy horní, resp. dolní komponenty

bispinoru transformují jako  $D^{(0, \frac{1}{2})}$ , resp.  $D^{(\frac{1}{2}, 0)}$ .

Tato skutečnost je přitom nezávislá na tom, jakou realizaci Diracovy algebry využíváme.

Proto je výhodné v termínech Weylovy reprezentace vyjádřit Diracovu rovnici ( 8.100 ):

$$(i\partial_\mu \boldsymbol{\gamma}^\mu - \kappa)\boldsymbol{\psi}(q) = 0, \quad (8.196)$$

kde  $\kappa$  je reciproká hodnota Comptonovy vlnové délky.

Vynásobíme-li ji maticí  $\boldsymbol{\gamma}_5$ , vidíme, že je ekvivalentní s rovnicí

$$(i\partial_{\mu}\gamma^{\mu} - \kappa)\gamma_5\psi(q) = 0. \quad (8.197)$$

Sečtením a odečtením posledních dvou rovnic dostáváme vztahy

$$\begin{aligned} i\partial_{\mu}\gamma^{\mu}\psi_R(q) &= \kappa\psi_L(q), \\ i\partial_{\mu}\gamma^{\mu}\psi_L(q) &= \kappa\psi_R(q), \end{aligned} \quad (8.198)$$

kteřé v chirální reprezentaci představují soustavu rovnic

$$\begin{aligned} i(\partial_0 + \nabla\sigma)\varphi(q) &= \kappa\chi(q), \\ i(\partial_0 + \nabla\sigma)\chi(q) &= \kappa\varphi(q) \end{aligned} \quad (8.199)$$

pro dvoukomponentové spinory  $\varphi, \chi$ .

Nepřehlédněme, že vazbu mezi těmito dvěma rovnicemi

zprostředkovává pouze parametr  $\kappa$ , takže v případě nehmotné částice se tato soustava rozpadá na dvě nezávislé **Weylovy rovnice**

$$\begin{aligned} (\partial_0 + \nabla\sigma)\varphi(q) &= 0, \\ (\partial_0 + \nabla\sigma)\chi(q) &= 0. \end{aligned} \quad (8.200)$$

Každá z nich je invariantní vůči vlastní Lorentzově grupě.

Při prostorové inverzi si však navzájem vyměňují úlohu.

Pokud tedy od pohybové rovnice požadujeme invarianci pouze vůči vlastní Lorentzově grupě, potom každá z rovnic ( 8.200 ) může být sama o sobě kandidátem na pohybovou rovnici pro částici s nulovou hmotou a spinem 1/2.

O odpovídající částici se pak hovoří jako o **weylovské částici**.

Zdůrazněme, že zatímco k popisu stavů diracovské částice potřebujeme čtyřkomponentové vlnové funkce, v případě weylovské částice vystačíme s dvoukomponentovými.

Snadno totiž nahlédneme, že polovina ze všech stavů, ve kterých se může nalézat částice diracovská, je pro weylovskou částici zakázaných.



Zatímco helicity diracovské částice může nabývat hodnot  $\pm 1/2$ , v případě částice weylovské je to buď pouze  $+1/2$ , nebo  $-1/2$ . Není bez zajímavosti, že sám H. Weyl, který svoji rovnici publikoval roku 1929, ji jako kandidáta na pohybovou rovnici zavrhl, právě z důvodu, že nevyhovovala požadavku pravo-levé symetrie. Její fyzikální význam tak mohl být doceněn až tehdy, když v polovině padesátých let experimentální data jasně prokázala, že pravo-levá symetrie je v přírodě obecně narušena. Že některé přírodní zákony nejsou symetrické vůči prostorové inverzi. Ukažme si nyní invarianci Diracovy rovnice vzhledem k unitárním transformacím, konkrétněji vzhledem ke grupě  $U(1)$ . Těmto transformacím odpovídá přetočení vlnové funkce

$$\psi \rightarrow \psi e^{i\alpha}. \quad (8.201)$$

Při této transformaci tedy nahrazujeme původní vlnovou funkci  $\psi$ , přetočenou vlnovou funkcí  $\psi'$  pro kterou platí:

$$\psi' = \psi e^{i\alpha}. \quad (8.202)$$

Snadno se přesvědčíme, že pro kvadrát normy pak platí

$$\langle \psi' | \psi' \rangle \rightarrow \psi'^* e^{-i\alpha} \psi e^{i\alpha} = \langle \psi | \psi \rangle. \quad (8.203)$$

Vůči této transformaci je Diracova rovnice samozřejmě invariantní (násobíme konstantou), stejně, jako kterákoli jiná pohybová rovnice kvantové mechaniky.

Podívejme se ale jak se situace změní, jestliže bude parametr  $\alpha$  obecně funkcí místa a času, tj.

$$\alpha = \alpha(\mathbf{r}, t). \quad (8.204)$$

V tomto případě hovoříme o lokální symetrii  $U(1)$ , označované jako  $U(1)_{\text{loc}}$ .

Snadno opět nahlédneme, že ač hustota pravděpodobnosti se při této transformaci

$$\psi' = \psi e^{i\alpha(\mathbf{r},t)} \quad (8.205)$$

opět zachovává:

$$\langle \psi' | \psi' \rangle \rightarrow \psi'^* e^{-i\alpha(\mathbf{r},t)} \psi' e^{i\alpha(\mathbf{r},t)} = \langle \psi | \psi \rangle. \quad (8.206)$$

Vlnová funkce  $\psi'$  již není řešením původní Diracovy rovnice, neboť kalibrační transformace  $U(\mathbf{1})_{\text{loc}}$  závisí na prostoročasových souřadnicích. Na základě našich dřívějších poznatků o kalibrační invarianci snadno uhodneme, že abychom zachovali kalibrační invarianci Diracovy rovnice vzhledem k symetrii  $U(\mathbf{1})_{\text{loc}}$ , budeme do ní muset přidat další 4 kompenzující pole.

Provedeme-li záměnu parciálních derivací za derivace kovariantní, předpisem

$$\partial_\mu \rightarrow D_\mu \equiv \partial_\mu + \frac{ie}{\hbar c} A_\mu, \quad (8.207)$$

dá se ukázat, že Diracova rovnice zůstane kalibračně invariantní vzhledem k transformacím  $U(\mathbf{1})_{\text{loc}}$  právě tehdy, pokud  $A_\mu$  jsou komponenty čtyřpotenciálu.

Oním hledaným kompenzujícím polem je pole elektromagnetické, jak si podrobněji ukážeme ihned v následující kapitole.

Symetrie  $U(\mathbf{1})_{\text{loc}}$  podle věty Noetherové bude souviset s nějakým dalším zákonem zachování.

V tomto případě se jedná o zákon zachování elektrického náboje.

Pro diracovskou částici v elektromagnetickém poli tak dospíváme k rovnici

$$(i\gamma^\mu D_\mu - \kappa)\psi(q) = 0. \quad (8.208)$$

Snadno se lze přesvědčit, že pro každé řešení  $\psi(q)$  této rovnice vyhovuje čtyřproud

$$j^\mu(q) \equiv c\bar{\psi}(q)\gamma^\mu\psi(q) \quad (8.209)$$

rovnici kontinuity

$$\partial_{\mu} j^{\mu}(q) = 0. \quad (8.210)$$

Pauliho rovnice

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(q) = \left[ (c\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A}(q)) \cdot \boldsymbol{\alpha} + \beta mc^2 + e\varphi(q) \right] \psi(q), \quad (8.211)$$

kde

$$\varphi = A^0, \quad (8.212)$$

při Pauliho reprezentaci Diracovy algebry představuje soustavu rovnic

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(q) &= \left[ (c\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A}(q)) \cdot \boldsymbol{\sigma} \chi(q) + (mc^2 + e\varphi(q)) \right] \Phi(q), \\ i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(q) &= \left[ (c\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A}(q)) \cdot \boldsymbol{\sigma} \Phi(q) + (-mc^2 + e\varphi(q)) \right] \chi(q), \end{aligned} \quad (8.213)$$

pro dvoukomponentové funkce  $\Phi$ ,  $\chi$ , tvořící horní, resp. dolní komponenty bispinoru  $\psi$ .

V obecném případě představuje  $\psi$  nějakou superpozici stacionárních stavů diracovské částice.

V nerelativistickém případě budou k této superpozici přispívat výrazněji pouze ty stavy, jejichž energie má hodnotu blízkou k energii klidové, a tedy bude

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \chi(q) \approx mc^2 \chi(q). \quad (8.214)$$

Pro nepříliš silná pole bude

$$(-mc^2 + e\varphi(q)) \chi(q) \approx -mc^2 \chi(q). \quad (8.215)$$

z druhé rovnice ( 8.213 ) v tomto případě dostáváme

$$\chi(q) \approx \frac{1}{2mc^2} (c\hat{\mathbf{P}} - e\mathbf{A}(q)) \boldsymbol{\sigma} \Phi(q) . \quad ( 8.216 )$$

V této aproximaci se pak formule ( 8.213 ) redukuje na rovnici

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(q) = \left\{ \frac{1}{2m} \left[ \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(q) \right) \cdot \boldsymbol{\sigma} \right]^2 + e\varphi(q) + mc^2 \right\} \Phi(q) . \quad ( 8.217 )$$

Na základě relací ( 8.92 ) dostáváme

$$\left[ \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(q) \right) \boldsymbol{\sigma} \right]^2 = \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(q) \right)^2 - \frac{e\hbar}{c} \mathbf{B}(q) \cdot \boldsymbol{\sigma} , \quad ( 8.218 )$$

a tedy rovnici ( 8.218 ) můžeme přepsat do tvaru

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Phi(q) = \left\{ \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{P}} - \frac{e}{c} \mathbf{A}(q) \right)^2 - \mu \mathbf{B}(q) \cdot \boldsymbol{\sigma} + e\varphi(q) + mc^2 \right\} \Phi(q) , \quad ( 8.219 )$$

kde

$$\mu = \frac{e\hbar}{2mc} \quad ( 8.220 )$$

je magnetický moment diracovské částice.

Vidíme, že je orientován ve, resp. proti směru jejího spinu v závislosti na tom, zda je nabitá kladně, či záporně.

## Elektromagnetická interakce

Působení	výběrové (na $Q_e \neq 0$ )
Dosah	nekonečný
Symetrie	$U(1)_{\text{loc}}$
IM částice	$\gamma$ - foton

- **Působení interakce:** Elektromagnetická interakce je *výběrová interakce*. Působí jen na částice s nenulovým elektrickým nábojem.
- **Dosah interakce:** *Nekonečný*, existují radiační členy s intenzitou pole  $1/r$ , tj. s intenzitou energie  $1/r^2$ , které neubývají ani v nekonečnu. Tyto členy odpovídají elektromagnetickým vlnám.
- **Symetrie interakce:** Každá ze základních interakcí podléhá určité symetrii, která je pro ni typická. Pro elektromagnetickou interakci jde o symetrii, při které se rovnice kvantové teorie pole nezmění, nahradíme-li vlnovou funkci jinou vlnovou funkcí, vynásobenou komplexní jednotkou. Jde tedy o transformaci:  $\psi \rightarrow \psi \exp[i\alpha(t, x, y, z)]$ . Z matematického hlediska se jedná o pootočení vlnové funkce, neboli o *unitární transformaci*, s *jedním* parametrem (úhlem  $\alpha$ ), který může být v každém bodě časoprostoru různý (závisí na  $t, x, y, z$  - takovéto transformace nazýváme *lokální*). Matematici proto tuto transformaci označují  $U(1)_{\text{loc}}$ . Jejím přímým důsledkem je existence a zachování elektrického náboje. Někdy se proto zkráceně hovoří o kvantové teorii elektromagnetického pole jako o  $U(1)_{\text{loc}}$  teorii.
- **Intermediální částice:** Symetrie je popsána jedním volným parametrem (úhlem otočení  $\alpha$ ), kterému odpovídá jediná intermediální částice - foton. Foton má nulovou klidovou hmotnost. Plyne to z relací neurčitosti mezi energií vyslané intermediální částice  $mc^2$  a dobou, po kterou může být mimo

objekt. Má-li mít interakce nekonečný dosah, musí mít intermediální částice nulovou hmotnost.

## Trocha historie

To, že jevy elektrické a magnetické mají společnou podstatu, objevili ve svých experimentech a teoretických pracích Michael Faraday, Andre Marie Amper, Hans Christian Orsted. Završením těchto prací byla **teorie elektromagnetického pole** formulovaná Jamesem Clercem Maxwellem a Heinrichem Hertzem. Dnešní podoba Maxwellových rovnic pochází od Olivera Heavisidea. Maxwell správně rozpoznal, že světlo je příčné elektromagnetické vlnění. Mezi různými souřadnicovými systémy se Maxwellovy rovnice transformují pomocí Lorentzovy transformace. Právě odlišnost transformačních vlastností Maxwellových rovnic od rovnic newtonovské mechaniky vedla ve svých důsledcích ke vzniku speciální teorie relativity. Na konci 19. století badatelé Heinrich Hertz, Nicola Tesla a Guglielmo Marconi experimentálně prokázali platnost Maxwellových rovnic, když se jim podařilo uskutečnit bezdrátový přenos energie a informace.



Hans Christian Ørsted (1777 – 1851)    Nicola Tesla    Guglielmo Marconi (1874 – 1937)  
( 1856 - 1943 )

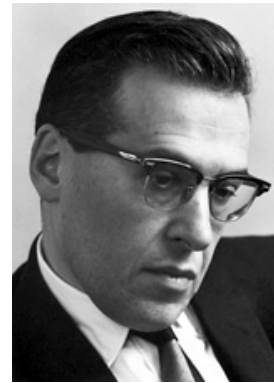
Na počátku 20. století bylo stále zřejmější, že matematické prostředky, které využíváme k popisu makroskopických jevů, selhávají při popisu mikrosvěta. Byl třeba nový, kvantový přístup k popisu jevů, který využívá nekomutujících objektů. To je nutné, uvědomíme-li si, že například sám akt měření není komutativní (různé výsledky

dosáhneme, změříme-li v mikrosvětě nejprve rychlost a poté polohu částice, nebo provedeme-li měření v obráceném pořadí. U zrodu kvantové teorie stáli Max Planck, Albert Einstein, Erwin Schrödinger, Werner Heisenberg, Louis de Broglie, Wolfgang Pauli, Max Born a mnozí další. První verze kvantových teorií (Schrödingerova rovnice, Heisenbergova maticová mechanika) byly nerelativistické. K relativistické kvantové teorii přispěli zejména Klein, Gordon (Klein-Gordonova rovnice pro částice s nulovým spinem) a Paul Adrien Maurice Dirac (Diracova rovnice pro částice s poločíselným spinem). Právě **Diracova rovnice**, jako rovnice vhodná pro popis elektronu, znamenala další zvrát v elektromagnetické teorii. Na jejím základě předpověděl Dirac existenci pozitronu, první antičástice. Na základě Diracovy rovnice byla vybudována kvantová elektrodynamika. Za její tvorbu získali Richard Phillips Feynman, Julian Schwinger a Sin-Itiro Tomonaga Nobelovu cenu v roce 1965.

### Tvůrci kvantové elektrodynamiky



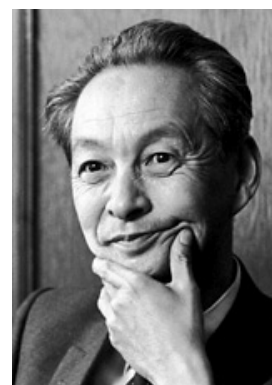
**Richard Phillips Feynman (1918 – 1988)**



**Julian Seymour Schwinger (1918 – 1994)**



**Freeman John Dyson (1923)**

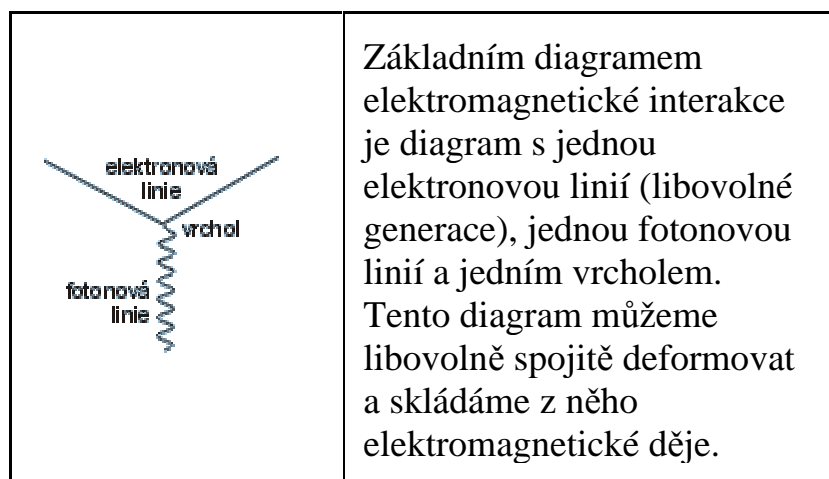


**Shin'ichirō Tomonaga (1906 – 1979)**

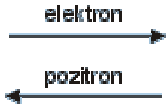

Doplníme-li do Diracovy rovnice symetrii  $U(1)_{loc}$  objeví se přirozenou cestou v rovnici pro elektron další pole – elektromagnetické pole. Právě doplňování symetrií do rovnic se dnes stalo základním způsobem tvorby nových fyzikálních zákonů (hovoříme o tzv. **kalibračních teoriích**, teoriích postavených na transformačních symetriích fyzikálních zákonů). První takto vytvořenou teorií byla **kvantová teorie elektromagnetického pole** (P.A.M. Dirac, Richard Phillips Feynman). Komplikovaný aparát kvantové teorie byl zjednodušen do grafických zkratk, které dnes známe pod názvem Feynmanovy diagramy. Podle kvantové teorie pole je elektromagnetické pole kvantováno, základním kvantem je foton, který současně tvoří výměnnou částici zprostředkující elektromagnetickou interakci. Elektrický náboj je stíněn přítomností párů elektron-pozitron ve vakuu. Dostaneme-li se k elektronu na velmi malé vzdálenosti, jeho náboj roste. Pozorovaný elektrický náboj je stíněný náboj, skutečný náboj nazýváme holý náboj elektronu. Základní konstanta interakce (elektrický náboj) tak není ve skutečnosti konstantní, ale mění se v závislosti na energii částic (čím energetičtější částice, tím blíže elektronu se mohou přiblížit).

## Feynmanovy diagramy

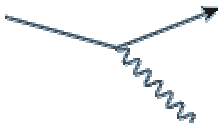


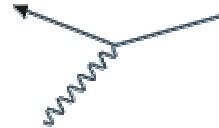


Feynmanovy diagramy jsou zástupné grafické zkratky pro jednotlivé členy poruchového rozvoje rovnic kvantové teorie elektromagnetického pole do řady. Každému diagramu odpovídá konkrétní matematický výraz a pro sestavování diagramů platí jednoduchá pravidla.





	<p>Veškeré částice se ve Feynmanových diagramech pohybují <i>doprava</i>. Šipky na liniích neznamenaají pohyb, ale rozlišují mezi částicemi a antičásticemi. Šipka doprava znamená částici (zde elektron) a šipka doleva antičástici (zde pozitron).</p>
	<p>Do interakční oblasti mohou vcházet libovolné částice. Napravo vylétávají částice po interakci. Najdeme-li jakýkoli způsob pospojování částic Feynmanovými diagramey, našli jsme jeden možný kanál reakce.</p>

Základní diagram elektromagnetické interakce lze interpretovat šesti způsoby:

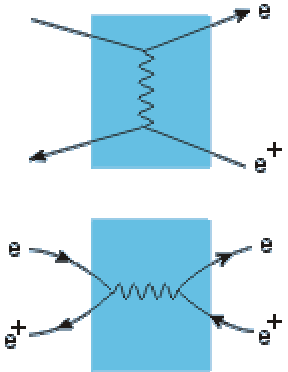
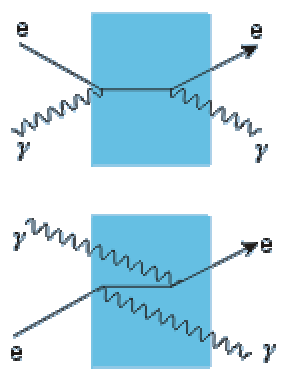
			
<p><i>emise fotonu elektronem</i></p>	<p><i>absorpce fotonu elektronem</i></p>	<p><i>emise fotonu pozitronem</i></p>	<p><i>absorpce fotonu pozitronem</i></p>
			
<p><i>anihilace páru elektron pozitron</i></p>		<p><i>kreace páru elektron pozitron</i></p>	

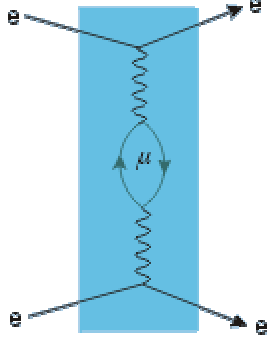



## Typické elektromagnetické procesy

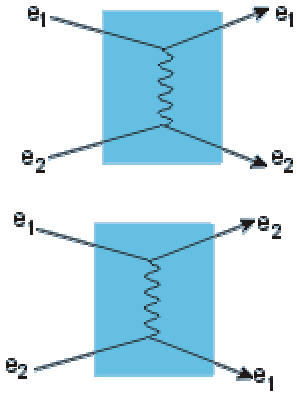
Počet vrcholů diagramu odpovídá pořadí v odpovídající poruchové řadě a amplituda pravděpodobnosti dějů s každým dalším vrcholem klesá v poměru, který nazýváme *konstanta jemné struktury*:

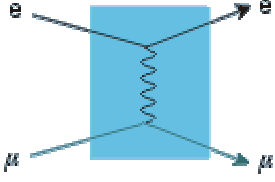
$$\alpha = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0\hbar c} \approx \frac{1}{137} . \quad ( 8.221 )$$

Jedině linie s volnými konci jsou skutečné částice, které lze registrovat v našich přístrojích. Linie, které začínají a končí ve vrcholu odpovídají tzv. virtuálním částicím, které nerespektují zákon zachování energie. Tyto částice nikdy nemůžeme registrovat v přístrojích (nemají volné konce linií), jde například o intermediální částice. Uvedme některé jednoduché Feynmanovy diagramy:

	<p><math>e + e^+ \rightarrow e + e^+</math> (elektron pozitronový rozptyl)</p> <p>Dva základní kanály reakce v druhém řádu Feynmanových diagramů. Odpovídající příspěvek k účinnému průřezu reakce spočítal v roce 1936 Bhabha bez pomoci FD.</p>
	<p><math>e + \gamma \rightarrow e + \gamma</math> (elektron-foton)</p> <p>Comptonův rozptyl</p> <p>Dva základní kanály reakce v druhém řádu Feynmanových diagramů.</p>

	<p>Anomální magnetický moment elektronu.</p>
	<p>Vakuový diagram.</p>
	<p>Diagram polarizace vakua.</p>
	<p>Diagram vlastní hmotnosti elektronu.</p>

	<p><math>e + e \rightarrow e + e</math>  (Coulombův zákon)  Dva základní kanály reakce, jde o diagramy druhého řádu se dvěma vrcholy. Modrá oblast je "černá skříňka" - oblast interakce. Běžně se v diagramech neoznačuje. Později uvidíme kvantové opravy ke Coulombovu zákonu od slabé interakce.</p>
---	--

	$e + \mu \rightarrow e + \mu$ <p>(elektron-mion) Existuje jediný diagram 2. řádu. Odpovídající příspěvek k účinnému průřezu reakce spočítal v roce 1932 Möller bez FD.</p>
---	--

Předpovědi nerelativistické kvantové teorie jsou v neobyčejně dobrém souladu s experimentem ve všech případech, kdy se jedná o stavy, v nichž klidové energie částic dominují nad všemi ostatními příspěvky k celkové hodnotě energie.

Navíc, v těchto případech bylo možno malé odchylky předpovědi teorie od velice přesných experimentálních dat připsat na vrub zanedbávaných relativistických korekcí.

Tento názor byl nejen dobře fyzikálně motivován, ale významně podpořen zejména skutečností, že již započtení odpovídajících oprav v nejnižším řádu vedlo vesměs k podstatnému zlepšení souhlasu předpovědí s experimentálními daty.

Bylo proto přirozené očekávat, že dalšího zlepšení bude dosaženo, když se podaří problém adekvátně formulovat v rámci relativistické kvantové mechaniky.

Na řadě konkrétních problémů zejména z oblasti spektroskopie se ukázalo, že toto očekávání bylo plně oprávněné, pokud jde o jevy dominované klidovou energií příslušných částic.

Je takřka nemyslitelné, že by šlo o pouhou náhodu.

Máme proto důvody předpokládat, že relativistická kvantová mechanika adekvátně popisuje velké množství stránek fyzikálního světa.

Na druhé straně je zřejmé, že kvantová mechanika nemůže poskytnout rámec pro adekvátní popis úplně všech stránek fyzikální reality, a to zcela nezávisle na tom, zda se jedná o teorii, která je, či není plně vnitřně konzistentní z hlediska čistě matematického.

V tomto případě totiž není podstatné to, že jde o teorii kvantovou, alebrž že jde o mechaniku, tj. o teorii, v níž je systém předem určen zadáním počtu a druhů částic, které tento systém tvoří.

Jinými slovy řečeno, mechanika je představuje teorii, která nepřipouští žádné procesy, při nichž by docházelo ke změnám počtu a druhů částic, a to ani vlivem vnějších polí, ani v důsledku interakce mezi jednotlivými částicemi systému samotného.

Ve skutečnosti však v přírodě nepřeberné množství právě takovýchto procesů probíhá.

Vždy při tom jde o procesy, v nichž dochází ke změnám energie jednotlivých částic tak velkým, že jsou srovnatelné s klidovou energií některé částice, tj. procesy probíhají daleko od nerelativistického režimu. Je dobře si připomenout, že relativistické kvantová mechanika naráží na zásadní problémy právě tehdy, když se ji pokusíme aplikovat na výše naznačené oblasti.

Z výše popsaných důvodů, je však fakt, že relativistická kvantová mechanika přestává být vnitřně konzistentní právě v těchto oblastech, možno považovat za její klad.

Signalizuje totiž, že představuje aproximaci nějaké bohatší teorie.

Teorie fyzikálního systému, jehož stavy budou obsahovat různé počty částic a přitom v procesech dominovaných nerelativistickým režimem bude dynamika stavu se zadanými počty jednotlivých druhů částic jen málo ovlivňována faktem, že se systém může nacházet ve stavech s jinými počty či a druhy částic.

Jestliže výše zmíněná bohatší teorie má být teorií kvantovou, potom naznačená situace může nastat, když stavy s pevně zadaným počtem jednotlivých druhů částic jsou zobrazovány elementy nějakého podprostoru  $H_p$  Hilbertova prostoru  $H$  přiřazeného zmíněnému systému.

Pokud je dynamika celého systému determinována hamiltoniánem  $\hat{H}$ , potom kvantově mechanická aproximace popisu dynamiky soustavy výše zmíněných částic bude zřejmě determinována nějakým efektivním hamiltoniánem  $\hat{H}_p$ , pro který platí

$$\hat{H}_p = \hat{P}\hat{H}_p\hat{P} \quad , \quad ( 8.222 )$$

kde  $\hat{\mathbf{P}}$  je projekční operátor na podprostor  $\hat{\mathbf{H}}_P$ .

Úspěch kvantové mechaniky pak signalizuje, že pro ty vektory  $|\psi\rangle \in \hat{\mathbf{H}}_P$ , které odpovídají stavům dominovaným nerelativistickým režimem, řešení pohybové rovnice

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathbf{H}} |\psi(t)\rangle, \quad (8.223)$$

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle$$

je prakticky ekvivalentní s řešením rovnice

$$i \frac{d}{dt} |\psi(t)\rangle = \hat{\mathbf{H}}_P |\psi(t)\rangle, \quad (8.224)$$

$$|\psi(t_0)\rangle = |\psi\rangle.$$

Zatímco v případě mechaniky je otázka, zda umožňuje formulovat výroky v termínech opírajících se o pojem „částice“ téměř triviální (je ex definitione konstruována tak, aby popisovala chování částic), v obecném případě tomu tak ani z daleka není.

K tomu, abychom mohli v rámci nějaké teorie adekvátně popsat situaci, kdy v běžném jazyce mluvíme o individuální částici, je zřejmě nezbytné, aby fyzikální systém popisovaný takovouto teorií mohl být ve stavech, které takovéto částici odpovídají.

To m.j. znamená, že spektrum celkového impulsu a energie systému musí obsahovat takové hodnoty  $P^\mu$ , že

$$P_\mu P^\mu = m^2, \quad (8.225)$$

kde  $m$  je hmota zmíněné částice.

Z předchozího víme, že v kvantové teorii operátor celkového impulsu a energie libovolného systému je třeba identifikovat s operátory reprezentujícími generátory prostoročasových translací.

V kvantové teorii tedy otázka existence jednočásticových stavů nějakého systému intimně souvisí s otázkou reprezentace grupy *Poincaré* na Hilbertově prostoru tohoto systému.

Ve skutečnosti jde jen o jeden z aspektů klíčové role, kterou tato grupa hraje v relativistické kvantové teorii.

Právě z tohoto hlediska se nyní věnujme grupě *Poincaré* poněkud podrobněji.

## Poincaréova grupa



**Jules Henri Poincaré (1854 – 1912)**

Řekneme, že nová souřadná soustava vznikla z výchozí translací  $T(a)$  pokud je vůči ní v klidu, její souřadné osy jsou paralelní s výchozími, pouze počátek je posunut do místy  $(-a)$  a její časová škála je posunuta dopředu o hodnotu  $(-a_0)$ .

Jestliže souřadnice světobodu mají ve výchozí soustavě hodnotu  $x^\mu$ , potom z hlediska nové souřadné soustavy mají souřadnice téhož světobodu hodnotu

$$x'^\mu = x^\mu + a^\mu. \quad (8.226)$$

Je zřejmé, že dvě po sobě provedené translace představují opět translaci a přitom výsledek je nezávislý na pořadí, v jakém byly zmíněné dvě translace provedeny.



Niels Henrik Abel (1802 – 1829)

Všechny možné takovéto translace tvoří čtyřparametrickou abelovskou grupu (grupu translací v Minkowského prostoru), jejíž elementy jsou jednoznačně určeny hodnotami parametrů  $a^\mu$  tak, že

$$T(a)T(b) = T(a+b). \quad (8.227)$$

V každé reprezentaci této grupy lze tedy operátor  $\hat{U}(a)$  přiřazený elementu  $T(a)$  zapsat ve tvaru

$$\hat{U}(a) = \exp\left(ia_\mu \hat{\mathbf{P}}^\mu\right), \quad (8.228)$$

kde operátory  $\hat{\mathbf{P}}^\mu$  reprezentující generátory této grupy všechny navzájem komutují

$$\left[\hat{\mathbf{P}}^\mu, \hat{\mathbf{P}}^\nu\right] = 0. \quad (8.229)$$

Translace můžeme ovšem skládat také s Lorentzovými transformacemi. Jestliže nová soustava vznikne transformací  $G(\Lambda(\omega_{(1)}), a_{(1)})$  z výchozí tak, že nejprve provedeme vlastní Lorentzovu transformaci  $\Lambda(\omega_{(1)})$  a po ní translaci  $T(a_{(1)})$ , potom hodnoty souřadnic téhož světobodu v nové a výchozí soustavě spolu souvisí vztahem

$$x'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu(\omega_{(1)})x^\nu + a_{(1)}^\mu. \quad (8.230)$$



Přejdeme-li z této soustavy opět do další, transformací  $G(\Lambda(\omega_{(2)}), a_{(2)})$ , potom v takto vzniklé soustavě bude mít uvažovaný světobod souřadnice

$$\begin{aligned} x''^\mu &= \Lambda^\mu{}_\nu(\omega_{(2)})x'^\nu + a_{(2)}^\mu = \\ &= \Lambda^\mu{}_\rho(\omega_{(2)})\left[\Lambda^\rho{}_\nu(\omega_{(1)})x^\nu + a_{(1)}^\rho\right] + a_{(2)}^\mu = \\ &= \Lambda^\mu{}_\nu(\omega_{(1,2)})x^\nu + a_{(1,2)}^\mu. \end{aligned} \quad (8.231)$$

kde

$$\Lambda^\mu{}_\nu(\omega_{(1,2)}) \equiv \Lambda^\mu{}_\rho(\omega_{(2)})\Lambda^\rho{}_\nu(\omega_{(1)}) \quad (8.232)$$

představuje opět vlastní Lorentzovu transformaci a

$$a_{(1,2)}^\mu \equiv \Lambda^\mu{}_\rho(\omega_{(2)})a_{(1)}^\rho + a_{(2)}^\mu. \quad (8.233)$$

Jinými slovy řečeno, do poslední soustavy jsme mohli přejít také přímo ze soustavy výchozí provedením nejprve vlastní Lorentzovy transformace  $\Lambda(\omega_{(1,2)})$ , následované translací  $T(a_{(1,2)})$ .

Tedy všechny takovéto transformace tvoří grupu a násobení mezi jejími elementy  $G(\Lambda(\omega), a)$  je determinováno relací

$$G\left(\Lambda(\omega_{(2)}), a_{(2)}\right)G\left(\Lambda(\omega_{(1)}), a_{(1)}\right) = G\left(\Lambda(\omega_{(2)})\Lambda(\omega_{(1)}), \Lambda(\omega_{(2)})a_{(1)} + a_{(2)}\right). \quad (8.234)$$

Tato desetiparametrická Lieova grupa se nazývá Poincaréovu grupou  $P$ . Vzhledem k tomu, že libovolný element Poincaréovy grupy můžeme vyjádřit ve tvaru

$$G(\Lambda(\omega), a) = G(1, a)G(\Lambda(\omega), 0), \quad (8.235)$$

bude také v každé reprezentaci platit analogický vztah mezi odpovídajícími operátory

$$\hat{U}(\omega, a) = \hat{U}(a) \hat{U}(\omega). \quad (8.236)$$

Přítom víme, že operátory přiřazené translacím  $T(a)$ , resp. vlastním Lorentzovým transformacím  $\Lambda(\omega)$  musí mít tvar ( 8.228 ), resp.

$$\hat{U}(\omega) = \exp\left(\frac{i}{2} \omega_{\mu\nu} \hat{M}^{\mu\nu}\right), \quad (8.237)$$

kde operátory  $\hat{P}^\mu$ ,  $\hat{M}^{\mu\nu}$  odpovídají generátorům těchto transformací, a tedy musí vyhovovat komutačním relacím ( 8.229 ), resp.

$$[\hat{M}^{\mu\nu}, \hat{M}^{\rho\sigma}] = i(g^{\mu\sigma} \hat{M}^{\nu\rho} - g^{\mu\rho} \hat{M}^{\nu\sigma} + g^{\nu\rho} \hat{M}^{\mu\sigma} - g^{\nu\sigma} \hat{M}^{\mu\rho}) \quad (8.238)$$

definované pravou stranou formule ( 8.236 ) vyhovující relacím (viz. ( 8.231 ) – ( 8.234 ))

$$\hat{U}(\omega_{(1,2)}, a_{(1,2)}) = \hat{U}(\omega_{(2)}, a_{(2)}) \hat{U}(\omega_{(1)}, a_{(1)}) \quad (8.239)$$

i tehdy, když se nejedná o pouhé skládání dvou translací, nebo skládání dvou vlastních Lorentzových transformací.

K tomu, aby tomu tak bylo, musí být evidentně splněny ještě relace mezi operátory  $\hat{P}^\mu$  a  $\hat{M}^{\mu\nu}$ , odpovídající zákonům skládání translací s vlastními Lorentzovými transformacemi, tj. musí např. platit

$$\hat{U}(\omega, 0) \hat{U}(1, a) \hat{U}(-\omega, 0) = \hat{U}(1, \Lambda(\omega) a). \quad (8.240)$$

Zderivováním této relace pro  $a = 0$  dostaneme

$$\hat{U}(\omega) \hat{P}^\mu \hat{U}^{-1}(\omega) = \Lambda_\nu{}^\mu(\omega) \hat{P}^\nu = \Lambda^\mu{}_\nu(-\omega) \hat{P}^\nu, \quad (8.241)$$

a tedy do veličin prvního řádu v  $\omega$

$$\left(1 + \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} \hat{M}^{\alpha\beta}\right) \hat{P}^\mu \left(1 - \frac{i}{2} \omega_{\alpha\beta} \hat{M}^{\alpha\beta}\right) = \hat{P}^\mu + \omega^\mu{}_\nu \hat{P}^\nu, \quad (8.242)$$

tj.

$$\frac{i}{2}\omega_{\alpha\beta}[\hat{\mathbf{M}}^{\alpha\beta}, \hat{\mathbf{P}}^{\mu}] = \omega_{\alpha\nu}g^{\mu\alpha}\hat{\mathbf{P}}^{\nu}. \quad (8.243)$$

S využitím toho, že  $\hat{\mathbf{M}}^{\mu\nu} = -\hat{\mathbf{M}}^{\nu\mu}$  a

$$\frac{\partial\omega_{\alpha\beta}}{\partial\omega_{\rho\sigma}} = \delta_{\alpha\rho}\delta_{\beta\sigma} - \delta_{\alpha\sigma}\delta_{\beta\rho}, \quad (8.244)$$

odtud dostáváme

$$[\hat{\mathbf{M}}^{\mu\nu}, \hat{\mathbf{P}}^{\rho}] = i(g^{\nu\rho}\hat{\mathbf{P}}^{\mu} - g^{\mu\rho}\hat{\mathbf{P}}^{\nu}). \quad (8.245)$$

Snadno se lze přesvědčit, že tyto komutační relace, spolu s dříve nalezenými ( 8.229 ), ( 8.238 ):

$$[\hat{\mathbf{P}}^{\mu}, \hat{\mathbf{P}}^{\nu}] = 0, \quad (8.246)$$

$$[\hat{\mathbf{M}}^{\mu\nu}, \hat{\mathbf{M}}^{\rho\sigma}] = i(g^{\mu\sigma}\hat{\mathbf{M}}^{\nu\rho} - g^{\mu\rho}\hat{\mathbf{M}}^{\nu\sigma} + g^{\nu\rho}\hat{\mathbf{M}}^{\mu\sigma} - g^{\nu\sigma}\hat{\mathbf{M}}^{\mu\rho}), \quad (8.247)$$

již zajišťují, že operátory ( 8.236 ) vyhovují relacím ( 8.239 ) pro všechny elementy Poincaréovy grupy.

Libovolné operátory  $\hat{\mathbf{P}}^{\rho}$  a  $\hat{\mathbf{M}}^{\mu\nu}$  vyhovující komutačním relacím ( 8.245 ) – ( 8.247 ) realizují reprezentaci Poincaréovy algebry.

Zavedeme-li (srov. definice ( 8.34 )) operátory

$$\hat{\mathbf{H}} \equiv \hat{\mathbf{P}}^0, \quad (8.248)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_k \equiv \frac{1}{2}\varepsilon_{klm}\hat{\mathbf{M}}^{lm}, \quad (8.249)$$

$$\hat{\mathbf{K}}_j \equiv \hat{\mathbf{M}}^{0j}, \quad (8.250)$$

můžeme výše uvedené komutační relace definující Poincaréovu algebru ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$[\hat{\mathbf{P}}_j, \hat{\mathbf{P}}_k] = [\hat{\mathbf{P}}, \hat{\mathbf{H}}] = [\hat{\mathbf{J}}, \hat{\mathbf{H}}] = 0, \quad (8.251)$$

$$[\hat{\mathbf{J}}_j, \hat{\mathbf{J}}_k] = -[\hat{\mathbf{K}}_j, \hat{\mathbf{K}}_k] = i\epsilon_{jkl} \hat{\mathbf{J}}_l, \quad (8.252)$$

$$[\hat{\mathbf{J}}_j, \hat{\mathbf{P}}^k] = i\epsilon_{jkl} \hat{\mathbf{P}}^l, \quad (8.253)$$

$$[\hat{\mathbf{J}}_j, \hat{\mathbf{K}}_k] = i\epsilon_{jkl} \hat{\mathbf{K}}_k \quad (8.254)$$

$$[\hat{\mathbf{K}}_j, \hat{\mathbf{P}}^k] = -i\delta_{jk} \hat{\mathbf{H}}, \quad (8.255)$$

$$[\hat{\mathbf{K}}, \hat{\mathbf{H}}] = -i\hat{\mathbf{P}}. \quad (8.256)$$

Libovolný výraz utvořený z generátorů grupy, který se všemi generátory komutuje, musí být v každé ireducibilní reprezentaci realizován nějakým násobkem operátoru identity.

Takové výrazy se nazývají **Casimirovými operátory**.

Prostor libovolné ireducibilní reprezentace grupy tak představuje charakteristický podprostor každého Casimirova operátoru příslušný k nějaké jeho vlastní hodnotě.



**Hendrik Brugt Gerhard Casimir (1909 – 2000)**

Díky tomu lze ireducibilní reprezentace jednoznačně (až na ekvivalenci) určit zadáním odpovídajících vlastních hodnot všech nezávislých Casimirových operátorů.

V případě Poincaréovy grupy jsme již našli, že generátory translací se vůči vlastním Lorentzovým transformacím chovají jako čtyřvektor, tj. že pro ně platí relace (8.241).

Zcela analogicky zjistíme, že generátory vlastní Lorentzovy grupy se transformují jako komponenty antisymetrického tenzoru druhého řádu, tj. platí

$$\hat{U}^{-1}(\omega)\hat{M}^{\mu\nu}\hat{U}(\omega) = \Lambda^{\mu}_{\rho}(\omega)\Lambda^{\nu}_{\sigma}(\omega)\hat{M}^{\rho\sigma}. \quad (8.257)$$

Pomocí nich můžeme běžným způsobem (násobením, kontrakcí) konstruovat další tenzorové veličiny.

Tak např. okamžitě vidíme, že pro operátor

$$\hat{P}^2 \equiv \hat{P}_{\mu}\hat{P}^{\mu} \quad (8.258)$$

platí

$$[\hat{U}(\omega), \hat{P}^2] = 0 \quad (8.259)$$

a díky komutačním relacím (8.246) také

$$[\hat{U}(a), \hat{P}^2] = 0. \quad (8.260)$$

Tedy  $\hat{P}^2$  představuje Casimirův operátor Poincaréovy grupy.  
Definujme **Pauli-Lubanského vektor**

$$\hat{W}^{\mu} \equiv -\frac{1}{2}\varepsilon^{\mu\nu\rho\sigma}\hat{M}_{\nu\rho}\hat{P}_{\sigma}. \quad (8.261)$$

Takto definované operátory splňují relaci

$$\hat{U}^{-1}(\omega)\hat{W}^{\mu}\hat{U}(\omega) = \Lambda^{\mu}_{\nu}(\omega)\hat{W}^{\nu}, \quad (8.262)$$

tj. chovají se vůči vlastním Lorentzovým transformacím jako komponenty čtyřvektoru, ale také komutují se všemi generátory translací:

$$[\hat{\mathbf{W}}^\mu, \hat{\mathbf{P}}^\nu] = 0 . \quad ( 8.263 )$$

Odtud pak okamžitě vidíme, že také operátor

$$\hat{\mathbf{W}}^2 \equiv \hat{\mathbf{W}}_\mu \hat{\mathbf{W}}^\mu \quad ( 8.264 )$$

je Casimirovým operátorem Poincaréovy grupy.

Pro další je užitečné si všimnout, že komponenty Pauli-Lubanského vektoru lze též zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{W}}^0 &= \hat{\mathbf{P}} \cdot \hat{\mathbf{J}} , \\ \hat{\mathbf{W}} &= \hat{\mathbf{H}}\hat{\mathbf{J}} - [\hat{\mathbf{P}} \times \hat{\mathbf{K}}] . \end{aligned} \quad ( 8.265 )$$

Podle teorie relativity jsou všechny souřadné soustavy, které spolu souvisejí nějakou transformací patřící do Poincaréovy grupy  $\mathbf{P}$ , navzájem ekvivalentní.

Tedy jestliže nějakému fyzikálnímu systému přiřadíme ve vybrané soustavě Hilbertův prostor  $\mathbf{H}$ , potom tentýž Hilbertův prostor lze přiřadit tomuto systému v každé soustavě, kterou z ní obdržíme jakoukoliv transformací  $G(\Lambda(\omega), a) \in \mathbf{P}$ .

Jestliže z hlediska výchozí soustavy je systém ve tvaru popsáném vektorem  $|\psi\rangle \in \mathbf{H}$ , potom z hlediska transformované soustavy je ve stavu, který lze popsat vektorem

$$|\psi'\rangle \equiv \hat{\mathbf{U}}(\omega, a)|\psi\rangle \in \mathbf{H} . \quad ( 8.266 )$$

Přitom bez újmy na obecnosti můžeme požadovat, aby

$$\|\psi'\| = \|\psi\| . \quad ( 8.267 )$$

Operátor  $\hat{\mathbf{U}}(\omega, a)$  musí být unitární lineární, anebo antilineární.

Protože spojitou změnou hodnot parametrů lze transformaci  $G(\Lambda(\omega), a)$  převést v transformaci identickou, tj. transformaci  $G(1, a)$ , nemůže operátor  $\hat{U}(\omega, a)$  být antilineárním.

Operátory  $\hat{U}(\omega, a)$  musí respektovat zákon skládání uvažovaných transformací.

Pokud by stavům byly přiřazeny vektory, plynula by odtud podmínka

$$\hat{U}(g_{(2)})\hat{U}(g_{(1)}) = \hat{U}(g_{(1,2)}), \quad (8.268)$$

kde jsme pro zjednodušení označili

$$\hat{U}(g_{(j)}) = \hat{U}(\omega_{(j)}, a_{(j)}). \quad (8.269)$$

Jinými slovy řečeno, v takovémto případě by operátory  $\hat{U}(g)$  musely realizovat unitární reprezentaci Poincaréovy grupy na Hilbertově prostoru  $\mathbf{H}$ .

Skutečnost, že stavům nejsou přiřazeny vektory, ale paprsky, vede k tomu, že důsledky zákona skládání transformací jsou slabší.

Musí platit pouze relace

$$\hat{U}(g_{(2)})\hat{U}(g_{(1)}) = \exp\left[i\varphi(g_{(2)}, g_{(1)})\right]\hat{U}(g_{(1,2)}), \quad (8.270)$$

kde  $\varphi(g_{(2)}, g_{(1)})$  je reálná funkce naznačených parametrů, tj. operátory

$\hat{U}(g)$  musí tvořit projektivní reprezentaci grupy.

Ukazuje se, že v případě Poincaréovy grupy se ve skutečnosti stačí omezit na vyšetřování jejích reprezentací, pokud pod pojmem „reprezentace“ zahrneme i reprezentace dvojznačné.

Uvedené výsledky představují speciální případ mnohem obecněji platných závěrů, které hrají důležitou roli i v mnoha dalších oblastech.

Zde je pouze stručně shrneme: Jestliže unitární operátory  $\hat{U}(g)$ , definované na Hilbertově prostoru  $\mathbf{H}$  tvoří projektivní reprezentaci  $N$ -parametrické Lieovy grupy  $\mathbf{G}$ , potom tyto operátory lze zapsat jako

$$\hat{U}(g(\alpha)) = \exp\left(i \sum_{a=1}^N \alpha_a \hat{X}_a\right), \quad (8.271)$$

kde  $\alpha_a$  jsou reálné parametry a  $\hat{X}_a$  jsou samosdružené operátory.

Z požadavku, aby vztah (8.270) platil pro  $\alpha_a \rightarrow 0$  (tj. v blízkosti jednotkového elementu grupy  $\mathbf{G}$ ), nalezneme, že tyto operátory musí vyhovovat komutačním relacím

$$[\hat{X}_a, \hat{X}_b] = i \sum_{c=1}^N C_{ab}^c \hat{X}_c + i C_{ab}, \quad (8.272)$$

kde  $C_{ab}^c$  jsou strukturní konstanty grupy  $\mathbf{G}$  a

$$C_{ab} = -C_{ba} \quad (8.273)$$

jsou reálná čísla, která musí vyhovovat relacím

$$\sum_{c=1}^N (C_{ab}^c C_{cd} + C_{bd}^c C_{ca} + C_{da}^c C_{cb}) = 0, \quad a, b, d = 1, \dots, N. \quad (8.274)$$

Pro poslední členy na pravé straně komutačních relací (8.272) (které je samozřejmě třeba chápat jako příslušné násobky operátoru identity) se užívá názvu **centrální náboje**.

Jsou to tedy pouze centrální náboje, které v okolí jednotkového elementu grupy  $\mathbf{G}$  determinují odlišnost operátorů realizujících projektivní reprezentaci téže grupy.

Někdy ovšem může jít o odlišnost zcela nepodstatnou: Předpokládejme, že na prostoru  $\mathbf{H}$  existuje i unitární reprezentace grupy  $\mathbf{G}$ , tj. existují unitární operátory  $\hat{U}(g)$ , pro které platí

$$\hat{U}(g_{(2)}) \hat{U}(g_{(1)}) = \hat{U}(g_{(1,2)}). \quad (8.275)$$



Přitom víme, že je lze vyjádřit ve tvaru

$$\hat{U}(g(\alpha)) = \exp\left(i \sum_{a=1}^N \alpha_a \hat{X}_a\right), \quad (8.276)$$

kde operátory  $\hat{X}_a$  vyhovují komutačním relacím

$$[\hat{X}_a, \hat{X}_b] = i \sum_{c=1}^N C_{ab}^c \hat{X}_c. \quad (8.277)$$

definujeme-li

$$\hat{X}_a \equiv \hat{X}_a + \xi_a, \quad (8.278)$$

kde  $\xi_a$  jsou libovolná pevně zvolená reálná čísla, potom, snadno zjistíme, že tyto operátory vyhovují komutačním relacím (8.272), v nichž

$$C_{ab} = - \sum_{c=1}^N C_{ab}^c \xi_c, \quad (8.279)$$

a operátory (8.271) vyhovují relacím (8.270), v nichž

$$\varphi(g_{(2)}, g_{(1)}) = \sum_{a=1}^N [\alpha_0(2) + \alpha_0(1) - \alpha_0(1,2)] \xi_a. \quad (8.280)$$

Konstanty (8.279) pochopitelně vyhovují rovnicím (8.274).

Důležitější však je, že pro mnohé grupy žádná jiná řešení těchto rovnic neexistují, tj. neexistují pro ně žádné pravé projektivní reprezentace (tj. takové, které nelze pouhou transformací (8.278) generátorů změnit v reprezentaci). Lze dokázat, že tak tomu je nejen pro všechny poloprosté grupy, ale také např. pro grupu Poincaré.

Z uvedeného je zřejmé, že pokud se nejedná o pravou projektivní reprezentaci, potom v okolí jednotkového elementu je odlišnost projektivní reprezentace od reprezentace naprosto triviální.

To však vůbec neznamená, že by to muselo platit i tehdy, vzdálíme-li se z okolí jednotkového elementu.

Tak tomu obecně je jedině u grup jednoduše souvislých.

Na druhé straně však víme, že ke každé  $m$ -násobně souvislé grupě  $G$  existuje právě jedna univerzální pokrývací grupa  $\bar{G}$ , tj. grupa, která je jednoduše souvislá a přitom může být homomorfně zobrazena na  $G$ .

Každá z reprezentací grupy  $\bar{G}$  je buď reprezentací grupy  $G$ , nebo její víceznačnou (až  $m$ -značnou) reprezentací.

Odtud vidíme, že výše uvedený výrok o tom, že projektivní reprezentace, pokud nejsou pravými projektivními se jen triviálně liší od reprezentací, je obecně platným, pokud pod termín reprezentace zahrneme v případě vícenásobně souvislých grup i reprezentace víceznačné.

Připomeňme, že jak grupa rotací v třírozměrném Eukleidově prostoru  $SO(3)$ , tak vlastní Lorentzova grupa ve čtyřrozměrném Minkowského prostoru  $SO(3,1)$ , jsou grupami dvojnásobně souvislými.

Odpovídající univerzální pokrývací grupu v těchto případech tvoří grupa  $SU(2)$ , resp.  $SL(2,C)$ .

Na bázi Hilbertova prostoru  $\mathbf{H}$  libovolné unitární ireducibilní reprezentace Poincaréovy grupy můžeme utvořit z vektorů  $|p, \xi\rangle$ , pro které platí

$$\hat{\mathbf{P}}^\mu |p, \xi\rangle = p^\mu |p, \xi\rangle, \quad (8.281)$$

$$p_\mu p^\mu = p^2,$$

kde  $\xi$  je parametr, který čísluje nějakou ortogonální bázi v každém charakteristickém podprostoru společných vlastních vektorů operátoru  $\hat{\mathbf{P}}^\mu$ .

Z formule (8.228) pak vidíme, že pokud jde o operátory reprezentující translace, je jejich působení na uvedenou bázi téměř triviální:

$$\hat{\mathbf{U}}(a) |p, \xi\rangle = \exp(ip^\mu a_\mu) |p, \xi\rangle. \quad (8.282)$$

Na druhé straně v případě vlastních Lorentzových transformací z formule ( 8.241 ) víme, že

$$\hat{U}(\omega)\hat{P}^\mu|p,\xi\rangle = \Lambda^\mu{}_\nu(-\omega)\hat{P}^\nu\hat{U}(\omega)|p,\xi\rangle, \quad ( 8.283 )$$

tj.

$$p^\mu\hat{U}(\omega)|p,\xi\rangle = \Lambda^\mu{}_\nu(-\omega)\hat{P}^\nu\hat{U}(\omega)|p,\xi\rangle, \quad ( 8.284 )$$

což je totéž jako

$$\hat{P}^\mu\hat{U}(\omega)|p,\xi\rangle = \Lambda^\mu{}_\nu(\omega)p^\nu\hat{U}(\omega)|p,\xi\rangle. \quad ( 8.285 )$$

Jinými slovy, vektor  $\hat{U}(\omega)|p,\xi\rangle$  patří do charakteristického podprostoru operátoru  $\hat{P}^\mu$  příslušného k vlastním hodnotám

$$p'^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu(\omega)p^\nu, \quad ( 8.286 )$$

a tedy ho musí být možno vyjádřit jako lineární kombinaci

$$\hat{U}(\omega)|p,\xi\rangle = \sum_{\xi'} A_{\xi',\xi}(\omega,p)|\Lambda(\omega)p,\xi'\rangle. \quad ( 8.287 )$$

Odtud vidíme, že do Hilbertova prostoru kterékoliv pevně zvolené ireducibilní reprezentace mohou náležet vektory  $|p,\xi\rangle, |p',\xi'\rangle$  jedině tehdy, existuje-li vlastní Lorentzova transformace  $\Lambda(\omega)$  taková, že platí relace ( 8.286 ).

Díky tomu můžeme všechny unitární ireducibilní reprezentace Poincaréovy grupy rozdělit podle šesti tříd čtyřvektorů invariantních vůči vlastním Lorentzovým transformacím, tak jak jsou uvedeny v následující tabulce.

Tab. 8.1

Číslo třídy	Vlastnosti čtyřvektorů	4-vektor $k^\mu$	Malá grupa
1	$p_\mu p^\mu = 0, p^0 = 0 \Leftrightarrow p^\mu = 0$	$\{0,0\}$	$SO(3,1)$
2	$p_\mu p^\mu = M^2, M > 0 \Leftrightarrow p^0 > 0$	$\{M,0\}$	$SO(3)$
3	$p_\mu p^\mu = 0, p^0 > 0$	$\{1,0,0,1\}$	$SO(2) \otimes T(2)$
4	$p_\mu p^\mu = M^2, M > 0 \Leftrightarrow p^0 > 0$	$\{-M,0\}$	$SO(3)$
5	$p_\mu p^\mu = 0, p^0 > 0$	$\{-1,0,0,1\}$	$SO(2) \otimes T(2)$
6	$p_\mu p^\mu = M^2 < 0$	$\{0,0,0,M\}$	$SO(2,1)$

kde  $T(2)$  je grupou translací v rovině.

Přitom každý vektor  $p^\mu$  ze zadané třídy lze získat vhodnou vlastní Lorentzovou transformací z libovolného jiného vektoru téže třídy.

Speciálně ho tedy můžeme obdržet transformací „standardního vektoru“  $k^\mu$ , specifikovaného pro každou třídu v předposledním sloupci tabulky.

Tato Lorentzova transformace ovšem není zadáním vektoru  $p^\mu$  určena jednoznačně.

Okamžitě např. vidíme, že pokud je

$$p^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu(\omega) k^\nu, \quad (8.288)$$

potom určitě také platí

$$p^\mu = \Lambda^\mu{}_\nu(\tilde{\omega}) k^\nu, \quad (8.289)$$

kde

$$\Lambda(\tilde{\omega}) \equiv \Lambda(\omega''; p) \Lambda(\omega) \Lambda(\omega'; k) \quad (8.290)$$

a  $\Lambda(\omega'; k)$ , resp.  $\Lambda(\omega''; p)$  je libovolná transformace, vůči níž je čtyřvektor  $k$ , resp.  $p$  invariantní, tj. platí

$$\begin{aligned}\Lambda^\mu{}_\nu(\omega'; k)k^\nu &= k^\mu, \\ \Lambda^\mu{}_\nu(\omega''; p)p^\nu &= p^\mu.\end{aligned}\tag{ 8.291 }$$

Snadno nahlédneme, že množina všech vlastních Lorentzových transformací, vůči nimž je invariantní jakýkoliv pevně vybraný čtyřvektor  $p$ , tvoří podgrupu. Wigner ji nazval **malou grupou**  $W(p)$ . Není snad nutno zdůrazňovat, že do malé podgrupy dvou různých čtyřvektorů patří různé transformace.

Podstatné však je, že pro všechny čtyřvektory patřící do téže třídy jsou odpovídající malé grupy navzájem izomorfní, tj. představují pouze různé realizace téže grupy.

O kterou grupu se jedná, je uvedeno v posledním sloupci tabulky 7.1.

Při pevně zvoleném standardním vektoru dané třídy můžeme z množiny všech transformací  $\Lambda(\omega)$ , které splňují relaci ( 8.288 ), evidentně nějakým předpisem vybrat transformaci jedinou.

Pro tuto transformaci, která je již zadáním čtyřvektoru  $p$  určena jednoznačně, budeme užívat symbolu  $\mathbf{L}(p)$ .

Zdůrazněme ještě jednou, že to, kterou konkrétní Lorentzovu transformaci symbol  $\mathbf{L}(p)$  představuje záleží nejen na  $p$ , ale také na výše zmíněném předpisu.

Nezávisle na jeho volbě ovšem vždy platí

$$L^\mu{}_\nu(p)k^\nu = p^\mu.\tag{ 8.292 }$$

Dříve zmíněné vektory báze  $\mathbf{H}$  budeme nyní identifikovat s

$$|p, \xi\rangle \equiv N(p)\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p))|k, \xi\rangle,\tag{ 8.293 }$$

kde  $N(p)$  je normalizační konstanta, kterou budeme specifikovat později, a  $\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p))$  je operátor, který v uvažované reprezentaci odpovídá výše uvedené transformaci  $\mathbf{L}(p)$ .

Relaci ( 8.287 ) pak můžeme pro libovolnou vlastní Lorentzovu transformaci zapsat ve tvaru

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{U}}(\Lambda)|p, \xi\rangle &= N(p)\hat{\mathbf{U}}(\Lambda)\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p))|k, \xi\rangle = \\ &= N(p)\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(\Lambda p))\hat{\mathbf{U}}^\dagger(\mathbf{L}(\Lambda p))\hat{\mathbf{U}}(\Lambda)\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p))|k, \xi\rangle = \\ &= N(p)\hat{\mathbf{U}}(\Lambda p)\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{W}(\Lambda p))|k, \xi\rangle,\end{aligned}\tag{ 8.294 }$$

kde

$$\mathbf{W}(\Lambda, p) \equiv \mathbf{L}^{-1}(\Lambda p)\Lambda\mathbf{L}(p).\tag{ 8.295 }$$

Ale

$$\begin{aligned}[\mathbf{W}(\Lambda, p)]^\mu_\nu k^\nu &= [\mathbf{L}^{-1}(\Lambda p)]^\mu_\rho [\mathbf{L}(p)]^\rho_\nu k^\nu = \\ &= [\mathbf{L}^{-1}(\Lambda p)]^\mu_\rho \Lambda^\rho_\nu p^\nu = [\mathbf{L}^{-1}(\Lambda p)]^\mu_\rho (\Lambda p)^\rho = k^\mu,\end{aligned}\tag{ 8.296 }$$

odkud vidíme, že transformace  $\mathbf{W}(\Lambda, p)$  je elementem malé grupy čtyřvektoru  $k$ , a tedy

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{W}(\Lambda, p))|k, \xi\rangle = \sum_{\xi'} D_{\xi\xi'}(\mathbf{W}(\Lambda, p))|k, \xi'\rangle,\tag{ 8.297 }$$

kde  $D_{\xi\xi'}(\mathbf{W})$  jsou elementy unitární matice  $\mathbf{D}(\mathbf{W})$  přiřazené transformaci  $\mathbf{W}$  v nějaké ireducibilní reprezentaci malé grupy  $W(k)$ . Dosazením do pravé strany formule ( 8.294 ) dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{U}}(\Lambda)|p, \xi\rangle &= N(p) \sum_{\xi'} D_{\xi\xi'}(\mathbf{W}(\Lambda, p))\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(\Lambda p))|p, \xi'\rangle = \\ &= \frac{N(p)}{N(\Lambda p)} \sum_{\xi'} D_{\xi\xi'}(\mathbf{W}(\Lambda, p))|p, \xi'\rangle.\end{aligned}\tag{ 8.298 }$$

k tomu, abychom našli všechny unitární ireducibilní reprezentace Poincaréovy grupy stačí, abychom našli tyto reprezentace pro malou grupu odpovídající každé ze šesti tříd čtyřvektorů specifikovaných v tabulce 7.1.

Pro nás jsou ovšem důležité pouze reprezentace realizovatelné v prostorech, které lze identifikovat s Hilbertovými prostory fyzikálních systémů, tj. operátory  $\hat{\mathbf{P}}^\mu$ , reprezentující generátory translací, musí současně hrát i úlohu operátorů celkového čtyřimpulsu této soustavy. Čtyřimpuls  $p^\mu = 0$  je evidentně invariantní vůči všem vlastním Lorentzovým transformacím, tj. jeho malou grupou je grupa  $SO(3,1)$ . Vzhledem k tomu, že jde o grupu nekompaktní, její jedinou konečněrozměrnou unitární ireducibilní reprezentací je triviální jednorozměrná reprezentace přiřazující každému elementu jednotku. Již tento prostinký fakt má závažný důsledek: Stav s nulovým čtyřimpulsem představuje vakuum.

Z uvedeného vyplývá, že žádná relativisticky invariantní kvantová teorie nemůže připustit konečný stupeň degenerace vakua.

Vakuum tak musí být buď nedegenerované, nebo je stupeň jeho degenerace nekonečný.

Čtyřvektor časového charakteru s kladnou nulovou komponentou, tj. čtyřvektor  $p$ , pro který platí

$$p_\mu p^\mu = m^2, \quad p^0 \equiv E > 0, \quad (8.299)$$

můžeme identifikovat se čtyřimpulsem částice s klidovou hmotou  $m > 0$ . Standardní čtyřvektor

$$k^\mu \equiv \{m, 0\} \quad (8.300)$$

je evidentně invariantní vůči všem prostorovým rotacím, kdežto vůči boostu invariantní není.

Odpovídající malou grupou tedy je grupa  $SO(3)$ , tj. transformace (8.295) v tomto případě představuje rotaci.

Budeme ji nazývat **Wignerovou rotací**.

Je zřejmé, že pro operátor (8.258) platí

$$\hat{\mathbf{P}}^2 |k, \xi\rangle = m^2 |k, \xi\rangle . \quad (8.301)$$

Z formulí ( 8.265 ), ( 8.300 ) vidíme, že v našem případě je

$$\hat{\mathbf{W}}^0 |k, \xi\rangle = 0 , \quad (8.302)$$

$$\mathbf{W} |k, \xi\rangle = m \hat{\mathbf{J}} |k, \xi\rangle , \quad (8.303)$$

a tedy

$$\hat{\mathbf{W}}^2 |k, \xi\rangle = -m^2 j(j+1) |k, \xi\rangle , \quad (8.304)$$

kde  $j$  je celé nebo polocelé nezáporné číslo, odpovídající spinu uvažované částice.

Vzhledem k tomu, že  $\hat{\mathbf{P}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{W}}^2$  jsou Casimirovy operátory, zůstanou formule ( 8.301 ), ( 8.304 ) v platnosti i tehdy, když v nich provedeme záměnu

$$|k, \xi\rangle \rightarrow |p, \xi\rangle . \quad (8.305)$$

V případě uvažované třídy čtyřimpulsů můžeme tedy každou ireducibilní reprezentaci charakterizovat zadáním dvojice reálných parametrů  $m, j$ , z nichž první je kladný a druhý představuje nějaké celé nebo polocelé nezáporné číslo.

Z relace ( 8.303 ) vidíme, že kety  $|k, \xi\rangle$  lze zvolit tak, aby představovaly vlastní vektor operátoru  $\hat{\mathbf{J}} \cdot \mathbf{s}$ , kde  $\mathbf{s}$  je libovolný pevně zvolený jednotkový vektor. Parametr  $\xi$  v uvažované reprezentaci tedy probíhá  $2j + 1$  hodnot, za které můžeme zvolit  $\xi = -j, \dots, j$ .

Nebude-li řečeno jinak, budeme volit konvenci, kdy  $\mathbf{s} = \mathbf{e}_3$ .

Potom

$$\mathbf{J}_3 |k, \xi\rangle = \xi |k, \xi\rangle , \quad (8.306)$$

$$\hat{\mathbf{J}}_{\pm} |k, \xi\rangle = \alpha^{\pm} (j, \xi) |k, \xi \pm 1\rangle , \quad (8.307)$$

kde



$$\alpha^{(\pm)}(j, \xi) \equiv \sqrt{(j \mp \xi)(j \pm \xi + 1)} . \quad (8.308)$$

Povšimněme si také toho, že rovnost ( 8.306 ) lze s využitím definice ( 8.293 ) ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p)) \hat{\mathbf{W}}^3 \hat{\mathbf{U}}^\dagger(\mathbf{L}(p)) |p, \xi\rangle = m\xi |p, \xi\rangle . \quad (8.309)$$

Tedy ket  $|p, \xi\rangle$  představuje vlastní vektor operátoru  $\hat{\mathbf{W}}^3(\mathbf{L}(p))$  příslušný k vlastní hodnotě  $m\xi$ , kde

$$\hat{\mathbf{W}}^\mu(\mathbf{L}(p)) \equiv \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p)) \hat{\mathbf{W}}^\mu \hat{\mathbf{U}}^\dagger(\mathbf{L}(p)) = [\mathbf{L}(p)]_\nu^\mu \hat{\mathbf{W}}^\nu . \quad (8.310)$$

pokud  $\mathbf{R} \equiv \Lambda(\mathbf{n}, \varphi)$  představuje libovolné natočení, potom

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{R}) = \exp(i\varphi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}) \quad (8.311)$$

a z formulí ( 8.306 ) až ( 8.308 ) dostáváme

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{R}) |k, \xi\rangle = \sum_{\xi'} |k, \xi'\rangle \langle k, \xi' | \exp(i\varphi \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{J}}) |k, \xi\rangle = \sum_{\xi'=-j}^j D_{\xi'\xi}^{(j)}(\mathbf{R}) |k, \xi'\rangle , \quad (8.312)$$

kde  $D_{\xi'\xi}^{(j)}(\mathbf{R})$  jsou elementy ortogonální matice  $\mathbf{D}^{(j)}(\mathbf{R})$  přiřazené rotaci  $\mathbf{R}$  v  $2j + 1$  rozměrné reprezentaci grupy  $\mathbf{SO}(3)$ .

K tomu, abychom skutečně poznali pravou stranu formule ( 8.298 ), tj. abychom dokončili konstrukci diskutované ireducibilní reprezentace, musíme ještě specifikovat normalizační konstantu  $N(p)$  a transformaci  $\mathbf{L}(p)$ , vystupující v definici ( 8.295 ) Wignerovy rotace  $\mathbf{W}(\Lambda, p)$ .

V obou případech to do značné míry představuje přijetí určité konvence. Věnujme se nejprve otázce volby normalizační konstanty.

Při ní musíme respektovat skutečnost, že konstruovaná reprezentace má být unitární, a tedy operátory přiřazené jejím generátorům musí být samosdružené.

O vlastních vektorech samosdružených operátorů  $\hat{\mathbf{P}}$  pak víme, že vedle rovnice

$$\hat{\mathbf{P}}|p, \xi\rangle = \mathbf{p}|p, \xi\rangle \quad (8.313)$$

musí vyhovovat i podmínce

$$\langle p, \xi | p', \xi' \rangle = f(p) \delta_{\xi\xi'} 2E \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') , \quad (8.314)$$

kde  $f(p)$  je nějaká, zatím blíže nespécifikovaná nenulová funkce. Připomeňme, že odpovídající relace uzavřenosti v prostoru uvažované reprezentace má potom tvar

$$\int \frac{d^3\mathbf{p}}{2Ef(p)} \sum_{\xi=-j}^j |p, \xi\rangle \langle p, \xi| = 1 . \quad (8.315)$$

Z formule ( 8.298 ) přitom dostáváme

$$\begin{aligned} \langle p', \xi | \hat{\mathbf{U}}^\dagger(\Lambda) \hat{\mathbf{U}}(\Lambda) | p', \xi \rangle &= \\ &= \left| \frac{N(p)}{N(\Lambda p)} \right|^2 \sum_{\xi'' \xi'} \left( D_{\xi'' \xi}^{(j)}(\mathbf{W}) \right)^* D_{\xi' \xi}^{(j)}(\mathbf{W}) \langle \Lambda p', \xi'' | \Lambda p, \xi' \rangle , \end{aligned} \quad (8.316)$$

a tedy díky unitaritě operátorů  $\hat{\mathbf{U}}(\Lambda)$  a matic  $\mathbf{D}^{(j)}(\mathbf{W})$  musí platit

$$\frac{1}{|N(p)|^2} \langle p', \xi | p, \xi \rangle = \frac{1}{|N(\Lambda p)|^2} \langle \Lambda p', \xi | \Lambda p, \xi \rangle , \quad (8.317)$$

kde jsme využili toho, že díky relaci ( 8.314 ) poslední faktor na pravé straně formule ( 8.316 ) vymizí pro všechna  $\xi'' \neq \xi'$ .

Porovnáním s formulí ( 8.314 ) vidíme, že výraz

$$\frac{f(p)}{|N(p)|^2} \quad (8.318)$$

musí být invariantní vůči vlastním Lorentzovým transformacím, neboť veličina  $2E\delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}')$  vůči těmto transformacím invariantní je.

To je jediná podmínka, kterou je nutno splnit.

Mezi nejčastěji užívané volby patří

$$N(p) = f(p) = 1, \quad (8.319)$$

nebo

$$N(p) = \sqrt{\frac{f(p)}{f(k)}}, \quad f(p) = \frac{1}{2E}. \quad (8.320)$$

Obě mají své výhody a nevýhody, proto se ani jedné z nich nebudeme vyhýbat.

Abychom jasně odlišili, kdy máme kterou na mysli, budeme kety definované pravou stranou formule ( 8.293 ) označovat nadále symbolem  $|p, \xi\rangle$  při volbě ( 8.319 ), kdežto v případě volby ( 8.320 ) budeme pro tyto veličiny užívat symbolu  $|\mathbf{p}, \xi\rangle$ .

Pokud jde o transformaci  $\mathbf{L}(p)$ , opět se nejčastěji setkáváme se dvěma způsoby její volby:

$$\mathbf{L}(p) \equiv \Lambda(-\tilde{\mathbf{v}}, v), \quad (8.321)$$

kde

$$\mathbf{v} \equiv \frac{\mathbf{p}}{E}, \quad (8.322)$$

tj.  $\mathbf{L}(p)$  je čistý boost.

V tomto případě se veličina odpovídající operátoru

$$\frac{\hat{\mathbf{W}}^\mu(\mathbf{L}(p))}{m} \quad (8.323)$$

nazývá **kovariantní spin**.

Druhým způsobem volby je boost ve směru  $-\mathbf{e}_3$  následovaný pootočením o úhel  $\varphi$  kolem téže osy a takovým natočením kolem osy  $\mathbf{p} \times \mathbf{e}_3$ , které převede směr  $\mathbf{e}_3$  do směru impulsu  $\mathbf{p}$ , tj.

$$\mathbf{L}(p) \equiv \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{p}}) \mathbf{B}(u), \quad (8.324)$$

kde

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\tilde{\mathbf{p}}) &\equiv \exp\{i\vartheta[\mathbf{M}_1 \sin \varphi - \mathbf{M}_2 \sin \varphi]\} \exp(-i\varphi \mathbf{M}_3) = \\ &= \exp(-i\varphi \mathbf{M}_3) \exp(-i\vartheta \mathbf{M}_2), \end{aligned} \quad (8.325)$$

kde  $\varphi, \vartheta$  jsou sférické úhly vektoru  $\mathbf{p}$  a

$$\mathbf{B}(u) \equiv \exp\{-iu \mathbf{N}_3\}, \quad (8.326)$$

kde  $u$  je rapidita odpovídající velikosti rychlosti (8.322), tj.

$$\cosh u = \frac{1}{\sqrt{1-v^2}}, \quad \sinh u = \frac{v}{\sqrt{1-v^2}}. \quad (8.327)$$

Přitom platí

$$\frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{P}}}{|\hat{\mathbf{P}}|} |p, \xi\rangle = \xi |p, \xi\rangle, \quad (8.328)$$

tj. v uvažovaném případě představují kety  $|p, \xi\rangle$  vlastní vektory helicity.

Pokud v dalším budeme chtít zdůraznit, že se nám jedná právě o tuto volbu  $\mathbf{L}(p)$ , budeme k označení parametru  $\xi$  užívat symbolu  $\lambda$ .

Vzhledem k tomu, že připouštíme i dvojnásobné reprezentace, nemusí být ket  $|p, \xi\rangle$  ve skutečnosti určen jednoznačně ani po zadání  $\mathbf{L}(p)$ .

Odstranit tuto zbývající nejednoznačnost však nečiní žádné potíže.

Např. ve zde uvažovaném případě budeme pod operátorem vystupujícím ve formuli ( 8.293 ) vždy rozumět

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p)) \equiv \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}})\hat{\mathbf{B}}(u) , \quad ( 8.329 )$$

kde

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) &\equiv \exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3)\exp(-i\vartheta\hat{\mathbf{J}}_2) = \\ &= \exp\left\{i\vartheta\left[\hat{\mathbf{J}}_1 \sin \varphi - \hat{\mathbf{J}}_2 \cos \varphi\right]\right\}\exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3) , \end{aligned} \quad ( 8.330 )$$

$$\hat{\mathbf{B}}(u) \equiv \exp\{-iu\hat{\mathbf{K}}_3\}$$

$$\text{a přitom } \vartheta \in \langle 0, \pi \rangle, \varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle. \quad ( 8.331 )$$

Čtyřvektor světelného charakteru s kladnou nultou komponentou, tj. čtyřvektor  $p$ , pro který platí

$$p_\mu p^\mu = 0, \quad p^0 \equiv E > 0 , \quad ( 8.332 )$$

můžeme identifikovat se čtyřimpulsem částice s nulovou klidovou hmotou.

Standardní čtyřvektor  $k$ :

$$k^\mu \equiv \{1, 0, 0, 1\} \quad ( 8.333 )$$

je evidentně invariantní vůči libovolnému pootočení kolem osy  $\mathbf{e}_3$ , tj. odpovídající malá grupa  $SO(2)$  tvořenou všemi možnými rotacemi

$\mathbf{R}(\mathbf{e}_3, \varphi)$ .

Vůči žádným jiným čistým pootočením čtyřimpuls ( 8.333 ) invariantní není.

V současné soustavě, která se vůči výchozí posouvá rychlostí  $\mathbf{w}$ , má čtyřvektor  $k$  komponenty

$$\begin{aligned}
k'^0 &= \gamma(1 - w \cos \vartheta), \\
k'_{\parallel} &= \gamma(\cos \vartheta - w), \\
\mathbf{k}'_{\perp} &= \mathbf{k}_{\perp},
\end{aligned}
\tag{8.334}$$

kde jsme užili standardní zkratku

$$\gamma \equiv \frac{1}{\sqrt{1 - w^2}}, \tag{8.335}$$

$\vartheta$  je úhel svíraný rychlostí  $\mathbf{w}$  s osou  $\mathbf{e}_3$  a

$$\begin{aligned}
k'_{\parallel} &\equiv \mathbf{k}' \cdot \tilde{\mathbf{w}}, \\
\mathbf{k}'_{\perp} &\equiv \mathbf{k}' - k'_{\parallel} \tilde{\mathbf{w}}, \\
\mathbf{k}_{\perp} &\equiv \mathbf{k} - \tilde{w} \cos \vartheta.
\end{aligned}
\tag{8.336}$$

Z požadavku

$$k'^0 = 1 \tag{8.337}$$

dostáváme

$$\cos \vartheta = \frac{1 - \sqrt{1 - w^2}}{w}. \tag{8.338}$$

Následným pootočením kolem osy

$$\frac{\mathbf{e}_3 \times \tilde{\mathbf{w}}}{\sin \vartheta} \tag{8.339}$$

o úhel

$$\delta = \pi + 2\vartheta \pmod{2\pi}, \tag{8.340}$$

případně doplněním dalším pootočením o libovolný úhel  $\varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle$  kolem osy  $\mathbf{e}_3$  přejdou

$$k'^{\mu} \rightarrow k^{\mu} . \quad ( 8.341 )$$

Snadno nahlédneme, že žádná jiná než právě popsaná kombinace boostu a natočení nemůže nechat standardní čtyřvektor ( 8.333 ) nezměněn. Odtud je již zřejmé, že malá grupa je v uvažovaném případě grupou tříparametrickou.

Každý její element bychom mohli jednoznačně určit např. zadáním velikosti a polárního úhlu rychlosti  $\mathbf{w}$ , doplněným zadáním výše uvedeného úhlu  $\varphi$ .

Ve skutečnosti je však výhodnější provést tuto parametrizaci poněkud jinak.

Libovolný element malé grupy lze jednoznačně určit zadáním parametrů  $\alpha, \beta, \varphi$  tak, že

$$\Lambda(\alpha, \beta, \varphi) \equiv S(\alpha, \beta) \mathbf{R}(\mathbf{e}_3, \varphi) , \quad ( 8.342 )$$

kde

$$\begin{aligned} \mathbf{R}(\mathbf{e}_3, \varphi) &\equiv \exp(i\varphi \mathbf{M}_3) , \\ S(\alpha, \beta) &\equiv \exp[i(\alpha \mathbf{A} + \beta \mathbf{B})] , \end{aligned} \quad ( 8.343 )$$

a

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &\equiv \mathbf{N}_1 - \mathbf{M}_2 , \\ \mathbf{B} &\equiv \mathbf{N}_2 + \mathbf{M}_1 . \end{aligned} \quad ( 8.344 )$$

V libovolné unitární reprezentaci Poincaréovy grupy tedy odpovídající operátor můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\hat{\mathbf{U}}(\Lambda(\alpha, \beta, \varphi)) = \exp[i(\alpha \hat{\mathbf{A}} + \beta \hat{\mathbf{B}})] \exp(i\varphi \hat{\mathbf{J}}_3) , \quad ( 8.345 )$$

kde samosdružené operátory

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{A}} &\equiv \hat{\mathbf{K}}_1 - \hat{\mathbf{J}}_2, \\ \hat{\mathbf{B}} &\equiv \hat{\mathbf{K}}_2 + \hat{\mathbf{J}}_1\end{aligned}\tag{8.346}$$

vyhovují komutačním relacím

$$\begin{aligned}[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] &= 0, \\ [\hat{\mathbf{J}}_3, \hat{\mathbf{A}}] &= i\hat{\mathbf{B}}, \\ [\hat{\mathbf{J}}_3, \hat{\mathbf{B}}] &= -i\hat{\mathbf{A}}.\end{aligned}\tag{8.347}$$

Z první z nich okamžitě vidíme, že v uvažovaném případě lze kety  $|k, \xi\rangle$  vystupující ve formuli (8.293) zvolit tak, aby představovaly společné vlastní vektory operátorů  $\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}$ .

Na druhé straně však z posledních dvou komutačních relací plyne

$$\begin{aligned}\exp(i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3)\hat{\mathbf{A}}\exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3) &= \hat{\mathbf{A}}\cos\varphi - \hat{\mathbf{B}}\sin\varphi, \\ \exp(i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3)\hat{\mathbf{B}}\exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3) &= \hat{\mathbf{A}}\sin\varphi + \hat{\mathbf{B}}\cos\varphi,\end{aligned}\tag{8.348}$$

a tedy jestliže ket  $|k, \xi\rangle \equiv |k, a, b, \lambda\rangle$  je společným vlastním vektorem operátorů  $\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}$  příslušným k vlastním hodnotám  $a$ , resp.  $b$ , tj. vyhovuje rovnicím

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}}^\mu |k, a, b, \lambda\rangle &= k^\mu |k, a, b, \lambda\rangle, \\ \hat{\mathbf{A}} |k, a, b, \lambda\rangle &= a |k, a, b, \lambda\rangle, \\ \hat{\mathbf{B}} |k, a, b, \lambda\rangle &= b |k, a, b, \lambda\rangle,\end{aligned}\tag{8.349}$$

potom pro ket

$$|k, a', b', \lambda\rangle \equiv \exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3)|k, a, b, \lambda\rangle\tag{8.350}$$



platí

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}}^\mu |k, a', b', \lambda\rangle &= k^\mu |k, a', b', \lambda\rangle, \\ \hat{\mathbf{A}} |k, a', b', \lambda\rangle &= a' |k, a', b', \lambda\rangle, \\ \hat{\mathbf{B}} |k, a', b', \lambda\rangle &= b' |k, a', b', \lambda\rangle,\end{aligned}\tag{ 8.351 }$$

kde

$$\begin{aligned}a' &\equiv a \cos \varphi - b \sin \varphi, \\ b' &\equiv a \sin \varphi + b \cos \varphi.\end{aligned}\tag{ 8.352 }$$

Odtud vidíme, že pokud v prostoru uvažované reprezentace Poincaréovy grupy existuje vlastní vektor čtyřimpulsu příslušný k vlastní hodnotě  $k^\mu$ , který je současně společným vlastním vektorem samosdružených operátorů  $\hat{\mathbf{A}}$ ,  $\hat{\mathbf{B}}$  příslušným k vlastním hodnotám,  $a$  resp.  $b$ , potom v něm existuje také vektor, který je vlastním vektorem čtyřimpulsu patřícím k téže vlastní hodnotě  $k^\mu$ , a přitom je společným vlastním vektorem  $\hat{\mathbf{A}}$ ,  $\hat{\mathbf{B}}$  příslušným k vlastním hodnotám  $a'$ ,  $b'$ , definovaným formulí ( 8.352 ), v níž  $\varphi$  může mít libovolnou hodnotu z intervalu  $\langle 0, 2\pi \rangle$ . V dalším se omezíme pouze na případ  $a = b = 0$  a nazveme

$$|k, \lambda\rangle \equiv |k, 0, 0, \lambda\rangle.\tag{ 8.353 }$$

Odpovídající reprezentace malé grupy  $ISO(2)$  je jednorozměrná a parametr  $\lambda$  můžeme identifikovat s vlastní hodnotou operátoru  $\hat{\mathbf{J}}_3$ , tj. ket  $|k, \lambda\rangle$  vyhovuje rovnici

$$\hat{\mathbf{J}}_3 |k, \lambda\rangle = \lambda |k, \lambda\rangle.\tag{ 8.354 }$$

Z formule ( 8.346 ) navíc vidíme, že pro něj platí relace

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{K}}_1|k, \lambda\rangle &= \hat{\mathbf{J}}_2|k, \lambda\rangle, \\ \hat{\mathbf{K}}_2|k, \lambda\rangle &= -\hat{\mathbf{J}}_1|k, \lambda\rangle.\end{aligned}\tag{8.355}$$

Odtud, s využitím ( 8.265 ), již snadno zjistíme, že tento ket vyhovuje také rovnicím

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{W}}^0|k, \lambda\rangle &= \hat{\mathbf{W}}^3|k, \lambda\rangle = \lambda|k, \lambda\rangle, \\ \hat{\mathbf{W}}^1|k, \lambda\rangle &= \hat{\mathbf{W}}^2|k, \lambda\rangle = 0.\end{aligned}\tag{8.356}$$

Tedy ket  $|k, \lambda\rangle$  je také společným vlastním vektorem všech čtyř komponent Pauli-Lubanského vektoru, a to takovým, že

$$\hat{\mathbf{W}}^\mu|k, \lambda\rangle = \lambda k^\mu|k, \lambda\rangle,\tag{8.357}$$

a tedy také

$$\hat{\mathbf{W}}_\mu \hat{\mathbf{W}}^\mu|k, \lambda\rangle = \left[ (\hat{\mathbf{W}}^0)^2 - (\hat{\mathbf{W}}^3)^2 \right]|k, \lambda\rangle = 0.\tag{8.358}$$

Uvažovaná třída ireducibilních reprezentací je tak charakterizována nulovými vlastními hodnotami obou Casimirových operátorů  $\hat{\mathbf{P}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{W}}^2$ . Vlastní hodnoty operátoru  $\hat{\mathbf{J}}_3$  mohou v prostoru libovolné unitární reprezentace Poincaréovy grupy nabývat pouze celých nebo polocelých hodnot, a tedy parametr  $\lambda$ , vystupující v ketu  $|k, \lambda\rangle$  může být roven kterémukoliv z celých nebo polocelých čísel. Z formule ( 8.342 ) vidíme, že v diskutovaném případě lze matici  $\mathbf{W}(\Lambda, p)$ , definovanou formulí ( 8.295 ), vyjádřit jako

$$\mathbf{W}(\Lambda, p) = S(\alpha(\Lambda, p), \beta(\Lambda, p))\mathbf{R}(\mathbf{e}_3, \varphi(\Lambda, p)),\tag{8.359}$$

a tedy odpovídající operátor vystupující na levé straně rovnosti ( 8.297 ) má tvar

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{W}(\Lambda, p)) = \exp\left\{i\left[\alpha(\Lambda, p)\hat{\mathbf{A}} + \beta(\Lambda, p)\hat{\mathbf{B}}\right]\right\} \exp\left[i\varphi(\Lambda, p)\hat{\mathbf{J}}_3\right] \quad (8.360)$$

a díky relacím ( 8.354 ), ( 8.355 ) je v uvažovaných reprezentacích

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{W}(\Lambda, p))|k, \lambda\rangle &= \exp\left\{i\left[\alpha(\Lambda, p)\hat{\mathbf{A}} + \beta(\Lambda, p)\hat{\mathbf{B}}\right]\right\} \cdot \\ &\cdot \exp\left[i\varphi(\Lambda, p)\hat{\mathbf{J}}_3\right]|k, \lambda\rangle = \exp(i\lambda\varphi(\Lambda, p))|k, \lambda\rangle = \\ &= \sum_{\lambda'} D_{\lambda\lambda'}(\mathbf{W}(\Lambda, p))|k, \lambda'\rangle, \end{aligned} \quad (8.361)$$

tj.

$$D_{\lambda\lambda'}(\mathbf{W}(\Lambda, p)) = \delta_{\lambda\lambda'} \exp(i\lambda\varphi(\Lambda, p)). \quad (8.362)$$

ted y v diskutovaném případě transformační zákon ( 8.298 ) nabývá tvaru

$$\hat{\mathbf{U}}\Lambda|p, \lambda\rangle = \frac{N(p)}{N(\Lambda p)} \exp(i\lambda\varphi(\Lambda, p))|p, \lambda\rangle. \quad (8.363)$$

Pokud jde o normalizační konstantu  $N(p)$ , je situace naprosto stejná jako ve dříve uvažovaném případě částice s nenulovou hmotou.

Pokud jde o transformaci  $\mathbf{L}(p)$ , zvolíme ji tak, aby co nejvíce odpovídala výše popsané volbě  $\mathbf{B}$  v případě částice s nenulovou hmotou: nejprve provedeme takový boost rychlostí  $-\mathbf{w}\mathbf{e}_3$ , aby čtyřvektor určený ve výchozí soustavě komponentami  $k^\mu \equiv \{1, 0, 0, 1\}$ , měl v nové soustavě komponenty  $\{p^0, 0, 0, p^0\}$ , následovaný pootočením o úhel  $\varphi$  kolem téže osy a potom provedeme takové natočení kolem osy  $\mathbf{p} \times \mathbf{e}_3$ , aby odpovídající výsledný třívektor měl požadovaný  $\mathbf{p}$  měl požadovaný směr  $\tilde{\mathbf{p}}$ . Přesněji řečeno, v dalším pod operátorem  $\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p))$  budeme rozumět

$$\hat{\mathbf{U}}(\mathbf{L}(p)) \equiv \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}})\hat{\mathbf{B}}(u), \quad (8.364)$$

kde

$$\hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \equiv \exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3)\exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_2) \quad (8.365)$$

a

$$\hat{\mathbf{B}} \equiv \exp(-iu\hat{\mathbf{K}}_3), \quad (8.366)$$

kde  $\vartheta \in \langle 0, \pi \rangle$ ,  $\varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle$  jsou sférické úhly vektoru  $\tilde{\mathbf{p}}$  a  $u$  je rapidita odpovídající výše zmíněné rychlosti:

$$\tanh u = w = \frac{|\mathbf{p}|^2 - 1}{|\mathbf{p}|^2 + 1}, \quad (8.367)$$

tj.

$$\cosh u = \frac{1}{\sqrt{1-w^2}} = \frac{|\mathbf{p}|^2 + 1}{2|\mathbf{p}|}, \quad (8.368)$$

$$\sinh u = \frac{w}{\sqrt{1-w^2}} = \frac{|\mathbf{p}|^2 - 1}{2|\mathbf{p}|}.$$

Ponecháváme čtenáři jako jednoduché cvičení, aby na základě relace ( 8.310 ) dokázal, že pro kety

$$|p, \lambda\rangle \equiv N(p)\exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3)\exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_2)\exp(-iu\hat{\mathbf{K}}_3)|k, \lambda\rangle \quad (8.369)$$

platí

$$\frac{\hat{\mathbf{W}}^0}{|\hat{\mathbf{P}}|}|p, \lambda\rangle = \frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{P}}}{|\hat{\mathbf{P}}|}|p, \lambda\rangle = \lambda|p, \lambda\rangle, \quad (8.370)$$

a tedy kety vystupující ve formuli ( 363 ) představují vlastní stavy helicity.

Zavedeme nyní operátory

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}} &\equiv \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{P}), \\ \hat{\mathbf{T}} &\equiv \hat{\mathbf{U}}(\mathbf{T})\end{aligned}\tag{8.371}$$

přiřazené inverzím.

Tyto operátory musí v libovolné unitární reprezentaci Lorentzovy grupy splňovat relace

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{U}}(\Lambda(\mathbf{n}, \varphi))\hat{\mathbf{P}}^{-1} &= \hat{\mathbf{U}}(\Lambda(\mathbf{n}, \varphi)), \\ \hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{U}}(\Lambda(\mathbf{n}, \nu))\hat{\mathbf{P}}^{-1} &= \hat{\mathbf{U}}(\Lambda(-\mathbf{n}, \nu)),\end{aligned}\tag{8.372}$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{U}}(\Lambda(\mathbf{n}, \varphi))\hat{\mathbf{T}}^{-1} &= \hat{\mathbf{U}}(\Lambda(\mathbf{n}, \varphi)), \\ \hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{U}}(\Lambda(\mathbf{n}, \nu))\hat{\mathbf{T}}^{-1} &= \hat{\mathbf{U}}(\Lambda(-\mathbf{n}, \nu)).\end{aligned}\tag{8.373}$$

Snadno nahlédneme, že také skládáním časové a prostorové inverze transformacemi Poincaréovy grupy obdržíme opět grupu.

Uvážíme-li, že posunutí souřadné soustavy o  $\mathbf{a}$  následované časovou (prostorovou) inverzí je ekvivalentní s časovou (prostorovou) inverzí následovanou posunutím o  $\mathbf{a}$  (o  $-\mathbf{a}$ ) a že časové o  $a^0$  následované prostorovou (časovou) inverzí je ekvivalentní prostorové (časové) inverzi následované časovým posunutím o  $a^0$  (o  $-a^0$ ), vidíme, že v libovolné unitární reprezentaci této grupy musí navíc platit

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{P}}\exp(i\hat{\mathbf{P}}^0 a_0)\hat{\mathbf{P}}^{-1} &= \exp(i\hat{\mathbf{P}}^0 a_0), \\ \hat{\mathbf{P}}\exp(-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a})\hat{\mathbf{P}}^{-1} &= \exp(i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}),\end{aligned}\tag{8.374}$$

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{T}}\exp(i\hat{\mathbf{P}}^0 a_0)\hat{\mathbf{T}}^{-1} &= \exp(-i\hat{\mathbf{P}}^0 a_0), \\ \hat{\mathbf{T}}\exp(-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a})\hat{\mathbf{T}}^{-1} &= \exp(-i\hat{\mathbf{P}}\mathbf{a}).\end{aligned}\tag{8.375}$$

V případě infinitesimálních vlastních Lorentzových transformací a translací můžeme požadavky ( 8.372 ) až ( 8.375 ) vyjádřit v termínech generátorů Poincaréovy grupy jako

$$\begin{aligned}\hat{P}i\hat{J}\hat{P}^{-1} &= i\hat{J}, \\ \hat{P}i\hat{K}\hat{P}^{-1} &= -i\hat{K}, \\ \hat{P}i\hat{P}\hat{P}^{-1} &= -i\hat{P}, \\ \hat{P}i\hat{H}\hat{P}^{-1} &= i\hat{H},\end{aligned}\tag{ 8.376 }$$

$$\begin{aligned}\hat{T}i\hat{J}\hat{T}^{-1} &= i\hat{J}, \\ \hat{T}i\hat{K}\hat{T}^{-1} &= -i\hat{K}, \\ \hat{T}i\hat{P}\hat{T}^{-1} &= -i\hat{P}, \\ \hat{T}i\hat{H}\hat{T}^{-1} &= i\hat{H}.\end{aligned}\tag{ 8.377 }$$

Z posledních z relací ( 8.376 ), ( 8.377 ) je zřejmé, že operátor prostorové inverze  $\hat{P}$  musí být lineárním, kdežto operátor časové inverze  $\hat{T}$  musí být antilineárním.

Tedy relace ( 8.376 ), ( 8.377 ) mezi operátory reprezentujícími inverze a operátory reprezentujícími generátory Poincaréovy grupy lze ekvivalentně zapsat ve tvaru komutačních a antikomutačních relací

$$[\hat{P}, \hat{J}] = \{\hat{P}, \hat{P}\} = \{\hat{P}, \hat{K}\} = [\hat{P}, \hat{H}] = 0,\tag{ 8.378 }$$

$$[\hat{T}, \hat{J}] = \{\hat{T}, \hat{P}\} = \{\hat{T}, \hat{K}\} = [\hat{T}, \hat{H}] = 0.\tag{ 8.379 }$$

Kety  $|k, \xi\rangle$  vyhovující rovnici ( 8.306 ) představují společné vlastní vektory operátorů  $\{\hat{H}, \hat{J}_3, \hat{P}\}$  příslušné k vlastním hodnotám  $\{M, \xi, 0\}$ . Z komutačních relací ( 8.378 ) okamžitě vidíme, že totéž je pravdou o ketu  $\hat{P}|k, \xi\rangle$ , a tedy musí platit

$$\hat{P}|k, \xi\rangle = \eta^{(P)}|k, \xi\rangle,\tag{ 8.380 }$$

kde **vnitřní parita** uvažované částice musí splňovat podmínku

$$|\eta^{(P)}| = 1 \quad (8.381)$$

plynoucí z unitarity operátou  $\hat{P}$ .

K tomu, abychom mohli nalézt vyjádření pro ket  $\hat{P}|p, \xi\rangle$ , musíme nejprve specifikovat transformaci  $\mathbf{L}(p)$ , nebo přesněji operátor  $\hat{U}(\mathbf{L}(p))$ , vystupující v definici (8.293).

V případě báze  $|p, \xi\rangle$ , tvořené vlastními vektory třetí složky kovariantního spinu, tj. když je

$$|p, \xi\rangle \equiv N(p) \exp(-iu\tilde{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{K}}) |k, \xi\rangle, \quad (8.382)$$

kde  $u$  je rapidita odpovídající velikosti rychlosti (8.322), tj. definovaná vztahy (8.327), dostáváme z antikomutačních relací (8.378)

$$\hat{P}|p, \xi\rangle \equiv N(p) \exp(iu\tilde{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{K}}) \hat{P}|k, \xi\rangle = \frac{N(p)}{N(\mathbf{P}p)} \eta^{(P)} |\mathbf{P}p, \xi\rangle. \quad (8.383)$$

Při volbě (8.319), stejně jako při volbě (8.320) je splněna podmínka

$$N(p) = N(\mathbf{P}p), \quad (8.384)$$

čímž se relace (8.383) zjednoduší na

$$\hat{P}|p, \xi\rangle = \eta^{(P)} |\mathbf{P}p, \xi\rangle. \quad (8.385)$$

V případě báze tvořené vlastními vektory helicity, tj. když

$$|p, \xi\rangle \equiv |p, \lambda\rangle = N(p) \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \exp(-iu\hat{\mathbf{K}}_3) |k, \lambda\rangle, \quad (8.386)$$

kde

$$\hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) = \exp(-i\varphi\hat{\mathbf{J}}_3)\exp(-i\vartheta\hat{\mathbf{J}}_2), \quad (8.387)$$

přičemž sférické úhly vektoru  $\tilde{\mathbf{p}}$  leží v intervalech  $\vartheta \in \langle 0, \pi \rangle$   $\varphi \in \langle 0, 2\pi \rangle$ , z relací ( 8.378 ) dostáváme

$$\begin{aligned} \hat{P}|p, \lambda\rangle &= N(p)\hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}})\exp(iu\hat{\mathbf{K}}_3)\hat{P}|k, \lambda\rangle = \\ &= \eta^{(p)}N(p)\hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}})\exp(iu\hat{\mathbf{K}}_3)|k, \lambda\rangle. \end{aligned} \quad (8.388)$$

Vzpomeneme-li si, že

$$\langle k, \lambda' | \exp(-i\pi\hat{\mathbf{J}}_2) | k, -\lambda \rangle = \delta_{\lambda\lambda'} (-1)^{j-\lambda}, \quad (8.389)$$

kde  $j$  je velikost spinu uvažované částice, vidíme, že

$$|k, \lambda\rangle = (-1)^{j-\lambda} \exp(i\pi\hat{\mathbf{J}}_2) |k, -\lambda\rangle. \quad (8.390)$$

Na druhé straně z komutačních relací

$$[\hat{\mathbf{J}}_j, \hat{\mathbf{K}}_k] = i\varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{K}}_l \quad (8.391)$$

víme, že

$$\exp(-i\alpha\hat{\mathbf{J}}_2)\hat{\mathbf{K}}_3\exp(-i\alpha\hat{\mathbf{J}}_2) = \hat{\mathbf{K}}_3 \cos \alpha + \hat{\mathbf{K}}_1 \sin \alpha, \quad (8.392)$$

a tedy

$$\exp(iu\hat{\mathbf{K}}_3)\exp(i\pi\hat{\mathbf{J}}_2) = \exp(i\pi\hat{\mathbf{J}}_2)\exp(-iu\hat{\mathbf{K}}_3), \quad (8.393)$$

což nám umožňuje relaci ( 8.388 ) přepsat do tvaru



$$\hat{\mathbf{P}}|p, \lambda\rangle = \eta^{(p)} (-1)^{j-\lambda} N(p) \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \exp(i\pi \hat{\mathbf{J}}_2) \exp(-iu \hat{\mathbf{K}}_3) |k, -\lambda\rangle. \quad (8.394)$$

Uvážíme-li, že sférickými úhly směru  $-\tilde{\mathbf{p}}$  jsou  $\vartheta' = \pi - \vartheta$ ,  $\varphi' = \varphi \pm \pi$ , kde horní znaménko platí pro  $\varphi < \pi$  a dolní pro  $\varphi \geq \pi$ , vidíme, že

$$\hat{\mathbf{R}}(-\tilde{\mathbf{p}}) \equiv \exp(-i(\varphi \pm \pi) \hat{\mathbf{J}}_3) \exp(-i(\pi - \vartheta) \hat{\mathbf{J}}_2), \quad (8.395)$$

a tedy

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}}^{-1}(-\tilde{\mathbf{p}}) \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \exp(i\pi \hat{\mathbf{J}}_2) &= \exp(-i(\vartheta - \pi) \hat{\mathbf{J}}_2) \exp(-i(\varphi \pm \pi) \hat{\mathbf{J}}_3) \times \\ &\quad \times \exp(-i\varphi \hat{\mathbf{J}}_3) \exp(-i(\vartheta - \pi) \hat{\mathbf{J}}_2) = \\ &= \exp(-i(\vartheta - \pi) \hat{\mathbf{J}}_2) \exp(\pm i\pi \hat{\mathbf{J}}_3) \times \\ &\quad \times \exp(-i(\vartheta - \pi) \hat{\mathbf{J}}_2) = \exp(\pm i\pi \hat{\mathbf{J}}_3), \end{aligned} \quad (8.396)$$

kde jsme využili toho, že díky komutační relaci

$$[\hat{\mathbf{J}}_2, \hat{\mathbf{J}}_3] = i\hat{\mathbf{J}}_1 \quad (8.397)$$

je

$$\exp(\pm i\pi \hat{\mathbf{J}}_3) \exp(i\alpha \hat{\mathbf{J}}_2) = \exp(-i\alpha \hat{\mathbf{J}}_2) \exp(\pm i\pi \hat{\mathbf{J}}_3). \quad (8.398)$$

Díky vztahu ( 8.396 ) lze relaci ( 8.394 ) ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}|p, \lambda\rangle &= \eta^{(p)} (-1)^{j-\lambda} N(p) \hat{\mathbf{R}}(-\tilde{\mathbf{p}}) \exp(-iu \hat{\mathbf{K}}_3) \exp(\mp i\pi \lambda) |k, -\lambda\rangle = \\ &= \eta^{(p)} (-1)^{j-\lambda} \frac{N(p)}{N(\mathbf{P}p)} \exp(\mp i\pi \lambda) |\mathbf{P}p, -\lambda\rangle, \end{aligned} \quad (8.399)$$

který se při splnění rovnosti ( 8.384 ) zjednoduší na

$$\hat{P}|p, \lambda\rangle = \eta^{(P)} (-1)^{j-\lambda} \exp(\mp i\pi\lambda) |\mathbf{P}p, -\lambda\rangle . \quad ( 8.400 )$$

Právě nalezené výsledky dokazují, že unitární ireducibilní reprezentaci Poincaréovy grupy realizovanou v Hilbertově prostoru stavů jakékoliv částice s nenulovou hmotou lze vždy doplnit operátorem  $\hat{P}$ , splňujícím všechny podmínky kladené na operátor reprezentující prostorovou inverzi.

Pro nehmotné částice to však již obecně možné není.

Stačí si uvědomit, že z relací ( 8.378 ) plyne

$$\hat{P} \frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{P}}}{|\hat{\mathbf{P}}|} = - \frac{\hat{\mathbf{J}} \cdot \hat{\mathbf{P}}}{|\hat{\mathbf{P}}|} \hat{P} , \quad ( 8.401 )$$

a proto působením operátoru prostorové inverze na libovolný vlastní vektor helicity obdržíme opět vlastní vektor helicity, který však přísluší k opačné vlastní hodnotě.

Z předchozího však víme, že v případě libovolné ireducibilní reprezentace Poincaréovy grupy realizované na Hilbertově prostoru nehmotné částice nabývá helicity jedinou hodnotu  $\lambda$ .

K tomu, aby bylo možno na Hilbertově prostoru nehmotné částice definovat operátor prostorové inverze, musí na něm reprezentace Poincaréovy grupy představovat direktní součet alespoň dvou ireducibilních reprezentací, z nichž jedna odpovídá helicitě  $\lambda$  a ta druhá helicitě  $-\lambda$ .

Je zřejmé, že pro jeden pevně vybraný impuls  $\mathbf{p}$  můžeme vždy požadovat, aby platilo

$$\hat{P}|p, \lambda\rangle = \zeta |\mathbf{P}p, -\lambda\rangle , \quad ( 8.402 )$$

kde  $\zeta$  je číslo s jednotkovou absolutní hodnotou.

Konkrétní volba je opět otázkou pouhé konvence.

Provedeme ji tak, aby byla co nejpodobnější volbě, přijaté u částice s nenulovou hmotou.

Povšimněme si proto, že pro  $M \neq 0$  z formulí ( 8.380 ), ( 8.390 ) plyne relace

$$\hat{\mathbf{Y}}|k, \lambda\rangle = \eta^{(P)} (-1)^{j-\lambda} |k, -\lambda\rangle, \quad (8.403)$$

kde  $j$  je spin uvažované částice a operátor

$$\hat{\mathbf{Y}} \equiv \exp(-i\pi\hat{\mathbf{J}}_2)\hat{\mathbf{P}} \quad (8.404)$$

reprezentuje zrcadlení v rovině  $\{\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_3\}$ .

Pod spinem nehmotné částice definitivně rozumíme absolutní hodnotu její helicity.

Proto v případě  $M = 0$  budeme požadovat

$$\hat{\mathbf{Y}}|k, \lambda\rangle = \eta^{(P)} |k, -\lambda\rangle \quad \text{pro } \lambda \geq 0. \quad (8.405)$$

Zopakováním postupu, jenž nás přivedl k formuli ( 8.400 ), pak již snadno zjistíme, že pro libovolný impuls  $\mathbf{p}$  je při  $\lambda \geq 0$

$$\hat{\mathbf{P}}|p, \lambda\rangle = \eta^{(P)} \exp(\mp i\pi\lambda) |\mathbf{P}p, -\lambda\rangle, \quad (8.406)$$

kde horní, resp. dolní znaménko platí, když úhel  $\varphi$  směru  $\tilde{\mathbf{p}}$  je menší, resp. větší nebo roven  $\pi$ .

Z relací ( 8.379 ) vidíme, že ket  $\hat{\mathbf{T}}|k, \xi\rangle$  je společným vlastním vektorem týchž operátorů příslušným k vlastním hodnotám  $\{M, -\xi, 0\}$ , a tedy musí být

$$\hat{\mathbf{T}}|k, \xi\rangle = \zeta_\xi |k, -\xi\rangle, \quad (8.407)$$

kde  $|\zeta_\xi| = 1$ .

V důsledku antilinearitě operátoru  $\hat{\mathbf{T}}$  však toto číslo závisí na  $\xi$ .

Aplikací operátoru  $\hat{\mathbf{T}}$  na obě strany rovnosti ( 8.307 ) dostáváme

$$-\left(\hat{\mathbf{J}}_1 \mp i\hat{\mathbf{J}}_2\right)\hat{\mathbf{T}}|k, \xi\rangle = \alpha^{(\pm)}(j, \xi)\hat{\mathbf{T}}|k, \xi \pm 1\rangle, \quad (8.408)$$

tj.

$$-\alpha^{(\mp)}(j, -\xi) \zeta_{\xi} |k, -\xi \mp 1\rangle = -\alpha^{(\pm)}(j, \xi) \zeta_{\xi \pm 1} |k, -\xi \mp 1\rangle, \quad (8.409)$$

a tedy

$$\zeta_{\xi \pm 1} = -\zeta_{\xi}, \quad (8.410)$$

neboť

$$\alpha^{(\mp)}(j, -\xi) = \alpha^{(\pm)}(j, \xi). \quad (8.411)$$

Obecné řešení relací ( 8.410 ) můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\zeta_{\xi} = \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi}, \quad (8.412)$$

tj. rovnost ( 8.407 ) upřesnit jako

$$\hat{T} |k, \xi\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi} |k, -\xi\rangle, \quad (8.413)$$

kde

$$|\eta^{(T)}| = 1. \quad (8.414)$$

K tomu, abychom mohli vyjádřit ket  $|p, \xi\rangle$ , musíme nejprve specifikovat operátor  $\hat{U}(\mathbf{L}(p))$ , vystupující v definici ( 8.293 ).

V případě báze  $|p, \xi\rangle$ , tvořené vlastními vektory třetí složky kovariantního spinu z relace ( 8.373 ) víme, že

$$\hat{T} \exp(-iu\tilde{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{K}}) \hat{T}^{-1} = \exp(-iu\tilde{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{K}}), \quad (8.415)$$

díky čemuž po aplikaci operátoru  $\hat{T}$  na obě strany rovnosti ( 8.382 ) dostáváme

$$\begin{aligned}\hat{T}|p, \xi\rangle &= N^*(p) \exp(iu\tilde{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{K}}) \hat{T}|k, \xi\rangle = \\ &= \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi} N^*(p) \exp(iu\tilde{\mathbf{v}} \cdot \hat{\mathbf{K}}) |k, -\xi\rangle,\end{aligned}\quad (8.416)$$

a tedy

$$\hat{T}|p, \xi\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi} \frac{N^*(p)}{N(\mathbf{P}p)} |\mathbf{P}p, -\xi\rangle. \quad (8.417)$$

Při volbě normalizačních konstant reálných a vyhovujících požadavku ( 8.384 ) se relace ( 8.417 ) zjednoduší na

$$\hat{T}|p, \xi\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi} |\mathbf{P}p, -\xi\rangle. \quad (8.418)$$

V případě báze tvořené vlastními vektory helicity, tj. když

$$|p, \lambda\rangle = N(p) \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \exp(-iu\hat{\mathbf{K}}_3) |k, \lambda\rangle, \quad (8.419)$$

využijeme toho, že na základě formulí ( 8.390 ), ( 8.413 ) víme, že

$$\exp(-i\pi\hat{\mathbf{J}}_2) |k, \lambda\rangle = (-1)^{j-\lambda} |k, -\lambda\rangle, \quad (8.420)$$

$$\hat{T}|k, \lambda\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{j-\lambda} |k, -\lambda\rangle,$$

a tedy

$$\hat{T}|k, \lambda\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{2j} \exp(i\pi\hat{\mathbf{J}}_2) |k, \lambda\rangle \quad (8.421)$$

a že díky relacím ( 8.373 ) platí nejen vztah ( 8.415 ), ale také

$$\hat{T}\hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) = \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}})\hat{T}. \quad (8.422)$$

Aplikací operátoru  $\hat{T}$  na obě strany rovnosti ( 8.419 ) tak dostáváme

$$\begin{aligned}
\hat{T}|p, \lambda\rangle &= N^*(p) \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \exp(iu \hat{\mathbf{K}}_3) \hat{T}|k, \lambda\rangle = \\
&= \eta^{(T)} (-1)^{2j} N^*(p) \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \exp(iu \hat{\mathbf{K}}_3) \exp(i\pi \hat{\mathbf{J}}_2) |k, \lambda\rangle = \\
&= \eta^{(T)} (-1)^{2j} N^*(p) \hat{\mathbf{R}}(\tilde{\mathbf{p}}) \exp(i\pi \hat{\mathbf{J}}_2) \exp(-iu \hat{\mathbf{K}}_3) |k, \lambda\rangle = \\
&= \eta^{(T)} (-1)^{2j} \frac{N^*(p)}{N(\mathbf{P}p)} |\mathbf{P}p, \lambda\rangle,
\end{aligned} \tag{8.423}$$

kde jsme k obdržení poslední rovnosti využili výsledku ( 8.396 ).

Při obvyklých normalizacích, kdy je  $N^*(p) = N(\mathbf{P}p)$ , se nalezený transformační zákon zjednoduší na

$$\hat{T}|p, \lambda\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{2j} \exp(\pm i\pi\lambda) |\mathbf{P}p, \lambda\rangle. \tag{8.424}$$

V případě částice s nulovou hmotou z relací ( 8.252 ), ( 8.253 ), ( 8.379 ) snadno zjistíme, že ket  $\hat{T}|p, \lambda\rangle$ , kde  $|p, \lambda\rangle$  je společenským vlastním vektorem operátorů  $\hat{\mathbf{P}}^\mu$  a helicity příslušným k vlastním hodnotám  $p^\mu$  a  $\lambda$ , představuje opět vlastní vektor zmíněných operátorů příslušný k těmž vlastním hodnotám.

Tedy jistě můžeme pro vybraný impuls  $\mathbf{p}$  požadovat, aby platilo

$$\exp(-i\pi \hat{\mathbf{J}}_2) \hat{T}|p, \lambda\rangle = \zeta_\lambda |p, \lambda\rangle. \tag{8.425}$$

V zájmu co nejužší analogie s dříve diskutovaným případem částice s nenulovou hmotou použijeme konvenci

$$\exp(-i\pi \hat{\mathbf{J}}_2) \hat{T}|p, \lambda\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{2\lambda} |p, \lambda\rangle. \tag{8.426}$$

Zopakováním kroků, jež nás přivedli k formuli ( 8.424 ), pak obdržíme hledaný transformační zákon ve tvaru

$$\hat{T}|p, \lambda\rangle = \eta^{(T)} (-1)^{2\lambda} \exp(\pm i\pi\lambda) |\mathbf{P}p, \lambda\rangle. \tag{8.427}$$

Všimněme si, že operátor časové inverze je možno, na rozdíl od operátoru inverze prostorové, definovat na Hilbertově prostoru nehmotné částice s nulovou helicitou i tehdy, jedná-li se o prostor příslušný ireducibilní reprezentaci Poincaréovy grupy, tj. časová inverze nevyžaduje, aby pro nehmotnou částici, která může být ve stavu s helicitou  $\lambda$ , nutně existovaly také stavy s helicitou  $-\lambda$ . Ze vztahu ( 8.418 ) dostáváme

$$\hat{T}^2 |p, \xi\rangle = \left(\eta^{(T)}\right)^* (-1)^{j-\xi} |\mathbf{P}p, -\xi\rangle = (-1)^{2j} |p, \xi\rangle . \quad ( 8.428 )$$

Podobně ze vztahu ( 8.427 ) s přihlédnutím k antilinearitě operátoru  $\hat{T}$  obdržíme

$$\begin{aligned} \hat{T}^2 |p, \lambda\rangle &= \left(\eta^{(T)}\right)^* (-1)^{2\lambda} \exp(\mp i\pi\lambda) \hat{T} |\mathbf{P}p, \lambda\rangle = \\ &= \exp(\mp 2i\pi\lambda) |p, \lambda\rangle = (-1)^{2|\lambda|} |p, \lambda\rangle , \end{aligned} \quad ( 8.429 )$$

kde jsme k obdržení prostřední rovnosti využili faktu, že pokud druhá komponenta impulsu  $\mathbf{p}$  je kladná, tj. odpovídající úhel  $\varphi < \pi$ , potom druhá komponenta impulsu  $-\mathbf{p}$  je záporná, tj. odpovídající úhel  $\varphi > \pi$  a naopak.

Kvadrát operátoru časové inverze je pro částice s celým spinem roven operátory identity, kdežto pro částice se spinem polocelým se od něj liší znaménkem.

Již v rámci kvantové elektrodynamiky jsme poznali, jak užitečným nástrojem pro popis soustav nerozlišitelných částic představují kreační a anihilační operátory.

Definujme proto nyní anihilační operátory  $\hat{\mathbf{a}}^-(p, \xi)$  tak, že

$$\hat{\mathbf{a}}^-(p, \xi) |0\rangle = 0 . \quad ( 8.430 )$$

Operátory jim sdružené představují operátory kreační:

$$\hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi)|\mathbf{0}\rangle = |p, \xi\rangle. \quad (8.431)$$

Přitom jsou splněny buď komutační, nebo antikomutační relace

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{a}}^-(p, \xi), \hat{\mathbf{a}}^-(p', \xi')]_{\mp} &= [\hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi), \hat{\mathbf{a}}^+(p', \xi')]_{\mp} = 0, \\ [\hat{\mathbf{a}}^-(p, \xi), \hat{\mathbf{a}}^+(p', \xi')]_{\mp} &= 2Ef(p) \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'), \end{aligned} \quad (8.432)$$

z nichž poslední zaručuje, že kety  $|p, \xi\rangle$  dané vztahem (8.431) splňují normalizační podmínku

$$\langle p, \xi | p', \xi' \rangle = 2Ef(p) \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}'). \quad (8.433)$$

Dále budeme požadovat, aby platila rovnost

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}|0\rangle = \hat{\mathbf{H}}|0\rangle = \hat{\mathbf{J}}|0\rangle = \hat{\mathbf{K}}|0\rangle = 0, \\ \hat{\mathbf{P}}|0\rangle = \hat{\mathbf{T}}|0\rangle = |0\rangle, \end{aligned} \quad (8.434)$$

a též relace

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{U}}(\Lambda, a) \hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi) \hat{\mathbf{U}}^\dagger(\Lambda, a) &= \frac{N(p)}{N(\Lambda p)} \exp(ia\Lambda p) \cdot \\ &\cdot \sum_{\xi'=-j}^j D_{\xi\xi'}^{(j)}(\mathbf{W}(\Lambda, p)) \hat{\mathbf{a}}^+(\Lambda p, \xi'), \end{aligned} \quad (8.435)$$

díky nimž kety  $|p, \xi\rangle$  určené vztahem (8.431) budou vyhovovat transformačnímu zákonu

$$\hat{\mathbf{U}}(\Lambda, a) |p, \xi\rangle = \frac{N(p)}{N(\Lambda p)} \exp(ia\Lambda p) \sum_{\xi'=-j}^j D_{\xi\xi'}^{(j)}(\mathbf{W}(\Lambda, p)) |\Lambda p, \xi'\rangle. \quad (8.436)$$

Dále budou splněny relace



$$\hat{\mathbf{P}}|p, \xi\rangle = \frac{N(p)}{N(\mathbf{P}p)} \eta^{(p)} |\mathbf{P}p, \xi\rangle, \quad (8.437)$$

$$\hat{\mathbf{T}}|p, \xi\rangle = (-1)^{j-\xi} \frac{N^*(p)}{N(\mathbf{P}p)} \eta^{(T)} |\mathbf{P}p, -\xi\rangle,$$

pokud

$$\hat{\mathbf{P}}\hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi)\hat{\mathbf{P}}^{-1} = \frac{N(p)}{N(\mathbf{P}p)} \eta^{(p)} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{P}p, \xi), \quad (8.438)$$

$$\hat{\mathbf{T}}\hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi)\hat{\mathbf{T}}^{-1} = \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi} \frac{N^*(p)}{N(\mathbf{P}p)} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{P}p, -\xi).$$

Porovnáním veličin prvního řádu v  $a_\mu$  ve formuli ( 8.435 ) pro  $\Lambda = 1$  dostáváme

$$\left[ \hat{\mathbf{P}}^\mu, \hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi) \right] = p^\mu \hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi), \quad (8.439)$$

tj. operátor  $\hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi)$  hraje úlohu posunovacího operátoru, zvedajícího vlastní hodnotu operátoru  $\hat{\mathbf{H}}$  o  $\sqrt{\mathbf{p}^2 + m^2}$  a posunujícího vlastní hodnotu operátoru  $\hat{\mathbf{P}}$  o  $\mathbf{p}$ .

tento operátor lze tedy vskutku interpretovat jako operátor rodící částici, která má hmotu  $m$  a impuls  $\mathbf{p}$ .

Počínaje formulí ( 8.313 ) jsme všechny vztahy uváděli ve tvaru platném při libovolné volbě funkcí  $N(p)$ ,  $f(p)$ , omezené pouze požadavkem invariance poměru  $f(p)/|N(p)|^2$  vůči Lorentzovým transformacím.

V dalším již budeme pracovat v duchu dříve zavedené konvence:

Symboly  $|p, \xi\rangle$ ,  $\hat{\mathbf{a}}^-(p, \xi)$ , ... budeme rezervovat k označení těchto veličin při volbě  $N(p) = f(p) = 1$ , kdežto tytéž veličiny při volbě

$$f(p) = \frac{1}{2E}, \quad N(p) = \sqrt{\frac{E}{k^0}}$$

budeme označovat  $|\mathbf{p}, \xi\rangle$ ,  $\hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi)$ , ... , tj.

místo relací ( 1659 ) – ( 8.438 ) bude nyní platit

$$\langle p, \xi | p', \xi' \rangle = 2E \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (8.440)$$

$$\left[ \hat{\mathbf{a}}^-(p, \xi), \hat{\mathbf{a}}^-(p', \xi') \right]_{\mp} = \left[ \hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi), \hat{\mathbf{a}}^+(p', \xi') \right]_{\mp} = 0, \quad (8.441)$$

$$\left[ \hat{\mathbf{a}}^-(p, \xi), \hat{\mathbf{a}}^+(p', \xi') \right]_{\mp} = 2E \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

$$\hat{\mathbf{U}}(\Lambda, a) \hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi) \hat{\mathbf{U}}^\dagger(\Lambda, a) = \exp(ia\Lambda p) \sum_{\xi'=-j}^j D_{\xi\xi'}^{(j)}(\mathbf{W}(\Lambda, p)) \hat{\mathbf{a}}^+(\Lambda p, \xi'), \quad (8.442)$$

$$\hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi) \hat{\mathbf{P}}^{-1} = \eta^{(P)} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{P}p, \xi), \quad (8.443)$$

$$\hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{a}}^+(p, \xi) \hat{\mathbf{T}}^{-1} = \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{P}p, -\xi).$$

respektive

$$\langle \mathbf{p}, \xi | \mathbf{p}', \xi' \rangle = \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}') \quad (8.444)$$

$$\left[ \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi), \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}', \xi') \right]_{\mp} = \left[ \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi), \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}', \xi') \right]_{\mp} = 0, \quad (8.445)$$

$$\left[ \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi), \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}', \xi') \right]_{\mp} = \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),$$

$$\hat{\mathbf{P}} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi) \hat{\mathbf{P}}^{-1} = \eta^{(P)} \hat{\mathbf{a}}^+(-\mathbf{p}, \xi), \quad (8.446)$$

$$\hat{\mathbf{T}} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi) \hat{\mathbf{T}}^{-1} = \eta^{(T)} (-1)^{j-\xi} \hat{\mathbf{a}}^+(-\mathbf{p}, -\xi),$$

$$\hat{\mathbf{U}}(\Lambda, a) \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi) \hat{\mathbf{U}}^\dagger(\Lambda, a) = \sqrt{\frac{(\Lambda p)^0}{E}} \exp(ia\Lambda p) \cdot \sum_{\xi'=-j}^j D_{\xi\xi'}^{(j)}(\mathbf{W}(\Lambda, p)) \hat{\mathbf{a}}^+(\Lambda \vec{p}, \xi'), \quad (8.447)$$

kde  $\Lambda \vec{p}$  jsme označili třívektor s komponentami

$$(\Lambda \vec{p})^k \equiv \Lambda^k_{\mu} p^{\mu} = \Lambda^k_j p^j + \Lambda^k_0 E. \quad (8.448)$$

Definujme nyní ket

$$|\mathbf{p}_1, \xi_1; \mathbf{p}_2, \xi_2; \dots; \mathbf{p}_N, \xi_N\rangle \equiv \mathbf{a}^+(\mathbf{p}_1, \xi_1) \mathbf{a}^+(\mathbf{p}_2, \xi_2) \cdot \dots \cdot \mathbf{a}^+(\mathbf{p}_N, \xi_N) |0\rangle. \quad (8.449)$$

Díky formulím ( 8.439 ) a ( 8.434 ) víme, že se jedná o společný vlastní vektor operátorů  $\hat{\mathbf{P}}$  a  $\hat{\mathbf{H}}$  příslušný k vlastním hodnotám odpovídajícím celkovému impulsu a energii soustavy  $N$  částic, z nichž každá má hmotu  $m$ , a přitom jedna z nich má impuls  $\mathbf{p}_1$ , jiná  $\mathbf{p}_2$ , jiná  $\mathbf{p}_N$ .

Navíc, z formulí ( 8.447 ), ( 8.434 ) vidíme, že pokud je systém z hlediska naší soustavy ve stavu popsaném ketem ( 8.449 ), potom z hlediska soustavy, která z ní vznikne Poincaréovu transformací, je ve stavu popsaném ketem

$$\hat{\mathbf{U}}(\Lambda, a) |\mathbf{p}_1, \xi_1; \mathbf{p}_2, \xi_2; \dots; \mathbf{p}_N, \xi_N\rangle = \prod_{k=1}^N \sqrt{\frac{(\Lambda p)^0}{E}} \exp(ia\Lambda p_{(k)}) \cdot \sum_{\xi'=-j}^j D_{\xi'\xi}^{(j)}(\mathbf{W}(\Lambda, p)) |\Lambda \bar{\mathbf{p}}_1, \xi'_1; \Lambda \bar{\mathbf{p}}_2, \xi'_2; \dots; \Lambda \bar{\mathbf{p}}_N, \xi'_N\rangle, \quad (8.450)$$

tj. vektor ( 8.449 ) se transformuje jako direktní součin vektorů odpovídajících příslušným jednočásticovým stavům.

Podobně z formulí ( 8.446 ) díky platnosti relací ( 8.434 ) obdržíme

$$\hat{\mathbf{P}} |\mathbf{p}_1, \xi_1; \mathbf{p}_2, \xi_2; \dots; \mathbf{p}_N, \xi_N\rangle = (\eta^{(P)})^N |-\mathbf{p}_1, \xi_1; -\mathbf{p}_2, \xi_2; \dots; -\mathbf{p}_N, \xi_N\rangle, \quad (8.451)$$

resp.

$$\hat{\mathbf{T}} |\mathbf{p}_1, \xi_1; \mathbf{p}_2, \xi_2; \dots; \mathbf{p}_N, \xi_N\rangle = (\eta^{(T)})^N \cdot \prod_{k=1}^N (-1)^{j-\xi_k} |-\mathbf{p}_1, -\xi_1; -\mathbf{p}_2, -\xi_2; \dots; -\mathbf{p}_N, -\xi_N\rangle. \quad (8.452)$$

Nalezené výsledky ukazují, že kety  $|\mathbf{p}_1, \xi_1; \mathbf{p}_2, \xi_2; \dots; \mathbf{p}_N, \xi_N\rangle$  lze bezesporně interpretovat jako vektory popisující  $N$  nerozlišitelných částic, z nichž jedna má impuls  $\mathbf{p}_1$  a třetí složku kovariantního spinu  $\xi_1$ , jiná impuls  $\mathbf{p}_2$  a třetí složku kovariantního spinu  $\xi_2, \dots$ , a přitom se jedná o bosony nebo fermiony, v závislosti na tom, zda ve formulích ( 8.445 ) platí komutační či antikomutační relace.

Jestliže příslušná částice nemá žádné další stupně volnosti, potom Hilbertův prostor diskutovaného fyzikálního systému můžeme ztotožnit s prostorem, jehož báze je tvořena kety ( 8.449 ) pro  $N = 0, \dots, \infty$ .

Takto zkonstruovaný Hilbertův prostor  $\mathcal{H}$  budeme nazývat **Fockovým prostorem**. Libovolný element  $|\Phi\rangle \in \mathcal{H}$  můžeme vyjádřit ve tvaru rozvoje

$$\begin{aligned} |\Phi\rangle &= c_0 |0\rangle + \int d^3\mathbf{p}_1 \sum_{\xi_1} c_1(\mathbf{p}_1, \xi_1) |\mathbf{p}_1, \xi_1\rangle + \\ &+ \frac{1}{\sqrt{2!}} \int d^3\mathbf{p}_1 d^3\mathbf{p}_2 \sum_{\xi_1, \xi_2} c_2(\mathbf{p}_1, \xi_1, \mathbf{p}_2, \xi_2) |\mathbf{p}_1, \xi_1, \mathbf{p}_2, \xi_2\rangle + \dots = \\ &= \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N \sum_{\xi_1, \dots, \xi_N} c_N(\mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N) |\mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N\rangle \end{aligned} \quad ( 8.453 )$$

kde komplexní funkce  $c_N(\mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N)$  jsou invariantní, resp. mění znaménko při záměně  $(\mathbf{p}_j, \xi_j) \Leftrightarrow (\mathbf{p}_k, \xi_k)$  pro libovolnou dvojici  $j \neq k$ , kde  $j, k = 1, \dots, N$ , v závislosti na tom, zda ve formuli ( 8.445 ) platí komutační, či antikomutační relace.

Z komutačních relací ( 8.445 ) snadno plyne vztah

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}_N, \xi_N) \dots \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}_1, \xi_1) \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}'_1, \xi'_1) \dots \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}'_N, \xi'_N) | 0 \rangle = \\ = \delta_{NN'} \sum_P \delta_{\xi_1 \xi'_1} \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_{i_1}) \dots \delta_{\xi_N \xi'_N} \delta(\mathbf{p}_N - \mathbf{p}'_{i_N}), \end{aligned} \quad ( 8.454 )$$

kde suma probíhá přes všechny permutace

$$\begin{pmatrix} 1 & \cdots & N \\ i_1 & \cdots & i_N \end{pmatrix}. \quad (8.455)$$

Díky němu pro koeficienty rozvoje ( 8.453 ) obdržíme výraz

$$c_N(\mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \langle \mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N | \Phi \rangle, \quad (8.456)$$

po jehož dosazení do tohoto rozvoje obdržíme relaci uzavřenosti

$$1 = \sum_{N=0}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{N!}} \int d^3 \mathbf{p}_1 \cdots d^3 \mathbf{p}_N \sum_{\xi_1, \dots, \xi_N} |\mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N\rangle \langle \mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N|, \quad (8.457)$$

v níž  $N$  – tý člen na pravé straně není ničím jiným, než projekčním operátorem do  $N$  – částicového podprostoru, tj. do prostoru  $N$  – částicových stavů studovaného systému.

Pomocí této relace m.j. ihned dostaneme vyjádření kvadrátu normy vektoru ( 8.453 ) ve tvaru

$$\|\Phi\|^2 \equiv \langle \Phi | \Phi \rangle = \sum_{N=0}^{\infty} \int d^3 \mathbf{p}_1 \cdots d^3 \mathbf{p}_N \sum_{\xi_1, \dots, \xi_N} |c_N(\mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N)|^2. \quad (8.458)$$

V případě antikomutačních relací ( 8.445 ) obdržíme místo ( 8.454 ) vztah

$$\begin{aligned} \langle 0 | \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}_N, \xi_N) \cdots \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}_1, \xi_1) \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}'_1, \xi'_1) \cdots \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}'_N, \xi'_N) | 0 \rangle = \\ = \delta_{NN'} \sum_P \varepsilon_P \delta_{\xi_1 \xi'_1} \delta(\mathbf{p}_1 - \mathbf{p}'_1) \cdots \delta_{\xi_N \xi'_N} \delta(\mathbf{p}_N - \mathbf{p}'_N), \end{aligned} \quad (8.459)$$

kde  $\varepsilon_P$  je parita permutace.

Formule ( 8.456 ) – ( 8.458 ) však zůstanou v platnosti bez jakékoli změny.

Právě nalezené výsledky nám dovolují interpretovat komplexní funkci  $c_N(\mathbf{p}_1, \xi_1, \dots, \mathbf{p}_N, \xi_N)$  jako amplitudu hustoty pravděpodobnosti nalezení

právě  $N$  částic ve stavu uvažovaného systému popsaném vektorem  $|\Phi\rangle$ , z nichž jedna bude mít třetí komponentu kovariantního spinu rovnou  $\xi_1$  a impuls  $\mathbf{p}_1$ ,  $N$ -tá třetí komponentu kovariantního spinu  $\xi_N$  impuls  $\mathbf{p}_N$ . Definujeme-li

$$\hat{N}(\xi) \equiv \int d^3\mathbf{p} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi), \quad (8.450)$$

potom na základě formule (8.445), nezávisle na tom, zda v ní vystupují komutační či antikomutační relace, snadno zjistíme, že tento operátor vyhovuje komutačním relacím

$$[\hat{N}(\xi), \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi)] = \delta_{\xi\xi'} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi), \quad (8.461)$$

díky nimž ho můžeme interpretovat jako operátor počtu částic s třetí složkou kovariantního spinu rovnou  $\xi$ .

Z formule (8.460) pak vidíme, že operátor

$$\hat{N}(\mathbf{p}, \xi) \equiv \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi) \quad (8.462)$$

hraje v impulsovém prostoru úlohu operátoru hustoty počtu částic s třetí složkou kovariantního spinu rovnou  $\xi$ .

Ze samotné konstrukce Fockova prostoru plyne, že libovolný operátor  $\hat{F}$  na tomto prostoru definovaný, lze vyjádřit pomocí kreačních a anihilačních operátorů ve tvaru

$$\begin{aligned} \hat{F} = & \sum_{N=0}^{\infty} \sum_{N'=0}^{\infty} \int d^3\mathbf{p}_1 \dots d^3\mathbf{p}_N \int d^3\mathbf{p}'_1 \dots d^3\mathbf{p}'_{N'} \\ & \sum_{\xi_1 \dots \xi_2} \sum_{\xi'_1 \dots \xi'_2} F_{N,N'}(\mathbf{p}_1, \xi_1; \dots; \mathbf{p}_N, \xi_N; \mathbf{p}'_1, \xi'_1; \dots; \mathbf{p}'_{N'}, \xi'_{N'}) \cdot \\ & \cdot \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}_1, \xi_1) \dots \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}_N, \xi_N) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}'_1, \xi'_1) \dots \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}'_{N'}, \xi'_{N'}), \end{aligned} \quad (8.463)$$

kde  $F_{N,N'}$  jsou komplexní funkce příslušných proměnných.

V tomto tvaru vyjádřené operátory celkové energie a impulsu neinteragujících částic můžeme zapsat jako

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{H}} &= \int d^3\mathbf{p} \sum_{\xi} E \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi) = \int d^3\mathbf{p} \sum_{\xi} E \hat{\mathbf{N}}(\mathbf{p}, \xi), \\ \hat{\mathbf{P}} &= \int d^3\mathbf{p} \sum_{\xi} \mathbf{p} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi) = \int d^3\mathbf{p} \sum_{\xi} \mathbf{p} \hat{\mathbf{N}}(\mathbf{p}, \xi).\end{aligned}\quad (8.464)$$

Díky (anti)komutačním relacím ( 8.445 ) operátory vystupující na pravých stranách posledních dvou formulí vyhovují komutačním relacím ( 8.439 ).

Pro zobecnění naznačené konstrukce pro popis systému, jenž se může vyskytovat ve stavech odpovídajících libovolnému počtu nejrůznějších druhů částic, z nichž některé mohou být bosony a jiné fermiony stačí, když každému druhu částic přiřadíme vlastní kreační anihilační operátory tak, že pokud  $\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{p}, \xi, n)$  je anihilační operátor odpovídající  $n$ -tému druhu částic, potom platí

$$\hat{\mathbf{a}}(\mathbf{p}, \xi; n) |0\rangle = 0 \quad (8.465)$$

a relace

$$\begin{aligned}\left[ \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{p}, \xi; n), \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{p}', \xi'; n') \right]_{\mp} &= \left[ \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi; n), \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}', \xi'; n') \right]_{\mp} = 0, \\ \left[ \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{p}, \xi; n), \hat{\mathbf{a}}(\mathbf{p}', \xi'; n') \right]_{\mp} &= \delta_{nn'} \delta_{\xi\xi'} \delta(\mathbf{p} - \mathbf{p}'),\end{aligned}\quad (8.466)$$

v nichž se jedná o atikomutátory pouze tehdy, když jak částice  $n$ , tak částice  $n'$  je fermionem.

$$\begin{aligned}1 &= \sum_{n_1=0}^{\infty} \cdots \sum_{n_N=0}^{\infty} \frac{1}{n_{n_1}! \cdots n_{n_N}!} \int d^3\mathbf{p}_1^{(1)} \cdots d^3\mathbf{p}_{n_1}^{(1)} \sum_{\xi_1^{(1)} \cdots \xi_{n_1}^{(1)}} \cdots \int d^3\mathbf{p}_1^{(N)} \cdots d^3\mathbf{p}_{n_N}^{(N)} \\ &\quad \sum_{\xi_1^{(N)} \cdots \xi_{n_N}^{(N)}} \left| \mathbf{p}_1^{(1)}, \xi_1^{(1)}; \dots; \mathbf{p}_{n_N}^{(N)}, \xi_{n_N}^{(N)} \right\rangle \left\langle \mathbf{p}_1^{(1)}, \xi_1^{(1)}; \dots; \mathbf{p}_{n_N}^{(N)}, \xi_{n_N}^{(N)} \right|.\end{aligned}\quad (8.467)$$

kde  $N$  udává počet druhů částic a

$$\begin{aligned} & \left| \mathbf{p}_1^{(1)}, \xi_1^{(1)}; \dots; \mathbf{p}_{n_1}^{(1)}, \xi_{n_1}^{(1)}; \mathbf{p}_1^{(2)}, \xi_1^{(2)}; \dots; \mathbf{p}_{n_N}^{(N)}, \xi_{n_N}^{(N)} \right\rangle \equiv \\ & \equiv \hat{\mathbf{a}}^+ \left( \mathbf{p}_1^{(1)}, \xi_1^{(1)}; 1 \right) \dots \hat{\mathbf{a}}^+ \left( \mathbf{p}_{n_1}^{(1)}, \xi_{n_1}^{(1)}; 1 \right) \hat{\mathbf{a}}^+ \left( \mathbf{p}_1^{(2)}, \xi_1^{(2)}; 2 \right) \dots \hat{\mathbf{a}}^+ \left( \mathbf{p}_{n_N}^{(N)}, \xi_{n_N}^{(N)}; N \right) |0\rangle. \end{aligned} \quad (8.468)$$

Povšimněme si, že operátor

$$\hat{\mathbf{N}}(\xi, n) \equiv \int d^3 \mathbf{p} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi, n) \quad (8.469)$$

vyhovuje komutačním relacím

$$\left[ \hat{\mathbf{N}}(\xi, n), \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi', n') \right] = \delta_{nn'} \delta_{\xi\xi'} \mathbf{a}^+(\mathbf{p}, \xi, n), \quad (8.470)$$

díky nimž ho můžeme interpretovat jako operátor počtu částic druhu  $n$  s třetí složkou kovariantního spinu rovnou  $\xi$ .

Operátory celkové energie a impulsu neinteragujících částic pak můžeme vyjádřit jako

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} &= \int d^3 \mathbf{p} \sum_{n=1}^N \sum_{\xi} E(\mathbf{p}, n) \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi, n), \\ \hat{\mathbf{P}} &= \int d^3 \mathbf{p} \sum_{n=1}^N \sum_{\xi} \mathbf{p} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi, n), \end{aligned} \quad (8.471)$$

kde

$$E(\mathbf{p}, n) \equiv \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_n^2} \quad (8.472)$$

a  $m_n$  je hmota částice druhu  $n$ .

Výše zavedený Fockův prostor jsme konstruovali tak, že na něm existuje unitární reprezentace Poincaréovy grupy realizovaná operátory  $\hat{\mathbf{U}}(\Lambda, a)$ , které vedle požadavku



$$\hat{U}(\Lambda, a)|0\rangle = |0\rangle \quad (8.473)$$

vyhovují relacím

$$\begin{aligned} \hat{U}(\Lambda, a)\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n)\hat{U}^\dagger(\Lambda, a) &= \sqrt{\frac{(\Lambda p)^0}{E}} \exp(ia\Lambda p) \cdot \\ &\cdot \sum_{\xi'=-j^{(n)}}^{j^{(n)}} D_{\xi\xi'}^{(j^{(n)})}(\mathbf{W}(\Lambda, p))\hat{\mathbf{a}}^+(\Lambda\vec{p}, \xi', n), \end{aligned} \quad (8.474)$$

kde

$$p^0 = E \equiv \sqrt{\mathbf{p}^2 + m_n^2}. \quad (8.475)$$

Povšimněme si, že na obou stranách těchto relací vystupují kreační operátory odpovídající téže částici, ale pro různé hodnoty kinematických proměnných.

Fyzikálně to odráží skutečnost, že pozorovatelé užívající různé souřadné soustavy vidí tytéž částice, ale hodnoty jejich impulsů a spinových charakteristik závisí na tom, v jaké soustavě jsou určovány.

Podobně je tomu i u operátorů reprezentujících prostorovou, resp. časovou inverzi, které vedle požadavku

$$\hat{P}|0\rangle = \hat{T}|0\rangle = |0\rangle \quad (8.476)$$

vyhovují relacím

$$\begin{aligned} \hat{P}\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n)\hat{P}^{-1} &= \eta^{(P)}\hat{\mathbf{a}}^+(-\mathbf{p}, \xi, n), \\ \hat{T}\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n)\hat{T}^{-1} &= \eta^{(T)}(-1)^{j^{(n)}-\xi}\hat{\mathbf{a}}^+(-\mathbf{p}, -\xi, n). \end{aligned} \quad (8.477)$$

Na diskutovaném prostoru však mohou existovat i reprezentace dalších grup ( $\equiv \mathfrak{G}$ ) realizované unitárními operátory  $\hat{U}(g)$ , jejichž vlastnosti

jsou v jistém smyslu opačné: nemění kinematické charakteristiky částic, ale mohou mezi sebou míchat různé druhy částic.

V dalším se zaměříme na ty z těchto operátorů, pro které platí

$$\hat{U}(g)|0\rangle = |0\rangle \quad (8.478)$$

a přitom

$$\hat{U}(g)\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n)\hat{U}^\dagger(g) = \sum_{n'} U_{n'n}(g)\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n'), \quad (8.479)$$

kde  $U_{n'n}(g)$  představují elementy unitárních matic  $U(g)$ , kterými je realizována nějaká reprezentace uvažované grupy  $\mathfrak{G}$ .

Z hlediska těchto transformací hrají kinematické proměnné naprosto pasivní roli, tj. tyto transformace neodrážejí žádné vlastnosti prostoročasu.

Proto se o nich obvykle mluví jako o transformacích vnitřních symetrií. Formálně se to odráží v tom, že všechny operátory vnitřních symetrií komutují s operátory reprezentujícími Poincaréovu grupu, tj.

$$[\hat{U}(g), \hat{U}(\Lambda, a)] = 0, \quad (8.480)$$

což m.j. vyžaduje, aby platilo

$$[\hat{U}(g), \hat{\mathbf{H}}] = [\hat{U}(g), \hat{\mathbf{J}}] = 0. \quad (8.481)$$

Pokud  $\mathfrak{G}$  je  $\eta$ -parametrickou Lieovou grupou, potom každý její element  $g$  je jednoznačně určen hodnotou  $\eta$  reálných parametrů  $(\alpha_1, \dots, \alpha_\eta \equiv \alpha)$  a operátory  $\hat{U}(g)$ , resp. matice  $U(g)$  možno vyjádřit ve tvaru

$$\hat{U}(g(\alpha)) \equiv \hat{U}(\alpha) = \exp \left\{ i \sum_{\alpha=1}^{\eta} \alpha_a \hat{\mathbf{X}}_a \right\}, \quad (8.482)$$

resp.

$$\mathbf{U}(g(\alpha)) \equiv \mathbf{U}(\alpha) = \exp \left\{ i \sum_{\alpha=1}^{\eta} \alpha_a \mathbf{t}_a \right\}, \quad (8.483)$$

kde samosdružené operátory  $\hat{\mathbf{X}}_a$  i hermitovské matice  $\mathbf{t}_a$  realizují reprezentaci generátorů grupy  $\mathfrak{G}$ , tj. reprezentaci odpovídající Lieovy algebry, a tedy vyhovují komutačním relacím

$$\begin{aligned} [\hat{\mathbf{X}}_a, \hat{\mathbf{X}}_b] &= i \sum_{c=1}^N C_{ab}^c \hat{\mathbf{X}}_c, \\ [\mathbf{t}_a, \mathbf{t}_b] &= i \sum_{c=1}^N C_{ab}^c \mathbf{t}_c, \end{aligned} \quad (8.484)$$

kde  $C_{ab}^c$  jsou strukturní konstanty grupy  $\mathfrak{G}$ .

Porovnáním veličin prvního řádu v  $\alpha$  na obou stranách formulí ( 8.479 ), resp. ( 8.478 ) nalezneme, že platí komutační relace

$$[\hat{\mathbf{X}}_a, \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n)] = \sum_{n'} (t_a)_{n'n} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n), \quad \alpha = 1, \dots, \eta \quad (8.485)$$

a přitom

$$\hat{\mathbf{X}}_a |0\rangle = 0, \quad \alpha = 1, \dots, \eta. \quad (8.486)$$

Z komutační relace ( 8.481 ) navíc vidíme, že musí platit

$$[\hat{\mathbf{X}}_a, \hat{\mathbf{H}}] = 0. \quad (8.487)$$

tj. operátory  $\hat{\mathbf{X}}_a$  představují integrály pohybu částic.

Ve speciálním případě, když matice  $\mathbf{t}_a$ , odpovídající některému z generátorů je diagonální, tj. když (pro určitou hodnotu  $a$ ) je

$$(t_a)_{n'n} = q_n \delta_{n'n} , \quad (8.488)$$

operátor

$$\hat{\mathbf{Q}} \equiv \mathbf{X}_a \quad (8.489)$$

splňuje komutační relace

$$[\hat{\mathbf{Q}}, \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n)] = q_n \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n) , \quad (8.490)$$

z nichž okamžitě vidíme, že ket ( 468 ) je jeho vlastním vektorem takovým, že

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{Q}} \left| \mathbf{p}_1^{(1)}, \xi_1^{(1)}; \dots; \mathbf{p}_{n_1}^{(1)}, \xi_{n_1}^{(1)}; \mathbf{p}_1^{(2)}, \xi_1^{(2)}; \dots; \mathbf{p}_{n_N}^{(N)}, \xi_{n_N}^{(N)} \right\rangle = \\ = \sum_{j=1}^N n_j q_j \left| \mathbf{p}_1^{(1)}, \xi_1^{(1)}; \dots; \mathbf{p}_{n_1}^{(1)}, \xi_{n_1}^{(1)}; \mathbf{p}_1^{(2)}, \xi_1^{(2)}; \dots; \mathbf{p}_{n_N}^{(N)}, \xi_{n_N}^{(N)} \right\rangle . \end{aligned} \quad (8.491)$$

Díky tomu můžeme  $\hat{\mathbf{Q}}$  interpretovat jako operátor odpovídající nějakému kvantovému náboji, jako je elektrický náboj, leptonové číslo, baryonové číslo, projekce izospinu, či jakékoliv jiné aditivní kvantové číslo.

Číslo  $q_n$  pak udává hodnotu náboje pro částici druhu  $n$ .

Povšimněme si, že tento operátor lze vyjádřit pomocí kreačních a anihilačních operátorů jako

$$\hat{\mathbf{Q}} = \sum_n q_n \hat{\mathbf{N}}(n) , \quad (8.492)$$

kde

$$\hat{N}(n) \equiv \sum_{\xi} \hat{N}(\xi, n) = \sum_{\xi} \int d^3\mathbf{p} \hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n) \hat{\mathbf{a}}^-(\mathbf{p}, \xi, n) \quad (8.493)$$

je operátor počtu částic druhu  $n$ .

Vraťme se však ještě zpátky k formuli ( 8.479 ).

Je zřejmé, že částic je možno vždy očíslovat tak, aby postupně vytvářely skupiny takové, že žádná z uvažovaných transformací navzájem nemíchá částice náležející do různých skupin.

Matice  $\mathbf{U}(g)$  pak mají kvazidiagonální tvar, v němž každé z těchto skupin odpovídá jedna submatice na diagonále.

Uvážíme-li, že relaci ( 8.481 ) lze splnit jedině tehdy, když se mezi sebou mohou míchat pouze ty částice, které mají stejné hmoty a stejné spiny (aby maticový element  $\mathbf{U}_{n'n}(g)$  mohl být nenulový, je nezbytné, aby hmota i spin částice  $n'$  měly stejné hodnoty, jako u částice  $n$ ), vyvstává přirozeně otázka, zda výše zmíněné submatice vůbec mohou být více než jednorozměrné.

Demonstrujme na nejprve na jednom konkrétním případě, že to skutečně možné je.

V rámci relativistické kvantové teorie docházíme k závěru, že ke každé částici  $n$  musí existovat její antičástice  $\bar{n}$ , která má stejnou hmotu a spin jako částice  $n$ , ale opačnou hodnotu všech kvantových nábojů.

Proto hraje důležitou roli diskrétní symetrie nazývaná nábojovým sdružením, která je na Fockově prostoru realizována unitárním operátorem  $\hat{\mathbf{C}}$ , takovým, že

$$\hat{\mathbf{C}}|0\rangle = |0\rangle \quad (8.494)$$

a

$$\hat{\mathbf{C}}\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n)\hat{\mathbf{C}}^{-1} = \eta_n^{(C)}\hat{\mathbf{a}}^+(\mathbf{p}, \xi, n), \quad (8.495)$$

kde  $\eta_n^{(C)}$  je nábojová parita částice  $n$ , pro kterou platí

$$\eta_n^{(C)} = \eta_{\bar{n}}^{(C)} = \pm 1. \quad (8.496)$$

Odtud vidíme, že operátor nábojového sdružení  $\hat{C}$  patří mezi uvažované operátory vnitřních symetrií  $\hat{U}(g)$ , neboť pro něj platí

$$\hat{C}^2 = 1, \quad (8.497)$$

a tedy představuje spolu s operátorem identity reprezentaci grupy  $S_2$ . Očíslujeme-li druhy částic tak, že mezi částicí a jí odpovídající antičásticí nefiguruje žádný jiný druh částic, potom odpovídající matice  $U(g)$  má kvazidiagonální tvar, v němž každé částici a její antičástici odpovídá jedna submatice.

Každá z těchto submatic společně s odpovídající jednotkovou maticí představuje opět reprezentaci grupy  $S_2$ .

Tato reprezentace je jednorozměrná (a tedy ireducibilní), resp. dvourozměrná (a tedy ireducibilní) v závislosti na tom, zda příslušná částice je, či není identická se svojí antičásticí.

Nábojové sdružení tak představuje diskrétní transformaci vnitřních symetrií uvažovaného typu, která hraje v relativistické kvantové teorii a jejích aplikacích velmi významnou roli.

Naznačená konstrukce však dovoluje bez problémů nalézt i celou řadu dalších operátorů vnitřních symetrií, tvořících reprezentace také Lieových grup.

Např. jestliže ve formuli (8.479) vezmeme  $U(g) \equiv U(\alpha; n)$ , kde matice napravo je diagonální a všechny její diagonální elementy jsou jednotkové, až na  $n$ -tý, který je dán výrazem  $\exp(i\alpha)$ .

Potom odpovídající operátory  $\hat{U}(\alpha; n)$ , v nichž  $n$  je pevně zvolené číslo a parametr  $\alpha$  nabývá všech možných reálných hodnot, tvoří reprezentaci grupy  $U(1)$ .

Totéž je evidentně pravdou i o operátorech obdržných coby součin více operátorů  $\hat{U}(\alpha; n)$ , z nichž všechny odpovídají téže hodnotě  $\alpha$ , ale různým hodnotám  $n$ .

Podobně, jestliže ve formuli (8.479) je  $U(g) \equiv U(\alpha; n \neq \bar{n})$ , kde  $U(\alpha; n \neq \bar{n})$  je kvazidiagonální matice, se submaticemi na diagonále odpovídajícími vždy jednomu druhu částice a její antičástici, které jsou všechny rovny jednotkové matici, s výjimkou jediné.

Ta odpovídá některému (pevně zvolenému) druhu částic ( $\equiv n$ ), které nejsou identické se svými antičásticemi.

Tuto submatici definujeme výrazem

$$\exp(i\boldsymbol{\alpha} \cdot \boldsymbol{\sigma}) . \quad ( 8.498 )$$

Snadno se přesvědčíme, že odpovídající operátory  $\hat{U}(\boldsymbol{\alpha}; n \neq \bar{n})$ , u nichž druh částice  $n \neq \bar{n}$  je pevně zvolený a každý z trojice parametrů  $\alpha_1$ ,  $\alpha_2$ ,  $\alpha_3$  probíhá všechny možné reálné hodnoty, tvoří reprezentaci grupy  $SU(2)$ .

Také součiny více operátorů  $\hat{U}(\boldsymbol{\alpha}; n \neq \bar{n})$ , z nichž všechny odpovídají témuž  $\boldsymbol{\alpha}$ , ale různým  $n \neq \bar{n}$  opět tvoří reprezentaci  $SU(2)$ .

Lze očekávat, že pouze ty z výše uvedených reprezentací grupy  $U(1)$ , resp.  $SU(2)$ , u nichž jsou některé generátory shodné s operátory odpovídajícími dynamickým proměnným, které se buď zachovávají (např. elektrický náboj), nebo je jejich zachování jen slabě narušeno (baryonové číslo, leptonové číslo, projekce izospinu, podivnost, půvab, krása, pravda, ...), mohou být fyzikálně zajímavé.

Formálně pak lze dokonce na všechny druhy částic patřící do téže skupiny pohlížet jako na částici jedinou, která se může nalézat v různých stavech z hlediska nějakých vnitřních stupňů volnosti. Transformace vnitřních symetrií pak odpovídají transformacím v prostoru těchto vnitřních stupňů volnosti.

To nám umožňuje prakticky beze zbytku zopakovat úvahy, které jsme dříve provedli při konstrukci reprezentací grup  $U(1)$  a  $SU(2)$ , vycházející z rovnosti hmot částice a antičástice.

Pouze rozměr submatic nacházejících se na diagonále  $U(g)$  bude nyní dán počtem druhů částic patřících do jednotlivých skupin (počtem nezávislých vnitřních stavů odpovídající zobecněné částice).

Protože do některých skupin mohou patřit i více než 2 druhy částic, můžeme tak dospět k nejrůznějším reprezentacím, a to i dalších než dříve zmíněných grup (např.  $SU(3)$ ).

Většina z takto získaných operátorů  $\hat{U}(g)$  bude opět fyzikálně málo zajímavá.

Zato ty z nich, které odpovídají vnitřním symetriím interagujících částic, tj. komutují s operátorem  $\hat{\mathbf{H}}_{(I)}$  nebo alespoň s jeho podstatnou částí (např. v případě  $SU(3)$  symetrie s právě tou částí  $\hat{\mathbf{H}}_{(I)}$ , která popisuje silné interakce, ale nekomutuje s tou částí  $\hat{\mathbf{H}}_{(I)}$ , která odpovídá interakcím slabým a elektromagnetickým), poskytují velice účinný nástroj pro fyzikální analýzu.

V dalším budeme požadovat, aby příslušná vnitřní symetrie, kterou dosud formulujeme v termínech transformačních vlastností kreačních a anihilačních operátorů, byla rovněž vnitřní symetrií odpovídajících polí. Nastává to tehdy, když se kreační operátory antičástic transformují stejně, jako kreační operátory částic.

Označíme-li  $\hat{\mathbf{a}}^+(h, H)$  kreační operátor částice  $h$  patřící do multipletu  $H$ , potom relace ( 8.479 ) znamená, že pro každý multiplet  $H$  platí

$$\hat{\mathbf{U}}(g)\hat{\mathbf{a}}^+(h, H)\hat{\mathbf{U}}^\dagger(g) = \sum_{h'} U_{h'h}(g, H)\hat{\mathbf{a}}^+(h', H), \quad ( 8.499 )$$

kde  $\mathbf{U}(g, H)$  jsou zadané matice realizující unitární reprezentaci  $D(\mathfrak{G}; H)$  grupy  $\mathfrak{G}$ .

Sdružením obou stran této rovnosti dostaneme odpovídající transformační zákon pro anihilační operátory:

$$\hat{\mathbf{U}}(g)\hat{\mathbf{a}}^-(h, H)\hat{\mathbf{U}}^\dagger(g) = \sum_{h'} U_{h'h}^*(g, H)\hat{\mathbf{a}}^-(h', H). \quad ( 8.500 )$$

Odtud vidíme, že antičástice  $\bar{h}$  k částicím  $h$  z multipletu  $H$  tvoří multiplet  $\bar{H}$  a pro jejich kreační operátory platí

$$\hat{\mathbf{U}}(g)\hat{\mathbf{a}}^+(\bar{h}, \bar{H})\hat{\mathbf{U}}^\dagger(g) = \sum_{h'} U_{\bar{h}'\bar{h}}(g, \bar{H})\hat{\mathbf{a}}^+(\bar{h}', \bar{H}), \quad ( 8.501 )$$

kde



$$\mathbf{U}(g; \bar{H}) \equiv \mathbf{U}^*(g; H) = \left\{ \left[ \mathbf{U}(g; H) \right]^{-1} \right\}^T. \quad (8.502)$$

Tento poznatek se obvykle formuluje jako teorém „antičástice se transformují kontrgradientně“.

Připomeňme, že pokud matice  $\mathbf{U}(g)$  tvoří reprezentaci  $D(\mathfrak{G})$  grupy  $\mathfrak{G}$ , potom také matice  $\mathbf{U}^*(g)$ , resp.  $\left\{ \left[ \mathbf{U}(g) \right]^{-1} \right\}^T$  realizují reprezentaci  $D^*(\mathfrak{G})$ , resp.  $\bar{D}(\mathfrak{G})$  téže grupy.

Přitom se o  $D^*(\mathfrak{G})$ , resp.  $\bar{D}(\mathfrak{G})$  hovoří jako o reprezentaci sdružené, resp. kontrgradientní.

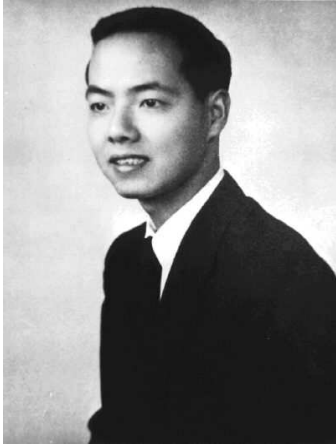
### 3) Slabá jaderná interakce

#### Trocha historie

Slabá interakce byla poprvé poznána u  $\beta$  rozpadu neutronu. Od té doby bylo pozorováno mnoho rozpadů částic ovládaných slabou interakcí. Jde o rozpady s relativně velmi dlouhými poločasy (odtud název slabá interakce) od  $10^{-15}$  s do několika týdnů. Interakce působí na značné množství částic (na všechny leptony a kvarky a samozřejmě částice z kvarků složené). Nepůsobí na intermediální částice.

V roce 1956 byly pozorovány slabé rozpady  $K^+$  mezonů, které nezachovávaly pravolevou symetrii. Tento závažný fakt byl ověřen laboratorním experimentem s  $\beta$  rozpadem kobaltu  $^{60}\text{Co}$  v roce 1957 (experiment navrhli T. D. Lee a C. N. Yang a provedla ho Chien-Shiung Wu z Kolumbijské university). Tak bylo poprvé přímo detekováno narušení P symetrie (pravo-levé symetrie prostoru). V roce 1964 (James W. Cronin, Val L. Fitch) byly pozorovány rozpady levotočivého  $K_L^0$  mezonu na piony  $\pi^+$  a  $\pi^-$ , které sice málo, ale přece jen narušují i CP symetrii (kombinovanou symetrii parity P a nábojového sdružení C). Veškeré tyto experimenty znamenaly první poznávání zákonů slabé interakce.

## První poznání slabé interakce



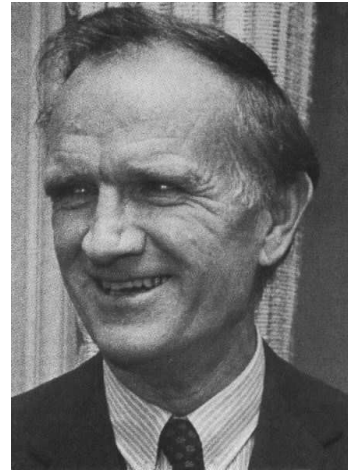
Tsung-Dao Lee (1926)



Chien-Shiung Wu (1912-1997)

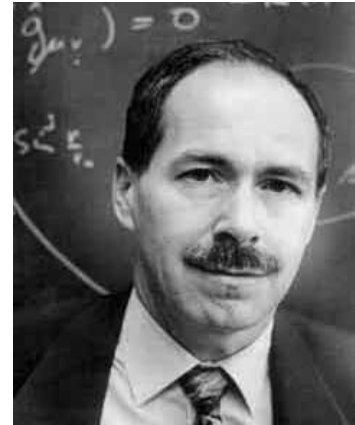


James Watson Cronin (1931)



Val Logsdon Fitch (1923)

V padesátých letech byly navrženy první teorie slabé interakce, které postupně vedly k vybudování teorie založené na  $SU(2)$  symetrii. Roku 1954 publikovali Chen Ning Yang a Robert Mills článek o možném zobecnění kvantové elektrodynamiky ve snaze popsat kromě elektromagnetické interakce i slabou. Tato teorie má lokální kalibrační symetrii izospinových transformací právě  $SU(2)$ . Tento zobecněný druh kalibračních transformací je dnes znám pod názvem Yangova–Millsova kalibrační symetrie a jejich teorii se říká Yangova–Millsova kvantová teorie pole. V této teorii vystupuje pole analogické elektromagnetickému, ale jeho kvanta jsou tří různých druhů a navíc mezi nimi působí síly určené kalibrační symetrií.



Chen Ning Yang (1922) Robert Laurence Mills (1927 – 1999) Gerardus 't Hooft (1946)

Od počátečních návrhů Yanga a Millse se různí špičkoví fyzici své doby pokoušeli konstruovat pro tuto teorii poruchový rozvoj a renormalizovat ji. Techniky rozvinuté pro zacházení s kalibrační invariancí kvantové elektrodynamiky si však nedokázaly poradit se zobecněnou kalibrační invariancí Yangovy–Millsovy teorie. Teprve roku 1971 se Gerardu van 't Hoffovi v rámci dizertace pod vedením Martina Veltmana podařilo dokázat, že Yangovy–Millsovy teorie renormalizovatelné jsou a tedy principiálně umožňují ve svém poruchovém rozvoji bezrozporně vypočítat členy libovolného řádu. Teorie slabé interakce se nazývá *kvantová flavourdynamika*, zkratku má *QFD* (Quantum Flavour Dynamics). Jde tedy o teorii postavenou na symetrii vůně při slabé interakci – symetrii  $SU(2)$ .

### Kvantová flavourdynamika

Při slabé interakci dochází k výměně intermediálních vektorových bosonů  $W^+$ ,  $W^-$ ,  $Z^0$ . Tyto částice teoreticky předpověděli S. Weinberg, A. Salam a S. L. Glashow, kteří jsou autory jednotné teorie elektromagnetické a slabé interakce (*elektroslabé interakce*). Za tuto práci obdrželi Nobelovu cenu v roce 1979. Částice objevil v Cernu C. Rubbia na přelomu roku 1983 a 1984. Za jejich objev obdržel Nobelovu cenu spolu s konstruktérem zařízení S. van der Meerem v roce 1984.

**Symetrie interakce:** Slabá interakce nerozpozná od sebe částice stejného barevného náboje. Například elektron a elektronové neutrino se při slabé interakci jeví jako jediná částice. Stejně tak kvark  $d$  a

kvark  $u$  a i ostatní dvojice. Samozřejmě při jiných interakcích (například elektromagnetické) lze tyto dvojice snadno odlišit. Symetrii nazýváme  $SU(2)$ , což je anglická zkratka pro Special Unitary – v matematice je popsána komplexními maticemi  $2 \times 2$  (přehazují mezi sebou dvě částice nerozlišitelné při slabé interakci). Tyto matice jsou unitární (Unitary) s determinantem rovným jedné (Special). Unitární matice jsou matice, které se nezmění, překlopíme-li je kolem diagonály a komplexně sdružíme. V matematice reprezentují unitární matice dvě třídy operací: rotace ( $\det = +1$ ) a zrcadlení ( $\det = -1$ ).

Slabá jaderná interakce od sebe nerozlišuje následující dvojice částic:

$$\begin{pmatrix} e \\ \nu_e \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \mu \\ \nu_\mu \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} \tau \\ \nu_\tau \end{pmatrix} \quad (8.503)$$

$$\begin{pmatrix} d \\ u \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} s \\ c \end{pmatrix} \quad \begin{pmatrix} b \\ t \end{pmatrix} \quad (8.504)$$

kteří tak tvoří  $SU(2)$  izodublety z hlediska nového kvantového čísla (náboje) zvaného **vůně**.

Transformace  $SU(2)$  se realizují s pomocí komplexních unitárních unimodulárních matic působících na vlnové funkce částic izodubletu (označme si je pro názornost  $a, b$ ):

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \end{pmatrix}. \quad (8.505)$$

Tím dostáváme v teorii celkem 8 volných parametrů.

Z požadavku unitarity

$$\boldsymbol{\sigma}^\dagger \boldsymbol{\sigma} = \mathbf{1} \quad (8.506)$$

dostáváme celkem 4 vazby a z požadavku unimodularity

$$\det \boldsymbol{\sigma} = 1 \quad (8.507)$$

další jednu vazbu.

V teorii tak zbývají pouze 3 volné parametry, které odpovídají třem vektorovým polím a jim odpovídajícím bosonům.

Tyto vektorové bosony označujeme  $W^+$ ,  $W^-$ ,  $Z^0$ .

### Základní informace

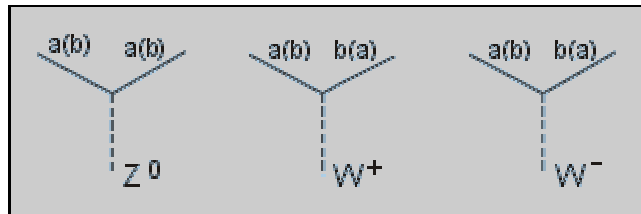
Působení	výběrové, na $Q_w \neq 0$ (leptony a kvarky)
Dosah	konečný, $10^{-18}$ m
Symetrie	SU(2)
IM částice	IM vektorové bosony $W^+$ , $W^-$ , $Z^0$

- **Působení interakce:** Slabá interakce je *výběrová interakce*. Působí jen na částice s nenulovým nábojem slabé interakce  $Q_w$ , který souvisí s vůní (flavour). Vůni mají leptony a kvarky. Vždy jedna generace částic tvořící jeden izodublet z hlediska vůně (například elektron se svým neutrinem) má stejný barevný náboj. Rozeznáváme tedy barevný náboj elektronový, mionový, tauonový, a barevný náboj kvarků  $d$  a  $u$ , kvarků  $s$  a  $c$  a kvarků  $t$  a  $b$  (celkem 6 barevných nábojů).
- **Dosah interakce:** *Konečný*, interakce slabá má krátký dosah, cca  $10^{-18}$  m. S tím je spojená nenulová hmotnost intermediálních částic interakce ( $W^\pm$  mají hmotnost 80 GeV a  $Z^0$  má hmotnost 91 GeV).

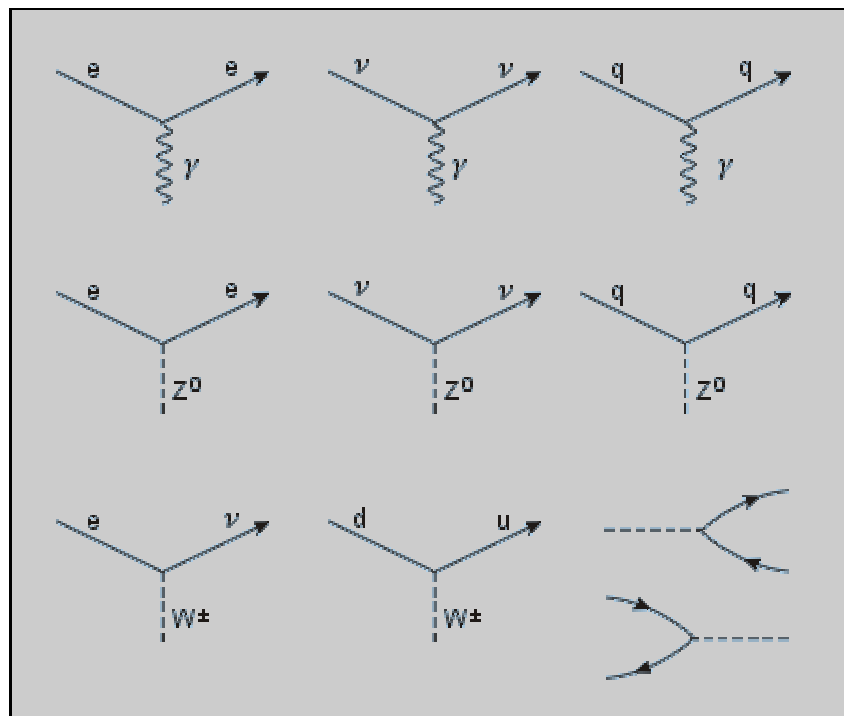
### Feynmanovy diagramy

Základní diagramy se skládají z leptonové či kvarkové linie, vrcholu a linie intermediální částice  $W^+$ ,  $W^-$  nebo  $Z^0$ . Na rozdíl od elektromagnetické interakce máme diagramy dvou typů. První je podobný jako v elektromagnetické interakci. Částice  $Z^0$  neodnáší žádný elektrický náboj (hovoříme o tzv. *neutrálních tocích*). Částice kvarkové či leptonové linie pokračuje za vrcholem.

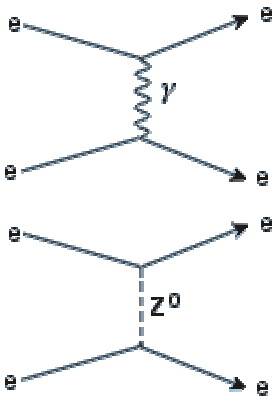
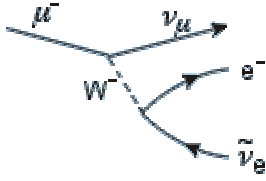
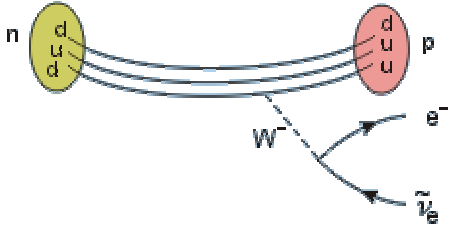
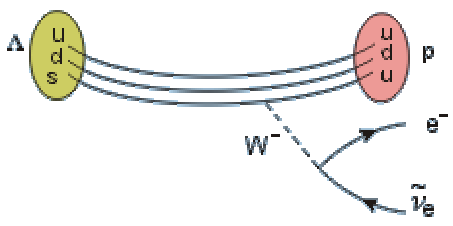
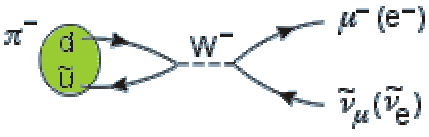
Jiná situace ale nastane, je-li intermediální částicí  $W^+$  nebo  $W^-$ . Tyto částice přináší do či odnáší z vrcholu elektrický náboj. Z hlediska slabé interakce jde sice pořád o jednu částici ( $SU(2)$  symetrie), ale z hlediska elektromagnetické interakce se horní částice izodoubletu (dvojice částic se stejným slabým nábojem) stává dolní či naopak

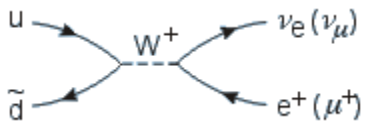
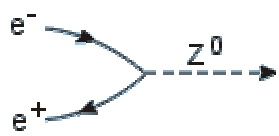


Vhodnou deformací těchto tří základních diagramů již v prvním řádu dostáváme značné množství možností. Povšimněte si, že z hlediska slabé interakce se elektron a jeho neutrino (nebo kvark  $d$  a  $u$ ) chovají v nabitých tocích jako jediná částice. V následujících diagramech je jen část z mnoha možností diagramů prvního řádu:



## Typické slabé procesy

	<p><b>Coulombův zákon.</b> Druhý kanál reakce je oprava k elektrodynamice způsobená slabou interakcí. Elektron s elektronem interagují také slabě pomocí částice <math>Z^0</math>.</p>
	<p><b>Rozpad mionu.</b> <math>\mu^- \rightarrow e^- + \tilde{\nu}_e + \nu_\mu</math></p>
	<p><b>Beta rozpad neutronu.</b> <math>n \rightarrow p^+ + e^- + \tilde{\nu}_e</math></p>
	<p><b>Slabý rozpad <math>\Lambda</math> hyperonu.</b> <math>\Lambda \rightarrow p^+ + e^- + \tilde{\nu}_e</math></p>
	<p><b>Rozpad <math>\pi^+</math> a <math>\pi^-</math> mezonů:</b> Pozorován v produktech interakce kosmického záření s horními vrstvami atmosféry. Vede na <math>e^+</math>, <math>e^-</math>, <math>\mu^+</math>, <math>\mu^-</math> a elektronová a mionová neutrina.</p>

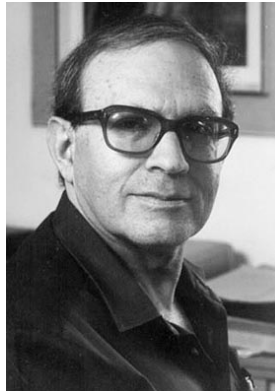
	<p><b>Objev částic <math>W^{+/-}</math>.</b> CERN (1983). Proton antiprotonový svazek. Každý svazek měl energii 270 GeV. Nabité proudy.</p>
	<p><b>Objev částice <math>Z^0</math>.</b> CERN (1984). Zařízení LEP, neutrální toky. Oba objevy: Carlo Rubbia, Simon van der Meer.</p>

#### 4) Silné interakce

Mladý americký fyzik Murray Gell-Mann si počátkem 60. let minulého století všiml, že úplně všechny fermiony, kterých již v té době bylo známo přes 200 druhů, by šlo popsat s pomocí pouhých dvou kvantových čísel (nábojů), které nazval **vůně** (flavour) a **barva** (color). Gell-Mann zjistil, že kdyby kromě 6 leptonových vůní existovalo ještě dalších 6 vůní hadronových, daly by se všechny hadrony poskládat z pouhých 6 elementárních částic, které nazval **kvarky** (tento název byl s notnou dávkou recese převzat z literárního díla Jamese Joyce).



Murray Gell-Mann (1929)



Yuval Ne'eman (1925 – 2006)



George Zweig (1937)



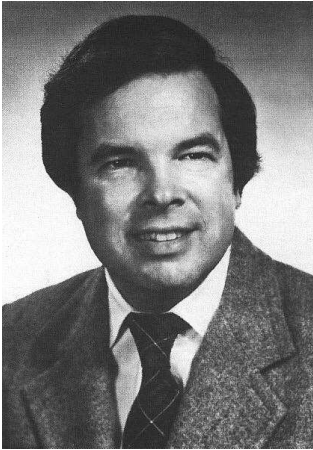
Aby mohlo uvnitř jediného hadronu existovat i vícero kvarků téže vůně, musel Gell-Mann postulovat existenci nového kvantového náboje zvaného barva. K poskládání všech mezonů z kvarků mu stačila teoreticky jediná barva a její antibarva (color), avšak k sestavení všech baryonů potřeboval 3 různé barvy, jejichž vzájemným sečtením vznikaly bezbarvé baryony. Tyto barvy byly tudíž nazvány klasicky R,G,B (red, green, blue). Vůně kvarků získaly exotická jména:  $d$  – down,  $u$  – up,  $s$  – strange,  $c$  – charm,  $b$  – beauty,  $t$  – truth. Poslední 2 kvarky byly později přejmenovány na  $b$  – botom,  $t$  – top.

Následně se objevily úvahy, zda dokonce i leptony a kvarky by nemohly být složeny z pouhých 8 druhů ještě elementárnějších částic nazvaných **preony** (viz následující kapitoly).

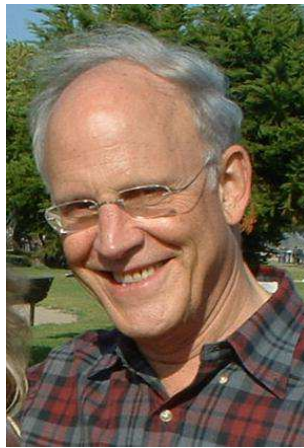
Na základě obsáhlého experimentálního materiálu, získaného převážně v 50. a 60. letech při hledání nových elementárních částic, byly vyzorovány výrazné **symetrie** ve vlastnostech elementárních částic, které v r.1964 vyústily zformulováním **kvarkového modelu** hadronů. Hlavní obtíž kvarkové hypotézy však tkvěla v tom, že žádné volné částice s vlastnostmi kvarků nebyly dlouho nikdy pozorovány. Kvarky by tedy musely být v nukleonech **velmi silně vázány**.

Koncem 60. let byl kvarkový model dopodpořen výsledky experimentů s rozptylem vysokoenergetických elektronů na nukleonech (hluboce nepružný rozptyl) ukazujících na to, že při takovém "tvrdém ostřelování" se nukleon nechová jako kompaktní částice, ale jako shluk několika (tří) víceméně volných rozptylových center. Přitom kvantová čísla těchto center (náboj, spin, izospin) odpovídala hodnotám očekávaným u kvarků. Přímému ztotožnění kvarků a rozptylových center však bránil rozpor: na jedné straně se při experimentech rozptylová centra v nukleonech chovala jako volná, na druhé straně kvarky jsou tak silně vázány, že je nelze z nukleonů uvolnit.

## Kvantová chromodynamika



**Kenneth Geddes Wilson**  
(1936)



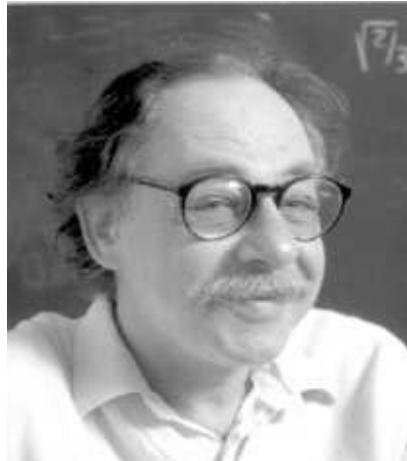
**David Jonathan Gross**  
(1941)



**Frank Anthony Wilczek**  
(1951)



**Hugh David Politzer** (1949)



**Sidney Richard Coleman** (1937 – 2007)

Výrazného pokroku v chápání vlastností silné interakce bylo dosaženo v 70. letech, kdy byla zformulována a rozvinuta tzv. **kvantová chromodynamika** (QCD, řecky chromos = barva) jako teorie silné interakce. Tato teorie je vybudována podobným způsobem jako kvantová elektrodynamika (QED), avšak je založena na neabelovských kalibračních symetriích fyzikálně souvisejících s barvou kvarků. Význačnou vlastností QCD je **asymptotická volnost**: efektivní vazbová konstanta vzájemného působení mezi kvarky se blíží nule při zmenšování vzdáleností, ale prudce roste se zvětšováním vzdálenosti. Asymptotická volnost umožňuje přirozeně pochopit zdánlivě neslučitelné vlastnosti kvarků jakožto rozptylových center: kvarky na malých vzdálenostech uvnitř nukleonů téměř neinteragují, zatímco z hlediska větších vzdáleností jsou vázány velmi silně.

S asymptotickou volností tak těsně souvisí hypotéza **dokonalého "uvěznění" kvarků**, podle níž kvarky nemohou existovat jako volné částice (nekonečně velká energie potřebná na uvolnění), ale pouze vázané v hadronech.

Silná jaderná interakce není schopna vzájemně rozlišit kvarky téže barvy.

**Symetrie interakce:** Kvarky jsou fermiony, proto by se neměly nacházet podle Pauliho vylučovacího principu ve stejném kvantovém stavu. Tomu zdánlivě odporuje již existence neutronu ( $ddu$ ), kde jsou dva kvarky  $d$  v témže stavu. V částici  $\Omega^-$  ( $sss$ ) jsou dokonce tři kvarky  $s$  ve stejném stavu. Tento problém se řeší zavedením další kvantové vlastnosti, která odlišuje jednotlivé kvarky v částici - *barvy*. Každý kvark se v přírodě musí vyskytovat ve třech navzájem různých provedeních (barvách), na které je citlivá silná interakce. V matematice tuto symetrii označujeme  $SU(3)$  symetrie (barevná symetrie) a je na ní postavena teorie silné interakce. Symetrie je popsána komplexními maticemi, které převádí mezi sebou tři barevné náboje silné interakce. Tyto matice jsou opět (jako v případě slabé interakce) unitární (Unitary) s determinanem rovným jedné (Special). Máme-li tedy např. matici, kde jednotlivé prvky označují vůně a jejich indexy označují barvy, pak zatímco slabá interakce permutuje částice v každém jednom sloupci, silná interakce naopak permutuje částice v řádcích a elektromagnetická zas částice na diagonálách.

$$\begin{pmatrix} d_R & s_G & b_B \\ u_R & c_G & t_B \end{pmatrix}. \quad (8.508)$$

(Libovolnou záměnou jednotlivých prvků v řádcích ( 8.508 ) dojdeme k obecně jinému uspořádání, které je však z hlediska silné interakce nerozeznatelné od původního – dává stále celkově bezbarvou permutaci).

Vzájemně permutovatelné kvarky pro silnou interakci tedy tvoří  $SU(3)$  izotriplety z hlediska nového kvantového čísla (náboje) zvaného **barva**.

Transformace  $SU(3)$  se realizují s pomocí komplexních unitárních unimodulárních matic působících na vlnové funkce částic izotripletu (označme si je pro názornost  $a, b, c$ ):

$$\begin{pmatrix} \lambda_{11} & \lambda_{12} & \lambda_{13} \\ \lambda_{21} & \lambda_{22} & \lambda_{23} \\ \lambda_{31} & \lambda_{32} & \lambda_{33} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \\ \psi_c \end{pmatrix}. \quad (8.509)$$

čímž dostáváme v teorii celkem 18 volných parametrů.  
Z požadavku unitarity

$$\lambda^\dagger \lambda = \mathbf{1} \quad (8.510)$$

dostáváme celkem 9 vazebních podmínek a z požadavku unimodularity

$$\det \lambda = 1 \quad (8.511)$$

další jednu vazbu.

V teorii tak zbývá 8 volných parametrů, které odpovídají osmi skalárním polím a jim příslušejícím bosonům.

Tyto skalární bosony se nazývají **gluony** a označují  $g$  s příslušným barevným indexem.

Silná interakce mezi kvarky je tedy v QCD zprostředkována vektorovým kalibračním polem, jehož kvanta s nulovou klidovou hmotností – **gluony**, zde hrají podobnou úlohu jako fotony v QED. Na rozdíl od kvantové elektrodynamiky mají gluony "**barevný**" **náboj** a interagují samy se sebou (mohou se navzájem "emitovat"); v důsledku této nelinearity má vakuum v QCD složitou strukturu, zvláště v oblasti "infračervených" (nízkoenergetických) vakuových fluktuací.

## Základní informace

Působení	výběrové, na $Q_c \neq 0$ (kvarky, gluony)
Dosah	konečný, $10^{-15}$ m
Symetrie	SU(3)
IM částice	8 gluonů

- **Působení interakce:** Silná interakce je *výběrová interakce*. Působí jen na částice s nenulovým nábojem silné interakce  $Q_c$ , tzv. barevným nábojem (chromos). Barvu mají kvarky a gluony. Rozeznáváme tři barvy. Výsledný svět je bezbarvý.
- **Dosah interakce:** *Konečný*, interakce silná má krátký dosah, cca  $10^{-15}$  m.

## Trocha historie



**Hideki Yukawa (1907-1981)**

Silná interakce je v pořadí třetí interakcí popisovanou kvantovou teorií pole. Jde o interakci, která drží pohromadě nukleony v atomovém jádře a současně i kvarky tvořící jednotlivé nukleony. První jednoduchou teorii silné interakce vytvořil Hideki Yukawa v roce 1934.

Z dosahu interakce vypočítal hmotnost intermediálních částic a usoudil, že při silné interakci si neutrony a protony v jádře mezi sebou

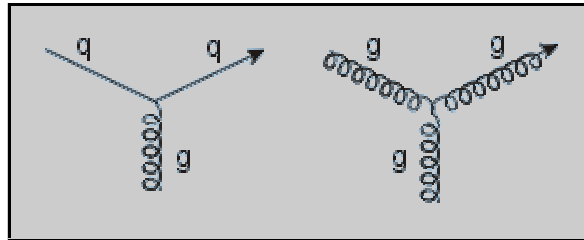
vyměňují mezony. Dnes víme, že jde o podobnou situaci, jako v elektromagnetické interakci. Interagují-li mezi sebou dva bodové náboje, vyměňují si fotony a síla ubývá jako  $1/r^2$ . Elektromagnetická interakce může ovlivňovat ale i složitější komplexy, byť jsou navenek neutrální – jde o dipól-dipólovou interakci, dipól-kvadrupólovou interakci, atd., ve kterých silové působení ubývá s vyšší mocninou  $r$  (tzv. Van der Waalsovy síly). U silné interakce představuje základní úroveň výměna gluonů mezi kvarky tvořícími částici (například neutron nebo proton). Vzájemná interakce neutronu s protonem je potom na úrovni vzájemné interakce větších komplexů.

Kvarky se skládají do částic tak, aby výsledek byl bezbarvý. První možností je kombinace kvark-antikvark (například červená-antičervená). To jsou pro nás již známé mezony. Druhou možností je složení tří kvarků různých základních barev, které dohromady dají bílou – tyto částice nazýváme baryony.

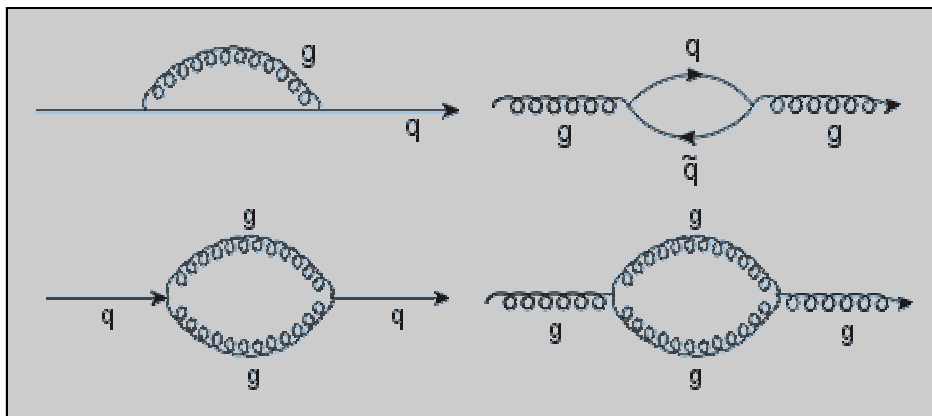
Jde o výběrovou interakci, která působí jen na částice složené z kvarků, tj. na hadrony (mezony a baryony). V okolí kvarků vytvářejí gluony těžké „gluonové kožichy“, které jsou hmotnější než samotné kvarky. Například  $d$  kvark má hmotnost 4 MeV a jeho gluonový kožich cca 300 MeV. Na rozdíl od ostatních interakcí jsou v silné interakci samy intermediální částice nositeli barevného náboje (barvy). To neznáme u elektromagnetické interakce: foton jako intermediální částice elektromagnetické interakce sám o sobě nenes elektrický náboj. Důsledkem tohoto faktu je tzv. antistínění barevného náboje. Čím blíže kvarku se nacházíme, tím je jeho barevný náboj menší. Proto kvarky na velmi malých vzdálenostech neinteragují a síla interakce roste se zvětšující se vzdáleností kvarků (tzv. asymptotická svoboda kvarků na malých vzdálenostech). Proto se kvarky nevyskytují nikdy o samotě. V počátečních fázích vývoje Vesmíru byla průměrná vzdálenost mezi částicemi menší než  $10^{-15}$  m a kvarky netvořily mezony a baryony a vyplňovaly Vesmír jako volné částice – **kvark-gluonové plazma**. Teprve když Vesmír expanzí získal větší rozměry, začaly vznikat hadrony.

## Feynmanovy diagramy

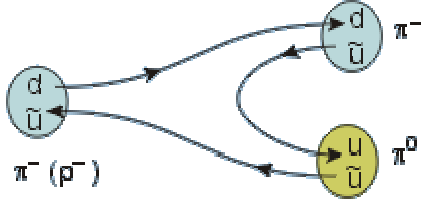
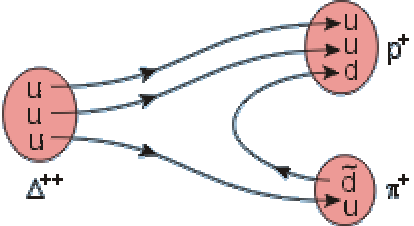
Stejně jako u elektromagnetické interakce je základním diagramem linie interagující částice (kvarku) s intermediální částicí (gluonem) vycházející z vrcholu. U silné interakce je ale možná i silná interakce gluonů samotných (mají barevný náboj), je tedy možná gluon - gluonová interakce z druhého diagramu.



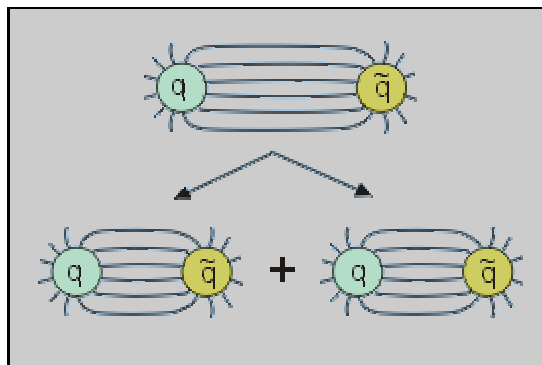
Podobně jako v elektromagnetické interakci je možné, aby letící kvark vyslal a chytil intermediální částici (zde gluon), nebo aby se letící částice (zde gluon) rozštěpila na pár částice - antičástice (zde kvark antikvark). Navíc je u silné interakce možné, aby se letící kvark nebo gluon změnily na pár gluonů.



U diagramů silné interakce nebývá zvykem zakreslovat všechny vyslané a chycené gluony. Jako příklad uveďme diagram rozpadu mezonu na dva mezony a silný rozpad částice  $\Delta^{++}$ .

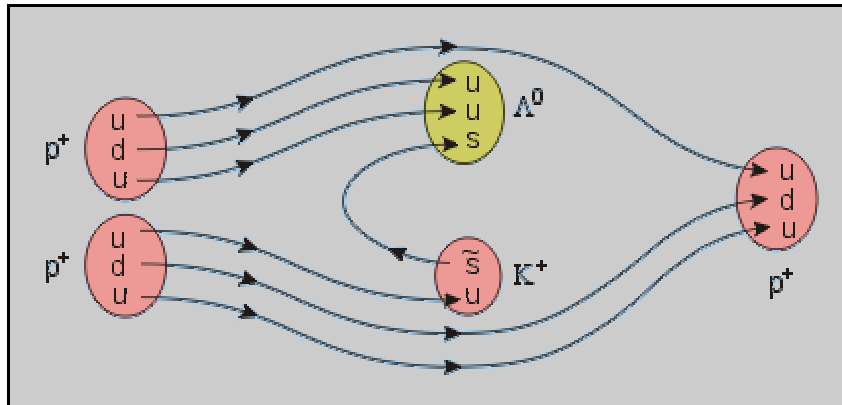
	<p><b>Rozpad mezonu na dva mezony.</b> Podobně jako se dva kousky rozděleného magnetu chovají zase jako magnety, tak se rozdělený mezon chová jako dva mezony. Samotný kvark nelze z mezonu vytrhnout.</p>
	<p><math>\Delta^{++} \rightarrow p^+ + \pi^+</math> Silný rozpad <math>\Delta</math> baryonu na proton a pion. Doba života <math>\Delta</math> baryonu je méně jak <math>10^{-23}</math> s. Takové částice nazýváme rezonance. Silné rozpady jsou velmi rychlé.</p>

Dělení mezonu je podobné dělení magnetu na dvě části. Nikdy nezískáme samotný kvark, ale po rozdělení získáme opět dvojici mezonů. Čáry mezi kvarky představují silokřivky gluonového pole. Prostor mezi kvarky se nazývá *gluonová nit*.



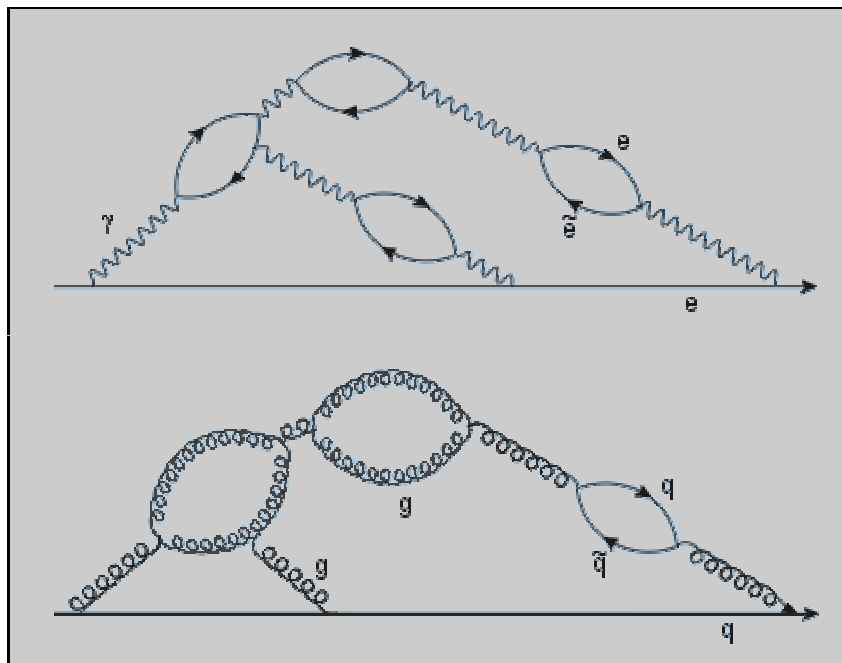


A na závěr ještě jeden trochu složitější diagram. Jde o silnou srážku dvou urychlených protonů  $p^+ + p^+ \rightarrow \Lambda^0 + K^+ + p^+$ :



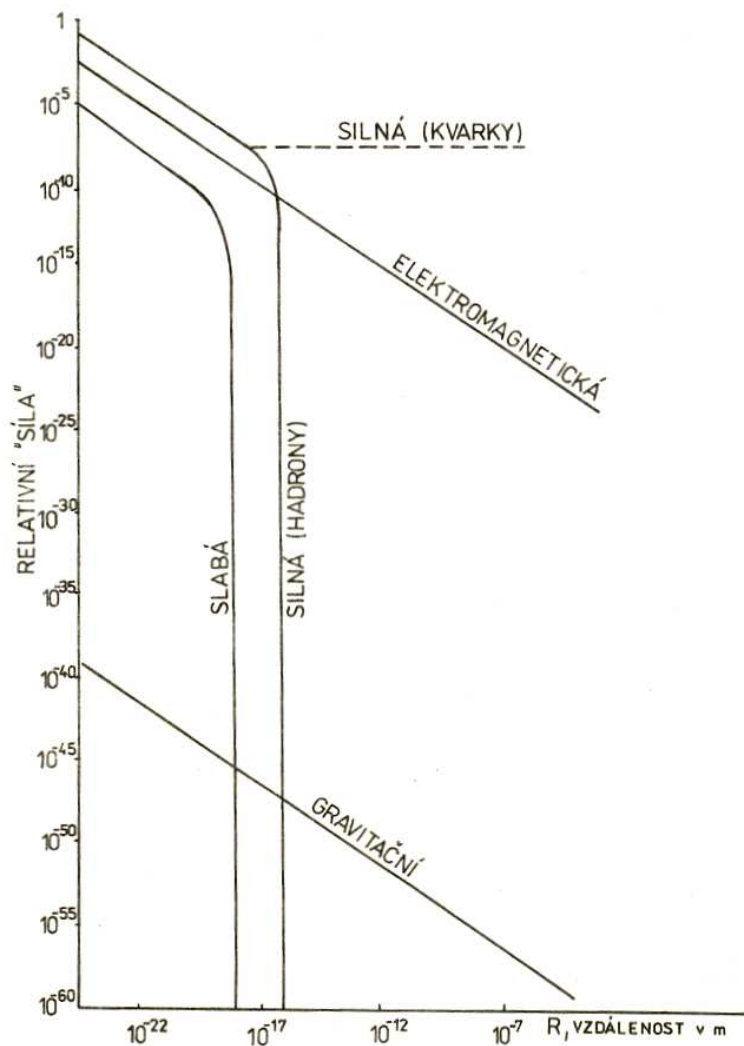
### Porovnání s elektromagnetickou interakcí

Základní odlišností je to, že intermediální částice silné interakce mají barevný náboj (u elektromagnetické interakce nenesou fotony elektrický náboj). Odsud plynou základní rozdíly.

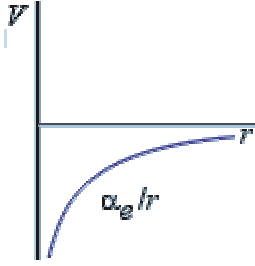
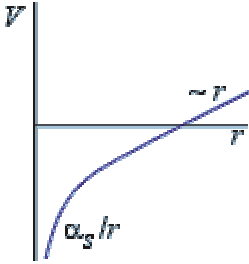
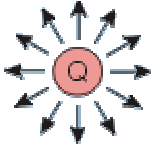



Volně letící elektron vysílá fotony, které se dělí na elektron pozitronové páry. Důsledkem je, že kolem letícího elektronu je oblak virtuálních elektron - pozitronových párů, které efektivně *stíní* náboj elektronu. Při vysokých energiích se částice dostávají blíže elektronu a pociťují vyšší elektrický náboj než z větší vzdálenosti. U letícího kvarku je situace jiná. Vytváří kolem sebe kromě oblaku kvark antikvarkových párů mohutný *gluonový kožich*. Tyto gluony jsou nositeli barevného náboje, proto dochází k *antistínění* kvarku. Čím blíže se ke kvarku dostaneme, tím menší barevný náboj budeme pociťovat. Vzdálené kvarky velmi silně interagují a nelze je proto od sebe odtrhnout.

Obr. 8.2



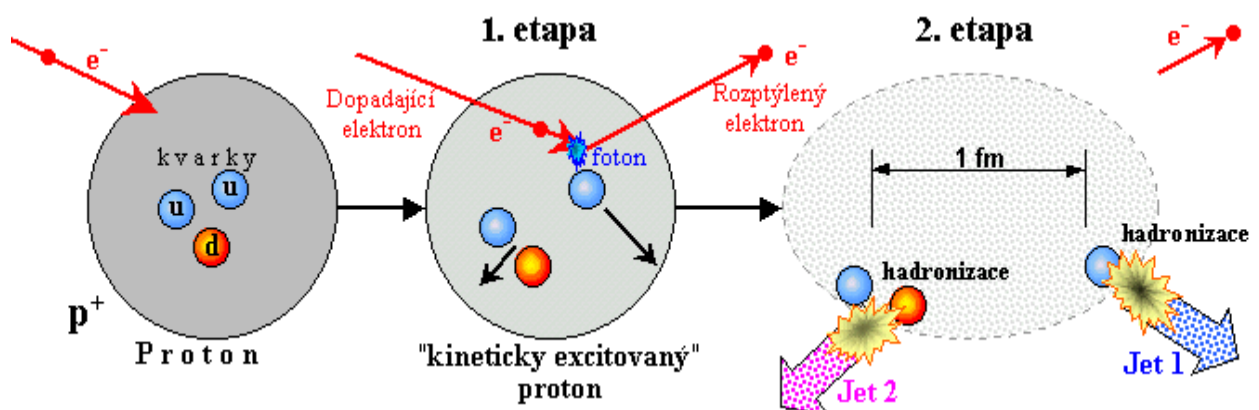
Průběh velikosti („sily“) interakcí v závislosti na vzdálenosti. Silná interakce mezi hadrony prudce klesá při vzdálenosti  $R \geq 10^{-15}$  m. Působení této interakce mezi kvarky má však jiný charakter (přerušovaná čára).

Foton nese elektrický náboj.	Gluon nese barevný náboj.
Elektricky nabité částice jsou <i>stíněné</i> elektron pozitronovými páry.	Kvarky jsou <i>antistíněné</i> svými gluonovými kožichy.
Potenciál interakce je v celém průběhu Coulombický. 	Potenciál interakce je na malých vzdálenostech Coulombický, na velkých se chová jako potenciál homogenního pole. 
Nejjednodušší elektrické pole (bodový náboj): 	Nejjednodušší silné pole (dvojice kvark antikvark - mezon):  <p>Těsně u kvarků je pole podobné Coulombickému. Ve větších vzdálenostech je homogenní a vytváří tzv. <i>gluonovou strunu</i>.</p>
Tenzor pole: $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu$	Tenzor pole: $F_{\mu\nu} = \partial_\mu A_\nu - \partial_\nu A_\mu + g(A_\mu A_\nu - A_\nu A_\mu)$ <p>Navíc je zde nekomutující nelineární člen představující interakci gluonu s gluonem.</p>
Abelova (komutující) $U(1)_{\text{loc}}$ teorie.	Neabelova (nekomutující) $SU(3)$ teorie.

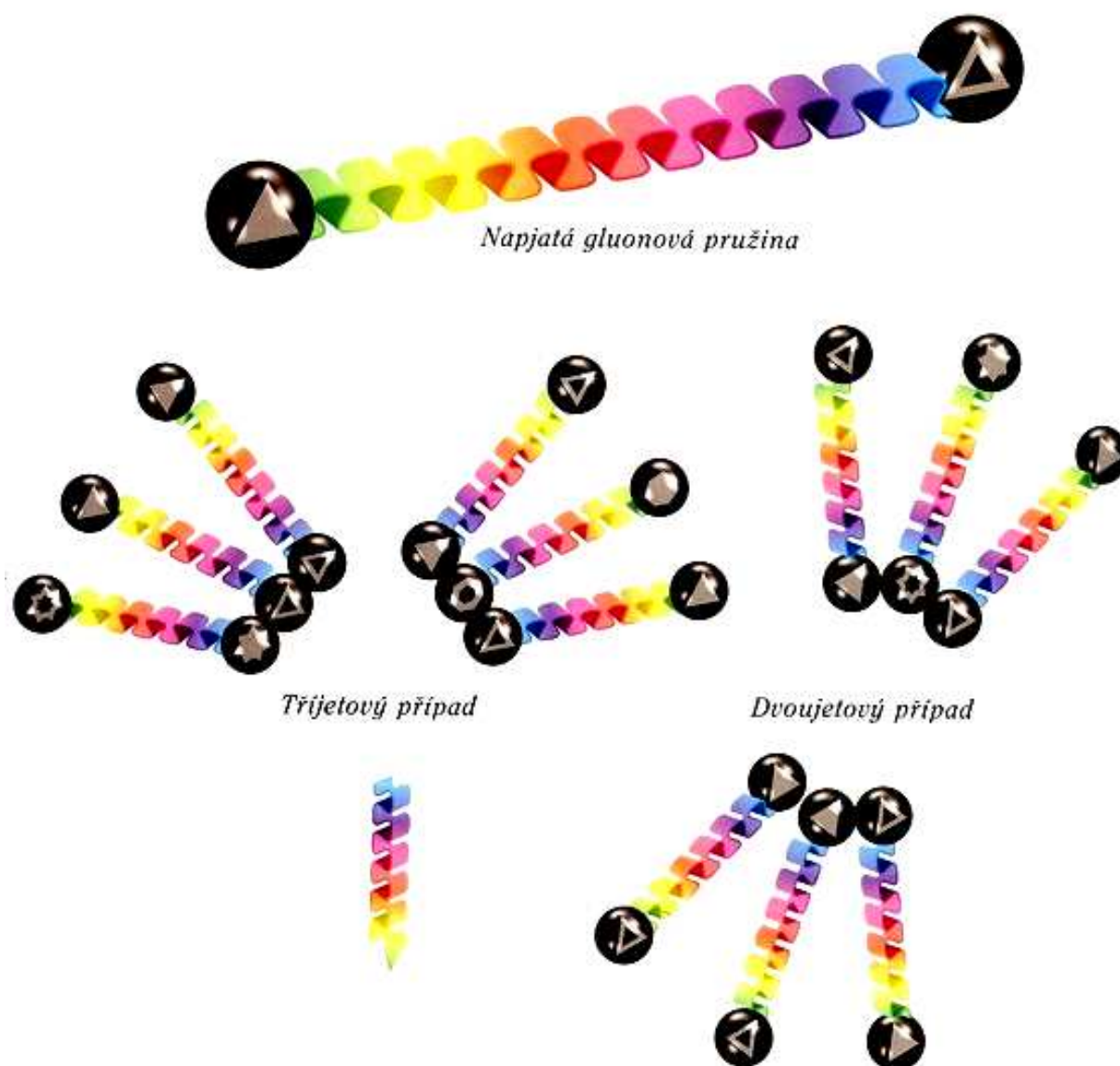
## Jetý - stopy po hadronizovaných kvarcích

Za velmi vysokých energií při tvrdých a hluboce nepružných srážkách elektronů s protony vzniká řada sekundárních částic, které vylétají **neizotropně** v jakýchsi směřovaných "výtryscích" – **jetech**. Detailní analýza úhlového rozdělení a energie částic v jetech ukázala následující mechanismus interakce, který lze rozdělit do dvou etap: Během 1. etapy vysokoenergetický elektron při interakci s protonem předá část své kinetické energie jednomu z kvarků, který se po tomto rozptylu po určitou kratičkou dobu pohybuje prakticky volně (asymptotická volnost) uvnitř protonu; podobně i zbytek protonu tvořený dvěma zbývajících kvarky. Nedojde však k uvolnění kvarků z protonu. Jakmile vzdálenost mezi vyzářeným kvarkem a zbytkem protonu přesáhne zhruba 1 fm ( $=10^{-15}$  m), nastává 2. etapa: síly mezi nimi začnou prudce narůstat a v kvark-gluonovém poli dojde k produkci kvarků a antikvarků, které se zformují do mezonů a baryonů – dojde k tzv. „**hadronizaci kvark-gluonového plasmatu**“. Výsledkem je vyzáření dvou úhlově kolimovaných spršek částic – **jetů**, které vylétají přibližně ve směrech letu kvarku a zbytku protonu v první etapě. Tyto jety jsou vlastně **stopami po kvarcích**. Tento mechanismus je zjednodušeně znázorněn na obrázku 8.3 a 8.4.

Obr. 8.3

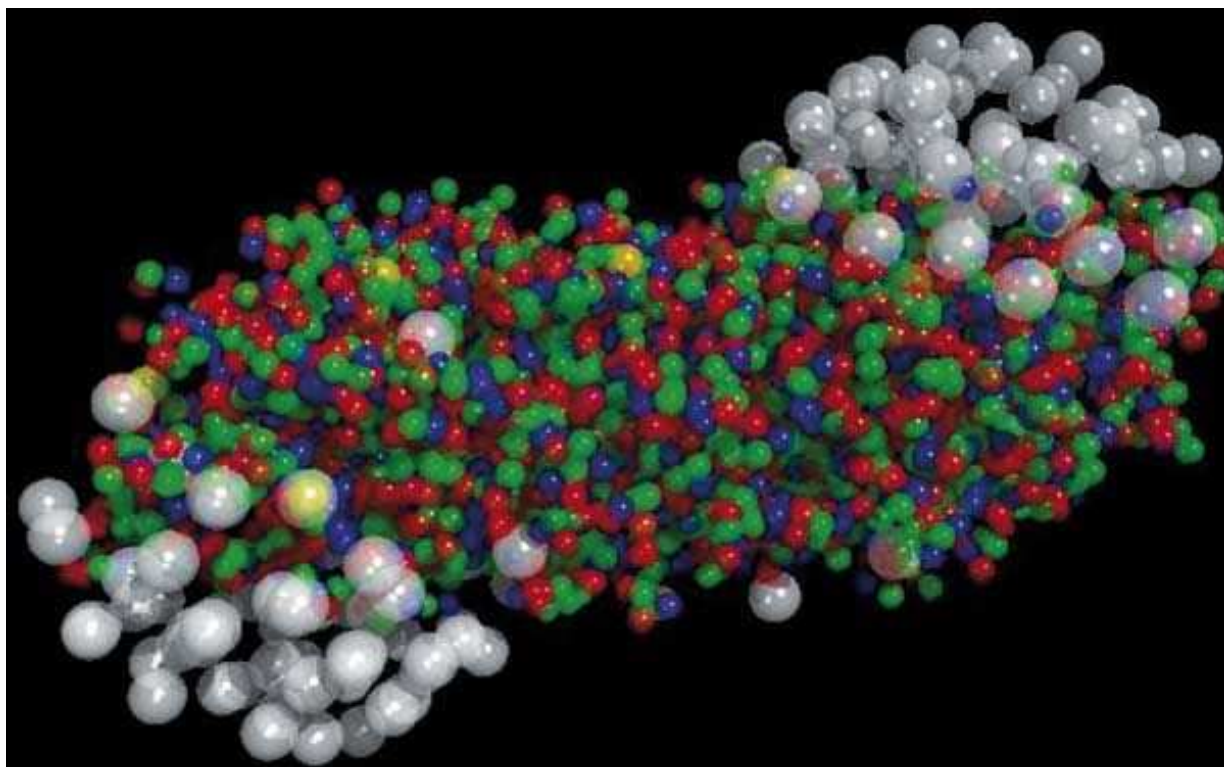


Obr. 8.4



**Kvarkový posilovač svalů** Silovou vazbu mezi kvarky můžeme přirovnat k velmi silným pružinám. Když leží posilovač svalů volně na stole, můžeme jeho držadly snadno pohybovat. Teprve když pružiny pořádně natáhneme, cítíme odpor. S kvarky je to podobné – čím jsou od sebe dál, tím silnější je jejich vazba. Jestliže pružina získá velké množství energie a natáhne se až za určitou hranici, může prasknout a z uvolněného napětí vzniknou dva

proudy kvarků ve směru původní napnuté struny, spojené opět „kousky“ struny (vpravo). Někdy se kousek gluonové struny „utrhne“ a vznikne další sprška částic (vlevo). Tyto spršky z kvarků a gluonů dostaly jméno „jety“ a brzy se staly významným nástrojem ke zkoumání jinak neviditelných kvarků uvnitř srážejících se částic. Specifické kombinace jetů a dalších částic jsou poznávacími znaky interakcí nových částic.



Obr. 8.5: počítačově vytvořený model kvark – gluonového plazmatu

## Axiony

V kvantové chromodynamice se vyskytuje problém narušení kombinace nábojové symetrie a parity v teorii kvarků, který se řeší zavedením částic zvaných **axiony**.

Axiony úzce souvisí s narušením CP symetrie v přírodě. Jde o narušení symetrie fyzikálních dějů, pokud zaměníme fyzikální zařízení za jeho zrcadlový obraz (P symetrie) a všechny částice za antičástice (C symetrie). Narušení CP symetrie bylo pozorováno při rozpadu kaonů již v roce 1964 J. Croninem a V. Fitchem. Šlo o narušení CP symetrie při slabé interakci a od té doby bylo pozorováno mnohokrát. Standardní model ovšem předpovídá, že by narušení CP symetrie mělo být pozorovatelné i při silné interakci. V tomto sektoru však nikdy potvrzeno nebylo. V roce 1977 navrhli Roberto Peccei a Helen Quinn ze Stanfordské univerzity nový druh fyzikální symetrie, která vysvětluje negativní výsledek pokusů s narušením CP symetrie v silné interakci. S touto symetrií je spojena existence částice, kterou dnes nazýváme axion.



**Roberto D. Peccei (1942)**



**Helen Rhoda Quinn (1943)**

Axion by měl mít nulový spin a interagovat kromě gravitační interakce jen slabou interakcí. Jeho hmotnost se odhaduje na přibližně  $10^{-5}$  eV. Velké množství axionů (tzv. reliktních axionů) mělo vzniknout těsně po Velkém třesku. Jejich zachycení by znamenalo otevření nového okna do minulosti našeho vesmíru. Axiony by ale měly vznikat i v nitru hvězd při rozptylu vysoce energetických fotonů na nabitých částicích (tzv. Primakovův jev).

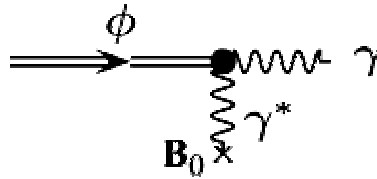


**Evgenii Maximovič Primakov (1929)**

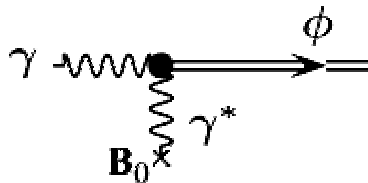
Axiony jsou žhavými kandidáty na záhadné částice temné hmoty, která tvoří 23% hmoty a energie ve vesmíru. Axiony jsou v silném magnetickém poli  $\mathbf{B}_0$  schopny dvoufotonové interakce, která může být popsána dvěma typy hustoty Lagrangeovy funkce (v jednotkách  $c = 1$ )

$$L_1 = g \Phi (\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2), \quad (8.512)$$

$$L_2 = g \Phi (\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}), \quad (8.513)$$



V obou případech vystupuje axionové pole  $\Phi$  lineárně (jde o jeden axion) a elektromagnetické pole kvadraticky (jde o dva fotony). Vazebná konstanta interakce je označena symbolem  $g$ . V prvním případě je elektromagnetická část ( $\mathbf{E}^2 - \mathbf{B}^2$ ) skalární a pole  $\Phi$  proto musí být také skalární (výsledná Lagrangeova funkce musí být skalární, jinak by chování polí záviselo na volbě souřadnicového systému). Takový axion interaguje s fotony, jejichž polarizace je kolmá k externímu magnetickému poli  $\mathbf{B}_0$ . V druhém typu interakce je elektromagnetická část interakce  $\mathbf{E} \cdot \mathbf{B}$  pseudoskalární a proto musí být axionové pole také pseudoskalární. Axion v tomto případě interaguje s fotony, jejichž polarizace je rovnoběžná s externím magnetickým polem  $\mathbf{B}_0$ . Možný je samozřejmě i inverzní proces, ve kterém se foton v přítomnosti silného magnetického pole přemění pomocí virtuálního fotonu na axion:



Axiony pravděpodobně vznikaly v období krátce po Velkém třesku (tzv. reliktní axiony). Dnes by jejich nejbližším zdrojem mělo být nitro Slunce, kde se část vysoce energetických fotonů při rozptylu na elektrických nábojích (Primakovův jev) přeměňuje na axiony. Jejich počet by měl být roven počtu slunečních neutrin. Axiony by také mohly vznikat z fotonů v extrémních magnetických polích v okolí neutronových hvězd. Existuje řada experimentů, hledajících reliktní, sluneční i další axiony. První ze slunečních experimentů BFRT byl prováděn v Brookhavenské národní laboratoři, axiony hledají dále experimenty NOMAD, SOLAR, COSME. K nejvýznamnějším



experimentům současné doby patří CAST, PVLAS, FLASH. Další experiment se od roku 1999 připravuje v LLNL.

### **Experiment CAST (Cern Axion Solar Telescope)**

Velmi zajímavý projekt na sledování slunečních axionů je umístěn od roku 2003 v CERNu. Jde o dalekohled, který by měl v silném magnetickém poli konvertovat axiony z nitra Slunce na fotony RTG záření. Většina dalekohledu vznikla z nepotřebných dílů jiných experimentů. Jako magnet byl využit již nepotřebný prototyp magnetu pro LHC. Je dlouhý 10 metrů a dosahuje magnetické indukce 9 T. Pro detekci vznikajících RTG fotonů slouží tři detektory, část detekční soustavy byla původně postavena pro vesmírný RTG dalekohled ABRIXAS. Dalekohled je umístěn na kolejnici, která umožňuje pohyb ve vodorovném směru  $\pm 40^\circ$ , naklání ve výšce je možné jen v rozsahu  $\pm 8^\circ$ . Z toho důvodu může dalekohled pozorovat Slunce jen při východu a poté až při západu Slunce. Celková pozorovací doba je tři hodiny denně. Po zbytek času se měří RTG pozadí. Dosud nebyl detekován žádný přebytek RTG záření oproti pozadí (v době, kdy je dalekohled namířen na Slunce). Detektor doposud hledal axiony do hmotnosti 0,02 eV. V současné době byla citlivost dalekohledu výrazně zvýšena, magnet byl vyplněn héliem o nízké teplotě (1,8 K) a dalekohled by měl detekovat axiony až do hmotnosti 0,8 eV. Měření v nové konfiguraci budou probíhat po celý rok 2007. Je možné, že axiony nejsou detekovány proto, že ve slunečním nitru je k jejich vytvoření potřebná vyšší energie fotonů, než je k dispozici, anebo proto, že jsou v nitru Slunce nějakými procesy opět pohlcovány.



**Obr. 8.6: CAST – CERN Axion Solar Telescope.**

### **Experiment PVLAS (Polarization of Vacuum with LASer)**

PVLAS je zatím bezkonkurenčně nejznámějším experimentem díky pozitivní detekci stočení roviny polarizovaného světla ve vakuu. Jde o italský experiment umístěný v Národní laboratoři v Legnaru, která je součástí INFN (Istituto Nazionale di Fisica Nucleare). V experimentu bylo použito lineárně polarizované světlo o vlnové délce 1 064 nm generované laserem. Světelný puls procházel metrovým magnetem o indukci 5 T, celý prostor byl chlazen kapalným héliem na 2,6 K. Za pomoci rezonátoru byla dráha světla uměle prodloužena. E. Zavattini se spolupracovníky z 44 000 průchodů světla zjistili, že světlo získalo slabě eliptickou polarizaci a vektor polarizace se stočil za jeden průchod (tedy na metrové vzdálenosti) o úhel  $(3,9 \pm 0,5) \times 10^{-12}$  rad.



**Emilio Zavattini (1927 – 2007)**

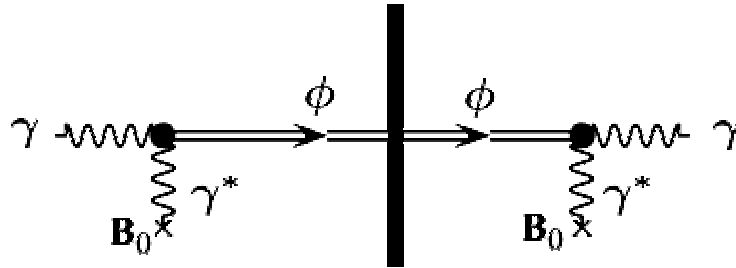
Nejpřirozenějším vysvětlením je, že se část fotonů s polarizací rovnoběžnou s externím polem  $\mathbf{B}_0$  v silném magnetickém poli přeměnila na axiony nebo jim podobné částice a tím došlo ke stočení polarizační roviny. Situace odpovídá interakci s Lagrangeovou funkcí  $L_2$  a částice zodpovědné za stočení roviny polarizace by měly být pseudoskaláry odnášející nadbytečný moment hybnosti. Zda jde skutečně o axiony nebo jiné částice musí ukázat až další experimenty. Předpovídaná hmotnost  $m$  pseudoskalárů je v rozmezí  $1 \div 1,5$  meV a vazební konstanta  $g$  vychází v rozmezí  $(1,7 \div 5) \times 10^{-6} \text{ GeV}^{-1}$ .



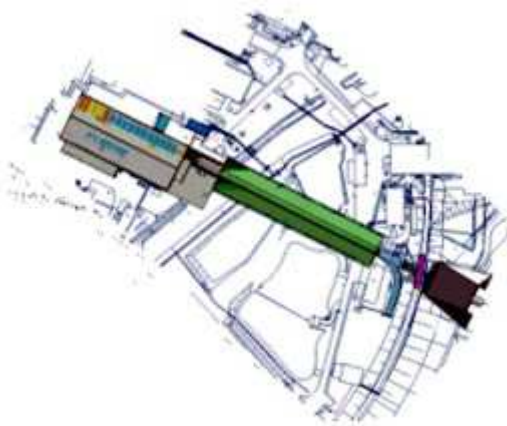
Obr. 8.7: PVLAS: Nalevo celkový pohled na experiment, napravo je žulová věž o výšce 7 metrů, ve které je umístěn kryostat (chladicí zařízení) a v horní části optická lavice.

### Experiment FLASH (Free-electron LASer in Hamburg)

Experiment FLASH připravují v DESY v německém Hamburgu. Myšlenka experimentu je velmi prostá a měla by ověřit nezávisle anomálii měřenou v experimentu PVLAS. Část fotonů z výkonného laditelného laseru na volných elektronech bude konvertována v silném magnetickém poli na axiony. Tyto axiony snadno projdou neprůhlednou překážkou (interagují jen slabě). Za stěnou budou (opět v silném magnetickém poli) některé axiony přeměněny zpět na fotony a svazek laseru částečně obnoven. Zdánlivě by tak měla část světla projít neprůhlednou deskou.



V experimentu se počítá s laserem na volných elektronech laboratoře DESY, který je laditelný od 10 eV (EUV obor) po 200 eV (měkké RTG). Za magnety bude použito 12 elektrických dipólových magnetů, každý má indukci 2,24 T a délku 1,029 m. Šest magnetů bude umístěno před překážkou (zajistí konverzi světla na axiony) a šest za překážkou (zajistí zpětnou konverzi axionů na fotony). Laser spolu s magnety se ovšem nevejde do laboratoří DESY a proto je experiment stavěn před budovou. Se zprovozněním se počítá do konce roku 2006 a pokud bude axion objeven, jeho detailní průzkum by měl probíhat na podzim 2007. Autoři považují experiment za natolik důležitý, že původní název VUV-FEL (Vacuum Ultraviolet Free-Electron Laser) byl 16. 4. 2006 změněn na FLASH (Free-electron LASer in Hamburg). Pokud bude existence axionů potvrzena, bude to znamenat veliký krok kupředu v chápání vakua.

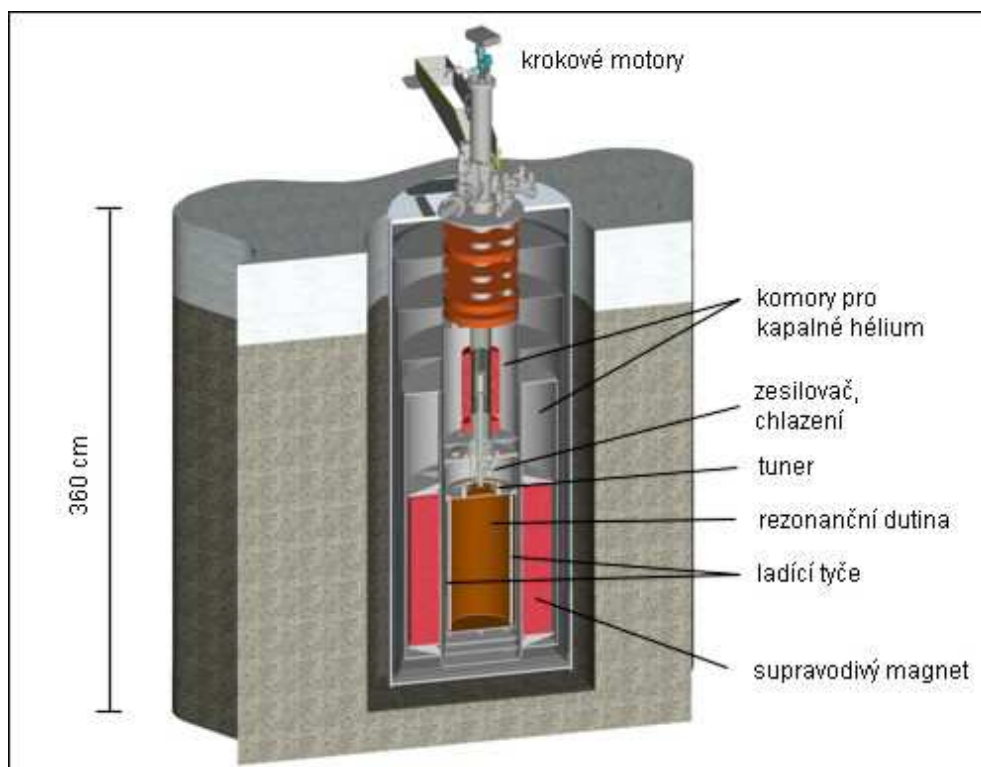


Obr. 8.8: Experiment FLASH bude postaven před vchodem do budovy DESY.

## Projekt ADMX

Axionový experiment v LLNL započal v roce 1995. Obdobně jako ostatní experimenty využívá faktu, že v silném magnetickém poli by se axiony měly konvertovat na fotony, v případě zařízení ADMX (Axion Dark Matter eXperiment) na mikrovlnné fotony.

Experimentální zařízení se skládá ze supravodivého magnetu o indukci 8 T, který má hmotnost 6 tun. Magnet je navinutý na vnějšku mědi potaženého ocelového válce. V nitru tohoto válce je rezonanční dutina s dvěma ladicími tyčemi, kterými lze pohybovat krokovými motory a měnit sledovanou frekvenci. Slabý signál axionů konvertovaných na fotony poté prochází zesilovačem.



Obr. 8.9: Schéma axionového detektoru.

## Magnet

Magnet je supravodivá cívka skládající se z 37 700 niobo-titanových závitů. Průměr jádra je 60 cm a délka magnetu 100 cm. Vlastní indukčnost magnetu je 534 H. Pole v ose magnetu dosahuje hodnoty 7,92 T, celková energie magnetického pole činí 15 MJ. Zatím největší uložené magnetické energie bylo dosaženo v Oxford Instruments před pěti lety (27 MJ).

## Rezonanční dutina

Rezonanční dutinu tvoří metr dlouhý válec kruhového průřezu o průměru 50 cm. Je vyroben z oceli a oplátován mědí. Uvnitř jsou dvě pohyblivé ladicí tyče. Elektrické pole v dutině je sledováno sondou spojenou s ultranízkošumovou elektronikou. Axiony se hledají pomalým skenováním dutiny napříč frekvenčním rozsahem měněným ladicími tyčemi. Kovové ladicí tyče zvýší rezonanční frekvenci dutiny, pokud jsou posunuty směrem k centru dutiny. Naopak dielektrické tyče posunuté do centra dutiny frekvenci sníží.

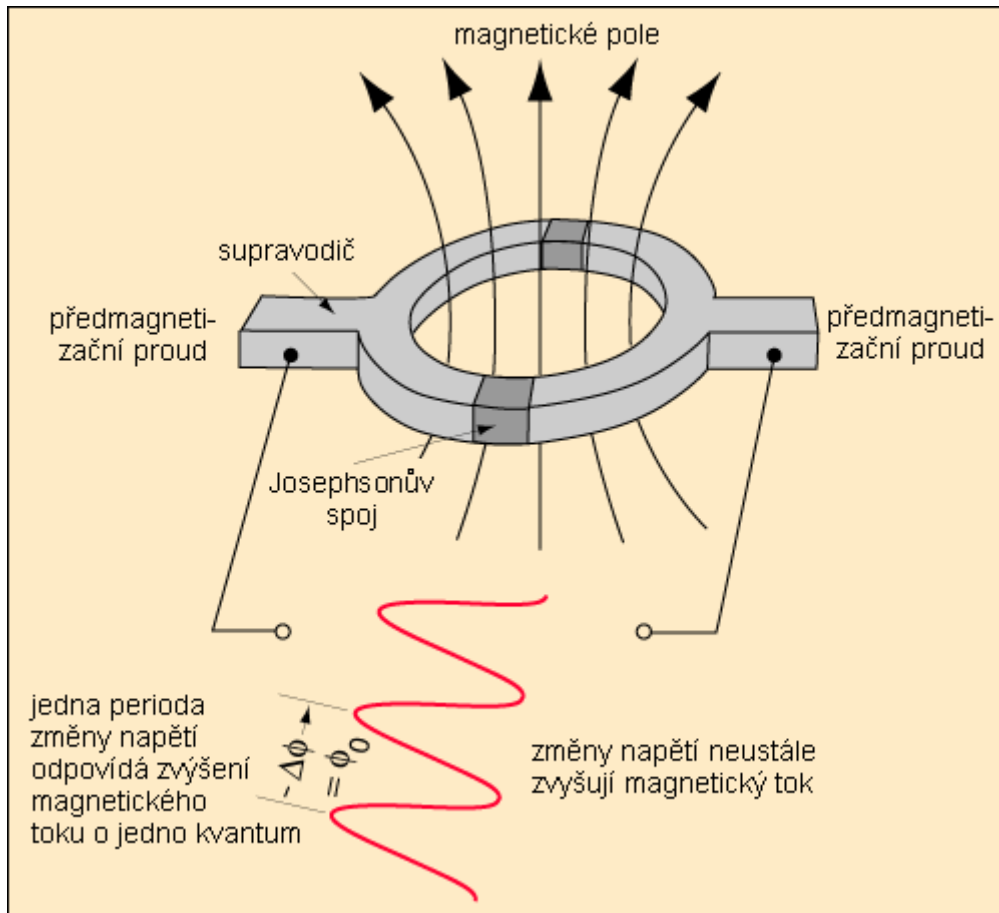


Obr. 8.10: Vlevo: pohled shora na rezonanční dutinu, jejíž průměr je 50 cm a výška 1 m. Vnitřek dutiny je potažen mědí a obsahuje dvě ladicí tyče. Vpravo: osazování horní části detektoru.

## Přijímač

Ultránízkošumový přijímač je jádrem celého experimentu. Napěťový signál z mikrovlnné dutiny je přiveden do rezonátoru, který ho převede na magnetický tok detekovatelný SQUID elektronikou. Extrémně tiché zesilovače byly vyrobeny v NRAO v polovině 90. let. Přijímač konvertuje mikrovlnný signál v šířce pásma 50 kHz kolem rezonanční frekvence dutiny nejprve na signál s centrální frekvencí 35 kHz. Elektronika poté nalezne spektrum signálu. Sledované 50 kHz pásmo v okolí rezonanční frekvence je rozděleno na 400 kanálů o šířce 125 Hz na každé straně. Pořízeno je 10 000 takových spekter pro každou rezonanční frekvenci, zprůměrováno a uloženo na harddisk spolu s dalšími experimentálními daty. Očekává se, že vlastní axionový signál by měl vytvořit pík ve spektru široký přes 6

kanálů. Dominantním signálem je samozřejmě tepelný šum rezonanční dutiny a přijímací elektroniky.



Obr. 8.11: SQUID (Superconducting QUantum Interference Device)

Zařízení konstruované v LLNL je v tuto chvíli nejcitlivějším zařízením na světě pro detekci axionů. Neoptimističtější předpovědi hovoří o možnosti detekovat až stovku axionů za sekundu. Pozitivní detekce axionů by znamenala velký pokrok v pochopení temné hmoty a přispěla významnou měrou k porozumění stavby vesmíru jako celku.

## Projekt ALPS

Dalším právě probíhajícím experimentem je projekt ALPS realizovaný v německém DESY u Hamburgu. Zdrojem světla je zde laser na volných elektronech, který se původně jmenoval FEL (Free Electron Laser) a později FLASH (Free electron LASer in Hamburg). Světlo je vedeno přes šest silných magnetů, kde by malá část měla konvertovat na axiony. V cestě světla bude neprůhledná stěna a za ní další šestice magnetů. Pokud skutečně světlo zkonvertuje na axiony,

projdou axiony stěnou a za ní bude v magnetickém poli jejich malá část opět konvertována na světlo. Samo světlo stěnou neprojde a tak by pozitivní detekce světla za stěnou byla nezávislým nepřímým potvrzením existence axionů. Experiment by měl být po mnoha průtazích a přejmenování zprovozněn pod názvem ALPS (Axion Like Particle Search).



**Obr. 8.12 Jeden z dipólových magnetů, použitých v experimentu ALPS.**



## Supersymetrie

### 1) Sjednocení elektromagnetických a slabých interakcí

#### $U(1)$ symetrie

Mějmež Diracův lagrangián

$$\mathcal{L} = i\bar{\psi}\gamma^\alpha\partial_\alpha\psi - m\bar{\psi}\psi \quad (9.1)$$

popisující částice se spinem  $1/2$  a hmotností  $m$ .

Vlnová funkce  $\psi$  je čtyřspinor,  $\bar{\psi} = \psi^\dagger\psi^0$ ,  $\gamma^\alpha$  jsou Diracovy matice  $4 \times 4$ .

Lagrangián ( 9.1 ) je invariantní vůči transformaci

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{ia}\psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = e^{-ia}\bar{\psi}, \quad a = \text{konst.} \quad (9.2)$$

Necht' nyní  $a = a(x^\alpha)$ .

Nový lagrangián bude mít tvar

$$\mathcal{L}' = \mathcal{L} - T^\beta\partial_{\alpha\beta}(x^\alpha), \quad (9.3)$$

kde

$$T^\beta = \bar{\psi}\gamma^\beta\psi, \quad (9.4)$$

a není tedy vůči transformacím

$$\psi \rightarrow \psi' = e^{ia(x^\alpha)}\psi, \quad \bar{\psi} \rightarrow \bar{\psi}' = e^{-ia(x^\alpha)}\bar{\psi}, \quad (9.5)$$

invariantní.

Jak minimálně modifikovat lagrangián  $\mathcal{L}$  aby byl vůči ( 9.5 ) invariantní, jsme si naznačili v kapitole o Diracově rovnici.

Vezmeme-li modifikovaný lagrangián ve tvaru

$$\mathcal{L}_1 = \mathcal{L} + \tilde{e}A^\alpha(x)T_\alpha(x), \quad \tilde{e} = \text{konst.} \quad (9.6)$$

a požadujeme-li, aby se při transformaci ( 9.5 ) měnily veličiny  $A^\alpha$  podle vztahu

$$A^\alpha \rightarrow A'^\alpha = A^\alpha + \frac{1}{\tilde{e}}\partial^\alpha a(x), \quad (9.7)$$

bude

$$\mathcal{L}'_1 = \mathcal{L} + \tilde{e}A^\alpha T_\alpha + \mathcal{L}_1, \quad (9.8)$$

neboť

$$T'^\alpha = T^\alpha. \quad (9.9)$$

Abychom dosáhli požadované vlastnosti lagrangiánu, zavedli jsme nové veličiny  $A^\alpha(x)$  s požadovanými transformačními vlastnostmi ( 9.7 ). Veličiny  $A^\alpha(x)$  tvoří vektorové pole a transformace ( 9.2 ), ( 9.5 ) jsou kalibračními transformacemi.

Globální kalibrační transformací je ( 9.2 ), lokální kalibrační transformací je ( 9.5 ).

Po dosazení těchto výsledků do Diracovy rovnice se ukáže, že

$$\mathcal{L}_1 = i\bar{\psi} \left[ \gamma^\alpha (\partial_\alpha - i\tilde{e}A_\alpha) \right] \psi - m\bar{\psi}\psi. \quad (9.10)$$

Z Diracovy teorie jsme již dříve rozeznali, že  $A^\alpha(x)$  je vektorový potenciál elektromagnetického pole a  $\tilde{e}$  je náboj částice.

Lagrangián ( 9.10 ) není ovšem lagrangiánem celého systému „elektron + elektromagnetické pole“.

K úplnému lagrangiánu se dospěje snadno, přidáme-li k ( 9.10 ) ještě člen s kinetickou energií (tj. člen kvadratický v  $A_\alpha$ ).

Výsledkem je vztah

$$L = \mathcal{L}_1 - \frac{1}{4} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta}, \quad (9.11)$$

Kde

$$F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha. \quad (9.12)$$

K elektromagnetickému poli jsme tudíž dospěli na základě požadavku globální symetrie, který jsme poté rozšířili o požadavek symetrie lokální.

Kalibrační transformace ( 9.5 ), ( 9.7 ) závisí na jediném parametru  $a$ , tvoří tedy jednoparametrickou abelovskou grupu  $U(1)$ .

Uvedený postup se zobecňuje na další globální a poté i lokální symetrie s cílem popsat i jiné, než elektromagnetické interakce.

### Symetrie $SU(2)$

Jako další příklad uvažujme o dubletu komplexních skalárních polí označených jako

$$\varphi = \begin{pmatrix} \varphi_u \\ \varphi_d \end{pmatrix}, \quad (9.13)$$

a lagrangián pole vezměme ve tvaru

$$\mathcal{L}^* = \partial_a \varphi^\dagger \partial^a \varphi - \frac{1}{2} \mu^2 \varphi^\dagger \varphi - \frac{1}{4} \lambda (\varphi^\dagger \varphi)^2, \quad (9.14)$$

kde  $\lambda, \mu$  jsou konstanty.

Uvedený lagrangián je invariantní vůči transformaci

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \exp\left(-\frac{i}{2} \tau^A a_A\right) \varphi. \quad (9.15)$$

Veličiny  $a_A$  ( $A = 1, 2, 3$ ) reprezentují 3 parametry, které tuto transformaci určují a  $\tau^A$  jsou 3 matice ( $2 \times 2$ ), které splňují komutační relace

$$\left[ \frac{\tau^A}{2}, \frac{\tau^B}{2} \right] = i \varepsilon^{ABC} \left( \frac{\tau^C}{2} \right), \quad (9.16)$$

kde  $\varepsilon^{ABC}$  je Levi-Civitův tenzor.

Pro obecnou matici  $\mathbf{M}$  přitom platí:

$$e^{\mathbf{M}} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\mathbf{M}^n}{n!}. \quad (9.17)$$

Transformace ( 9.15 ) tvoří reprezentaci grupy  $SU(2)$ .

Požadavek globální symetrie rozšíříme tak, že parametry  $a^A$  budou nyní funkcemi prostoročasových souřadnic  $x^\alpha$  :

$$\varphi \rightarrow \varphi' = \exp\left(-\frac{i}{2} \tau_A a^A(x^\alpha)\right) \varphi. \quad (9.18)$$

Lagrangián ( 9.14 ) vůči transformaci ( 9.18 ) invariantní není.

Invariantním však může být učiněn zavedením tří nových kalibračních polí  $A_\alpha^N(x^\beta)$ ,  $N = 1, 2, 3$ , do lagrangiánu.

Nejprve nahradíme obyčejné parciální derivace  $\partial_\alpha$  derivacemi kovariantními

$$D_\alpha = \partial_\alpha + i \frac{g}{2} \tau_N A_\alpha^N(x). \quad (9.19)$$

Poté zvolíme transformační zákon pro  $A_\alpha$  při transformaci ( 9.8 ) takový, aby výsledný lagrangián zůstal invariantním:

$$A'_\alpha = \mathbf{U} A_\alpha \mathbf{U}^{-1} - \frac{i}{g} \mathbf{U} \partial_\alpha \mathbf{U}^{-1}, \quad (9.20)$$

příčemž matice

$$A_\alpha = \frac{1}{2} \tau_A A_\alpha^A, \quad \mathbf{U} = \exp\left(-i \frac{\tau_A}{2} \alpha^A\right) = \exp(-ia). \quad (9.21)$$

Lagrangián

$$\mathcal{L}_1 = (D^\alpha \varphi)^\dagger (D^\alpha \varphi) - \frac{1}{2} \mu^2 (\varphi^\dagger \varphi) - \frac{\lambda}{4} (\varphi^\dagger \varphi)^2 \quad (9.22)$$

poté invariantním již je, nemá však ještě člen s kinetickou energií pro kalibrační pole  $A_\alpha^N(x^\beta)$ .

Nejjednodušší volbou je

$$\mathcal{L}^* = -\frac{1}{4} F_{\alpha\beta}^N F_N^{\alpha\beta}, \quad (9.23)$$

kde

$$F_{\alpha\beta}^N = \partial_\alpha A_\beta^N - \partial_\beta A_\alpha^N - g \varepsilon^{NPQ} A_{\alpha P} A_{\beta Q}. \quad (9.24)$$

V maticovém označení se zavedením

$$F_{\alpha\beta} = \frac{1}{2} \tau_A F_{\alpha\beta}^N, \quad (9.25)$$

pak bude

$$F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha + ig [A_\alpha, A_\beta]. \quad (9.26)$$

Komplexní a lokálně kalibrační lagrangián tedy je

$$L = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}^*. \quad (9.27)$$

Popisuje svět tvořený dublety hmotných skalárních polí  $(\varphi_u, \varphi_d)$ , která spolu interagují přes člen  $\lambda(\varphi^\dagger \varphi)^2$  a tripletem nehmotných kalibračních polí  $(A_\alpha^1(x), A_\alpha^2(x), A_\alpha^3(x))$ , která spolu interagují prostřednictvím posledního členu v (9.26).

Důsledkem formulace lokálně kalibračně invariantních teorií je tedy objevení se nehmotného kalibračního pole.

Pro reálný popis interakcí s krátkým dosahem je však třeba hmotného kalibračního pole.

Odpovídajícího úspěšného popisu bylo dosaženo a příslušná jev byl nazván **spontánním narušením symetrie**.

Uvažujme o neutrálním a hmotném skalárním poli  $\Phi$ , které interaguje samo se sebou a jehož lagrangián je

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial^\alpha \Phi)(\partial_\alpha \Phi) - \frac{1}{2}\mu^2 \Phi^2 - \frac{1}{4}\lambda \Phi^4. \quad (9.28)$$

Tento lagrangián je symetrický vůči reflexi

$$\Phi \rightarrow -\Phi \quad (9.29)$$

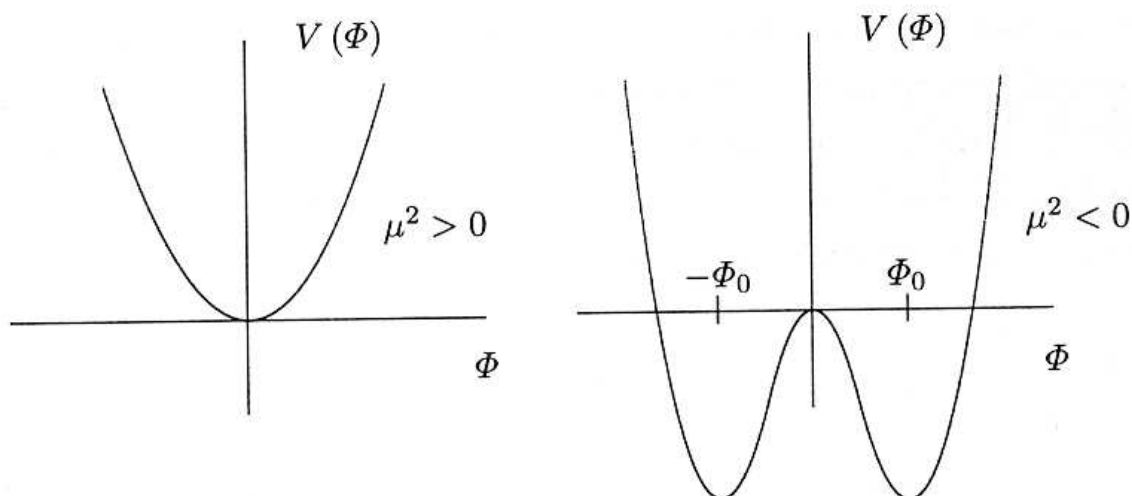
reprezentující velmi jednoduchou transformaci globální symetrie.

Různé tvary potenciálu

$$V(\Phi) = \frac{1}{2}\mu^2 \Phi^2 + \frac{1}{4}\lambda \Phi^4 \quad (9.30)$$

jsou pro případy  $\mu^2 > 0$  a  $\mu^2 < 0$  uvedeny na obr. 9.1

Obr. 9.1



V případě  $\mu^2 > 0$  existuje jen jediné minimum funkce  $V(\Phi)$ , a to v bodě  $\Phi = 0$ .

To odpovídá případu jediného stabilního, nedegenerovaného stavu.

V případě  $\mu^2 < 0$  existují dvě minima funkce  $V(\Phi)$ , a to v bodech

$$\Phi = \pm\Phi_0, \quad \left(-\frac{\mu^2}{\lambda}\right)^{1/2} = \Phi_0 > 0. \quad (9.31)$$

Za základní stav je možno vybrat vždy jen jednu z těchto dvou hodnot. Oba tyto základní vakuové stavy narušují symetrii ( 9.29 ).

Všimněme si řešení blízko jednoho stavu, řekněme pro určitost stavu  $+\Phi_0 > 0$ .

Zavedme novou veličinu

$$\Phi' = \Phi - \Phi_0. \quad (9.32)$$

Bod  $\Phi = 0$  není bodem stability, bod  $\Phi' = 0$  však ano.

Teorie vztažená k bodu  $+\Phi_0$  již není symetrická vzhledem k transformaci ( 9.29 ).

Lagrangián ( 9.28 ) přepíšeme s pomocí  $\Phi'$ :

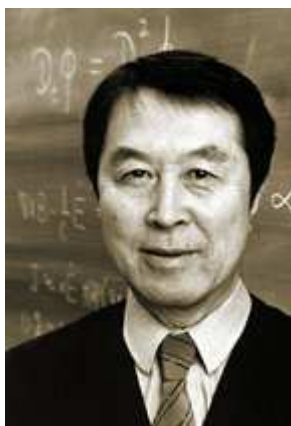
$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}(\partial^\alpha \Phi')(\partial_\alpha \Phi') + \mu^2 \Phi'^2 - \lambda \Phi_0 \Phi'^3 - \frac{1}{4} \lambda \Phi'^4. \quad (9.33)$$

Pro pole  $\Phi'$  se tedy vynořil hmotný člen  $-2\mu^2$ .

Symetrie  $\Phi' \rightarrow -\Phi'$  však již z Lagrangiánu patrná není, ačkoli stále existuje - je skrytá, nikoli však ztracená.

V obecném případě je globální symetrie spojitou grupou transformací a ne jen prostou diskretní transformací (9.29), kterou jsme v našem příkladu užili.

Jestliže je taková obecná globální symetrie spontánně narušena, objeví se částice se spinem nula a s nulovou hmotností. Nazývají se **Nambuovými-Goldstoneovými bosony**.



Yoichiro Nambu (1921)



Jeffrey Goldstone (1933)

Na semiklasické úrovni je možno vznik Nambuových-Goldstoneových bosonů demonstrovat, vyjdeme-li z lagrangiánu dvou reálných polí  $\sigma$  a  $\rho$  se vzájemnou interakcí

$$V = \frac{1}{2} \mu^2 (\sigma^2 + \rho^2) + \lambda (\sigma^2 + \rho^2), \quad \lambda > 0. \quad (9.34)$$

Nehmotné Nambuovy-Goldstoneovy bosony jsou dobře známy z fyziky pevných látek. Dojde-li např. ke spontánnímu narušení symetrie ve feromagnetu, objeví se Nambuovy-Goldstoneovy bosony ve formě **magnonů**. V sedmé kapitole jsme také viděli, že v teorii supravodivosti dochází ke Cooperovu párování, v důsledku čehož dochází k tzv. **dynamickému spontánnímu narušení symetrie**. Původ spočívá v



dynamickém jevu – druhotné síle mezi elektrony – jež dramaticky mění nejnižší energetický stav. Symetrie, která je tímto jevem narušena je kalibrační symetrie elektrodynamiky  $U(1)_{loc}$ . Kalibrační transformace symetrie  $U(1)_{loc}$  působí na pole koordinovaných Cooperových párů a dynamika teorie je invariantní vůči kalibračním transformacím  $U(1)_{loc}$ , avšak vakuový stav nikoliv. Řešení zpočátku velmi komplikovaného problému, kterak zacházet s kalibrační symetrií supravodiče, našel roku 1963 teoretik kondenzované fáze Philip Anderson. Ukázal, že v rámci kvantové elektrodynamiky si lze supravodič představit jako jistý stav vakuového stavu, jímž se pole šíří. V tomto novém vakuovém stavu je kalibrační symetrie  $U(1)_{loc}$  spontánně narušena, čehož důsledkem jsou Nambuovy-Goldstoneovy bosony s nenulovou klidovou hmotností – jakési zhmotnělé fotony. V jistém smyslu se zde foton kombinuje s nehmotnými Nambuovými-Goldstoneovými bosony, čímž efektivně získává hmotnost. V článku z roku 1963 Anderson vyslovil domněnku, že týž mechanismus by mohl fungovat v Yangových-Millsových teoriích s obecnější kalibrační symetrií  $SU(2)$ . Jedním z fyziků, kteří se jeho návrhu úspěšně chopili byl Peter Higgs, který v roce 1965 tuto teorii zveřejnil. Mechanismus, kdy je spontánně narušena symetrie lokální kalibrační grupy, čímž získají Nambuovy-Goldstoneovy bosony hmotnost, od té doby nazýváme **Higgsovým mechanismem**:



Philip Warren Anderson (1923)

Uvažujme komplexní skalární pole

$$\Phi' = \Phi_1 + i\Phi_2 \quad (9.35)$$

s lagrangiánem

$$\mathcal{L} = (\partial_\alpha \Phi^*)(\partial^\alpha \Phi) + \frac{\mu^2}{2}(\Phi^* \Phi) + \frac{\lambda}{4}(\Phi^* \Phi)^2. \quad (9.36)$$

Tento lagrangián je invariantní vzhledem ke globální transformaci  $U(1)$

$$\Phi \rightarrow e^{-ia} \Phi. \quad (9.37)$$

Budeme-li tuto symetrii kalibrovat, tj. budeme-li požadovat invarianci lagrangiánu také vůči lokální  $U(1)$  grupě:

$$\Phi \rightarrow e^{-ia(x)} \Phi(x), \quad (9.38)$$

musíme uskutečnit záměnu

$$\partial_\alpha \rightarrow \partial_\alpha + ieA_\alpha \quad (9.39)$$

zavedením kalibračního pole  $A_\alpha(x)$ , kde  $e$  značí elementární náboj. Pro  $U(1)_{\text{loc}}$  je

$$A_\alpha(x) \rightarrow A_\alpha(x) - \frac{1}{e} \partial_\alpha a(x) \quad (9.40)$$

a nyní již invariantní lagrangián má tvar

$$\mathcal{L} = (\partial_\alpha + ieA_\alpha) \Phi^* (\partial^\alpha - ieA^\alpha) \Phi - V(\Phi) - \frac{1}{4} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta}, \quad (9.41)$$

kde

$$F_{\alpha\beta} = \partial_\alpha A_\beta - \partial_\beta A_\alpha. \quad (9.42)$$

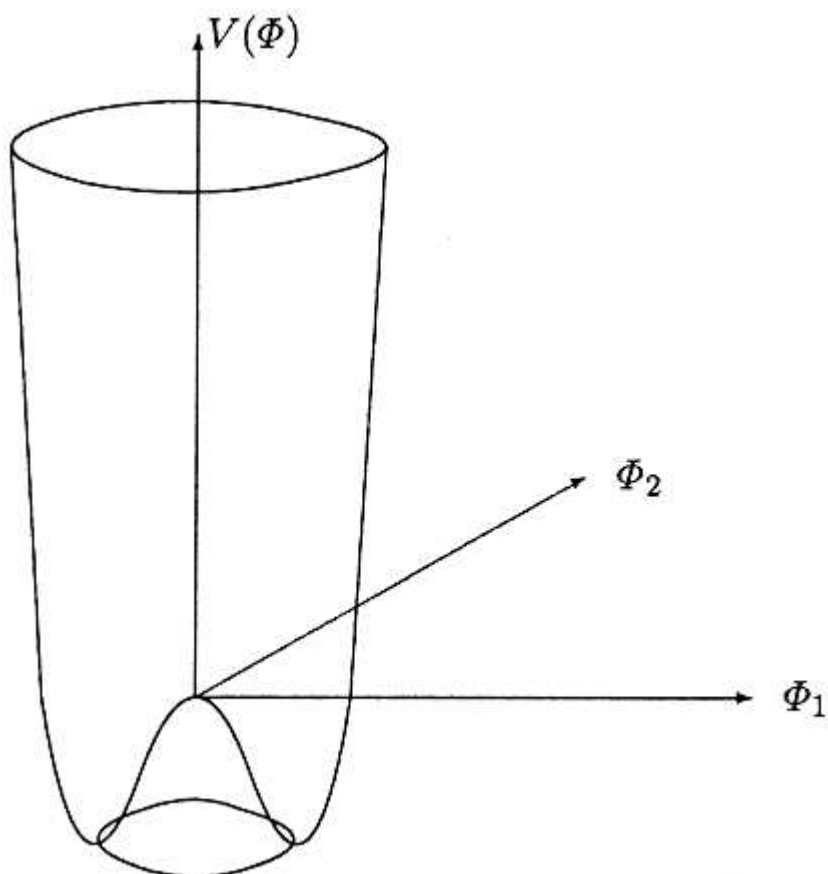
Pro  $\mu^2 > 0$  jde o skalární elektrodynamiku (fotony a masivní skalární částice).

Spontánní narušení symetrie se objeví při  $\mu^2 < 0$ .

Minima funkce  $V(|\Phi|)$  leží na kružnici  $|\Phi| = \Phi_0$

$$\Phi_0 = \left( \frac{\mu^2}{\lambda} \right)^{1/2}. \quad (9.43)$$

Obr. 9.2



Konkrétní volba minima  $\Phi = \Phi_0$  definuje základní stav a zavede se opět fyzikální pole ( 9.32 ).

Abychom obdrželi částicovou formulaci, zavedeme speciální kalibraci, v níž

$$\Phi' = h \quad (9.44)$$

kde  $h > 0$  je reálné pole.

To je možno učinit právě proto, že lagrangián ( 9.41 ) je lokálně kalibračně invarianní.

Tato operace nám nyní dovoluje dáti fyzikální interpretaci jednotlivým členům v lagrangiánu.

V uvedené speciální kalibraci má lagrangián ( 9.41 ) tvar

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & -\frac{1}{4} F_{\alpha\beta} F^{\alpha\beta} + \frac{1}{2} (\partial_\alpha h) (\partial^\alpha h) + \frac{1}{2} e^2 \Phi_0^2 A_\alpha A^\alpha + \frac{1}{2} e^2 A_\alpha A^\alpha h (2\Phi_0 + h) - \\ & - \frac{1}{2} h^2 (3\lambda^2 \Phi_0^2 + \mu^2) - \lambda \Phi_0 h^3 - \frac{1}{4} \lambda h^4 . \end{aligned} \quad (9.45)$$

Fundamentální pole zde odpovídají částicím a koeficienty v kvadratických členech odpovídají hmotnostem těchto částic.

Z lagrangiánu ( 9.45 ) můžeme po bližší analýze vyčíst, že je přítomna reálná skalární částice  $h$  s kvadrátem hmoty

$$m_h^2 = 3\lambda^2 \Phi_0^2 + \mu^2 \quad (9.46)$$

a hmotný vektorový boson  $A_n$  s hmotou

$$m_A = |e| \Phi_0 . \quad (9.47)$$

Narušení  $U(1)$  symetrie tak vede k reálnému poli  $h > 0$  (**Higgsovo pole**) a ke hmotnému poli  $A_\alpha(x)$  vektorových bosonů.

## Elektroslabé sjednocení

V šedesátých letech se ukázalo, že je možné vytvořit teorii, která by jednotně popisovala elektromagnetickou i slabou interakci.

První výrazný úspěch na této cestě byl zaznamenán při sjednocování elektromagnetické interakce a slabé interakce v tzv. **elektroslabou interakci**.

Před vznikem konstantního skalárního Higgsova pole  $H$  má tato teorie kalibrační symetrii  $SU(2) \times U(1)_{\text{loc}}$  a popisuje elektroslabé interakce částic způsobované výměnami nehmotných vektorových bosonů.

Po vzniku skalárního pole  $H$  se symetrie spontánně naruší až do podgrupy  $U(1)_{\text{loc}}$ , odpovídající část vektorových bosonů ( $W^+, W^-, Z^0$ ) získá hmotnost (řádu  $\sim e.H \approx 10^2 \text{ GeV}$ ), příslušné interakce se stanou krátkodosahovými  $\rightarrow$  slabé interakce, zatímco další pole  $A_i$  zůstává nehmotné  $\rightarrow$  elektromagnetické pole. Podařilo se tak sjednotit slabé a elektromagnetické interakce do jedné teorie, v níž vystupují jako dva různé aspekty téhož jevu.

Problém jednotného popisu elektromagnetické a slabé interakce (tzv. elektroslabé interakce) je otázkou nalezení symetrie, která obsahuje jak  $U(1)_{\text{loc}}$  tak  $SU(2)$  symetrii, tj. symetrii elektromagnetické a slabé interakce. To se podařilo Stevenu Weinbergovi, Abdusu Salamovi a Shaldonu Lee Glashowovi, kteří za teorii elektroslabé interakce obdrželi Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1979. Teorie elektroslabé interakce předpověděla, že kromě fotonu existují ještě další tři výměnné částice: intermediální bosony  $W^+, W^-, Z^0$ , které odpovídají za slabou interakci. Intermediální bosony  $W^+, W^-, Z^0$  byly objeveny v CERNu v roce 1983 ve vstřícných proton antiprotonových svazcích o energii 270 GeV. Jejich objevitelé Carlo Rubbia a Simon van der Meer obdrželi za tento objev Nobelovu cenu za fyziku pro rok 1984.

#### Tvůrci elektroslabého sjednocení



Sheldon Lee Glashow (1932)



Abdus Salam (1926)



Steven Weinberg (1933)

### Objevitelé částic W a Z



**Carlo Rubbia (1934) Simon van der Meer (1925)**

Ve skutečnosti je tedy nulová jen klidová hmotnost fotonu (s tím souvisí nekonečný dosah elektromagnetické interakce) a částice  $W^\pm$  a  $Z^0$  mají klidové hmotnosti 80 GeV a 91 GeV (s tím souvisí krátký dosah slabé interakce). Za toto tzv. **spontánní narušení symetrie**, by měly být odpovědné částice Higgsova pole, které nazýváme Higgsovy bosony. Právě energie Higgsova pole mohla být jakousi roznětkou inflační fáze raného Vesmíru. Jev analogický spontánnímu narušení symetrie známe i z běžného života. Postavíme-li jehlu na povrchu stolu na špičku, měla by podle klasické teorie spadnout tím později, čím lépe je jehla na začátku postavena svisle. Při přesné symetrii (jehla přesně na špičce) by neměla spadnout vůbec, protože nelze vybrat žádný preferovaný směr. Přesto dojde k narušení symetrie a jehla v konečném čase dopadne na povrch stolu.



**Peter Higgs (1929)**

S  $SU(2)$  symetrií slabé interakce souvisí, podobně jako v elektromagnetizmu, i určitý kvantový náboj. Nazýváme jej vůně. Základní konstanta interakce je opět s energií částic proměnná. Při energiích  $10^2$  GeV by se obě interakce měly chovat jednotně (jako jediná elektroslabá interakce). Při energiích nižších dojde k narušení symetrie a "oddělení" interakce elektromagnetické od slabé a tyto interakce se chovají různě. Ve Vesmíru měly takové energie částice v době  $10^{-10}$  s po jeho vzniku. Odpovídající teplota v té době byla  $10^{15}$  K. Weinbergovu-Salamovu-Glashowovu teorii elektroslabé interakce lze dnes již považovat za experimentálně prakticky ověřenou, protože v r.1973 byla v CERNu prokázána existence tzv. slabých "neutrálních proudů" (způsobujících reakce typu  $\nu_\mu + e \rightarrow \nu_\mu + e$ ), a v r.1983 byly ve vstřícných proton-antiprotonových svazcích (270 GeV proti 270 GeV) collideru velkého protonového synchrotronu v CERN objeveny intermediální bosony  $W^\pm, Z^0$ , jejichž hmotnosti ( $m_W \cong 82$  GeV,  $m_Z \cong 93$  GeV) i způsoby rozpadu velmi dobře souhlasí s předpovědí Weinbergova-Salamova-Glashowova modelu. Konečně, v roce 2012 byla na Large Hadron Colideru v ženevské laboratoři CERN definitivně potvrzena existence Higgsova bosonu o energii 126 GeV.

### $SU(3)$ symetrie

Všechny třírozměrné unitární unimodulární matice realizují grupu  $SU(3)$ .

Každou z nich lze zapsat ve tvaru

$$U = e^{iH}, \quad (9.48)$$

kde matice  $H$  vyhovuje požadavkům

$$H^\dagger = H, \quad \text{Tr } H = 0. \quad (9.49)$$

Existuje právě 8 lineárně nezávislých hermitovských matic  $3 \times 3$  s nulovou stopou.

Lze za ně zvolit např. následující tzv. **Gell-Mannovy** matice:

$$\begin{aligned}
\lambda_j &\equiv \begin{pmatrix} \sigma_j & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, & j=1, 2, 3, \\
\lambda_4 &\equiv \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, & \lambda_5 \equiv \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & -i \\ \cdot & \cdot & \cdot \\ 1 & \cdot & \cdot \end{pmatrix}, \\
\lambda_6 &\equiv \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & 1 \\ \cdot & 1 & \cdot \end{pmatrix}, & \lambda_7 \equiv \begin{pmatrix} \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & -1 \\ \cdot & i & \cdot \end{pmatrix}, \\
\lambda_8 &\equiv \begin{pmatrix} 1 & \cdot & \cdot \\ \cdot & 1 & \cdot \\ \cdot & \cdot & -2 \end{pmatrix}.
\end{aligned} \tag{9.50}$$

Tyto matice evidentně vyhovují požadavkům

$$\begin{aligned}
\lambda_a^\dagger &= \lambda_a, \\
\text{Tr } \lambda_a &= 0, \quad a=1, \dots, 8.
\end{aligned} \tag{9.51}$$

Ponecháme čtenáři jako jednoduché cvičení, aby dokázal, že také platí

$$\text{Tr } \lambda_a \lambda_b = 2\delta_{ab}, \quad a, b=1, \dots, 8 \tag{9.52}$$

a že z posledních dvou relací vyplývá lineární nezávislost všech osmi matic  $\lambda_a$ , tj, že libovolnou třírozměrnou unitární unimodulární matici lze jednoznačně určit pomocí osmi reálných parametrů  $\{\alpha_a, a=1, \dots, 8\}$  tak, že

$$\mathbf{U}(\alpha) = \exp \left\{ i \sum_{a=1}^8 \alpha_a t_a \right\}, \tag{9.53}$$

kde



$$t_a = \frac{1}{2} \lambda_a . \quad (9.54)$$

Přímým výpočtem se lze snadno přesvědčit, že platí realce

$$[\lambda_a, \lambda_b] = 2i \sum_{c=1}^8 f_{abc} \lambda_c , \quad (9.55)$$

$$\{\lambda_a, \lambda_b\} = \frac{4}{3} \delta_{ab} + 2 \sum_{c=1}^8 d_{abc} \lambda_c ,$$

kde koeficienty  $f_{abc}$ , resp.  $d_{abc}$  jsou antisymetrické, resp. symetrické vůči vzájemné záměně libovolných dvou indexů a přitom všechny nenulové. Jsou jednoznačně specifikovány následujícími výrazy:

$$f_{123} = 1 ,$$

$$f_{147} = f_{246} = f_{257} = f_{345} = f_{516} = f_{637} = \frac{1}{2} , \quad (9.56)$$

$$f_{458} = f_{678} = \frac{\sqrt{3}}{2} ,$$

$$d_{118} = d_{228} = d_{338} = -d_{888} = \frac{1}{\sqrt{3}} ,$$

$$d_{146} = d_{157} = d_{256} = d_{344} = d_{355} = \frac{1}{2} , \quad (9.57)$$

$$d_{247} = d_{366} = d_{377} = -\frac{1}{2} ,$$

$$d_{448} = d_{558} = d_{668} = d_{778} = -\frac{1}{2\sqrt{3}} .$$

Povšimněme si, že relace ( 9.55 ) lze ekvivalentně vyjádřit též ve tvaru

$$\lambda_a, \lambda_b = \frac{2}{3} \delta_{ab} + \sum_{c=1}^8 (d_{abc} + if_{abc}) \lambda_c, \quad (9.58)$$

což je bezprostředním zobecněním dobře známé relace mezi Pauliho maticemi

$$\sigma_j, \sigma_k = \delta_{jk} + i \sum_{l=1}^3 \varepsilon_{jkl} \sigma_l. \quad (9.59)$$

Díky rovnostem ( 9.51 ), ( 9.52 ) z těchto relací také okamžitě plynou rovnosti

$$\begin{aligned} \text{Tr} \lambda_a [\lambda_b, \lambda_b] &= 4if_{abc}, \\ \text{Tr} \lambda_a [\lambda_b, \lambda_b] &= 4d_{abc}, \end{aligned} \quad (9.60)$$

tj.

$$\text{Tr} \lambda_a \lambda_b \lambda_b = 2(d_{abc} + if_{abc}). \quad (9.61)$$

Z formulí ( 9.53 ), ( 9.55 ) víme, že koeficienty  $f_{abc}$  představují strukturní koeficienty osmiparametrické Lieovy grupy  $SU(3)$ , a tedy operátory  $\hat{\mathbf{T}}_a$  odpovídající generátorům této grupy musí v jakékoliv její reprezentaci vyhovovat komutačním relacím

$$[\hat{\mathbf{T}}_a, \hat{\mathbf{T}}_b] = i \sum_{c=1}^8 f_{abc} \hat{\mathbf{T}}_c. \quad (9.62)$$

Z vyjádření ( 9.56 ) je zřejmé, že

$$\forall a \neq j = 1, 2, 3: \quad [\hat{\mathbf{T}}_8, \hat{\mathbf{T}}_j] = 0 \wedge [\hat{\mathbf{T}}_8, \hat{\mathbf{T}}_a] \neq 0 \quad (9.63)$$

a přitom

$$\forall j, k = 1, 2, 3: \quad [\hat{\mathbf{T}}_j, \hat{\mathbf{T}}_k] = i \sum_{c=1}^3 \varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{T}}_l. \quad (9.64)$$

Odtud okamžitě vidíme, že

- 1) rank  $SU(3)$  je roven dvěma,
- 2) operátory  $\hat{\mathbf{T}}_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  realizují generátory  $SU(2) \subset SU(3)$ ,
- 3) bázi prostoru, na kterém je realizována libovolná reprezentace algebry  $SU(3)$ , lze vždy zvolit tak, aby ji tvořily společné vlastní vektory operátorů

$$\hat{\mathbf{T}}_3, \quad \hat{\mathbf{T}}^2 \equiv \sum_{j=1}^3 \hat{\mathbf{T}}_j^2 \quad \text{a} \quad \hat{y} = \frac{2}{\sqrt{3}} \hat{\mathbf{T}}_8. \quad (9.65)$$

Výše uvedenou  $SU(2) \subset SU(3)$  budeme pro určitost nazývat **izospinorovou podgrupou**. Pro další je užitečné specifikovat ještě jiné dvě podgrupy  $SU(2)$  grupy  $SU(3)$ .

K tomu nejprve definujme operátory

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{U}}_1 &\equiv \hat{\mathbf{T}}_6, & \hat{\mathbf{U}}_2 &\equiv \hat{\mathbf{T}}_7, & \hat{\mathbf{U}}_3 &\equiv \frac{1}{2}(-\hat{\mathbf{T}}_3 + \sqrt{3} \hat{\mathbf{T}}_8), \\ \hat{\mathbf{V}}_1 &\equiv \hat{\mathbf{T}}_4, & \hat{\mathbf{V}}_2 &\equiv \hat{\mathbf{T}}_5, & \hat{\mathbf{V}}_3 &\equiv \frac{1}{2}(\hat{\mathbf{T}}_3 + \sqrt{3} \hat{\mathbf{T}}_8). \end{aligned} \quad (9.66)$$

Snadno se lze přesvědčit, že komutační relace (9.62) zůstanou v platnosti jak při záměně  $\hat{\mathbf{T}} \rightarrow \hat{\mathbf{U}}$ , tak po záměně  $\hat{\mathbf{T}} \rightarrow \hat{\mathbf{V}}$ , a tedy také operátory  $\hat{\mathbf{U}}_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  realizují generátory nějaké  $SU(2) \subset SU(3)$  a totéž platí i o operátorech  $\hat{\mathbf{V}}_j$ .

Právě specifikovanou  $SU(2)$  budeme nazývat  $U$ -spinovou, resp.  $V$ -spinovou podgrupou.

Z definice (9.66) vidíme, že

$$\hat{\mathbf{T}}_3 = \hat{\mathbf{V}}_3 - \hat{\mathbf{U}}_3. \quad (9.67)$$

Zavedme v trojrozměrném Hilbertově prostoru ( $\equiv U^3$ ) ortonormální bázi tvořenou vektory  $|^j\rangle$ , ( $j = 1, 2, 3$ ) a definujme operátory  $\hat{t}_a$ , ( $a = 1, \dots, 8$ ) tak, že

$$\hat{t}_a|^j\rangle \equiv \sum_{k=1}^3 [t_a]_{(k,j)}|^k\rangle, \quad (9.68)$$

Kde na pravé straně vystupují elementy matice (9.54). Libovolný vektor  $|\psi\rangle \in U^3$  lze zapsat ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^3 \psi^j|^j\rangle, \quad (9.69)$$

kde

$$\psi^j \equiv \langle^j|\psi\rangle, \quad (9.70)$$

a tedy

$$\hat{t}_a|\psi\rangle = \sum_{j=1}^3 \psi^j \hat{t}_a|^j\rangle = \sum_{j,k=1}^3 \psi^j [t_a]_{(k,j)}|^j\rangle \equiv \sum_{j=1}^3 \psi'^j|^j\rangle, \quad (9.71)$$

tj. transformaci

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle \equiv \hat{t}_a|\psi\rangle \quad (9.72)$$

můžeme ekvivalentně vyjádřit jako

$$\psi^j \rightarrow \psi'^j \equiv \sum_{k=1}^3 [t_a]_{(k,j)} \psi^k. \quad (9.73)$$

Definice ( 9.68 ) automaticky zaručuje, že operátory  $\hat{\mathbf{t}}_a$  vyhovují komutačním relacím

$$[\hat{\mathbf{t}}_a, \hat{\mathbf{t}}_b] = i \sum_{c=1}^8 f_{abc} \hat{\mathbf{t}}_c, \quad (9.74)$$

a tedy realizují 3-rozměrnou reprezentaci algebry  $SU(3)$ , která se ve fyzikální literatuře obvykle označuje symbolem  $\{\mathbf{3}\}$ .

Z uvedené definice také okamžitě vidíme, že pro každý operátor

$$\hat{U}(\alpha) \equiv \exp\left(i \sum_{\alpha=1}^8 \alpha_a \hat{\mathbf{t}}_a\right) \quad (9.75)$$

platí

$$\hat{U}(\alpha) |^j\rangle = \sum_{k=1}^3 \mathbf{U}_{(k,j)}(\alpha) |^k\rangle, \quad (9.76)$$

kde na pravé straně vystupují elementy matice ( 9.53 ).

Přítom transformaci

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle \equiv \hat{U}(\alpha) |\psi\rangle \quad (9.77)$$

můžeme ekvivalentně vyjádřit jako

$$\psi^j \rightarrow \psi'^j \equiv \sum_{k=1}^3 \hat{U}_{(k,j)}(\alpha) \psi^k. \quad (9.78)$$

Operátory ( 9.75 ) realizují ireducibilní reprezentaci  $\{\mathbf{3}\}$  grupy  $SU(3)$ . V souladu s vžitou konvencí užíváme stejného symbolu k označení reprezentace Lieovy grupy a odpovídající reprezentace algebry jejích generátorů.

Uvažujme nyní devítirozměrný Hilbertův prostor

$$U^{(3^2, 3^0)} \equiv U^3 \otimes U^3. \quad (9.79)$$

Je zřejmé, že operátory

$$\hat{U}^{(3^2, 3^0)}(\alpha) \equiv \hat{U}(\alpha) \otimes \hat{U}(\alpha) \quad (9.80)$$

na něm realizují reprezentaci

$$\{\mathbf{3}\} \otimes \{\mathbf{3}\} \quad (9.81)$$

grupy  $SU(3)$ .

Vzhledem k tomu, že vektory

$$|j_1 j_2\rangle \equiv |j_1\rangle |j_2\rangle, \quad j_1, j_2 = 1, 2, 3 \quad (9.82)$$

tvorí ortonormální bázi uvažovaného prostoru, můžeme jich využít k definici „operátoru transpozice“  $\hat{\mathbf{P}}_{12}$  tak, že požadujeme, aby

$$\hat{\mathbf{P}}_{12} |j_1 j_2\rangle = |j_2 j_1\rangle, \quad \forall j_1, j_2 = 1, 2, 3. \quad (9.83)$$

Z definice (9.80) pak okamžitě plynou relace

$$\left[ \hat{\mathbf{P}}_{12}, \hat{U}^{(3^2, 3^0)}(\alpha) \right] = \left[ \hat{\mathbf{S}}, \hat{U}^{(3^2, 3^0)}(\alpha) \right] = \left[ \hat{\mathbf{A}}, \hat{U}^{(3^2, 3^0)}(\alpha) \right] = 0, \quad (9.84)$$

kde

$$\hat{\mathbf{S}} \equiv \frac{1}{2}(1 + \hat{\mathbf{P}}_{12}), \quad \hat{\mathbf{A}} \equiv \frac{1}{2}(1 - \hat{\mathbf{P}}_{12}). \quad (9.85)$$

Uvážíme-li, že operátor transpozice je unitární a že jeho kvadrát je operátorem identity, vidíme, že platí

$$\hat{\mathbf{P}}_{12}^\dagger = \hat{\mathbf{P}}_{12}, \quad (\hat{\mathbf{P}}_{12})^2 = 1, \quad (9.86)$$

a tedy také

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}}^\dagger &= \hat{\mathbf{S}}^2 = \hat{\mathbf{S}}, \\ \hat{\mathbf{A}}^\dagger &= \hat{\mathbf{A}}^2 = \hat{\mathbf{A}}, \end{aligned} \quad (9.87)$$

tj. operátory  $\hat{\mathbf{S}}, \hat{\mathbf{A}}$  jsou projekční.

Navíc z jejich definice a z druhé relace ( 9.86 ) víme, že

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{A}} &= 1, \\ \hat{\mathbf{S}} \cdot \hat{\mathbf{A}} &= 0. \end{aligned} \quad (9.88)$$

Označíme-li podprostor, na který projektuje  $\hat{\mathbf{S}}$ , resp.  $\hat{\mathbf{A}}$  symbolem  $\mathbf{H}^{(2,0)}$ , resp.  $\mathbf{H}^{(0,1)}$ , potom poslední dvě relace říkají, že  $\mathbf{H}^{(0,1)}$  je ortonormálním doplňkem podprostoru  $\mathbf{H}^{(2,0)}$ , Uvažovaný Hilbertův prostor tak můžeme vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{U}^{(3^2, 3^0)} \equiv \mathbf{H}^{(2,0)} \oplus \mathbf{H}^{(0,1)} \quad (9.89)$$

a komutační relace ( 9.84 ) vyjadřují, že podprostor  $\mathbf{H}^{(2,0)}$  redukuje všechny operátory  $\hat{\mathbf{U}}^{(3^2, 3^0)}(\alpha)$ , a tedy reprezentace ( 9.81 ) je úplně reducibilní.

Z formule ( 9.88 ) víme, že

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^2, 3^0)}(\alpha) = (\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{A}}) \hat{\mathbf{U}}^{(3^2, 3^0)}(\alpha) (\hat{\mathbf{S}} + \hat{\mathbf{A}}), \quad (9.90)$$

odkud díky relacím ( 9.84 ), ( 9.88 ) okamžitě dostáváme odpovídající rozklad operátorů ( 9.80 ):

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^2, 3^0)}(\alpha) \equiv \hat{\mathbf{U}}^{(2,0)}(\alpha) \oplus \hat{\mathbf{U}}^{(0,1)}(\alpha), \quad (9.91)$$

kde

$$\begin{aligned}\hat{U}^{(2,0)}(\alpha) &\equiv \hat{S}\hat{U}^{(3^2,3^0)}(\alpha)\hat{S}, \\ \hat{U}^{(0,1)}(\alpha) &\equiv \hat{A}\hat{U}^{(3^2,3^0)}(\alpha)\hat{A}.\end{aligned}\tag{9.92}$$

Přitom lze ukázat, že reprezentace grupy  $SU(3)$  realizovaná operátory  $\hat{U}^{(2,0)}(\alpha)$  na prostoru  $\mathbf{H}^{(2,0)}$  je již ireducibilní.

Totéž platí o reprezentaci realizované operátory  $\hat{U}^{(0,1)}(\alpha)$  na prostoru  $\mathbf{H}^{(0,1)}$ .

Zavedme vektory  $|j_1j_2;[2,0]\rangle$  a  $|j_1j_2;[0,1]\rangle$  tak, že

$$\begin{aligned}|j_1j_2;[2,0]\rangle &\equiv \hat{S}|j_1j_2\rangle = |j_1j_2\rangle, \\ |j_1j_2;[2,0]\rangle &\equiv \sqrt{2}\hat{S}|j_1j_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|j_1j_2\rangle + |j_2j_1\rangle\right], \quad \text{pro } j_1 \neq j_2, \\ |j_1j_2;[0,1]\rangle &\equiv \sqrt{2}\hat{A}|j_1j_2\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|j_1j_2\rangle - |j_2j_1\rangle\right].\end{aligned}\tag{9.93}$$

Přitom z jejich definice vidíme, že šestice vektorů  $|j_1j_2;[2,0]\rangle$ ,  $j_1 \leq j_2$  tvoří ortonormální bázi prostoru  $\mathbf{H}^{(2,0)}$  a trojice vektorů  $|j_1j_2;[2,0]\rangle$ ,

$j_1 < j_2$  tvoří ortonormální bázi prostoru  $\mathbf{H}^{(0,1)}$ .

První z výše uvedených ireducibilních reprezentací je tedy šestirozměrná a druhá je třírozměrná. Ve fyzikální literatuře se k jejich označení užívá symbolu  $\{\mathbf{6}\}$ , resp.  $\{\bar{\mathbf{3}}\}$ .

Rozklad reprezentace (9.81) na reprezentace ireducibilní zapisujeme ve tvaru

$$\{\mathbf{3}\} \otimes \{\mathbf{3}\} = \{\mathbf{6}\} \oplus \{\bar{\mathbf{3}}\}.\tag{9.94}$$



Proužek u posledního symbolu zdůrazňuje, že třírozměrná reprezentace vystupující na pravé straně relace ( 9.94 ) není ekvivalentní s třírozměrnými reprezentacemi, jejichž symboly figurují na straně levé. Nepřehlédněme, že zatímco každá konečněrozměrná ireducibilní reprezentace grupy  $SU(2)$  je svým rozměrem určena (až na ekvivalenci) jednoznačně, v případě grupy  $SU(3)$  již tomu tak není.

Každý vektor  $|\psi\rangle \in \mathbf{U}^{(3^2,3^0)}$  lze samozřejmě vyjádřit ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, j_2=1}^3 \psi^{j_1 j_2} |j_1 j_2\rangle. \quad (9.95)$$

V obecném případě může mít takovýto vektor nenulovou projekci jak do podprostoru  $\mathbf{H}^{(2,0)}$ , tak do podprostoru  $\mathbf{H}^{(0,1)}$ . Je zřejmé, že

$$|\psi\rangle \in \mathbf{H}^{(2,0)} \quad (9.96)$$

právě tehdy, když pro všechny koeficienty v rozvoji ( 9.95 ) platí

$$\psi^{j_1 j_2} = \psi^{j_2 j_1}. \quad (9.97)$$

Obdobně

$$|\psi\rangle \in \mathbf{H}^{(0,1)} \Leftrightarrow \psi^{j_1 j_2} = -\psi^{j_2 j_1}. \quad (9.98)$$

Postupem, který nás přivedl k formuli ( 9.78 ), pak můžeme bez potíží nalézt tvar matic odpovídajících vyjádření operátorů  $\hat{U}^{(2,0)}(\alpha)$  a  $\hat{U}^{(0,1)}(\alpha)$  při výše naznačené volbě bází příslušných prostorů.

Je instruktivní provést tuto konstrukci explicitně zejména v případě reprezentace  $\{\bar{\mathbf{3}}\}$ .

K tomu nejprve přečíslujeme výše uvedené vektory báze tak, že

$$|j\rangle \equiv \frac{1}{2} \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon_{jkl} |^{kl}; [0,1]\rangle, \quad j=1,2,3. \quad (9.99)$$

Inverzí tohoto vztahu dostáváme

$$|^{j_1 j_2}; [0,1]\rangle = \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{j j_1 j_2} |j\rangle, \quad (9.100)$$

a tedy každý vektor z podprostoru  $\mathbf{H}^{(0,1)}$  lze zapsat ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, j_2=1}^3 \psi^{j_1 j_2} |^{j_1 j_2}; [0,1]\rangle = \sum_{j, j_1, j_2=1}^3 \varepsilon_{j, j_1, j_2} \psi^{j_1 j_2} |j\rangle, \quad (9.101)$$

tj.

$$|\psi\rangle = \sum_{j=1}^3 \psi_j |j\rangle, \quad (9.102)$$

kde

$$\psi_j = \sum_{k,l=1}^3 \varepsilon_{jkl} \psi^{kl} \quad (9.103)$$

Díky antisymetrii ( 9.98 ) lze tento vztah invertovat, tj. lze ho ekvivalentně vyjádřit ve tvaru

$$\psi^{kl} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^3 \varepsilon_{jkl} \psi_j. \quad (9.104)$$

Pro každý vektor  $|\psi\rangle \in \mathbf{U}^{(3^2, 3^0)}$  můžeme transformaci

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle \equiv \hat{U}^{(3^2,3^0)}(\alpha)|\psi\rangle \quad (9.105)$$

ekvivalentně vyjádřit jako transformaci koeficientů vystupujících v rozvoji ( 9.95 )

$$\psi^{j_1 j_2} \rightarrow \psi'^{j_1 j_2} = \sum_{k_1, k_2=1}^3 \psi^{j_1 j_2} U_{(j_1, k_1)}(\alpha) U_{(j_2, k_2)}(\alpha) \psi^{k_1 k_2} . \quad (9.106)$$

Speciálně pro  $|\psi\rangle \in \mathbf{H}^{(0,1)} \subset \mathbf{U}^{(3^2,3^0)}$  pak transformaci

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle \equiv \hat{U}^{(3^2,3^0)}(\alpha)|\psi\rangle = \hat{U}^{(0,1)}(\alpha)|\psi\rangle \quad (9.107)$$

odpovídá

$$\begin{aligned} \psi_j \rightarrow \psi'_j &= \sum_{j_1, j_2=1}^3 \varepsilon_{j j_2 j_2} \psi'^{j_1 j_2} = \sum_{j_1, j_2, k_1, k_2=1}^3 \varepsilon_{j j_1 j_2} U_{(j_1, k_1)}(\alpha) U_{(j_2, k_2)}(\alpha) \psi^{k_1 k_2} = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{j_1, j_2, k_1, k_2, k=1}^3 \varepsilon_{j j_1 j_2} U_{(j_1, k_1)}(\alpha) U_{(j_2, k_2)}(\alpha) \varepsilon_{k k_1 k_2} \psi_k , \end{aligned} \quad (9.108)$$

tj.

$$\psi'_j = \sum_{k=1}^3 \bar{U}_{(j, k)}(\alpha) \psi_k , \quad (9.109)$$

kde

$$\bar{U}_{(j, k)}(\alpha) \equiv \frac{1}{2} \sum_{j_1, j_2, k_1, k_2=1}^3 \varepsilon_{j j_1 j_2} \varepsilon_{k k_1 k_2} U_{(j_1, k_1)}(\alpha) U_{(j_2, k_2)}(\alpha) . \quad (9.110)$$

Právě nalezený výsledek se stane transparentnějším, zapíšeme-li matici s těmito elementy ve tvaru

$$\bar{U}(\alpha) = \exp\left(i \sum_{a=1}^8 \alpha_a \bar{\mathbf{t}}_a\right). \quad (9.111)$$

Dosadíme-li do pravé strany formule ( 9.111 ) vyjádření ( 9.53 ) zjistíme, že do členů prvního řádu v  $\alpha_a$  musí platit

$$\begin{aligned} \delta_{jk} + i \sum_{a=1}^8 \alpha_a [\bar{\mathbf{t}}_a]_{(j,k)} &= \frac{1}{2} \sum_{j_1, j_2, k_1, k_2=1}^3 \varepsilon_{jj_1 j_2} \varepsilon_{kk_1 k_2} \times \\ &\times \left[ \delta_{j_1 k_1} + i \sum_{a=1}^8 \alpha_a [\mathbf{t}_a]_{(j_1, k_1)} \right] \left[ \delta_{j_2 k_2} + i \sum_{b=1}^8 \alpha_b [\mathbf{t}_b]_{(j_2, k_2)} \right] \end{aligned} \quad (9.112)$$

odkud po jednoduchých úpravách zjistíme, že

$$[\bar{\mathbf{t}}_a]_{(j,k)} = -[\mathbf{t}_a]_{(k,j)}. \quad (9.113)$$

Tedy  $3 \times 3$  matice  $\bar{\mathbf{t}}_a$ , odpovídající generátorům grupy  $SU(3)$  v reprezentaci  $\{\bar{\mathbf{3}}\}$  souvisejí s maticemi ( 9.54 ), odpovídajícími generátorům této grupy v reprezentaci  $\{\mathbf{3}\}$  vztahem

$$\bar{\mathbf{t}}_a = -\mathbf{t}_a^T. \quad (9.114)$$

Odtud okamžitě vidíme, že mezi maticemi ( 9.53 ) a ( 9.111 ) přiřazenými témuž elementu grupy  $SU(3)$  v těchto dvou reprezentacích platí vztah

$$\bar{U}(\alpha) = [\mathbf{U}^T(\alpha)]^{-1}, \quad (9.115)$$

tj. reprezentace  $\{\bar{\mathbf{3}}\}$  je kontragradientní k reprezentaci  $\{\mathbf{3}\}$ .

Snadno se přesvědčíme, že tyto dvě trojrozměrné ireducibilní reprezentace nejsou navzájem ekvivalentní.

Stačí si uvědomit, že pokud by existovala nesingulární matice  $\mathbf{B}$ :

$$\forall \mathbf{U}(\alpha) \in SU(3): \quad \mathbf{B}\mathbf{U}(\alpha)\mathbf{B}^{-1} = \bar{\mathbf{U}}(\alpha), \quad (9.116)$$

potom by platilo

$$\forall a = 1, \dots, 8: \quad \mathbf{B}\mathbf{t}_a\mathbf{B}^{-1} = \bar{\mathbf{t}}_a. \quad (9.117)$$

Z vyjádření ( 9.114 ), ( 9.54 ) vidíme, že poslední rovnost mj. vyžaduje, aby

$$\det \lambda_a = \det \mathbf{B}\lambda_a\mathbf{B}^{-1} = \det(-\lambda_a^T) = \det(-\lambda_a). \quad (9.118)$$

Z explicitního vyjádření ( 9.50 ) však vidíme, že

$$\det \lambda_8 = -\frac{2}{3\sqrt{3}} = -\det(-\lambda_a), \quad (9.119)$$

a tedy podobnostní transformace ( 9.116 ) jistě neexistuje.

Ponecháme čtenáři jako jednoduché cvičení, aby se přesvědčil, že platí

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{U}}^{(0,1)}(\alpha)|_j\rangle &= \sum_{k=1}^3 \bar{\mathbf{U}}_{(k,j)}(\alpha)|_k\rangle, \\ \hat{\mathbf{t}}|_j\rangle &\equiv \sum_{k=1}^3 [\mathbf{t}_a]_{(k,j)}|_k\rangle, \end{aligned} \quad (9.120)$$

kde  $\hat{\mathbf{t}}_a$  jsou operátory odpovídající v uvažované reprezentaci generátorům  $SU(3)$ .

Uvažujme nyní devítirozměrný Hilbertův prostor (izomorfní s prostorem ( 9.79 ))

$$\mathbf{U}^{(3^1,3^1)} \equiv U^3 \otimes \bar{U}^3, \quad (9.121)$$

kde

$$\bar{U}^3 \equiv \mathbf{H}^{(0,1)}. \quad (9.122)$$

Je zřejmé, že operátory

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^1,3^1)}(\alpha) \equiv \hat{\mathbf{U}}(\alpha) \otimes \hat{\bar{\mathbf{U}}}(\alpha), \quad (9.123)$$

kde

$$\hat{\bar{\mathbf{U}}}(\alpha) \equiv \hat{\mathbf{U}}^{(0,1)}(\alpha), \quad (9.124)$$

na něm realizují reprezentaci

$$\{\mathbf{3}\} \otimes \{\bar{\mathbf{3}}\} \quad (9.125)$$

grupy  $SU(3)$ .

Uvážíme-li, že vektory

$$\left| \begin{smallmatrix} j \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle \equiv \left| \begin{smallmatrix} j \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle_k \quad (9.126)$$

tvoří ortonormální bázi tohoto prostoru, a přitom

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^1,3^1)}(\alpha) \left| \begin{smallmatrix} j \\ k \end{smallmatrix} \right\rangle = \sum_{k_1, k_2=1}^3 \mathbf{U}_{(j_1, j)}(\alpha) \bar{\mathbf{U}}_{(k_1, k)}(\alpha) \left| \begin{smallmatrix} j_1 \\ k_1 \end{smallmatrix} \right\rangle, \quad (9.127)$$

okamžitě vidíme, že

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^1,3^1)}(\alpha) \sum_{j=1}^3 \left| \begin{smallmatrix} j \\ j \end{smallmatrix} \right\rangle = \sum_{j_1, k_1=1}^3 [\mathbf{U}(\alpha) \bar{\mathbf{U}}^T(\alpha)]_{(j_1, k_1)} \left| \begin{smallmatrix} j_1 \\ k_1 \end{smallmatrix} \right\rangle. \quad (9.128)$$

Z relace ( 9.115 ) však víme, že

$$\left[ \mathbf{U}(\alpha) \bar{\mathbf{U}}^T(\alpha) \right] = 1, \quad (9.129)$$

a tedy

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^1, 3^1)}(\alpha) \sum_{j=1}^3 |^j_j\rangle = \sum_{j=1}^3 |^j_j\rangle, \quad (9.130)$$

tj. jednorozměrný prostor  $\mathbf{H}^{(0,0)}$ , za jehož ortonormální bázi můžeme zvolit vektor

$$|[0,0]\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{3}} \sum_{j=1}^3 |^j_j\rangle, \quad (9.131)$$

redukuje všechny operátory  $\hat{\mathbf{U}}^{(3^1, 3^1)}(\alpha)$ .

Označíme-li jeho osmírozměrný ortogonální doplněk symbolem  $\mathbf{H}^{(1,1)}$ , můžeme prostor ( 9.121 ) vyjádřit jako

$$\mathbf{U}^{(3^1, 3^1)} \equiv \mathbf{H}^{(1,1)} \oplus \mathbf{H}^{(0,0)}. \quad (9.132)$$

Odpovídající rozklad operátorů ( 9.123 ) má tvar

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^1, 3^1)}(\alpha) \equiv \hat{\mathbf{U}}^{(1,1)}(\alpha) \otimes \hat{\mathbf{U}}^{(0,0)}(\alpha). \quad (9.133)$$

Přitom z formule ( 9.130 ) víme, že operátory  $\hat{\mathbf{U}}^{(0,0)}(\alpha)$  se všechny redukují na operátor identity, tj. tyto operátory realizují na prostoru  $\mathbf{H}^{(0,0)}$  triviální jednorozměrnou reprezentaci, která je samozřejmě ireducibilní.

Je možno dokázat, že také reprezentace realizovaná operátory  $\hat{U}^{(1,1)}(\alpha)$  je ireducibilní.

Ve fyzikální literatuře se pro ně užívá symbolu  $\{\mathbf{1}\}$ , resp.  $\{\mathbf{8}\}$ , tj. rozklad reprezentace ( 9.125 ) na ireducibilní komponenty se zapisuje ve tvaru

$$\{\mathbf{3}\} \otimes \{\bar{\mathbf{3}}\} = \{\mathbf{8}\} \oplus \{\mathbf{1}\} . \quad (9.134)$$

Každý vektor  $|\psi\rangle \in \mathbf{U}^{(3^1,3^1)}$  lze vyjádřit ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_{j,k=1}^3 \psi^j_k |^j_k\rangle . \quad (9.135)$$

Z formule ( 9.131 ) je evidentní, že

$$|\psi\rangle \in \mathbf{H}^{(1,1)} \quad (9.136)$$

právě tehdy, když jeho koeficienty mají nulovou stopu, tj. když platí

$$\sum_{j=1}^3 \psi^j_j |^j_j\rangle = 0 . \quad (9.137)$$

Jeho koeficienty tedy můžeme zapsat jako

$$\psi^j_k = \psi_{(j,k)} , \quad (9.138)$$

kde na pravé straně stojí elementy čtvercové matice  $\psi$  s nulovou stopou, tj.

$$\text{Tr} \psi = 0 . \quad (9.139)$$



Každou takovouto matici lze vyjádřit jako lineární kombinaci Gell-Mannových matic, tzn. zapsat ji ve tvaru rozvoje

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{a=1}^8 \psi_a \lambda_a . \quad (9.140)$$

pro jehož koeficienty dostáváme díky relaci ( 9.52 ) výraz

$$\psi_a = \frac{1}{\sqrt{2}} \text{Tr} \psi \lambda_a . \quad (9.141)$$

Dosazením z formule ( 9.135 ) do rozvoje ( 9.137 ) vidíme, že libovolný vektor  $|\psi\rangle \in \mathbf{H}^{(1,1)}$  lze vyjádřit ve tvaru

$$|\psi\rangle = \sum_{a=1}^8 \psi_a |a\rangle , \quad (9.142)$$

kde

$$|a\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j,k=1}^3 (\lambda_a)_{(j,k)} |^j_k\rangle , \quad a = 1, \dots, 8. \quad (9.143)$$

Na základě relací ( 9.51 ), ( 9.52 ) se čtenář snadno přesvědčí, že platí relace ortonormality

$$\langle b|a\rangle = \delta_{ab} , \quad (9.144)$$

a tedy vektory ( 9.143 ) tvoří ortonormální bázi prostoru  $\mathbf{H}^{(1,1)}$ .

Transformaci

$$|\psi\rangle \rightarrow |\psi'\rangle \equiv \hat{\mathbf{U}}^{(3^1,3^1)}(\alpha) |\psi\rangle \quad (9.145)$$

lze pro každý vektor  $|\psi\rangle \in \mathbf{H}^{(1,1)}$  vyjádřit v termínech příslušných rozvoju ( 9.135 ) jako

$$\psi_{k_1}^j \rightarrow \psi'_{k_1}{}^j = \sum_{j_1, k_1=1}^3 \mathbf{U}_{(j, j_1)}(\alpha) \bar{\mathbf{U}}_{(k, k_1)}(\alpha) \psi_{k_1}^{j_1}, \quad (9.146)$$

což v případě vektorů  $|\psi\rangle \in \mathbf{H}^{(1,1)}$  lze ekvivalentně vyjádřit jako transformaci

$$\begin{aligned} \psi_a \rightarrow \psi'_a &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j, k=1}^3 \psi'^j{}_k (\lambda_a)_{(k, j)} = \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{j, k, j_1, k_1=1}^3 \mathbf{U}_{(j, j_1)}(\alpha) \bar{\mathbf{U}}_{(k, k_1)}(\alpha) (\lambda_b)_{(k, j)} \frac{1}{\sqrt{2}} \sum_{b=1}^8 (\lambda_b)_{(j_1, k_1)} \psi_b = \\ &= \frac{1}{2} \sum_{b=1}^8 \psi_b \text{Tr} \mathbf{U}(\alpha) \lambda_b \bar{\mathbf{U}}^T(\alpha) \lambda_a. \end{aligned} \quad (9.147)$$

Přitom z formule ( 9.115 ) víme, že

$$\bar{\mathbf{U}}^T(\alpha) = \mathbf{U}^{-1}(\alpha), \quad (9.148)$$

a tedy

$$\mathbf{U}(\alpha) \lambda_b \bar{\mathbf{U}}^T(\alpha) = \sum_{c=1}^8 \mathbf{U}_{(c, b)}^{(A)}(\alpha) \lambda_c, \quad (9.149)$$

kde na pravé straně vystupují elementy matic

$$\mathbf{U}^{(A)}(\alpha) \equiv \exp\left(i \sum_{a=1}^8 \alpha_a \mathbf{t}_a^{(A)}\right), \quad (9.150)$$

kteře realizují regulární reprezentaci, tj. elementy matic  $\mathbf{t}_a^{(A)}$ , odpovídajících v této reprezentaci generátorům  $SU(3)$ , jsou determinovány strukturními konstantami jako

$$\left[ \mathbf{t}_a^{(A)} \right]_{(b,c)} \equiv -i \cdot f_{abc} . \quad (9.151)$$

Tedy

$$\psi'_a = \frac{1}{2} \sum_{b,c=1}^8 \psi_b \mathbf{U}_{(c,b)}^A(\alpha) \text{tr} \lambda_c \lambda_a = \sum_{b,c=1}^8 \mathbf{U}_{(a,b)}^A(\alpha) \psi_b . \quad (9.152)$$

Uvažujme nyní  $3^{m+n}$  – rozměrný Hilbertův prostor

$$\mathbf{U}^{(3^m, 3^n)} \equiv U^3 \otimes \dots \otimes U^3 \otimes \bar{U}^3 \otimes \dots \otimes \bar{U}^3 , \quad (9.153)$$

kde na pravé straně vystupuje  $m$  faktorů  $U^3$  a  $n$  faktorů  $\bar{U}^3$ . Je zřejmé, že operátory

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^m, 3^n)}(\alpha) \equiv \hat{\mathbf{U}}(\alpha) \otimes \dots \otimes \hat{\mathbf{U}}(\alpha) \otimes \hat{\bar{\mathbf{U}}}(\alpha) \otimes \dots \otimes \hat{\bar{\mathbf{U}}}(\alpha) \quad (9.154)$$

realizují na tomto prostoru reprezentaci grupy  $SU(3)$ .

Každý vektor  $|\psi\rangle \in \mathbf{U}^{(3^m, 3^n)}$  lze vyjádřit jako lineární kombinaci ortonormálních vektorů

$$\left| \begin{matrix} j_1 \dots j_m \\ k_1 \dots k_n \end{matrix} \right\rangle \equiv \left| \begin{matrix} j_1 \\ k_1 \end{matrix} \right\rangle \dots \left| \begin{matrix} j_m \\ k_m \end{matrix} \right\rangle \dots \left| \begin{matrix} j_n \\ k_n \end{matrix} \right\rangle , \quad (9.155)$$

tj. ve tvaru rozvoje

$$|\psi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_m, k_1, \dots, k_n=1}^3 \psi^{j_1 \dots j_m}_{k_1 \dots k_n} \left| \begin{matrix} j_1 \dots j_m \\ k_1 \dots k_n \end{matrix} \right\rangle . \quad (9.156)$$

Z předchozího je zřejmé, že všechny vektory, pro jejichž koeficienty takového rozvoje jedná platí

$$\psi^{j_1 \dots j_m}_{k_1 \dots k_n} = \psi^{j_{i_1} \dots j_{i_m}}_{k_{l_1} \dots k_{l_n}}, \quad (9.157)$$

kde  $\{i_1, \dots, i_m\}$ , resp.  $\{l_1, \dots, l_n\}$  je libovolnou permutací čísel  $\{1, \dots, m\}$ , resp.  $\{1, \dots, n\}$ , a jedná

$$\sum_{j=1}^3 \psi^{j j_2 \dots j_m}_{j k_2 \dots k_n} = 0, \quad (9.158)$$

tvoří podprostor ( $\equiv \mathbf{H}^{(m,n)}$ ).

Označíme-li jeho ortogonální doplněk symbolem  $\mathbf{H}_\perp^{(m,n)}$ , můžeme prostor (9.153) vyjádřit ve tvaru

$$\mathbf{U}^{(3^m, 3^n)} = \mathbf{H}^{(m,n)} \oplus \mathbf{H}_\perp^{(m,n)}. \quad (9.159)$$

V případech, kdy  $m \cdot n = 0$ , požadavek (9.158) pochopitelně odpadá. Koeficienty rozvoje (9.156) tvoří spinory grupy  $SU(3)$  s  $m$  horními a  $n$  dolními indexy.

Vlastnosti (9.157), resp. (9.158) mohou být pak formulovány spinorovou terminologií jako výrok, že příslušné spinory jsou úplně symetrické ve všech horních indexech a ve všech dolních indexech, resp. že kontrakce kteréhokoliv z jejich horních indexů s jakýmkoli indexem dolním dává nulu.

Nechť každá z veličin  $j_l$ ,  $l = 1, \dots, m$  může nabývat hodnot 1, 2, 3.

Nechť  $N_k(m)$  je počet těch  $m$ -tic

$$\{j_1, \dots, j_m\} \quad (9.160)$$

vyhovující podmínce

$$j_1 \leq j_2 \leq \dots \leq j_m, \quad (9.161)$$

pro které je

$$j_m = k, \quad k = 1, 2, 3. \quad (9.162)$$

Snadno lze dokázat, že

$$\begin{aligned} N_1(m) &= N_1(m-1), \\ N_2(m) &= N_1(m-1) + N_2(m-1), \\ N_3(m) &= N_1(m-1) + N_2(m-1) + N_3(m-1). \end{aligned} \quad (9.163)$$

Z těchto rekurentních vztahů plyne, že celkový počet  $m$ -tic vyhovujících podmínce (9.161) je dán výrazem

$$N(m) = \frac{(m+1)(m+2)}{2}. \quad (9.164)$$

Odtud již není složité odvodit, že prostor  $\mathbf{H}^{(m,n)}$  má dimenzi

$$N(m,n) = \frac{(m+1)(n+1)(m+n+2)}{2}. \quad (9.165)$$

Zopakováním předchozích úvah také snadno zjistíme, že prostor  $\mathbf{H}^{(m,n)}$  redukuje všechny operátory (9.154), tj. že platí

$$\hat{\mathbf{U}}^{(3^m, 3^n)}(\alpha) = \hat{\mathbf{U}}^{(m,n)}(\alpha) \otimes \hat{\mathbf{U}}_{\perp}^{(m,n)}(\alpha). \quad (9.166)$$

Podstatné je, že reprezentace ( $\equiv D(m,n)$ ) realizovaná operátory  $\hat{\mathbf{U}}^{(m,n)}(\alpha)$  je již ireducibilní.

Takovéto reprezentace jsou výše naznačeným postupem dobře definovány pro jakékoliv celočíselná nezáporné hodnoty parametrů  $m$  a  $n$ . Přitom pod reprezentací  $D(0,0)$  definatoricky rozumíme triviální jednorozměrnou reprezentaci realizovanou operátory  $\hat{\mathbf{U}}^{(0,0)}(\alpha)$  zavedenými ve formuli (9.133).

Navíc je možno dokázat, že

- a) každou konečněrozměrnou ireducibilní reprezentaci grupy  $SU(3)$  lze ztotožnit s některou z reprezentací  $D(m,n)$ ,
- b) reprezentace  $D(m,n)$  a  $D(m',n')$  jsou ekvivalentní právě tehdy, když

$$m = m', \quad n = n',$$

c) reprezentace  $D(n,m)$  je kontrgradientní k reprezentaci  $D(m,n)$ .  
 Jak jsme již dříve uvedli, ve fyzikální literatuře se většinou místo symbolu  $D(m,n)$  užívá zjednodušeného značení zdůrazňujícího dimenzi této reprezentace.

Přitom je vžita konvence

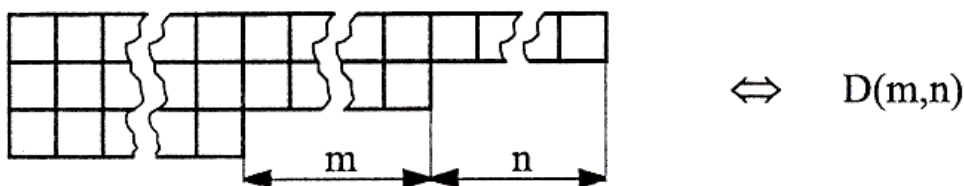
$$\begin{aligned} \{N(m,n)\} &\equiv D(m,n) && \text{pro } m \geq n, \\ \{\bar{N}(m,n)\} &\equiv D(m,n) && \text{pro } m < n \end{aligned} \quad (9.167)$$

a v případě nutnosti se k rozlišení dalších nezávislých reprezentací téže dimenze příslušné částice doplňují ještě čárkami, např.

$$\begin{aligned} D(2,1) &= \{\mathbf{15}\}, \\ D(4,0) &= \{\mathbf{15}'\}. \end{aligned} \quad (9.168)$$

Ireducibilní reprezentaci  $D(m,n)$  lze přiřadit kterékoliv Youngovo polyomino s maximálně třemi řádky, v němž první řádek má o  $m$  buněk víc než řádek druhý, který zase přesahuje o  $n$  buněk řádek třetí, jak je naznačeno na obrázku 9.3.

Obr. 9.3



Všechny ireducibilní reprezentace obsažené v reprezentaci

$$D(m, n) \otimes D(m', n') \quad (9.169)$$

pak obdržíme podle následujících pravidel:

- 1) Označme písmenem  $a$ , resp.  $b$  buňku v 1. resp. v 2. řádku Youngova polyomina  $D(m', n')$ .
- 2) K Youngovu polyominu  $D(m, n)$  přidáváme buňky z polyomina  $D(m', n')$  označené písmenem  $a$  tak, že
  - i) v žádném sloupci se nevyskytuje symbol  $a$  více než jednou,
  - ii) vzniklý obrazec je opět Youngovým polyominem
- 3) Obdobným způsobem přemístíme buňky z polyomina  $D(m', n')$  označené písmenem  $b$ , přičemž musí být navíc splněna podmínka

$$i) \quad N_M(a) \geq N_M(b),$$

kde  $N_M(x)$  je počet symbolů  $x$  ve výsledném Youngově polyominu v prvních  $M$  přidaných buňkách, počítáno zprava doleva a shora dolů (nejprve v prvním řádku, potom ve druhém, atd.)

- ii) Vynecháme Youngova polyomina o více jak 3 řádcích.

Tak např. v případě reprezentace

$$D(1,1) \otimes D(1,1) \quad (9.170)$$

tímto postupem dostáváme:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}$$

A tedy

$$D(1,1) \otimes D(1,1) = D(2,2) \oplus D(3,0) \oplus D(0,3) \oplus D(1,1) \oplus D(1,1) \oplus D(0,0) \quad (9.171)$$

tj.

$$\{8\} \otimes \{8\} = \{27\} \oplus \{10\} \oplus \{\overline{10}\} \oplus \{8\} \oplus \{8\} \oplus \{1\}. \quad (9.172)$$

Ponecháme čtenáři jako jednoduché cvičení, aby ukázal, že z výše popsaných pravidel bezprostředně plynou nejen dříve uvedené výsledky ( 9.94 ), ( 9.134 ), ale např. i rozklady

$$\{6\} \otimes \{3\} = \{10\} \oplus \{8\}, \quad (9.173)$$

$$\{8\} \otimes \{3\} = \{15\} \oplus \{\overline{6}\} \oplus \{3\}. \quad (9.174)$$

Znalost algoritmu rozkladu dvou ireducibilních reprezentací na reprezentace ireducibilní samozřejmě umožňuje nalézt takovéto rozklady i pro součiny více ireducibilních reprezentací. Tak např. z předposlední formule spolu s relacemi ( 9.94 ), ( 9.134 ) okamžitě obdržíme rozklad

$$\{3\} \otimes \{3\} \otimes \{3\} = (\{6\} \oplus \{\overline{3}\}) \otimes \{3\} = \{10\} \oplus \{8\} \oplus \{8\} \oplus \{1\}. (9.175)$$

Podobně z formulí ( 9.134 ), ( 9.174 ) vidíme, že

$$\{3\} \otimes \{\overline{3}\} \otimes \{3\} = (\{8\} \oplus \{1\}) \otimes \{3\} = \{15\} \oplus \{\overline{6}\} \oplus \{3\} \oplus \{3\}. (9.176)$$

Nepřehlédněme, že v rozkladu součinu dvou ireducibilních reprezentací grupy  $SU(3)$  se může některá z jejích ireducibilních reprezentací vyskytovat i více, než jednou. Připomeňme, že díky tomu může v případě této grupy v odpovídajícím Wigner – Eckartově teorému vystupovat více redukovaných maticových elementů.

Skutečnost, že nic takového nemůže nastat u grupy  $SU(2)$  je jistě evidentní každému, kdo ještě nezapomněl pravidla skládání impulsmomentů.



## Grandunifikační interakce

Máme-li k dispozici teorii silných interakcí (QCD) a teorii elektroslabých interakcí (WSG model), což jsou všechno kalibrační teorie, vzniká přirozeně snaha spojit tyto teorie do jedné ještě obecnější teorie interakcí. Tato další etapa unitarizace se označuje jako **velké sjednocení** (GUT - Grand Unification Theory).



Howard Mason Georgi (1947)

Grupa kalibrační symetrie  $G$  v tomto velkém sjednocení musí přitom obsahovat podgrupy  $SU(3)_{\text{color}} \times [SU(2) \times U(1)_{\text{loc}}]_{\text{elektroslab}} \subset G$ ; nejjednodušší grupou tohoto druhu je  $SU(5)$ , testují se však i modely s kalibračními grupami  $SO(10)$ ,  $E_6$  a další.

Grupa  $SU(5)$  unitárních unimodulárních matic ( $5 \times 5$ ) působících na vlnové funkce částic izopentatu (označme si je pro názornost  $a, b, c, d, e$ ):

$$\begin{pmatrix} \gamma_{11} & \gamma_{12} & \gamma_{13} & \gamma_{14} & \gamma_{15} \\ \gamma_{21} & \gamma_{22} & \gamma_{23} & \gamma_{24} & \gamma_{25} \\ \gamma_{31} & \gamma_{32} & \gamma_{33} & \gamma_{34} & \gamma_{35} \\ \gamma_{41} & \gamma_{42} & \gamma_{43} & \gamma_{44} & \gamma_{45} \\ \gamma_{51} & \gamma_{52} & \gamma_{53} & \gamma_{54} & \gamma_{55} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_a \\ \psi_b \\ \psi_c \\ \psi_d \\ \psi_e \end{pmatrix}. \quad (9.177)$$

čímž dostáváme v teorii celkem 50 volných parametrů.  
Z požadavku unitarity

$$\lambda^\dagger \lambda = \mathbf{1} \quad (9.178)$$

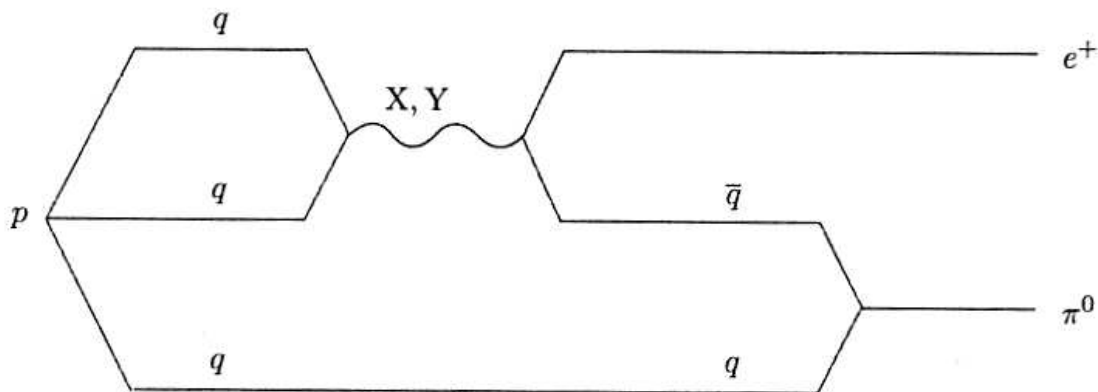
dostáváme celkem 25 vazebních podmínek a z požadavku unimodularity

$$\det \sigma = 1 \quad (9.179)$$

další jednu vazbu.

V teorii tak zbývá 24 volných parametrů, které odpovídají čtyřadvaceti polím a jim příslušejícím bosonům.

Čtyři z těchto polí patří elektroslabé interakci, osm polí tvoří gluony kvantové chromodynamiky a zbývajících 12 polí tvoří vektorové bosony X a Y zvané **leptokvarky**, neboť způsobují vzájemné přepisy leptonů na kvarky a naopak. Bosony X a Y jsou před narušením symetrie - stejně jako všechny ostatní vektorové částice - nehmotné; leptony se přitom mohou snadno měnit na kvarky a naopak.



Obr. 9.4: Možný rozpad protonu. Kvarky se samovolně přeměňují na bosony X a Y, které se následně rozpadají na leptony  $e^+$ ,  $\pi^0$ .

První Higgsovské pole narušuje výchozí symetrii  $SU(5)$  na  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)_{\text{loc}}$  - silné interakce popsané grupou  $SU(3)$  se oddělují od elektroslabých popsaných grupou  $SU(2) \times U(1)_{\text{loc}}$ . X a Y-mezony získávají velikou hmotnost (řádově  $m_{X,Y} \sim 10^{16}$  GeV), čímž je přeměna kvarků v leptony silně potlačena a proton se stává prakticky stabilní. Další higgsovské pole pak narušuje symetrii mezi slabými a elektromagnetickými interakcemi stejně jako ve Weinbergově-Salamově modelu.

Jednou z hlavních předpovědí grandunifikačních teorií je **nestabilita protonu**, který by se měl rozpadat na miony či pozitrony a na jeden neutrální či dva nabitě piony [ $p \rightarrow (\mu^+ \text{ nebo } e^+) + (\pi^0 \text{ nebo } \pi^+ + \pi^-)$ ] s dobou života řádově  $\tau_p \approx 10^{35}$  roků. Tento rozpad by byl způsoben přeměnou kvarku na lepton prostřednictvím bosonu X a vzhledem k obrovské hmotnosti bosonu X je jeho pravděpodobnost nesmírně malá. Pozorování rozpadu protonu by však bylo velice důležité, protože by rozhodujícím způsobem ukázalo, že grandunifikační teorie jde správnou cestou. Experimenty zatím dávají odhady  $\tau_p > 10^{33}$  let.

Tyto pokusy o pozorování rozpadu protonu se provádějí hluboko pod zemí (z důvodu odstínění kosmického záření), kde jsou umístěny velké nádrže s vodou, opatřené mnoha fotonásobiči, které by mohly zaregistrovat slabé záblesky způsobené průchodem rychlých částic vzniklých jako produkty rozpadu protonu. Nejdokonalejším zařízením tohoto druhu je **Superkamioka** v Japonsku, které sice nezaznamenalo žádný rozpad protonu, ale bylo velice úspěšné při detekci a spektrometrii neutrin.



**Obr. 9.5:** Vyprázdněná nádrž obřího neutrinového detektoru Superkamioka, se stěnami pokrytými výkonnými fotonásobiči.

## Technicolor a preonový model

Stabilita Higgsova bosonu je dosud velikou záhadou, neboť kvantová mechanika má podivnou tendenci tlačit jeho hmotnost směrem k Planckově hmotnosti. V kvantové teorii nejsou veličiny jako hmotnost pevně dané jednou provždy, ale modifikují je kvantové efekty. Stejně jako Higgs skrytě působí na ostatní částice, mohou působit jiné částice na Higgse. Tyto částice mají různou energii a jejich čistý vliv se odvíjí od toho, kde přesně ustupuje Standardní model hlubší teorii. Pokud se model drží až k  $10^{15}$  GeV, kde, jak se zdá silné a elektroslabé interakce splývají v jedno, působí částice o skutečně titánských energiích na Higgse a udělují mu značnou hmotnost. Ukazuje se, že aby nebyla hmotnost higgse zavlečena k Planckově hmotě, je třeba vyladit konstanty standardního modelu s fantastickou přesností 32 desetinných míst. Tato závažná skutečnost je známa jako **problém hierarchie**.

Teoretikové zkoumají několik způsobů, jak by mohly nové jevy vyřešit problém hierarchie. Vedoucí kandidát, tak zvaná **supersymetrie**, předpokládá, že každá částice má zatím nepozorovaného superpartnera, který se liší spinem. Pokud by byla příroda přesně supersymetrická, hmotnosti částic a superpartnerů by byly identické, a jejich vliv na Higgsovy bosony by se přesně vyrušil. V tom případě by ale již nyní fyzikové superpartnery pozorovali. Jelikož tomu tak není, pak pokud supersymetrie existuje, musí jít o porušenou symetrii. Čistý vliv na Higgse by stále ještě mohl být přijatelně malý, pokud by byly hmotnosti superpartnerů menší, než 1 TeV, čímž by se dostaly do zorného pole LHC. Prozatím však nic, co by naznačovalo existenci superpartnerů na této energetické škále, pozorováno nebylo.

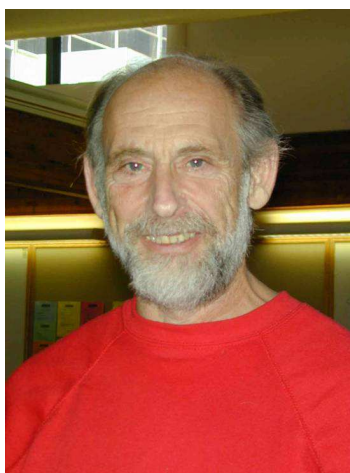
Další, vysoce provokativní myšlenkou je, že problém hierarchie při bližším prozkoumání pomine, pakliže má prostor další dimenze kromě tří, ve kterých žijeme. Další dimenze mohou modifikovat, jak se velikost sil mění s energií a jak nakonec splynou. Pak se splynutí – a nástup nové fyziky – nemusí odehrát na  $10^{12}$  TeV, ale při mnohem nižší energii související s velikostí dodatečných dimenzí, snad jen několika málo TeV. Pokud tomu tak je, LHC by nám mohlo umožnit nahlédnout do těchto dodatečných dimenzí. V současné době však nic nenaznačuje ani tuto možnost.

Poznamenejme, že Higgsov mechanismus spontánního narušení symetrie není v pravém slova smyslu dynamický. Nejde o druhotný jev způsobený dynamikou teorie, ale vyplývá ze zavedení nového pole s přesně definovanými vlastnostmi. Může-li za spontánní narušení elektroslabé kalibrační symetrie vskutku Higgsovo pole, potom jsou potřeba přinejmenším dva nové parametry, aby popsaly velikost narušení symetrie a intenzitu Higgsovy interakce jako takové. Tyto parametry nelze stanovit z teorie samé, takže model není schopen předpovědět hmotnost Higgsova bosonu. Navíc, standardní popis Higgsova pole v kvantové teorii pole není v souladu s požadavkem asymptotické volnosti, protože se vyskytují pochybnosti o jeho matematické bezrozpornosti.

Kvarky a leptony mají prozatím zcela náhodně vyhlížející hmotnosti, což dává 12 čísel, jež teorie neumí vysvětlit. Stanovení směšovacích úhlů si vyžaduje další čtyři parametry, které přesně určují, jak působí elektroslabé síly na částice. Těchto 16 parametrů ve standardním modelu působí, jakoby interakční intenzity Higgsova pole s kvarky a leptony byly úplně libovolné. Problém je pravděpodobně spojen s tím, že dobře nerozumíme pravé povaze narušení elektroslabé kalibrační symetrie vakua. Ve standardním modelu tak vystupuje 18 neurčených parametrů, které přímo souvisejí s vlastnostmi Higgsova pole. Většina problémů standardního modelu tedy spočívá v tom, jak se Higgsova pole buď zbavit a nebo porozumět tomu, odkud se vzalo. Teorie velkého sjednocení založená na grupě  $SU(5)$  nepřinesla nic nového o Higgsově částici ani o mechanismu spontánního narušení symetrie vakua a fakticky celý problém ještě zhoršila. Vakuový stav zde musí porušovat nejen elektroslabou symetrii, ale také většinu zbytku symetrie  $SU(5)$ . K tomu bylo potřeba doplnit další soubor Higgsových částic, čímž se do teorie zavádí množství dalších neurčených parametrů. Sám Glashow posléze označil Higgův mechanismus za „Weinbergův záchod“ v analogii s místností, kterou má každý doma, plní tam důležitou a nezbytnou funkci, ale nikdo se s ní nepyšní a nemá zájem ji předvádět návštěvám.

Většina problémů standardního modelu tedy pochází ze zavedení Higgsova pole a s tím spojené libovůle v jeho interakci se všemi ostatními elementárními částicemi. Je proto přirozené pokusit se hledat alternativní mechanismy spontánního narušení symetrie  $SU(2)$ .

Jelikož historicky prvním případem, kdy bylo spontánní narušení kalibrační symetrie pozorováno, byla teorie supravodivosti s dynamickým spontánním narušením symetrie  $U(1)_{\text{loc}}$ , zdá se tedy nejpřirozenějším hledat takové částice a síly, aby nejnižší energetický stav dynamicky narušoval symetrii  $SU(2)$ . V supravodiči není žádné elementární pole, které by symetrii narušilo, ale dynamika interakce běžných elektronů při jejich pohybu látkou působí, že nejnižší energetický stav není invariantní vůči kalibrační symetrii.



Leonard Susskind (1940)

Jedním ze způsobů jak zkrotit higgse je, že se vůbec nejedná o elementární částici. Kdyby se např. higgs skládal z vázaných stavů velmi těžkých kvarků a leptonů, které se chovají mnohem spořádaněji, problém by zmizel. Hmotnost Higgse by se pak především odvíjela od energie jeho složek a nebyla by tak citlivá na vysokoenergetické procesy, které zvyšují jeho hmotnost.

Zároveň není nutno do modelu zadávat žádné nové neznámé částice, ani volné parametry. Tato teorie však předpokládá, že těžké částice drží pohromadě nějakým dosud neznámým způsobem. Výpočty testovatelných důsledků této teorie jsou však natolik komplikované, že se dosud nepodařilo nalézt účinné matematické metody, jež by je dovolovali provést.

Roku 1978 přišli Stewen Weinberg a Leonard Susskind nezávisle na sobě s návrhem modelu, v němž by k takovému narušení mohlo dojít. Podle tohoto modelu by měla existovat pátá, dosud neznámá interakce velmi podobná silné interakci, ale s jinou grupou symetrie. Náboje této interakce byly nazvány v analogii s náboji silné interakce **technicolor**.

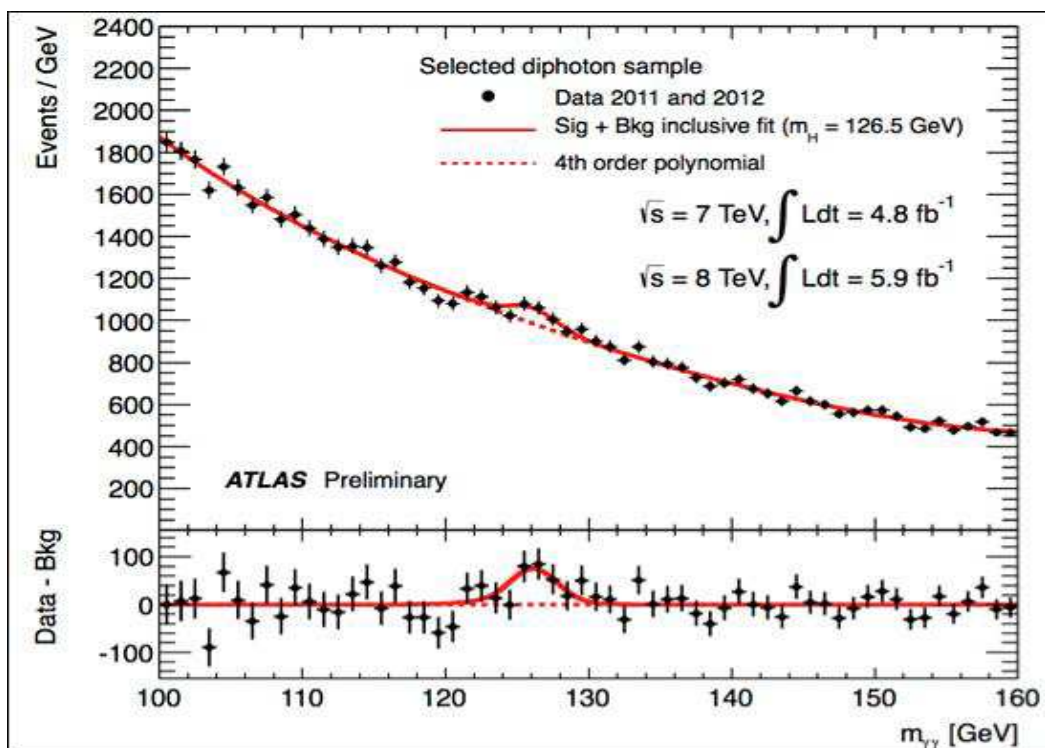
Weinberg a Susskind ukázali, že kdyby analogie spontánně narušené symetrie  $SU(3)$  v algebře toků teorie silných interakcí byla v teorii technicolor narušena stejným způsobem, způsobilo by to spontánní narušení kalibrační symetrie slabých interakcí. Technikolorované mezony o nejnižší energii v teorii efektivně vystupují jako Higgsovy bosony ve WSG elektroslabé kalibrační teorii. Tato teorie je mnohem snáze početně zvládnutelná, avšak za cenu zavedení nové rodiny neznámých technikolorovaných kvarků – **technikvarků**.

Přirozeným zobecněním veškerých těchto úvah bylo prohlásit všechny dosud známé částice za složené ze základnějších hypotetických částic, které koncem 70. let minulého století dostaly název **preony**.

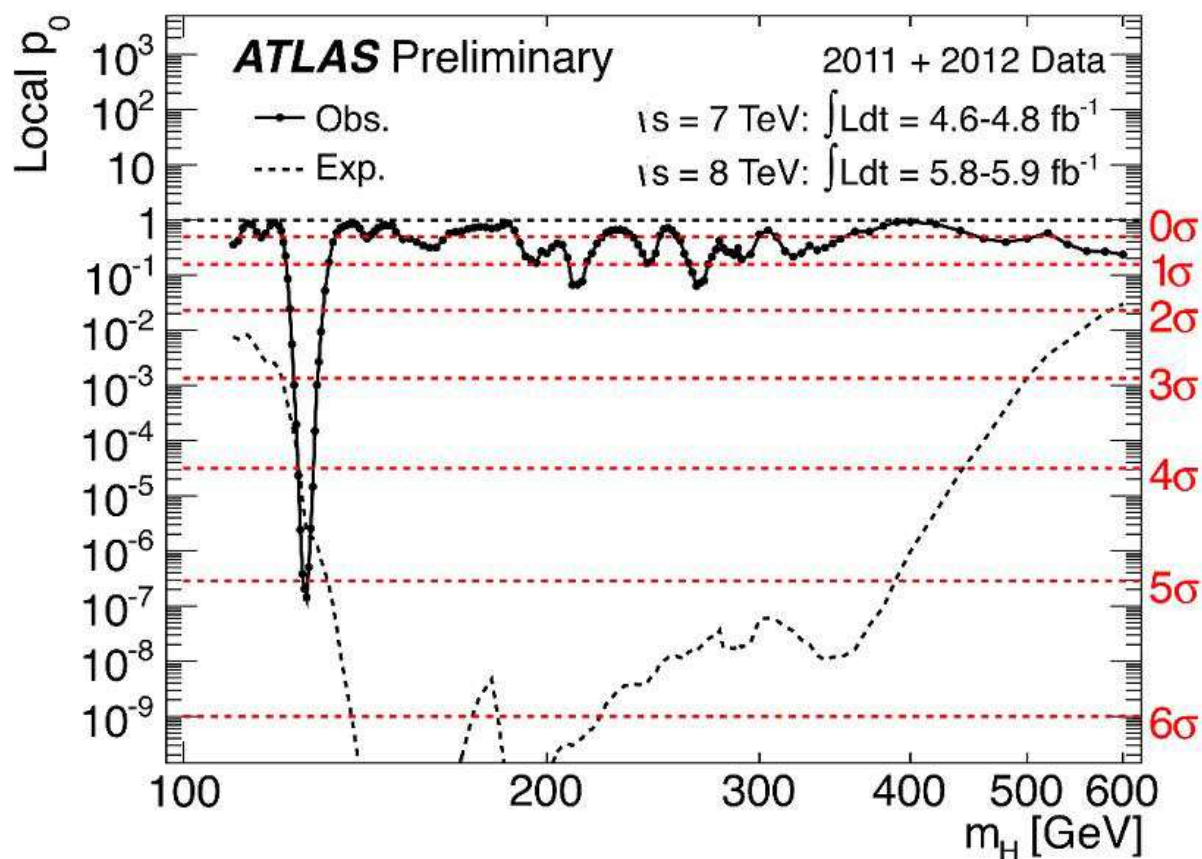
Všechny dnes známé částice by se daly poskládat z pouhých dvou typů preonů. Preonový model navíc objasňuje řadu v přírodě pozorovaných jevů, které standardní model nevysvětluje. Např. dvě charakteristiky kvarku – barva a elektrický náboj – se zdají být dle standardního modelu zcela nezávislé. Každý kvark se vyskytuje ve třech barvách. Tato násobnost nese symetrii nutnou pro fungování kalibrační teorie silných interakcí. Proč ale tři barvy, proč ne dvě, nebo čtyři? Různé kvarky mají různé náboje, jejichž velikost je buď  $1/3$ , nebo  $2/3$  velikosti náboje elektronu. V obou případech se tedy vyskytuje číslo 3, což naznačuje, že barva i náboj mají nějaký společný původ. Tento vztah však standardní model nikterak nevysvětluje, pouze jej postuluje. Vysvětlení dokonce dosud nepodala ani žádná ze strunových teorií. Preonový model jej však vysvětluje velmi elegantním způsobem. O preonovém modelu budeme ještě podrobně hovořit v následujících kapitolách věnovaných teorii cytoprostoru, která je založena na zobecněném preonovém modelu..

## Objev Higgsova bosonu v CERN

Mezi léty 2011 – 2012 byla existence higgsovy částice konečně potvrzena na urychlovači LHC v Ženevském CERN. Již o rok později obdržel Peter Higgs Nobelovu cenu za fyziku pro rok 2013. Klidová hmotnost Higgsova bosonu byla stanovena na 126 GeV.



Obr. 9.6: První náznak objevu nové částice na pozadí kvantového šumu



Obr. 9.7: Definitivní potvrzení Higgsova bosonu – překročení hranice  $5\sigma$ , které je již považováno za objev nové částice



## Unitární teorie pole

A. Einstein pevně věřil, že příroda, i když doslova hýří rozmanitostí nejrůznějších struktur a jevů, je velice **úsporná na základní principy**. V duchu této své vize pracoval po vytvoření obecné teorie relativity až do posledních dní svého života na unitárních teoriích pole. Myšlenka **unitární teorie pole** je nesmírně hluboká a krásná: podle ní by mělo existovat jediné, zcela základní a vše zahrnující fyzikální pole, jehož projevem by pak byla všechna pozorovaná pole v přírodě (gravitační, elektromagnetické, pole silných a slabých interakcí a příp. další pole třeba v subnukleární fyzice). Ve světě pak neexistuje nic než toto pole, z něhož je všechno složeno - i hmotné útvary (např. částice) jsou jakési místní "zhuštěniny" tohoto pole.

Dosud jsme pevně stáli na pozici **zdroj** → **pole**: existuje **zdroj** (jenž je v jistém smyslu "prvotní"), který kolem sebe **budí pole** a úkolem fyziky je stanovit zákony, podle nichž zdroj toto pole vytváří. Zdroj je přitom něco odlišného od pole, je to jakási "substance" - prvek cizorodý teorii samotného pole. Podíváme-li se na Maxwellovy rovnice  $F^{ik}_{;k} = 4\pi j^i$  nebo na Einsteinovy rovnice  $R_{ik} - 1/2 g_{ik} R = 8\pi T_{ik}$ , vidíme že na levé straně stojí výraz popisující pole a na pravé straně veličina popisující zdroj. Porovnáme-li vzájemně charakter obou veličin, můžeme konstatovat spolu s Einsteinem, že "fenomenologický" zdroj na pravé straně (tenzor energie-hybnosti  $T_{ik}$  nebo čtyřproud  $j^i$ ) působí ve srovnání s pregnantním výrazem popisujícím pole na levé straně jako "dřevěná chatrč vedle zlatého paláce". V dokonalé teorii pole by žádný takový dualismus neměl být, zdroj odlišný od pole by neměl existovat; zdroj by měl být rovněž "složen" z pole.

Unitární teorie pole tak klasický problém "Jakým způsobem zdroj kolem sebe budí pole?" obrací úplně na hlavu a ptá se: "Jakým způsobem je to, co považujeme za zdroj, ze svého pole složeno?". Problém buzení pole, stejně jako problém interakce dalších částic s tímto polem, pak již automaticky odpadá - všechno je pole, které se jistým způsobem (podle svých vnitřních zákonů) **vyvíjí** v prostoru a čase. Pouze při našem pozorování se nám některé oblasti pole jeví jako "zdroje" a jiné oblasti jako vzbuzované nebo působící "pole".

Po vytvoření obecné teorie relativity - což je vlastně geometrizace gravitace - se A.Einstein téměř po 40 let usilovně snažil vytvořit

**unitární teorii gravitačního a elektromagnetického pole** a završit tak své impozantní životní dílo. Elektromagnetické pole má totiž mnoho podobných vlastností jako pole gravitační, takže se přirozeně nabízelo jako nejvhodnější "kandidát" pro geometrizaci a tím pro sjednocení s již geometrizovaným gravitačním polem. A jako nejpřirozenější cesta k zahrnutí elektromagnetismu do gravitace se jevílo zobecňování geometrických vlastností Riemannova prostoročasu OTR tak, aby nově vzniklé geometrické struktury nějak popisovaly elektromagnetické pole. Unitární teorie gravitačního-elektromagnetického pole, vytvářené ve 20. letech Einsteinem a dalšími fyziky nevedly ke kýženému výsledku a proto o nich učiníme jen zcela stručnou zmínku. Tyto teorie lze rozdělit zhruba dvou skupin :

#### a) Zobecňování geometrických vlastností čtyřrozměrného prostoročasu

První pokus v tomto směru přísluší H. Weylovi, který v letech 1917-19 zobecnil Riemannovu geometrii v tom smyslu, že při paralelním přenosu vektoru kolem uzavřené křivky se může změnit nejen směr, ale i velikost vektoru. V této Weylově (konformní) geometrii se grupa obecné kovariance (používaná v OTR) rozšiřuje o kalibrační transformace metriky  $g_{ik}$

$$g'_{ik} = \lambda(x) \cdot g_{ik} , \quad (9.180)$$

při nichž se délky všech vektorů v daném bodě násobí stejným libovolným koeficientem  $\lambda$ , který se může měnit od bodu k bodu. Délka vektoru  $l$  se pak při nekonečně malém paralelním přenosu mění podle zákona

$$\delta l = -l \cdot \varphi_i dx^i . \quad (9.181)$$

Kromě fundamentální kvadratické formy  $ds^2 = g_{ik} dx^i dx^k$  tedy ve Weylově geometrii vzniká další lineární diferenciální forma  $d\varphi = \varphi_i dx^i$  popisující neintegrabilitu délky vektorů. Veličiny  $\varphi_i$  jsou přitom

komponentami čtyřvektoru a při kalibračních transformacích ( 9.99 ) se transformují podle zákona

$$\varphi'_i = \varphi_i - \frac{\partial}{\partial x^i} \ln \lambda(x^i) . \quad ( 9.182 )$$

Takto vzniklý čtyřvektor Weyl interpretoval jako elektromagnetický čtyřpotenciál a čtyřrozměrnou rotaci  $F_{ik} = \varphi_{k;i} - \varphi_{i;k}$  tohoto pole, která je kalibračně invariantní, jako tenzor elektromagnetického pole.

Rovnice elektromagnetického i gravitačního pole by pak měly vzniknout z jediného variačního principu, invariantního jak vzhledem k obecným transformacím souřadnic, tak vůči kalibračním transformacím ( 9.99 ). To vedlo ke kvadratickému lagrangiánu a tím k diferenciálním rovnicím 4. řádu.

Další způsob zobecnění axiomatiky Riemannovy geometrie pro účely unitarizace navrhl a v letech 1946-53 propracoval A. Einstein.

Zobecnění spočívá v tom, že místo symetrického tenzoru  $g_{ik}$  se v základní formě  $g_{ik} dx^i dx^k$  připouští **nesymetrický metrický tenzor**  $g_{ik}$  a rovněž nesymetrické koeficienty afinní konexe  $\Gamma_{ik}^l$ . Právě antisymetrickou část metriky se Einstein pokoušel interpretovat jako elektromagnetické pole, zatímco symetrická část popisovala gravitaci podobně jako v OTR.

## b) Pětirozměrné unitární teorie



Theodor Franz Eduard Kaluza (1885 – 1954)



Oscar Benjamin Klein (1894 – 1977)

Zcela jiný přístup k problému sjednocení gravitačního a elektromagnetického pole vypracovali v letech 1921 – 1925 T. Kaluza a O. Klein, kteří pro obecný popis fyzikální reality navrhli používat **5-rozměrnou varietu** (v níž prostoročas OTR je určitým 4-rozměrným podprostorem) v naději, že pátý rozměr by mohl vyjadřovat elektromagnetické pole. Kaluza a Klein se zřejmě inspirovali způsobem, jakým Minkowski sjednotil v trojrozměrnou oddělené elektrické a magnetické pole přechodem ke čtyřrozměrnému prostoročasu. Fyzikální prostoročas pozorujeme jako čtyřrozměrný, takže "přebytečného" pátého rozměru (který nemá přímý geometrický význam) je třeba se zbavit položením vhodné podmínky na pětirozměrnou geometrii. Kaluza původně zavedl poměrně umělý požadavek "cylindričnosti", podle něhož v pětirozměrné varietě měla existovat jednorozměrná grupa izometrických transformací; vzniká tak Killingovo vektorové pole což vede k tomu, že 5-rozměrná geometrická struktura může být plně popsána geometrií čtyřrozměrné hyperplochy. Později Einstein, Bergmann a Bargmann navrhli jinou geometrickou podmínku: uzavřenost (kompaktnost) pětirozměrné variety v pátém rozměru. Pětirozměrná varieta by pak měla topologickou strukturu  $M^4 \times S^1$ , kde  $M^4$  je Minkowskiho prostoročas a  $S^1$  je kružnice, tj. varieta by měla tvar tenké trubice. Pokud je poloměr této trubice (poloměr kompaktifikace) dostatečně malý (subatomových rozměrů), nemůže se žádný makroskopický objekt v pátém rozměru pohybovat a prostoročas se efektivně jeví jako čtyřrozměrný.



**Peter Gabriel Bergmann (1915 – 2002)**



**Valentine Bargmann (1908 – 1989)**

Integrál akce obecné teorie relativity v pětirozměrném prostoru se uvažuje ve tvaru

$$S_5 = -\frac{1}{16\pi G_5} \int \sqrt{|g^{(5)}|} R^{(5)} d^5 x \quad (9.183)$$

kde  $g_{AB}$  je pětirozměrná metrika,  $g^{(5)} = \det(g_{AB})$  a  $R^{(5)} = g^{AB} \cdot R_{AB}$  je skalární křivost pětirozměrného prostoru. Metrika pětirozměrného prostoru se volí ve tvaru

$$g_{AB} = \varphi^{-1/3} \cdot \begin{vmatrix} g_{ik} + A_i A_k \varphi & A_i \varphi \\ A_k \varphi & \varphi \end{vmatrix}, \quad A, B = 0, 1, 2, 3, 4, 5, \quad i, k = 0, 1, 2, 3 \quad (9.184)$$

kde  $g_{ik}$  je obvyklý metrický tenzor 4-rozměrného prostoročasu, 5. složka  $g_{5k}$  je ztotožněna (až na skalární faktor  $\varphi$ ) se čtyřpotenciálem elektromagnetického pole. Za předpokladu, že metrika  $g_{AB}$  nezávisí na souřadnici  $x^5$ , dosazením metriky (9.184) do akce (9.183) po integraci podle  $x^5$  dostaneme

$$S = -\frac{1}{16\pi G} \int \left( R^{(4)} + \frac{1}{4} \varphi F_{ik} F^{ik} + \frac{1}{6} \frac{\varphi_{,i} \varphi^{,i}}{2} \right) \sqrt{|g^{(4)}|} d^4 x \quad (9.185)$$

Pomineme-li skalární pole  $\varphi$ , je integrál akce v Kaluzově-Kleinově teorii roven součtu Einsteinova gravitačního členu a  $U(1)$ -kalibračního členu daného tenzorem

$$F_{ik} = A_{i;k} - A_{k;i}, \quad (9.186)$$

který lze interpretovat jako Maxwellovo elektromagnetické pole. Přitom kalibrační transformace

$$A_i \rightarrow A_i + \partial\lambda/\partial x^i \quad A_i \rightarrow A_i + \frac{\partial\lambda}{\partial x^i} \quad (9.187)$$

je generována speciální transformací souřadnic v 5-rozměrném prostoru:

$$x'^i = x^i, \quad x'^5 = x^5 + \lambda(x^i). \quad (9.188)$$

V teorii je bez újmy na obecnosti zvolena taková parametrizace metriky  $g_{AB}$  a označení veličin, aby se získaly Einsteinovy a Maxwellovy rovnice v obvyklém tvaru. Pátá proměnná pole – skalární veličina  $\varphi$  – je v Kaluzově-Kleinově teorii přebytečná a Kaluza ji vyloučil tím, že ji prostě položil rovnou jedné. Později byly činěny pokusy pochopit význam tohoto skalárního pole a dát mu kosmologický význam; Brans a Dicke dali toto pole do souvislosti se skalárním polem dalekého dosahu ve své tzv. skalárně-tenzorové teorii gravitace.



Carl Henry Brans (1935)



Robert Henry Dicke (1916 – 1997)

Einstein a Bergman chovali určitou dobu naději, že periodičnost polí vzhledem k páté zkompatifikované souřadnici (podél níž by se pole mohla měnit s periodou rovnou délce kružnice kompaktifikace) by mohla vysvětlit kvantové jevy a umožnila vytvořit klasické modely elementárních částic. Tato podobnost s Bohrovým-Broglieovým kvantováním se však ukázala jen jako povrchní a příslušné naděje se neuskutečnily.

Jedna z námitek proti Kaluzově-Kleinově teorii spočívá v tom, že tato teorie není vlastně v pravém slova smyslu jednotná: gravitace a elektromagnetismus jsou zde od sebe odděleny invariantním způsobem - jako "olej a voda".

Kaluzova-Kleinova teorie nevedla ke kýženým výsledkům a na dlouhou dobu upadla prakticky v zapomnění. V posledních desetiletích však neočekávaně zažíváme "renesanci" Kaluzovy-Kleinovy koncepce v souvislosti se snahami o geometrickou formulaci supergravitačních teorií. Jedná se o **zobecněné Kaluzovy-Kleinovy teorie** budované v superprostorech, kde se zavádějí navíc **další rozměry** spinorového charakteru vyjadřující vnitřní vlastnosti interakcí; ukazuje se, že např. 11-rozměrná Kaluzova-Kleinova teorie by mohla sjednocovat všechny známé interakce částic. Kaluzovy-Kleinovy teorie dále poskytují zajímavé možnosti modelů vesmíru o vyšším počtu rozměrů.

### c) Supersjednocení a supergravitace

Názory na úlohu **gravitace** ve struktuře elementárních částic se velice různí; rozprostírají se mezi dvěma krajními polohami:

**a)** Gravitace nemá **žádný vliv** na strukturu a interakce elementárních částic. Tento krajní názor vychází z faktu, že gravitační interakce mezi elementárními částicemi je za všech známých okolností daleko slabší než ostatní druhy interakcí: např. pro dva protony nacházející se v jádře ve vzdálenosti  $\sim 10^{-13}$  cm jsou gravitační síly zhruba  $\sim 10^{40}$ -krát slabší než elektrické síly a  $\sim 10^{42}$ -krát slabší než silné interakce.

**b)** Druhý krajní názor zastával A.Einstein a jeho následovníci (např. J.A.Wheeler): gravitace jakožto fyzika prostoročasu hraje určující roli ve struktuře elementárních částic, je jejich nejvlastnější podstatou. Podle této koncepce je nutno hledat taková zobecnění geometrických vlastností prostoročasu, jejichž přirozenými důsledky by byly vývody kvantové teorie pole o vlastnostech elementárních částic.

Pokud lze univerzálnost gravitace extrapolovat až do mikroměřítek elementárních (subnukleárních) částic, platila by zcela určitě aspoň první část druhého krajního názoru b). Lokální hustoty hmoty a energie zde totiž dosahují takových hodnot, že gravitační interakce by se stala silnou. Stále sílí názor, že v současné době již nelze od sebe odtrhovat fyziku elementárních částic a fyziku gravitace; zdá se dokonce, že bez zahrnutí gravitace nemůže být vytvořena konzistentní a jednotná teorie

částic tvořících hmotu.

Je proto přirozená snaha završit unitarizaci interakcí v kvantové teorii pole zahrnutím gravitační interakce, jejím sjednocením s ostatními třemi druhy interakcí. Tento ambiciózní unitarizační program se označuje jako **supersjednocení** nebo **supergravitace**.

Sjednotit gravitaci s ostatními druhy interakcí v duchu výše zmíněného schématu unitarizace kalibračních teorií znamená sloučit vnitřní symetrie s geometrickými, tj. najít společnou grupu zahrnující jak grupu transformací prostoročasu (např. Poincaréovu grupu) charakterizující gravitaci v OTR, tak i grupy vnitřních (nikoliv prostoročasných) symetrií slabých, silných a elektromagnetických interakcí.

#### První poznání supersymetrické interakce



**Vladimir Akulov (1930)**



**Dmitry L. Volkov (1931)**



**Julius Wess (1934 – 2007)**



**Bruno Zumino (1923)**

Ukázalo se, že provést takové sjednocení (netriviálním způsobem, tj. ne jako pouhý direktní součin) nelze v rámci Lieových grup, ale bylo nutné použít nové algebraické struktury - zobecněné grupy nazývané často



Lieovy superalgebry nebo graduované Lieovy algebry. Ve zobecněných grupách jsou příslušné algebry určeny jak komutačními, tak i antikomutačními relacemi mezi jednotlivými generátory. Ty Lieovy superalgebry, které obsahují jako svoji podalgebru grupu prostoročasových transformací (např. Poincaréovu grupu), se označují jako **supersymetrické**.

Algebra supersymetrie se konstruuje tak, aby obsahovala vedle obyčejných generátorů Poincaréovy grupy (prostoročasových posuvů  $P_k$  a rotací  $M_{kj}$ ) také spinorové generátory  $Q_i$  s vhodnými komutačními relacemi. Pokud se taková algebra realizuje v prostoru polí, transformují generátory  $Q_i$  tenzorová pole na spinorová a naopak. Protože v kvantové teorii tenzorová pole popisují bosony s celočíselným spinem (řídící se Bose-Einsteinovou statistikou) a spinorová pole popisují fermiony s poločíselným spinem (statistika Fermi-Diracova), operátory  $Q_i$  vlastně generují transformace převádějící fermiony na bosony a naopak.

V supergravitaci je tak odstraněna ostrá hranice kladená mezi fermiony a bosony v dosavadní fyzice. Další charakteristickou vlastností supergravitace je to, že vedle gravitačního pole, které je kalibračním polem vůči lokálním transformacím prostoročasu, obsahuje ještě spinorové pole - kalibrační pole vzhledem k lokálním supersymetrickým transformacím generovaným  $Q_i$ ; takové pole se označuje jako Raritovo-Schwingerovo a jeho kvantum se nazývá **gravitino** (může mít spin  $3/2$ , popř.  $5/2$ ).

#### Tvůrci teorie supersymetrického sjednocení



**William Rarita (1907 – 1999)**



**Martin Roček (1949)**



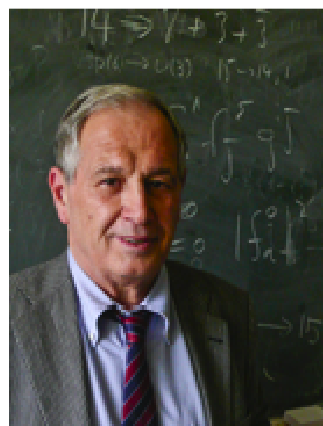
**Peter van Nieuwenhuizen (1938)**



Daniel Z. Freedman (1940)



Stanley Deser ( 1927 )



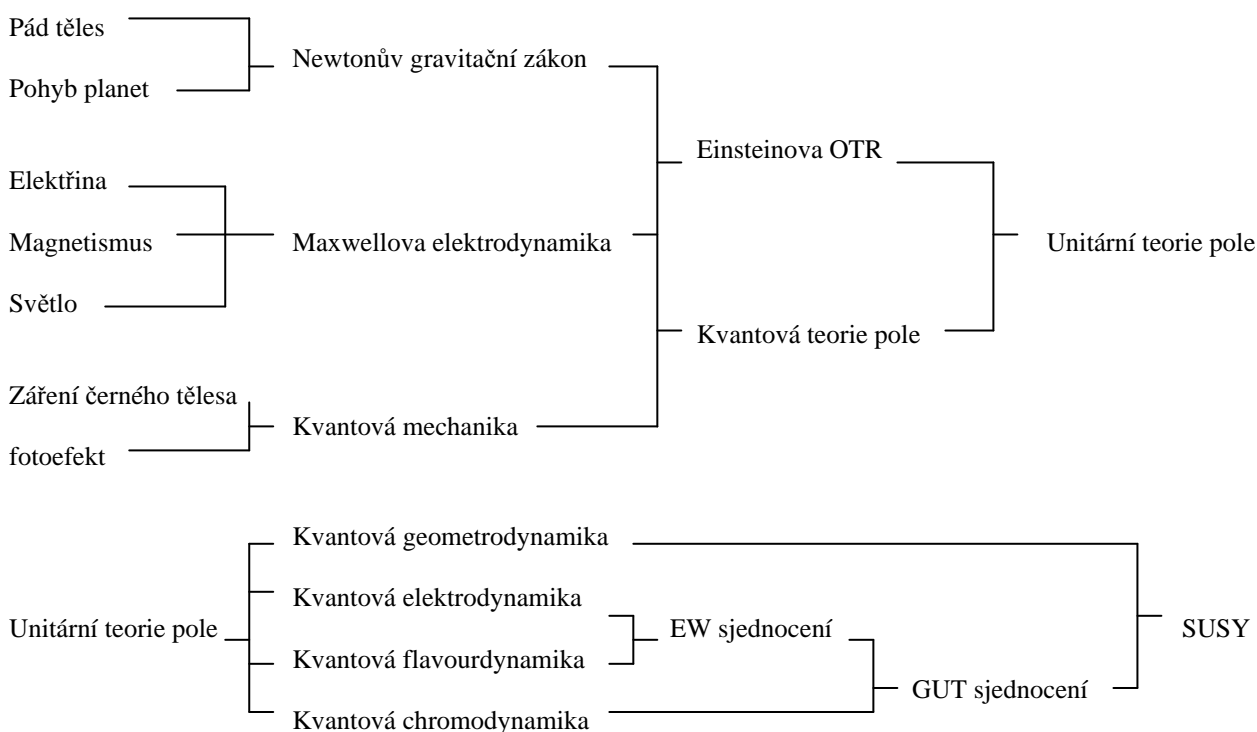
Sergio Ferrara (1945)

V supersymetrických unitárních teoriích elementárních částic je ke každé částici přiřazen její tzv. **superpartner** - každý boson má svého fermionového superpartnera a fermion má naopak svůj bosonový protějšek. Nejčastěji diskutované supersymetrické částice jsou zmíněná **gravitina** a dále též **photino** - slabě interagující hmotné částice se spinem  $1/2$ , zaváděné jako supersymetrický partner fotonu. Někdy se diskutují i supersymetrické částice k fermionům: **sleptony** jako superpartneři k leptonům, např. **selectron**, **smion**, **sneutrino** (zvané též **neutralino** - mělo by mít vysokou hmotnost desítky GeV), či kvarkům – **skvark**. Nejjednodušší supergravitační teorie - tzv. **prostá supergravitace** vytvořená v r. 1976, byla spíše modelovým experimentem, protože obsahuje minimální množství polí; nezahrnuje ani kvarky a leptony. Fyzikálně realističtější varianty supergravitačních teorií se snaží rozšířit počet spinorových generátorů a zavést též generátory vnitřních symetrií. Vzniká tak **rozšířená supergravitace**, která obsahuje  $4N$  spinorových generátorů  $Q^\alpha_i$  ( $\alpha = 1, 2, \dots, N$ ) nesoucích index vnitřní symetrie  $\alpha$ . Omezíme-li se přitom na částice (pole) se spinem nepřesahujícím hodnotu 2, v prostoročase dimenze  $d = 4$  jsou možné  $N$ -rozšířené supergravitační teorie s  $N = 1, 2, \dots, 8$ . Nejjednodušší rozšířenou supergravitační teorií je  $N = 2$ -supergravitace sjednocující Maxwellovu a Einsteinovu teorii; k fotonům a gravitonům jsou zde přiřazena dvě gravitina. Maximálně rozšířená  $N = 8$ -supergravitace obsahuje: jedno gravitační pole (graviton), 8 polí Raritových-Schwingerových (gravitin), 28 vektorových polí (bosonů) se spinem 1, 56 spinorových polí (fermionů) se spinem  $1/2$  a 70 skalárních polí. Multiplety rozšířených

supergravitačních teorií mají tedy mnohem bohatší strukturu než v prosté supergravitaci. Avšak přesto, že obsahují nadměrný počet polí, neobsahují pole některých známých částic, např.  $\mu$ -mezonu.

Z unitarizačního schématu 3 vidíme dvě na první pohled **diametrálně odlišné cesty**: Einsteinovu geometrickou cestu končící Wheelerovou geometrodynamikou a cestu kvantových kalibračních teorií pole vedoucí k supergravitaci, která nemá s geometrickým charakterem nic společného.

Schéma 3



Protože Einsteinovo pojetí gravitace jako geometrické struktury prostoročasu vychází z velmi hlubokých a názorných principů, naskytá se přirozeně otázka, zda geometrickými prostředky nelze konstruovat i supergravitační teorie. Fyzikálně by to znamenalo, že "náboje" v supergravitačních teoriích by měly mít svůj původ v geometrické struktuře zobecněného prostoročasu, podobně jako gravitační "náboj" v OTR má původ v křivosti prostoročasu.

Zajímavou variantou vícedimenzionální unitární teorie, která se objevila v posledních desetiletích, je teorie tzv. **superstrun**. V této teorii se částice a kvanta polí interpretují jako vzbuzené stavy kmitů

(jednorozměrné) **relativistické struny** ve vícerozměrném prostoru (nejčastěji  $d = 10$ ). Tyto superstruny s charakteristickou délkou řádu Planckovy délky  $\approx 10^{-33}$  cm mohou být jak otevřené (s volnými konci), tak uzavřené, přičemž interakce superstrun spočívá buď ve spojení konců dvou strun (vznikne struna třetí), nebo v roztržení jedné struny na dvě části. Za hlavní výhodu teorie superstrun se považují její lepší renormalizační vlastnosti - nevyskytují se zde "ultrafialové" divergence. O teorii superstrun je pojednáváme níže v samostatné pasáži.

Skutečně se ukázalo, že supergravitace může být formulována jako geometrická teorie v superprostoru (superprostor vzniklý rozšířením Minkowského prostoročasu je obecně zakřivený a má navíc další rozměry spinorového charakteru) s použitím aparátu diferenciální geometrie zobecněného na situaci, kdy některé ze souřadnic antikomutují. Jedná se tedy o prostor s torzí, přičemž se ukázalo, že všechny komponenty křivosti mohou být vyjádřeny pomocí torze a jejích kovariantních derivací. Torze se tak stává fundamentálním geometrickým objektem v supergravitaci.

Nejnovější pokusy o **geometrickou formulaci supergravitace** tak vedou k určité "renezanci" Kaluzovy-Kleinovy teorie: konstruují se teorie v **mnoharozměrném ( $d > 4$ ) "prostoročase"**, které by za pomoci **spontánní kompaktifikace** mohly dát realistickou teorii v prostoročase efektivní dimenze  $d = 4$ . Mechanismus spontánní kompaktifikace spočívá v tom, že se hledá speciální vakuové řešení zobecněných Einsteinových rovnic v  $d$ -rozměrném prostoročase, odpovídající reprezentaci  $d$ -rozměrné variety ve tvaru

$$\mathcal{M}^d = \mathcal{M}^4 \times B^{d-4}, \quad (9.189)$$

kde  $\mathcal{M}^4$  je čtyřrozměrný prostoročas (většinou se uvažuje Minkowského) a  $B^{d-4}$  je kompaktní "vnitřní" prostor.

Byly studovány zobecněné Kaluzovy-Kleinovy unitární teorie pro různé dimenze  $d > 4$ . Aby taková teorie byla úplná a realistická, tj. aby sjednocovala všechny známé interakce částic, musí obsahovat fenomenologickou grupu vnitřní symetrie  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$ . Jak nedávno ukázal Witten, aby "vnitřní" prostor  $B^n$  měl  $SU(3) \times SU(2) \times U(1)$  - grupu izometrií, musí být jeho minimální dimenze rovna  $n = 7$  tj. dimenze výchozí variety Kaluzovy-Kleinovy teorie musí být  $d = 11$ , což

se shoduje s výsledkem pro maximální ( $N = 8$ )-supergravitaci v ( $d = 4$ )-prostorově čase.

V nejranějších etapách vývoje vesmíru při vysokých teplotách, kdy ještě nenastala spontánní kompaktifikace, prostorově čas mohl mít všech svých 11 rozměrů. Spontánní kompaktifikace, která potom nastala, mohla vést v principu ke všem možným vakuovým řešením, takže se mohly vytvořit "ostrovky", v nichž prostorově čas může mít různou topologii, počet rozměrů i signaturu metriky. Nejranější vesmír by tak mohl být jakýmsi "oknem" do vyšších dimenzí zobecněné Kaluzovy-Kleinovy unitární teorie.

Pro ověření správnosti cesty nastoupené supergravitací by bylo podstatné, kdyby se podařilo experimentálně prokázat existenci gravitonů, která jsou pro supergravitační teorie charakteristická.

## Superalgebry a supersymetrie



**Hermann Günther Grassmann (1809 – 1877)**

V minulé kapitole jsme se důkladněji seznámili s obyčejnými algebry, jakou je například algebra Poincaré – Lieova algebra, generující izometrii časoprostoru včetně posunutí. Za její bázi lze tedy vybrat  $\mathbf{J}^{\mu\nu}$ , tedy generátory Lorentzovy grupy (resp. otočení) a  $\mathbf{p}^\nu$ , generátory posunů (značení se kryje s označením momentu hybnosti a hybnosti, a snad již mnozí z vás poznali, že to není náhoda).

Komutační relace budou

$$\begin{aligned}
[\mathbf{p}^\mu, \mathbf{p}^\mu] &= 0, \\
[\mathbf{p}^\mu, \mathbf{J}^{\alpha\beta}] &= i(g^{\mu\beta} \mathbf{p}^\alpha - g^{\mu\alpha} \mathbf{p}^\beta), \\
[\mathbf{J}^{\mu\nu}, \mathbf{J}^{\alpha\beta}] &= -i(g^{\nu\alpha} \mathbf{J}^{\mu\beta} - g^{\mu\alpha} \mathbf{J}^{\nu\beta} + g^{\mu\beta} \mathbf{J}^{\nu\alpha} - g^{\nu\beta} \mathbf{J}^{\mu\alpha}),
\end{aligned} \tag{9.190}$$

kde  $g^{\mu\nu}$  je metrický tenzor. Jacobiho identitu můžete zkontrolovat přímým výpočtem.

Kromě obyčejných algeber se dnes hodně mluví i o **graduovaných algebrách** neboli **superalgebrách**. Ty lze psát jako lineární obal prvků, kterými již nebudou pouze operátory, které jsou zvyklé s většinou ostatních komutovat, nýbrž také grassmannské operátory, které spolu typicky navzájem antikomutují  $ab = -ba$  (ovšem s negrassmannskými typicky komutují) a u nichž je tedy lepší hovořit o **antikomutátoru**  $\{a, b\} = ab + ba$ . Jednotným jazykem, **superkomutátor** neboli

**graduovaný komutátor** dvou operátorů  $[a, b]_{grad}$  je antikomutátorem, pokud jsou oba grassmannské, jinak je komutátorem.

Chceme-li transformovat objekty prvkem grupy  $g$  blízkým jednotkovému, napíšeme tento jako  $g = 1 + d\zeta^i s_i$ , kde  $d\zeta^i$  jsou infinitesimální parametry a  $s$  báze generátoru. Pokud jsou  $s_i$

grassmannské, musí být grassmannské i  $d\zeta^i$ ; představme si pod nimi grassmannské “číselné” parametry, např. grassmannské operátory, které komutují se všemi negrassmannskými a antikomutují se všemi grassmannskými.

Jestliže fyzika pracovala do šedesátých nebo sedmdesátých let jen s algebrami, působením jejichž transformací mohly přecházet elektrony do neutrin, červené kvarky do modrých anebo se systémy mohly otáčet nebo posouvat, v pozdějších letech promýšleli teoretici i tzv.

**supersymetrie**, pomocí nichž lze transformovat bosony na fermiony a naopak. Uvedeme jako příklad supersymetrii na světelném kuželi v deseti-rozměrném časoprostoru, která proti algebře Poincaré obsahuje navíc i grassmannské operátory  $Q^a$  a  $Q^{\dot{a}}$ . Pohledme tedy zběžně na některé superkomutátory algebry super-Poincaré:

$$\begin{aligned}
\{Q^a, Q^b\} &= 2\mathbf{p} + \delta^{ab}, \\
\{Q^{\dot{a}}, Q^{\dot{b}}\} &= 2\mathbf{p} - \delta^{\dot{a}\dot{b}}, \\
\{Q^a, Q^{\dot{b}}\} &= \sqrt{2}\gamma_{ab}^i \mathbf{p}^i, \\
[J^{i-}, Q^a] &= \frac{i}{\sqrt{2}}\gamma_{aa}^i Q^{\dot{a}}.
\end{aligned} \tag{9.191}$$

(Indexy  $a$  resp.  $\dot{a}$  jsou osmiznačné spinorové indexy grupy  $SO(8)$ ,  $\gamma$  jsou Diracovy matice, indexy  $\pm$  odpovídají kalibraci na světelném kuželi

$v^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}}(v^0 \pm v^s)$  atd.) Všimněte si, že antikomutátor dvou

supersymetrií je úměrný posunu. To všechno má názorné vysvětlení, rozšíříme-li pojem prostoru na superprostor, který kromě komutujících souřadnic navíc obsahuje i antikomutující, protože v něm je supersymetrie geometrickou operací.

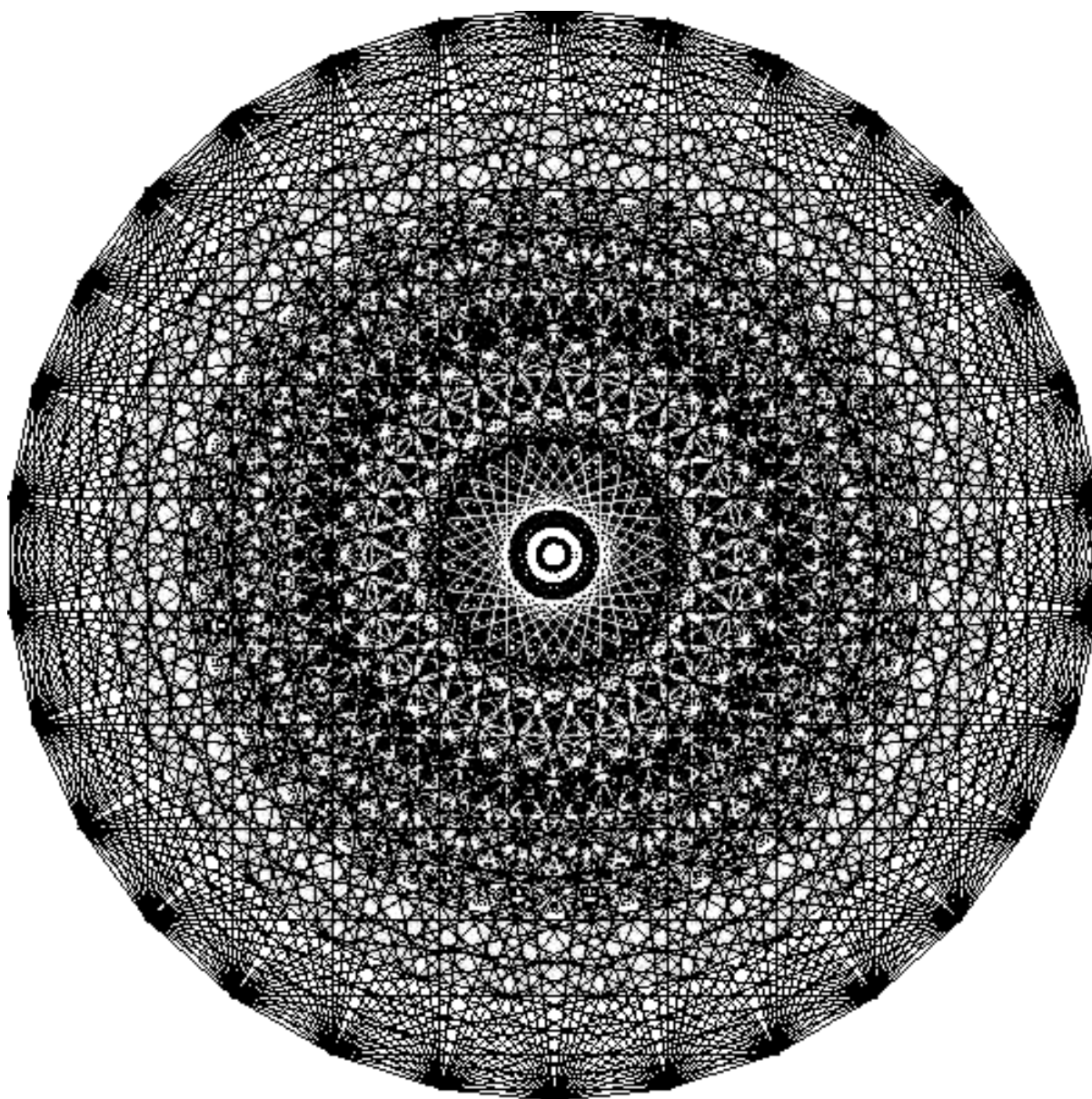
Supersymetrie zajišťuje teoriím zajímavé vlastnosti: její začlenění do teorie strun odstraní z této teorie tachyony (částice pohybující se nadsvětelnou rychlostí), jelikož např.  $\{Q^i, Q^i\} = 2\mathbf{p}^-$  tj.  $\mathbf{p}^- = Q^i Q^i$ ,

operátor  $Q^i$  je hermitovský a střední hodnota  $\mathbf{p}^-$  ve stavu  $|\psi\rangle$  je tedy nezáporná, poněvadž jde o čtverec normy  $\langle\psi|Q^i Q^i|\psi\rangle$  vektoru  $Q^i|\psi\rangle$ .

Navíc implikuje stejný počet fermionových a bosonových stavů na každé hladině; každý fermion má svého bosonového partnera a naopak (**fotino, gluino, gravitino, slepton, skvark, ...**). Supersymetrie zaručuje v mnoha případech vymizení kosmologické konstanty (hustoty vakua) a záhadou naopak zůstává, proč je kosmologická konstanta podle pozorování přinejmenším o 113 řádů menší než očekávané náhodné příspěvky od různých polí i v našem světě, který supersymetrický není nebo kde je supersymetrie narušena. A za zmínku stojí i fakt, že supersymetrie klade omezující podmínky na dimenzi časoprostoru. Již jen poznamenejme, že podobně, jako obecná teorie relativity požaduje, aby se parametry Lorentzovy transformace mohly měnit od bodu k bodu, lze tuto lokálnost požadovat od supersymetrie a získáme tak různé teorie **supergravitace**.

## Obří vyňatá grupa

Cílem této sekce je ukázat explicitní konstrukci **obří grupy** (resp. odpovídající algebry)  $E_8$  provedenou Michaelem B.Greenem, Johnem H.Schwarzem a Edwardem Wittenem. Proč jí říkáme obří? Protože má ze všech prostých vyňatých grup největší dimenzi (248) a navíc její symetrie (chápeme-li míru symetrie jako poměr dimenze a kvadrátu ranku, aby se klasické grupy  $SO(n)$  asymptoticky touto veličinou blížily konstantě), dosahuje rekordní hodnoty  $31/8$ .



Obr. 9.8: Superalgebra  $E_8$





Michael Boris Green (1946)



John Henry Schwarz (1941)



Edward Witten (1951)

Konstrukci začneme podalgebrou  $SO(16)$ , kterou generuje  $16 \cdot 15/2 = 120$  operátorů  $\mathbf{J}_{ij} = -\mathbf{J}_{ji}$ , splňujících obvyklé komutační relace

$$[\mathbf{J}_{ij}, \mathbf{J}_{kl}] = \mathbf{J}_{il} \delta_{jk} - \mathbf{J}_{jl} \delta_{ik} - \mathbf{J}_{ik} \delta_{jl} + \mathbf{J}_{jk} \delta_{il} \quad (9.192)$$

a přidáme k nim 128 generátorů  $\mathbf{Q}_\alpha$  (celková dimenze tedy bude  $120 + 128 = 248$ ), které se transformují jako spinory  $SO(16)$  dané (řekněme kladné) chiralitty, čímž míníme, že

$$[\mathbf{J}_{ij}, \mathbf{Q}_\alpha] = \mathbf{Q}_\beta (\sigma_{ij})_{\beta\alpha} \cdot \quad (9.193)$$

K dokončení specifikace algebry musíme dodefinovat zbývající komutátor  $[\mathbf{Q}_\alpha, \mathbf{Q}_\beta]$  (je to komutátor a ne antikomutátor, protože usilujeme o definici algebry a nikoli superalgebry). Teorie grupy  $SO(16)$  však tento komutátor až na normalisaci určuje jednoznačně;

$$[\mathbf{Q}_\alpha, \mathbf{Q}_\beta] = (\sigma_{ij})_{\beta\alpha} J_{ij} \cdot \quad (9.194)$$

Kladný faktor  $\kappa$ , kterým by nám teorie  $SO(16)$  dovolila násobit pravou stranu, lze absorbovat do  $\sqrt{\kappa}$ -násobného přeškálování  $\mathbf{Q}_\alpha$ , jejichž normalizaci totiž žádná z předchozích formulí neomezovala. I záporné  $\kappa$  by vedlo k izomorfní algebře; jeho efekt by byl podobný užití spinoru

druhé (zrcadlové) chiralitě. Jestliže tedy Lieova algebra  $\mathbf{E}_8$  s rozkladem přidružené reprezentace

$$\{248\} = \{120\} \oplus \{128\} \quad (9.195)$$

vůči její maximální podgrupě **Spin(16)** existuje, na jejích komutačních relacích daných prvými třemi vysazenými rovnicemi není co štelovat. K utvrzení se, že formule opravdu definují Lieovu algebru, je třeba ověřit Jacobiho identitu (už její splnění nám garantuje existenci matic, které splňují tytéž relace jako abstraktní operátory  $J_{ij}$  a  $Q_\alpha$ , tj. existenci reprezentace.) Z cvičných důvodů doporučujeme explicitní kontrolu  $JJJ$  identity, která pouze vyjadřuje, že  $J_{ij}$  formují Lieovu algebru,  $JJQ$  identity, která zase potvrzuje, že se  $Q_\alpha$  opravdu transformují jako reprezentace **SO(16)**. Ani  $JQQ$  identita neklade zvláštní požadavky a její platnost je podložena zvláště tím, že  $\sigma_{ij}$  matice splňují touž algebru jako  $J_{ij}$ . Opravdu zásadním případem volající po kontrole je identita

$$\left[ [Q_\alpha, Q_\beta], Q_\gamma \right] + \left[ [Q_\beta, Q_\gamma], Q_\alpha \right] + \left[ [Q_\gamma, Q_\alpha], Q_\beta \right] = 0. \quad (9.196)$$

Rozepsání vede k požadavku

$$\forall \alpha, \beta, \gamma, \delta: \sum_{ij} (\sigma_{ij})_{\alpha\beta} (\sigma_{ij})_{\gamma\delta} + (\sigma_{ij})_{\beta\gamma} (\sigma_{ij})_{\alpha\delta} + (\sigma_{ij})_{\gamma\alpha} (\sigma_{ij})_{\beta\delta} = 0 \quad (9.197)$$

který máme dokázat pro případ, že  $\alpha, \beta, \gamma$  jsou indexy jedné chiralitě. Všimneme si, že produkt dvou spinorů může být rozepsán na kombinaci úplného systému gamma-matic  $\gamma_{i_1 \dots i_n}$  pro  $n = 0 \dots 16$ , čili nulovost

poslední formule je ekvivalentní nulovosti jejího zúžení s  $(\gamma_{k_1 \dots k_n})_{\alpha\beta}$  pro

všechna  $n$  a  $k_1 \dots k_n$ . Díky shodné chiralitě indexů  $\alpha, \beta$  se staráme jen o sudá  $n$  a antisymetrie dokazované formule v  $\alpha, \beta$  nám dává možnost omezit se na případ antisymetrických  $\gamma_{k_1 \dots k_n}$ , což díky elementárním vlastnostem gamma-matic znamená  $n = 2, 6, 10, 14$ . Ve skutečnosti nám vztah

$$\gamma_{i_1 \dots i_k} = \frac{\varepsilon_{i_1 \dots i_6} \gamma_{i_{k+1} \dots i_6} \bar{\gamma}}{(16-k)!} \quad (9.198)$$

a fakt, že operátor chiralit  $\bar{\gamma}$  lze vynechat, účinkuje-li na spinory kladné chiralit, zmenší práci na polovinu. Že nám stačí prohlédnout jen  $n = 2$  a  $n = 6$  lze spatřit už na shodnosti počtu nezávislých členů v antisymetrické kombinaci  $Q_\alpha$  a  $Q_\beta$  (nalevo)

$$\frac{128 \cdot 127}{2 \cdot 1} = \frac{16 \cdot 15}{2 \cdot 1} + \frac{16 \cdot 15 \cdot 14 \cdot 13 \cdot 12 \cdot 11}{6 \cdot 5 \cdot 4 \cdot 3 \cdot 2 \cdot 1} \quad (9.199)$$

a součtu počtů nezávislých komponent  $\gamma_{i_1 \dots i_n}$  pro  $n = 2$  a  $n = 6$ .

Zúžení se  $(\sigma_{kl})_{\alpha\beta} = -(\sigma_{kl})_{\alpha\beta}$  dá

$$-(\text{Tr}_+ \sigma_{kl} \sigma_{ij}) \cdot (\sigma_{ij})_{\gamma\delta} + 2(\sigma_{ij} \sigma_{kl} \sigma_{ij})_{\gamma\delta}, \quad (9.200)$$

což se užitím Diracových identit anuluje; první resp. druhý člen se rovnají  $\pm 64(\sigma_{kl})_{\gamma\delta}$ . Faktor 64 u druhého členu vzejde z inventury kladných a záporných příspěvků (znaménko podle parity počtu prvků průniku množin indexů  $\{i, j\}$  a  $\{k, l\}$ )  $2 \cdot \frac{1}{2} + 14 \cdot \frac{13}{2} - 14 \cdot 2$ . Kontrakcí s  $(\gamma_{i_1 \dots i_6})_{\alpha\beta}$  dostaneme (první člen teď již nepřispěje)

$$2(\sigma_{ij} \gamma_{i_1 \dots i_6} \sigma_{ij})_{\gamma\delta}, \quad (9.201)$$

což opět vymizí: klíčovou je zde rovnost  $45 \cdot 1 + 1 \cdot 15 - 10 \cdot 6 = 0$  při bilanci příspěvků  $\pm \gamma_{i_1 \dots i_6}$ .

Přidání spinoru k přidružené reprezentaci grupy  $SO(N)$  vede k nové Lieově algebře jen ve třech případech: kromě  $N = 16$ , což přináší  $\mathbf{E}_8$ , se dá v úplné analogii sestavit 52-rozměrná vyňatá grupa  $\mathbf{F}_4$  přidáním 16-rozměrného spinoru k 36-rozměrné přidružené reprezentaci  $SO(9)$ . Podobnost je opravdu velkolepá; v 16-rozměrné spinorové reprezentaci

$SO(9)$  lze vzít za úplný soubor matic matice  $\gamma_{i_1 \dots i_n}$  pro  $n = 0, 2, 4, 6, 8$  a antisymetrie nám dovolí omezit se opět na  $n = 2$  a  $n = 6$ . Vzorce zůstanou, jen čísla se obmění;  $\pm 8$  místo  $\pm 64$ , osmičku v druhém členu dostaneme jako  $2 \cdot \frac{1}{2} + 7 \cdot \frac{6}{2} - 7 \cdot 2$  a místo  $45 + 15 - 60$  bude krácení u  $n = 6$  vypadat  $3 \cdot \frac{2}{2} + 6 \cdot \frac{2}{2} - 3 \cdot 6$ .

Třetí možností je přidání osmirozměrného spinoru k přidružené reprezentaci  $SO(8)$ , čímž získáme grupu  $SO(9)$  způsobem, který se liší  $SO(8)$  rotací triality od standardnější a jednodušší konstrukce - totiž přidání 8-vektoru  $J_i = J_{i9}$  k přidružené reprezentaci  $SO(8)$ .

Nyní bychom rádi popsali některé podgrupy  $E_8$ . Jednu maximální podgrupu -  $SO(16)$  - jsme již uvedli. Ta obsahuje maximální podgrupu  $SO(10) \times SO(6)$ , vůči níž se její přidružená reprezentace rozpadá na přidružené reprezentace složek a na produkt vektorů

$$\{120\} = (\{45\} \otimes \{1\}) \oplus (\{1\} \otimes \{15\}) \oplus (\{10\} \otimes \{6\}) . \quad (9.202)$$

Jak se vůči této podgrupě transformuje spinor  $SO(16)$ ? Šestnáct  $\gamma$ -matic  $\gamma_{1 \dots 16}$ , pomocí nichž definujeme tvar operátorů ve spinorové reprezentaci, se rozpadne na prvních deset  $\gamma_{1 \dots 10}$ , které můžeme považovat za matice  $SO(10)$ , a posledních šest  $\gamma_{11 \dots 16}$ , které zamětnáme jako matice  $SO(6)$ . Spinor  $SO(16)$  je tedy alespoň v prvním přiblížení součinem spinorů  $SO(10)$  a  $SO(6)$ . Operátor chiralidy  $SO(16)$

$$\bar{\gamma} = \gamma_1 \gamma_2 \cdots \gamma_{16} \quad (9.203)$$

je zjevně součinem operátoru chiralidy  $SO(10)$

$$\gamma^{(10)} = \gamma_1 \gamma_2 \cdots \gamma_{10} \quad (9.204)$$

a podobného u  $SO(6)$

$$\gamma^{(6)} = \gamma_{11} \gamma_{12} \cdots \gamma_{16} , \quad (9.205)$$

tedy

$$\bar{\gamma} = \gamma^{(10)} \gamma^{(6)} . \quad (9.206)$$

Tedy spinor  $Q_\alpha$  pozitivní chiralilty grupy  $SO(16)$ , který při konstrukci  $E_8$  přidáváme k  $J_{ij}$ , se rozpadá na dva kusy s vlastními čísly

$$\gamma^{(10)} = \gamma^{(6)} = +1 \quad (9.207)$$

resp.

$$\gamma^{(10)} = \gamma^{(6)} = -1 . \quad (9.208)$$

Označíme-li spinory pozitivní či negativní chiralilty grupy  $SO(10)$  resp.  $SO(6)$  jako  $\{16\}$  či  $\{\overline{16}\}$  resp.  $\{4\}$  či  $\{\overline{4}\}$  (dimenze spinorových reprezentací jsme již diskutovali), máme rozklad  $\{128\}$  grupy  $SO(16)$

$$\{128\} = (\{16\} \otimes \{4\}) \oplus (\{\overline{16}\} \otimes \{\overline{4}\}) \quad (9.209)$$

který ve spojení s rozkladem přidružené reprezentace výše, udává způsob transformace fundamentální reprezentace  $E_8$  (u této grupy je to tatáž co přidružená) vůči této podgrupě.

Nyní máme tu milou povinnost představit vám grupu  $E_6$  jako podgrupu  $E_8$ . Jako předehru si uvědomme, že ve  $\{4\}$  grupy  $SO(6)$  jsou generátory hermitovskými  $4 \times 4$  maticemi, jejichž bezstopost zabezpečuje prostota grupy  $SO(6)$ ; jsou tedy  $SO(4)$  generátory - neboli  $SO(6)$  je podalgebrou  $SO(4)$ . Postřehnutím shodné dimenze 15 u obou dojdeme k přesvědčení, že nemůže jít o vlastní podalgebru: musí jít o izomorfní algebry. Tato cesta nás současně poučila, že fundamentální  $\{4\}$  a  $\{\overline{4}\}$  grupy  $SO(4)$  se chovají v  $SO(6)$  jako spinory kladné resp. záporné chiralilty. Naopak, fundamentální (vektorová) reprezentace  $\{6\}$  grupy  $SO(6)$  je

antisymetrickým tenzorem druhého ranku grupy  $SO(4)$ , který má dimenzi  $4 \cdot \frac{3}{2} \cdot 1 = 6$ , jak má být. Je jedno, zda bereme  $\{4\} \wedge \{4\}$  nebo  $\{\bar{4}\} \wedge \{\bar{4}\}$ ; tyto reprezentace jsou ekvivalentní, jelikož je lze přepočítávat pomocí antisymetrického tenzoru Levi-Civitty  $v_{\alpha\beta} = \epsilon_{\alpha\beta\gamma\delta} \frac{v^{\gamma\delta}}{2}$ .



Tullio Levi-Civita (1873 – 1941)

A tak mluvmě místo o podalgebře  $SO(10) \times SO(6)$  o  $SO(10) \times SU(4)$ . Dále,  $SU(4)$  má očividnou podgrupu  $SU(3) \times U(1)$ . Značíme-li horními indexy  $U(1)$  náboje, rozkládá se nám  $\{4\}$  grupy  $SU(4)$  na  $\{1\}^3 \oplus \{3\}^{-1}$ ,  $\{6\}$  grupy  $SU(4)$  - právě ztotožněný s antisymetrickým součinem dvou  $\{4\}$ , se transformuje jako  $\{3\}^2 \oplus \{\bar{3}\}^{-2}$  a přidružená reprezentace  $SU(4)$ , což je vlastně  $\{4\} \otimes \{\bar{4}\} - \{1\}$  ( $-\{1\}$  značí odstraněný singlet - stopu) se pod  $SU(3) \times U(1)$  transformuje jako  $\{8\}^0 \oplus \{3\}^{-4} \oplus \{\bar{3}\}^{-4} \oplus \{1\}^0$ , kde  $\{8\}$  znamená přidruženou  $SU(3)$ . Kombinací všech faktů docházíme k vytouženému rozkladu přidružené reprezentace  $E_8$  vůči podgrupě  $SO(10) \times SU(4) \times U(1)$ :

$$\begin{aligned}
\{\mathbf{248}\} = & \left( (\{\mathbf{45}\} \otimes \{\mathbf{1}\})^0 \oplus (\{\mathbf{1}\} \otimes \{\mathbf{1}\})^0 \oplus (\{\mathbf{16}\} \otimes \{\mathbf{1}\})^3 \oplus (\{\overline{\mathbf{16}}\} \otimes \{\mathbf{1}\})^{-3} \right) \oplus \\
& \oplus \left( (\{\mathbf{16}\} \otimes \{\mathbf{3}\})^{-1} \oplus (\{\mathbf{10}\} \otimes \{\mathbf{3}\})^2 \oplus (\{\mathbf{1}\} \otimes \{\mathbf{3}\})^{-4} \right) \oplus \\
& \oplus \left( (\{\overline{\mathbf{16}}\} \otimes \{\overline{\mathbf{3}}\})^1 \oplus (\{\mathbf{10}\} \otimes \{\overline{\mathbf{3}}\})^{-2} \oplus (\{\mathbf{1}\} \otimes \{\overline{\mathbf{3}}\})^4 \right) \oplus (\{\mathbf{1}\} \otimes \{\mathbf{8}\})^0 .
\end{aligned}
\tag{9.210}$$

Zvláštní pozornosti zaslouží 78 generátorů, které jsou  $SU(3)$  singlety. Neb komutátor dvou  $SU(3)$  singletů musí být opět  $SU(3)$  singlet, lze usoudit, že těchto 78 generátorů tvoří uzavřenou podalgebru (těch generátorů, které s onou  $SU(3)$  komutují, někdy zvanou **centralizátor** grupy  $SU(3)$ ); je známa jako vyňatá Lieova algebra  $\mathbf{E}_6$ . Evidentní je maximální subalgebra  $SO(10) \times U(1)$ , vůči níž se přidružená reprezentace  $\mathbf{E}_6$  rozkládá podle předpisu

$$\{\mathbf{78}\} = \{\mathbf{45}\}^0 \oplus \{\mathbf{16}\}^3 \oplus \{\overline{\mathbf{16}}\}^{-3} \oplus \{\mathbf{1}\}^0 .
\tag{9.211}$$

A co víc, rozklad  $\{\mathbf{248}\}$  obsahuje 27 kopií  $\{\mathbf{3}\}$  grupy  $SU(3)$ . Tyto se musí zobrazovat na sebe při  $\mathbf{E}_6$  transformacích, a tak musí mít  $\mathbf{E}_6$  nějakou 27-rozměrnou reprezentaci s  $SO(10) \times U(1)$  rozkladem

$$\{\mathbf{27}\} = \{\mathbf{16}\}^{-1} \oplus \{\mathbf{10}\}^2 \oplus \{\mathbf{1}\}^{-4} .
\tag{9.212}$$

Jistotu zvýšíme ověřením, že  $16 \cdot (-1) + 10 \cdot 2 + 1 \cdot (-4) = 0$  – stopa  $U(1)$  generátoru v reprezentaci  $\{\mathbf{27}\}$  grupy  $\mathbf{E}_6$  je nula. To je v soulase s faktem, že stopa každého generátoru nějaké prosté Lieovy algebry vymizí v každé reprezentaci (onen  $U(1)$  generátor je jedním ze 78 generátorů  $\mathbf{E}_6$ ). Tím také dokazujeme ireducibilitu, jelikož tato stopa by se neanulovala po vyškrtnutí některých členů rozkladu  $\{\mathbf{27}\}$ . Komplexně sdruženou reprezentací jsou  $\{\overline{\mathbf{3}}\}$

$$\{\overline{\mathbf{27}}\} = \{\overline{\mathbf{16}}\}^1 \oplus \{\mathbf{10}\}^2 \oplus \{\mathbf{1}\}^4 .
\tag{9.213}$$

Poslední vysazené formule nejsou zjevně vzájemně izomorfní, takže  $\{27\}$  a  $\{\overline{27}\}$  jsou komplexní reprezentace, neekvivalentní k nim komplexně sdruženým.  $\mathbf{E}_6$  je opravdu jedinou vyňatou Lieovou algebrou, která vůbec komplexní reprezentace má. Posbíráním členů lze dojít k rozkladu  $\{248\}$  grupy  $\mathbf{E}_8$  vůči maximální podgrupě  $\mathbf{E}_6 \times SU(3)$ .

$$\{248\} = (\{78\} \otimes \{1\}) \oplus (\{1\} \otimes \{8\}) \oplus (\{27\} \otimes \{3\}) \oplus (\{\overline{27}\} \otimes \{\overline{3}\}) . \quad (9.214)$$

Užijeme-li maximální podgrupu  $SU(2) \times U(1)$  grupy  $SU(3)$  a označíme-li horními indexy  $U(1)$  náboj, máme

$$\begin{aligned} \{248\} = & (\{78\} \otimes \{1\})^0 \oplus (\{1\} \otimes \{3\})^0 \oplus (\{1\} \otimes \{2\})^{-3} \oplus \\ & \oplus (\{1\} \otimes \{2\})^3 \oplus (\{1\} \otimes \{1\})^0 \oplus (\{27\} \otimes \{1\})^2 \oplus \quad (9.215) \\ & \oplus (\{27\} \otimes \{2\})^{-1} \oplus (\{\overline{27}\} \otimes \{1\})^{-2} \oplus (\{\overline{27}\} \otimes \{\overline{2}\})^1 . \end{aligned}$$

Posbíráním  $SU(2)$  singletů dostaneme 133-rozměrnou přidruženou reprezentaci další vyňaté grupy  $\mathbf{E}_7$ , která se rozkládá pod maximální podgrupou  $\mathbf{E}_6 \times U(1)$  na

$$\{133\} = \{78\}^0 \oplus \{1\}^0 \oplus \{27\}^2 \oplus \{\overline{27}\}^{-2} . \quad (9.216)$$

Shromážděním dubletů (u grupy  $SU(2)$  je reprezentace  $\{2\}$  pseudoreálná a tedy izomorfní  $\{\overline{2}\}$ !) získáme fundamentální 56-rozměrnou reprezentaci  $\mathbf{E}_7$  s  $\mathbf{E}_6 \times U(1)$  rozkladem

$$\{56\} = \{1\}^{-3} \oplus \{1\}^3 \oplus \{27\}^{-1} \oplus \{\overline{27}\}^1 \quad (9.217)$$

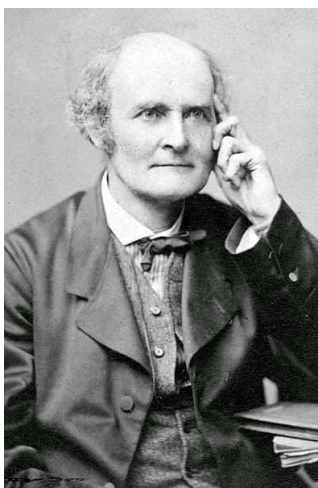


a můžeme tedy zapsat rozklad  $\{248\}$  grupy  $E_8$  pro maximální podgrupu  $E_7 \times SU(2)$

$$\{248\} = (\{133\} \otimes \{1\}) \oplus (\{56\} \otimes \{2\}) \oplus (\{1\} \otimes \{3\}) . \quad (9.218)$$

Kromě  $E_6$ ,  $E_7$ ,  $E_8$  známe ještě vyňaté grupy  $F_4$  a  $G_2$ . Zmíněnou  $SO(9)$  konstrukci grupy  $F_4$  lze vnořit do  $SO(16)$  výstavby  $E_8$  omezením se na  $J_{ij}$  pro  $i, j = 1 \dots 9$  a výběrem 16 složek spinoru ze  $\{128\}$ , která se vůči  $SO(9) \times SO(7)$  podgrupě  $SO(16)$  rozkládá na  $\{16\} \otimes \{8\}$ , stejně jako  $\{128'\}$ .

Zajímavý je centralizátor grupy  $F_4$  v  $E_8$ . Musí jím být kombinace  $J_{ij}$  (spinory  $Q_\alpha$  sotva donutíme komutovat s ostatními), a to podgrupa  $SO(7)$  (aby komutovala s  $SO(9)$  podgrupou  $F_4$ ). Navíc musí zachovávat náš výběr  $\{16\} \otimes \{1\}$  z  $\{16\} \otimes \{8\}$ , tj. půjde o podgrupu  $SO(7)$  fixující jeden element osmírozměrné spinorové reprezentace. Této grupě se říká  $G_2$  a je to současně grupa symetrií Cayleyovy algebry v tělese  $O$  všech oktonionů.



Arthur Cayley (1821 – 1895)

Tedy  $E_8$  obsahuje podgrupu  $F_4 \times G_2$ .

Mimo jiné, trojindexový antisymetrický invariant lze teď získat z invariantního spinoru  $s_\alpha$  jako

$$y^{mno} = s_\alpha \tilde{\gamma}_{\alpha\beta}^m \tilde{\gamma}_{\beta\gamma}^n \tilde{\gamma}_{\gamma\delta}^o s_\delta , \quad (9.219)$$

kde  $\tilde{\gamma}^i = \gamma^i \gamma^8$  jsou gamma-matice  $SO(7)$  upravené tak, aby působily uvnitř reprezentace, splňující

$$\{\tilde{\gamma}^i, \tilde{\gamma}^j\} = -\delta^{ij}. \quad (9.220)$$

A očekávali byste jiný rozpad  $\{248\}$  grupy  $E_8$  vůči podgrupě  $F_4 \times G_2$  než direktní sumu přidružených reprezentací a produktu fundamentálních

$$\{248\} = (\{52\} \otimes \{1\}) \oplus (\{26\} \otimes \{7\}) \oplus (\{1\} \otimes \{14\}) ? \quad (9.221)$$

## 1) Topologická kvantová teorie pole

### Geometrodynamika

Elektrické náboje (a jejich proudy) jsou zdroji elektromagnetického pole, avšak zároveň jsou čímsi cizorodým v teorii samotného elektromagnetického pole – jakási substance odlišná od pole.

V místech kladných elektrických nábojů elektrické siločáry začínají a vycházejí na všechny strany, do míst záporných elektrických nábojů siločáry ze všech stran vstupují a tam končí. Maxwellovy rovnice pole zde neplatí.

Celkový náboj v libovolné části prostoru lze podle Gaussovy věty zjistit tak, že vyšetřovanou oblast obklopíme myšlenou uzavřenou plochou  $S$  a změříme intenzitu  $E$  elektrického pole ve všech místech této uzavřené plochy – určíme počet siločar které jdou dovnitř nebo ven.

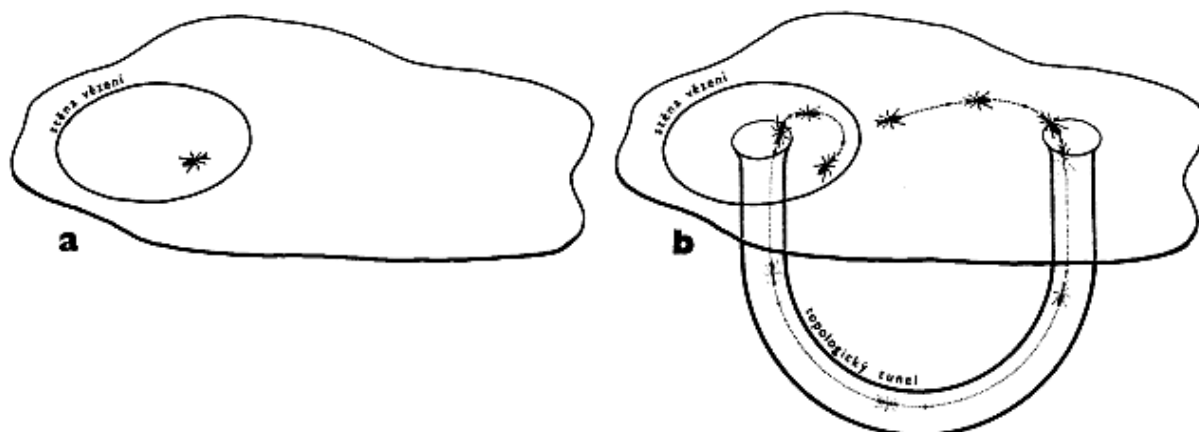
Nemohou se však siločáry které jdou dovnitř nějak nepozorovaně dostat zase ven aniž bychom to zaznamenali na uzavřené ploše tento vnitřek ohraničující (nebo podobně siločáry jdoucí ven se dostat zpět dovnitř)? Nakresleme si tuto situaci v dvojrozměrném případě.

Místo siločar použijeme myšlené mravence, které zde budeme považovat za dvojrozměrné bytosti.

Na obr. 9.9a má dvourozměrný svět mravenců obvyklé vlastnosti a mravenec nacházející se uvnitř uzavřené křivky se skutečně nijak nemůže dostat ven aniž by prošel touto hranicí.

Co však když dvourozměrný svět mravenců vypadá tak, jak je to znázorněno na obr. 9.9b ?

Mravenec uvězněný v oblasti ze všech stran obklopené uzavřenou křivkou může projít tunelem a podívat se zvenčí na svoje vězení. Z hlediska trojrozměrného okolí, do něhož je tato konstrukce vnořena, na tom není nic divného – mravenec, i když se pohybuje stále v rámci své dvourozměrné plochy (svého světa), podleze stěnu svého vězení tak říkajíc přes další rozměr.



**Obr.9.9. Vliv topologických vlastností prostoru na možnosti pohybu.**

a) Vězeň (mravenec) obklopený ze všech stran stěnou vězení se v prostoru (zde dvojrozměrném) s obvyklými topologickými vlastnostmi nijak nemůže dostat ven, aniž projde stěnou vězení.

b) V prostoru s vícenásobně souvislou topologií lze opustit uzavřené vězení bez nutnosti projití jeho stěnou. Mravenec může projít topologickým tunelem a podívat se zvenku na neporušenou stěnu svého vězení.

Z hlediska samotných dvourozměrných mravenců, pro něž žádný třetí rozměr neexistuje, se však stal jakýsi zázrak: vězeň, ze všech stran obklopený zdí, se najednou nějakým způsobem ocitl vně svého vězení. Příčina je v tom, že uvedený dvojrozměrný prostor má jiné topologické vlastnosti než na obr. 9.9a - je **vícenásobně souvislý**.

Uzavřená křivka zde již nemusí být hranicí oblasti uvnitř.

Lokální geometrické vlastnosti v každém místě přitom mohou být zcela obvyklé (jen mírné zakřivení).

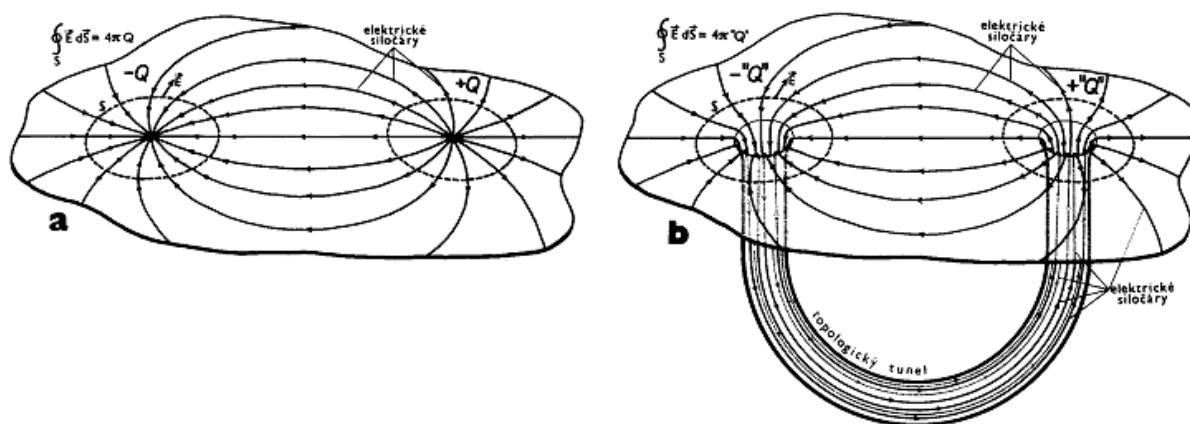
Když se teď vrátíme zpět k elektrickým nábojům, na obr. 9.10a je obvyklým způsobem v dvourozměrném nákresu znázorněn kladný elektrický náboj.

Z kladného náboje dle dohody siločáry vycházejí a končí na záporném náboji.

Obklopíme-li náboj myšlenou uzavřenou plochou  $S$ , můžeme „spočítáním“ siločar jež vcházejí nebo vycházejí stanovit hodnotu náboje  $Q$  uvnitř.

Tam však žádný skutečný elektrický náboj nemusí být.

Při vhodné topologii prostoru, jak je znázorněno na obr. 9.10b, sice budou skrze uzavřenou plochu  $S$  siločáry vstupovat dovnitř, tam však nebudou končit, alebrž projdou topologickým tunelem do jiného místa prostoru, kde opět vyvěrají na povrch a vracejí se zpět.



**Obr.9.10. Klasická a topologická interpretace elektrických nábojů.**

a) Obvyklé chápání elektrického náboje  $Q$  jako "substance"; z níž vycházejí (nebo do níž vcházejí) siločáry buzeného elektrického pole.

b) Topologická interpretace elektrického náboje - neexistuje žádný "skutečný" náboj jako substance, siločáry nikde nezačínají ani nekončí, jsou jen zachyceny a procházejí topologickým tunelem, jehož hrdla se pak jeví jako "zdánlivé" náboje " $Q$ ".

Vnějšímu pozorovateli, měřícímu elektrické pole, se jedno ústí topologického tunelu jeví jako záporný náboj ( $-Q$  - siločáry jdou dovnitř), druhé hrdlo tunelu jako náboj kladný ( $+Q$  - siločáry jdou ven). Elektrické pole, jehož siločáry procházejí topologickým tunelem, všude vyhovuje Maxwellovým rovnicím.

V důsledku toho se celkový tok intenzity elektrického pole přes ústí tunelu nemůže měnit s časem, pokud se nemění topologie.

Nezáleží přitom na proměnnosti elektromagnetického pole, zakřivení prostoru, změnách průřezu topologického tunelu ani vzdálenosti obou jeho ústí. Tok elektrického pole

$$Q = \oint_S \mathbf{E} \cdot d\mathbf{S} \quad (9.222)$$

tedy vyhovuje zákonu zachování elektrického náboje.

Takováto **topologická interpretace elektrického náboje** je vlastně nábojem bez náboje. Žádné skutečné elektrické náboje neexistují, elektrické siločáry nemají začátky ani konce. Jsou pouze zachyceny a procházejí topologickým tunelem prostoru, jehož jednotlivá ústí se pak jeví jako kladné a záporné náboje. Tedy volné elektromagnetické pole ve vakuu bez nábojů může vlivem vhodné topologické struktury prostoru vytvářet efektivní elektrické náboje. Elektrický náboj se v tomto pohledu jeví jako nelokální vlastnost elektrodynamiky bez nábojů ve vícenásobně souvislém prostoru.

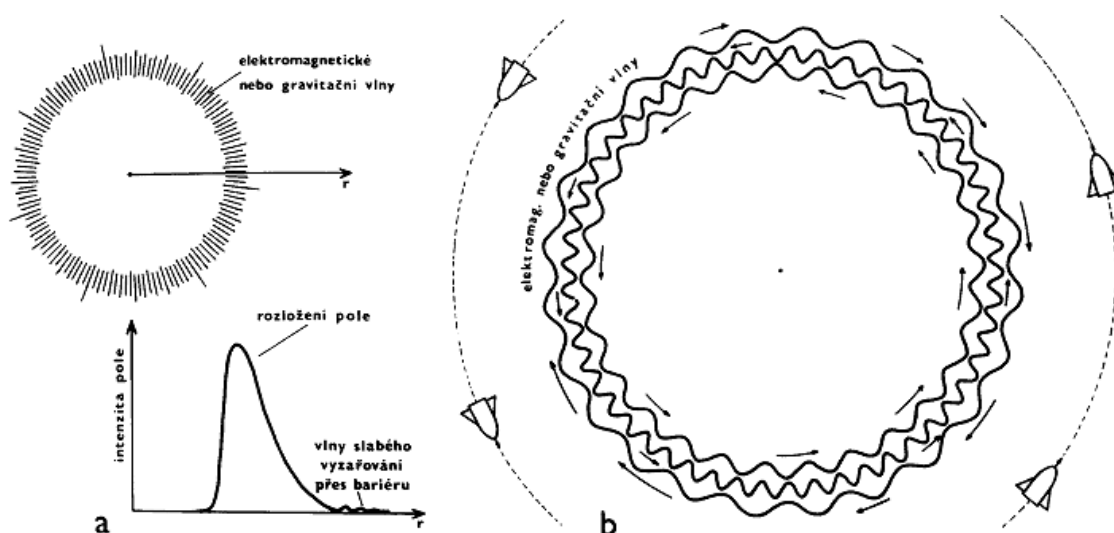
Na začátku tohoto odstavce jsme zdůraznili neuspokojivost koncepce, podle níž je pole buzeno zdrojem odlišným od pole. Pro elektromagnetické pole jako zdroj gravitace byla situace v zásadě úspěšně vyřešena, avšak v klasické fyzice je zdrojem gravitace též především obecná, blíže nespecifikovaná a nestrukturovaná hmota - objekty (tělesa, částice) mající hmotnost. V předchozích unitárních teoriích se částice pokoušeli interpretovat jako nějaké zvláštnosti (singularity) v poli, což však vede k řadě potíží, nebo jako nějaké spojitě struktury mající své zákony vnitřního pohybu; tyto zákony vnitřního pohybu však byly zavedeny zvenčí a nebylo jasné, jak je odvozovat v rámci uzavřené teorie. Jinak je tomu v geometrodynamice.

Zákony obecné teorie relativity připouštějí existenci objektů s obvyklou eukleidovskou topologií a bez singularit, chovajících se jako skutečná hmota (budící gravitační pole i na toto pole reagující), přičemž tyto objekty jsou složeny čistě ze samotného pole. Šíří-li se prostorem elektromagnetické vlny, budí kolem sebe gravitační pole - zakřivují prostoročas v němž se šíří, a to nezůstává bez vlivu na jejich pohyb. Podle obecné teorie relativity mohou velmi mohutné elektromagnetické vlny kolem sebe vytvořit tak silné gravitační pole, že jím budou nuceny trvale se pohybovat po uzavřených dráhách. Elektromagnetické vlny si

tak samy vytvářejí kolem sebe jakýsi gravitační "vlnovod" ze zakřivené geometrie prostoročasu (z gravitačního pole), v němž trvale cirkulují - obr. 9.11a.

Takový útvar z elektromagnetických vln, udržovaný pohromadě vlastní gravitací, se nazývá **elektromagnetický geon**.

Jestliže geon celkové hmotnosti  $M$  bude sféricky symetrický, bude vzbuzovat sféricky symetrické gravitační pole a prostoročasná metrika bude analogická ( 2.337 ). Geon není stabilní, ale pouze metastabilní - část energie vln proniká přes odstředivou a gravitační bariéru, geon se pomalu rozplývá (tím pomaleji, čím větší je počet vlnových délek po obvodu), nebo naopak může zkolabovat a vytvořit černou díru. Pro vzdáleného pozorovatele bude geon vykazovat gravitační účinky jako každá jiná hmota (třeba planeta) - můžeme např. na oběžnou dráhu kolem geonu uvést družici (obr. 9.11b).



**Obr.9.11. Mohutné elektromagnetické nebo gravitační vlny mohou kolem sebe vytvořit tak silné gravitační pole (zakřivit prostoročas), že jím budou trvale nuceny cirkulovat v uzavřeném "gravitačním vlnovodu" - vzniká metastabilní hmotný útvar zvaný geon.**

a) Průměrné rozložení pole v geonu.

b) Svými gravitačními účinky se geon chová jako každá jiná hmota (třeba planeta) - můžeme např. na oběžnou dráhu kolem geonu uvést družici.

Taková hmota složená z elektromagnetických vln se nám může zdát sice zvláštní, avšak hmotná povaha elektromagnetických vln je dostatečně vžitá. Ještě sugestivnější obraz dostaneme, když nahradíme elektromagnetické vlny vlnami gravitačními. Gravitační vlny rovněž přenášejí energii, zakřivují prostoročas (univerzální buzení gravitace) a

podle obecné teorie relativity mohou též vytvořit **gravitační geon**, který se bude navenek svými gravitačními účinky projevovat jako skutečná hmota.

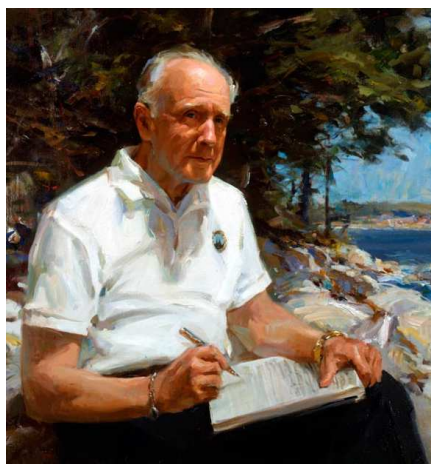
Gravitační vlny jsou však pouhým vlněním gravitačního pole, tedy fluktuacemi geometrie prázdného prostoročasu. Vnější pozorovatel se tak stává svědkem toho, kterak se vlnící křivost prázdného prostoročasu "bez hmoty" navenek projevuje jako hmotný útvar. Gravitační geon je tedy názorným modelem jakési "**hmoty bez hmoty**", hmoty utvořené doslova z "prázdnoty" prostoru s vlnící se křivostí.

Sledujeme-li hmotu buď ve stále menších měřítcích mikrosvěta, nebo naopak ve stále větších měřítcích megasvěta, bude hmota postupně ztrácet některé atributy na něž jsme zvyklí z běžné zkušenosti našeho makrosvěta a případně se začnou objevovat atributy nové. Vždy však zůstává základní znak hmoty - být **objektivní realitou**.

Hypotetický geon je jen určitým extrémním příkladem konstrukce hmotného objektu z geometrie prostoročasu; fakticky každá gravitační vlna popsaná svým **Isaacsonovým tenzorem nelokální energie-hybnosti** je takovou "hmotou bez hmoty", složenou z "vakua" chápaného v obvyklém smyslu. To, jak se i v "prázdném" prostoru bez obvyklých hmotných zdrojů objeví jakási efektivní hmota mající globální gravitační účinky, je ostatně podobné situaci v elektrodynamice, kde se i ve vakuu bez nábojů (a proudů) pro nestacionární elektromagnetické pole objevuje **Maxwellův posuvný proud** mající magnetické účinky stejné jako "skutečný" proud elektrických nábojů.

## **Kvantová geometrodynamika**

Formální základy kvantové geometrodynamiky položil již v roce 1900 Max Planck. Fyzikální disciplínou se však kvantová geometrodynamika stala až o mnoho desetiletí později, především zásluhou J.A.Wheelera, DeWitta a později i mnohých dalších.



John Archibald Wheeler (1911 – 2008)



Bryce Seligman DeWitt (1924 – 2004)

Abychom si co nejsrozumitelněji vysvětlili oč se jedná, použijeme jednoduchý myšlenkový experiment.

Již z Newtonova gravitačního zákona plyne, že dvě hmotná tělesa o hmotnostech  $m_1$ ,  $m_2$ , vzdálená od sebe  $r$ , se navzájem přitahují gravitační silou o velikosti

$$F_g = \frac{G \cdot m_1 \cdot m_2}{r^2} \quad (9.223)$$

kde  $G = 6,67259 \cdot 10^{-11}$  je gravitační konstanta.

Gravitační potenciální energie dvou těles hmoty  $m_1$ ,  $m_2$  je mírou práce kterou je nutno vykonat při přemístění těles ze vzdálenosti  $r_1$  do vzdálenosti  $r_2$ , tj.

$$\begin{aligned} E_p &= \int_{r_1}^{r_2} F_g \, dr = G \cdot m_1 \cdot m_2 \cdot \int_{r_1}^{r_2} r^{-2} \, dr = G \cdot m_1 \cdot m_2 \cdot \left[ -\frac{1}{r} \right]_{r_1}^{r_2} = \\ &= G \cdot m_1 \cdot m_2 \cdot \left( \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right) . \end{aligned} \quad (9.224)$$

Při přemístění těles ze vzájemné vzdálenosti  $r_2$  zpět do vzdálenosti  $r_1$  vykonají gravitační síly stejně velikou práci, takže těleso  $m_2$  získá kinetickou energii



$$\begin{aligned}
E_k &= \int_{r_1}^{r_2} F_g \, dr = \int_{r_1}^{r_2} m \cdot \frac{d^2 r}{dt^2} \, dr = m \cdot \int_{r_1}^{r_2} \frac{dv}{dt} \, dr = m \cdot \int_{v_1}^{v_2} \frac{dr}{dt} \, dv = m \cdot \int_{v_1}^{v_2} v \, dv = \\
&= m \cdot \left[ \frac{v^2}{2} \right]_{v_1}^{v_2} = \frac{m}{2} (v_2^2 - v_1^2),
\end{aligned}
\tag{9.225}$$

kde

$$m = \frac{m_1 \cdot m_2}{m_1 + m_2}
\tag{9.226}$$

je tzv. **redukována hmotnost** obou těles.

Položíme-li počáteční vzájemnou rychlost obou těles  $v_1 = 0$ , a budeme-li dále předpokládat, že počáteční vzdálenost obou těles se blíží asymptotickému nekonečnu, pak srovnáním (9.224) a (9.225), dostáváme pro vzájemnou rychlost  $v_2$  obou těles po vzájemném přiblížení se na vzdálenost  $r_1$ , vztah

$$v_2 = \lim_{r_2 \rightarrow \infty} \sqrt{2 \cdot G \cdot (m_1 + m_2) \cdot \left( \frac{1}{r_1} - \frac{1}{r_2} \right)} = \sqrt{\frac{2 \cdot G \cdot (m_1 + m_2)}{r_1}}.
\tag{9.227}$$

Jestliže mezi hmotnostmi obou těles platí relace  $m_1 \gg m_2$ , potom  $(m_1 + m_2) \rightarrow m_1 \stackrel{\text{def}}{=} M$ , a rychlost  $v$  padajícího tělesa  $m_2$  ve vzdálenosti  $r$  od hmotného středu gravitujícího tělesa  $M$  bude dána jednoduchým vztahem

$$v = \sqrt{\frac{2 \cdot G \cdot M}{r}}.
\tag{9.228}$$

Dosadíme-li rychlost ze vztahu (9.228) do (2.3), dostaneme pro gravitační dilataci času

$$t' = t \sqrt{1 - \frac{2 \cdot G \cdot M}{r \cdot c^2}} . \quad (9.229)$$

Vidíme, že čas je funkcí hmotnosti a poloměru, která je singulární při

$$r_g \leq \frac{2 \cdot G \cdot M}{c^2} , \quad (9.230)$$

což je tzv. **gravitační poloměr**.

Stlačíme-li těleso hmoty  $M$  pod jeho gravitační poloměr, prostoročas se okolo něho úplně uzavře a těleso vypadne ven z tohoto vesmíru.

Těleso poté pokračuje v nekontrolovaném samohroucení a neexistuje způsob, kterak tento proces zvrátit a vtáhnouti jej zpět do našeho vesmíru.

Zůstane po něm pouze prostoročasová trhlina o poloměru  $r_g$ , - černá díra, neboli **gravitační kolapsar**.

Vztah ( 9.230 ) si kupodivu zachovává svoji obecnou platnost i v Einsteinově obecné teorii relativity, takže k jeho použití zde jsme plně oprávněni.

Předpokládejme nyní, že se budeme snažit neustále zvyšovat rozlišovací schopnost optického mikroskopu, abychom mohli sledovat stále jemnější prostorové detaily.

Rozlišovací schopnost mikroskopu je rovna poloviční délce vln použitého záření, která souvisí s energií fotonů vztahem

$$\lambda = \frac{c \cdot h}{E} . \quad (9.231)$$

Jelikož energie závisí na hmotnosti částice Einsteinovým vztahem

$$E = M \cdot c^2 , \quad (9.232)$$

máme

$$\lambda = \frac{h}{M \cdot c} . \quad (9.233)$$

Srovnáme-li vztah pro gravitační průměr odvozený z ( 9.230 ) s ( 9.233 ), dostáváme

$$\frac{4 \cdot G \cdot M}{c^2} = \frac{h}{M \cdot c} \quad ( 9.234 )$$

čili

$$M_h = \sqrt{\frac{c \cdot h}{4 \cdot G}} \quad ( 9.235 )$$

což je tzv. **Planckova hmotnost**, udávající maximální hodnotu hmotnosti již může foton nabývat.

Této hmotnosti odpovídá nejkratší vlnová délka kterou může foton získat a která představuje zároveň nejkratší prostorový interval, který lze fyzikálně rozlišit.

Tento interval, který nazýváme **Planckovou-Wheelerovou délkou**, fyzikálně reprezentuje elementární kvantum prostoru:

$$l_h = \frac{\lambda_{\min}}{2} = \sqrt{\frac{G \cdot h}{c^3}} \quad ( 2.236 )$$

Doba, za kterou světlo překoná Planckovu-Wheelerovu délku představuje nejkratší možný rozlišitelný časový interval, a nazývá se **Planckův – Wheelerův čas**:

$$t_h = \frac{l_h}{c} = \sqrt{\frac{G \cdot h}{c^5}} \quad ( 2.237 )$$

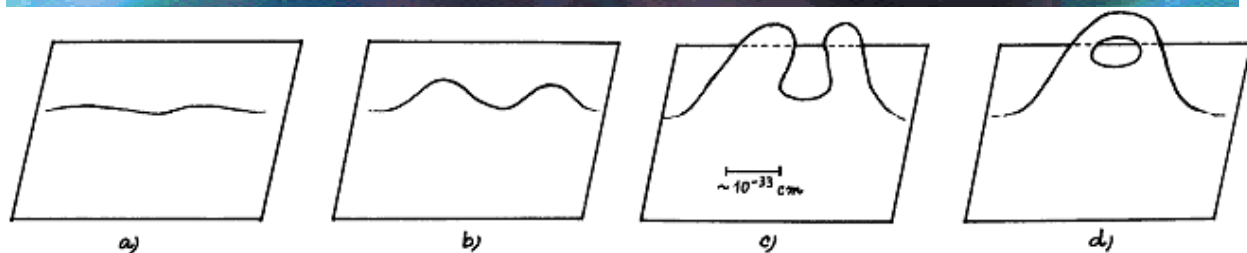
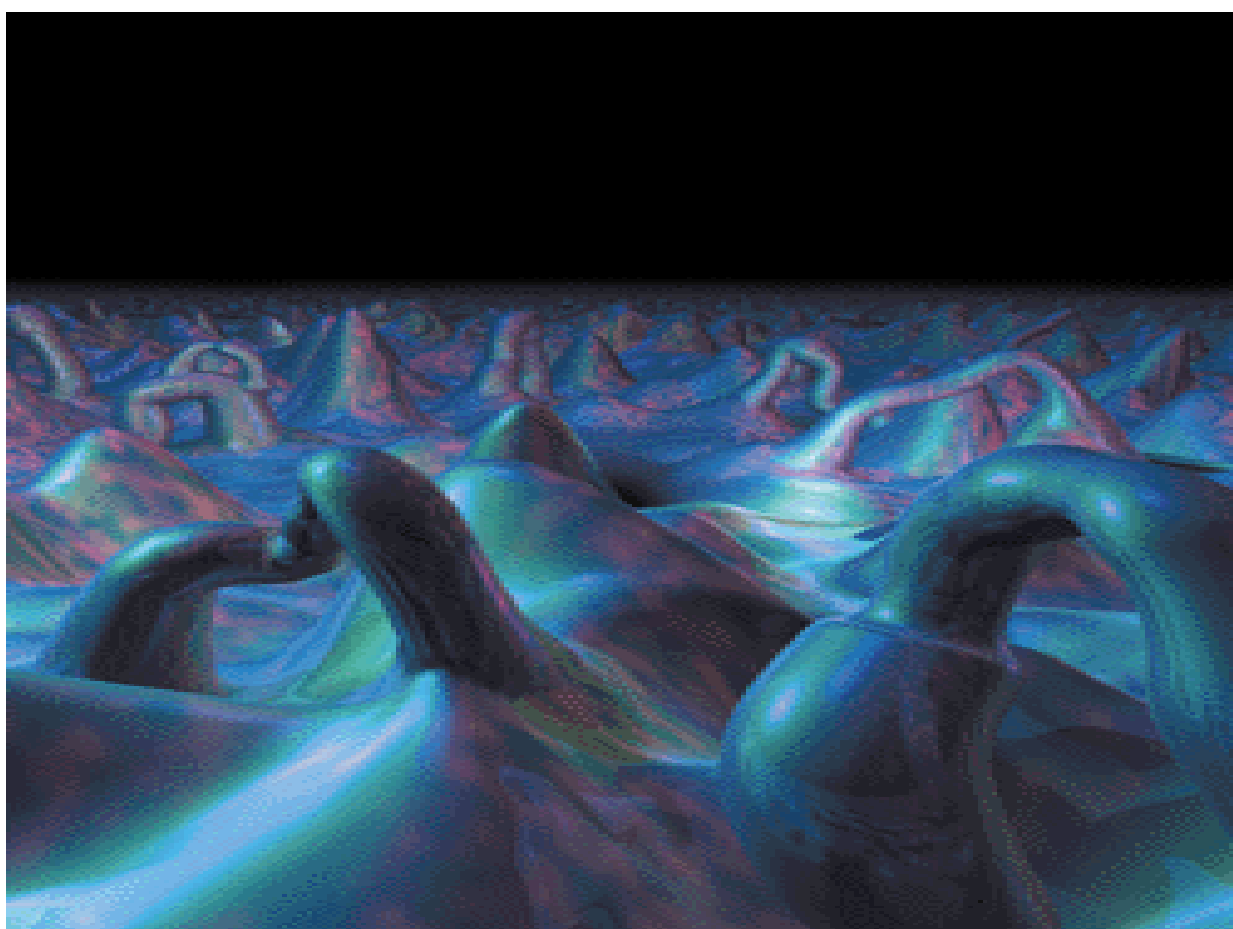
Tato veličina reprezentuje elementární kvantum času.

V měřítkách  $\sim 10^{-10}$  m s nimiž pracuje atomová fyzika se pohybujeme v řádu  $\sim 10^{25}$  Planckových délek.

Dokonce i pro měřítko  $\sim 10^{-15}$  m jaderné fyziky jsou kvantové fluktuace metriky stále ještě o 20 řádů menší, a tedy zcela zanedbatelné.

Proto ve všech situacích, s nimiž se zatím setkáváme, můžeme prostoročas plným právem považovat za hladké kontinuum. Základní postulát obecné teorie relativity, že prostor je lokálně eukleidovský, je tedy velmi dobře splněn pokud slovem lokálně nebudeme myslet měřítko blízká Planckově délce.

Jdeme-li však do stále menších měřítek, kvantové fluktuace stále rostou, až v oblastech velikosti Planckovy délky  $\sim 10^{-35}$  m, jsou fluktuace metriky prostoročasu již natolik silné, že přerůstají ve fluktuace topologie viz obr. 9.12.



Obr.9.12. Ve velmi malých měřítcích mohou kvantové fluktuace metriky prostoru (a,b,c) spontánně vzrůst natolik, že prostor se stane vícenásobně souvislým (d) - přerostou ve fluktuace topologie.

Dynamická evoluce prostoročasu tak vede ke zcela specifickým zákonitostem na velmi malých vzdálenostech.

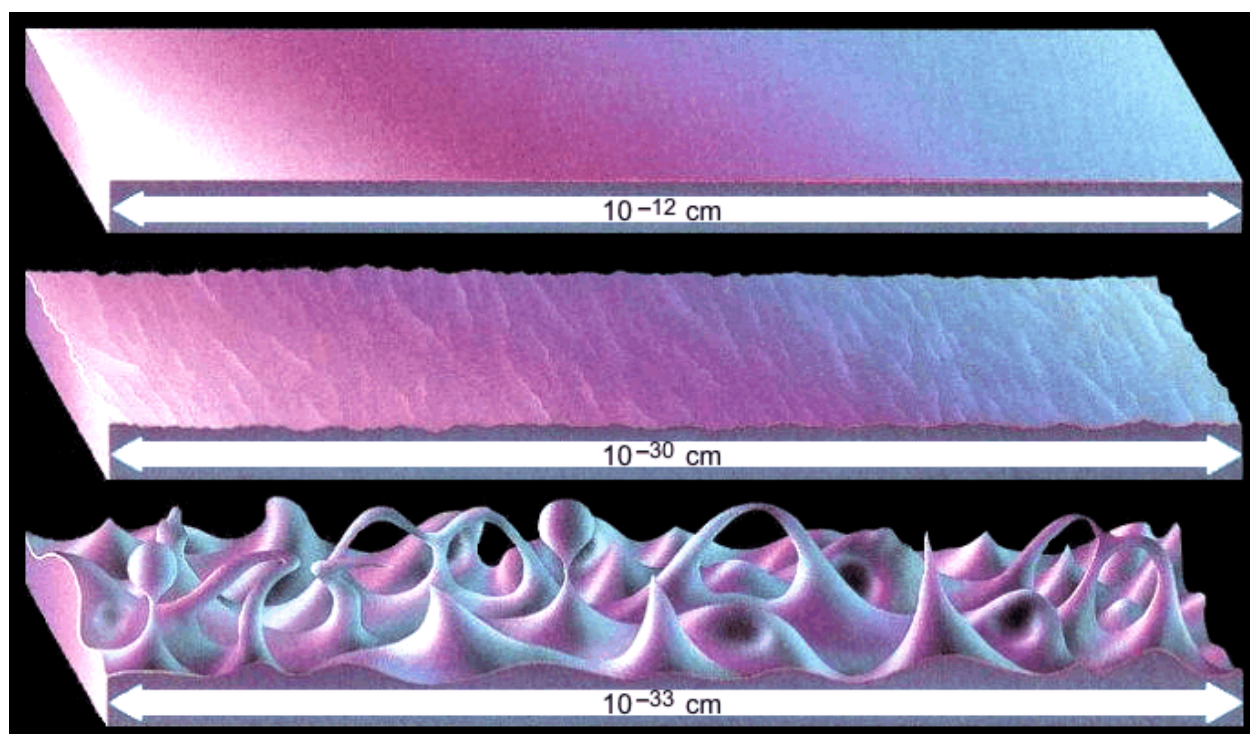
V mikroměřítkách řádu Planckových rozměrů velmi silně fluktuuje nejen geometrie, ale i topologie prostoročasu.

Při běžném pohledu se nám prostor jeví jako spojitě hladké kontinuum. Je to podobné, jako když se z vysoko letícího letadla díváme na povrch oceánu.

Vidíme zcela hladkou hladinu, jen mírně globálně zakřivenou do tvaru Zeměkoule.

Seskočí-li však pozorovatel padákem a postupně se blíží k hladině, vidí stále zřetelněji, že je rozvlněná.

Když nakonec dosedne na hladinu, uvědomí si, jak daleko má hladina do ideálně rovné a hladké plochy – hladina se prudce vlní, pění a stříká.



Obr.9.13. K analogii mezi geometricko-topologickou strukturou prostoročasu a strukturou hladiny oceánu.

**a)** Při pohledu s rozlišením odpovídajícím zhruba průměru atomového jádra se struktura prostoročasu jeví jako ideálně hladká.

**b)** Při detailnějším pohledu se prostoročas jeví jako zvlněný, ale jinak hladký.

**c)** Z bezprostřední blízkosti je vidět, že silně fluktuuje nejen zakřivení prostoročasu, ale i jeho topologická struktura.

V metrových měřítkách silně fluktuuje místní zakřivení hladiny (vlny), v centimetrových a milimetrových měřítkách fluktuuje dokonce i topologická struktura hladiny (oddělují se kapky, vznikají bubliny pěny). Podobně i v našem časoprostorovém kontinuu se budou projevovat kvantové fluktuace geometrie tím výrazněji, čím menší mikrooblasti sledujeme - viz obr. 9.13.

V měřítkách srovnatelných s Planckovou – Wheelerovou délkou, pak bude fluktuovat i samotná topologie prostoru.

Budou se např. vytvářet a opět zanikat topologické tunely, apod. (viz kapitola 4).

Dle kvantové geometrodynamiky je tedy ono zdánlivě prázdné vakuum dějištěm nejbouřlivějších mikrojevů.

Prostorčas má v těchto měřítkách pěnovitou, neustále spontánně fluktuující mikrostrukturu, plnou prudkých perturbací prostorčasové geometrie.

Pro elektromagnetické záření s delší vlnovou délkou se v příslušném delším měřítku kvantové fluktuace metriky zprůměrují a zcela vyhladí, takže toto záření se bude v klasickém vakuu pohybovat přesně rychlostí světla  $v = c$ . Fotony vysokoenergetického záření gama s velmi krátkou vlnovou délkou však budou na fluktuace metriky prostorčasu v jemném měřítku "citlivější", než nízkoenergetické fotony. Takové vlnění se bude pohybovat po mírně zvlněné geodetické dráze, fotony se budou v jistém smyslu "prodírat" nerovnostmi dráhy, způsobenými jemnými poruchami metriky a jejich efektivní rychlost bude o něco menší než  $c$ . Můžeme to přirovnat k pohybu automobilu s malými kolečky a s velkými koly po hrbolaté cestě: při pohánění kol stejnou obvodovou rychlostí pojedou automobil s malými kolečky o něco pomaleji než auto s velkým průměrem kol.

Tento jev nelze považovat za porušení či selhání speciální teorie relativity, která přesně platí v plochem prostorčase bez defektů metriky.

Tyto rozdíly se projevují až při velmi vysoké energii záření gama, v oblasti GeV a TeV. I zde jsou rozdíly v rychlosti velice malé (řádově  $10^{-20}$ ), bez možnosti laboratorního změření. Mohly by být v budoucnu prokázány jedině časovým porovnáním detekce světla a záblesků tvrdého gama záření z katastrofických procesů ve vzdáleném vesmíru. Na kosmologických vzdálenostech miliard světelných let by se

i tyto nepatrné rozdíly v rychlosti mohly "nakumulovat" a projevit se měřitelnými efekty (problémem je ovšem odlišit tyto rozdíly od rozdílů emisních časů v samotných zdrojích).

Kvantové fluktuace způsobují, že prostor má kromě makroskopické (gravitační) křivosti též mikrokřivost poloměru  $l_h$  a všude vznikají a opět zanikají hrdla topologických tunelů, jejichž rozměry a vzájemné vzdálenosti jsou rovněž řádově srovnatelné s  $l_h$ .

Máme-li topologický tunel o průměru  $l$  a tedy ploše  $\sim l^2$ , budou zde kvantové fluktuace intenzity elektrického pole řádově

$$E \approx \frac{\sqrt{\hbar \cdot c}}{l^2}, \quad (9.238)$$

takže celkový tok intenzity pole udávající efektivní elektrický náboj bude řádově

$$q \approx \sqrt{\hbar \cdot c}, \quad (9.239)$$

nezávisle na rozměrech tunelu.

Tento geometrodynamický náboj však nemá žádnou přímou souvislost s elementárním nábojem částic, neboť je mnohem větší a není kvantován.

Hustota energie  $\sim$  hmoty pole v typickém topologickém tunelu dosahuje fantastických hodnot

$$\rho = \frac{E^2}{c^2} = \frac{\hbar}{c \cdot l_h^4} \approx 5 \cdot 10^{96} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}. \quad (9.240)$$

Tuto hustotu nazýváme **Planckova-Wheelerova hustota hmoty**, a je považována za mezní hodnotu koncentrace hmoty elektromagnetického či gravitačního záření v prostoročase.

Charakteristická energie  $\sim$  hmota připadající na jeden topologický tunel je dána vztahem (9.235), což představuje zhruba  $2,2 \cdot 10^{-5}$  g, tj. řádově  $10^{26}$  eV.

To je o 8 řádů více, než největší energie částic zaznamenané doposud v kosmickém záření a o 17 řádů více než klidové hmotnosti nejtěžších známých elementárních částic.

Teoretický model předpokládá, že po dosažení energie  $10^{26}$  eV na jednu částici, dojde ke sjednocení všech čtyř fundamentálních fyzikálních interakcí v jednu jedinou supersymetrickou interakci zvanou též **supergravitace**. Tyto obrovské hodnoty jsou však evidentně v rozporu s velmi nízkou střední hustotou energie, kterou pozorujeme v současném vesmíru. Vezmeme-li však v úvahu příspěvek gravitace k hustotě energie a hmoty, pak dvě typická ústí tunelu o hmotnostech  $m_1 \approx m_2 = M_h$ , vzdálená od sebe  $l_h$ , budou mít při vzájemné gravitační interakci vazbovou energii

$$E_{gr} = -\frac{G \cdot m_1 \cdot m_2}{r_{1,2}} \approx -c^2 \cdot \sqrt{\frac{\hbar \cdot c}{G}} \quad (9.241)$$

Hmotový defekt dvou sousedních ústí topologických tunelů

$$\Delta m_{gr} = \frac{E_{gr}}{c^2} = -\sqrt{\frac{\hbar \cdot c}{G}} = -M_h \quad (9.242)$$

který je záporný a stejného řádu jako kladná elektromagnetická hmotnost obou struktur, může tedy lokálně kompenzovat energie příslušných fluktuací.

Takto lokálně vykompenzované fluktuace již nevykazují gravitační přitažlivost s ostatními toky hmoty a energie ze vzdálenějších topologických tunelů.

Po takovéto celkové kompenzaci obrovských pikofluktuací může vakuum vypadat tak, jak jej pozorujeme.

Pozorované elementární částice, které však zřejmě nejsou zdaleka elementární, jsou zřejmě jakýmsi kolektivními excitacemi v moři silných fluktuací mikrogeometrie, zahrnujícími obrovské množství elementárních fluktuací, které se však všude jinde v průměru ruší, tvoříc v makroskopických měřítkách obvyklé vakuum.

Na rozdíl od vztahu ( 9.240 ), udávajícího mezní hustotu záření, mezní hustota partonických částic je rovna hustotě partonu, tj. poměru hmoty



partonu a objemu tzv. **elementární buňky cytoprostoru**, tj. krychličky o straně jedné Planckovy délky:

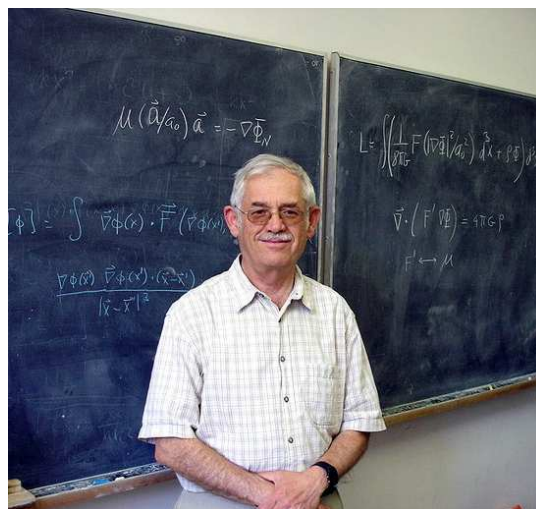
$$\rho = \frac{h}{c^2 \cdot l_h^3} \approx 10^{54} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3} . \quad ( 9.243 )$$

### Termodynamika kolapsarů - Hawkingův efekt.

Stlačíme-li hmotu pod její gravitační poloměr  $r_g$ , daný vztahem ( 9.230 ), úniková rychlost ( 9.228 ) na jejím povrchu bude rovna rychlosti světla ve vakuu. To znamená, že ani světlo nebude schopno pronikat ven ze sférické oblasti vymezené gravitačním poloměrem, tj. z gravitačního kolapsaru. Protože žádný signál se nemůže v prostoročase šířit vyšší rychlostí než je rychlost světla ve vakuu, znamená to, že nitro gravitačního kolapsaru je mohutnou gravitací odříznuto od okolního regulárního prostoročasu. Zatímco do nitra kolapsaru mohou pronikat částice velmi snadno, ven by se dle klasické fyziky, tj. obecné teorie relativity, nemělo dostat nic. Jedná se tedy o oblast, v níž je relativistický prostoročas úplně zakřiven, tj. zcela uzavřen sám do sebe. Kvantověmechanický rozbor celého problému provedený v roce 1974 Stephenem Hawkingem a Jacobem Bekensteinem však odhalil pozoruhodnou skutečnost, že kolapsary ve skutečnosti vyzařují energii, ačkoliv je to v rozporu s klasickou fyzikou.



Stephen William Hawking (1942)



Jakob David Bekenstein (1947)

Hranice kolapsaru zvaná **Schwarzschildova sféra** není totiž o nic tlustší než jedna Planckova délka.

Částice která se vytvoří těsně pod touto hranicí ji může překonat a proniknout tak do regulárního prostoročasu pouze za předpokladu, že na kratičký okamžik bude schopna letět nadsvětelnou rychlostí.

Podle kvantové teorie, však tomu vůbec nic nebrání.

Heisenbergovy relace neurčitosti ( 3.75 ), ( 3.76 ) totiž ukazují, že průměrná rychlost částice podléhá na krátkých prostorových a časových intervalech lokálním fluktuacím.

Částice s tzv. nulovou klidovou hmotností, jež se dle klasické fyziky musí pohybovat přesně rychlostí světla, tedy ve skutečnosti musí dodržovat tuto mezní rychlost pouze v průměru, tj. na prostorových a časových intervalech dostatečně dlouhých ve srovnání s Planckovou délkou a Planckovým časem.

Na vzdálenostech řádově srovnatelných s šířkou Schwarzschildovy sféry však dochází ke značným odchýlkám od této střední hodnoty rychlosti fotonů a dalších částic.

Pokud se zde některé fotony mohou pohybovat např. podsvětelnou rychlostí, pak jiné fotony tu musí dosahovat naopak lokálně nadsvětelných rychlostí, aby bylo možno zprůměrováním rychlostí všech fotonů nakonec dospět k hodnotě velmi blízké rychlosti světla.

Částice, které vznikly uvnitř kolapsaru v dostatečné blízkosti Schwarzschildovy sféry tedy mají možnost na krátkou dobu překonat rychlost světla a uniknout mimo kolapsar.

Poté však musí svoji rychlost rychle snížit na podsvětelnou hodnotu, aby jejich průměrná rychlost nepřekročila maximální povolenou hodnotu  $c$ .

V této fázi mohou být některé částice, kterým se již podařilo uniknout skrze Schwarzschildovu sféru ven z kolapsaru, opět vtaženy do jeho útroh působením mohutných gravitačních sil.

Pravděpodobnost že se tak stane je nepřímo úměrná tomu, jak rychle klesá intenzita gravitačního pole se vzdáleností od Schwarzschildovy sféry.

Z formule ( 9.223 ) vyplívá, že tento pokles intenzity gravitačního pole směrem od Schwarzschildovy sféry je nepřímo úměrný čtverci poloměru kolapsaru  $r_g$ .

Tedy čím je kolapsar menší, tím rychleji vyzařuje energii do asymptotického nekonečna.

Čím více energie ~ hmoty vyzáří za jednotku času, tím více se zmenší jeho poloměr, a tím více energie vyzáří v následujícím okamžiku.

Teoretický výpočet ukazuje, že kolapsar má entropii

$$S = \frac{k_B}{4l_h^2} A, \quad (9.244)$$

kde  $A$  je plocha horizontu, přičemž vyzařuje jako absolutně černé těleso zahřáté na termodynamickou teplotu

$$T = \frac{\hbar c^3}{8\pi GMk}. \quad (9.245)$$

Vidíme, že entropie černé díry je dána počtem **Planckových ploch**  $l_h^2$ , kterými lze pokrýt horizont černé díry (s koeficientem 1/4). Entropie černé díry (9.244) je zároveň **maximální entropií**, kterou lze "vtěsnat" do daného objemu uzavřeného uvnitř plochy velikosti  $A$ . Jinými slovy, černá díra představuje objekt, který nejefektivněji soustřeďuje entropii – plocha jejího horizontu  $A$  je nejmenším možným povrchem prostorové oblasti, v níž se hmota dané entropie  $S$  může nacházet.

V klasické termodynamice je entropie přímo úměrná objemu zaplněnému látkou. V kvantové fyzice gravitace je však entropie přímo úměrná povrchu, takže do daného objemu je možno "zakódovat" podstatně méně informace, než by odpovídalo klasické představě.

Dvojměrná plocha horizontu černé díry nese veškerou informaci o (trojrozměrných) konfiguracích pohlcené hmoty v černé díře, podobně jako dvojměrný hologram nese informace o trojrozměrném objektu. Tato skutečnost je proto často označována jako **holografický princip**. Holografický princip byl dále ještě zobecněn v souvislosti s budováním kvantových teorií gravitace: Informaci o systému uvnitř objemu  $V$  lze lokalizovat na povrch tohoto objemu, přičemž hustota informace nepřesahuje jeden bit na Planckovu plochu  $l_h^2$ .

S postupným vypařováním se kolapsaru (zmenšováním  $r_g$ ) se intenzita záření a energie emitovaných fotonů neustále zvětšuje, takže kvantová evaporace má lavinovitý charakter.

Závěrečné okamžiky existence kolapsaru tak završí mohutná kvantová exploze, při níž se během poslední zhruba jedné desetiny sekundy uvolní energie řádově  $10^{23}$  J.

To přibližně odpovídá současné explozi několika milionů vodíkových pum.

V samém závěru svého života emituje kolapsar poslední foton o energii  $E_\gamma = M_h \cdot c^2$ , což představuje veškerou zbylou energii kolapsaru, takže tento foton bude identický s původním kolapsarem, který ve snaze zbavit se energie kvantovou evaporací, pokaždé znovu a znovu emituje sám sebe.

Je tedy možné, aby obří vesmírné kolapsary byly vlastně jakýmsi „přetloustlými“ fotony?

Wheelerův teorém „**černá díra nemá vlasy**“ říká, že vlastnosti kolapsarů skutečně, až se zarážející nápadností připomínají vlastnosti elementárních částic.

Ukazuje se totiž, že všechny kolapsary, ať již vznikly těmi nejrozličnějšími způsoby, z těch nejrozmanitějších forem hmoty jaké si jen lze představit (včetně čisté gravitace v podobě koncentrovaných gravitačních vln), se navenek makroskopicky projevují vnějším polem nesoucím pouze 3 elementární informace o vlastnostech hmoty z níž kolapsar vznikl. Těmito informacemi jsou:

celková hmotnost  $M$  kolapsaru,  
celkový elektrický náboj  $Q$  kolapsaru,  
vlastní moment hybnosti  $J$  kolapsaru,

Všechny ostatní informace jsou horizontem odříznuty od okolního prostoročasu a jsou tudíž navždy ztraceny z vesmíru.

Ani kvantová evaporace není schopna tato data vytáhnout z pod horizontu kolapsaru zpět do vesmíru.

Všechny kolapsary, ať již nejrozmanitějšího původu, jsou od sebe makroskopicky nerozlišitelné, mají-li stejnou hmotnost, náboj a rotační moment hybnosti.

Těmito svými vlastnostmi kolapsary připomínají elementární částice, které se taktéž projevují pouze několika základními pozorovatelnými, jimiž jsou klidová hmotnost, elektrický náboj, vlastní moment hybnosti (**spin**) a několik dalších kvantových čísel.

Stejně jako kolapsary, i elementární částice jsou vzájemně nerozlišitelné, pokud se od sebe neliší ve výše jmenovaných nezávislých pozorovatelných.

**Poznámka:** Výsledky teoretického výzkumu strun v posledních letech ukazují, že informace se v černé díře ve skutečnosti neztrácejí. Makroskopické informace jsou pouze rozloženy až na jejich vlastní kvantovou podstatu a poté lokalizovány na horizontu, odkud mohou být opět emitovány zpátky do vesmíru kvantovou evaporací. Blíže o tom pohovoříme v odstavci o holografickém principu v teorii strun. Kolapsar je tedy charakterizován nejen makroskopickými stavovými veličinami jako je hmotnost, moment hybnosti a elektrický náboj (kterak původně předpokládali Wheeler a Hawking), ale též mikroskopickými stavovými veličinami (kvantovými čísly a charakteristikami) veškerých částic, které jej vytvořily.

## Superprostor

Feynmanova formulace kvantové teorie se vyznačuje velmi těsným vztahem ke klasické fyzice vyjádřené pomocí principu nejmenší akce. V klasické fyzice (mechanice, elektrodynamice, OTR) se mezi daným počátečním  $x_1$  a koncovým  $x_2$  stavem vyšetřovaného systému vždy

uskuteční pouze takový pohyb, pro nějž je integrál akce  $S = \int_{x_1}^{x_2} L dt$

extremální. Naproti tomu v kvantové fyzice se jak známo uskutečňují i takové procesy, které nevyhovují tomuto principu a jsou podle klasické fyziky nemožné - např. tunelový jev.

Přechod od klasické fyziky ke kvantové je zde natolik elegantní a přímočarý, že se J. A. Wheeler pomocí tohoto přístupu snažil přesvědčit A. Einsteina, leč bezvýsledně, aby zrevidoval svůj odmítavý postoj ke stochastickým principům kvantové mechaniky.

Ve Feynmanově přístupu se rovnoprávně uvažují všechny trajektorie vedoucí z počátečního stavu  $x_1$  do konečného stavu  $x_2$  bez ohledu na to, zda jsou podle klasické fyziky přípustné nebo nikoliv. Vypočítá-li se pro

každou trajektorii integrál  $\int_{x_1}^{x_2} L dt$ , bude pravděpodobnost přechodu soustavy z počátečního stavu  $x_1$  do koncového stavu  $x_2$  dána čtvercem veličiny

$$F(x_1, x_2) = \sum \exp\left(\frac{i}{\hbar} \int_{x_1}^{x_2} L dt\right), \quad (9.246)$$

získané jako suma vzata přes všechny trajektorie. Je evidentní, že největší příspěvek k této sumě dávají ty trajektorie, které mají fázový koeficient  $\frac{i}{\hbar} \int L dt$  téměř stejný (exponenty se sčítají), zatímco pro trajektorie s velkými rozdíly v  $\frac{i}{\hbar} \int L dt$  se exponenty v součtu vzájemně ruší. Nejpravděpodobnější trajektorie (odpovídající blízkým hodnotám  $\int L dt$ ) bude proto klasická trajektorie s extrémním chováním integrálu akce. Pod trajektorií se zde rozumí "dráha" v prostoru konfigurací dané soustavy; pokud se jedná o složitou soustavu popsanou velkým počtem parametrů, bude to trajektorie v mnohazměrném prostoru. Feynman ukázal, že tato formulace je ekvivalentní obvyklému Schrödingerovu a Heisenbergovu pojetí kvantové mechaniky. Podobně jako u klasického principu nejmenší akce se v praxi nehledá bezprostředně extrém integrálu  $\int L dt$ , ale odvozují se Lagrangeovy pohybové rovnice, ani při použití Feynmanovy metody se přímo nepočítá celková suma přes všechny trajektorie. Feynmanova procedura se spíše používá jako prostředek pro odvozování a rozpracování kvantových teorií, jakož i jejich fyzikální interpretace.

Wheeler a DeWitt se pokusili použít Feynmanovy koncepce pro kvantování "nejklasičtějšího" objektu jaký si dovedeme představit: vesmíru jako celku. Zavedli tzv. **superprostor** - nekonečněrozměrný prostor, jehož "body" představují všechny možné geometrie prostoru (stavy vesmíru). Čára (trajektorie) v tomto superprostoru pak reprezentuje určitou variantu evoluce vesmíru. Je jasné, že praktické

použití superprostoru je možné pouze za velmi zjednodušujících předpokladů. Misner proto navrhl studovat evoluci uzavřeného homogenního vesmíru (zobecněných Kasnerových modelů), pro popis jehož stavu stačí tři parametry; nekonečně rozměrný superprostor se zde redukuje na trojrozměrný "minisuperprostor". Superprostor Fridmanových homogenních izotropních vesmírů je dokonce jednorozměrný - všechny prostorové řezy jsou charakterizovány hodnotou parametru  $a(x^0)$ . V rámci superprostoru lze matematicky formulovat i Wheelerovu kvantovou geometrodynamiku.



Edward Kasner (1878 – 1955)

### Wittenovy topologické kvantové teorie pole

Roku 1974 navrhl Van't Hooft zobecnění kvantové chromodynamiky z kalibrační symetrie  $SU(3)$ , zahrnující 3 barvy, na teorii, kde počet barev je libovolně velké přirozené číslo  $N$  a odpovídající grupa symetrie je  $SU(N)$ . Ukazuje se, že s růstem  $N$  je naděje na stále přesnější řešení teorie, neboť lze konstruovat nový druh poruchového rozvoje, v němž rozvojový parametr je  $1/N$ . V případě kvantové chromodynamiky  $N = 3$  se poté lze omezit na prvních několik členů tohoto rozvoje, bychom dostali výsledky dostatečně blízké realitě. Ukázalo se, že tato myšlenka dobře funguje u kvantové chromodynamiky definované ve dvourozměrném prostoročase (jeden rozměr prostorový a jeden časový). Teorie tohoto druhu sdílejí mnohé rysy čtyřrozměrných kvantových teorií pole, ale bývají matematicky snáze zpracovatelné, zejména co se týče mnohem snadnější renormalizovatelnosti. Na základě tohoto

modelu Witten již roku 1978 podal vysvětlení, hmotností pionů. Roku 1983 pak Witten ukázal, že na základě této algebry by mohla být pochopena nejen fyzika pionů, ale i dalších hmotnějších hadronů. K tomu je nutno si představit hadrony jako exotické konfigurace pionových polí, jež nesou netriviální topologii. Z topologických důvodů nemohou být tyto polní konfigurace deformovány do malých variací v pionovém poli. Witten užil k odvození výsledku výjimečně chytré kombinace argumentů o pravděpodobném chování aproximace velkého  $N$  a pokročilé geometrie a topologie vedoucí k existenci nukleonů a dalších hadronů. Přes tento pokrok však dodnes nikdo nedokázal najít přesné řešení kalibrační teorie  $SU(N)$  pro  $N \rightarrow \infty$ . To je výchozí bod, čili člen nultého řádu rozvoje v mocninách  $1/N$ , bez něhož nelze provádět přesné výpočty. Později se ukázalo, že tato limitní teorie velkého  $N$  je jistým druhem teorie strun pojednané v následujícím odstavci. Jak ale přesně postupovat aby tato idea fungovala, zůstává otevřeným problémem. O důležitý pokrok se postaral opět Witten, když roku 1983 objevil to, co dnes nazýváme **Wessův-Zuminův-Wittenův model**, jehož konstrukce se opět opírá o topologické triky s dvourozměrným prostoročasem. Tak, jako Hilbertův prostor kvantověmechanických modelů dává reprezentaci nějaké konečněrozměrné grupy transformací symetrie modelu, tak Wessův-Zuminův-Wittenův model je založen na Kacově-Moodyho nekonečněrozměrné grupě symetrie, a metodách, kterými se roku 1974 podařilo Victoru Katzovi a Robertu Moodymu zobecnit Weylovu teorii reprezentací konečněrozměrných grup na teorii reprezentací grup nekonečněrozměrných. Jeho Hilbertův prostor je pak reprezentací této grupy. Navíc může být rozložen na části, které jsou reprezentacemi grupy konformních transformací. Z fyzikálního hlediska je tato kvantová teorie pole zajímavá zejména tím, že jí lze přesně řešit bez potřeby poruchového rozvoje, neboť teorie reprezentace grup nám dovoluje přímá a přesná řešení. Pozoruhodné také je, že Kacovy-Moodyho grupy jsou grupami kalibračních symetrií, jež se ukázaly důležitými pro rozvoj standardního modelu. Jak studium těchto grup nižší dimenze může pomoci při výzkumu kalibračních symetrií ve čtyřrozměrném prostoročase, si ukážeme v následujícím odstavci věnovaném teorii strun.





**Victor G. Kac (1943)**



**Robert Vaughan Moody (1941)**

Pro každý daný prostor libovolné dimenze lze konstruovat kvantověmechanický model se supersymetrií, jehož Hilbertův prostor závisí čistě na topologii. Tento Hilbertův prostor je konečněrozměrný a odpovídá homologii prostoru. Homologie prostoru je topologickým invariantem, tzn. nemění se při spojitých deformacích daného prostoru a závisí tedy čistě jen na jeho topologii. Homologické invarianty udávají zpravidla počty děr různé dimenze pro daný prostor a topologie tohoto prostoru je jimi jednoznačně určena.

Podoblastí topologie s dlouhou historií je teorie uzlů. Jedním z hlavních cílů této teorie je nalezení topologických invariantů, jež by šlo přiřadit každému uzlu. Tyto invarianty se nemění, když deformujeme uzel, např. když se jej snažíme rozplést.

Topologický invariant uzlů objevil roku 1985 Vaughn Jones (tzv. Jonesův polynom). Michael Atiyah navrhl, že by mohla existovat čtyřrozměrná kvantová teorie pole, jejímž Hilbertovým prostorem by byla Floerova homologie třírozměrné hranice čtyřrozměrného prostoru a jejími pozorovatelnými veličinami by byly Donaldsonovy topologické invarianty. Atiyah ukázal, že Floerova homologie třírozměrného hraničního prostoru je přesně to, co je potřeba zafixovat, chceme-li dát smysl Donaldsonovým invariantům v případě čtyřrozměrného prostoru s hranicí. Roku 1988 použil Witten čtyřrozměrnou kvantovou teorii se supersymetrií a zavedl tzv. zkroucenou (twisted) supersymetrii, zaručující existenci supersymetrie i v zakřiveném čtyřrozměrném prostoru. Tato nová symetrie mu umožnila propojit supersymetrické kvantové teorie pole s topologií, do jediné topologické kvantové teorie pole. Snažíme-li se pro každý daný čtyřrozměrný prostor v této teorii

vypočítat pozorovatelné veličiny, dostaneme nenulová řešení pouze tehdy, jedná-li se o veličiny nezávislé na deformacích prostoru – Donaldsovy polynomy. Jejich výpočet v obecném čtyřrozměrném prostoru je však mimořádně nesnadný.



**Sir Vaughan Frederick Randal Jones (1952)**



**Sir Michael Francis Atiyah (1929)**



**Andreas Floer (1956 – 1991)**



**Simon Kirwan Donaldson (1957)**

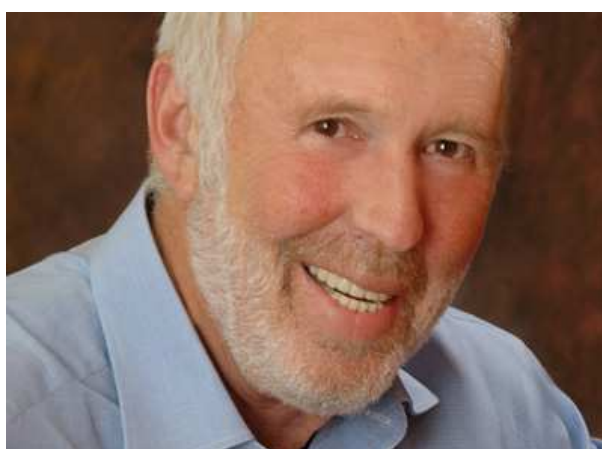
Jonesův polynom je topologický invariant, na nějž se v osmdesátých letech minulého století soustřeďovala značná část výzkumu uzlových teoretiků. Objevil se i v jedné práci o dvourozměrných konformních kvantových teoriích pole. Během léta 1988 se Wittenovi podařilo vytvořit topologickou kvantovou teorii pole, jejímiž fyzikálními veličinami byly přesně Jonesovy polynomy. Byla založena na Yangových-Millsových kalibračních polích a na uzlu, který se objevil jako trajektorie nabitě částice pohybující se v třírozměrném prostoročase. Lagrangián teorie je tvořen z Yangových-Millsových polí kalibrační teorie a nazývá se Chernův-Simonsův člen podle geometrů, kteří jej jako první zkoumali roku 1971.



**Shiing-Shen Chern (1911 – 2004)**



**Erik Peter Verlinde (1962)**



**James Harris Simons (1938)**

Nejpřekvapivější částí teorie je její Hilbertův prostor. Ten je konečněrozměrný s dimenzí určenou Verlindeovou formulí objevenou poprvé v konformní teorii pole. Ve Wittenově nové teorii pole se vynořovaly udivující vztahy mezi topologií uzlů a třírozměrnými prostory, teorií Kacových-Moodyho grup a jejich reprezentací, konformními teoriemi pole, atd.

Kromě Chernovy-Simsonovy a Donaldsonovy topologické kvantové teorie pole, jež vedly k novým myšlenkám o topologii třírozměrných a čtyřrozměrných prostorů, jakož i o uzlech v těchto prostorech, rozvinul Witten roku 1988 ještě jeden druh kvantové teorie pole, který nazval **topologickým modelem sigma**. V modelech sigma se poli v každém bodě prostoročasu přiřazuje bod v tzv. terčovém prostoru, což je obecně zakřivený prostor určité dimenze. V algebře toků je terčovým prostorem grupa. Prostor všech možných prvků grupy je zakřiveným prostorem

jisté dimenze. Pro grupu  $U(1)$  je to prostě kružnice – prostor dimenze 1. Pro grupu  $SU(2)$  je to třírozměrný povrch čtyřrozměrné koule.

Wittenův topologický model sigma je dvourozměrná kvantová teorie pole, jejímž terčovým prostorem je komplexní varieta. Každý bod takového prostoru je určen komplexními souřadnicemi. Ke každému bodu lze pak provést otočení souřadnic o  $90^\circ$  dané násobením imaginární jednotkou. Aby mohla mít varieta komplexní strukturu, zřejmě musí být její dimenze sudé číslo, neboť každá komplexní souřadnice je dvojicí reálných souřadnic.

V topologickém sigma modelu má jak dvourozměrný prostoročas, tak i terčový prostor komplexní strukturu, takže můžeme na pole klást **podmínku analytičnosti**. Podle této podmínky je pole analytické, pokud při násobení imaginární jednotkou (ať už v prostoročase či v terčovém prostoru) obdržíme totéž pole. Ačkoli obecně existuje neomezený počet všech možných konfigurací pole, počet těch analytických bývá zpravidla konečný.

Pozorovatelné veličiny ve Wittenově topologickém modelu sigma tvoří počty těchto analytických konfigurací pole. Tato čísla jsou v tomto modelu analogiemi Donaldsonových polynomů z Wittenovy topologické kvantové teorie pole.

Problém výpočtu takových čísel spadá do oblasti tzv. **algebraické geometrie**, studující všechna možná řešení soustav polynomiálních rovnic více proměnných. Má-li systém polynomiálních rovnic nekonečný počet řešení, tvoří tato řešení body abstraktního prostoru velmi komplikované geometrie a topologie. Jsou-li pak polynomiální rovnice rovnicemi komplexních proměnných, pak prostory jejich řešení tvoří komplexní variety a mohou být terčovými prostory pro Wittenův topologický model sigma. Obecně se očekává, že pro každý prostor řešení poskytne topologický model sigma číslo, udávající počet analytických polí, které bude druhem topologického invariantu. Dvěma různým prostorům řešení pak budou odpovídat různé počty analytických polí.

Topologický model sigma je supersymetrická kvantová teorie pole, v níž Witten opět použil triku zkroucení supersymetrie. Navíc jde o případ konformní teorie pole, neboť pozorovatelné veličiny jsou zde invariantní vzhledem ke všem transformacím dvourozměrného prostoročasu, včetně konformních transformací. V teoriích tohoto typu lze provést

jednoduchou transformaci, jež převádí původní teorii v novou, která je však velmi těsně provázána s původní. Tehdy hovoříme o tzv. **zrcadlité symetrii**. Terčový prostor se zde nazývá **zrcadlovým prostorem**.

V roce 1990 demonstrovali fyzici Brian Greene a Ronen Plesser, že zatímco některé výpočty prováděné v původním prostoru mohou být neobyčejně komplikované, či dokonce nemožné, stejné výpočty provedené v zrcadlovém prostoru se velmi výrazně zjednoduší a přitom poskytují správné výsledky.

V posledních desetiletích na poli zrcadlité symetrie velmi usilovně pracují jak matematici, tak fyzici. Zkoumala se řada souvislostí mezi topologickými modely sigma, zejména variantou topologické struny, maticovými modely obsahujícími integrály přes grupy  $SU(N)$  pro velmi velká  $N$  a mnoho dalšího, ve snaze porozumět kalibračním teoriím pro velká  $N$  na základě teorie strun, skýtající netriviální topologickou informaci.



**Brian Greene (1963)**

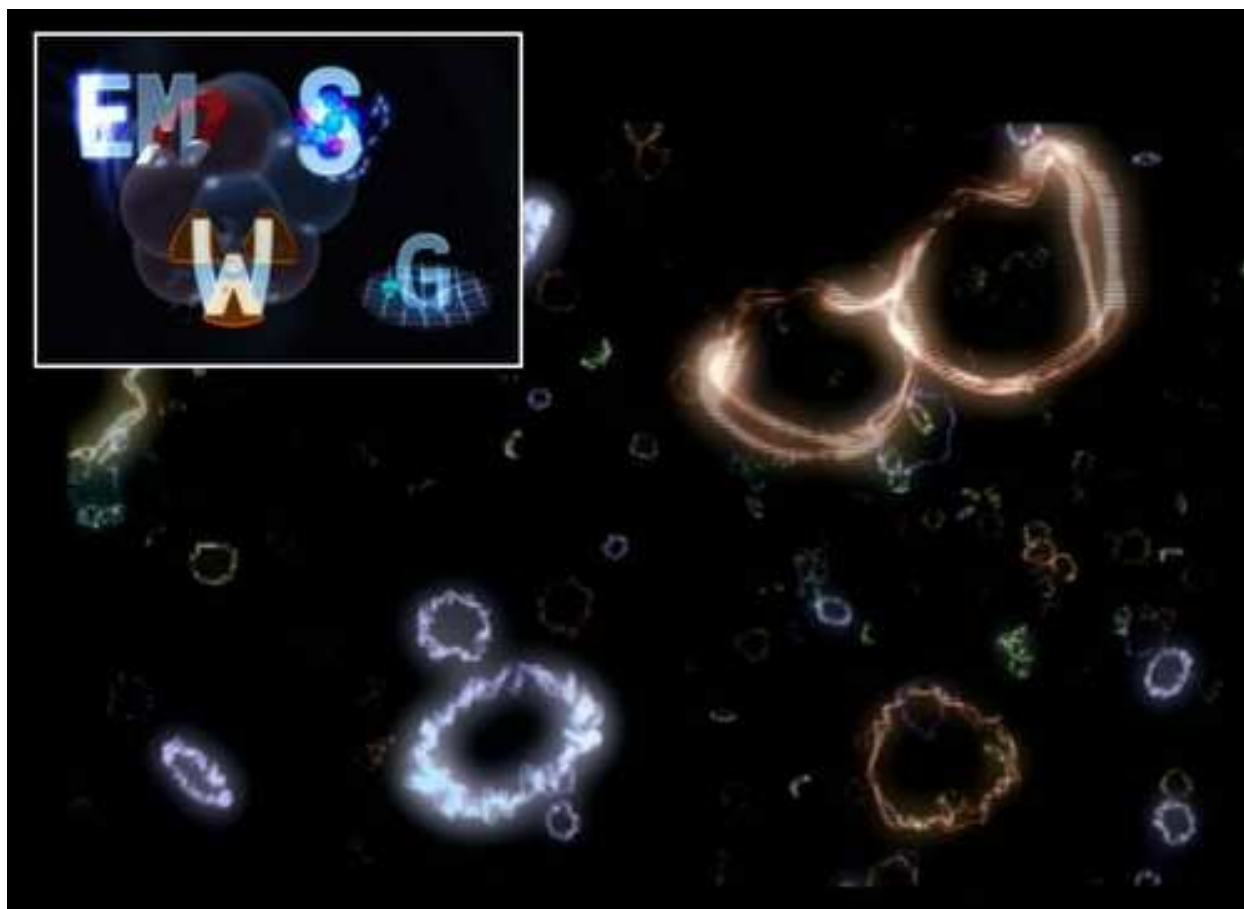


**M. Ronen Plesser (1963)**

## 2) Teorie strun

Jedním z výchozích pojmů fyziky je pojem **hmotného bodu** - idealizovaného objektu, jehož hmotnost (i ostatní parametry) jsou soustředěny do jediného geometrického bodu prostoru. Trajektorie, kterou probíhá hmotný bod v prostoru je křivka, jejíž každý bod lze charakterizovat prostorovými souřadnicemi a časem. Dynamika hmotného bodu v klasické mechanice je dána Newtonovými rovnicemi, v relativistické mechanice je popsána pohybem po světočáře ve čtyřrozměrném rovinném prostoročase STR, nebo v zakřiveném prostoročase OTR. V kvantové mechanice je dynamika částice popsána Schrödingerovou rovnicí; trajektorie, spojující počáteční a koncový stav částice v prostoru, jsou východiskem i při kvantování pomocí Feynmanových intergrálů přes trajektorie.

V klasické mechanice byl pojem hmotného bodu pouhou **idealizací** skutečných těles, výhodnou pro analýzu jejich pohybu. Speciální teorie relativity však posílila důležitost pojmu hmotného bodu: žádný elementární (fundamentální) objekt nemůže mít konečné prostorové rozměry, neboť žádný signál či interakce se nemůže šířit nadsvětelnou rychlostí. Při srážce dvou těles nenulových rozměrů nemohou všechny části reagovat ihned, z čehož plyne, že těleso je složeno z elementárnějších objektů: **⇒ elementární objekt musí být bodový**. Bodový charakter fundamentálních objektů - zdrojů pole - však vede k závažným problémům v teorii pole: při limitních přechodech k nulovým rozměrům vznikají matematicky **divergující výrazy** vedoucí k **nekonečným hodnotám**. Těchto divergencí je třeba se zbavit (v podstatě *ad hoc*) metodami **renormalizace** - provést třeba vhodnou kalibrační transformaci tak, aby se výsledky výpočtu shodovaly s experimentálními hodnotami.



Obr. 9.14: V teorii strun jsou částice jednorozměrné útvary v mnohorozměrném světě. Levý horní obdélník symbolizuje stav současné fyziky. Tři interakce jsou propojeny kvantovou teorií: EM – elektromagnetická, S (Strong) – silná a W (Weak) slabá. Poněkud stranou stojí zatím gravitace označená symbolem G, která je popisována pomocí zakřiveného prostoročasu.

Podařilo se však najít způsob, jak se těmto nepříznivým matematickým divergencím vyhnout systematicky - jsou to teorie, v nichž namísto bodů jsou elementárními objekty **jednorozměrné** čáry či smyčky nenulové délky - tzv. **struny**.

Časoprostorová historie struny je popsána funkcemi  $x^\mu(\sigma, \tau)$ , které zobrazují dvourozměrnou "světloplochu" struny do časoprostoru. Kromě  $x^\mu$  jsou na světloploše i další pole, popisující další stupně volnosti, jako například stupně spojené se supersymetrií nebo kalibračními symetriemi. Překvapivě, *klasická* dynamika teorie strun (odpovídající klasické teorii pole s nekonečně mnoha poli) je popsána konformně invariantní 2D *kvantovou* teorií pole

$$S = \left( \frac{1}{L_{str}} \right)^2 \int d\sigma d\tau L(x^\mu, \dots) . \quad (9.247)$$

Co povyšuje struny nad vícerozměrné analogie je to, že tato 2D teorie je renormalizovatelná. (Objekty s  $p$  dimenzemi,  $p$ -brány, mají  $p+1$ -rozměrný světoobjem.) Poruchovou kvantovou teorii strun lze formulovat metodou Feynmanova integrálu přes historie. To obnáší zaměstnat Riemannovu plochu s  $g$  otvory jako  $g$ -smyčkový Feynmanův diagram. Přitažlivými rysy tohoto přístupu je, že (pro orientované uzavřené struny) je právě jeden diagram v každém řádu poruchové teorie, reprezentující elegantní (ač komplikovaný) matematický výraz, který je ultrafialově konečný. Hlavním nedostatkem je, že nedává žádnou radu, jak jít za poruchovou teorii.

Abychom měli naději být realističtí, šest dimenzí se musí svinout do malé geometrické variety, jejíž rozměry jsou pravděpodobně srovnatelné s  $L_{str}$ . Jelikož prostoročasová geometrie je určena dynamicky (tak jako v obecné relativitě), jsou povoleny pouze geometrie splňující tyto dynamické rovnice ( $R_{\mu\nu} = 0$ ). HE teorie, svinutá na konkrétní druh variety, zvaný Calabiho-Yauova varieta, má mnoho kvalitativních vlastností při nízkých energiích, které imitují standardní model: lehké fermiony se sdružují do rodin, jejichž počet je dán topologií CY variety. Těchto úspěchů bylo dosaženo v poruchovém rámci a jsou nutně přinejlepším kvalitativní, protože neporuchové jevy jsou podstatné pro pochopení narušení supersymetrie a jiné důležité detaily.



**Eugenio Calabi (1923)**



**Shing-Tung Yau (1949)**

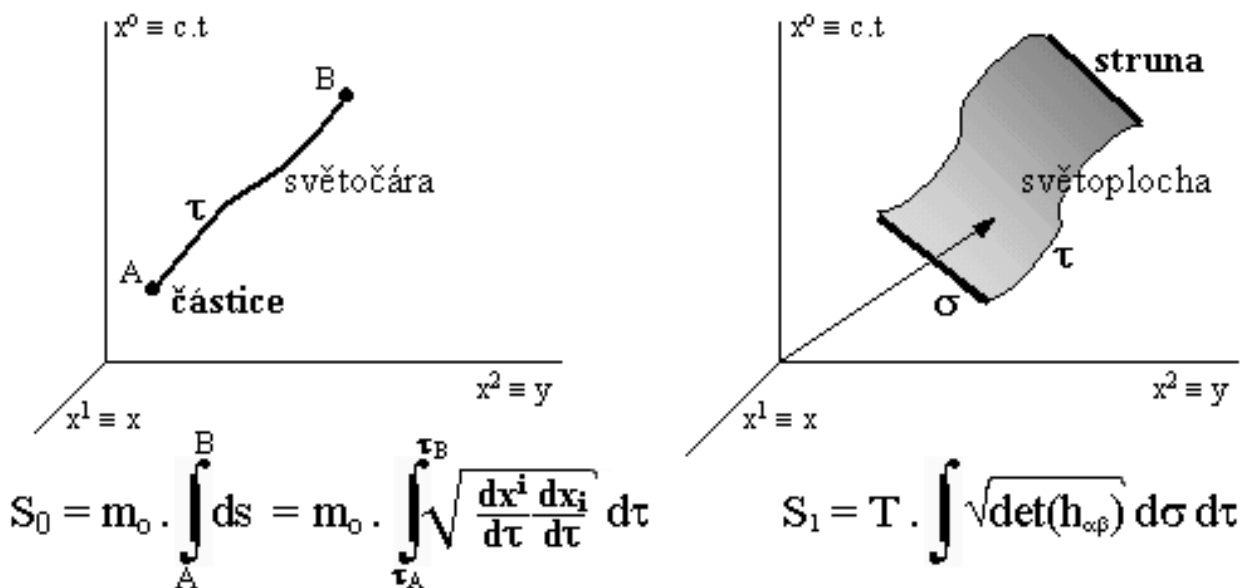


## Popis pohybu volné struny

Volná (relativistická) částice o klidové hmotnosti  $m_0$  v prostoročase ( $d = 4$ ) se popisuje integrálem akce

$$S_0 = m_0 \int ds = m_0 \int \sqrt{\frac{dx^i}{d\tau} \frac{dx_i}{d\tau}} d\tau \quad (9.248)$$

kde  $s$  je prostoročasový interval a  $\tau$  vlastní čas částice. Tato akce  $S_0$  (index "0" zde vyjadřuje, že se jedná o bodovou, tj. 0-rozměrnou částici) je úměrná **délce světočáry** částice (relativistickému intervalu  $s$ ) - obr. 9.15 vlevo. Variační princip nejmenší akce  $\delta S = 0$  pak vede k Lagrangeovým rovnicím, z nichž plynou pohybové rovnice relativistické mechaniky ve STR ( 2.220 ), resp. ( 1.35 ) v OTR. Tento postup lze zobecnit i na jiný počet dimenzí než  $d=4$ .



Obr. 9.15: Vlevo: Trajektorie "0-rozměrné" volné částice v prostoročase je 1-rozměrná světočára, kterou lze parametrizovat délkou intervalu  $s$  nebo vlastním časem  $\tau$ . Vpravo: Trajektorií, kterou 1-rozměrná struna proběhne v prostoročase, je 2-rozměrná svět plocha, kterou lze parametrizovat vlastním časem  $\tau$  a dalším parametrem  $\sigma$ , charakterizujícím polohu bodu na křivce znázorňující strunu.

Přirozené zobecnění integrálu akce z hmotného bodu na strunu vede k tomu, že akce struny bude úměrná **velikosti světoplochy**, kterou struna projde při svém pohybu (evoluci) v prostoročase - obr. 9.15 vpravo:

$$S_1 = T \int \sqrt{\det(h_{\alpha\beta})} d\sigma d\tau , \quad (9.249)$$

kde  $h_{\alpha\beta}$  ( $\alpha, \beta = 1, 2$ ) je dvourozměrná metrika na světoploše;  $T$  popisuje "**napětí**" struny, dané hmotností struny na jednotku délky.

### Teorie strun v silné interakci

Představa jednorozměrných objektů - **strun** - se zrodila na konci 60. let při jednom z pokusů o popis silných interakcí. Studium srážek hadronů (především  $\pi$ -mезonů) při vysokých energiích vedlo k tzv. Venezianově modelu, který amplitudy účinných průřezů kvantifikuje pomocí součinů a podílů  $\Gamma$ -funkcí, jejichž argumentem jsou druhé mocniny součtů čtyřhybností interagujících částic a částic výsledných. Ukázalo se, že spektrum Venezianova modelu je identické se spektrem normálních modů "vibrace" jednorozměrného kvantovaného objektu - **relativistické struny**. Feynmanovy diagramy, popisující interakce dvou částic, lze sjednotit do jednoho diagramu, v němž 4 interagující částice (2 vstupující a 2 vystupující) jsou znázorněny jako **otevřené struny** (lineární útvary topologicky ekvivalentní úsečce); stejně tak lze znázornit i výměnné částice zprostředkující interakci. Každá struna přitom může "vibrovat" různým způsobem a podle toho se jevit jako částice určitého druhu (elektron, foton, ...) - částice jsou **vzbuzenými stavy** "vibrace" struny. S touto názornou interpretací Venezianovy formule přišli nezávisle Yoichiro Nambu, Leonard Susskind a Holger Nielsen



Gabriele Veneziano (1942)



Holger Bech Nielsen (1941)

Velikost strun se zde uvažovala v řádu  $10^{-13}$  cm, odpovídající charakteristickému dosahu silné interakce.

Podrobná matematická analýza ukázala, že kvantová teorie bosonové struny je konzistentní (např. ve smyslu konformní invariance) jen tehdy, je-li dimenze prostoročasu  $d = 26$ . To dramaticky převyšuje pozorovaný počet dimenzí  $d = 4$  našeho prostoročasu. Tento nesoulad je možné vyřešit hypotézou o "svinutí" neboli **kompaktifikaci** přebytečných dimenzí do malých uzavřených (kompaktních) variet, jak to bylo zmíněno výše v souvislosti se zobecněnými Kaluzovými-Kleinovými unitárními teoriemi.

Dalším nedostatkem původní teorie strun je, že ve spektru volné bosonové struny (které obsahuje pouze transversální módy) základní stav odpovídá částici se záporným kvadrátem hmotnosti, tj. částici s imaginární hmotností - **tachyonu**. Druhý excitovaný stav je již příznivější - odpovídá kvantu s nulovou klidovou hmotností a se spinem 2, které lze ztotožnit s gravitonem, viz níže.

V polovině 70. let byla vytvořena **kvantová chromodynamika** (byla stručně zmíněná výše), která silné interakce interpretuje pomocí kvarků a gluonů, jež na sebe působí prostřednictvím tzv. "barevného náboje". Velký úspěch kvantové chromodynamiky odsunul dosavadní strunové modely na více než 10 let do pozadí.

Někteří fyzikové si ale v té době zjednodušeně představovali, že kvarky v hadronech jsou spojeny strunami (gluonovými trubicemi), které je drží pohromadě jako "gumová vlákna".

## Základní principy teorie strun

Vlastnosti a základní principy strunové teorie si ukážeme nejprve na příkladu teorie bosonových strun, která má mnoho společných vlastností s teorií superstrun. Uvažujme jednodimenzionální útvar - strunu, která představuje částici a šíří se na pozadí plochého Minkowského prostoročasu  $M$  obecné dimenze  $D$ . Z matematického hlediska se jedná o vložení Lorentzovské dvourozměrné variety  $N$  tvořené světoplochou pohybující se struny do  $M$ . Necht'  $\xi^a = (\tau, \sigma)$  jsou souřadnice na  $N$  a necht' vložení je dáno rovnicemi

$$X^\alpha = X^\alpha(\tau, \sigma). \quad (9.250)$$

Zde  $X^\alpha$  jsou souřadnice zadané v Minkowského prostoročase a řecké indexy nabývají hodnot  $\alpha = 0, \dots, D$ , zatímco latinské indexy hodnot  $a = 0, 1$ .

O podvarietě  $\Sigma$  získané tímto vložení předpokládáme, že je orientovatelná, takže se jedná o tzv. Riemannovu plochu. Topologie  $\Sigma$  je zřejmě řízena charakterem vložení (9.250). Rozeznáváme dva typy bosonové strunové teorie. Jsou-li prostorové řezy  $E$  kompaktní, mluvíme o teorii uzavřených strun, v opačném případě pak o strunách otevřených. Budeme se zabývat pouze uzavřenými strunami.

V analogii s účinkem pro volnou částici v relativistické mechanice, který je dán vlastní délkou oblouku světočáry této částice, je účinek pro strunu dán plochou její světoplochy (Nambuova-Gotoova akce)

$$S = \frac{1}{2\pi\alpha'} \int_{\Sigma} \sqrt{|\gamma|} d^2\xi, \quad (9.251)$$

kde  $\alpha'$  je konstanta tzv. inverzní strunové tenze a  $\gamma$  je determinant indukovaného metrického tenzoru  $\gamma_{ab}$  na  $\Sigma$ , daného jako

$$\gamma_{ab} = \partial_a X^\alpha \partial_b X^\beta \eta_{\alpha\beta}. \quad (9.252)$$



**Tetsuo Gotō (1950)**

Konstanta  $\alpha'$  má roli Planckovy konstanty v kvantové mechanice a zejména je parametrem, vůči němuž se provádí mocninný rozvoj. Je-li dán účinek ( 9.251 ), lze již konstruovat Feynmanovy diagramy podobně jako v kvantové elektrodynamice, s tím rozdílem, že diagramy jsou nyní nikoli jednorozměrné, ale dvourozměrné, a musíme v nich uvážit všechny možné topologie Riemannových ploch reprezentujících světloplachu. Pomocí vzorce ( 9.252 ) lze účinek ( 9.251 ) přepsat ve tvaru (Polyakovova akce)

$$S = \frac{1}{2\pi\alpha'} \int_{\Sigma} \sqrt{|\gamma|} d^2\xi \gamma^{ab} \partial_a X^\alpha \partial_b X^\beta \eta_{\alpha\beta} . \quad ( 9.253 )$$

Ve vztahu ( 9.253 ) pro účinek si lze povšimnout tří význačných principiálních symetrií. První symetrií je invariantnost ( 9.253 ) vzhledem k tzv. Poincarého transformaci v  $D$ -dimenzionálním Minkowskiho prostoročase. Druhou symetrií je invariance vzhledem k souřadnicovým transformacím na světloplše struny. Konečně za třetí je ( 9.253 ) invariantní vzhledem ke konformní transformaci

$$\gamma_{ab} \rightarrow e^{2\phi(\tau,\sigma)} \gamma_{ab} , \quad ( 9.254 )$$

což je tzv. Weylova symetrie.



Alexandr Markovič Polyakov (1945)

Dalším úkolem je odvodit ze zadané akce pohybové rovnice. Variací ( 9.253 ) podle metriky na světloploše obdržíme podmínku na vymizení tenzoru energie a hybnosti (energie-impulzu)  $T_{ab}^{\text{sheet}}$  této světloplochy

$$T_{ab}^{\text{sheet}} = \partial_a X^\alpha \partial_b X^\beta \eta_{\alpha\beta} - \frac{1}{2} \gamma_{ab} \partial_c X^\alpha \partial_d X^\beta \gamma^{cd} \eta_{\alpha\beta} . \quad ( 9.255 )$$

Variace ( 9.253 ) podle  $X^\alpha$  pak dává vlnovou rovnici pro tyto veličiny

$$\gamma^{\alpha\beta} \nabla_a \nabla_b X^\alpha = 0 , \quad ( 9.256 )$$

kde  $\nabla_a$  značí kovariantní derivaci podle  $\xi^a$ . Jestliže nyní předpokládáme, že světloplocha struny má tvar válce, lze na ní zvolit souřadnice  $\sigma \in \langle 0; 2\pi \rangle$  a  $t \in (-\infty; \infty)$  spolu s plochou metrikou  $\gamma_{ab}$ . Někdy se též ukazuje výhodným zavést izotropní souřadnice  $\xi^+$  a  $\xi^-$  vztahem  $\xi^\pm = \sigma \pm \tau$ . V nich se systém ( 9.256 ) redukuje na soustavu jednoduchých dvoudimenzionálních vlnových rovnic, jež je možné separovat a získat řešení

$$X^\alpha = f^\alpha(\sigma - \tau) + g^\alpha(\sigma + \tau) , \quad ( 9.257 )$$

s obecnými funkcemi  $f^\alpha$  a  $g^\alpha$  řídícími doleva a doprava se pohybující strunové excitace.

Skutečnost, že hustota Lagrangeovy funkce nezávisí na derivacích

$\gamma_{ab}$ , určuje primární vazbu, kdy je moment konjugovaný k  $\gamma_{ab}$  nulový. Aby tato vazba platila ve všech časech, požadujeme splnění sekundární vazby, kterou lze vyjádřit podmínkou, aby se tenzor energie-impulzu ( 9.255 ) rovnal nule. Ačkoli tenzor energie-impulzu strunové světoplochy má jednoduché vyjádření pomocí jednotlivých polí, přímé kvantování činí technické obtíže. Tento tenzor má dvě nezávislé složky a pro kvantování sekundární vazby se s výhodou užívá Fourierova rozvoje jeho složek  $T_{++}^{\text{sheet}}$  a  $T_{--}^{\text{sheet}}$  v souřadné bázi ( $\xi^+$ ,  $\xi^-$ ). Koeficienty tohoto rozvoje se nazývají Virasorovy koeficienty.

Následujícím cílem v budování teorie strun se přirozeně stává kvantování. Obvyklý postup sestává ze sestavení rozvoje souřadnic  $X^\alpha$  do Fourierovy řady a určení jejich netriviálních Poissonových závorek. V tomto stadiu ale stále zůstává jistá kalibrační volnost, jak můžeme uvidět z následující úvahy. Uvažme souřadnicovou změnu v souřadnicích  $X^\alpha$ . Pokud tato změna zobrazí body ze světoplochy struny opět na tuto světoplochu, lze ji chápat jako souřadnicovou transformaci na  $E$ , tedy jako nefyzikální stupeň volnosti. Pokud ale změna  $X^\alpha$  posouvá body světoplochy mimo ni samotnou, jedná se o fyzikální deformaci této světoplochy. Jednou z výhodných metod fixování této volnosti je zavedení dvou izotropních souřadnic podél světelného kužele. Přesněji, kalibrace světelného kužele spočívá ve zvolení dvou izotropních směrů v Minkowského prostoročase za souřadnicové křivky nových souřadnic, zpravidla nazývaných  $X^+$  a  $X^-$ . Jako kalibraci klademe podmínku, aby v souřadnicích  $(X^+, X^-, X^I)$ , kde  $I = 1, \dots, D - 2$ , souřadnice  $X^+$  závisela pouze lineárně na  $\tau$  (rovnoměrný přímočarý pohyb), a dále, aby byly splněny vazebné rovnice vyplývající z anulace Virasorových koeficientů. Nyní lze přímočaře kvantovat, a to nahrazením Poissonových závorek komutátory a nahrazením Fourierových koeficientů příslušnými kreačními a anihilačními operátory.



**Miguel Angel Virasoro (1940)**

Další věcí je, že musíme zaručit platnost sekundárních vazeb. Klasicky jsou tyto vazby vyjádřeny anulováním všech Virasorových koeficientů. Aby sekundární vazba platila i po kvantování, tak dostáváme z analogického požadavku neobyčejně důležitý výsledek, totiž fyzikální stavy (teorie). Jak si za chvíli ukážeme, teorie obsahuje tachyon, dále obsahuje  $(D - 2)^2$  nehmotných stavů a nekonečně mnoho hmotných stavů. Zastavme se blíže u nehmotných stavů. Každou obecnou matici  $(D - 2) \times (D - 2)$  můžeme rozložit na její stopu, což je skalár, na její symetrickou část, která má  $D(D - 3)/2$  komponent, a na antisymetrickou část s  $(D - 2)(D - 3)/2$  složkami. Tomuto rozkladu odpovídá nehmotný skalár zvaný dilaton, nehmotná částice se spinem 2, interpretovaná jako graviton, a nehmotná částice s potenciálem tvořeným antisymetrickým tenzorem druhého řádu.

Úvahy doposud prováděné nejsou zajisté obecně kovariantní. Abychom jejich kovarianci zajistili, lze využít tzv. Faddějevova-Popovova přístupu ke kvantování. Jestliže vyšetřujeme algebru tvořenou Virasorovými operátory, zjistíme, že obsahuje určitou anomálii, respektive přídavný člen. Tato anomálie závisí na dimenzi  $D$  Minkowského prostoročasu a musí být nulová, protože očekávaná hodnota homogenní části Virasorovy algebry vymizí. Jak zanedlouho poznáme, je tento požadavek splněn pouze tehdy, je-li dimenze prostoročasu rovna 26.

V teorii bosonové struny zjišťujeme, že operátor čtverce hmotnosti stringu má tvar



$$M \sum_{n=1}^{\infty} \left( \alpha_{-n}^i \alpha_n^i + (D-2) \frac{n}{2} \right), \quad (9.258)$$

kde faktor  $M$  závisí na výběru jednotkové hmotnosti (např.  $M = 8$ ),  $\alpha_{-n}$  resp.  $\alpha_n$  jsou kreační resp. anihilační operátory a podle zdvojeného indexu  $i$  se sčítá v souladu s Einsteinovou sumační konvencí od jedné do  $(D-2)$  (přes ryze prostorové souřadnice). Teorie je lorentzovsky invariantní (relativistická) jen když je dimenze časoprostoru 26.

Působením  $\alpha_n^i$  na energeticky nejnižší hladinu dostaneme nulu, ale přesto nám ve výrazu pro  $m^2$  zbude součet členů nutných k hermitičtému operátoru  $M(D-2) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{2}$ , což je divergentní suma, která má zápornou

zobecněnou hodnotu. Čtverec hmotnosti základního stavu je tedy záporný, hmotnost imaginární, což odpovídá částici, která se pohybuje nadsvětelnou rychlostí (proto zvané tachyon) a nebyla nikdy pozorována. A pokud alespoň trochu věříme v kauzalitu a v teorii relativity, nikdy pozorována nebude.



Ludvig Dmitrievič Faddějev (1934)



Viktor Nikolajevič Popov (1937 – 1994)

Můžeme dokonce jednoduše vysvětlit, proč bosonové stringy v jiné dimenzi než 26 nemohou fungovat. Uvažujeme-li energetickou hladinu hned nad tachyonem (nejméně vzbuzenou, v případě otevřených strun jednou, u uzavřených dvakrát), vidíme, že tato má pouze  $(D-2)$ -násobnou degeneraci. Uvažujeme-li o takto vzbuzeném stringu s vektorem energie-hybnosti v čistě časovém směru, zdá se nemožné

z těchto stavů vytvořit multiplet grupy  $SO(D - 1)$  rotací fixujících tento směr (u ještě vyšších hladin, kde je degenerace vyšší, se to nemožné nezdá). Máme však jednu záchranu: vektor nepůjde namířit do čistě časového směru a tedy argument neobstojí, bude-li tato hladina nehmotná. Požadujeme tedy, aby

$$m^2 = M \left[ (D - 2) \left( \sum_{n=1}^{\infty} \frac{n}{2} \right) + 1 \right] = 0. \quad (9.259)$$

Naším úkolem bude nyní určit dimenzi  $D$ , vyhovující této rovnosti.

### Riemannova zeta funkce

Definujme ji s parametrem  $s$ , obvykle nulovým

$$\zeta_s(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (n + s)^{-x}. \quad (9.260)$$

Pro nás zajímavý součet je  $\zeta_0(-1)$ . Poznamenejme, že pro  $n > 1$  je funkce dobře definována, např.  $\zeta_0(2) = \frac{\pi^2}{6}$  (přesně). Funkci, která je v určitém oboru komplexních čísel dobře definována a jde jednoznačně analyticky rozšířit, prodlužme, všimnuv si, že

$$\zeta_1(x) = \zeta_0(x) - 1, \quad (9.261)$$

(při přechodu od  $s = 0$  k  $s = 1$  pouze vynecháme první sčítanec). Rozepišme funkci do Taylorovy řady v okolí  $s = 0$ , zajímaje se o  $s = 1$ .

$$\begin{aligned} \zeta_0(x) - 1 = \zeta_1(x) &= \\ &= \zeta_0(x) + \frac{\partial}{\partial s} \zeta_s(x) \Big|_{s=0} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial s^2} \zeta_s(x) \Big|_{s=0} + \frac{1}{3!} \frac{\partial^3}{\partial s^3} \zeta_s(x) \Big|_{s=0} \dots \end{aligned} \quad (9.262)$$

Derivace zeta funkce podle proměnné  $s$  však lze lehce vypočítat:

$$\frac{\partial}{\partial s} \zeta_s(x) = \sum_{n=1}^{\infty} (n+s)^{(-x-1)} (-x) = (-x) \zeta_s(x+1) \quad (9.263)$$

a obecně  $m$ -tá derivace je:

$$\frac{\partial^m}{\partial s^m} \zeta_s(x) = (-x-1)(-x-2)\dots(-x-m+1) \zeta_s(x+m). \quad (9.264)$$

Odečteme-li  $\zeta_0(x)$  od obou stran rovnice (9.262) a zohledníme-li poslední vztah pro derivaci, máme

$$\begin{aligned} -1 = (-x) \zeta_0(x+1) + \frac{(-x)(-x-1)}{2!} \zeta_0(x+2) + \\ + \frac{(-x)(-x-1)(-x-2)}{3!} \zeta_0(x+3) + \dots \end{aligned} \quad (9.265)$$

Dosadíme do této rovnice  $x \rightarrow 0$ . Vzhledem k tomu, že pro  $x > 1$  má zeta funkce konečnou hodnotu, kterou zde násobíme číslem jdoucím k nule, vliv má jen první člen. To jest

$$\lim_{x \rightarrow 0} x \zeta_0(x+1) = 1. \quad (9.266)$$

Dosadíme-li  $x \rightarrow -1$ , máme

$$-1 = \zeta_0(0) + \frac{1}{2!} (-x-1) \zeta_0(x+2). \quad (9.267)$$

Ale

$$\lim_{x \rightarrow -1} (-x-1) \zeta_0(x+2) = -1, \quad (9.268)$$

a proto

$$\zeta_0(0) = -\frac{1}{2}. \quad (9.269)$$

A nakonec dosazením  $x \rightarrow -2$  zbudou v rovnici jen členy

$$-1 = 2\zeta_0(-1) + \frac{2}{2!}\zeta_0(0) + \frac{2}{3!}(-x-2)\zeta_0(x+3), \quad (9.270)$$

což po úpravě dává

$$-1 = 2\zeta_0(-1) - \frac{1}{2} - \frac{1}{3}, \quad (9.271)$$

a tedy

$$\zeta_0(-1) = -\frac{1}{12}. \quad (9.272)$$

Zajisté, existuje-li limita u bodu -1, chápeme ji přímo jako funkční hodnotu. Všimněme si, že všechny provedené operace byly platné (a sumy konvergentní) alespoň v nějakém kruhu v komplexní rovině.

Rovnice (9.259) je tedy splněna pro dimenzi  $D = 26$ .

(Argumentace byla trošku zjednodušená, protože první hladina nad základní by nešla namířit časovým směrem, ani kdyby byla tachyonová. Ale intuice radí, že podmínky pro splnění požadovaných komutátorů grupy Poincaré vedou k rovnici (s jedním řešením  $D = 26$ ) a nikoli k nerovnici.)

Východisko z tachyonové zhouby spočívá v tom, že kromě obyčejných rozměrů  $\mathbf{x}_1$  až  $\mathbf{x}_{24}$  a  $\mathbf{x}^-$  v daném čase  $\mathbf{x}^+$  (počítáme v kalibraci na světelném kuželi – *light-cone gauge* – čili náš "čas"  $\mathbf{x}^+ = \frac{\mathbf{x}^0 + \mathbf{x}^{25}}{\sqrt{2}}$ )

přidáme antikomutující proměnné, čímž se zbavíme fluktuací v základní hladině, která se stane nehmotnou (jako je třeba foton). Kritický rozměr se změní ze šestadvaceti na deset a struna se stane superstringem.

Podobné triky jako ty, které jsme využili pro výpočet  $\sum n$ , se však hojně využívají také v kvantové elektrodynamice, teorii silných nebo slabých interakcí a ve standardním modelu. Přinášejí předpovědi, jež jsou v perfektním souladu s experimentem. Užívána je například dimenzionální regularizace, v níž předpokládáme, že časoprostor má

obecnou dimenzi  $d$ , zjistíme, že pro určitá  $d$  vycházejí konečné výsledky, a ty analyticky prodloužíme na nám zajímavé  $D = 4$ .

fyzikální oprávnění těchto postupů obecně není známo. Lze si dnes kupříkladu jen obtížně představit, jak v rámci současných teorií ospravedlnit **dimenzionální regularizaci**. Pro některé speciální případy regularizace to známo je, ale konkrétně v kvantové elektrodynamice nikoliv. Dokážeme matematicky napsat regulátory, podle kterých to vyjde v souladu s experimentem, ale nevíme proč.

To vede řadu fyziků k názoru, že QED, či obecněji kvantová teorie pole, je ve skutečnosti jen efektivní teorií, za kterou se skrývá něco hlubšího, co dost možná nově definuje spojitý prostoročas jako nízkoenergetickou limitu čehosi fundamentálnějšího.

### Supersymetrická teorie strun - superstruny



Pierre Ramond (1943)



André Neveu (1946)

Jak bylo výše v pasáži o supergravitaci nastíněno, pokusy o sjednocení gravitační interakce s ostatními typy interakcí v rámci kalibračních kvantových teorií pole vedly k pojmu **supersymetrie**. Tato teorie spojuje bosony a fermiony: ke každému bosonu předpovídá "superpartnera" kterým je fermion, a naopak. V roce 1970 teoretický fyzik Pierre Ramond a zhruba ve stejné době nezávisle na něm André Neveu a John Schwarz našli způsob, jak upravit rovnice teorie strun tak, aby kromě bosonů popisovaly i fermiony. Ukázalo se, že hledaným klíčem je dodání nového typu symetrie – konkrétně symetrie záměny bosonů za fermiony a naopak – do teorie strun. Aplikace těchto nových

symetrií, vyjádřených geometricky (komutačními i antikomutačními relacemi v prostoročase) na teorii strun vedla ke snížení potřebné dimenze prostoročasu z původní  $d = 26$  na  $d = 10$ . Vznikla tak **supersymetrická teorie strun**, neboli **teorie superstrun**. Vedle bosonové struny zde jako její partner vystupuje fermionová struna, neboli superstruna, která má další, spinorovou proměnnou.

V tomto případě existuje díky supersymetrii ke každému  $X^\alpha$  jeho superpartner, spinor  $\psi^a$  definovaný na světoploše struny. Superstruny nemají ve svém spektru tachyon a obsahují bosony i fermiony.

Ve spektru excitací relativistické kvantované struny se vyskytuje částice s nulovou klidovou hmotností a spinem  $s = 2$ , kterou lze identifikovat s **gravitonem** - kvantem gravitačních vln. To přivedlo J. Sherka a J. Schwarze v r.1974 k myšlence, že i když teorie strun není vhodná pro popis silných interakcí, mohla by se stát vhodným nástrojem k budování **kvantové teorie gravitace**. Přitom však velikost těchto hypotetických strun je nutno z původně uvažovaných  $10^{-13}$  cm radikálně zmenšit na rozměry  $10^{-33}$  cm **Planckovy-Wheelerovy délky**, charakteristické pro kvantovou gravitaci.

Excitace superstrun mohou být "vibrační", "rotační", i excitace "vnitřních stupňů volnosti" - vnitřní symetrie, supersymetrie. Různé kvantové excitace (normální módy superstruny) se interpretují jako spektrum elementárních částic. Toto spektrum se ukazuje být natolik bohaté, že může generovat nejen všechny stavební prvky standardního modelu elementárních částic, ale zahrnovat i kvantovou gravitaci.

Úspěšné dokončení koncepce superstrun by tak představovalo **jednotný přístup** k různorodému světu elementárních částic a všech jejich interakcí.

Všechny interakce strun mají též původ, jímž je štěpení a spojování strun. Tím se v teorii automaticky objeví silové působení jakožto důsledek dynamických procesů v prostoročase. Protože výsledná teorie musí být zároveň v souladu se speciální relativitou i s kvantovou teorií, neexistuje téměř žádná libovůle a pravidla pro dělení a opětovné spojování strun jsou prakticky jednoznačně určena. Interakce a pohyby strun jsou tudíž elegantně sjednoceny způsobem, který nemá v nestrunové fyzice obdoby.

V běžné částicové fyzice lze v zásadě libovolně přidávat různé druhy interakcí a tedy i odpovídajících vazbových konstant, určujících velikost

a charakter jejich působení. V teorii strun naproti tomu existují jen dvě fundamentální konstanty. První je **napětí struny**, určující energii připadající na jednotku délky struny, druhou je **vazbová konstanta**, charakterizující pravděpodobnost, s jakou se struna rozštěpí. Vazbová konstanta je bezrozměrné číslo související s s možnými interakcemi strun a ve skutečnosti s vlastně nejedná o konstantu v pravém slova smyslu. Je to fyzikální stupeň volnosti odlišující od sebe přípustná řešení teorie. Její hodnota závisí na konkrétních geometricko – topologických vlastnostech vícerozměrného světa, v němž struny žijí. Všechny známé fyzikální konstanty by měly být v principu vyjádřitelné pomocí těchto dvou čísel (např. gravitační konstanta by měla souviset s jejich součinem).

Když se jednorozměrná struna pohybuje a vyvíjí v prostoročase, vytváří přirozeně dvourozměrný povrch určité plochy. Princip, který řídí veškeré interakce strun minimalizuje tento povrch. Takto jednoduchý zákon jednoznačně určuje veškeré pohyby, vývoj i silové interakce mezi strunami. Sjednocují se tím jedním tahem všechny známé částice se silami, jež mezi nimi působí.

Konce otevřených strun popisují nabitě částice. Nehmotná vibrace struny napnuté mezi nimi, pak příslušný boson, zprostředkovávají sílu mezi nimi. Struny tak mohou popisovat jak částice, tak síly mezi nimi. Má-li být teorie strun v souladu se speciální teorií relativity, musí se při jejich interakcích objevovat občas též uzavřené smyčky. Právě tyto smyčky identifikovali roku 1974 Sherk se Schwarzem a nezávisle na nich mladý japonský fyzik Tamiaki Yoneya jako gravitony.



**Tamiaki Yoneya (1948)**

Ukázalo se tak, že sama konzistence teorie strun vyžaduje, aby zahrnovala též gravitaci. Rozdíl mezi gravitací a ostatními interakcemi je přitom přirozeně vysvětlen topologickými rozdíly mezi otevřenými a uzavřenými strunami.

Podobně jako u dřívějších kvantových teorií pole a vícedimenzionálních unitárních teorií, i zde se nabízejí zajímavé hypotézy **astrofyzikálních** a **kosmologických důsledků** teorie superstrun. Jak uvidíme ihned v následujících kapitolách, zajímavé astrofyzikální aspekty teorie superstrun byly studovány v souvislosti s termodynamikou a kvantovou evaporací černých děr (Hawkingův efekt). Pomocí metod teorie strun se podařilo odvodit vzorec pro entropii černé díry, a to nezávisle na Hawkingově a Bekensteinově přístupu. To umožňuje lépe proniknout jak do podstaty kvantově-gravitačních procesů, tak do úlohy horizontů a černých děr v unitární teorii pole.

Zajímavé mohou být i kosmologické důsledky zobecněné teorie superstrun. V pojetí duálních p-brán by vesmír mohl být 3-dimenzionální bránou (3-bránou), vyvíjející se na pozadí 11-rozměrné variety s vhodnými kompaktifikacemi. A vznik vesmíru velkým třeskem by mohl být způsoben **srážkou** dvou p-brán. Různá řešení teorie superstrun mohou předpovídat **různé vesmíry** s různými vlastnostmi (dimenzemi, hodnotami fyzikálních konstant či spektry hmotností elementárních částic); k reflexi těchto možností a jejich selekci možná řekne své i **antropický princip**.

## **M-teorie, 11-rozměrná teorie strun**

Další vývoj teorie superstrun pokračoval výzkumy M.Grena, J.Schwarze a E.Wittena, kteří našli takové kalibrační grupy, aby teorie superstrun byla plně kovariantní v prostoročase (v duchu OTR). Bylo nalezeno pět takových modelů teorie superstrun, z nichž nejzajímavější se jevíly dvě tzv. *heterotické teorie* s kalibračními grupami  $SO(32)$  a  $E_8 \times E_8$ .

Zbývajících 3 teoriemi jsou teorie typu I, typu IIA, typu IIB. Obě teorie typu II mají dvě supersymetrie v desetirozměrné řeči, ostatní jen jednu. Teorie prvního typu je založena na neorientovaných strunách otevřených i uzavřených, ostatní pouze na orientovaných uzavřených.



Významnou úlohu v teorii superstrun v té době sehrála analýza matematické (a z toho následně plynoucí i fyzikální) ekvivalence neboli **duality** mezi různými modely superstrun. Tyto duality představují nové typy symetrií, sjednocující různé modely, které mohou mít na první pohled odlišnou formu, avšak vedou k rovnocenným fyzikálním výsledkům.

V polovině 90. let 20. století se lidé poučili, že struny jsou jen první mezi rovnými (jelikož připouštějí poruchový rozvoj), ovšem podobně důležité pro tuto teorii jsou i objekty všech ostatních dimenzí, zvané  **$p$ -brány**, kde  $p$  označuje dimenzi.

Konkrétně se ukázalo, že heterotická teorie  **$SO(32)$**  s vazebnou konstantou  $g$  je ekvivalentní teorii strun typu I (která má stejnou kalibrační grupu  **$SO(32)$** ) s vazebnou konstantou  $1/g$ .

Tomuto vztahu dvou teorií se říká  $S$ -dualita a je jím vysvětleno chování tří teorií z pěti při velkém  $g$ . Podobně strunová teorie typu IIB je  $S$ -samoduální.

Předpokládejme nyní, že teorie A, B jsou  $S$ -duální. Označuje-li  $g$  vazebnou konstantu a  $f$  nějakou veličinu, znamená to, že  $f_A(g) = f_B(1/g)$ . Tato dualita, jejíž rozpoznání tvořilo první krok druhé revoluce, zobecňuje elektro-magnetickou dualitu Maxwellových rovnic. Vtip je v tom, že Diracova kvantovací podmínka nutí magnetické náboje, aby byly celými násobky převrácené hodnoty kvanta elektrického náboje (při správné normalizaci), což je vazebná konstanta. Krom  $S$ -dualit byly objeveny tzv.  $T$ -duality, v nichž je svinutí jedné teorie na varietu o typickém rozměru  $R$  ekvivalentní svinutí druhé teorie na varietu o typickém rozměru  $1/R$  (přesněji  $L_{\text{str}}^2/R$ , kde  $L_{\text{str}}$  je délka superstruny). Díky svinutí vzniknou dva nové typy excitací. Struna může mít kvantovaný impuls  $n/R$  ve směru svinuté dimenze, což je excitace známá už z obyčejných bodových Kaluza-Kleinových teorií.

Tento impuls přispěje ke kvadrátu energie struny výrazem  $\left(\frac{n}{R}\right)^2$ .

Jedním důsledkem je, že na krátkých vzdálenostech běžná geometrie přestává fungovat a je nahrazena “kvantovou geometrií”, matematicky popsanou  $2D$  konformní teorií pole. Také nás vede k zobecnění

Heisenbergovy relace neurčitosti, podle které je neurčitost  $\Delta x > \frac{\hbar}{\Delta p}$ , ale

také než strunové měřítko délky  $L_{\text{str}}$ .

T-dualita spojuje fyziku velkého prostoročasu s fyzikou malého.

Představme si zakřivený prostoročas jako válec. Struna ovinutá kolem tohoto válce má dva druhy energetických stavů. Jedny vznikají z vln této struny, těm budeme říkat **vibrační módy**.

Jestliže je válec tlustý, pak tyto vibrace mají dlouhou vlnovou délku a tudíž malou energii. Energie odpovídající různým počtům vln po obvodu válce leží tedy blízko sebe.

Je-li válec tenký, je vlnová délka vibračních módů malá a tyto stavy mají tedy velkou energii a jednotlivé energetické hladiny budou ležet daleko od sebe.

Struna však také může být okolo válce ovinuta vícekrát.

Jestliže je válec opět tlustý, pak je struna více napjatá a tudíž má i vyšší energii.

Různé počty ovinutí kolem válce nazýváme **navíjecími módy**.

uzavřená struna může  $m$ -krát ovinout kružnici, kteréžto obtáčení přidává ke čtverci energie  $(2\pi RmT)^2$ , kde  $T = (2\pi L_{\text{str}}^2)^{-1}$  je napětí struny. Dva

důležité příklady dvojic T-duálních teorií jsou IIA/IIB a HE/HO.

(V posledním případě je ještě třeba přidat tzv. **Wilsonovy smyčky**, narušující symetrii.).

Tyto dvojice jsou také ekvivalentní pro  $g = 0$ , což je další důvod, proč jsme je spojili v obrázku 9.16. Původní bosonová teorie strun v 26 rozměrech je T-samoduální, což se pro samoduální poloměr projeví zvětšením kalibrační grupy z  $U(1)^2$  na  $SU(2)^2$ .

Energie odpovídající různým navíjecím módům tedy v případě tlustého válce budou ležet daleko od sebe, zatímco u tenkého válce budou hladiny blízko.

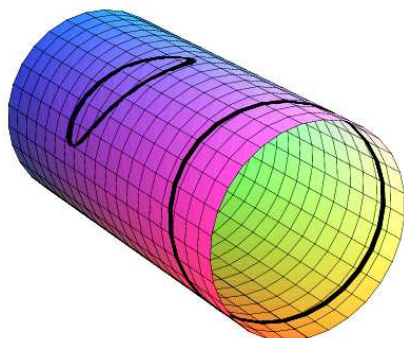
Pro makroskopického pozorovatele však různý původ vibračních a navíjecích stavů není zřejmý.

Oba válce, jak tlustý, tak i tenký, poskytují nakonec stejné energetické hladiny, které strunoví fyzikové interpretují jako částice.

Totožnost mezi energiemi strun ve vesmírech s kruhovou dimenzí o poloměrech  $R$  a  $1/R$  pramení matematicky z faktu, že energie mají tvar

$$\frac{v}{R} + wR, \quad (9.273)$$

kde  $v$  je vibrační číslo a  $w$  je navíjecí číslo.



**Obr. 9.16:** Plášť válce znázorňuje dvě dimenze prostoru zkompaktifikované na kružnici. Struna nalevo má navíjecí číslo nulové, kdežto struna napravo má buď  $w = 1$ , nebo  $w = -1$ , v závislosti na své orientaci

Tento výraz se nezmění při kombinované záměně

$$R \leftrightarrow \frac{1}{R}, \quad v \leftrightarrow w. \quad (9.274)$$

V obyčejné kvantové mechanice bodových částic jsou totiž vzdálenost a impuls svázány Fourierovou transformací.

Konkrétně vlastní stav  $|x\rangle$  polohy na kružnici o poloměru  $R$  lze vyjádřit jako

$$|x\rangle = \sum_v e^{ixp} |p\rangle, \quad (9.275)$$

kde a  $|p\rangle$  je vlastní stav impulsu s vlastní hodnotou

$$p = \frac{v}{R}. \quad (9.276)$$

V teorii strun však můžeme zkonstruovat ještě další reprezentaci vlastního stavu operátoru polohy:

$$|\tilde{x}\rangle = \sum_w e^{i\tilde{x}\tilde{p}} |\tilde{p}\rangle, \quad (9.277)$$

kde  $|\tilde{p}\rangle$  je vlastní stav operátoru navíjecího čísla s vlastní hodnotou

$$\tilde{p} = wR. \quad (9.278)$$

Z toho je okamžitě vidět, že  $x$  je periodická proměnná s periodou  $2\pi R$ , zatímco  $\tilde{x}$  má periodu  $2\pi/R$ , což znamená, že  $x$  je poloha na kružnici o poloměru  $R$ , zatímco  $\tilde{x}$  je poloha na kružnici o poloměru  $1/R$ .

Podobně to lze popsat rovněž i z hlediska energie a času.

Budou li nyní vektory  $|x\rangle$  a  $|\tilde{x}\rangle$  reprezentovat dvě vlnová klubka startující z počátku soustavy souřadné, pak jelikož se stav o energii  $E$  vyvíjí s fázovým faktorem  $Et$ , okamžitě vidíme, že spotřebovaný čas, a tedy i poloměr, je úměrný

$$t \sim \frac{1}{E} \sim R \quad (9.279)$$

pro módy vibrační, a

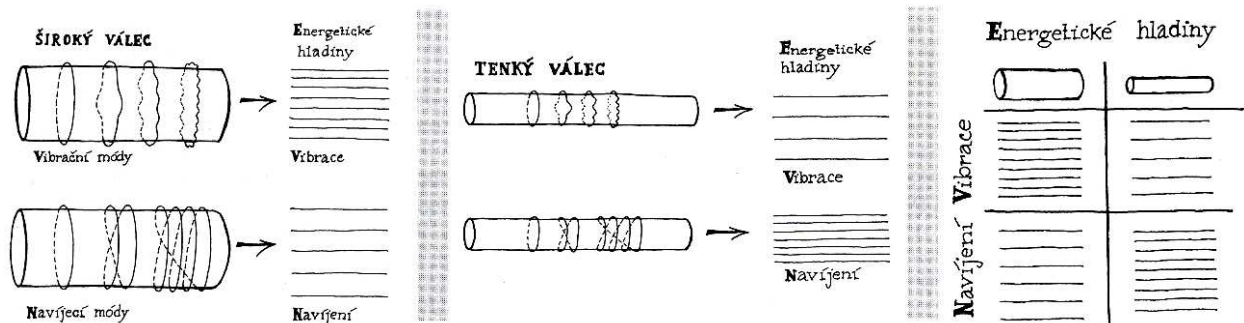
$$t \sim \frac{1}{E} \sim R \quad (9.280)$$

pro módy navíjecí.

Takže subkvantová měřítka prostoročasu mohou nakonec poskytovat stejnou fyziku, jako kosmologická měřítka našeho vesmíru.

Později byla diskutována i tzv. *U-dualita*, vzniklá kombinací S a T-duality. Tím bylo vysvětleno chování tří z pěti superstrunových teorií při velikém  $g$ .

Obr. 9.17



Pokusy o objasnění chování zbývajících dvou přinesly další překvapení. Edward Witten nejprve ukázal, že teorie typu IIA pro veliké  $g$  vytváří novou, jedenáctou dimenzi, svinutou na kružnici o obvodu úměrném  $g^{2/3}$ . Limitou pro nekonečné  $g$  je tedy teorie v jedenácti-rozměrném prostoročase.



Jens hoppe ( 1963 )



Hermann Nicolai (1952)

Již koncem 80. letech minulého století učinili fyzici Bernard de Wit, Jens Hoppe a Hermann Nicolai pokus o sestavení jedenácti-rozměrné membránové teorie. Uspěli na základě matematického triku – přepisu vlastností membrány do devíti nekonečně-rozměrných matic, popisujících chování příslušné membrány. Zároveň dokázali, že jejich maticová teorie může být konzistentní kvantovou teorií, tento důkaz se jim však podařilo provést pouze pro konečně-rozměrnou třídu matic. V roce 1996 jejich původní myšlenku rozvinuli strunoví teoretici Thomas Banks, Willy Fischler, Stephen Shenker a Leonard Susskind. Z jejich práce se postupně zrodila nová teorie zvaná **M-teorie**. Studium strunových dualit ukázalo, že všechny stávající teorie superstrun lze **sloučit** do této obecnější teorie (označení "M" pochází z

názvu *membrane*, někteří autoři jej dávají do souvislosti s přívlastky *matrix*, *mystery*, *magic* a pod.).



**Thomas Banks (1949)**



**Willy Fischler ( 1949 )**

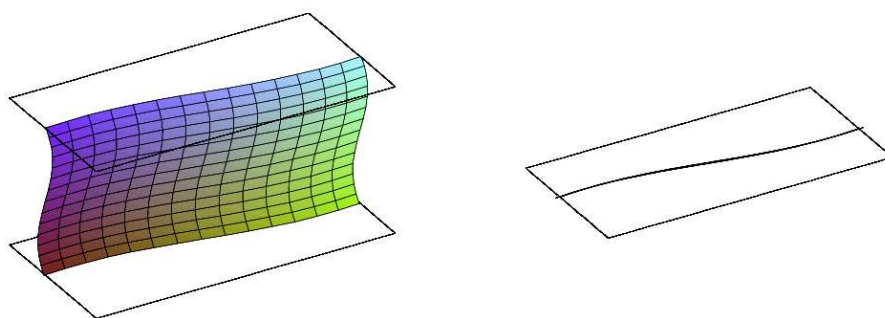


**Stephen H. Shenker ( 1949 )**

Do roku 1984 byla velmi populární teorie jedenácti-rozměrné supergravitace. Jedenáct je maximální dimenze, ve které lze lokálně supersymetrickou teorii vytvořit. Právě superstruny vzaly 11-rozměrné supergravitaci její prvenství, co se oblíbenosti týče. Jejich nízkoenergetickou limitou jsou supergravitace v dimenzi 10 (a případně nižší), eventuálně interagující se super-Yang-Millsovým polem. Superstruny tedy vysvětlují existenci těchto supergravitačních teorií. Jedenácti-rozměrná supergravitace zůstávala výjimkou, protože nešla odvodit z žádné superstrunné teorie. Mnohým se zdála z estetického hlediska nepřijatelná představa, že by existence 11-rozměrné supergravitace byla náhodou.

A měli pravdu. Nízkoenergetickou limitou M-teorie se ukázala být právě jedenácti-rozměrná supergravitace.

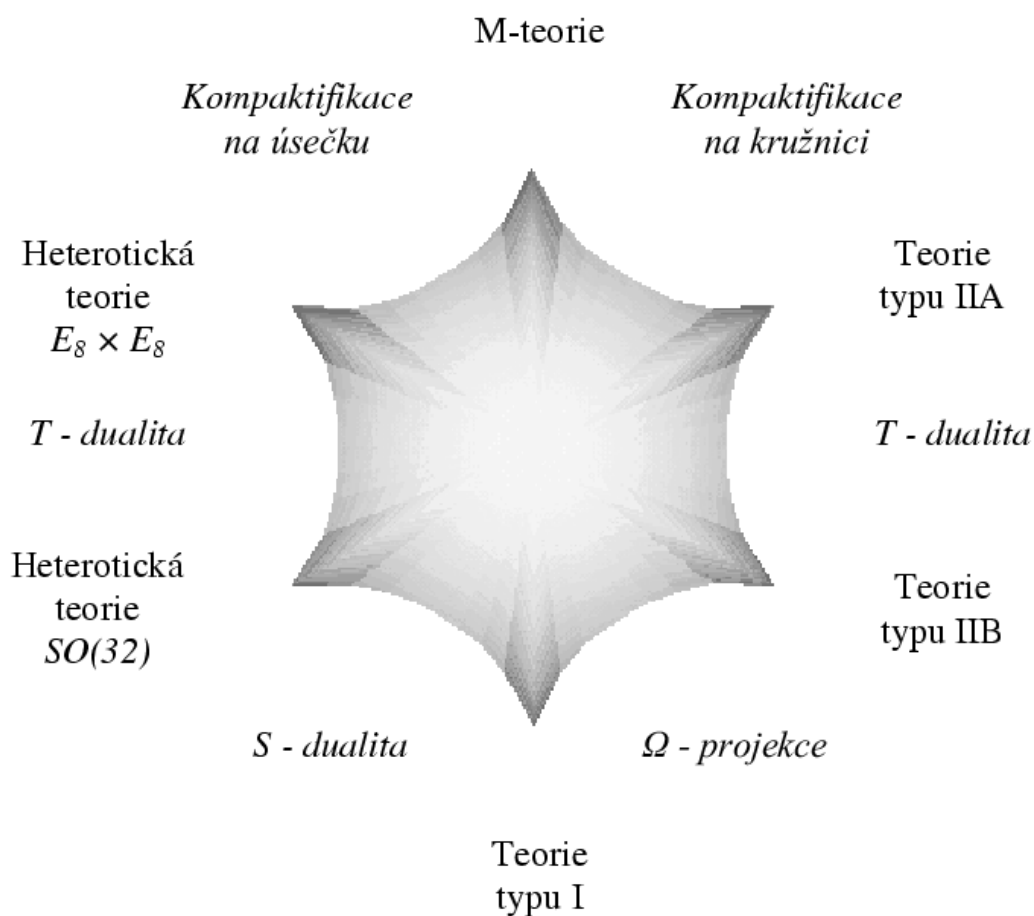
Nejtvrdší oříšek, totiž chování heterotické teorie  $E_8 \times E_8$ , se dočkal vysvětlení až ve slavném článku Edwarda Wittena a Petra Hořavy. Autoři ukázali, že také tato teorie vytváří jedenáctou souřadnici, jejíž délka je úměrná  $g^{2/3}$ , avšak souřadnice nemá tentokrát tvar kružnice, alebrž úsečky.



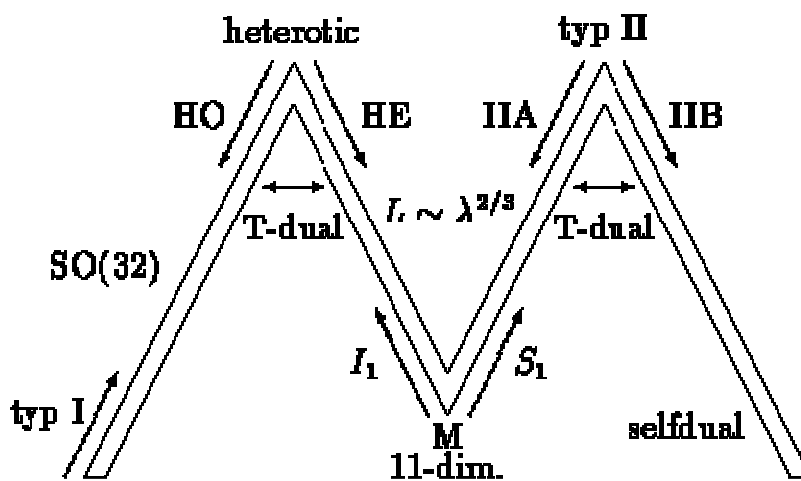
**Obr. 9.18:** Otevřená membrána napnutá mezi konci světa v heterotické M-teorii se v limitě malých vzdáleností mezi světobránami stává heterotickou strunou  $E_8 \times E_8$ .

Kalibrační grupa heterotické  $E_8 \times E_8$  se skládá z dvou stejných faktorů a je tedy ekvivalentní M-teorii na pásu jedenácti-rozměrného prostoročasu, přičemž každý ze dvou faktorů  $E_8$  kalibrační grupy žije na jedné ze dvou hranic tohoto pásovitého světa.

Petr Hořava pokračuje v pilné práci a přišel s návrhem na řešení záhady kosmologické konstanty. Náš svět je podle něho vhodné popisovat v řeči M-teorie se šesti souřadnicemi svinutými na Calabi-Yauovu varietu a jednou souřadnicí svinutou na úsečku. Na jednom jejím okraji (tj. jednom okraji světa) žije grupa  $E_8$ , která zodpovídá za narušení supersymetrie. Na druhém okraji žije "naše" grupa  $E_8$ , narušená do grupy standardního modelu. Hořava ukázal, že lokálně všude (včetně okrajů světa) zůstává teorie supersymetrická, což by měl být důvod pro vymizení kosmologické konstanty. Svět se jeví supersymetrickým pozorovateli kratšímu, než je délka úsečky. Ovšem globálně teorie supersymetrická není, protože oba okraje světa požadují jiný skok parametru supersymetrické transformace.



Obr. 9.19: M-teorie a všechny superstrunové teorie jsou vzájemně propojeny dualitami.



Obr. 9.20: Šipky znázorňují poruchové rozvoje kolem  $g = 0$ .  $S_1$  značí kompaktifikaci na dlouhou kružnici,  $I_1$  svinutí na dlouhou úsečku.



Dalším důsledkem dualit a sjednocení superstrunových modelů je rozšíření vlastní dimenze strun z původní  $D = 1$  na objekty s jiným (vyšším) počtem  $p$  prostorových rozměrů, např. 2-rozměrné objekty - **membrány**. Takovéto vícerozměrné objekty se již nenazývají superstruny, ale  **$p$ -brány**: pro  $p = 0$  se jedná o bod, pro  $p = 1$  je to struna, pro  $p = 2$  membrána, atd.

Další zajímavý princip pro M-teorii objevil E. Martinec a D. Kutasov. Zjistili, že všechny známé teorie strun je možné generovat pomocí tzv. (2,1) heterotických strun. Podobně, jako je obvyklá (1,0) heterotická teorie směsí vpravojdoucí 10D superstruny (1) a vlevojdoucí 26D bosonové struny (0), je (2,1) teorie směsí vpravojdoucí  $N = 2$  superstruny a vlevojdoucí  $N = 1$  superstruny. Liší se v tom, že vede jen ke konečnému množství stavů, protože kritická dimenze  $N = 2$  strun je  $D = 2$  (obě souřadnice jsou ovšem jistým způsobem zdvojeny) a neobsahuje tedy žádné příčné polarizace. (Parametr  $N$  udává stupeň supersymetrie na světlošle. Kromě hodnot 0,1,2 s kritickými dimenzemi 26,10,2 se promýšlela i hodnota 4, která ovšem vede ke zcela nepoužitelné kritické dimenzi  $D = -2$ .)



**Emil J. Martinec (1958)**



**David Kutasov (1963)**

$N=2$  superstruna obsahuje dvě časové a dvě prostorové souřadnice. Kvůli skloubení s  $9+1$  souřadnicemi vlevojdoucími je třeba k nim přidat a poté zase odhodit  $1+1$  souřadnici. (2,1) teorie tedy generuje teorii pole ve  $2+2$  rozměrech. Takovou membránu s 2 časovými souřadnicemi nazvali autoři "M-bránou". Z  $2+2$  souřadnic se efektivně  $0+1$  nebo  $1+1$  odhodí, proto nám zůstane teorie v  $1+1$  rozměrech (podle volby okrajových podmínek dostaneme různé teorie strun - bosonovou, teorii

typu II, heterotickou apod.) nebo v 2+1 rozměrech, kandidát pro konzistentní teorii membrán.

Výklad M-teorie by si zasloužil rozsáhlý text a proto zde odkážeme na vynikající práci věnovanou tomuto tématu:

<http://www.sytoprostor.euweb.cz/docs/Text.pdf> .

Zde si uvedeme jen několik základních údajů.

Hamiltonián tohoto kvantového modelu je velmi jednoduchý (maximálně supersymetrická Yangova – Millsova teorie s grupou  $U(N)$  v  $9 + 1$  dimenzích, redukováná do  $0 + 1$  dimenzí) a popisuje  $N$  základních částic zvaných **D0-brány**.

Každá D0-brána nese jednu jednotku hybnosti ve směru kolmém na plochu, do níž chceme informaci uložit.

Fyzikální systém s 9 páry matic  $\mathbf{X}$ ,  $\mathbf{P}$  rozměru  $N \times N$  (a jejich 16 antikomutujícími partnery, které však pro jednoduchost zanedbejme), jejichž maticovými elementy jsou operátory

$$\begin{aligned} (x^i)_{mn}, (p^i)_{mn}, \quad i = 1, \dots, 9, \quad m, n = 1, \dots, N, \\ \left[ (x^i)_{kl}, (p^i)_{mn} \right] = i\hbar \delta^{ij} \delta^{kn} \delta^{lm}. \end{aligned} \quad (9.281)$$

na Hilbertově prostoru tedy popisuje sektor stavů M-teorie s hybností  $N/R$  ve směru zvolené dimenze  $x^-$ .

Tato dimenze je právě oním směrem kolmým ke zvolené rovině hologramu.

Její hamiltonián vypadá takto:

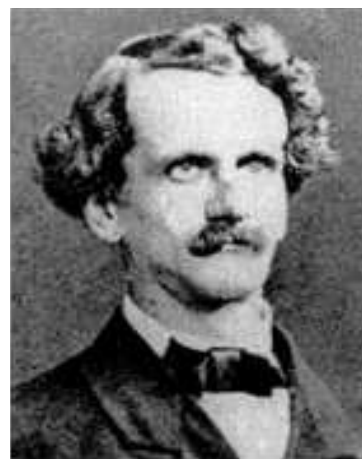
$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} = p^- = \frac{p^2 + m^2}{2p^+} = \\ = R \cdot \text{Tr} \left( \frac{1}{2} \Pi_i \Pi_i - \frac{M_{11}^6}{16\pi^2} [\mathbf{X}_i, \mathbf{X}_j]^2 - \frac{M_{11}^3}{4\pi} \lambda \Gamma^0 \Gamma^i [\mathbf{X}_i, \lambda] \right). \end{aligned} \quad (9.282)$$

kde  $\mathbf{X}_i$ ,  $i = 1, \dots, 9$  jsou hermitovské matice  $N \times N$ ,  $\Pi_i$  jsou jejich kanonické duály a  $\lambda$  jsou hermitovské fermionové matice jež mají 16 komponent formujících elementy grupy **Spin(9)**.

$D$ -brány (dirichletické brány, kde  $D$  označuje dimenzi) jsou zvláštní a velmi důležitou třídou brán. Nesou jméno podle Dirichletových okrajových podmínek pro souřadnice na koncích strun, které na  $D$ -bránách mohou končit.



**Johann Peter Gustav Lejeune Dirichlet**  
(1805 – 1859)



**Carl Gottfried Neumann**  
(1832 – 1925)

Obvyklé otevřené struny mají Neumannovy okrajové podmínky na koncích (derivace je rovna nule), ovšem T-dualita má za následek existenci duálních otevřených strun, které mají Dirichletovy okrajové podmínky (určena hodnota souřadnice na konci struny) pro T-dualizované souřadnice. Obecněji, v teoriích druhého typu můžeme uvažovat otevřené struny s

$$\left. \frac{\partial x^\mu}{\partial \sigma} \right|_{\sigma=0} = 0, \quad (\mu = 0, 1, \dots, p); \quad x^\mu \Big|_{\sigma=0} = x_0^\mu, \quad (\mu = p+1, \dots, 9). \quad (9.283)$$

Taková volba pro konstanty  $x_0^\mu$  naruší Lorentzovu invarianci, díky čemuž lidi tak dlouho odpuzovala. Řešení zdánlivého paradoxu spočívá v tom, že konce strun leží na dynamickém  $p+1$ -rozměrném objektu - na  $D$ -bráně.  $D$ -brány se studovaly už pár let, ovšem jejich význam vysvětlil až Joe Polchinski v roce 1996. Jsou důležité proto, že umožňují studovat excitace brány pomocí renormalizovatelné dvojdimenzionální kvantové teorie pole, namísto světoobjemové teorie  $D$ -brány samotné, která renormalizovatelná není. Tímto způsobem se stalo možné počítat neporuchové jevy užitím poruchových metod. Mnohé z dříve

nalezených  $p$ -brán jsou  $D$ -bránami. Další jsou spojeny s  $D$ -bránami symetriemi duality, takže i tyto lze dostat pod matematickou kontrolu. Souřadnice těchto  $N$   $D0$ -brán tvoří uspořádanou  $N$ -tici, jak jsme zvyklí, ale celou matici  $N \times N$ , která odpovídá vektorovému potenciálu v Yangově – Millsově teorii s grupou  $U(N)$ .

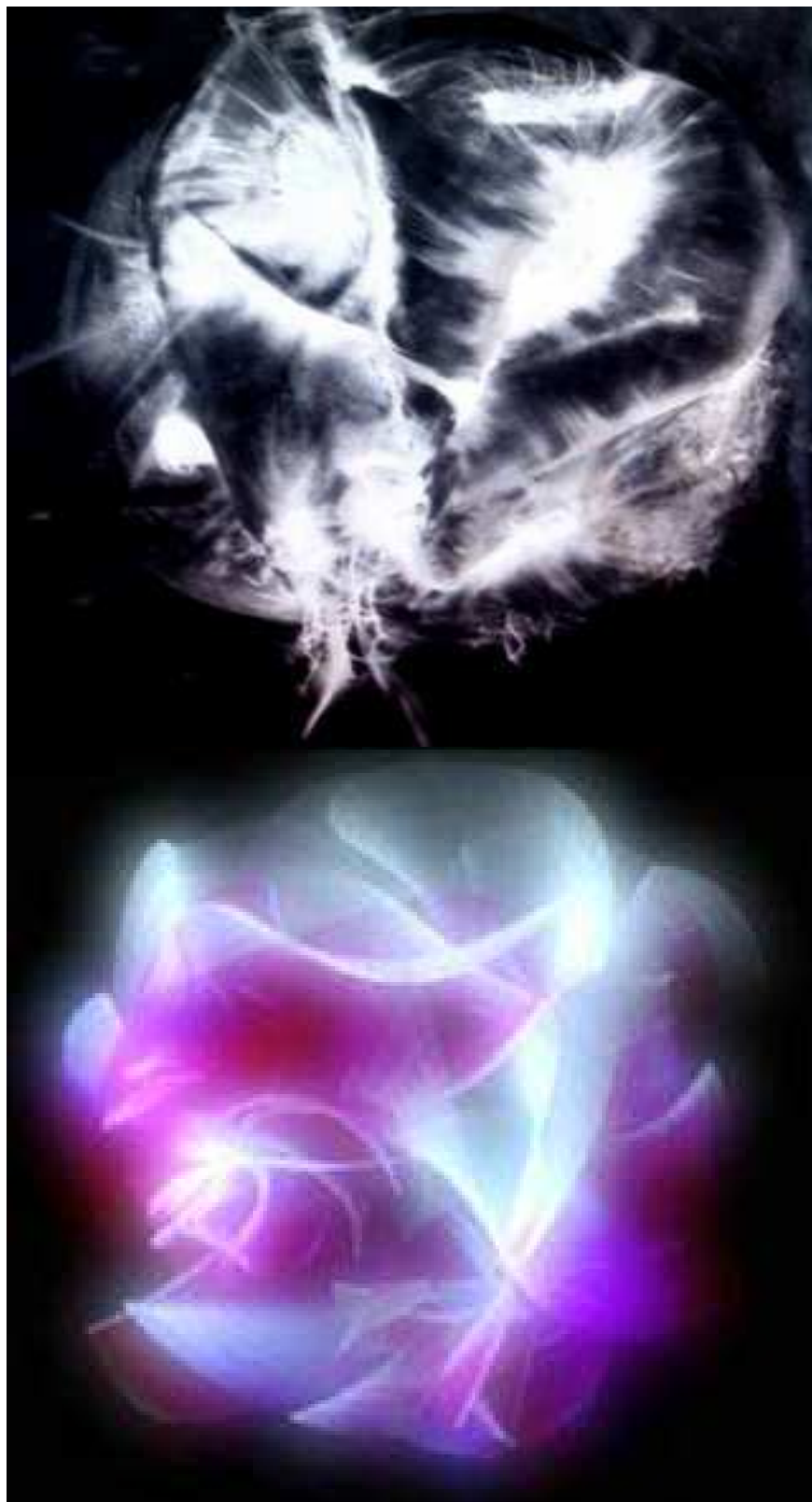


**Joseph Polchinski (1954)**

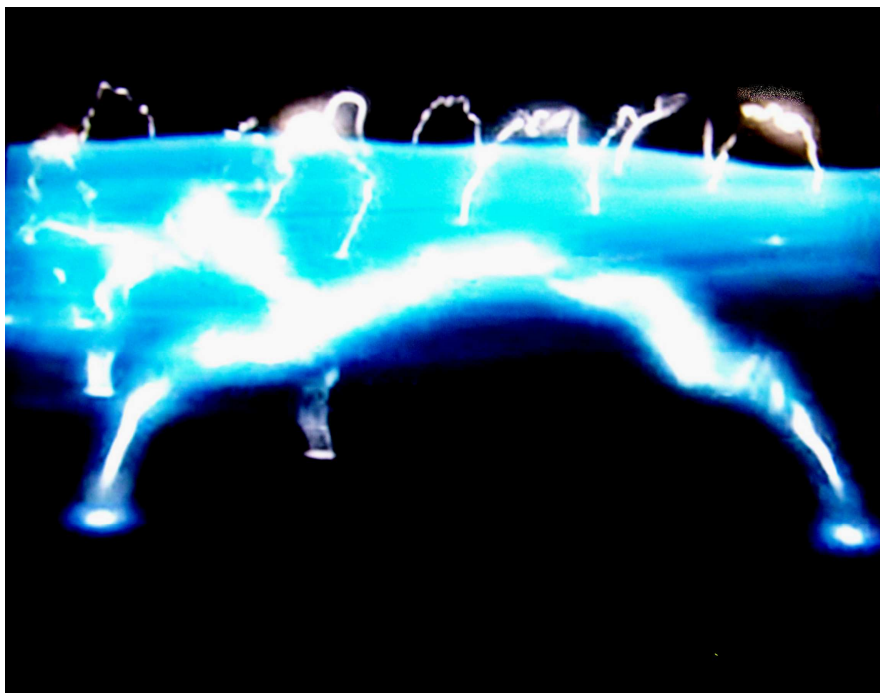
Pokud jsou  $D$ -brány daleko od sebe, matici lze s velkou přesností diagonalizovat (vlnová funkce je zanedbatelná v bodě odpovídajícím klasické konfiguraci silně nekomutujících matic díky potenciálnímu členu v hamiltoniánu  $\text{Tr}[\mathbf{X}_i \mathbf{X}_j]^2$  a diagonální elementy nám říkají, jaké jsou klasické polohy těchto částic. Čísla kolem diagonály ve skutečnosti nejsou přesně nulová, ale mohou kolem nuly fluktuovat.

Tyto fluktuace nediagonálních elementů matic představují virtuální efekty, které jsou dimenzionální redukcí vektorových bosonů, ovšem v kontextu maticového modelu jsou nelokálními veličinami a odpovídají za veškeré interakce mezi  $D0$ -bránami. Matic souřadnic těchto  $D0$ -brán je však o jednu méně, než je prostorových souřadnic (konkrétně jich je 9). Přesto tato teorie popisuje dění v původním prostoru, který má  $10 + 1$  dimenzí. Jedna  $D0$ -brána má pozici v posledním desátém prostorovém směru zcela neurčitou. Ovšem pokud máme  $D0$ -brán velké množství, můžeme do jejich počtu s pomocí Fourierových řad zakódovat i poslední desátou souřadnici.

To tedy znamená, že důvod, proč se cítíme býti trojrozměrnými bytostmi a nikoli dvourozměrným obrazem je ten, že se skládáme z velkého množství  $D$ -brán.



**Obr. 9.21: Calabi – Yauova (C – Y) varietta**



Obr. 9.22: Otevřené struny ukotvené na membráně C – Y variety

M-teorie ukazuje holografický princip na mnoha místech. Např. příčná velikost objektu složeného z  $D$ -brán roste tak, že celková plocha (v případě M-teorie devítirozměrná) je úměrná počtu  $D$ -brán. Výpočty vlastností černých děr v M-teorii tento závěr plně podporují. Černá díra se při malé hodnotě vazebné konstanty jeví jako soustava vibrujících strun a brán, na kterých se mohou struny zachytit svými konci.

Strominger a Vafa (a následně mnozí další) ukázali, že  $D$ -brán lze použít pro získání počtu kvantových mikrostavů spojených s klasickými konfiguracemi černých děr. Nejjednodušší případ, který byl studován nejdříve, je statická extrémní nabitá černá díra v pěti dimenzích.

Strominger a Vafa spočítali, že pro velké hodnoty náboje souhlasí entropie (definovaná jako  $S = \log N$ , kde  $N$  je počet kvantových stavů, ve kterých systém může být) s Bekenstein-Hawkingovou předpovědí (9.245). Výsledek byl zobecněn i pro černé díry ve 4D, stejně jako pro téměř extrémní (a správně vyzařující) nebo rotující. Posléze bylo propočítáno mnoho dalších černých děr, nejprve téměř extrémních, posléze ale také např. schwarzschildovských.



Andrew Strominger (1955)



Cumrun Vafa (1960)

Ukázalo se, že stupně volnosti reprezentované  $D0$ -bránami (jakési základní částice tvořící svět a také v této souvislosti nazývané **partony**) jsou v černé díře skutečně rozptýleny po povrchu, jelikož její entropie (kterou lze interpretovat jako veličinu úměrnou počtu stupňů volnosti či logaritmu počtu možných konfigurací) je úměrná jejímu povrchu, a nikoli objemu, jak jsme zvyklí z klasické termodynamiky.

Zároveň černá díra reprezentuje těleso, v němž je entropie soustředěna nejefektivnějším možným způsobem – plocha jejího horizontu je nejmenším možným povrchem oblasti, ve které se hmota s danou entropií může vyskytovat.

To přivedlo holandského fyzika Gerarda 't Hoofta a amerického fyzika Lennyho Susskinda k hypotéze, že všechny stupně volnosti, v nichž je uložena informace o všem na světě, se dají lokalizovat na povrch prostoru, v němž žijí.

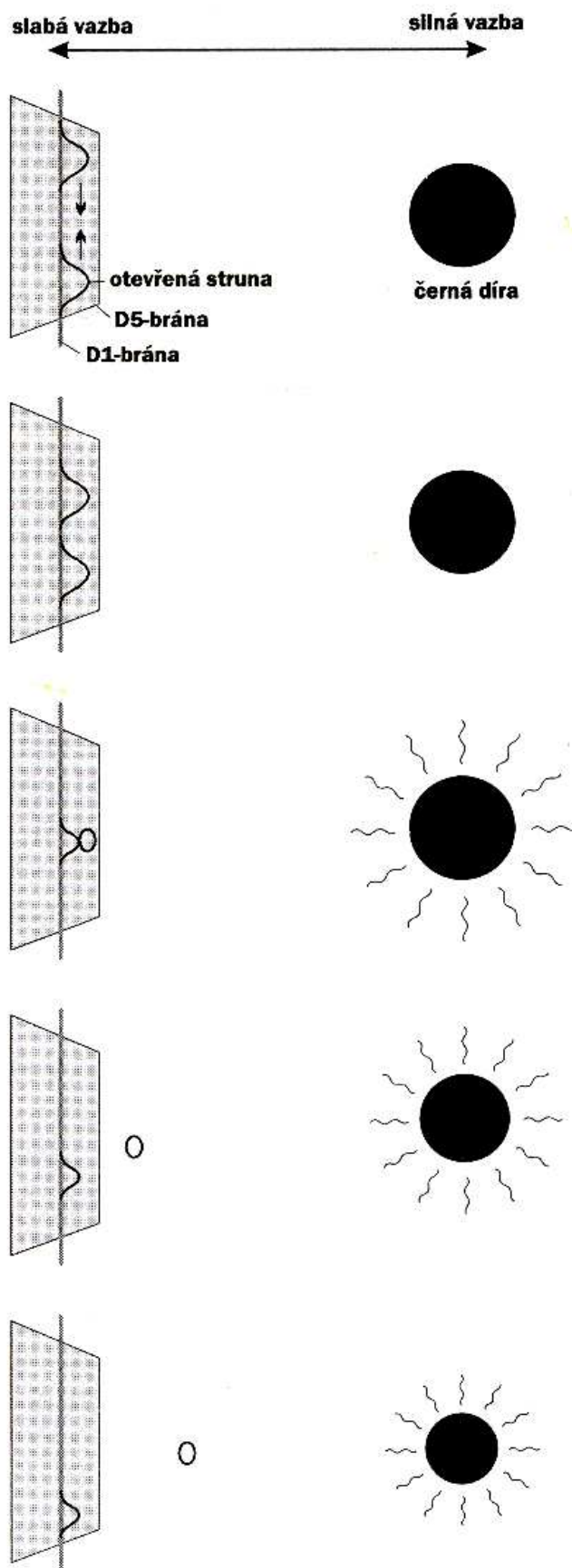
Celá situace je velmi podobná hologramu v tom smyslu, že plocha udržuje informaci o celém prostoru, a proto se uvedenému principu říká holografický.

Díky principu ekvivalence musí tento princip platit nejen pro černou díru, ale úplně všechny fyzikální systémy, neboť dynamika jakéhokoli fyzikálního systému vypadá úplně stejně jako dynamika systému padajícího do ohromné černé díry, jejíž geometrie na horizontu je téměř plochá.

Jsme tudíž vedeni k závěru, že všechny stupně volnosti celého vesmíru (partony) jsou projektovány na dvourozměrnou plochu obklopující vesmír. Hlouběji se tomuto problému budeme věnovat v mé příští knize, věnované m.j. fyzice Blandria.

Obr. 9.23

Černá díra podle Vafy a Stromingera vypadá na krátkých vzdálenostech a při slabé vazebné konstantě jako soustava D1-brán, D5-brán a otevřených strun, které jsou na D-brány připojeny konci (obr. nahoře). Vypařování černé díry lze při slabé vazebné konstantě znázornit jako odtrhávání uzavřených strun z otevřených strun (následující série obrázků).





Z termodynamiky černých děr tak plyne, že by kolem každého objemu měla jít nakreslit myšlená uzavřená plocha taková, že všechny informace o objektech uvnitř by měly jít popsat pouze fyzikou na povrchu této plochy (z toho, že entropie černých děr je úměrná povrchu a ne objemu a že urychlení pozorovatelé vnímají horizonty událostí na prakticky libovolných místech - podle zvoleného zrychlení a polohy pozorovatele - a ty rovněž vyzařují záření obdobné Hawkingovu záření).

Navíc to vypadá, že ne každý pozorovatel může měřit na systému totéž. Velice pěkně to ilustruje například informační paradox černých děr: Z hlediska padajícího pozorovatele se na horizontu nestane nic zvláštního - jde jen o normální bod relativně plochého časoprostoru. Z hlediska vnějšího pozorovatele ale každého padajícího pozorovatele musí spálit Hawkingovo záření. Dá se ukázat, že paradox je nerozřešitelný naší současnou fyzikou - každý pozorovatel který by chtěl narazit na rozpor, by musel nutně zažít Planckovu teplotu.

Z těchto indicií usuzujeme, že k dokončení kvantové gravitace není potřeba nic menšího, než predefinování kvantového stavu tak, aby zahrnoval existenci horizontů událostí a toho, že některé informace jsou pro některé pozorovatele nedostupné a různí pozorovatelé na stejnou otázku mohou dostat různou odpověď, pokud ji v principu nemají jak porovnat.

I z toho, jak s gravitonem zacházejí superstruny je vidět, že jde o něco jiného, než zbylé 3 interakce - graviton je jediná částice tvořená uzavřenou strunou. Dalším problémem by mohlo být, že gravitace obsahuje mnoho stupňů volnosti - stejně jako současné teorie pole, kde mohou být za našich nízkých teplot některé stupně volnosti zamrzlé a částice vypadají jako body. Za vysokých teplot ale může každý bod časoprostoru být nezávislý.

V roce 1996 mladý argentinský fyzik Juan Maldacena ukázal, že i když vypneme gravitaci extrémní Reissnerovy – Nordströmovy černé díry, zachovají si bránové systémy vlastnosti extrémní černé díry z hlediska termodynamiky kolapsarů. Zanedlouho na to ukázal, že podobné závěry platí i pro Reissnerovu – Nordströmovu černou díru, která je pouze

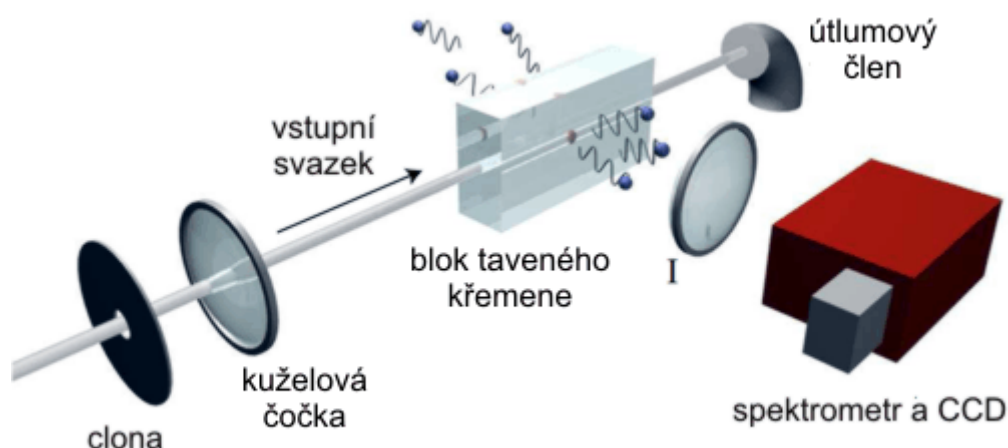
blízká té extrémní.

Horizont černé díry není jedinou hranicí pro šíření elektromagnetického záření. I v laboratorních pokusech se šířením světla existují oblasti, za které se světlo dostat nemůže. Typickým příkladem mohou být experimenty se zpomalováním nebo zastavováním světla. V médiu, kterým se světlo šíří, vznikají „horizonty“, za které se světlo dostat nemůže. Zajímavou, dosud neřešenou otázkou je, zda i na těchto laboratorních horizontech může dojít ke genezi Hawkingova záření. Podle posledních experimentů provedených pracovníky Univerzity v Milánu a italského Národního ústavu pro jaderný výzkum (INFN) se zdá, že ano.



**Friedrich Wilhelm Bessel ( 1784 – 1846 )**

Popišme si nyní experiment provedený v roce 2011 v Milánu, ze kterého se zdá, že z okolí laboratorního horizontu vychází záření obdobné Hawkingovu. Jako zdroj světla posloužil výzkumný tým pulzní laser s aktivním prostředím z neodymového skla s délkou trvání pulzu 1 ps, maximální energií pulzu 6 mJ a opakovací frekvencí 10 Hz. Laserový pulz byl po průchodu kruhovou clonou upraven speciální kuželovou čočkou (obr. 9.24). Taková čočka zobrazí bod na přímku podél optické osy a laserový svazek na svazek s prstencovým průřezem. V prvním přiblížení lze říci, že čočka transformuje svazek s Gaussovým průběhem intenzity na tzv. Besselův svazek, u něhož je silně potlačen ohybový jev a který se při prostupu prostředím nerozšiřuje.



Obr. 9.24: Základní experimentální uspořádání, které použila milánská skupina.

Takto upravený svazek vstupuje do aktivního prostředí z taveného křemene, ve kterém dochází ke Kerrově jevu. Elektromagnetická vlna při svém putování prostředím mění index lomu úměrně intenzitě ozáření křemene. Křemenem proto putuje ve směru optické osy porucha indexu lomu  $\delta n$ , celkový index lomu křemene má tvar

$$n(t, z, \omega) = n_0(\omega) + \delta n(z - vt). \quad (9.284)$$

Ve vztahu jsme označili  $n_0$  index lomu pozadí (křemen jeví disperzi, proto je jeho index lomu závislý na frekvenci) a  $\delta n$  poruchu indexu lomu, šířící se rychlostí  $v$  ve směru osy  $z$  (ve směru optické osy, tj. pohybu svazku). V soustavě spojené s šířící se poruchou se nemůže světlo dostat do libovolného místa křemenného média. Z definice indexu lomu  $n = c/v$  plyne, že světlo se šíří jen v oblasti, jež vyhovuje nerovnosti

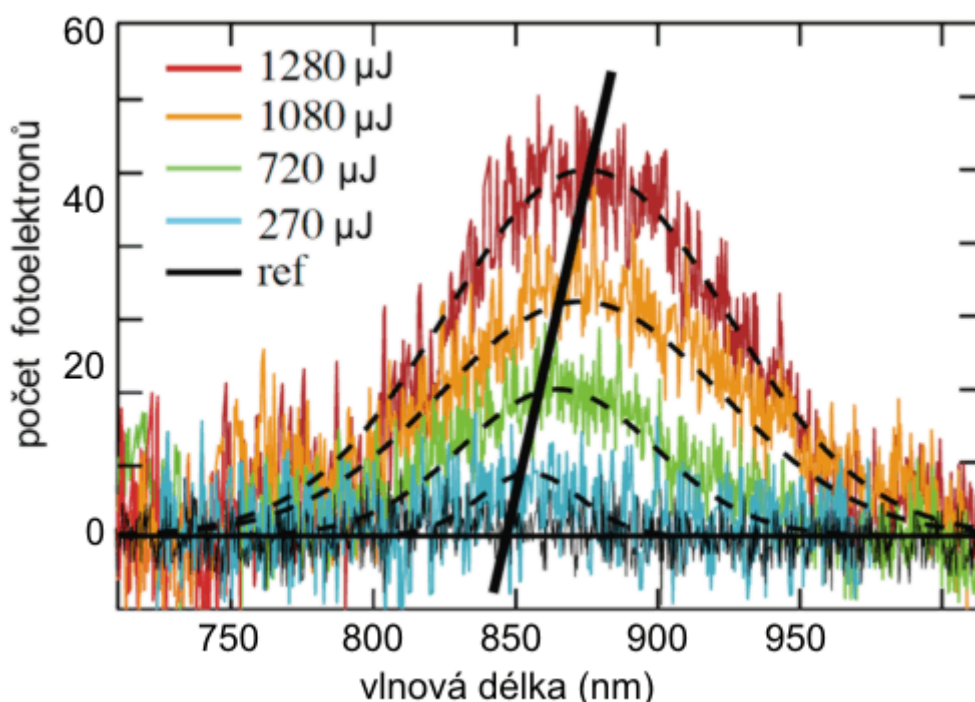
$$n_0(\omega) + \delta n > \frac{c}{v} > n_0(\omega). \quad (9.285)$$

Před pulzem vzniká čelní horizont, za pulzem zadní horizont. Horizonty oddělují oblasti šířícího se elektromagnetického signálu od oblastí, kam signál nemůže proniknout. Poznamenejme, že jde o horizont fázové rychlosti, jiný horizont nazývaný horizont grupové rychlosti, v prováděném experimentu neexistoval. Pokud platí analogie mezi

horizontem černé díry a horizontem v popsaném experimentu, mělo by z oblasti horizontů přicházet záření černého tělesa, které je modifikováno konečnou geometrií jevu. Výsledkem je, že záření z horizontu by mělo mít jen určitý pás frekvencí daný poslední relací. Po výpočtu vychází, že by mělo být generováno elektromagnetické záření s vlnovou délkou v pásu 800 – 900 nm. Vědecký tým se pokusil toto záření zachytit v kolmém směru za pomoci zobrazovací čočky I a CCD kamery se zobrazovacím spektrometrem (viz obr. 9.24).

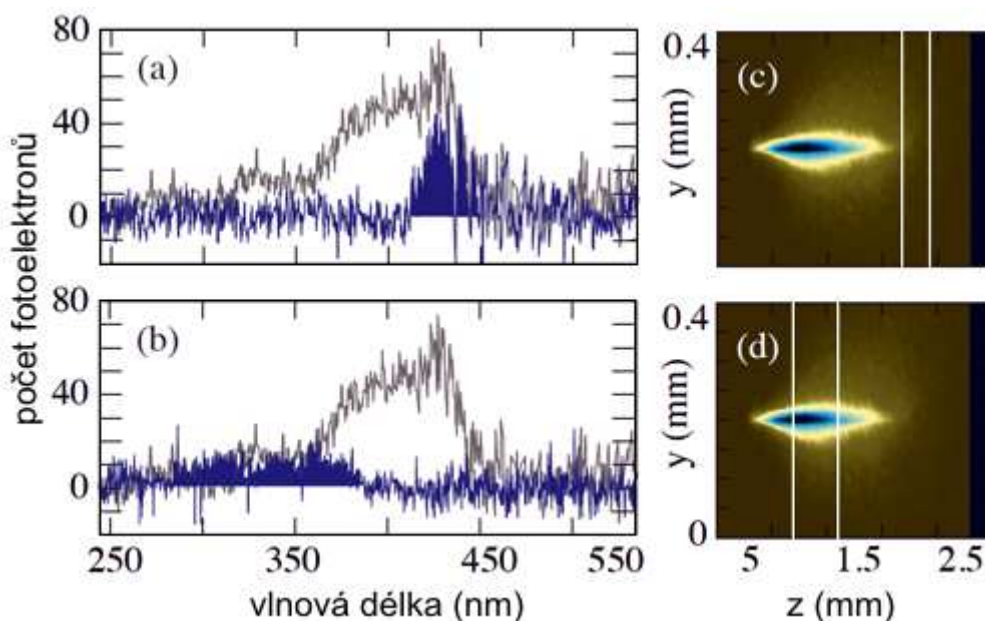
### *Výsledky experimentu*

Milánský tým skutečně našel v hledané oblasti signál. Největším problémem bylo vyloučení všech známých zdrojů elektromagnetického signálu při průchodu laserového svazku prostředím. Postupně byly vyloučeny různé varianty Čerenkovova záření, mixování různých vlnových modů a Rayleighův rozptyl (pružný rozptyl elektromagnetického záření na částicích s menším rozměrem, než má vlnová délka). Nejtěžší bylo ovšem vyloučení fluorescence, která by mohla dát signál v kolmém směru. Byla provedena řada srovnávacích testů, při kterých se zjistilo, že ve sledované frekvenční oblasti nemá tavený křemen žádný fluorescenční pík. Výsledkem je, že naměřený signál odpovídá Hawkingovu záření z obou horizontů, a to frekvenčně, amplitudově i posuvem vlnové délky maxima vyzařování s rostoucí energií Besselova pulzu.



Obr. 9.25: Spektrum měřeného signálu. Různé barvy odpovídají různým energiím jednoho Besselova pulzu. K pořízení spektra bylo použito 3 600 pulzů, jde tedy o integrální spektrum. Čárkovaně je vždy proložena křivka odpovídající měřené hodnotě. Spektra jsou frekvenčně omezena a se zvyšující se energií jeví frekvenční posun (v souladu s teorií). Černě je zobrazeno spektrum referenčního Gaussova pulzu, z něhož je patrné, že v dané oblasti není žádný fluorescenční pík.

Milánská skupina také zkoušela alternativní uspořádání, v němž byla kónická čočka nahrazena normální čočkou s ohniskovou vzdáleností 20 cm, která svazek fokusovala do taveného křemene. Nelineární dynamika Kerrova jevu způsobila vznik filamentu, který se pohyboval křemenem a opět vytvořil přesouvající se poruchu indexu lomu. V tomto uspořádání z výše uvedené nerovnosti vyplynul rozsah vlnových délek emitovaného záření 270 – 450 nm. V této oblasti nebyl při experimentech s Besselovým pulzem pozorován žádný signál, který by naznačoval, že zde nedochází k nechtěné fluorescenci. Výsledek modifikovaného experimentu byl opět pozitivní, tj. v uvedené oblasti vlnových délek byl nalezen signál odpovídajících Hawkingovu záření.



**Obr. 9.26:** Spektra generovaná v alternativním uspořádání (samostatný filament). Šedé křivky jsou spektra měřená pro dvě různé polohy zcela otevřené vstupní štěrbiný spektrometru. Poloha vstupní štěrbiný je označena na CCD fotografii filamentu v pravých částech obrázků (c, d). Osa  $z$  míří ve směru svazku, osa  $y$  je na něho kolmá.

Pokus se skutečně prokáže hlubší souvislost s Hawkingovým zářením by bylo možné sledovat chování horizontu černé díry přímo na laboratorním stole, což je myšlenka velmi fantastická a vzrušující. Spolu s připravovaným experimentem, ve kterém bude hledán stín černé díry ve středu naší Galaxie, může jít o dvě velké události, jež posunou naše znalosti černých děr.

### **Emergentní struny a Maldacenova hypotéza**

Na podzim roku 1997 Maldacena publikoval ohromující článek, ve kterém odhalil zcela nový typ duality, podle níž má strunová teorie svůj duální popis v řeči kalibrační teorie. Vzhledem ke skutečnosti, že strunová teorie je rovněž teorií gravitační interakce, je toto odhalení nesmírně významné. Dosud formulované kalibrační teorie totiž neobsahují gravitaci, jsou formulovány pouze ve 4 prostoročasových dimenzích a navíc jsou definovány na pozadí pevného prostoročasu, což bychom od teorie gravitačního pole rozhodně neočekávali.

Abychom si nastínili alespoň základní rysy Maldacenovy myšlenky, musíme si nejprve povědět něco o teorii emergentních strun.



**Juan Martín Maldacena (1968)**

Počátkem 19. století přišel Michael Faraday s představou siločar pole a považoval je za reálné objekty. Maxwell později prezentoval tyto siločáry jako pouhé pomocné objekty odvozené z rovnic příslušných polí. V teorii strun však původní představa siločar polí jakožto reálných fyzikálních objektů zažívá překvapivou renesanci.

V šesté kapitole jsme si ukázali, že v supravodiči se siločáry magnetického pole stávají diskretními – každá siločára přenáší jen elementární kvantum magnetického toku. Podobná analogie aplikovaná na QCD vedla na počátku 70. let minulého století Holgera Nielsena k objevu strun. Zakladatelé teorie strun chápali siločáry jako fundamentální objekty kalibrační teorie, napnuté mezi příslušné náboje. Tím byl formulován duální popis, kde siločáry můžeme chápat jako primární objekty a základní zákony předepisují, jakým způsobem se napínají a pohybují. Na druhé straně je možno považovat za primární příslušná pole, přičemž siločáry jsou jen jejich vhodnou vizualizací. Kvantová teorie připouští oba způsoby popisu.

Jak ale mohou být siločáry makroskopických délek (u interakcí nekonečného dosahu) vytvořeny ze strun, jejichž rozměry se pohybují v řádu Planckovy délky? Tato schopnost je příkladem jevu zvaného **emergence**. Tímto pojmem se označuje vznik zcela nových a nečekaných vlastností velkých a složitých systémů. Frekvence kmitů makroskopické struny je typická emergentní vlastnost, protože je určena rychlostí šíření zvuku uvnitř struny. Metodami druhého kvantování lze však s každou vlnou asociovat novou částici. U zvukových vln uvnitř struny jsou to fonony, které přitom rozhodně nepatří mezi částice,

z nichž se skládá materiál struny. Přesto má však fonon všechny atributy částice – hmotnost, hybnost, energii, ... . Fonon patří mezi tzv.

### **emergentní částice.**

Něco podobného platí rovněž i pro kvantové struny – v důsledku jejich vzájemných interakcí se štěpí a zase spojuje ohromné množství strun najednou a je prakticky nemožné sledovat každou strunu zvlášť.

Nezbývá, než k popisu použít nějakou jednodušší emergentní vlastnost velkého souboru strun, která nám umožní dobře popsat, co se děje.

A stane se něco opravdu pozoruhodného – stejně, jako se soubor nějakých částic může chovat jako úplně nová částice (např. fonon), může se i kolektivní soubor velkého množství strun projevovat jako nový druh struny – v takovém případě hovoříme o **emergentní struně**. Chování emergentních strun je přesně opačné, než chování strun fundamentálních. Čím více spolu fundamentální struny interagují, tím méně mohou interagovat z nich složené struny emergentní. Přesněji řečeno, je-li pravděpodobnost interakce dvou fundamentálních strun úměrná vazbové konstantě  $g$ , pak pravděpodobnost interakce emergentních strun je  $1/g$ .

Ukazuje se, že působení fundamentálních a emergentních strun nelze vzájemně oddělit a celé schéma lze tedy otočit a prohlásit emergentní struny za fundamentální. Jak jsme si řekli v odstavci o M-teorii, tato tzv. S-dualita dokázala spolu s T-dualitou vzájemně propojit 5 různých superstrunových teorií.

Jelikož teorie strun může povstat ze siločar toku polí, a tyto siločáry se stávají fundamentálními objekty teorie, dalo by se říci, že siločáry jsou emergentními strunami. Alexandr Poljakov ukázal, že za jistých okolností by se emergentní struny spojené s kalibračními teoriemi skutečně mohly chovat jako fundamentální struny. Struny vzniklé z kalibračních polí mají při kvantověmechanickém popisu emergentní vlastnost, kterou lze v každém bodě struny popsat jedním číslem o fyzikálním rozměru délky. Toto číslo udává další souřadnici daného bodu struny v dodatečné dimenzi prostoru. Takováto kalibrační teorie by tedy mohla fungovat v prostoročase o 5 dimenzích. Poljakov tak formuloval dualitu mezi kalibrační teorií pole ve čtyřrozměrném prostoročase a teorií strun v pětirozměrném prostoročase.

Maldacena tuto ideu dále rozvinul a upřesnil. Zaměřil se na emergentní struny vznikající jako duální popis **maximální superteorie**, což je



kalibrační teorie s nejvyšší možnou supersymetrií. Zjistil, že strunová teorie popisující příslušné emergentní struny je ve skutečnosti desetirozměrná supersymetrická teorie strun. Z devíti jejích prostorových dimenzí jich čtyři odpovídají Poljakovově konstrukci a jeví zápornou křivost, zbylých pět dimenzí má naopak křivost kladnou. Maldacenaova hypotéza nebyla dosud rigorózně dokázána ve vší její obecnosti, přesto bylo shromážděno velké množství argumentů minimálně pro její aproximativní platnost. V tomto směru již bylo dosaženo značného pokroku.

Například desetirozměrná teorie v nejhrušší aproximaci odpovídá zobecněné verzi OTR doplněné o supersymetrii. Je to dobře definovaná klasická teorie bez kvantových efektů, ve které se dají snadno provádět nejrůznější výpočty.

Nalezení rigorózního důkazu Maldaceny hypotézy by nám umožnilo získat přesný popis teorie strun překladem jakékoli otázky do jazyka maximální superteorie, o níž toho dnes víme mnohem víc, než o M-teorii. Nedávno bylo dokonce dosaženo značného pokroku ve snaze přesně definovat tuto kalibrační teorii pomocí aproximativního postupu zvaného **kalibrační teorie na mříži**, o němž budeme podrobně hovořit ve 12. kapitole. Nalezení tohoto důkazu by jistě odstartovalo třetí superstrunovou revoluci, proto je jeho hledání pro současné strunové teoretiky zcela klíčovým úkolem.

Pokud by se nakonec potvrdila pouze přibližná platnost Maldaceny hypotézy, potom by byl vztah mezi fyzikou uvnitř černé díry a kalibrační teorií také jen aproximativní. V takovém případě může černá díra informace navždy uvěznit a předat je dál do nového vesmíru, jenž se zrodí z její singularity.

## Strunové prostoročasy

Zkoumejme strunu šířící se na pozadí, v němž některá ze strunových polí mají klasické očekávané hodnoty. Rozšíření akce ( 9.253 ), kdy bereme do úvahy tři základní pole - graviton, popsany symetrickým tenzorem se složkami  $g_{\alpha\beta}$ , antisymetrický tenzorový potenciál  $B_{\alpha\beta}$  a dilaton  $\Phi$ , je dáno takto

$$S = \frac{1}{4\pi\alpha'} \int \sqrt{|\gamma|} d^2\xi \left[ g_{\alpha\beta}(X) \partial_i X^\alpha \partial_j X^\beta \gamma^{ij} - \right. \\ \left. - \frac{1}{2} \alpha' R \Phi(X) + B_{\alpha\beta}(X) \partial_i X^\alpha \partial_j X^\beta \varepsilon^{ij} \right], \quad (9.286)$$

kde  $\varepsilon^{ij}$  označuje Levi-Civitův tenzor na světlošle a  $R$  je skalární křivost počítaná pro metriku  $\gamma_{ab}$ . Protože dilatonový člen je řádu  $O(a'^2)$ , je akce (9.286) konformně invariantní pouze do řádu  $O(a')$ , což znamená, že v obecném řádu je ztracena jedna ze základních symetrií strunové teorie. Ve vztahu (9.286) je explicitně vyznačena závislost  $g_{ab}$ ,  $B_{ab}$  a  $\Phi$  na prostoročasových souřadnicích, a tedy  $X^\alpha$  již nejsou volná pole. Z konformní teorie pole vyplývá, že při kvantování interagujících konformně invariantních polí je obecně ztracena konformní invariance. Proto, aby byla zachována konformní invariance, nezbyvá než požadovat, aby byla zachována v každém řádu  $a'$ . Odtud vyplývají fundamentální pohybové rovnice, které musí  $g_{ab}$ ,  $B_{ab}$  a  $\Phi$  splňovat.

$$R_{\alpha\beta} - \nabla_\alpha \nabla_\beta \Phi + \frac{1}{4} H_{\alpha\gamma\delta} H_\beta^{\gamma\delta} = O(\alpha'), \\ \nabla_\alpha H^{\alpha\beta\gamma} + \nabla_\alpha \Phi H^{\alpha\beta\gamma} = O(\alpha'), \\ \frac{2}{3} \frac{D-26}{\alpha'} + \left( -R + \nabla_\alpha \Phi \nabla^\alpha \Phi + 2 \nabla_\alpha \nabla^\alpha \Phi + \frac{1}{12} H_{\alpha\beta\gamma} H^{\alpha\beta\gamma} \right) = O(\alpha'). \quad (9.287)$$

V rovnicích (9.287) jsou komponenty  $H_{\alpha\beta\gamma}$  antisymetrického tenzoru třetího řádu  $H$ , definované vnější derivací z  $B_{\alpha\beta}$ , dále  $R$  a  $R_{\alpha\beta}$  jsou skalární křivost a Ricciho tenzor počítané z metriky  $g_{\alpha\beta}$ . Tyto rovnice jsou strunovou verzí Einsteinových rovnic, a tedy členy obsahující  $\alpha'$  lze chápat jako strunové korekce. Zdůrazněme ještě jednou, že rovnice (9.287) byly odvozeny čistě z podmínky zachování konformní symetrie. Po konformní transformaci  $g_{ab} \rightarrow \exp\{-2\Phi/(D-2)\}g_{ab}$  je akce systému (9.287) dána vztahem

$$S = \int d^D x \sqrt{-g} \left[ \frac{2}{3} \frac{D-26}{\alpha'} \exp\left(-\frac{2\Phi}{D-2}\right) - R + \frac{1}{D-2} \nabla_\alpha \Phi \nabla^\alpha \Phi + \frac{1}{12} \exp\left(-\frac{4\Phi}{D-2}\right) H^2 \right], \quad (9.288)$$

kde jsme označili  $H^2 = H_{\alpha\beta\gamma} H^{\alpha\beta\gamma}$ .

Před zakončením tohoto oddílu se zmíníme o další přesné symetrii ve strunové teorii. Nazývá se T-dualitou a jejím základním důsledkem je to, že dva různé prostoročasy jsou popsány jednou a toutéž strunovou teorií. Předpokládejme, že v daném strunovém prostoročase je definováno Killingovo vektorové pole  $\zeta = \partial/\partial X^0$  vyjadřující symetrii prostoročasu vůči posunutí ve směru souřadnice  $X^0$ , a tedy lze zvolit adaptované souřadnice, v nichž  $g_{ab}$ ,  $B_{ab}$  a  $\Phi$  nezávisí na souřadnici  $X^0$ . Pak může být dokázáno, že nová metrika, definovaná vzorci

$$\begin{aligned} \hat{g}_{00} &= \frac{1}{g_{00}}, \\ \hat{g}_{0\alpha} &= \frac{B_{0\alpha}}{g_{00}}, \\ \hat{g}_{\alpha\beta} &= g_{\alpha\beta} - \frac{g_{0\alpha} g_{0\beta} - B_{0\alpha} B_{0\beta}}{g_{00}}, \end{aligned} \quad (9.289)$$

tvoří spolu s příslušně transformovanými veličinami, potenciálem  $\hat{B}_{\alpha\beta}$  a dilatorem  $\hat{\Phi}$ , strunový (a T-duální) prostoročas ekvivalentní s původním. Výsledkem dvojnásobné T-dualizace je opět výchozí prostoročas.

## Kosmologické modely

Začněme nejjednodušším předpokladem o **statičnosti vesmíru**, který je sice **nerealistický**, avšak sehrál důležitou heuristickou úlohu a i nyní má svůj teoretický význam - z něj plynoucí Einsteinův a de Sitterův kosmologický model se často používají pro srovnávání a ilustraci

vlastností složitějších a realističtějších modelů. V homogenním statickém vesmíru, v němž jsou podmínky všude stejné v každém časovém okamžiku, je přirozené zvolit souřadnicovou soustavu tak, aby prostoročasový interval byl **sféricky symetrický** vzhledem k libovolnému bodu. Element prostoročasového intervalu pak bude mít obecný tvar

$$ds^2 = -A(r)c^2 dt^2 + B(r)dr^2 + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.290)$$

kde  $A$  a  $B$  jsou funkce pouze  $r$ , přitom pro malá  $r$  musí tento interval nabývat tvar odpovídající plochému prostoročasu speciální teorie relativity.

Přímým výpočtem komponent Ricciho tenzoru  $R_{ik}$  a dosazením tenzoru energie-hybnosti

$$T_{ik} = (p + \rho)u_i u_k - p \cdot g_{ik} \quad (9.291)$$

odpovídajícího ideální kapalině, lze Einsteinovy rovnice pro metriku ( 9.290 ) převést na soustavu obyčejných rovnic (čárka znamená derivaci podle  $r$ )

$$\begin{aligned} \frac{A'}{ABr} - \frac{(1-1/B)}{r^2} &= 8\pi p, \\ \frac{B'}{B^2 r} + \frac{(1-1/B)}{r^2} &= 8\pi \rho, \\ \frac{dp}{dr} &= -\frac{A'(\rho + p)}{2A}, \end{aligned} \quad (9.292)$$

(poslední rovnici lze nejsnadněji obdržet ze zákona zachování  $T^{ik}_{;k} = 0$ ).

Protože  $dp/dr = 0$  (homogenita), poslední rovnice ( 9.292 ) dává podmínku  $A'(\rho + p)$ . Pomineme-li případ prázdného prostoru  $\rho = p = 0$ , mají Einsteinovy rovnice statické homogenní řešení jen tehdy, když

$A' r) = 0$ . To však podle prvních dvou rovnic pole ( 9.292 ) vede k podmínce  $\rho + 3p = 0$ , což pro reálnou hmotu opět znamená  $\rho = p = 0$ . Einsteinovy rovnice v běžném tvaru ( 2.321 ) tedy nepřipouštějí jiné homogenní statické řešení, než prázdný plochý Minkowskiho prostoročas STR; jsou tedy **neslučitelné** s koncepcí homogenního statického vesmíru zaplněného hmotou s konstantní kladnou hustotou  $\rho$ .

Aby rovnice ( 9.292 ) měly statické homogenní řešení pro realistický případ  $\rho > 0, p > 0$ , je třeba do nich vnést vhodnou konstantu  $\Lambda$ . V Einsteinových rovnicích lze toto zajistit zavedením dodatečného **kosmologického členu**  $\Lambda g_{ik}$ , jak to v r. 1917 navrhl Einstein:

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R - \Lambda g_{ik} = 8\pi T_{ik} \quad ( 9.293 )$$

kde  $\Lambda$  je nová (dostatečně malá) univerzální přírodní konstanta - tzv. **kosmologická konstanta**, jejíž hodnota by měla plynout ze srovnání příslušného kosmologického modelu s výsledky astronomických pozorování.

Pro statickou homogenní metriku ( 9.290 ) vedou zobecněné Einsteinovy rovnice na soustavu obyčejných diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} \frac{A'}{ABr} - \frac{(1-1/B)}{r^2} + \Lambda &= 8\pi p, \\ \frac{B'}{B^2 r} + \frac{(1-1/B)}{r^2} - \Lambda &= 8\pi \rho, \\ \frac{dp}{dr} &= -\frac{A'(\rho + p)}{2A}. \end{aligned} \quad ( 9.294 )$$

Vzhledem k požadavku homogenity musí být  $dp/dr = 0$ , takže poslední rovnice ( 9.294 ) může být splněna jen tehdy, když  $(\rho + p) A' = 0$ . Rovnice ( 9.294 ) jsou tedy řešitelné ve třech případech, kterým odpovídají následující řešení :

$$\begin{array}{ll}
 A' = 0 & \text{Einsteinův model ;} \\
 \rho + p = 0 & \text{de Sitterův model ;} \\
 A' = 0, \rho + p = 0 & \text{plochý prostoročas STR .}
 \end{array}$$

### Einsteinův kosmologický model

V modelech založených na kosmologickém principu musí být trojrozměrný prostor **homogenní** a **izotropní**, tj. všechny body a všechny směry jsou zde rovnocenné, ničím se neliší. V diferenciální geometrii se ukazuje, že takovým trojrozměrným prostorem je prostor s **konstantní křivostí** (nezávislou na prostorových souřadnicích ani na směru), který je **sféricky symetrický** vzhledem ke každému bodu; libovolný bod proto může být zvolen za počátek  $r = 0$  prostorových souřadnic. Délkový element v takovém prostoru se obvykle vyjadřuje ve tvaru

$$dl^2 = \frac{dr^2}{1 + \frac{kr^2}{a^2}} + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.295)$$

kde veličina  $a$  (s rozměrem délky) udává poloměr křivosti prostoru a parametr  $k = 1, 0, -1$  charakterizuje typ geometrie prostoru:

$$\begin{array}{ll}
 k = 1 & \rightarrow \text{prostor s kladnou konstantní křivostí ;} \\
 k = 0 & \rightarrow \text{Eukleidovský plochý prostor ;} \\
 k = -1 & \rightarrow \text{prostor s konstantní zápornou křivostí .}
 \end{array}$$

V případě  $A' = 0$  musí být  $A(r)$  konstanta, takže příslušnou volbou jednotky času (časové souřadnice) lze dosáhnout  $A = 1$ ; je tak zajištěn požadavek, aby pro malé  $r$  interval  $ds^2$  byl stejný jako ve STR. Z první rovnice (9.294) dosazením  $A' = 0$  dostáváme pro funkci  $B$  řešení

$$B(r) = \frac{1}{1 - r^2 (\Lambda - 8\pi p)} = \frac{1}{1 - \frac{r^2}{a^2}} \quad (9.296)$$

kde

$$a^2 \equiv \frac{1}{\Lambda - 8\pi p}. \quad (9.297)$$

Metrika ( 9.290 ) má tedy pro Einsteinův kosmologický model homogenního statického vesmíru tvar

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + \frac{dr^2}{1 - \frac{r^2}{a^2}} + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.298)$$

Srovnáním s ( 9.295 ) vidíme, že prostorovou část

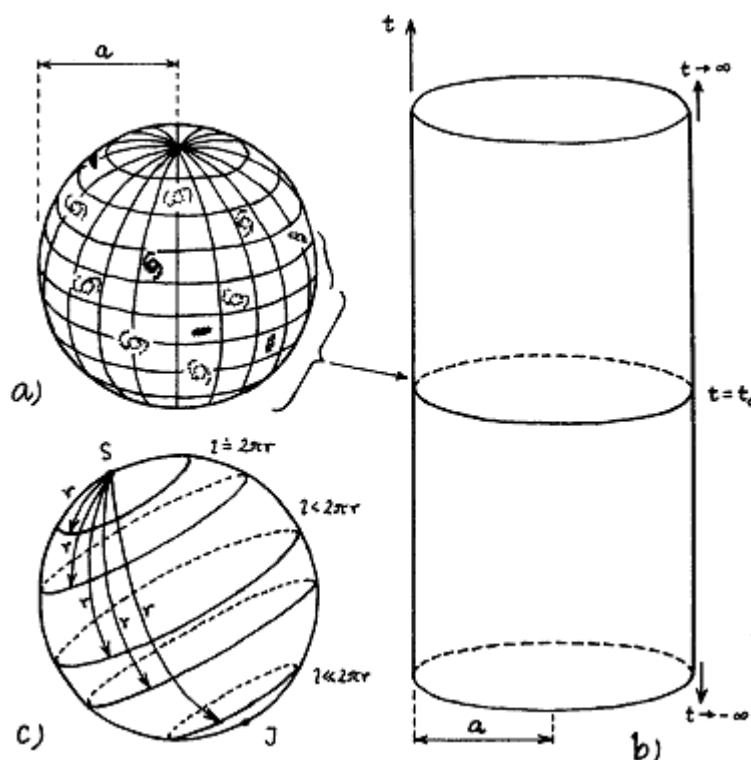
$$dl^2 = \frac{dr^2}{1 - \frac{r^2}{a^2}} + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.299)$$

tohoto prostoročasového intervalu lze interpretovat jako metriku trojrozměrné hypersféry o konstantním poloměru  $a$ , vnořené do fiktivního čtyřrozměrného Eukleidovského prostoru (obr. 9.27). Opět je zde třeba upozornit, že tvarem metriky není jednoznačně určen typ geometrie, protože je možno předpokládat různé globální topologické vlastnosti. Volba sférické geometrie je zde však nejjednodušší a nejpřirozenější. Zavedeme-li v tomto pomocném prostoru souřadnice

$$\begin{aligned} w_1 &= a \sqrt{1 - \frac{r^2}{a^2}}, \\ w_2 &= r \cdot \sin \vartheta \cos \varphi = x, \\ w_3 &= r \cdot \sin \vartheta \sin \varphi = y, \\ w_4 &= r \cdot \cos \vartheta = z, \end{aligned} \quad (9.300)$$

dostaneme rovnici sféry  $w_1^2 + w_2^2 + w_3^2 + w_4^2 = a^2$ , a element prostorové vzdálenosti má tvar  $dl^2 = (dw_1)^2 + (dw_2)^2 + (dw_3)^2 + (dw_4)^2$ . Uvažujeme-li nejen prostorovou, ale i časovou dimenzi, je možno celkovou prostoročasovou geometrii Einsteinova vesmíru zobrazit jako geometrii

čtyřrozměrné válcové plochy vnořené do fiktivního (pomocného) pětirozměrného prostoru - obr. 9.27b.



**Obr. 9.27. Einsteinův kosmologický model.**

a) Geometrii trojrozměrného prostoru v Einsteinově modelu vesmíru si lze představit jako trojrozměrnou hypersféru o konstantním poloměru, vnořenou do fiktivního 4-rozměrného Eukleidova prostoru.

b) Celkovou prostoročasovou geometrii Einsteinova vesmíru je možno zobrazit jako geometrii čtyřrozměrné válcové plochy vnořené do fiktivního pětirozměrného prostoru.

c) Specifické zvláštnosti prostorové geometrie a topologie uzavřeného vesmíru lze názorně ilustrovat na kulové ploše, např. na glóbusu zeměkoule - viz text.

Celkový objem prostoru v Einsteinově vesmíru je (za předpokladu sférické topologie) roven

$$V = 2 \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} \int_0^{\pi} \frac{r^2 \sin \vartheta d\varphi d\vartheta dr}{\sqrt{1 - \frac{r^2}{a^2}}} = 2\pi^2 a^3 \quad (9.301)$$

"obvod" vesmíru (délka hlavní kružnice trojrozměrné sféry) je



$$L = \int_0^{2\pi} a d\varphi = 2\pi a . \quad (9.302)$$

Einsteinův vesmír je tedy **konečný, prostorově uzavřený**; "vejde" se do něho jen konečné množství hmoty.

Prostorová uzavřenost vesmíru má zajímavé důsledky, které si lze snadno představit pomocí dvojrozměrné analogie na kulové ploše, třebaš na povrchu zeměkoule (obr. 9.27c). Postavíme-li se na pól (který z geometrického hlediska můžeme umístit do kteréhokoli místa kulové plochy) a opisujeme kolem sebe kružnice o stále větším poloměru, zjistíme že poměr délky kružnice ku poloměru bude čím dál menší než  $2\pi$  a při překročení "rovníku" se délka kružnice s rostoucím poloměrem zmenšuje. Podobně když pozorovatel nacházející se v libovolném místě uzavřeného vesmíru bude v myšlenkovém pokusu vytyčovat kolem sebe kulové plochy, poroste jejich povrch pomaleji než druhá mocnina poloměru a po překročení určité vzdálenosti se velikost plochy začne zmenšovat, i když se vzdálenost (poloměr) zvětšuje. Další charakteristickou vlastností geometrie uzavřeného prostoru je skutečnost, že pozorovatel postupující stále přímo v jednom směru se za určitou dobu vrátí do výchozího bodu (z opačné strany). Totéž platí i pro světelné paprsky: světlo, vyslané z nějakého místa určitým směrem, "oběhne vesmír" a vrátí se do výchozího bodu z opačného směru. Takže když se budeme v uzavřeném vesmíru dívat dopředu, můžeme po určité době v dálce před sebou uvidět svoje vlastní záda. Podobné "duchy" zde vznikají při pozorování každého svítícího objektu, takže některé hvězdy nebo galaxie bychom mohli vidět vícekrát v různých místech oblohy (hledání identických duplicitních objektů v opačných místech oblohy však dosud nebylo úspěšné).

Tento efekt by vedl u Einsteinova kosmologického modelu k Olbersovu fotometrickému paradoxu podobně jako dřívější představa nekonečného statického vesmíru. Každý paprsek z každé hvězdy bude totiž neustále obíhat vesmír, dokud nenarazí na jinou hvězdu nebo se nerozptýlí na mezihvězdné hmotě. V uzavřeném statickém vesmíru, v němž je po nekonečně dlouhou dobu stejná průměrná svítivost hvězd, nebude v noci tma, obloha bude všude stejně jasná.



Heinrich Wilhelm Matthäus Olbers (1758 – 1840)

Vztahy mezi hustotou, tlakem, kosmologickou konstantou a poloměrem křivosti prostoru v Einsteinově kosmologickém modelu plynou z rovnic ( 9.294 ) - ( 9.297 ) :

$$8\pi p = \Lambda - \frac{1}{a^2}, \quad ( 9.303 )$$

$$8\pi\rho = \frac{3}{a^2} - \Lambda,$$

Odkud

$$\begin{aligned} \Lambda &= 4\pi(\rho + 3p), \\ \frac{1}{a^2} &= 4\pi(\rho + p). \end{aligned} \quad ( 9.304 )$$

Za předpokladu, že hmota vesmíru sestává z nekoherentního prachu nezpůsobujícího žádný tlak, bude

$$\Lambda = \frac{1}{a^2} = 4\pi\rho, \quad ( 9.305 )$$

a poloměr křivosti prostoru a jeho celkový objem je určen hodnotou kosmologické konstanty :

$$a = \frac{1}{\sqrt{\Lambda}},$$

$$V = \frac{2\pi^2}{\sqrt{\Lambda^3}}.$$
( 9.306 )

Celková hmotnost vesmíru je potom rovna

$$M = \rho V = \frac{\pi a}{2} = \frac{\pi}{2\sqrt{\Lambda}}.$$
( 9.307 )

Takto stanovená hmotnost má však pouze formální význam z hlediska negravitační fyziky jako míra množství hmotných částic zaplňujících vesmír. Při druhém krajním předpokladu, že vesmír je zaplněn pouze zářením pro něž platí  $p = r/3$ , dostáváme

$$\Lambda = \frac{3}{2a^2},$$

$$4\pi\rho = \frac{3}{4a^2},$$

$$4\pi p = \frac{1}{4a^2}.$$
( 9.308 )

Učinek sumárního gravitačního pole Einsteinova modelu na testovací částici je dán rovnicí geodetiky ( 1.33 ). Dosazením statické metriky ( 9.290 ) do rovnice geodetiky tělesa, které je v daném okamžiku v klidu vůči okolní hmotě, dostaneme  $d^2x^i/dt^2 = 0$ , takže celkové gravitační pole (metrika prostoročasu) v Einsteinově vesmíru nemůže uvést nehybné těleso do pohybu.

### De Sitterův kosmologický model

S užitím požadavku, aby pro malá  $r$  hledaná metrika přecházela v Minkowskiho tvar, dostáváme

$$\frac{1}{A} = B = 1 - \frac{\Lambda + 8\pi\rho}{3} r^2.$$
( 9.309 )



Willem de Sitter (1872 – 1934)

Metrika de Sitterova modelu vesmíru tedy je

$$ds^2 = \left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right) dt^2 + \frac{dr^2}{1 - r^2/a^2} + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.310)$$

kde konstanta  $a$  je definována vztahem

$$\frac{1}{a^2} = \frac{\Lambda + 8\pi\rho}{3}. \quad (9.311)$$

Pro pohyb testovacích částic a šíření světelných signálů, který je obecně dán rovnicí geodetiky ( 1.33 ), pro deSitterovu metriku po úpravách (díky sférické symetrii lze bez újmy na obecnosti pohyb vyšetřovat pouze v rovině  $\vartheta = \pi/2$ ) vychází rovnice

$$\begin{aligned} \frac{dr}{dt} &= \pm \frac{1 - r^2/a^2}{H} \sqrt{H^2 - 1 + \frac{r^2}{a^2} - \frac{L^2}{r^2} + \frac{L^2}{a^2}}, \\ \frac{d\varphi}{dt} &= \frac{L(1 - r^2/a^2)}{Hr^2}, \end{aligned} \quad (9.312)$$

( $H$  a  $L$  jsou integrační konstanty). Rychlost světla v de Sitterově modelu je pro případ čistě radiálního šíření dána vztahem

$$\frac{dr}{dt} = \pm(1 - r^2/a^2). \quad (9.313)$$

Z těchto rovnic je v první řadě vidět, že při  $r = a$  se rychlost pohybu částic i souřadnicová rychlost světla stávají nulovými. Integrací od  $r = 0$  do  $r = a$  zjistíme, že z hlediska pozorovatele ve středu  $r = 0$  každá částice i světlo ze středu  $r = 0$  do místa  $r = a$  dorazí až za nekonečně dlouhou dobu. Pozorovatel v de Sitterově modelu tedy nikdy nemůže získat žádné informace o tom, co se děje ve vzdálenostech větších než  $a$  od něj – v de Sitterově modelu existuje **kauzální horizont vesmíru** ve vzdálenosti

$$r = a = \sqrt{\frac{3}{\Lambda + 8\pi\rho}}. \quad (9.314)$$

Z rovnic pohybu dále plyne, že původně nehybné těleso bude mít radiální zrychlení

$$\frac{d^2r}{dt^2} = \frac{r}{a} \left(1 - \frac{r^2}{a^2}\right), \quad (9.315)$$

které roste se vzdalováním od počátku lokálních souřadnic (který může být umístěn v libovolném bodě). Jsou-li v de Sitterově vesmíru homogenně a izotropně rozmístěny částice, budou se navzájem od sebe vzdalovat rychlostí úměrnou jejich vzdálenosti. Metrika de Sitterova vesmíru je sice statická (v dané vztažné soustavě nezávisí na čase), avšak v intervalu (9.310) koeficient  $u dt$  již není konstantní. Na rozdíl od Einsteinova modelu celkové gravitační pole (metrika prostoročasu) v de Sitterově vesmíru způsobuje rozptylování nebeských těles - jako by každý bod byl odpudivým centrem. Pro velké vzdálenosti zde neplatí zákon setrvačnosti, tělesa budou od sebe s narůstající rychlostí expandovat. Tato proměnnost vlastních vzdáleností částic bude způsobovat Dopplerovský spektrální posuv světla vysílaného těmito částicemi; v ne příliš velkých vzdálenostech  $r$  bude pro tento frekvenční posun přibližně platit **Hubbleův zákon**

$$\frac{\delta\lambda}{\lambda} \approx Hr \quad (9.316)$$

kde **Hubbleova konstanta**

$$H = a^{-1} = \sqrt{\frac{\Lambda + 8\pi\rho}{3}} \quad (9.317)$$

Jelikož tedy de Sitterův model zachycuje pozorovaný rudý posuv spektra vzdálených zdrojů ve vesmíru, mohl by být na první pohled považován za realistický kosmologický model. Ve skutečnosti však tento model není konzistentní z fyzikálního hlediska. Základní podmínka z níž de Sitterův vesmír vychází, totiž zní  $\rho + p = 0$ . Vlastní hustota hmoty  $\rho$  je (svou fyzikální povahou) vždy nezáporná. Tlak  $p$  sice může být v principu záporný, avšak žádná forma hmoty nevytváří takový záporný tlak, jehož absolutní velikost by se přibližovala hustotě hmoty  $\rho$  (v geometrodynamických jednotkách). Podmínka  $\rho + p = 0$  může být proto v praxi splněna jen tehdy, když současně  $\rho = 0$  a  $p = 0$ . De Sitterův model tedy odpovídá zcela **prázdnému vesmíru**, který neobsahuje žádné znatelné množství látky ani záření. Existující hvězdy a galaxie je v tomto modelu třeba považovat za "testovací částice", které nijak nepřispívají k celkovému kosmologickému gravitačnímu poli. A to je proti duchu obecné teorie relativity, která gravitaci a geometrii prostoročasu dává do přímé souvislosti s distribucí hmoty. Současné kvantové unitární teorie pole však připouštějí možnost velkého negativního tlaku vedoucího k antigravitačním účinkům. De Sitterovská expanze se podle toho skutečně mohla realizovat ve velmi raném vesmíru (inflační expanze).

Všimněme si nyní ještě obecné povahy kosmologického členu. Když Einstein zavedl kosmologický člen, umístil jej na **levou stranu** rovnice:

$$G_{ik} + \Lambda g_{ik} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{ik}, \quad (9.318)$$

čímž bylo vyjádřeno, že se jedná o (geometrickou) vlastnost samotného prostoru (prostoročasu).

Fyzikální význam kosmologického členu však jasněji vysvitne po jeho přenesení na pravou stranu Einsteinových rovnic

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R = \frac{8\pi G}{c^4} T_{ik} + \Lambda g_{ik} \quad (9.319)$$

tj. z jeho zahrnutí do tenzoru energie-hybnosti hmoty  $T_{ik}$ . Uvážíme-li případ vakua  $T_{ik} = 0$ , je vidět, že  $\Lambda g_{ik}$  představuje jakousi imanentní principiálně neodstranitelnou **křivost prázdného prostoru**, která se uplatňuje i bez jakékoliv hmoty a gravitačních vln. Jinými slovy, kosmologický člen vyjadřuje **gravitační účinky vakua**. Jestliže by bylo  $\Lambda \neq 0$ , znamená to, že vakuum vytváří gravitační pole, jako kdyby bylo (z hlediska běžného přístupu  $\Lambda = 0$ ) zaplněno hmotou s efektivní hustotou a tlakem

$$\begin{aligned} \rho_{\text{kosm}} &= \frac{c^2 \Lambda}{8\pi G}, \\ p_{\text{kosm}} &= -\frac{c^2 \Lambda}{8\pi G} \equiv -\mathcal{E}_{\text{kosm}}, \end{aligned} \quad (9.320)$$

( $\mathcal{E}_{\text{kosm}}$  je efektivní hustota energie této fiktivní hmoty), což odpovídá stavové rovnici  $p = -rc^2$ .

Kosmologický člen můžeme považovat za projev jakéhosi exotického typu hmoty - **energie vakua**. Ta proniká celým prostorem a spojitě ho vyplňuje určitou **základní hustotou energie**, a to i bez přítomnosti "běžné" hmoty (v látkové formě). Nezředuje se při rozpínání vesmíru, ani se nezhlukuje jako látková hmota, ale zachovává si konstantní hustotu, přispívající k všeobecné hustotě energie, gravitačně ovlivňující dynamiku evoluce vesmíru (po pravdě řečeno, se takto chová standardní "geometricky indukovaný" kosmologický člen - fyzikálně pojatý kosmologický člen by se v zásadě mohl měnit s časem a rovněž v různých oblastech vesmíru by mohl mít jinou hodnotu).

Z hlediska obecné teorie relativity je zavedení kosmologické konstanty jako další nezávislé univerzální přírodní konstanty čistě fenomenologické, i když kosmologický člen může být organickou součástí rovnic pole - zavedení kosmologického členu  $\Lambda g_{ik}$  je jedinou

přípustnou úpravou Einsteinových rovnic ( 2.321 ) v tom smyslu, že nenarušuje zákon zachování energie  $T^{ik}_{;k} = 0$ , protože kovariantní 4-divergence tenzoru

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R + \Lambda g_{ik} \quad ( 9.321 )$$

je identicky rovna nule stejně jako u tenzoru

$$G_{ik} \equiv R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R. \quad ( 9.322 )$$

Byly činěny pokusy dát  $\Lambda$  do souvislosti s "fyzikou vakua" kvantové teorie pole: kosmologický člen by měl vznikat následkem polarizace a kvantových fluktuací vakua. Přímočarý výpočet (resp. dimenzionální odhad) dává však nepředstavitelně velkou hustotu energie vakua  $\rho_{\text{kosm}} > 10^{22} \text{ g/cm}^3$ . Aby vakuum vypadalo jako prázdný prostor, musejí se uplatňovat dalekosáhlé kompenzace mezi vakuovými fluktuacemi různých polí, které většinu fluktuací vyruší.

Žádné uspokojujivé vysvětlení kosmologické konstanty na základě mikrofyziky zatím neexistuje; určité naděje snad slibují kalibrační unitární teorie pole, kde spontánní narušení symetrie Higgsova skalárního pole by mohlo "generovat" kosmologickou konstantu.

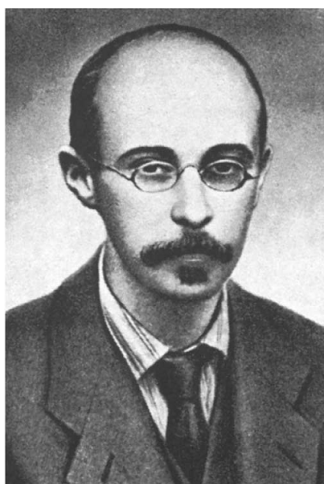
Současná astronomická pozorování nepožadují sice  $\Lambda \neq 0$ , avšak tuto možnost ani striktně nevyklučují. Studium mimogalaktických objektů pouze čím dál více omezuje hodnotu kosmologické konstanty (nyní  $|\Lambda| < 10^{-55} \text{ cm}^{-2}$ ), aby teorie neodporovala výsledkům pozorování dostupné části vesmíru. Je zřejmé, že laboratorní stanovení tak nepatrné hodnoty  $\Lambda$  je zcela beznadějně. I tak malá kosmologická konstanta by však mohla výrazně ovlivnit stavbu a vývoj vesmíru jako celku. V zájmu objektivnosti je proto třeba na možnost  $\Lambda \neq 0$  pamatovat a při studiu globálních vlastností vesmíru kosmologický člen brát v úvahu. V poslední době se navíc ukazuje, že kosmologický člen by mohl hrát významnou roli v nejranějších fázích vývoje vesmíru, kdy se projevovaly efekty kvantové teorie pole a jednotnost fundamentálních



interakcí - kosmologická konstanta mohla být "hnací silou" **inflační expanze vesmíru**, jak bude ukázáno dále.

### Friedmanovy dynamické modely vesmíru

Je zřejmé, že reálný vesmír, alespoň v současném stádiu jeho vývoje, nelze popsat žádným z modelů založených na předpokladu statičnosti, protože v Einsteinově modelu není rudý posuv světla od vzdálených galaxií a v de Sitterově modelu zase prostor nemůže obsahovat žádnou látku ani záření. Pro modelování reálného vesmíru je proto třeba vzdát se předpokladu statičnosti (který je neslučitelný se současnými astronomickými poznatky) a vytvořit obecnější kosmologický model.



Alexandr Alexandrovič Friedman (1888 – 1925)

Budeme tedy uvažovat homogenní izotropní vesmír, který obecně nebude stacionární. Metrika trojrozměrného prostoru (tj. prostorová část intervalu) v takovém případě bude mít opět obecný tvar ( 9.295 ), avšak poloměr křivosti  $a$  zde bude obecně funkcí času :

$$dl^2 = \frac{dr^2}{1 + \frac{r^2}{a^2(t)}} + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.323)$$

Prostoročasovou vztažnou soustavu je přirozené zvolit tak, aby odrážela izotropii prostoru i rozložení a pohybu hmoty. Nejvhodnější je tedy lokálně "souběžná" vztažná soustava pohybující se v každém místě prostoru spolu s hmotou, která je tam obsažena. Lokální rychlost látky v

takové soustavě je tedy všude rovna nule, vztažnou soustavu tvoří samotná hmota vyplňující vesmír. Veškerý pohyb hmoty je vyjádřen deformací vztažné soustavy. Časovou souřadnici je vhodné zvolit tak, aby v každém okamžiku metrika prostoru byla stejná ve všech bodech a ve všech směrech. Aby všechny směry byly ekvivalentní, komponenty  $g_{0a}$  metrického tenzoru musejí být v této vztažné soustavě rovny nule. Prostorčasová metrika bude mít tedy tvar  $ds^2 = g_{00} dx_0^2 + dl^2$ . Koeficient  $g_{00}$  je funkcí pouze  $x_0$ , takže vhodnou volbou časové souřadnice lze dosáhnout  $g_{00} = -1$  ( $= -c^2$ ). Časová souřadnice  $x_0$ , kterou můžeme označit  $t$ , pak udává vlastní čas v každém bodě prostoru. Prostorčasový interval zde bude mít jednoduchý tvar  $ds^2 = dl^2 - dt^2$ .

Délkový element ( 9.323 ) se obvykle upravuje na tvar, v němž je úměrný příslušnému Eukleidovskému výrazu. To lze uskutečnit zavedením nové souřadnice  $r$  pomocí transformace  $r \rightarrow r/(1+r^2/4a^2)$ . Prostorová metrika ( 9.323 ) pak má tvar

$$dl^2 = \frac{dr^2 + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2)}{\left(1 + \frac{kr^2}{4a^2}\right)^2} = \frac{dx^2 + dy^2 + dz^2}{\left(1 + k \frac{x^2 + y^2 + z^2}{4a^2}\right)^2} \quad (9.324)$$

Dále, jelikož poloměr křivosti  $a$  může být použit jako přirozená jednotka pro měření vzdálenosti, je výhodné zavést nové bezrozměrné souřadnice  $r \rightarrow r/a$ ,  $x \rightarrow x/a$ ,  $y \rightarrow y/a$ ,  $z \rightarrow z/a$ , ve kterých má délkový element tvar

$$dl^2 = a^2(t) \frac{dr^2 + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2)}{\left(1 + \frac{kr^2}{4}\right)^2} = a^2(t) \frac{dx^2 + dy^2 + dz^2}{\left(1 + k \frac{x^2 + y^2 + z^2}{4}\right)^2} \quad (9.325)$$

Vzdálenost  $dl$  mezi libovolnými blízkými body je tedy úměrná  $a(t)$ , takže růst nebo pokles  $a(t)$  s časem znamená zvětšování nebo zmenšování všech vzdáleností v soustavě - rozšiřování nebo smršťování veškeré hmoty. Prostorčasová metrika homogenního izotropního vesmíru může být tedy napsána ve tvaru tzv. **Robertsonovy-Walkerovy metriky**



Howard Percy Robertson (1903 – 1961)



Arthur Geoffrey Walker (1909 – 2001)

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + a^2(t) \frac{dx^2 + dy^2 + dz^2}{\left(1 + k \frac{x^2 + y^2 + z^2}{4}\right)^2} \quad (9.326)$$

Tenzor energie-hybnosti kosmologického "plynu" ve všude lokálně klidové vztažné soustavě má nenulové komponenty pouze  $T^0_0 = \rho c^2$ ,  $T^1_1 = T^2_2 = T^3_3 = -p$ , přičemž v homogenním a izotropním vesmíru mohou být  $\rho$  a  $p$  funkcemi pouze času  $t$ . Einsteinovy rovnice ( 9.293 ) pro metriku ( 9.326 ) pak vedou po úpravě (včetně vynásobení obou stran  $c^2$ ) ke dvěma obyčejným diferenciálním rovnicím - **Fridmanovým rovnicím**

$$3\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + \frac{3kc^2}{a^2} - \Lambda c^2 = \frac{8\pi G}{c^2} T^0_0 = 8\pi G \rho, \quad (9.327)$$

$$2\frac{\ddot{a}}{a} + \left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 + \frac{3kc^2}{a^2} - \Lambda c^2 = -\frac{8\pi G}{c^2} p$$

kteřé spolu se **stavovou rovnicí**  $p = p(\rho)$  kosmologické kapaliny umožňují určit  $a$ ,  $p$ ,  $\rho$  jako funkce času  $t$ , tj. určit **evoluci vesmíru**. Každá tečka nad  $a$  značí derivaci podle času. Obě tyto rovnice spolu souvisejí identitou

$$\frac{d}{dt} \rho c^2 a^3 = -p \frac{d}{dt} a^3 \quad (9.328)$$

kteřá je vyjádřením lokálního zákona zachování energie.

V relativistické kosmologii se místo  $\dot{a}$  a  $\ddot{a}$  zavádějí veličiny od nich odvozené, které mohou být (aspoň v principu) přímo změřeny z astronomických pozorování. Jako míra relativní rychlosti změny poloměru křivosti, tj. míra expanze (nebo komprese), se používá **Hubbleova konstanta  $H$** .



Edwin Powell Hubble (1889 – 1953)

$$H = \frac{\dot{a}}{a}. \quad (9.329)$$

Veličina  $H$  se označuje za "konstantu" pouze v tom smyslu, že je stejná pro všechna místa (nezávisí na souřadnicích); obecně však může být funkcí času. Nynější hodnota Hubbleovy konstanty se odhaduje většinou na  $H \in (60;70)$  km s<sup>-1</sup>/Mpc.

Dále se zavádí tzv. **decelerační parametr  $q$**

$$q = a \frac{\ddot{a}}{\dot{a}^2} \quad (9.330)$$

charakterizující zpomalování nebo zrychlování expanze nebo kontrakce. Pomocí veličin  $H$  a  $q$  lze rovnice (9.327) vyjádřit ve tvaru

$$\frac{kc^2}{a^2} = \frac{8\pi G\rho}{3} - H^2 + \frac{\Lambda c^2}{3} = (2q-1)H^2 + \Lambda c^2. \quad (9.331)$$

Všimněme si nejprve případu  $\Lambda = 0$ . Z první rovnice ( 9.327 ) je vidět, že o tom, která z variant  $k = 1, 0, -1$  se může realizovat, rozhoduje znaménko  $8\pi G\rho/3 - H^2$ , tj. vztah mezi hustotou hmoty a rychlostí expanze. Příklad  $k = 1$  odpovídající **uzavřenému vesmíru** nastává tehdy, když  $8\pi G\rho/3 > H^2$ , tj. když střední hustota hmoty ve vesmíru je větší než určitá "**kritická hustota**"  $\rho_{\text{krit}}$

$$\rho_{\text{krit}} = \frac{3H^2}{8\pi G} \quad (9.332)$$

Na základě v současnosti pozorovaných rychlostí vzdalování galaxií (Hubbleovy konstanty) je tato kritická hustota přibližně  $8 \cdot 10^{-30} \text{ g/cm}^3$ , což odpovídá jen asi 5 atomům vodíku na  $1 \text{ m}^3$ .

Jestliže  $\rho < \rho_{\text{krit}}$ , je  $k = -1$  (jedná se o otevřený vesmír), při  $\rho = \rho_{\text{krit}}$  máme  $k = 0$  (odpovídající Eukleidovskému vesmíru). Druhá rovnice ( 9.327 ) ukazuje, že ekvivalentním kritériem charakteru Friedmana vesmíru je hodnota deceleračního parametru  $q$ : v uzavřeném vesmíru je  $q > 1/2$ , v otevřeném  $q < 1/2$  a Eukleidovskému vesmíru odpovídá  $q = 1/2$ .

První rovnice ( 9.327 ) pro  $k = 1, \Lambda = 0$  má tvar

$$\dot{a}^2 + 1 = \frac{a^2 8\pi G\rho}{3}. \quad (9.333)$$

V případě, že vesmír je zaplněn nekoherentním prachem, tj.  $p = 0$ , plyne z rovnice ( 9.328 )  $\rho a^3 = \text{const.}$ ; jelikož objem uzavřeného vesmíru je  $V = 2\pi^2 a^3$ , je součet hmotnosti v celém prostoru konstantní:

$$M = 2\pi^2 a_0^3 \rho_0 = \text{const.} \quad (9.334)$$

kde  $a_0$  a  $\rho_0$  jsou poloměr a hustota hmoty vesmíru v nějakém pevném časovém okamžiku  $t_0$ . Po zavedení nové "časové" proměnné  $\eta$

substitucí  $d\eta = adt$  lze řešení první rovnice ( 9.327 ) napsat v parametrickém tvaru

$$\begin{aligned} a &= \frac{4GM}{6\pi c^2}(1 - \cos\eta), \\ t &= \frac{4GM}{6\pi c^2}(\eta - \cos\eta). \end{aligned} \quad (9.335)$$

Grafické znázornění časové závislosti  $a = a(t)$  je tedy cykloida, kterou opisuje pevný bod na kružnici o poloměru

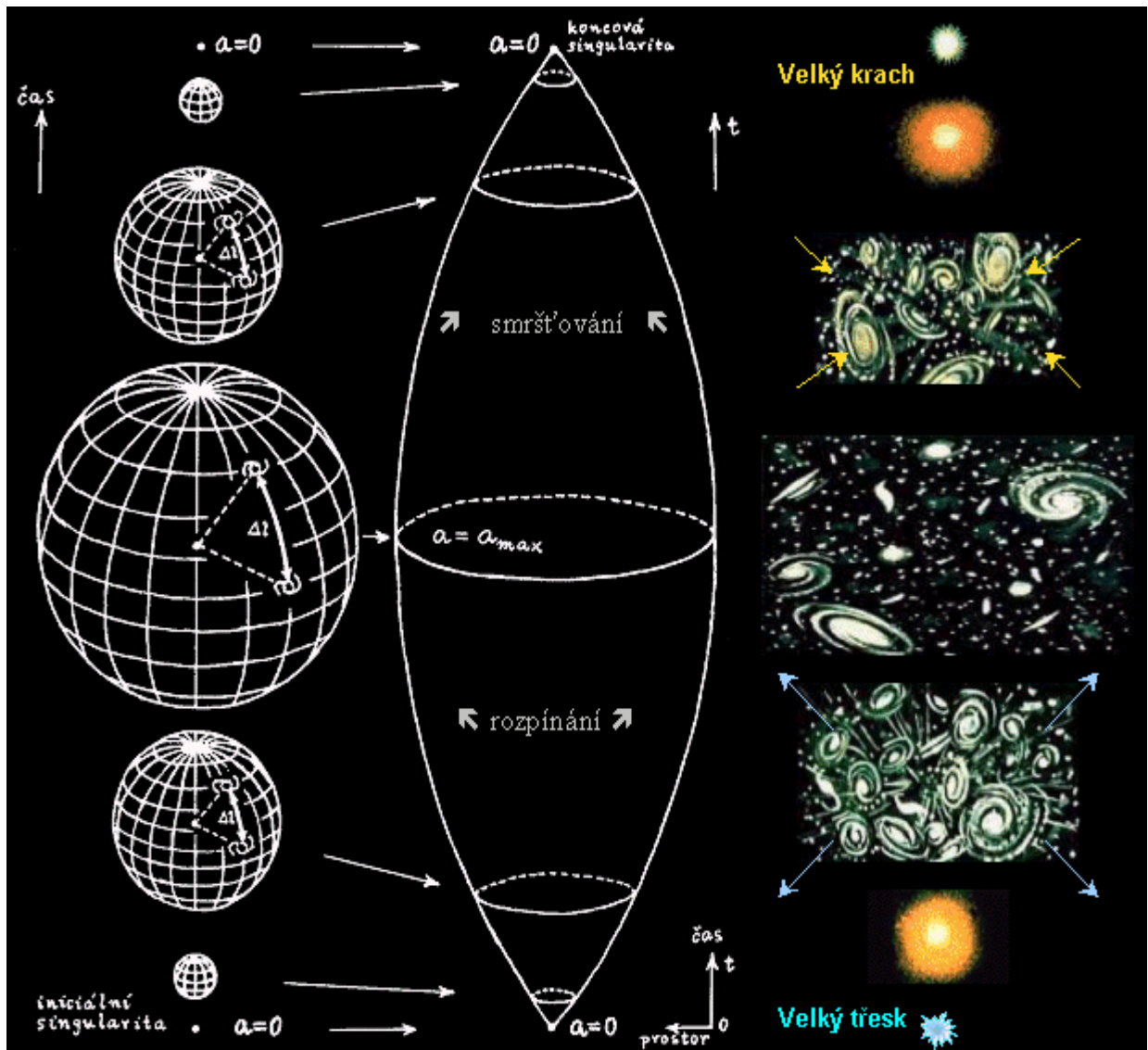
$$a_{\max} = \frac{4GM}{3\pi c^2}. \quad (9.336)$$

při jejím valení po přímce (časové ose  $t$ ); parametr  $\eta$  je úhel valení. Hustota hmoty se přitom mění podle zákona

$$\rho = \frac{3}{a_{\max}^2 (1 - \cos\eta)^3} = \frac{6H^2}{8\pi G(1 + \cos\eta)} \quad (9.337)$$

Ve Friedmanově modelu uzavřeného vesmíru zaplněného prachem tedy evoluce vypadá tak (obr. 9.28), že na počátku  $t = 0$  vesmír vychází ze **singulárního stavu**  $a = 0$  s nulovým objemem a nekonečnou hustotou hmoty, postupně se rozšiřuje až do rozměru  $a = a_{\max}$ , a potom se opět smršťuje do bodu  $a = 0$ .

Podle levé části obr. 9.28 se evoluce vesmíru často modeluje nafukujícím se a posléze se opět smršťujícím balónkem, na jehož povrchu jsou nakresleny galaxie či kupy galaxií. Při takovém nafukování balónku se všechny body jeho povrchu od sebe **vzdalují** rychlostí úměrnou jejich vzájemné vzdálenosti, ve shodě s Hubbleovým zákonem ( 9.316 ).



**Obr. 9.28. Časová evoluce uzavřeného vesmíru.**

**Vlevo:** Uzavřený Fridmanovský vesmír si lze představit jako trojrozměrnou sféru, která se postupně "nafukuje" od nulového poloměru (iniciální singularita v čase  $t=0$ ) do jistého maximálního poloměru, a pak se zase smršťuje do bodu (koncová singularita). Veškeré vzdálenosti  $D_l$  mezi libovolnými objekty (galaxiemi, resp. kupami galaxií) se při expanzi nebo kontrakci vesmíru zvětšují nebo zmenšují úměrně poloměru křivosti.

**Uprostřed:** Prostorčasový diagram uzavřeného vesmíru vnořený do fiktivního pětirozměrného prostoru.

**Vpravo:** Názorné zobrazení rozpínající a smršťující se hmoty během evoluce vesmíru.

Ve stádiích  $a \rightarrow 0$ , tj. na počátku a na konci evoluce, však předpoklad stavové rovnice nekoherentního prachu není realistický. Naopak, látka se zde nutně stává ultrarelativistickou, takže blíže skutečnosti bude stavová rovnice  $p = \rho c^2/3$ . Rovnice ( 9.328 ) pak dává  $\rho a^4 = \text{const.}$  a řešení první rovnice ( 9.327 ) zde je

$$a = \tilde{a} \cdot \sin \eta,$$

$$t = \tilde{a} \frac{(1 - \cos \eta)}{c} \quad (9.338)$$

(grafem je polokružnice), kde

$$\tilde{a} = \sqrt{\frac{8\pi G \rho_0 a_0^4}{3c^4}} = \text{const.} \quad (9.339)$$

Globální charakter evoluce bude stejný jako v předchozím případě - žádný tlak látky vyplňující uzavřený vesmír není schopen singulárním bodům  $a = 0$  zabránit.

Jestliže  $\rho < \rho_{\text{krit}}$ , je  $k = -1$  - jedná se o **otevřený vesmír**. Pokud je zaplněn prachem, je řešení první rovnice ( 9.327 )

$$a = \hat{a} (\cos \vartheta - 1),$$

$$t = \hat{a} \frac{\sin \vartheta - \vartheta}{c}, \quad (9.340)$$

kde

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{8\pi G \rho_0 a_0^3}{3c^2}} = \text{const} \quad (9.341)$$

Závislost  $a = a(t)$  zde má tvar hyperboly (obr. 9.29a) - poloměr křivosti  $a$  monotónně roste od nuly (singularita) při  $t = 0$  do nekonečna při  $t \rightarrow \infty$ . Podobný obraz se dostane i při zahrnutí vlivu tlaku; pro krajní případ  $p = \rho c^2/3$  je řešení

$$a = \hat{a} \cdot \sinh \vartheta,$$

$$t = \tilde{a} \frac{\cosh \vartheta - 1}{c}, \quad (9.342)$$

Otevřený Friedmanův vesmír má tedy rovněž singularitu, avšak pouze jedinou - **iniciální**.



V mezním případě  $\rho = \rho_{\text{krit}}$  bude  $k = 0$ , vesmír má nekonečně velký poloměr křivosti - jedná se o model s **plochým prostorem** (Eukleidovým). Prostorovočasová metrika zde má jednoduchý tvar

$$ds^2 = -c^2 dt^2 + a^2(t)(dx^2 + dy^2 + dz^2), \quad (9.343)$$

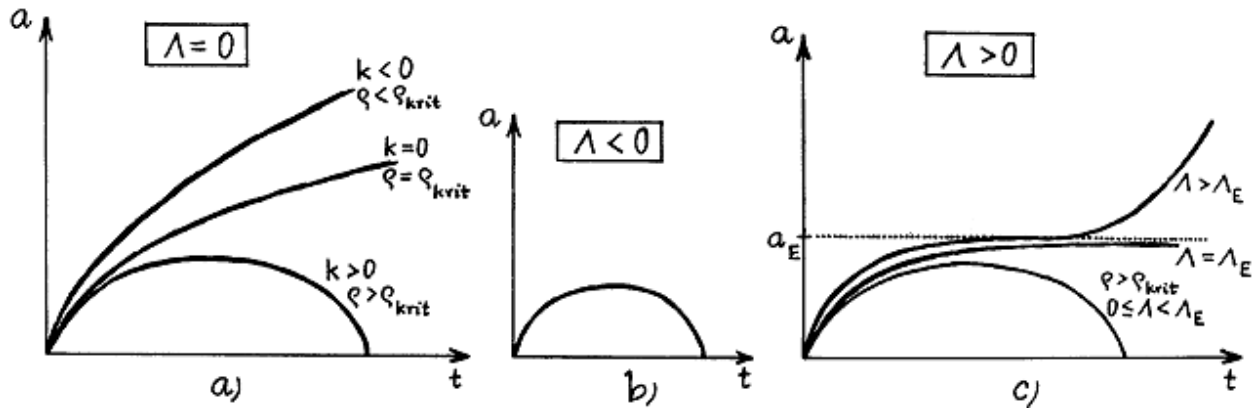
přičemž časově proměnný koeficient  $a(t)$  nevyjadřuje zakřivení prostoru, ale jedná se jen o **měřítkový faktor**. Pro případ nekoherentního prachu (tj. malého tlaku - odpovídá pozdním fázím evoluce) rovnice (9.328) dává  $\rho a^3 = \text{const.}$  a z první rovnice (9.327) vychází, že vzdálenost mezi každými dvěma body roste podle zákona

$$a(t) = a_1 t^{2/3} \quad (9.344)$$

kde konstanta  $a_1$  závisí na měřítku prostorovočasové vztažné soustavy. V raných stádiích evoluce vesmíru, kdy je třeba uvažovat maximální tlak  $p = \rho/3$ , je  $\rho a^4 = \text{const.}$  a pro expanzi dostáváme časovou závislost tvaru

$$a(t) = a_2 t^{1/2} \quad (9.345)$$

Je třeba upozornit na to, že i když pro  $\rho = \rho_{\text{krit}}$  vychází Eukleidova metrika trojrozměrného prostoru, celý čtyřrozměrný prostorovočas zde není plochý. Ploché jsou pouze určité speciální řezy (nadplochy) prostorovočasu, odpovídající stejnému vlastnímu času všech částic vyplňujících vesmír.



**Obr. 9.29. Evoluce kosmologických modelů (časový průběh poloměru  $a$  vesmíru) v závislosti na hodnotě kosmologické konstanty  $\Lambda$  a hustotě rozložení hmoty  $\rho$ .**  
( $a_E$  a  $\Lambda_E$  na obr. vpravo značí hodnoty poloměru vesmíru a kosmologické konstanty odpovídající Einsteinovu kosmologickému modelu)

Při zahrnutí **nenulové kosmologické konstanty**  $\Lambda$  se ve vesmíru objevuje navíc určitá **přídavná síla** (odpudivá pro  $\Lambda > 0$  a přitažlivá při  $\Lambda < 0$ ), která urychluje nebo zpomaluje rozšiřování nebo smršťování vesmíru. Tato síla nezávisí na hmotnosti a roste se vzdáleností. Z hlediska globální evoluce vesmíru má **efektivní energie vakua**, generovaná kosmologickým členem, důležitou vlastnost (odlišnou od látkové formy hmoty) - **nezředuje** se ani **nezhuštuje** při rozšiřování či smršťování vesmíru, zachovává si konstantní hodnotu. Řešení rovnic ( 9.327 ) pak při  $\Lambda \neq 0$  vede k následujícím možnostem :

Pokud je  $\Lambda < 0$ , vždy převáží nakonec přitažlivost a evoluce vesmíru má průběh podle obr. 9.29b při libovolném  $\rho$ .

Pestřejší možnosti evoluce vesmíru vznikají při  $\Lambda > 0$  - jsou znázorněny na obr. 9.29c.

Pokud je kosmologická konstanta  $\Lambda$  menší než Einsteinova hodnota ( 9.305 )  $\Lambda_E = 4pGr/c^2$ , bude pro nadkritickou hustotu  $\rho > \rho_{krit}$  evoluce vesmíru probíhat zhruba (kvalitativně) stejně jako pro  $\Lambda = 0$ .

Při  $\Lambda > \Lambda_E$  se  $a(t)$  zvětšuje od nuly do nekonečna, avšak v určité fázi se expanze na čas výrazně zpomalí - dochází k jakési "kvazistatické fázi", během níž jsou přitažlivé síly vyváženy odpudivými ("nerozhodný" vesmír); později převládnu síly odpudivé. Doba trvání  $T_{st}$  této kvazistatické fáze (během níž se poloměr křivosti vesmíru udržuje přibližně na hodnotě poloměru Einsteinova statického modelu ( 9.306 )  $a = a_E$ ) je tím delší, čím menší je rozdíl  $\Lambda - \Lambda_E$ :

$$T_{st} \sim \ln \frac{\Lambda}{\Lambda - \Lambda_E}. \quad (9.346)$$

Při  $\Lambda \rightarrow \Lambda_E$  se vesmír dostává do stavu Einsteinova statického vesmíru zmíněného v předchozím odstavci. Tento Einsteinův model je však nestabilní, protože sebenepatrnější perturbace hustoty povede k expanzi. Pro  $\rho > \rho_{krit}$  a  $\Lambda = \Lambda_E$  existují dvě další řešení:

1. V nekonečně vzdálené minulosti  $t \rightarrow -\infty$  bylo  $a = a_E$ , v budoucnu pak neomezená expanze;
2. Vesmír vyšel v okamžiku  $t = 0$  ze stavu  $a(0) = 0$ , načež expanduje a asymptoticky (v nekonečně vzdálené budoucnosti  $t \rightarrow -\infty$ ) dosahuje poloměr  $a \rightarrow a_E$ .

Pro  $\Lambda > 0$  existuje, kromě zmíněných speciálních možností, též řešení, podle něhož při  $t = -\infty$  měl vesmír nekonečný poloměr, pak probíhala kontrakce do určité minimální hodnoty  $a_{min}$ , načež nastává neohraničená expanze.

Zmíněné zvláštnosti kosmologických modelů s nenulovou kosmologickou konstantou se používají při pokusech o překonání obtíží relativistické kosmologie (vnitřních potíží i nesrovnalostí s výsledky pozorování).

### Chaotická inflace a kvantová kosmologie

Teorie chaotické inflace vychází ze situace v časech  $t \approx t_h$  při hustotách  $\rho \approx \rho_h$ , kdy v důsledku silných **kvantově-gravitačních fluktuací** polí i metriky prostoročasu lze předpokládat, že při  $t \approx t_h$  všechny hodnoty polí  $\varphi$  (při nichž  $V(\varphi) \approx m_h^4$ ) byly zhruba stejně pravděpodobné; rozložení pole  $\varphi$  ve vesmíru bylo tedy víceméně chaotické. Proto existovaly i oblasti prostoru, v nichž pole  $\varphi$  bylo shodou okolností dostatečně silné a přitom téměř homogenní. Pokud rozměry  $\Delta l$  oblastí, v níž je pole  $\varphi$  homogenní, jsou větší než velikost horizontu v de Sitterově modelu s hustotou energie  $V(\varphi)$ , tj.

$$\Delta l \approx \sqrt{\frac{3hc}{8\pi G V(\varphi)}} = H^{-1}. \quad (9.347)$$

a pole  $\varphi$  se mění s časem dostatečně pomalu, pak vnitřní část této oblasti se bude **exponenciálně rozpínat** podle zákona

$$a \sim a_0 e^{Ht} \quad (9.348)$$

nezávisle na situaci vně této oblasti, tj. podle inflačního scénáře. Pole, které vyvolává inflační expanzi, se nazývá **inflatonové**. Takovým inflatonovým polem může být skalární pole  $\varphi$  s kvadratickou závislostí potenciální energie na velikosti pole

$$V(\varphi) = \frac{m^2 \varphi^2}{2}. \quad (9.349)$$

Z matematického hlediska lagrangián skalárního pole spolu s kosmologickou metrikou ( 9.326 ) vede k vázaným rovnicím pro gravitaci a pole

$$\ddot{\varphi} + 3\varphi \frac{\dot{a}}{a} + \frac{dV}{d\varphi} = 0, \quad (9.350)$$

$$\left(\frac{\dot{a}}{a}\right)^2 = +\frac{1}{a^2} = \frac{8\pi G}{3} \left( V(\varphi) + \frac{\dot{\varphi}^2}{2} \right),$$

kde  $V(\varphi)$  je efektivní potenciál. Skalární pole  $\varphi$  Higgsova typu, používané v unitárních kalibračních teoriích přispívá do lagrangiánu v nejjednodušším případě členy

$$L_\varphi = \frac{(\varphi_{;i})^2}{2} - \frac{m^2 \varphi^2}{2} - \frac{\lambda \varphi^4}{4} \quad (9.351)$$

kde  $m$  je hmotnost a  $\lambda > 0$  je (samo)vazbová konstanta pole  $\varphi$ . Tenzor energie-hybnosti tohoto skalárního pole bude mít nenulové pouze diagonální složky rovné

$$T_0^0 = -\varepsilon \quad (9.352)$$

$$T_\beta^\alpha = p \delta_\beta^\alpha$$

kde

$$\begin{aligned}\varepsilon &= \frac{\dot{\varphi}^2}{2} + \frac{m^2 \varphi^2}{2}, \\ p &= \frac{\dot{\varphi}^2}{2} - \frac{m^2 \varphi^2}{2}.\end{aligned}\tag{ 9.353 }$$

Pokud se pole  $\varphi$  mění dostatečně pomalu tak, že  $\dot{\varphi}^2 \ll m^2 \varphi^2$ , efektivní stavová rovnice bude  $p = -\varepsilon$ , což povede k "deSitterovskému" stádiu doprovázenému **exponenciální expanzí**.

Za přítomnosti takového pole k nastartování inflace automaticky dojde tehdy, je-li počáteční hustota energie pole větší než plyne z výše uvedených vztahů (pro oblast Planckovské velikosti musí být počáteční energie inflatonového pole větší než trojnásobek Planckovy hmotnosti).

Koncepce chaotické inflace nevyžaduje téměř žádné apriorní počáteční podmínky. Kromě univerzálnosti kvantových fluktuací stačí předpokládat alespoň jedno výchozí pole  $\varphi$  (dostatečně slabě interagující s ostatními poli), které nemusí být jednoduchým skalárním polem, může se jednat i o pole fermionové, nebo dokonce o fluktuující pole křivosti prostoročasu. Krom toho má tato koncepce ještě další význačný pozitivní rys: jako jediná nabízí určitou možnost řešit i nejjednodušší kosmologický problém - problém inerciální singularity a vzniku vesmíru. Za úplnou lze považovat jen takovou kosmologickou teorii, která zahrnuje i **proces vzniku vesmíru**. Podle kvantové teorie gravitace jsou v malých měřících  $\Delta l \approx l_h$  kvantové fluktuace metriky a fyzikálních polí velmi velké. Existuje proto možnost, že v důsledku těchto fluktuací se utvoří oblast zaplněná pomalu se měnícím skalárním polem  $\varphi$ . Jestliže velikost  $\Delta l$  této oblasti je větší než velikost horizontu v de Sitterově modelu s hustotou energie  $V(\varphi)$ , pak vnitřní část této oblasti se bude exponenciálně rozpínat nezávisle na vnější situaci, jak bylo již výše uvedeno. Přitom pravděpodobnost toho, že kvantové fluktuace (jež jsou velké pouze při hustotě energie vznikajícího vesmíru  $\rho \approx \rho_h$ ) povedou ke vzniku inflačně expandujícího vesmíru, je značná pouze při splnění podmínky

$$m_h^{-2} \approx \sqrt{\frac{3hc}{8\pi G V(\varphi)}} = H^{-1}, \quad (9.354)$$

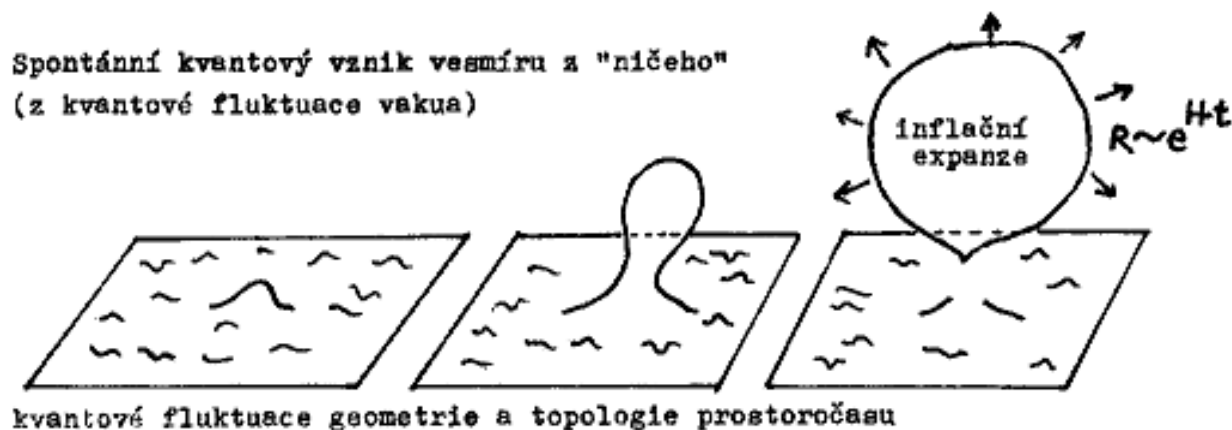
neboli  $V(\varphi) \approx m_h^4$ ; pravděpodobnost kvantového vzniku vesmíru při  $V(\varphi) \ll m_h^4$  je podstatně nižší. Za předpokladu, že kvantový vznik vesmíru probíhá mechanismem tunelování přes bariéru, byla by pravděpodobnost vzniku vesmíru

$$P \sim e^{-\frac{k\rho_h}{\rho}}, \quad (9.355)$$

kde  $k$  je nějaká konstanta. S poklesem hustoty pod  $\rho_h$  tedy pravděpodobnost kvantového vzniku vesmíru rychle klesá. Vzhledem k podmínce  $\Delta l \approx m_h^{-1}$  z toho plyne, že pokud popsáním mechanismem vzniká Fridmanovský vesmír, bude to nejpravděpodobněji vesmír uzavřený, startující svou inflační expanzi z charakteristické velikosti  $l \approx l_h \approx 10^{-35}$  m.

Podle této koncepce tedy vesmír nikdy nemusel být v singulárním stavu, ale v důsledku kvantově-gravitačních fluktuací spontánně vznikl "z ničeho" - z vakua zaplněného virtuálními částicemi a poli. Objevuje se tak nástin úplné kosmologické teorie jednotně vysvětlující vznik vesmíru, jeho evoluci i strukturu hmoty jej zaplňující. Všechny detaily **kvantové kosmologie** nejsou zatím zdaleka ještě rozpracovány. Například není jasné, co vlastně znamená kvantový popis vesmíru jako celku. V základech kvantové teorie totiž leží proces měření, který předpokládá určitý vnější přístroj, resp. vnějšího pozorovatele, provádějícího měření. Z kvantové fyziky se zde proto extrapolují jen nejzákladnější koncepce - spontánnost, náhodnost, nepředvídatelnost, fluktuace.

Spontánní kvantový vznik vesmíru z "ničeho"  
(z kvantové fluktuače vakua)

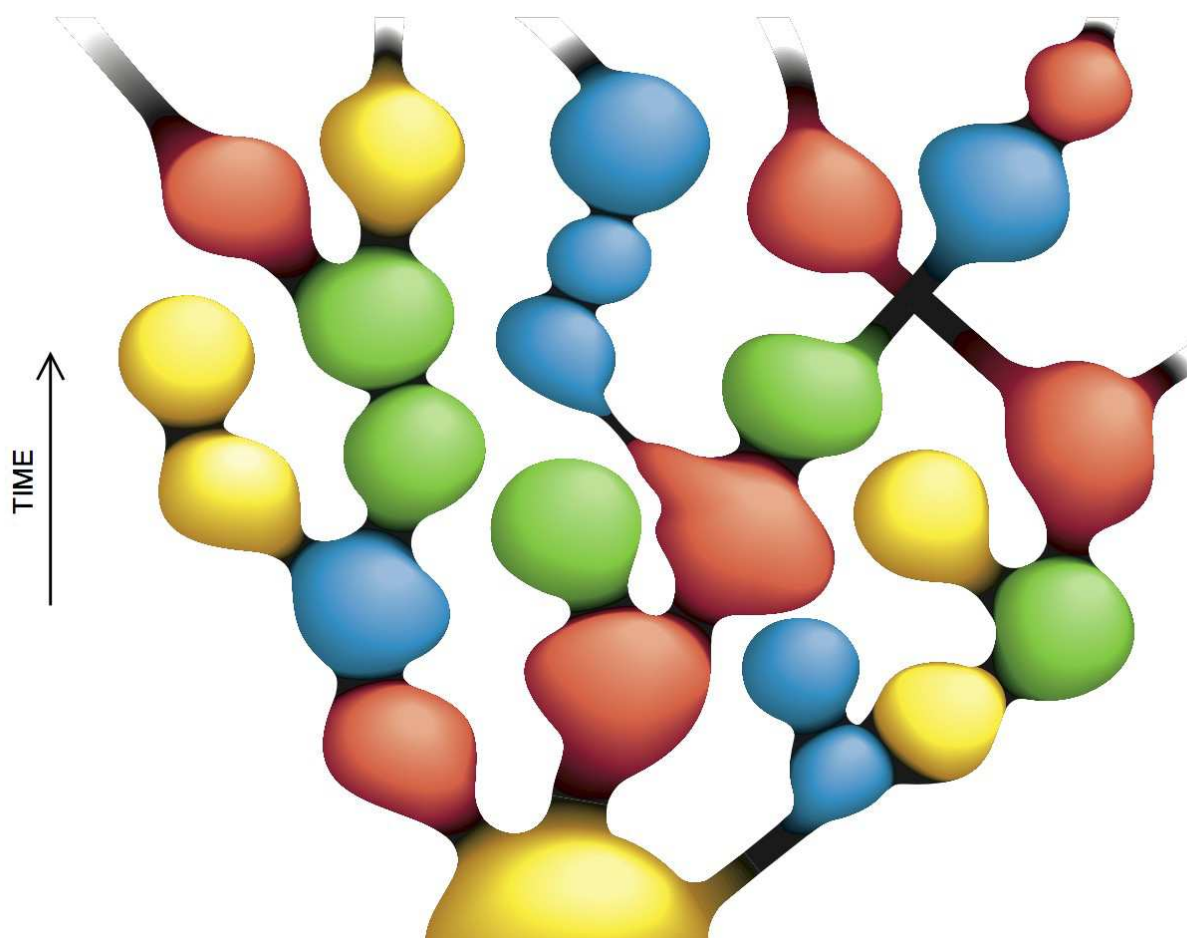


Obr. 9.30: Spontánní kvantový vznik vesmíru inflační expanzí dostatečně velké kvantové fluktuače.

Představa spontánního kvantového vzniku vesmíru vede ještě k dalším zajímavým důsledkům. Dostatečně silné kvantové fluktuače podobné té, jež vedla ke vzniku "našeho" vesmíru, mohly totiž nezávisle nastat i jinde. Z prvotního vakua, které dalo vzniknout našemu světu, by se tak mohlo vynořit mnoho dalších vesmírů, každý se svými specifickými různými fyzikálními zákony. Vznikla by tak celá řada různých rozpínajících se "bublin" - řada nezávislých vesmírů s různou globální strukturou prostoročasu i vlastnostmi hmoty. Taková předpokládaná množina spontánně vznikajících vesmírů z kvantových fluktuač vytváří jakýsi "**fraktálový strom**" nových a nových světů (o fraktálech blíže pojednáme v 10. kapitole).

Pokud skutečně existují takovéto "mnohočetné" vesmíry, pak to, co jsme dosud nazývali **univerzum**, může být výsledkem jednoho velkého třesku (či kvantové fluktuače) z mnoha jiných, podobně jako je naše Slunce jen jedna z mnoha hvězd vzniklých podobným způsobem v Galaxii. Pro Vesmír by pak místo dosavadního názvu "univerzum" bylo přiléhavější označení "**multiverzum**".

Obr. 9.31



Kvantové fluktuace vakua možná všude a neustále "chrlí" nové a nové vesmíry s nejrůznějšími vlastnostmi. Celý Vesmír se tedy podle těchto koncepcí jeví jako kypící "pěna" rozpínajících se "bublin" - samostatných vesmírů, z nichž každý se řídí svými **vlastními** zákony fyziky. Paralelní vesmíry žijí "svým vlastním životem". Náš celý viditelný vesmír je jen malou oblastí v jedné z těchto bublin. Jinak jen velmi málo bublin má fyzikální a geometrické vlastnosti vhodné pro vytvoření složitějších struktur - galaxií, hvězd, planet a nakonec života.

Ve světle podobných koncepcí se ukazuje, že tradiční (a zdálo by se samozřejmý) kosmologický požadavek, aby se vesmír jako celek během expanze stal homogenní a izotropní, není nutný - stačí, aby tyto vlastnosti vykazovaly jednotlivé "minivesmíry", nebo alespoň metagalaxie v níž žijeme.



Vznik vesmíru z "ničeho" se může zdát zvláštní a nepřijatelný, odporující všem našim poznatkům. Avšak definice "ničeho" je zde odlišná od běžného významu tohoto slova. V kvantové fyzice "*nic*" = "*vakuuum*" znamená prostor, v němž neustále po kratičkové okamžiky elementární částice začínají a končí svou existenci ve **vakuových fluktuacích**. V jakési "*prostorochasové pění*", v reji vakuových fluktuací, nepřetržitě vznikají a zanikají maličké submikroskopické "vesmíry". Naprostá většina z těchto vznikajících "bublinkových" vesmírů vzápětí splaskne a zanikne, avšak podle zákonitostí kvantové pravděpodobnosti jednou za čas vznikne tak velká fluktuace, která je schopna dalšího vývoje - inflační expanze. Vedle "našeho" vesmíru tak mohly vznikat i jiné vesmíry v topologicky jiném prostoru.

Když to shrneme, scénář inflační expanze velmi raného vesmíru řeší tak říkajíc "jednou ranou" několik nejdůležitějších problémů současné kosmologie: Proč je vesmír ve velkých měřítcích tak dokonale homogenní a izotropní, proč je průměrná hustota hmoty ve vesmíru tak blízka kritické hustotě, proč v jinak homogenním rozložení hmoty ve vesmíru vznikly fluktuace se spektrem vhodným pro vznik pozorovaných galaxií, a proč není vesmír zaplněn magnetickými monopóly a dalšími "exotickými" částicemi.

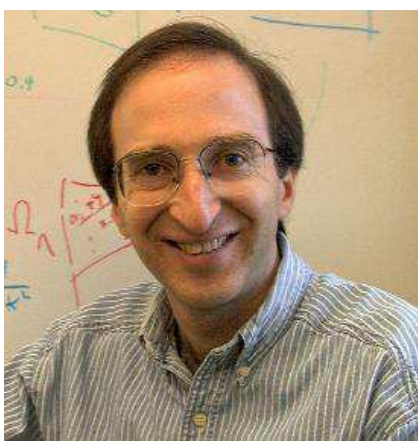
Koncepce inflačního vesmíru však přináší též nový důležitý poznatek metodologického (či dokonce filosofického) charakteru. V kosmologii bylo doposud vždy nutno většinu pozorovaných vlastností vesmíru (homogenitu a izotropii, počáteční rychlost expanze, měřítko nehomogenit pro vznik galaxií, entropii na jeden baryon a pod.) "zabudovávat ručně" do daného modelu jakožto počáteční podmínky. V inflačním modelu jsou však počáteční podmínky **bezvýznamné**, protože inflační expanze efektivně "smazává" veškeré detaily vesmíru, který byl před inflační fází. Lavinovitě narůstající expanze téměř dokonale vyhlazuje vesmír. Jakmile inflace začne, zahladí veškeré stopy dřívějšího stavu - zanechá jen rozsáhlý horký, hustý a hladký raný vesmír. Podle inflačního modelu tedy struktura vesmíru není produktem počátečních podmínek, ale je výlučně důsledkem fundamentálních zákonů fyziky - zákonů gravitace a kvantové teorie pole. Poprvé se tak

setkáváme s fyzikální teorií, která kromě dynamiky evoluce řeší (nebo lépe řečeno obchází) **problém počátečních podmínek**.

## Temná energie a akcelerovaná expanze vesmíru

Podle standardního kosmologického modelu je expanze vesmíru **brzděna** přitažlivými gravitačními účinky hmoty a tudíž se musí **zpomalovat** - a to jak v uzavřeném vesmíru (kde posléze přejde v kontrakci), tak i v otevřeném vesmíru (kde se rozšiřování bude zpomalovat, avšak nikdy se zcela nezastaví). Nyní víme, že ke zpomalování expanze vesmíru rozhodujícím způsobem přispívá svou gravitací nezářící temná hmota. Kosmologická konstanta v Einsteinových gravitačních rovnicích podle dosavadních představ mohla snad sehrát rozhodující roli při inflační expanzi vesmíru na samém počátku, avšak pro další evoluci vesmíru ji nebylo třeba uvažovat.

Přesná měření vzdáleností supernov v poslední době však ukázala, že vzdálené supernovy typu Ia jsou méně jasné, než by odpovídalo jejich kosmologickému červenému posuvu ve vesmíru, jehož rozpínání se vlivem gravitačních účinků hmoty zpomaluje. Tato měření provedly v letech 1988-89 dvě skupiny astronomů, které vedli A. Reiss a S. Perlmutter. Z takto změřeného vztahu mezi kosmologickým rudým posuvem a vzdáleností supernov bylo s překvapením vyzorováno, že expanze vesmíru se nezpomaluje, ale naopak **zrychluje!**



Saul Perlmutter (1959)



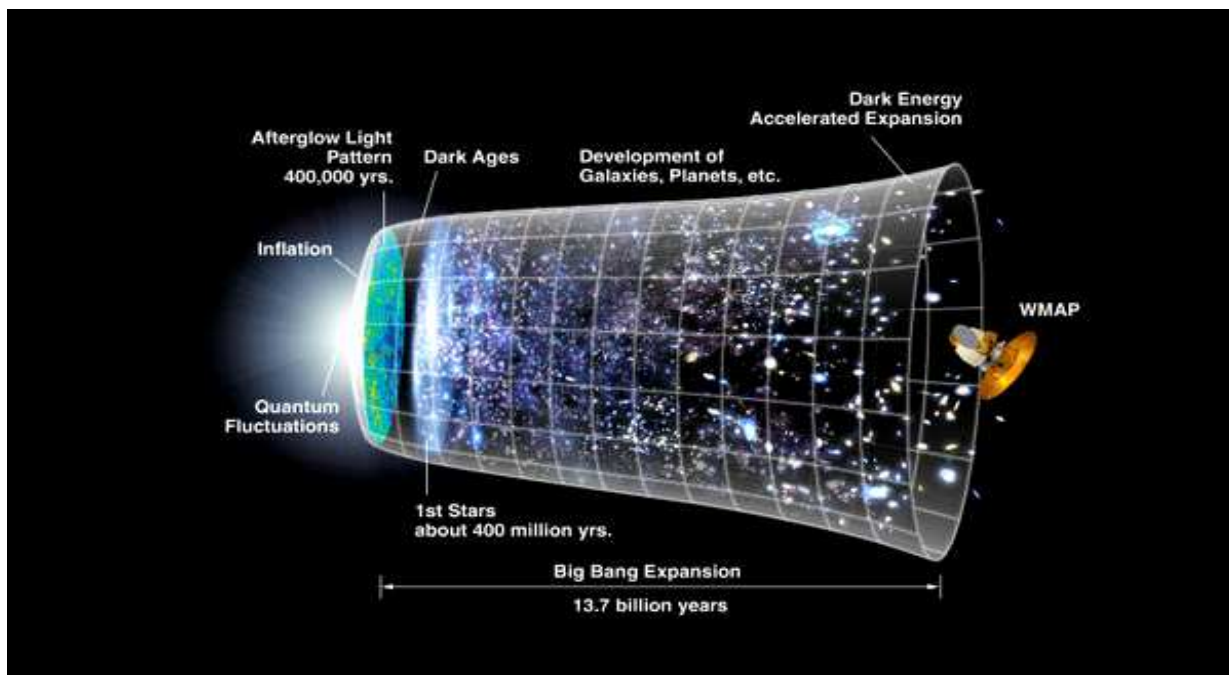
Adam Guy Riess (1969)

Supernova typu Ia vzniká v těsné dvojhvězdě z obří hvězdy a bílého trpaslíka, kde dochází k přenosu látky z obra na bílého trpaslíka, jehož

hmotnost roste, posléze překročí Chandrasekharovu mez ( $1,4 M_{\odot}$ ) a bílý trpaslík se zhroutí do neutronové hvězdy, což se projeví jako výbuch supernovy typu Ia. Výchozí hmotnost a proto i množství uvolněné energie je pokaždé **prakticky stejné**, takže z relativní pozorované jasnosti lze stanovit **vzdálenost** takové supernovy typu Ia, a to nezávisle na spektrometricky změřeném **kosmologickém rudém posuvu**  $z = (l - l_0)/l_0$  záření ze supernovy ( $l_0$  je vlnová délka určité spektrální čáry v okamžiku  $t_0$  vyslání paprsku,  $l$  je vlnová délka téže čáry v okamžiku  $t$  zachycení paprsku). V předešlém odstavci byla pro popis evoluce vesmíru zavedena **měřítková (expanzní) funkce**  $a(t)$  udávající, jak se s časem  $t$  mění vzdálenosti v expandujícím vesmíru. Pro dva časové okamžiky  $t_0$  a  $t$  platí mezi hodnotami měřítkové funkce  $a$  a kosmologického červeného posuvu  $z$  jednoduchý vztah  $z = (a - a_0)/a_0$ , kde  $a_0$  charakterizuje rozměry vesmíru v době  $t_0$  vyslání paprsku a rozměry vesmíru v době  $t$  jeho zachycení. Z toho  $a = (1 + z)a_0$ , takže z naměřeného kosmologického rudého posuvu můžeme stanovit, jak se změnily rozměry vesmíru od doby, kdy byl vyslán dnes zachycený světelný paprsek. Pečlivým rozbořením záření z většího počtu různě vzdálených supernov lze zjistit vztah mezi kosmologickým rudým posuvem a vzdáleností supernov, z čehož lze "vystopovat", jakým způsobem se vesmír rozpíná. A právě tato měření ukazují na časovou závislost  $a(t)$  podobnou křivce  $\Lambda > \Lambda_E$  na obr. 9.29c, podle níž se rychlost expanze vesmíru v současné době **zvyšuje**.

Byla vyslovena hypotéza, že toto zrychlující se rozpínání je způsobeno všeprostopující vakuovou tzv. "**temnou energií**" se **zápornou hustotou energie** natolik velkou, že svými repulsivními účinky překonává gravitační působení veškeré hmoty ve vesmíru. Tato záhadná skrytá či temná energie je někdy označována jako "páté skupenství" či "kvintesence" (viz níže). Taková vakuová temná energie by generovala **kosmologickou konstantu**  $\Lambda > 0$  v Einsteinových rovnicích (9.293) obecné teorie relativity, vedoucí k **zápornému tlaku**, který by na kosmologických vzdálenostech vyvolával "antigravitační" **odpuzování**, působící opačně než gravitace běžné hmoty.

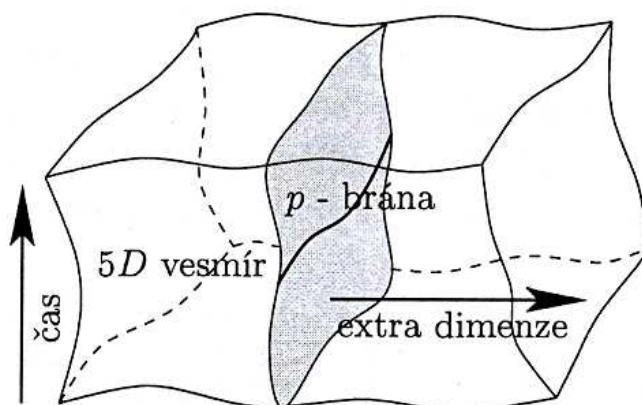
Obr. 9.32



Pokud hustota temné energie je časově konstantní nebo klesá pomaleji než hustota běžné hmoty (tj. pomaleji než  $1/a^3$  pro látku, popř.  $1/a^4$  pro záření), odpovídá scénář evoluce vesmíru křivce  $\Lambda > \Lambda_E$  na obr. 9.29c po skončení počáteční inflační expanze a nástupu expanze Fridmanovské trvalo dlouhou dobu období **decelerace**, kdy gravitační účinky hmoty (zářící+skryté) převládaly nad odpudivými silami temné energie a rozpínání se zpomalovalo. Po náležitém snížení hustoty hmoty nastalo období určitého **zvratu** ("nerozhodný vesmír") a vesmírná expanze posléze přešla ze stádia decelerace k **akceleraci**.

### Bránová kosmologie

V tomto odstavci budeme hovořit o bránových světech. Ve své nejjednodušší verzi tento termín v souvislosti s relativistickou kosmologií poukazuje na fyzikální obraz prostoročasu, v němž je náš čtyřrozměrný prostoročas časupodobnou nadplochou v pětirozměrném prostoročasu  $M_5$ . Fyzikální hmota je omezená na náš vesmír  $M_4$ . Situaci znázorňuje obr. 9.33.



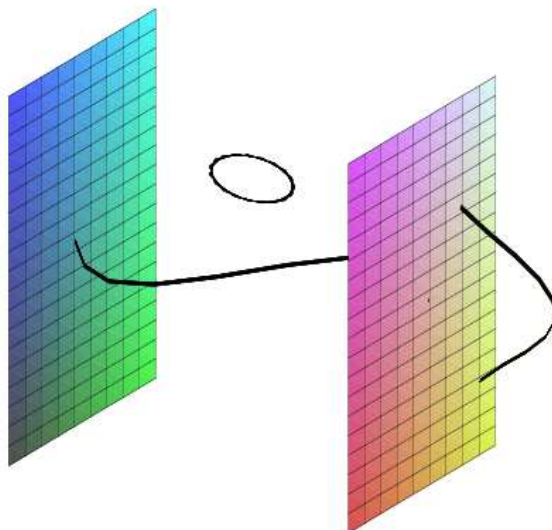
Obr. 9.33: Schematické znázornění 3-brány v pětidimenzionálním prostoročasu. S vývojem 3-brány v čase vzniká čtyřrozměrná nadplocha, na obrázku znázorněná šedou barvou.

Obecněji  $p$ -bránou nazýváme  $p$ -dimenzionální prostoropodobnou podvarietu nějakého  $D$ -dimenzionálního ( $D > p + 1$ ) prostoročasu  $M_D$ , který budeme dále nazývat prostor světů (v angličtině bulk). Toto je dosti obecná definice; dále se omezíme na fyzikálně opodstatněný případ, kdy dimenze prostoru světů je rovna  $D = p + 2$ . Souřadnice  $x^a$  ( $a = 1, \dots, p + 2$ ) na prostoru světů sestávají z časové souřadnice  $t$ , prostorových souřadnic  $x^\mu$  ( $\mu = 1, \dots, p$ ) na  $p$ -bráně a z jedné transverzální (tzv. extra) souřadnice  $Z$ .

Podle teorie strun jsou konce otevřených strun fixovány na časupodobné  $p$ -dimenzionální plochy. Matematická formulace spočívá v položení Dirichletových hraničních podmínek na příslušné souřadnice konců otevřené struny. Odtud též pochází název  $D$ -brány, kde  $D$  poukazuje na povahu těchto bran, tj. na souvislost s Dirichletovými podmínkami. Protože v dalším výkladu budeme uvažovat pouze  $D$ -brány, bude písmeno  $D$  vynecháno a symbol  $p$ -brána znamená  $p$ -dimenzionální  $D$ -bránu.

Náš 4-rozměrný prostoročas je vložen jako časupodobná nadplocha do 5-rozměrného prostoročasu. Samotný 3-rozměrný prostor je pak 3-bránou. V obecném  $D$ -rozměrném prostoročase může být obecně libovolný počet  $p$ -brán, z nichž alespoň jedna, náš vesmír, zahrnuje standardní model čističové fyziky (jako dobře ověřenou teorii elementárních částic). Sektor otevřených strun generuje fyzikální pole vázaná na  $p$ -bránu, neboť struny jsou přiloženy svými konci na

světloplochu brány. Uzavřené struny se mohou šířit v prostoru světů. Protože ve spektrech uzavřených strun se nachází graviton, není gravitace omezena na  $p$ -bránu, nýbrž naopak zprostředkovává interakce mezi nimi, viz obr. 9.34.

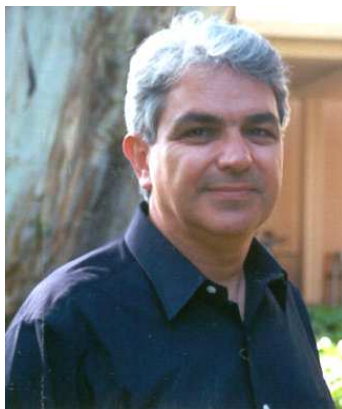


**Obr. 9.34:** Otevřené struny musí být vždy oběma koci ukotveny na D-bránách, v hyperprostoru (prostoru světů) se mohou volně pohybovat pouze uzavřené struny, jako jsou např. gravitony.

Historicky prvním modelem bránového světa byl model Arkani-Hamed, Dimopoulos a Dvaliho, kteří studovali  $(4 + d)$ -dimenzionální plochý prostor světů, v němž  $d$  dimenzí má toroidální geometrii. Pozoruhodný pokrok přinesly práce Randallové a Sundruma. V nich byl nalezen zakřivený prostor světů tvořený řezem anti-de Sitterova (AdS) prostoročasu.



**Nima Arkani-Hamed (1972)**



**Savas Dimopoulos (1952)**



**Georgi (Gia) Dvali (1964)**

5-dimenzionální akce, s níž budeme dále pracovat, je dána analogicky jako v 4-dimenzionální gravitaci výrazem

$$S = - \int d^5 x \sqrt{-g^{(5)}} \left( \frac{R}{2\kappa_5^2} + \Lambda_5 \right) + S_{\text{pole}} , \quad (9.356)$$

v němž  $\kappa_5$  je 5-dimenzionální gravitační vazebná konstanta,  $\Lambda_5$  je kosmologická konstanta v prostoru světů a  $S_{\text{pole}}$  představuje akci veškerých dalších polí. Gravitační vazebnou konstantu lze v jednotkách  $\hbar = c = 1$  vyjádřit i pomocí fundamentální (tj. definované v prostoru světů) Planckovy škály  $M_5$  jako

$$\kappa_5^2 = \frac{8\pi}{M_5^3} . \quad (9.357)$$

Einsteinovy rovnice v prostoru světů, které získáme variováním akce (9.356), jsou

$$G_{ab} \equiv R_{ab} - \frac{1}{2} g_{ab} R = -\kappa_5^2 T_{ab} + g_{ab} \Lambda_5 , \quad (9.358)$$

kde tenzor energie-impulzu je definován prostřednictvím variace akce polí vzhledem k metrice stejně jako v klasickém případě.

Přijměme zjednodušující podmínku, že všechna hmota je soustředěna na bráně. Předpokládejme dále, že 5-dimenzionální metrika v prostoru světů má reflexní symetrii v extra dimenzi,  $Z \rightarrow -Z$ , a metrika bránového světa disponuje časovou reflexí a prostorovou paritou, tj.  $t \rightarrow -t$  a  $x^I \rightarrow -x^I$ , ( $I = 1, 2, 3$ ).

Protože prostor světů by neměl záviset na souřadnicích na bráně, lze jeho metriku zapsat ve tvaru

$$ds^2 = e^{2A(t,z)} [dt^2 - D^2(t, z) d(x^I)^2] - C^2(t, z) dz^2 . \quad (9.359)$$

Pokud navíc požadujeme, aby 5-dimenzionální metrika byla statická a splňovala Poincarého ( $SO(\mathbf{3}, \mathbf{1})$ ) symetrii, můžeme ji psát ve tvaru

$$ds^2 = e^{2A(Z)} \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu - dZ^2 . \quad (9.360)$$

Studujeme-li expandující bránu, lze 5-dimenzionální metriku psát jako

$$ds^2 = a^2 b^2 (dt^2 - dZ^2) - a^2 \left( \frac{dr^2}{1 - Kr^2} + r^2 d\vartheta^2 + r^2 \sin^2 \vartheta d\varphi^2 \right), \quad (9.361)$$

s obvyklými hodnotami  $K = \pm 1$  nebo  $K = 0$  v závislosti na tom, zda je 3-brána (naš prostor) topologicky 3-sféra, hyperbolický prostor, nebo zda je plochý. Metrika (9.361) je konzistentní s homogenitou a izotropií na bráně lokalizované v  $Z = 0$ . Funkce  $a$  a  $b$  závisí pouze na souřadnicích  $t$  a  $Z$ .

### Kovariantní popis gravitace bránových světů

Uvažujme (3+1)-dimenzionální nadplochu v 5-rozměrném prostoru světů. Označme  $n$  její normálové vektorové pole. Snadno se ukáže, že projekční tenzor, daný jako

$$h = g - n \otimes n , \quad (9.362)$$

je metrikou na zadané nadploše. Připomeňme si definici vnější křivosti

$$K_{ab} = h_a^c h_b^d \nabla_c n_d . \quad (9.363)$$

V diferenciální geometrii se odvozuje vztah mezi křivostí variety a křivostí do ní vložené nadplochy. Tento vztah je znám jako Gaussova rovnice a je dán takto

$$R_{abcd}^{(4)} = h_a^j h_b^k h_c^l h_d^m R_{jklm} - 2K_{a[c} K_{d]b} . \quad (9.364)$$

V Gaussově rovnici (9.364) je 4-dimenzionální Riemannův tenzor konstruován z metriky  $h_{ab}$  stejným způsobem, jako je Riemannův tenzor prostoru světů konstruován z metriky  $g_{ab}$ .





Delfino Codazzi (1824 – 1873)

Dalším důležitým vztahem je Codazziho rovnice, která vztahuje čtyřdivergenci vnější křivosti s Ricciho tenzorem prostoru světů

$$\nabla_b^{(4)} K^b_a - \nabla_a^{(4)} K = n^c h^b_a R_{bc} . \quad (9.365)$$

Lze ukázat, že pokud je na zadané nadploše lokalizován tenzor energie-impulzu  $T_{ab}$  a prostor světů má reflexní symetrii  $Z \rightarrow -Z$ , pak je vnější křivost vyjádřena jako

$$K_{ab} = \kappa^2 \left[ -T_{ab} + \frac{1}{3}(T - \sigma)h_{ab} \right] . \quad (9.366)$$

Definujme skok funkce  $[f]$  předpisem

$$[f] = \lim_{\varepsilon \rightarrow +0} \left[ f(Z + \varepsilon) - f(Z - \varepsilon) \right] . \quad (9.367)$$

Z rovnice (9.366) vyplývá, že skok vnější křivosti je

$$|K_{ab}| = -\kappa^2 \left( T_{ab} - \frac{1}{3}h_{ab}T \right) . \quad (9.368)$$

Rovnice (9.368) tvoří navazovací podmínky na zadané nadploše.

Tenzor energie-impulzu  $T_{ab} = \tau_{ab} - \sigma - h_{ab}$  jsme rozložili na část od povídající klasickému tenzoru energie-impulzu  $\tau_{ab}$  a část, která odpovídá

tenzi brány  $\sigma$ . Využitím ( 9.364 ), ( 9.365 ), ( 9.368 ) a 5-dimenzionální prostorupodobné varianty tzv. elektrické části Weylova tenzoru

$E_{ab} = C_{acbd}n^c n^d$  pak získáme 4-dimenzionální Einsteinovy gravitační rovnice

$$G_{ab}^{(4)} = 8\pi G\tau_{ab} - \Lambda_4 h_{ab} + \kappa_5^4 \pi_{ab} - E_{ab}, \quad (9.369)$$

kde  $\pi_{ab}$  je tenzor definovaný jako

$$\pi_{ab} = \frac{1}{12} b\tau\tau_{ab} - \frac{1}{4}\tau_{ac}\tau_b^c + \frac{1}{8}h_{ab}\tau_{cd}\tau^{cd} - \frac{1}{24}\tau^2 h_{ab}. \quad (9.370)$$

Mezi tenzí brány, Newtonovou gravitační konstantou  $G$ , efektivní kosmologickou konstantou bránového světa  $\Lambda_4$  a fundamentální kosmologickou konstantou v prostoru světů  $\Lambda_4$  platí vztahy

$$8\pi G = \frac{\kappa_5^4}{6} \sigma, \quad (9.371)$$

$$\Lambda_4 = \frac{\kappa_5^2}{2} \left( \Lambda_5 + \frac{\kappa_5^4}{6} \sigma^2 \right).$$

V teorii bránových světů se tedy Einsteinovy rovnice ( 9.369 ) liší od své verze známé z klasické relativistické kosmologie, a to o dodatečné zdrojové členy. Je to tenzor  $\pi_{ab}$ , kvadratický v tenzoru energie-impulzu a reprezentující korekce při vysokých energiích. Gravitační vliv prostoru světů na bránu je popsán elektrickým Weylovovým tenzorem, který vystupuje v roli efektivního tenzoru energie-impulzu. Bianchiho identity a zákony zachování implikují diferenciální identitu

$$\kappa_5^4 \nabla^a \pi_{ab} = \nabla^a E_{ab}, \quad (9.372)$$

která platí na bráně. Odvozené Einsteinovy rovnice ( 9.369 ) jsou obecné a platí pro libovolnou nadplochu bez předpokladu speciálních symetrií.

## Randallové-Sundrumův statický bránový svět typu II



**Lisa Randall (1962)**



**Raman Sundrum (1963)**

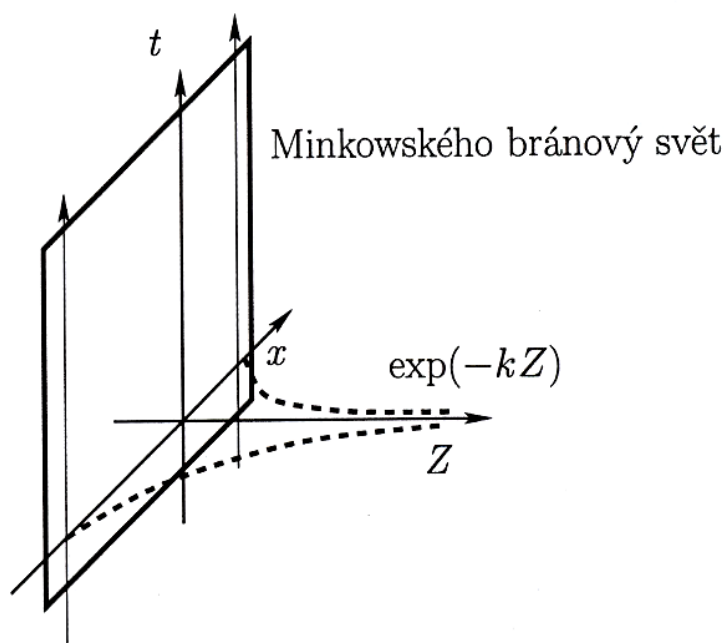
Nyní se budeme zabývat případem bránového světa, který byl poprvé publikován v pracích Randallové a Sundruma. Jedná se o vložení Minkowského bránového světa, popsaného metrikou ( 9.360 ), do 5-dimenzionálního AdS, viz obr. 9.35.

Budeme předpokládat, že prostor světů je vyplněný pouze vakuovou negativní energií, tj.  $\Lambda_5 < 0$ . Fyzikálním zdrojem metriky je bránový svět umístěný v  $Z = 0$ , popsaný bránovou tenzí  $\sigma$ . Tento model je obvykle nazýván Randallové-Sundrumův bránový svět typu II. Einsteinovy 5-dimenzionální rovnice lze odvodit z akce, která je v tomto jednoduchém případě součtem Einsteinovy-Hilbertovy akce a bránové akce

$$S = S_{\text{EH}} + S_{\text{Brána}} = - \int d^5 x \sqrt{-g^{(5)}} \left( \frac{R}{2\kappa_5^2} + \Lambda_5 \right) + \int d^4 x \sqrt{-g^{(4)}} (-\sigma) . \quad (9.373)$$

Einsteinovy rovnice se redukují na soustavu dvou rovnic

$$3A'' = \kappa_5^2 \sigma \delta(Z) \quad , \quad 6(A')^2 = -\kappa_5^2 \Lambda_5 . \quad (9.374)$$



**Obr. 9.35 - Vnoření Minkowského bránového světa do 5-dimenzionálního AdS v Poincarého souřadnicích.**

Vyloučíme-li exponenciálně rostoucí řešení, je výsledná metrika dána formulí

$$ds^2 = e^{-2k|Z|} \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu - dZ^2, \quad (9.375)$$

kde konstanta

$$k = \sqrt{-\frac{\kappa_5^2}{6} \Lambda_5}. \quad (9.376)$$

Integrací druhé z rovnic ( 9.374 ) podle  $Z$  od  $-\varepsilon$  do  $\varepsilon$  a využitím reflexní symetrie obdržíme vztah

$$\Lambda_5 = -\frac{\kappa_5^2}{6} \sigma^2. \quad (9.377)$$

Získané řešení ( 9.375 ) je singulární pro  $Z = \pm\infty$ .

Souřadnicová transformace  $\exp\{-kZ\} = y$  a přeškálování  $\bar{x}^\mu = kx^\mu$

převádí ( 9.375 ) do tvaru

$$ds^2 = k^{-2} \left( y^2 \eta_{\mu\nu} d\bar{x}^\mu d\bar{x}^\nu - \frac{dy^2}{y^2} \right). \quad (9.378)$$

Je zajímavé, že singularita v  $y = 0$  může být považována za horizont 3-brány, který má nulový poloměr. Tenzor energie-impulzu má tvar

$$T_{\text{II}b}^a = \frac{6k}{\kappa_5^2} \delta(Z) \delta_\nu^\mu \delta_\mu^a \delta_b^\nu, \quad (9.379)$$

což přesně odpovídá skutečnosti, že hmota je s kladnou konstantní hustotou lokalizovaná na bráně. V tomto případě jsou metrické fluktuační v extra směru nulové, tj.  $\delta g^{ZZ} = 0$ , a tenzor energie-impulzu lze odvodit z rovnice

$$T_{\text{Brána}}^{ab} = \frac{2}{\sqrt{-g^{(5)}}} \frac{\delta \left( \sigma \sqrt{-g^{(5)}} \right)}{\delta g_{ab}} \Bigg|_{\delta g^{ZZ}=0} \delta(Z). \quad (9.380)$$

5-dimenzionální akce příslušející bránové tenzi je dána rovnicí

$$S_{\text{II}} = \frac{6k}{\kappa_5^2} \int d^4x \int_{-\infty}^{\infty} dZ \sqrt{-g^{(5)}} \delta(Z). \quad (9.381)$$

Všimněme si, že uvedené navazovací podmínky jsou podmínkami jemného ladění, neboť celá hmotová akce ( 9.381 ) je určena pouze charakteristikami prostoru světů - fundamentální (definovanou v prostoru světů) Planckovou škálou  $M_5$  a kosmologickou konstantou v prostoru světů  $A_5$ . Jak vyplývá z ( 9.381 ) a ( 9.377 ), efektivní kosmologická konstanta 3-brány je nulová.



Erich Justus Kretschmann (1887 – 1973)

Oproti souřadnicovým singularitám v  $Z = \pm\infty$  existuje fyzikální singularita v  $Z = 0$ , což odpovídá hmotě, kterou jsme přidali na bránu. To je patrné z Kretschmannova skaláru, daného výrazem

$$R_{abcd}R^{abcd} = 8k^2 \left\{ 3k^2 + [k - 2\delta(Z)]^2 \right\}. \quad (9.382)$$

### Randallové-Sundrumův bránový svět typu I

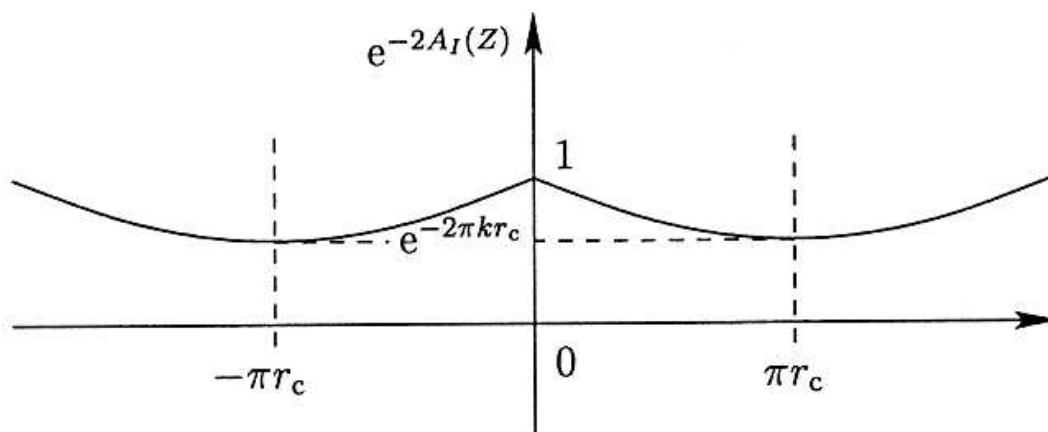
Na rozdíl od Randallové-Sundrumova modelu typu II, kde  $Z$  leželo v intervalu  $-\infty \leq Z \leq \infty$ , v Randallové-Sundrumově bránovém světě I je extra souřadnice  $Z$  kompaktní. Tedy kromě reflexní symetrie  $Z \rightarrow -Z$  navíc předpokládáme i její periodičnost, viz obr. 9.36. Nyní přidáme hmotu nejenom na bránu v počátku  $Z = 0$ , ale i na druhou bránu, která je umístěna v  $Z = \pi r_c$ , kde  $r_c$  je poloměr kompaktifikace. Ke vzorci (9.381) tak analogicky dostáváme

$$S_I = S_I|_{Z=0} + S_I|_{Z=\pi r_c} = \frac{6k}{K_5^2} \int d^4x \int_{-\pi r_c}^{\pi r_c} dZ \sqrt{-g^{(5)}} [\delta(Z) - \delta(Z - \pi r_c)]. \quad (9.383)$$

Odpovídající tenzor energie-hybnosti nabývá tvaru

$$T_{Ib}^a = \frac{6k}{K_5^2} [\delta(Z) - \delta(Z - \pi r_c)] \delta_\nu^\mu \delta_\mu^a \delta_b^\nu. \quad (9.384)$$

Zatímco brána v  $Z = 0$  má kladnou hustotu hmoty, brána v  $Z = \pi r_c$  ji má zápornou.



Obr. 9.36: Metrická funkce  $\exp\{-2A_I(Z)\}$  pro Randallové-Sundrumův kompakťovaný model typu I.

Metrika Randallové-Sundrumova bránového světa je

$$ds^2 = e^{-2kr_c\varphi} \eta_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu - r_c^2 d\varphi^2, \quad 0 \leq \varphi \leq \pi. \quad (9.385)$$

Kretschmannův skalár je dán výrazem

$$R_{abcd} R^{abcd} = 8k^2 \left\{ 3k^2 + \left[ k - 2(\delta(Z) - \delta(Z - \pi r_c)) \right]^2 \right\}, \quad (9.386)$$

Bránová akce (9.383) je určena pouze fundamentálním měřítkem a kosmologickou konstantou v prostoru světů. Dále je jemné nastavení manifestováno skutečností, že hmotové akce obou brán mají stejné velikosti, ale opačné znaménko

$$\frac{S_I|_{Z=0}}{V_4} = -\frac{S_I|_{Z=\pi r_c}}{V_4} = \frac{M_5^3}{8\pi}, \quad (9.387)$$

kde  $V_4$  je (formální) objem každé brány,  $V_4 = \int d^4x$ , a gravitační

vazebná konstanta je vyjádřena pomocí fundamentální škály energie  $M_5$ . To je také důvodem, proč má brána v počátku  $Z = 0$  pozitivní tenzi, zatímco brána v  $Z = \pi r_c$  má negativní tenzi. Efektivní kosmologická konstanta vymizí na obou bránách.

## Newtonovská gravitace z Randallové-Sundrumova modelu typu II

Standardním postupem při odvození Newtonova gravitačního zákona je uvažovat linearizovanou teorii gravitace. V tomto odstavci budeme postupovat analogicky, tj. budeme se zabývat malými fluktuacemi na pozadí bránové metriky vzniklé přidáním bodové hmoty na bránu. Předpokládáme-li malé perturbace  $h_{\mu\nu}$ , omezené na bránový svět, můžeme psát

$$ds^2 = \left[ e^{-2kr_c\phi} \eta_{\mu\nu} - h_{\mu\nu}(x, Z) \right] dx^\mu dx^\nu - dZ^2 . \quad (9.388)$$

Využijme časté kalibrace, kdy je stopa a divergence tenzoru  $h_{\mu\nu}$  nulová, tj.  $h^\mu{}_\mu = 0$  a  $\partial^\mu h_{\mu\nu} = 0$ . Variace Einsteinových rovnic

$$\delta G_{\mu\nu} = \delta \left( -\kappa_5^2 T_{\mu\nu} + \Lambda g_{\mu\nu} \right) \quad (9.389)$$

v této kalibraci nabývá tvaru

$$\left( e^{2k|Z|} \partial^\rho \partial_\rho - \partial_Z^2 \right) h_{\mu\nu} - 4k \delta(Z) h_{\mu\nu} + 4k^2 h_{\mu\nu} = 0 . \quad (9.390)$$

Po separaci proměnných  $h_{\mu\nu}(x^\rho, Z) = \psi(Z) \Phi(x^\rho)$  obdržíme rovnice

$$\partial^\mu \partial_\mu \Phi(x^\rho) = -m^2 \Phi(x^\rho) \quad , \quad m^2 \geq 0 , \quad (9.391)$$

$$\left[ -\frac{m^2}{2} e^{2k|Z|} - \frac{1}{2} \partial_Z^2 - 2k \delta(Z) + 2k^2 \right] \psi(Z) = 0 . \quad (9.392)$$

Pokud se budeme zabývat statickým rotačně symetrickým případem nulového módu, tj.  $m = 0$ , vidíme, že  $\psi$  splňuje Laplaceovu rovnici a je



dáno

$$\psi(r) = -\frac{B}{r} \quad (9.393)$$

kde integrační konstanta  $B$  je rovna  $G m_1 m_2$ , abychom obdrželi správný výraz pro newtonovskou gravitační sílu mezi dvěma částicemi.

Pro funkci  $\psi(Z)$  získáme při  $m = 0$  řešení

$$\psi(Z) = \psi_0 e^{-2k|Z|}, \quad (9.394)$$

kde  $\psi$  je integrační konstanta.

Na závěr se stručně zmiňme o nenulových módech, kdy  $m \neq 0$  (tzv. Kaluzovy-Kleinovy módy). Tehdy obdržíme korekci řádu  $r^{-3}$  k Newtonově gravitačnímu zákonu.

### **Kalibrační hierarchie z Randallové-Sundrumova modelu typu I**

Pojednání o Randallové-Sundrumově bránovém světě typu I by nebylo úplné, kdybychom se nezmínili o tzv. problému kalibrační hierarchie, který je znám ze standardního modelu elementárních částic vycházejícího z principu spontánního narušení symetrie.

Například u elektroslabých interakcí proběhlo toto narušení při energiích kolem energetické škály  $M_E \sim 10^3$  GeV. Naproti tomu efekty strunové teorie jsou zcela signifikantní při škálách energie okolo Planckovy energie, což je přibližně  $M_P \sim 10^{19}$  GeV. Dostáváme o 16 řádů vyšší hodnotu, než je energie při spontánním narušení symetrie.

Standardní částicový model doposud ztroskotával při objasnění takové energetické diskrepance. Na ilustrativním příkladu se podívejme, jak lze problém hierarchie vysvětlit v rámci Randallové-Sundrumova modelu typu I.

Předpokládejme že žijeme na bráně lokalizované v  $Z = \pi r_c$  a provedme dimenzionální redukci Einsteinovy gravitace na 3-bráně z 5-rozměrné gravitace na 4-rozměrnou gravitaci v  $Z = \pi r_c$ . Píšeme-li

$$ds^2 = g_{ab}^{(5)} dx^a dx^b = e^{-2k|Z|} g_{\mu\nu} dx^\mu dx^\nu - dZ^2 \quad (9.395)$$

postupně dostáváme

$$\begin{aligned} S_5 &= -\frac{M_5^3}{16\pi} \int d^5 x \sqrt{|g^{(5)}|} R = \\ &= -\frac{M_5^3}{16\pi} \int d^4 x \sqrt{|\det g_{\mu\nu}|} \int_{-\pi r_c}^{\pi r_c} dZ e^{-2k|Z|} (R^{(4)} + \dots) = \\ &= -\frac{M_5^3}{16\pi} (1 - e^{-2k\pi r_c}) \int d^4 x \sqrt{|\det g_{\mu\nu}|} (R^{(4)} + \dots) = \\ &= -\frac{M_P^3}{16\pi} \int d^4 x \sqrt{|\det g_{\mu\nu}|} (R^{(4)} + \dots) = S_4 + \dots \end{aligned} \quad (9.396)$$

Při odvození ( 9.396 ) jsme použili  $g^{(5)} = \exp(-8k|Z|) \det g_{\mu\nu}$  a

$$R = e^{2k|Z|} g^{\mu\nu} R_{\mu\nu} + \dots = e^{2k|Z|} R^{(4)} + \dots \quad (9.397)$$

Porovnáním získáváme vztah

$$M_P = \frac{1}{k} (1 - e^{-2k\pi r_c}) M_5^3 . \quad (9.398)$$

Rovnice ( 9.398 ) nám dává velmi důležitý výsledek, podle něhož  $M_P$  závisí pouze slabě na  $r_c$  v limitě, když je součin  $kr_c$  velký.

Obdobně jako rovnici ( 9.398 ) lze odvodit i další důležitý vztah mezi hmotovým parametrem  $m_0$ , definovaným ve fundamentálním 5-dimenzionálním prostoru světů, a odpovídající fyzikální hmotou  $m$ , měřenou pozorovatelem na 3-bráně,

$$m = e^{-k\pi r_c} m_0 . \quad (9.399)$$

Ze vztahu ( 9.399 ) vidíme, že pokud je hodnota  $m_0$  blízko Planckovy škály, potřebujeme  $kr_c \approx 50$ , aby jí z hlediska pozorovatele na bráně

odpovídala fyzikální hmota  $m$  s korektní hodnotou elektroslabé škály  $M_E$ . Odtud vyplývá, že nastavením  $r_c$  na dostatečnou hodnotu lze obdržet velmi vysokou hierarchii mezi elektroslabou a Planckovou škálou. Ačkoli exponenciála ve vzorci ( 9.398 ) má velmi malý vliv na určení Planckovy škály energie, hraje podstatnou roli v určení viditelných hmotných škál ( 9.399 ).

Je zapotřebí důrazně upozornit, že předložené vysvětlení není skutečným řešením, neboť vyžaduje splnění podmínky jemného ladění. Nicméně se problém hierarchie stává mnohem jasnějším.

### Friedmannův bránový svět

Zabývejme se situací, kdy je bránový svět představován prostoročasem typu FRW a je vložen do AdS. Bránový svět FRW je nejpřirozenější volbou, která odráží skutečnost, že náš vesmír expanduje. Protože o kosmologii FRW bylo pojednáno v předchozích kapitolách, zmíníme se především o odlišnostech, kterými se vyznačuje bránový svět FRW od standardní kosmologie FRW.

Předpokládejme metriku prostoru světů ve tvaru ( 9.361 ). Ačkoli pro jednoduchost uvažujeme ploché prostorové řezy (tj. parametr  $K$  v ( 9.361 ) je 0), lze výsledky přímočaře zobecnit i na případy  $K = \pm 1$ .

Rozložíme-li celkovou hustotu energie  $\rho$  na část pocházející z hmoty  $\rho_m$  a na bránovou tenzi a zavedeme-li kosmický čas  $ab dt = d\tau$ , po dosazení do ( 9.369 ) a úpravě obdržíme

$$H^2 = \frac{8\pi G}{3} \rho_m \left( 1 + \frac{\rho_m}{2\sigma} \right) + \frac{\Lambda_4}{3} + \frac{\mu}{a^4}, \quad (9.400)$$

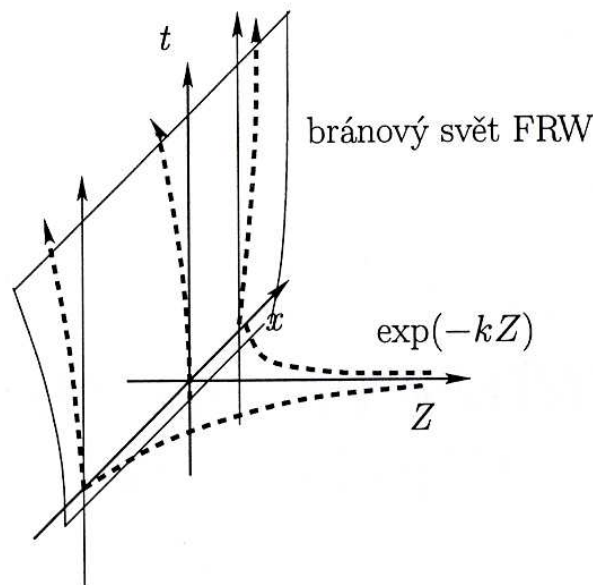
$$\frac{dH}{d\tau} = -4\pi G (\rho_m + p_m) \left( 1 + \frac{\rho_m}{\sigma} \right),$$

kde  $H$  je Hubbleova konstanta  $H = a^{-1}(da/d\tau)$ . Vztahy ( 9.400 ) jsou bránové verze Friedmannovy a Raychaudhuriho rovnice. Veličina  $\mu$  v ( 9.400 ) je integrační konstanta a člen  $\mu / a^4$  popisuje temné záření. Vlastnosti tohoto členu lze vyvodit z detailní analýzy rovnic v prostoru světů.

Nejdůležitější změna ve Friedmannově rovnici spočívá v přítomnosti členu úměrného  $\rho_m^2$ , pocházejícího z tenzoru  $\pi_{ab}$ . To znamená, že v režimu, kdy je hustota hmoty podstatně vyšší než bránová tenze,  $\rho_m \gg \sigma$ , je Hubbleova konstanta úměrná  $\rho_m$ , a nikoli  $\sqrt{\rho_m}$ , jak je tomu v klasické kosmologii FRW. Míra expanze je ve scénáři bránových světů vyšší. Pouze pokud je hustotaenergie hmoty zanedbatelná vůči bránové tenzi, dostáváme obvyklou úměru  $H \sim \sqrt{\rho_m}$ . Tato důležitá modifikace Friedmannovy rovnice není omezena jen na Randallové-Sundrumův bránový svět, ale platí v širší třídě řešení. Navazovací rovnice ( 9.368 ) pak reprodukuje standardní zákon zachování

$$\dot{\rho} + 3\frac{\dot{a}}{a}(\rho + p) = 0 . \quad ( 9.401 )$$

Na závěr pojednání o kosmologii FRW shrňme základní myšlenku bránového světa FRW. Podle klasické kosmologie FRW náš vesmír expanduje do "ničeho". Pokud je obraz bránových světů správný, je z fundamentálního hlediska naprosto přijatelné tvrzení, že náš vesmír expanduje do AdS prostoru světů. Bránový svět FRW je znázorněn na obr. 9.37.



Obr. 9.37 - Vložení bránového světa FRW do 5-dimenzionálního AdS v Poincarého souřadnicích.

## Ekpyrotický model vesmíru

Ekpyrotický model navrhli v roce 2001 Neil Turok, Paul Steinhardt, Burt Ovrut a Justin Khoury jako alternativu k inflačnímu modelu. Název znamená „z ohně pocházející“.



**Neil Geoffrey Turok (1958)**



**Paul J. Steinhardt (1954)**



**Burt Ovrut (1942)**

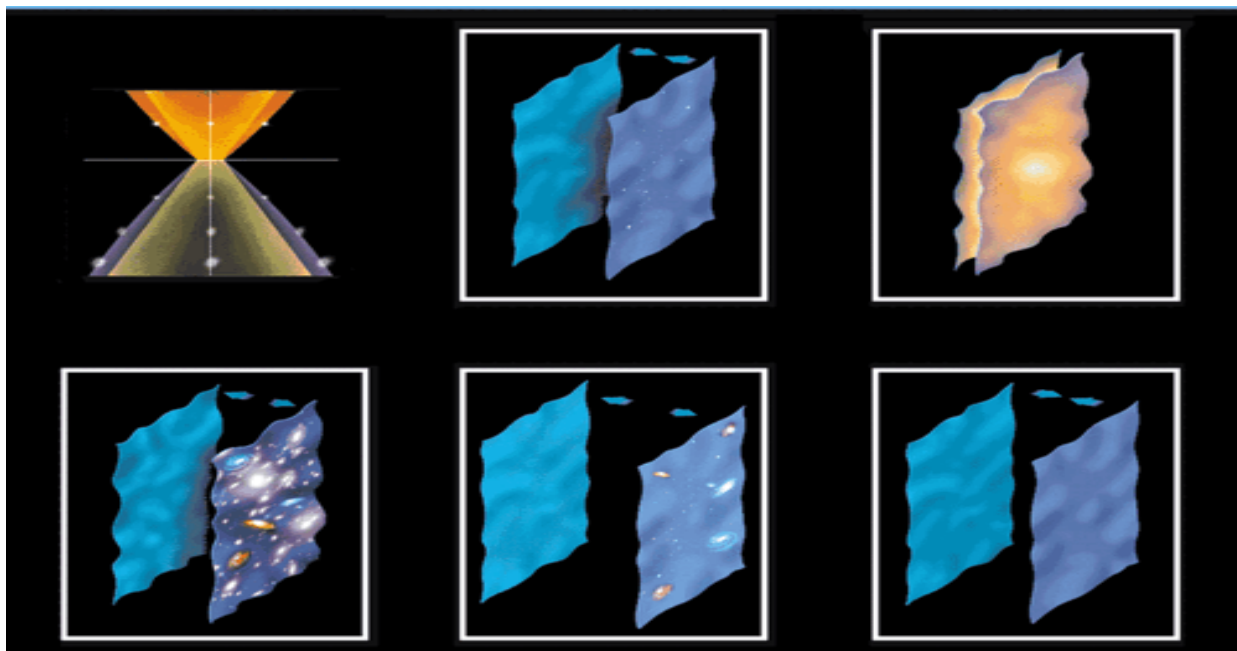


**Justin Khoury (1976)**

Základem modelu je tvrzení, že Vesmír představuje méněrozměrný objekt ve vícerozměrném světě (bránu). Počátek Vesmíru je ztotožněn se setkáním dvou brán v místě největší kvantové fluktuace. Základní přírodní konstanty (gravitační, Planckova, rychlost světla) mohou být v různých bránách různé. Po dotyku dojde v „naší“ bráně k prudké expanzi a následné tvorbě galaxií. Pokračující expanze zředí látku v bráně a gravitační síla působící i v dimenzi kolmé na náš Vesmír přitáhne opět druhou bránu a dojde k dalšímu dotyku. Výsledkem je jednoduchý model dvou oscilujících brán, který předpovídá, že při

doteku brán vzniknou gravitační vlny, jejichž amplituda roste směrem ke krátkovlnné části spektra.

Obr. 9.38



## Kvantování gravitace

Poruchová metoda nám dává odpověď na jakoukoli fyzikální otázku v podobě nekonečné řady. Protože prvních pár členů mívá tu vlastnost, že každý další je mnohem menší než předchozí člen, lze získat velmi dobrý odhad výsledku sečtením jen několika prvních sčítanců. Zatímco u kalibračních teorií pole tento postup dobře funguje, u gravitace před objevem teorie strun vedl tento postup vždy k nesmyslným nekonečným hodnotám počítaných veličin a parametrů. V teorii strun odpovídá první člen poruchového rozvoje klasické OTR bez zahrnutí kvantových efektů. O druhém členu, který při všech nestrunových pokusech o kvantování gravitace již divergoval, lze v teorii strun snadno dokázat, že je rovněž konečný. Teprve v roce 2001 se podařilo rigorózně dokázat, že rovněž třetí člen dává konečné výsledky. Tento neobyčejně obtížný důkaz je dílem mnohaletého heroického úsilí Erica D'Hokera a Duong H. Phonga. Tito autoři v současné době pracují na důkazu, že rovněž i čtvrtý člen poruchového rozvoje kvantové gravitace je konečný, a tento důkaz je již téměř před dokončením.



**Eric D'Hoker (1955)**



**Duong Hong Phong (1951)**

Před nedávnou dobou se podařil veliký pokrok v tomto směru Stanley mandelstamovi a především Nathanu Berkovitsovi, který formuloval několik předpokladů strunové teorie, při jejichž splnění lze dokázat, že všechny členy poruchového rozvoje kvantové gravitace jsou v teorii strun konečné. Otevřeným problémem zatím zůstává, nakolik snadné je tyto dodatečné předpoklady splnit. Dosud také není známo, zda i v případě konečnosti všech členů poruchového rozvoje nebude nakonec poruchová řada jako celek přesto divergovat. Podobný problém však zůstává nedořešen i u klasických kalibračních teorií, jako je třeba QED. Přestože se v těchto teoriích z výpočetních důvodů obvykle omezujeme nejvýše na 3 členy poruchového rozvoje, jsou získané výsledky ve výborné shodě s experimentem. Není proto důvodu předpokládat něco jiného též u kvantové teorie gravitačního pole.



**Stanley Mandelstam (1928)**



**Nathan Jacob Berkovits (1961)**

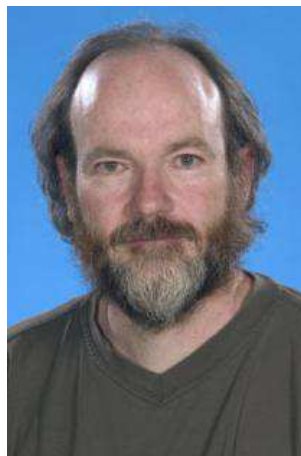
## Supersymetrické sjednocení a ještě dál

Při pohledu na graf vazebních konstant vyvstávají okamžitě dvě otázky: Setkají se všechny tři konstanty při jedné jediné energii? A co se bude dít při vyšších energiích? Pokud by elektrický náboj dále rostl, znamená to, že v počátečních fázích Velkého třesku měly částice enormní elektrický náboj, snad dokonce nekonečný. To by ale vedlo k mnoha problémům. Již v roce 2006 publikovali Sean Robinson a Frank Wilczek možné řešení. Pokud se do výpočtů zahrne kvantová gravitace, pak při extrémně vysokých energiích (nad  $10^{18}$  GeV) začnou náboje všech tří interakcí prudce klesat, a proto budou mít v nejranějších fázích vesmíru všechny tři kvantové interakce velmi malé vazební konstanty.

Předložené výpočty byly mnoha vědci kritizovány a byly v nich nalezeny zásadní chyby. Na sklonku roku 2010 byly publikovány dva nové články na obdobné téma. První shrnuje výpočty Davida Tomse z Univerzity v Newcastlu a druhý výpočty čínsko-japonské skupiny vědců (Hong-Jian He, Xu-Feng Wang, Zhong-Zhi Xianyu). V obou článcích je opět prováděn výpočet závislosti vazebních konstant na energii. V úvahu je brán vliv kvantové gravitace. Oba články prokazují, že základní myšlenka Robinsona a Wilczeka byla správná a korektní výpočty skutečně vedou na prudký pokles vazebních konstant nad Planckovou energií  $10^{19}$  GeV. Všechny tři vazební konstanty (náboje) se stanou pro vyšší hodnoty energie nulové. V raném vesmíru by podle těchto výpočtů elektron o svůj náboj přišel. Pokud se výpočty potvrdí, bude to znamenat výrazný posun v řešení mozaiky jednotné teorie všech čtyř interakcí.

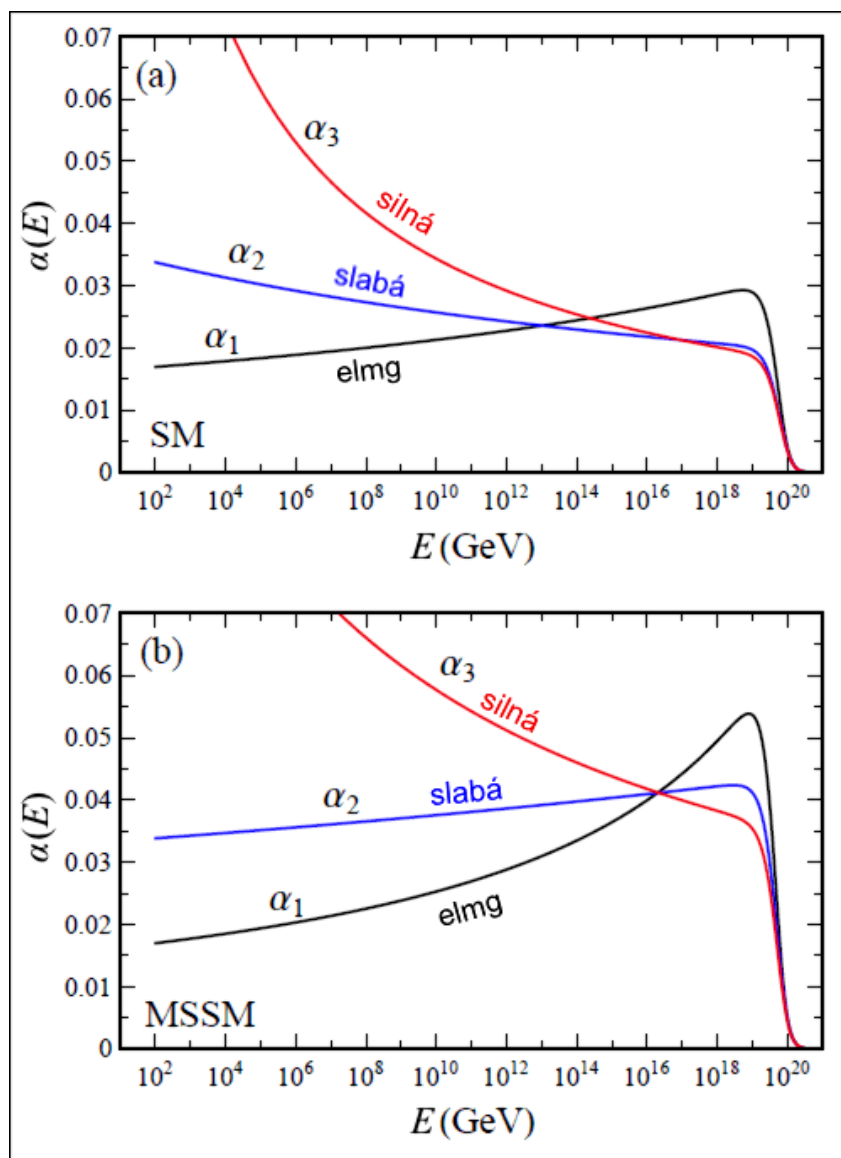


Sean Patrick Robinson (1977)



David John Toms (1966)





Obr. 9.39: Výsledky výpočtů čínsko-japonské skupiny. Nad Planckovou energií hodnoty všech tří vazebních konstant prudce klesají. Stínění elektrického náboje (jeho růst s energií) se změní v antistínění. Za to je zodpovědná celá řada exotických Feynmanových diagramů, které nejsou běžné v nízkoenergetické limitě. Na horním obrázku je výpočet v rámci standardního modelu (SM). Pokud se do výpočtu zahrne i supersymetrie (MSSM – Minimální supersymetrický model, dolní graf)), protnou se dokonce všechny tři průběhy vazebních konstant v jediném bodě.



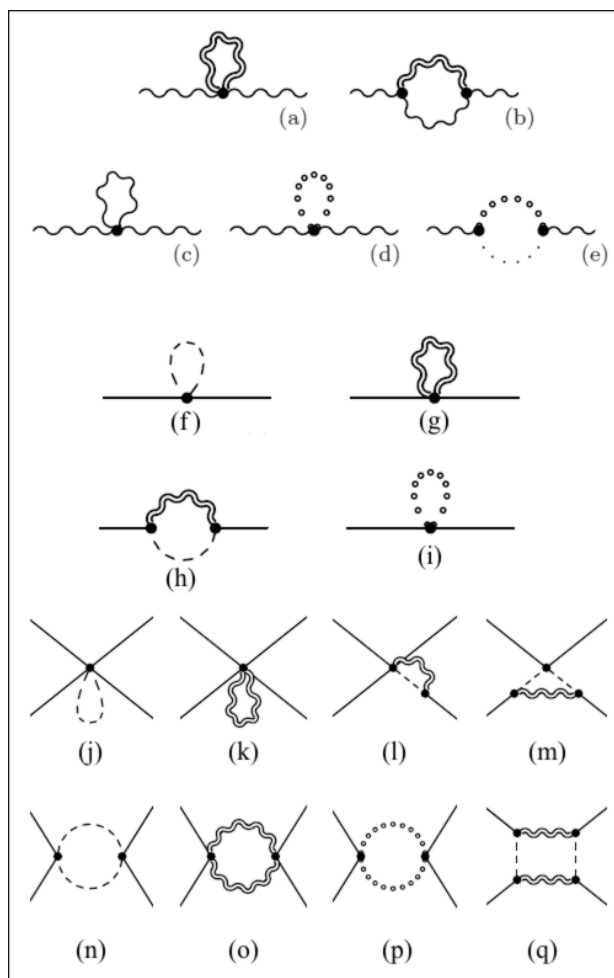
Hong-Jian He (1979)



Zhong-Zhi Xianyu (1988)



Xu-Feng Wang (1988)



Obr. 9.40: Exotické Feynmanovy diagramy, které se uplatňují při vysokých energiích. Vlnkou jsou značeny fotony, dvojitou vlnkou gravitony, plnou čarou skalární pole, čárkovaně fluktuace skalárního pole, kolečky pole gravitonových duchů a tečkované pole fotonových duchů (pole duchů se do teorie přidávají proto, aby platily určité symetrie, nejde však pravděpodobně o reálná fyzikální pole).

## Konifold – rozpárání prostoru

V roce 1987 učinili Sing-Tung Yau se svým studentem Tian Gangem důležité matematické pozorování, že C-Y variety lze vzájemně transformovat mezi jednotlivými topologicky odlišnými formami protržením a opětovným sešitím vzniklého otvoru dle jistého vzorce, kterému matematici říkají **flop**.



Tian Gang (1958)

Roku 1992 dokázali fyzici Brian Greene, Paul Aspinwall a Edward Witten, spolu s matematiky Victorem Batyrevem a Davidem Morrisonem, s pomocí rozvinutých metod zrcadlitě symetrie, že prostor C-Y variety se může skutečně rozpárat a opět bezpečně slepit do jiné topologické formy, aniž by to mělo katastrofální důsledky na jeho integritu. Struny obepínající trhlinu v průběhu probíhající transformace dokážou ochránit zbytek vesmíru před katastrofálními účinky trhliny po nezbytně nutnou dobu. Práce těchto autorů ukázala, že když se C-Y varieta trhá, mohou se měnit jednotlivé hmotnosti částic – vibrační módy strun. Zprvu se však zdálo, že fyzikální veličiny, jako je počet rodin částic a druhy částic v každé rodině se touto transformací nezmění. V průběhu vesmírné inflace se pravděpodobně C-Y varieta rozpárala a znovu sešila hned několikrát, jak se postupně měnila energetická bilance vesmíru.



Paul S. Aspinwall (1964)

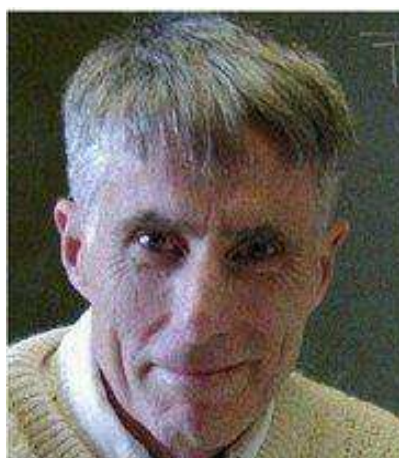


David R. Morrison (1955)



Victor Batyrev (1961)

Pozdější práce Bryana Greena a Davida Morrisona, inspirované pracemi matematiků Herberta Clemense, Roberta Friedmana, Milese Reida, Philipa Candelase, Michaela Greena a Tristana Hübsche však přinesla překvapení. Třírozměrný prostor se může protrhnout a zase spravit také tím, že v něm naroste dvourozměrná sféra, což vede k daleko drastičtější změně topologie, než se do té doby uvažovalo. Tato nová transformace dostala název **konifold**. Tímto způsobem se může C-Y varieta transformovat do zcela odlišného C-Y tvaru. Fyzika vesmíru se tak v ranných fázích po jeho zrodu pravděpodobně velmi bouřlivě měnila, než hustota jeho energie poklesla natolik, že se C-Y varieta přestala trhat a kvantově zamrzla v nějakém konkrétním stabilním tvaru odpovídajícím jednomu z mnoha možných lokálních energetických minim, určujícím veškerou fyziku současného vesmíru.



C. Herbert Clemens (1941)



Robert David Friedman (1956)



Miles Reid (1948)



Philip Candelas (1952)



Tristana Hübsch (1958)

### **Význam české školy teoretické fyziky pro vývoj strunové teorie**

Teorie superstrun je v současné době ve stádiu intenzivního rozvoje. Kromě průkopníků J.Schwarze, M.Greena, E.Wittena, na ní pracuje několik tisíc fyziků (především mladší generace) a řada výzkumných skupin. Z našich fyziků se teorii superstrun velmi aktivně a úspěšně věnují zejména P.Hořava a L.Motl, M. Schnabl, M. Fabinger, J. Klusoň a další.

Matematicky konzistentním formalismem strunové teorie je samozřejmě M-teorie, na jejímž rozvoji se významně podílel právě náš krajan prof. Luboš Motl. Jedná se o grupový uzel  $U(N)$ . Každý prostorový rozměr je definován jedním z devíti párů matic  $N \times N$ , kde  $N$  je počet nula-brán, což je rank kalibrační grupy. Důvod, že M-teorie, objev největšího mozku teoretické fyziky, prof. Edwarda Wittena spolu s naším slavným krajanem, prof. Petrem Hořavou, má o jeden rozměr více než-li teorie superstrun, tkví právě v U-dualitě, protože počet rozměrů je spjat skrz rank grupy s mírou kvantového rozmazání prostoročasu.



Petr Hořava



Luboš Motl



Michal Fabinger



Martin Schnabl

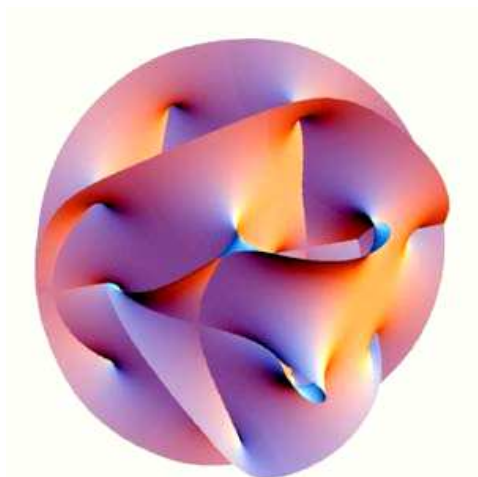


Josef Klusoň

Důsledkem U-duality je rovnoprávnost objektů libovolné prostorové dimenze a rovněž objev dalšího strunového velmistra, prof. Cumruna Vafy, tzv. F-teorie – 12-rozměrné duální teorie, který umožnil konstruovat velké nové třídy neporuchových vakuí superstrun typu IIB. Závěr je takový, že v teorii superstrun existují matematicky konzistentní prostoročasy s libovolnou mírou kvantového rozmazání (označovanou tzv. vazebnou konstantou), přičemž topologický tvar může nabývat jakéhokoli matematicky konzistentního tvaru.

Hodnota vazebné konstanty je exponenciálou skalárního pole, tzv. dilatonu. Toto pole tvoří samotnou strukturu našeho prostoročasu a samozřejmě zásadním způsobem závisí na jeho topologii. Brány nejsou ničím jiným, než uzly uvázanými na tomto skalárním poli. Za těmito pojmy se skrývá mohutný matematický aparát, klasifikující možné kondenzáty dilatonu K-teoretické grupy příbuzné grupě homotopií C-Y variety. Topologie C-Y variety (přesný tvar kompaktifikovaných

rozměrů společně s našimi rozměry) přesně determinuje počet rodin elementárních částic.



**Obr. 9.41: 3-dimenzionální model 11-ti rozměrné C – Y variety**

Dr. Martin Schnabl studuje mechanismus uvázování vakuových uzlů. Např. na uvázání skalárního pole inflatonu se můžeme dívat, jak ukázal před 20 lety prof. Andrei Linde, právě jako na velký třesk, fluktuaci jedné nestabilní U-duální brány (jednoho libovolně rozměrného a libovolně kvantově rozmazaného, jakkoli matematicky konzistentně uvázaného uzlu).



**Ashoke Sen (1956)**

Dr. Schnabl již analyticky dokázal dvě ze tří důležitých hypotéz prof. Ashoke Sena. První domněnka vztahuje potenciál na tachyonovém poli a napětí brány (vazebná konstanta determinující napětí brány,  $(10^{42} \text{ kg})$  visící na jednorozměrné bráně, je exponenciálou skalárního pole).

Tachyonové vakuum Dr. Schnabl definoval pomocí tzv. Bernoulliho čísel, jenž mají úzký vztah k Riemannově zeta funkci, která definuje strukturu prvočísel.



**Daniel Bernoulli (1700 – 1782)**

Platonisticky přemýšlejícího strunaře potěší podobný netriviální vztah mezi atomy čísel a atomy vakuu. Bernoulliho čísla se samozřejmě hojně objevují v topologické teorii strun (teorii strun zaměřující se pouze na topologické stupně volnosti). Rovněž sílí poznání, že Riemannova zeta funkce definuje vlastní hodnoty v maticových formulacích topologické teorie strun. Dodejme, že tachyonovými uzly se ve svých pracích zabývá také náš další krajan Dr. Josef Klusoň.

Druhá doměnka říká, že existuje jedna nestabilní brána vyplňující prostoročas (přesněji algebraickou grupovou vakuovou varietu) a méněrozměrné brány jsou pouhými jejími fluktuacemi, jakými si defekty v jejím kalibračním poli.

Třetí Seanova doměnka, kterou Dr. Schnabl dokázal spolu s Dr. Ianem Ellwoodem říká, že na pravém tachyonovém vakuu nejsou uvázané žádné uzly. V tachyonovém poli tedy neexistují žádné brány s žádnými kalibračními symetriemi. Nejsou-li uvázané žádné uzly, nemáme žádné elementární částice, protože elementární částice jsou reprezentací kalibrační grupy vakuového uzlu.





**Ian T. Ellwood (1977)**

Vakuový uzel je bodem v abstraktní krajině, kde je lokálně nejnižší energie. Uzel je v celku stabilně usazený, protože už existuje v konkrétním topologickém tvaru nějakých 14 miliard let. Pokud by se uzel nalézal v bodě mimo minimum energie, z něhož by spadl řádově v Planckově čase na základní hladinu, tak by se při pádu a jakémkoli následném pohybu v modulární krajině nepředstavitelně divoce převazoval. Důležité je to, že potenciálnímu minimu na tachyonové krajině odpovídá naopak právě divoká kondenzace (uzlování) vakua, to se děje například přiblíží-li se brána k antibráně (opačně orientované bráně) blíže než na planckovskou délku, poté pár brána - antibrána anihiluje. Dochází k topologicky netriviální operaci: rozvázání uzlu. Spolu s tím se odpovídajícím způsobem mění kalibrační symetrie. Pokud je na původním páru brána - antibrána uvázaný nějaký tachyonový uzel, tak se při anihilaci nemůže úplně rozvázat a výsledkem je brána nižší dimenze (podle K-teoretické grupy klasifikující všechny možné náboje brán). Tím se dostáváme ke druhé domněnce.

Kvantově rozmazaný uzel generující prostoročas je holograficky duální k hrdlu černé brány (hrdlo černé díry libovolného rozměru). Strukturu hrdla můžeme studovat prostřednictvím tzv. automorfních forem grupové variety definující celou krajinu. Zbývá už jen dokázat, že partiční funkce černé díry (definovaná pomocí topologické partiční funkce) přesně koresponduje se strukturou prvočísel.

Náš zatím nejmladší strunař Michal Fabinger studuje vliv Casimirova jevu na dynamiku červých děr a vývoj p-brán včetně kosmologických. V posledních letech se rovněž věnuje výzkumu multidimenzionálního Hallova jevu.



Edwin Herbert Hall (1855 – 1938)

## Vakuová degenerace strunové teorie

V teoriích s mnoha dimenzemi vede kompaktifikace vyšších dimenzí k mnoha odlišným řešením. Jen málo z nich se však přibližuje našemu reálnému světu. Některé vlastnosti geometrie vícerozměrného prostoru totiž musí být zafixovány, jinak se geometrie začne samovolně vyvíjet a destabilizuje prostoročas. Buď se objeví smrtonosné singularity, nebo naopak sbalené dimenze narostou do makroskopických rozměrů. Strunaři to označují jako **problém stabilizace modulů**. Moduly obecně rozumíme soubor konstant, které popisují geometrii a topologii dodatečných dimenzí. Tento problém se podařilo vyřešit v průběhu 90. let minulého století, kdy Joseph Polchinky a Raphael Bousso ukázali, že ke stabilizaci geometrie a topologie  $C-Y$  variety, která by se jinak spojitě měnila, je možno využít brány. Protože brán může být vždy jen diskrétní počet a protože brány mohou nést jen jednotkové hodnoty nábojů, dostáváme tím diskrétní jednotky toků. Polchinski s Boussem tak začali studovat teorie strun, ve kterých je kolem dodatečných dimenzí sbaleno veliké množství jednotek elektrického a magnetického toku. Podařilo se jim sestrojít teorie s kvantově zmraženými parametry. Tato stabilizace geometrie pochází z kvantových efektů, které přímo nesouvisejí se strunovou teorií, ale jsou poměrně dobře známy ze supersymetrických kalibračních teorií. Velmi příjemným vedlejším efektem této konstrukce byla skutečnost, že pokud se spolu s bránami použijí též antibrány, vytvoří to teorii strun s kladnou kosmologickou konstantou, která předpovídá pozorovanou

zrychlenou expanzi vesmíru, což se do té doby žádné strunové teorii nepodařilo.



Raphael Bousso ( 1972 )

Protože nevíme, jak vypadá podklad M-teorie v podobě konkrétního tvaru C-Y variety, zabývají se strunoví teoretici prvními členy poruchového rozvoje strunové teorie podle počtu děr ve světlošpe struny. Tyto vyšší členy v rozvoji odpovídají většímu počtu děr ve světlošpe. Předpokládá se, že tento výpočet dá hodnoty blízké tomu, co by mohl poskytnout výpočet podle pravé M-teorie (pokud bychom znali přesný tvar C -Y variety). Pro uskutečnění takového výpočtu v 11-ti rozměrném prostoročase je potřeba provést volbu brán, na nichž jsou upevněny konce strun, neboli provést volbu vakuového stavu. Existuje naděje, že se tak podaří nalézt nejnižší vakuový stav odpovídající základnímu stavu M-teorie (nejnižšímu energetickému stavu C-Y variety). Existuje však nekonečně mnoho tříd podkladových prostorů, které dávají možné bezrozporné volby a každá z těchto tříd přináší velký počet parametrů určujících rozměry a tvar podkladového prostoročasu – modulů.

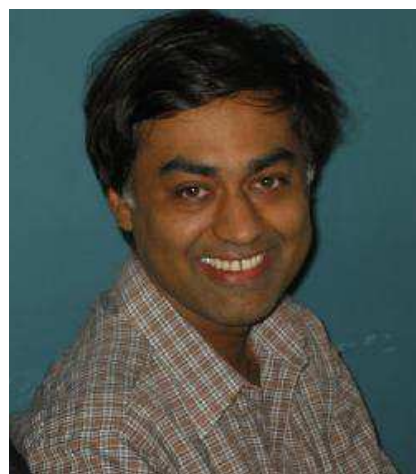
Pro nalezení neznámé dynamiky M-teorie je zapotřebí nalézt mechanismus, který dává různé energie vakuovým stavům odpovídajícím různým hodnotám modulů. Zobrazení energetické funkce v závislosti na mnoha modulových parametech se nazývá **krajinou** (landscape) **superstrunové teorie**.

Již ve druhé polovině 80. let minulého století byl vytvořen hrubý odhad počtu stabilních strunových vakuů v řádu  $10^{1500}$ . Drtivá většina těchto vakuů však obsahovala zápornou kosmologickou konstantu, což je

v příkrém rozporu s pozorováním současné zrychlené expanze prostoru. V roce 2003 našli fyzici Shamit Kachru, Sandip Trivedi a manželé Renata Kallošová a Andrej Linde mechanismus, který dává různé hodnoty energií pro různé hodnoty modulů, což dovolí fixovat jejich hodnoty nalezením minima energie jako funkce modulů. Tento mechanismus byl nazván podle iniciál příjmení autorů **KKLT mechanismem**.



**Shamit Kachru (1970)**



**Sandip Trivedi (1963)**



**Renata Kallosh (1943)**



**Andrej Dmitrievič Linde (1948)**

Vyjdeme-li z C-Y variety, abychom kompaktifikovali šest z deseti prostorových rozměrů podkladu pro superstrunovou teorii, přidává KKLT mechanismus další vrstvy struktury zahrnující brány a toky. Tyto toky jsou vícedimenzionálním zobecněním magnetických polí ukotvených na topologii C-Y variety. Tato práce je nesmírně komplikovaná dokonce i na poměry teorie strun.

Bohužel, KKLТ mechanismus dává modulům velmi rozsáhlý soubor hodnot, z nichž každá představuje lokální minimum, ve kterém mohla C-Y varieta kvantově zamrznout. Řádový odhad množství těchto stabilních vakuových stavů (možných vesmírů) nyní dělá  $10^{1000}$ , což je stále ještě otřesně veliké číslo.

Výzkumy z posledních let naznačují, že snad bude možné z tohoto počtu možných kompaktifikací C-Y variety vyloučit tzv. **non kahlerovské kompaktifikace**, čímž by se počet možných vakuí neuvěřitelně zredukoval na „pouhých“  $10^{500}$ .



**Errich Kähler (1906 -2000)**

Vybereme-li z tohoto souboru pouze ty stavy, jejichž vlastnosti souhlasí se současně známými experimentálními hodnotami různých fyzikálních parametrů našeho vesmíru, mělo by se podařit tento ohromný počet možných vakuí ještě dále zredukovat. Např. se předpokládá, že kosmologická konstanta by měla mít v každém z možných stavů vakua jinou hodnotu. Existence  $10^{500}$  různých stabilních vakuí tak přirozeně vede k existenci  $10^{500}$  různých hodnot kosmologické konstanty.

Spektrum těchto hodnot je tedy diskrétní a teoretici jej proto nazývají **diskretum**. Pouze „malé množství“ těchto různých stabilních vakuových stavů strunové teorie s kladnou kosmologickou konstantou by mělo mít hodnotu kosmologické konstanty blízkou nule, jak to pozorujeme v našem vesmíru, a jak to také vyžaduje antropický princip. Konfrontace M-teorie se známými hodnotami přírodních konstant našeho vesmíru by dle optimistických odhadů mohla nakonec zredukovat počet kandidátů na strunové vakuum našeho vesmíru až na

nějakých  $10^{100}$  různých možností. To je však stále příliš mnoho na to, aby byla M-teorie za současného stavu věcí schopna učinit jakoukoli předpověď týkající se konkrétního vesmíru. Zbývá zkrátka ještě příliš mnoho možných stavů (převyšují dokonce počet částic ve vesmíru) které povedou k nejednoznačným v předpovědích výsledku jakéhokoliv nového pozorování.

Ačkoli je superstrunová teorie mnohými fyziky považována za nejnadějnějšího kandidáta na **úplnou unitární teorii pole**, sjednocující všechny 4 typy interakcí na toužebně očekávanou "**teorii všeho**", řada fyziků zůstává k teorii superstrun zdrženlivější. Poukazují na nejednoznačnost jejích závěrů, neprůhlednost a přílišnou matematickou komplikovanost, především pak na obtížnost, ba nemožnost experimentálního ověření v dohledné budoucnosti.

## Smyčková kvantová gravitace

### Standardní model

Fyzika elementárních částic udělala nepochybně v posledních desetiletích nesmírný experimentální a technický pokrok. Počet částic pozorovaných v ohromných urychlovačích se stále rozmnožuje a zároveň se na teoretické úrovni podařilo uskutečnit dalekosáhlé sjednocení fyzikálních představ o struktuře hmoty a o základních interakcích v přírodě. Takzvaný *standardní model* obsahuje jen poměrně málo základních kamenů: *leptony* a *kvarky*, z nichž se skládají těžší částice. K tomu přistupují *intermediální částice* zprostředkující čtyři známé síly či interakce. Tak standardní model uspokojuje současné potřeby fyziky elementárních částic a dává jí teoretickou výzbroj k vysvětlení světa od nejmenších dnes dostupných velikostí ( $\sim 10^{-18}$  m) až do měřítka metrů.

Teoretickým základem standardního modelu je *kvantová teorie pole* (KTP), podle níž jsou základními veličinami spojité funkce v prostoru a v čase - "pole". Pole příslušející elementárním částicím se pohybují prostorem a časem, a částice se objevují jako kvanta energie příslušného pole - jsou tedy lokalizovány jen přibližně, kdežto v klasické teorii byly částice bodovými útvary. Obrazně lze říci, že v kvantové teorii pole jsou částice rozpuštěny do vlnových balíčků. Starý spor mezi "atomisty" a "energetisty" o diskrétní či spojitou povahu hmoty, který byl na začátku našeho století dočasně rozhodnut ve prospěch prvních, je tak v kvantové teorii pole vyřešen opačně.

### Gravitace jako "zdánlivá síla"

Co však do standardního modelu začlenit nelze, je čtvrtá základní interakce - *gravitace*. Protože je ve srovnání s jinými silami přírody daleko nejslabší, hraje zdánlivě roli jen ve velkých rozměrech, v planetárním systému či v celém vesmíru, a její teorie je od kvantové teorie pole naprosto odlišná. *Obecná teorie relativity* (OTR) vykládá gravitační sílu pomocí křivosti čtyřrozměrného prostoročasu. Zakřivené a zrychlené pohyby způsobené gravitací vznikají podle ní podobně, jako

když se koule valí po nerovné podložce a "sama od sebe" sleduje její křivost. Z tohoto hlediska je gravitace "zdánlivou silou". Podle Einsteinových rovnic platných v obecné teorii relativity, zakřivuje prostoročas každý druh energie, která je v něm rozložena. Obecná teorie relativity je klasická teorie, jež nezná pojem zprostředkujících částic. Částice gravitace analogické fotonům - gravitony - v ní proto nevystupují.

Co se týče experimentů, není gravitace vůbec patrná ani v těch největších urychlovačích. Sjednocená teorie proto není potřebná pro výklad žádného dosud pozorovaného jevu a graviton také zatím nikdo nikde nepozoroval. Pro porozumění experimentálním skutečnostem jsou standardní model a obecná teorie relativity úplně dostatečné. Zatím je to spíše estetická potřeba harmonie a úplnosti, která teoretické fyziky už po mnoho desetiletí podněcuje, aby hledali jednotnou teorii čtyř základních interakcí, popřípadě kvantovou teorii gravitace. Taková teorie může nabýt fyzikálního významu tam, kde je gravitace velmi silná: v blízkosti černých děr, v centru galaxií, v raném vesmíru.

Při snahách o kvantovou teorii gravitace se nejprve zdálo rozumné považovat křivost prostoru - tj. jeho odchylku od plochého prostoru v každém místě - za dynamické pole na nezměnitelném, plochém pozadí. Kvantový formalismus by nám měl ukázat, jaká je energie těchto odchylek "zabalená" v gravitonech. Avšak gravitony jako balíčky energie působí zpětně na prostor a dále jej zakřivují. Jak lze matematicky dokázat, na rozdíl od jiných případů "samointerakce" není běžný formalismus kvantové teorie pole schopen tuto komplikaci vyřešit pro případ obecné teorie relativity. Výsledky běžné kvantové teorie pole jsou nepoužitelné, protože dávají fyzikálním veličinám nekonečné hodnoty. Nástroje kvantové fyziky, které jsou jindy velmi úspěšné, vyvolávají závažné problémy, jako jsou absurdní nekonečna, pravděpodobnosti větší než 1 ("jevy jistější než jisté") a další.

## **Kvantování prostoročasu**

Kvantová teorie a Einsteinova obecná teorie relativity byly každá zvlášť skvěle experimentálně potvrzeny - ale žádný pokus nezkoumal situaci, kdy obě teorie předpovídají významné efekty. Potíž tkví v tom, že ke kvantovým jevům dochází téměř výhradně v malých rozměrech,



zatímco účinky obecné teorie relativity se projevují při obrovských hmotnostech, takže je těžké spojit obě tyto mimořádné podmínky dohromady.

S touto mezerou v experimentálních údajích je spojen obrovský problém: Einsteinova obecná teorie relativity je veskrze klasická, tedy nekvantová. Pro logickou souvislost fyziky jako celku je potřebná teorie, která nějakým způsobem spojí kvantovou mechaniku s obecnou teorií relativity. Touto dlouho hledanou teorií je kvantová teorie gravitace. Protože se obecná teorie relativity zabývá geometrií časoprostoru, bude kvantová teorie gravitace navíc i kvantovou teorií časoprostoru.

Fyzici vyvinuli pozoruhodnou sbírku matematických postupů k přechodu od klasické teorie na kvantovou. Mnoho teoretických fyziků a matematiků pracovalo s využitím těchto technik v obecné teorii relativity. Rané výsledky přinášely zklamání. Podle výpočtů z 60. a 70. let se zdálo nemožné obě teorie úspěšně spojit. Vypadalo to, že je nutné požadovat něco zcela nového, například nové postuláty či pravidla, která nejsou ani v kvantové teorii ani v obecné teorii relativity, nebo nějaké nové částice či pole, případně zcela nové entity. Správné dodatky nebo nová matematická struktura by snad umožnily vyvinout teorii kvantového charakteru, která by úspěšně aproximovala obecně-relativistické chování v nekvantovém režimu. K zachování úspěšných předpovědí kvantové teorie a obecné teorie relativity bylo zapotřebí, aby se nové prvky celkové teorie projevovaly jen při experimentech v mimořádných podmínkách, kdy jsou silné jak účinky kvantové teorie tak obecné teorie relativity. V tomto směru byla vyzkoušena celá řada teorií, jako například tzv. teorie twistorů, nekomutativní geometrie a supergravitace.

## Planckova délka

Mezi nejdůležitější fyzikální konstanty patří nepochybně:

gravitační konstanta  $G = 6 \times 10^{-11} \text{ m}^3/\text{kg} \cdot \text{s}^2$ ,

rychlost světla ve vakuu  $c = 3 \times 10^8 \text{ m/s}$ ,

Planckova konstanta  $\hbar = 1 \times 10^{-34} \text{ kg} \cdot \text{m}^2/\text{s}$ .

Čtenář si může snadno ověřit, že součinem mocnin těchto konstant lze sestavit jedinou veličinu o rozměru délky

$$L_p = \sqrt{\frac{Gh}{c^2}} \approx 10^{-35} \text{ m}, \quad (9.398)$$

což je Planckova délka, ke které jsme důsledněji dospěli v předchozím oddílu. M. Planck ji zavedl ve snaze dospět k přirozené soustavě jednotek. Později se však ukázalo, že tato veličina má význam nejmenší délky, o níž má smysl ještě hovořit. Ukázali jsme, že při Planckově délce naroste křivost natolik, že se body ocitnou uvnitř černé díry. Pokus o měření tak malých vzdáleností proto principiálně nedospěje k svému cíli. Představa o zakřiveném, ale spojitém prostoročase tak ztrácí smysl. Planckova délka je považována za veličinu, u níž končí platnost obecné teorie relativity a fyzikální procesy začnou být ovládány kvantovou teorií gravitace.

Na úrovni reality v Planckově škále existuje přesná a bohatá diskretní struktura. Tato vzdálenost je o 20 řádů menší, než jsme schopni detekovat v dnes nejlepších urychlovačích částic. V tomto měřítku Einsteinova obecná teorie relativity, která se zabývá vztahy prostoročasu, hmoty a energie, již neplatí, protože její veličiny nabývají nekonečných hodnot a její geometrie obsahuje singularity. Jak pronesl John Archibald Wheeler, obecná teorie relativity sama v sobě obsahuje semínko sebedestrukce - meze své platnosti. Toto omezení je na druhé straně výhodou, protože fyzikové se nemohou vyhnout hledání lepší a úplnější teorie pro zákony přírody na fundamentální úrovni reality. Fyzika potřebuje teorii kvantové gravitace, která by vysvětlila chování vesmíru na všech jeho úrovních, od kvarků až po kvasary. Proto teoretičtí fyzikové hledají novou "teorii všeho", která by obsahovala všechny fundamentální zákony přírody.

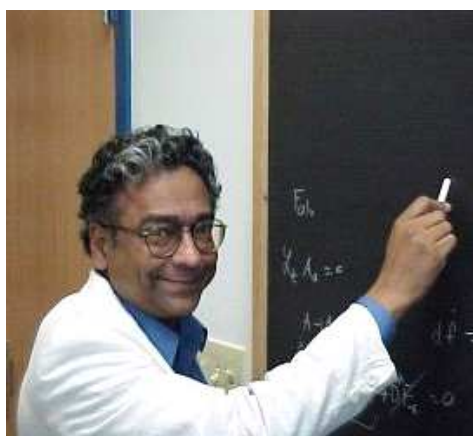
Mnoho pokusů v této oblasti učinili částicoví fyzikové, když předpokládali plochý prostoročas na pozadí. Matematik a fyzik Oxfordské university Roger Penrose tento postup kritizoval. Pokud z Einsteinovy krásné teorie odstraníme život tím, že použijeme lineární rovnice a plochý prostoročas, nemůžeme nic nového získat tím, že se teorii gravitace pokusíme spojit s kvantovou teorií. Rovnice popisující chování gravitace za kvantových podmínek nejsou řešitelné, přestože mají smysl a jsou konsistentní. Jsou jako palác, který nemá žádné dveře.

Relativističtí fyzikové většinou přistupují k tomuto problému z geometrického hlediska. John Archibald Wheeler již v 50. letech 20. století vyslovil hypotézu, že v nejmenším měřítku prostoročas není spojitý, ale spíše "pěnovitý". Je jasné, že kvantová gravitace vyžaduje zásadní změny našeho pohledu na vesmír. Naše představivost opět bude muset překročit hranice běžného vnímání světa kolem nás.

### Diskrétní povaha prostoru

Na počátku 80. let minulého století se Abhay Ashtekar z Pennsylvánské státní univerzity, Ted Jacobson z Marylandské univerzity a Carlo Rovelli, nyní působící na Marseilleské univerzitě, rozhodli znovu prověřit, zda je možné pomocí standardních metod souvisle spojit kvantovou mechaniku s obecnou teorií relativity. Věděli, že negativní výsledky ze 70. let mají důležitou mezeru. Při těchto výpočtech se předpokládalo, že geometrie prostoru je spojitá a hladká, bez ohledu na to, v jak malém rozměru ji zkoumáme - přesně tak se nahlíželo na hmotu, dokud nebyly objeveny atomy. Bylo zřejmé, že pokud je tento předpoklad nesprávný, nelze se spolehnout ani na staré výpočty.

Výše jmenovaní teoretici začali zkoumat, jak provádět výpočty bez toho, aby předpokládali, že je prostor hladký a spojitý. Zásadně nepředpokládali nic, co by se vymykalo experimentálně důkladně ověřeným principům obecné teorie relativity a kvantové teorie. V základech svých výpočtů se drželi dvou základních principů obecné teorie relativity.



**Abhay Ashtekar (1949)**



**Theodore A. Jacobson (1954)**



**Carlo Rovelli (1956)**

První z nich je známý jako nezávislost na pozadí. Tento princip říká, že geometrie časoprostoru není dána jednou provždy. Naopak, podle tohoto pravidla se vyvíjí a je dynamickou veličinou. K nalezení této geometrie je třeba vyřešit rovnice, které zahrnují všechny účinky hmoty a energie. Jak jsme se mohli přesvědčit v předchozím oddílu, teorie strun ve své dnešní podobě není nezávislá na pozadí; rovnice popisující struny jsou přizpůsobeny předem určenému klasickému (tedy nekvantovému) pozadí.

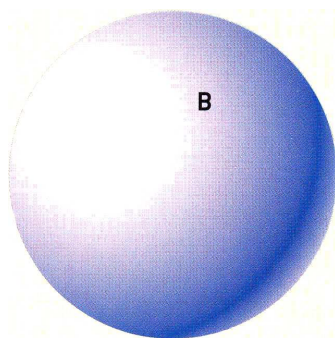
Druhý princip, známý pod názvem invariance diffeomorfismu se vztahuje k souřadnicím. K výpočtům v zakřiveném časoprostoru se používá systém souřadnic, zobecněný na čtyři rozměry zakřiveného časoprostoru. Tento princip říká, že rovnice teorie jsou stejné v libovolném dobře se chovajícím systému souřadnic, který si vybereme. Jde o velice silný princip, který byl hlavním vodítkem Einsteinovi při jeho původním vývoji obecné teorie relativity.

Pečlivým spojením těchto dvou principů za použití standardních metod kvantové mechaniky byl vyvinut matematický jazyk, který umožnil provést výpočty potřebné ke zjištění, zda je prostor spojitý či zda má diskrétní povahu. Tyto výpočty prozradily, že prostor je kvantován. Byly položeny základy nové teorie smyčkové kvantové gravitace, LQG (loop quantum gravity).

výpočty zopakovali mnozí fyzikové a matematici, kteří při tom použili řadu nejrůznějších metod. Během let se studium LQG stalo živým polem vědeckého výzkumu s přispěvateli z celého světa. Díky společnému úsilí byla získána důvěra v takový obraz časoprostoru, jaký bude popsán v následujících řádcích.

Teorie smyčkové kvantové gravitace je kvantovou teorií struktury časoprostoru v nejmenším měřítku jeho velikosti. Proto se k jejímu vysvětlení musíme zaměřit na to, co předvídá pro malou oblast nebo objem. Když se zabýváme kvantovou fyzikou, je nezbytné přesně specifikovat, jaké fyzikální veličiny se mají měřit. K tomuto účelu bereme v úvahu oblast, která je vyznačena svou hranicí  $B$  (viz obrázek 10.1). Tato hranice může mít materiální povahu, nebo může být určena samotnou geometrií časoprostoru, jako je tomu v případě horizontu černé díry.

Obr. 10.1

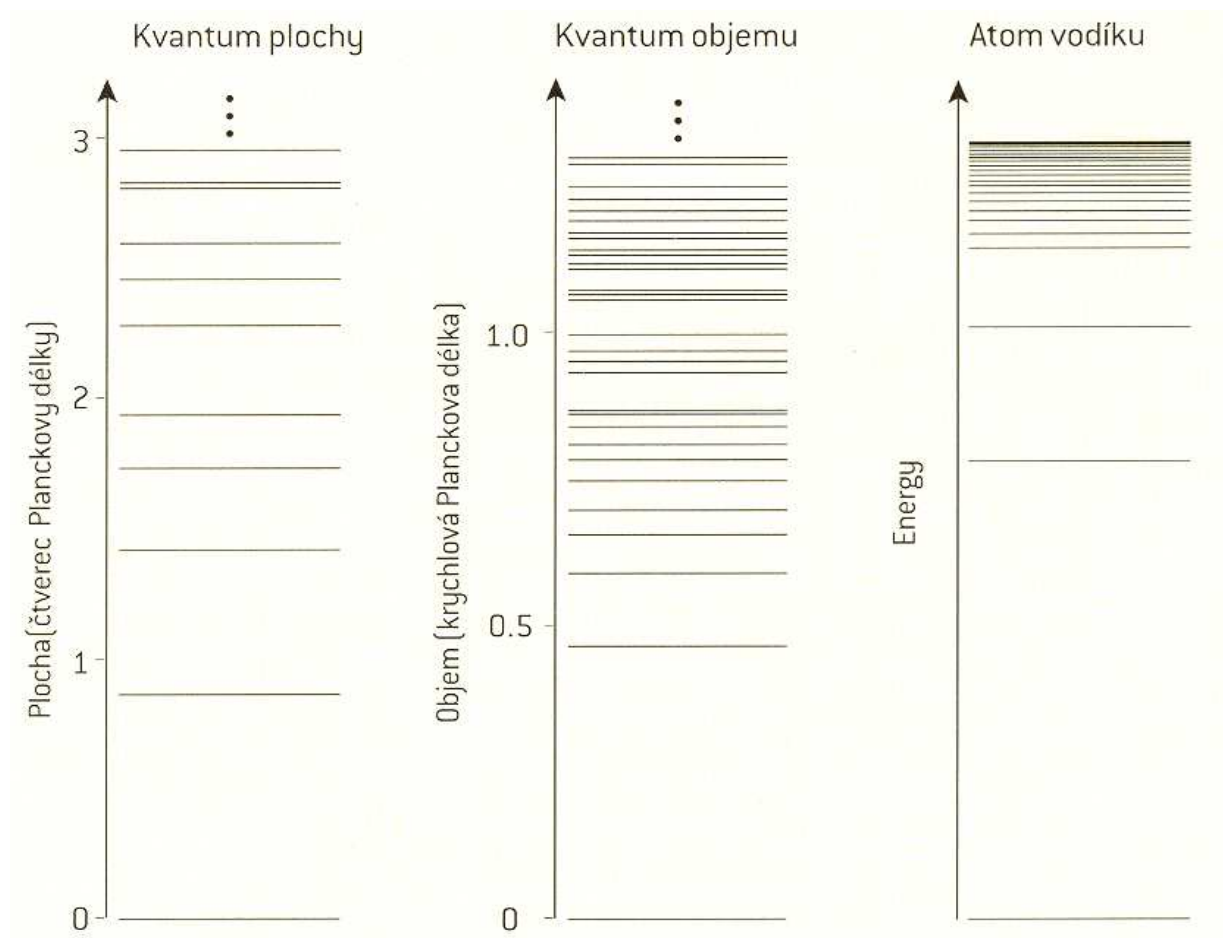


Ústřední předpověď LOG teorie se vztahuje k objemům a plochám.

Podle klasické nekvantové fyziky by mohl být objem vyjádřen libovolným kladným reálným číslem. Teorie LOG však říká, že existuje nenulový absolutní minimální objem cca.  $L_p^3 = 10^{-99} \text{ cm}^3$ , a tento objem omezuje soubor větších objemů na diskrétní řadu čísel. Podle této teorie je tedy v každém krychlovém centimetru prostoru  $10^{99}$  atomů objemu. Základní kvantum objemu je tak nepatrné, že v jednom krychlovém centimetru je těchto "atomů" objemu více, než kolik je krychlových centimetrů v celém viditelném vesmíru.

Podobně musí být plocha povrchu alespoň  $10^{-66} \text{ cm}^2$  (čtverec Planckovy délky), další plochy jsou pak jejím násobkem. Diskrétní spektrum povolených kvantových ploch a objemů (obr. 10.2 uprostřed) je značně podobné diskrétním kvantovým energetickým hladinám atomu vodíku (obr. 10.2 vpravo).

Obr. 10.2



## Kvantování prostoru

Z předchozí části víme, že někteří teoretičtí fyzici pracujících v oblasti elementárních částic zkouší vyvíjet a zobecňovat standardní model, aby tak dostali "teorii všeho" včetně gravitace - *teorii strun*. Stejně jako standardní kvantová teorie pole se teorie strun odehrává na daném prostorovém pozadí, většinou plochem, které má však ve všech variantách teorie více než čtyři rozměry. Relativisté se naopak snaží nejprve kvantovat samotnou obecnou teorii relativity. Zatímco teoretikové strun vyzbrojují prostor dodatečnými rozměry, aby získali konečné, dobře definované výsledky, tato skupina si z neúspěchu dosavadních snah o kvantování gravitace vyvodila jiné poučení. Podle nich by bylo rozštěpení prostoru na ploché pozadí a "dynamické vlnění" vzhledem k obecné teorii relativity krokem zpět. Nemůže proto jít

o dobré východisko ke kvantové teorii gravitace. Namísto toho se hledá kvantová teorie prostoru jako celku. Otázkou je, na jakém pozadí má být matematické lešení teorie vystavěno. Prvním návrhem byl již v šedesátých letech "prostor všech geometrií třírozměrného prostoru" (J. Wheeler, B. DeWitt). Kvantová teorie by měla předpovědět rozložení pravděpodobnosti, kde se právě nachází v tomto abstraktním prostoru reálný prostor, v němž žijeme. To by vedlo k časovému vývoji vesmíru nebo nějakého jeho podsystému, např. galaxie, který by byl postižen jistým stupněm kvantové neurčitosti. Tak by se zároveň vytvořil most ke kvantové kosmologii. Bohužel je "superprostor trojrozměrných geometrií" nekonečněrozměrná obluda, a proto se na této cestě daleko nedospělo, dokud nepřišel A. Ashtekar s nápadem použít pro popis geometrie prostoru nové proměnné. Fyzikálně znamená výběr určitých proměnných pouze volbu jedné z mnoha možností (srovnatelnou s užitím různých soustav jednotek nebo různých souřadnic). Ale při výpočtu to působilo takové zjednodušení, že se během minulých desetiletí podařilo redukovat nekonečné rozměry a sestavit formálně konzistentní kvantovou teorii trojrozměrných geometrií. Je to kvantová teorie na varietě místo na prostoročase. Varieta je jak víme hladký souvislý útvar, původně bez metriky, takže pojem vzdálenosti dvou bodů zde neexistuje předem. Vzdálenost, obsah, objem, jsou ve zde spíše dynamické veličiny teorie, která předpovídá, s jakou pravděpodobností tyto veličiny nabývají jistých hodnot.

## **Kvantová pěna**

Skutečně se podařilo zkonstruovat kvantový operátor objemu a obsahu a důsledky jsou nedozírné. Teorie předpovídá, že možné hodnoty obsahu a objemu jsou v měřítku Planckovy délky diskrétní. Tak se dostáváme od obecné teorie relativity, již se řídí pohyb galaxií, k výpovědi o nejmenších možných velikostech. Jako jiné kvantové teorie pole generují diskrétní kvanta (totiž elementární částice) v prostoru, který je pokládán za spojitý, v kvantové teorii gravitace vzniknou "kvanta prostoru" na abstraktní, hladké varietě bez metrické struktury. Podle této teorie neexistují menší vzdálenosti než Planckova délka, mluví se proto o "kvantové pění". Tento výsledek, bude-li potvrzen, může mít velký význam i pro jiné kvantové teorie pole, ačkoliv vychází z kvantování

samotné obecné teorie relativity. Energie libovolných kvant je totiž nepřímou úměrná vlnové délce příslušného vlnového balíčku. Nemohou-li být vlnové délky menší než určitá dolní mez, protože kratší délka neexistuje, pak je energie omezena shora a kvanta s nekonečnou energií jsou předem vyloučena. Přestože problém odstranění těchto kvant byl většinou řešitelný i v jiných teoriích, vyžádal si matematicky ne zcela regulerní dodatečnou úpravu teorie - renormalizaci.

### Ashtekarovy proměnné

Na rozvinutí shora zmíněných myšlenek o diskrétní povaze prostoročasu, založil profesor Abhay Ashtekar, ředitel Střediska pro gravitační fyziku a geometrii na Pennsylvánské státní univerzitě, své výpočty kvantové gravitace. Teorie vznikla a rozvíjela se od počátku 80. a let 20. století zásluhou práce A. Ashtekara L. Smolina, C. Rovelliho, J. Baeze, Ch. Ishama, M. Bojowalda a dalších průkopníků. Ústřední pilíř mostu mezi obecnou teorií relativity a kvantovou teorií položil Abhay Ashtekar v roce 1986. Byl inspirován článkem o pohybu elektronu v gravitačním poli, který napsal Amitabha Sen, tehdy student na Univerzitě v Chicagu.



**John Carlos Baez (1961)**



**Christopher Isham (1966)**



**Amitabha Sen (1960)**

Ashtekar vyvinul nový geometrický jazyk, v němž bylo možno Einsteinovy rovnice pole formulovat odlišným, avšak matematicky ekvivalentním způsobem. Tento matematický aparát brzy získal všeobecné uznání. S jeho pomocí zformulované rovnice elektroslabé interakce a Maxwellovy rovnice byly snadněji použitelné a rovnice



gravitační interakce získaly příznivější tvar. Ashtekarův matematický aparát umožnil elegantním způsobem popsat body, oblasti, pohyb a síly bez dříve nezbytné metriky. Další veličiny již byly v učebnicích označovány jako "Ashtekarovy proměnné".

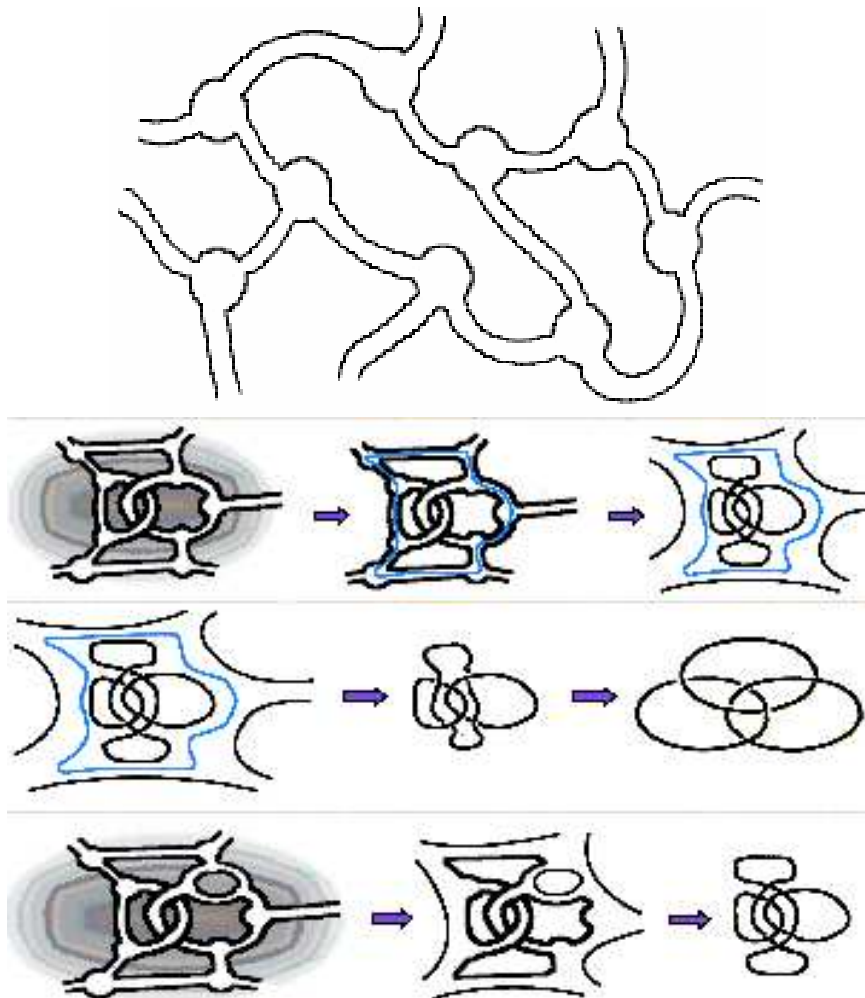
Matematici dobře vědí, že alternativou k uvažování o geometrii v jazyce polí křivosti v každém bodě prostoru je studium holonomie okolo smyček v prostoru. V zakřiveném prostoru si lze podél každé uzavřené smyčky přenést libovolný soubor vektorů, které během přenosu udržujeme kolineární s původními vektory. Po objetí smyčky je pro splynutí přenášených vektorů s původními obecně zapotřebí operace otočení, známá jako **holonomie smyčky**. Lze ji vypočítat pro každou smyčku v daném prostoru, čímž získáme tzv. **holonomii prostoru**. Po náročné a podrobné práci byla Ashtekarova verze Einsteinových rovnic pole rozšířena takovým způsobem, že tyto rovnice bylo možno kvantovat. Lee Smolin a italský fyzik Carlo Rovelli v letech 1988 až 1990 vykonali rozhodující průkopnickou práci a od roku 1992 oba začali spolupracovat s Ashtekarem. Na této úrovni popisu již prostor není homogenní, ale má jemnozrnnou strukturu. Skládá se z malých kroužků a je tvořen bezpočtem vzájemně propojených prstenců ("smyček") o průměru Planckovy délky. Takto se zrodila "smyčková kvantová gravitace" (*loop quantum gravity*).

Pokud bychom atom zvětšili na velikost naší Galaxie, pak kvantová smyčka by nebyla větší než lidská buňka. Proto není překvapením, že se nám prostoročas jeví zcela spojitý.

Klíčovým zdrojem inspirace byla tzv. Willsonova smyčka v mřížkové kalibrační teorii (lattice gauge theory) kvantové chromodynamiky, o níž budeme ještě podrobněji hovořit v závěrečné kapitole. Tuto teorii nezávisle na sobě vypracovali americký fyzik Kenneth Wilson a ruský fyzik Alexander Polyakov. Kvantová chromodynamika nepoužívá spojitý prostor, ale algebraickou strukturu svazu. Ve fyzice jsou takovými katastrofami nekonečné hodnoty veličin a absurdní matematické výrazy. K tomu však dochází pouze v kvantových teoriích, které jsou založeny na spojitém prostoročasu.

Po měsících nadšení se ovšem objevilo postupné zklamání. Matematika začala být nejasná a ve výpočtech se znovu objevily nekonečné hodnoty některých veličin. Smyčky proto nelze považovat za fundamentální reprezentaci reality. Mohou být užitečným popisem, podobně jako

Wheelerova kvantová pěna, avšak nepodařilo se dosáhnout správných matematických základů. V teoretické fyzice často se měnící paradigma vyžaduje nové matematické nástroje. Newtonova mechanika a teorie gravitace potřebovala diferenciální a integrální počet. Maxwellova elektrodynamika potřebovala parciální diferenciální rovnice, Einsteinova obecná teorie relativity potřebovala diferenciální geometrii a kvantová mechanika potřebovala Hilbertovy prostory a operátorovou algebru. Abhay Ashtekar proto nejdříve pomocí nových proměnných vyjádřil metriku 3-rozměrného prostoru pomocí formalismu  $SU(2)$  (nebo  $SO(3)$ ) symetrií kalibračního pole. Jeho spolupracovníci pak ukázali, že Hilbertův prostor kvantovaného  $SU(2)$  kalibračního pole lze generovat tzv. **spinovými sítěmi**, vycházejícími z *twistorové teorie* kterou navrhl nezávisle na Ashtekarových proměnných již o desetiletí dříve R. Penrose.



Obr. 10.3: Grafy twistovaných pásů vnořených do  $S^3$  topologie

V dalších pěti obtížných letech Ashtekar se svými spolupracovníky Jerzym Lewandowskim, Johnem Baezem, Chrisem Ishamem, Thomasem Thiemannem a dalšími společně vytvořili nástroje pro kvantovou geometrii, v níž důležitou roli sehraává teorie uzlů (*knot theory*). Hlavními pojmy jsou spinové sítě a grafy, jako spoje a průsečíky smyček, a spiny, které představují typ a počet těchto spojů. Ashtekarovi a jeho kolegům se podařilo odstranit nepříjemná nekonečna. Vzniklý matematický formalismus je natolik účinný, že jej lze použít nejen v obecné teorii relativity, ale také v teorii supergravitace. Podle Rovelliho se tak podařilo dosáhnout prvního úspěšného spojení obecné teorie relativity a kvantové teorie.



**Jerzy Lewandowski (1948)**



**Thomas Thiemann (1967)**

## **Kanonické kvantování**

Nejobvyklejší a nejpřímočařejší způsob přechodu od klasické teorie k teorii kvantové je metoda kanonického kvantování. Použitím této metody na mechaniku hmotných částic vzniká kvantová mechanika. Při takovém kvantování (nazývaném někdy "prvotní") se hmotným částicím přiřazují vlny pravděpodobnosti tvořící pole. Při použití kanonické metody na fyzikální pole (popř. mechaniku kontinua) se naopak objevují částice jako kvanta excitací těchto soustav - ať již se jedná o kvazičástice (fonony) existující jen na pozadí mechanického kontinua, nebo především o reálné částice (jako jsou fotony, fermiony a pod.)

existující na pozadí "vakua" příslušných polí. Tato metoda se označuje jako **druhotné kvantování**.

Při kvantování fyzikálního pole se zpravidla rovnice pole převedou na vlnovou rovnici, takže pole (v nějaké konečné oblasti prostoru) může být vyjádřeno jako **superpozice rovinných vln**; tím je pole popsáno diskrétní řadou proměnných - amplitud a frekvencí vln. Na základě těchto amplitud se definují kanonické proměnné pole - zobecněné souřadnice  $q_A$  a hybnosti  $p_A$ , pomocí nichž se vyjádří hamiltonián jako suma nezávislých členů tvaru jednorozměrného harmonického oscilátoru odpovídajícího jednotlivým vlnám s příslušnými vlnovými vektory a polarizacemi. Při kvantovém přechodu se kanonické proměnné (zobecněné souřadnice  $q_A$  a hybnosti  $p_A$ ) stávají operátory s komutační relací  $[\hat{P}_A, \hat{Q}_A] = -i\hbar$ . Použití těchto komutačních vztahů pro stanovení vlastních hodnot hamiltoniánu vede k **diskrétním** energetickým úrovním pole  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$ .

Použití této kanonické metody kvantování na elektromagnetické pole je všeobecně známé (kvantová elektrodynamika) a vede k představě volného elektromagnetického pole jako souboru částic - **fotonů**, z nichž každý má energii  $\hbar\omega$  a hybnost  $\hbar\omega/c$ . Analogický postup kvantování pro slabé gravitační pole v rámci linearizované teorie, provedený v letech 1930-36, vede k existenci **gravitonů** jako kvant gravitačního pole. Gravitony jsou částice s nulovou klidovou hmotností a **spinem 2**, které jsou příčně polarizovány (realizují se pouze maximální spinové hodnoty +2 a -2). Pro obecný případ nelineární tenzorové teorie pak bylo kvantování rozpracováno Diracem.

Bylo vyvinuto několik variant kanonického kvantování gravitačního pole. Tyto modifikace se liší jednak způsobem zavedení času (jako čas se bere buď přímo souřadnice  $x^0$ , nebo čas vzhledem k určitým nerotujícím "normálním" vztažným soustavám), jednak volbou a vztahy mezi zobecněnými souřadnicemi a hybnostmi (vzhledem k singularitě lagrangiánů existují mezi  $p$  a  $q$  určité vazbové rovnice umožňující snížit počet nezávislých kanonických proměnných).

## Spinová síť a smyčková kvantová gravitace

Kanonické kvantování OTR začíná rozkladem prostoročasu na trojrozměrnou prostorovou varietu  $\Sigma$  a na čas tak, že struktura je  $\Sigma \times R$ . Pak se definují kanonické proměnné gravitačního pole na  $\Sigma$ .

Na první pohled jsou indukované metriky na  $\Sigma$  a kanonicky sdružené veličiny přirozené proměnné.

Sdružené impulsy jsou průměty kovariantní derivace normálového vektoru k  $\Sigma$  (vnější křivost vložené podvariety  $\Sigma$ ). V těchto proměnných je však hamiltonovská vazba velmi složitá a nazývá se Wheelerovou – DeWittovou rovnicí.

V Ashtekarově nových proměnných se vazba výrazně zjednoduší.

V tomto formalismu fungují složky konexe  $A(x)$  jako konfigurační proměnné a sdruženými impulsy jsou triády  $E(x)$ , tj. ortonormální báze v tečných prostorech bodů variety  $\Sigma$ .

Konfigurační proměnné jsou veličiny, které hrají roli gravitační síly v geodetické rovnici.

V dalším postupu jsou konfigurační a impulsové proměnné prohlášeny za operátory kanonickými komutačními relacemi.

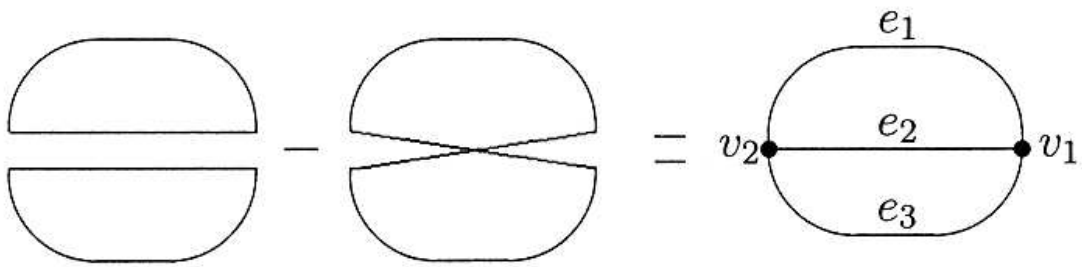
Kvantové stavy gravitačního pole v konexní reprezentaci jsou funkcionály konexe, formalismus ale vyžaduje regularizaci.

Výsledkem je, že fyzikální stavy nezávisí na konexi v každém bodě (tj. na poli  $A(x)$ ), nýbrž na operátoru paralelního přenosu vektorů po uzavřených křivkách (smyčkách)  $\gamma$ , tj. na holonomii  $h[A, \gamma]$ .

Z toho se vyvodil název smyčková kvantová gravitace.

Ortonormální báze v Hilbertově prostoru s vhodně definovaným skalárním součinem se skládá z funkcí holonomií křivek, které jsou spojené v uzavřené síti obsahující tzv. hrany a vrcholy.

Obr. 10.4 znázorňuje nejjednodušší případ tvorby spinové sítě.



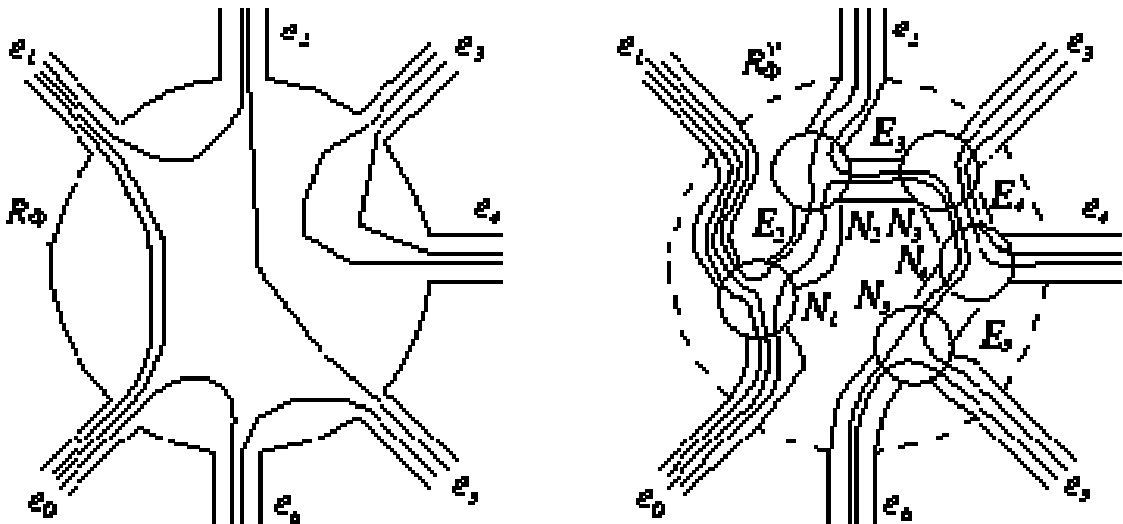
Obr. 10.4: Vytvoření sítě ze dvou smyček a osmičky. Výsledná síť má dva vrcholy  $v_i$  a tři hrany  $e_i$ .

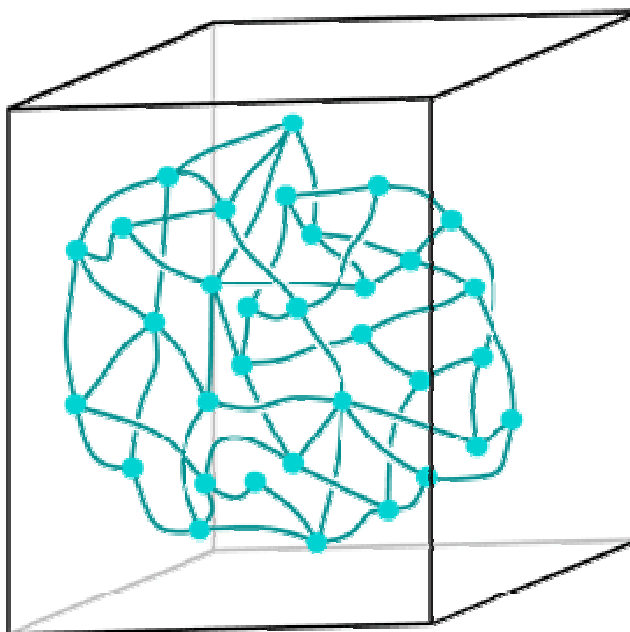
Důvodem je lineární závislost mezi dvěma smyčkami a osmičkou. Tento konkrétní bázevý vektor je funkcí tří holonomií

$$\psi(h[A, e_1], h[A, e_2], h[A, e_3]). \quad (9.399)$$

Velkou výhodou této konstrukce je skutečnost, že každý takový funkcionál, i když je síť rozsáhlá, má jen konečně mnoho argumentů (na rozdíl od nekonečného počtu stupňů volnosti pole  $A(x)$ ).

Operátory holonomie působí na triády tak, že zachovávají ortonormalitu. Z toho důvodu se síť, na které je definovaný stavový funkcionál, nazývá **spinovou sítí**.





Obr. 10.6.: Spinová síť

V duchu OTR kvantuje tato procedura zároveň s gravitačním polem i geometrii prostoru.

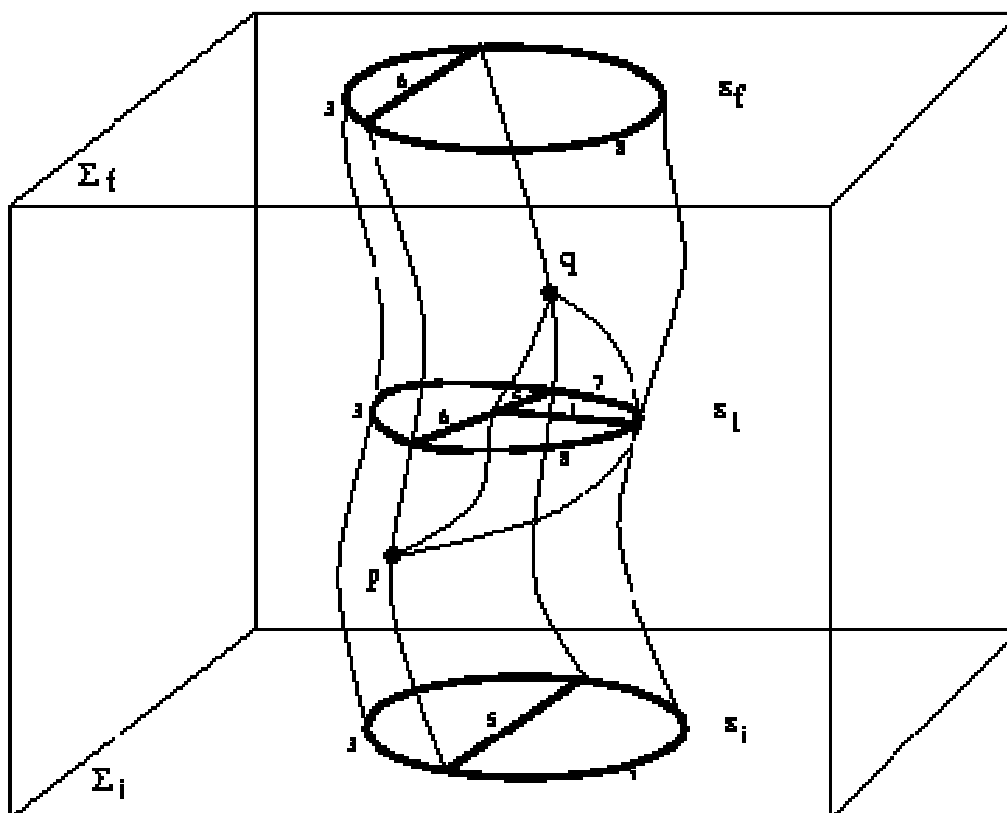
K tomu se dospěje následujícím způsobem: Z klasického výrazu pro objem trojrozměrné oblasti  $R$

$$V = \int_R d^3x \sqrt{|\det g^{(3)}|} \quad (9.400)$$

kde  $g^{(3)}$  je trojrozměrná indukovaná metrika, a z klasického výrazu pro obsah plochy  $G$

$$S = \int_G d^2x \sqrt{|\det g^{(2)}|} \quad (9.401)$$

kde  $g^{(2)}$  je dvojrozměrná indukovaná metrika, dostaneme pomocí triád operátory  $\hat{V}$  a  $\hat{S}$ .



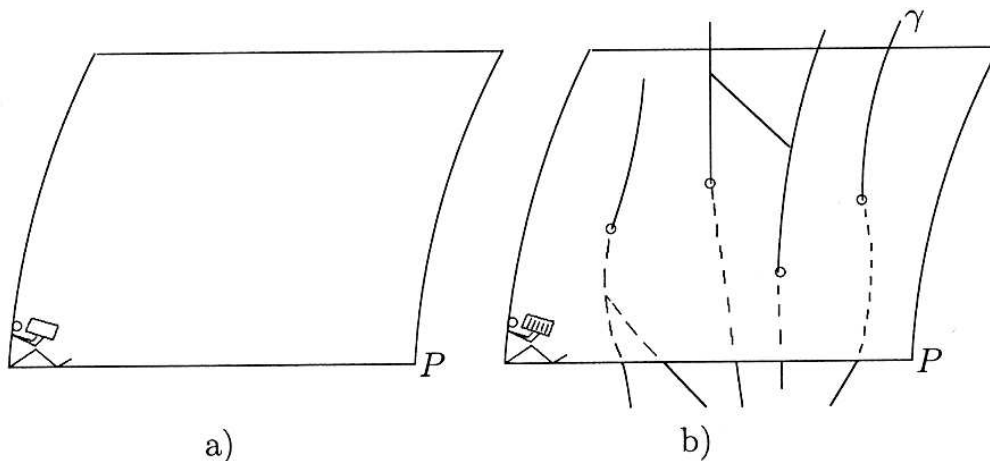
Obr- 10.7:: Obsah plochy je ve smyčkové kvantové gravitaci určen spojením topologické kvantové teorie pole s Crane-Yetterovým difeomorfně invariantním modelem kvantové teorie pole.

Základní veličiny jsou tedy reprezentovány kvantovými operátory. Konstrukce operátoru délky je v rámci teorie také možná.

Takové kvantování geometrie vede k tomu, že varieta  $\Sigma$  má význam pouhé pomocné konstrukce, nikoliv fyzikálního prostoru.

Teprve tehdy, když známe stav gravitačního pole ve tvaru superpozice funkcí spinových sítí, nabude oblast  $G$  vlastního obsahu plochy. Obr. 10.8 znázorňuje mechanismus vzniku plošného obsahu pro případ jednoho bázevého stavového vektoru.





**Obr. 10.8:**  
 a) Plocha  $P$  s operátorem plošného obsahu.  
 b) Operátor počítá průnik grafů  $\gamma$  s plochou  $P$ .

Ploše  $P$  ve varietě  $\Sigma$  je přiřazen operátor, který „umí počítat“. Když je stav gravitačního pole zadán funkcí na základě jednoho grafu, operátor sčítá příspěvky jednotlivých křivek, které protínají plochu  $P$ .

Z teorie vyplývá, že příspěvky jsou úměrné

$$l_P^2 \sqrt{j_i \left( j_i + \frac{1}{2} \right)}, \quad (9.402)$$

kde  $j_i$  je  $1/2$  počtu jednotlivých smyček podél  $i$ -té křivky.

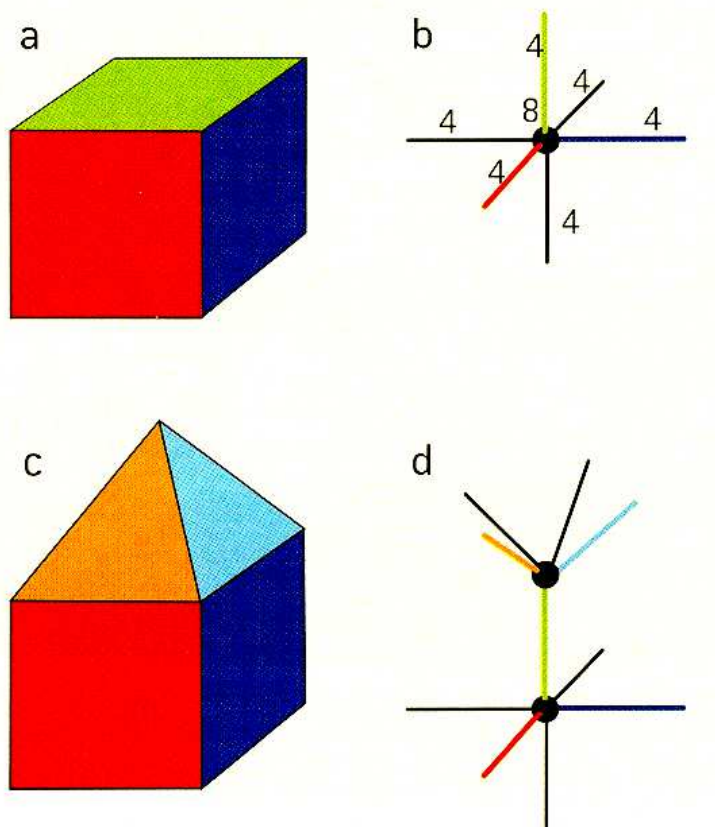
V případě objemu oblasti  $R$  se skládá očekávaná hodnota z příspěvků uzlů sítě uvnitř  $R$ .

Nejdůležitějším výsledkem je, že geometrie je diskrétní v měřítku Planckovy délky – v teorii existují jakési atomy prostoročasu.

Diagramy zvané spinové sítě, se využívají ke znázornění kvantových stavů prostoru v nepatrném měřítku. Některé z těchto diagramů odpovídají objemům mnohostěnů. Například krychle (a) na obr. 10.9 sestává z objemu uzavřeného šesti čtvercovými stěnami. Příslušná spinová síť (b) obsahuje tečku neboli uzel, který představuje objem, a šest čar, které představují příslušných šest stěn. Úplná spinová síť má u uzlu číslo, které udává objem krychle, a číslo u každé čáry udává plochu odpovídající stěny (c). Na našem obrázku činí objem uzlu 8 krychlových

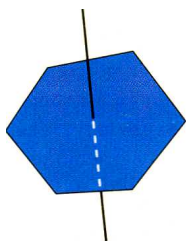
Planckových délek a plocha každé z šesti stěn činí čtyři čtvereční Planckovy délky. (Pravidla LQG omezují povolené objemy a plochy na specifická množství; na čarách a uzlech jsou povoleny jen určité kombinace čísel).

Obr. 10.9

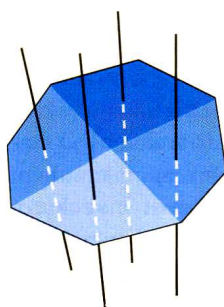


V případě jehlanu usazeného na horní stěně krychle by čára představující tuto plochu ve spinové síti spojovala uzel krychle s uzlem jehlanu (*d*). Čáry odpovídající čtyřem volným stěnám jehlanu a pěti volným stěnám krychle by vycházely z příslušných uzlů.

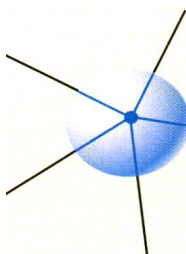
Obr. 10.10



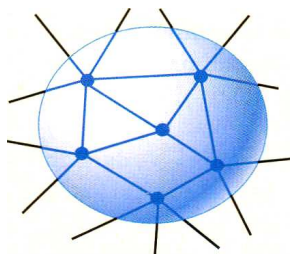
e) Jedno kvantum plochy



f) Větší plocha



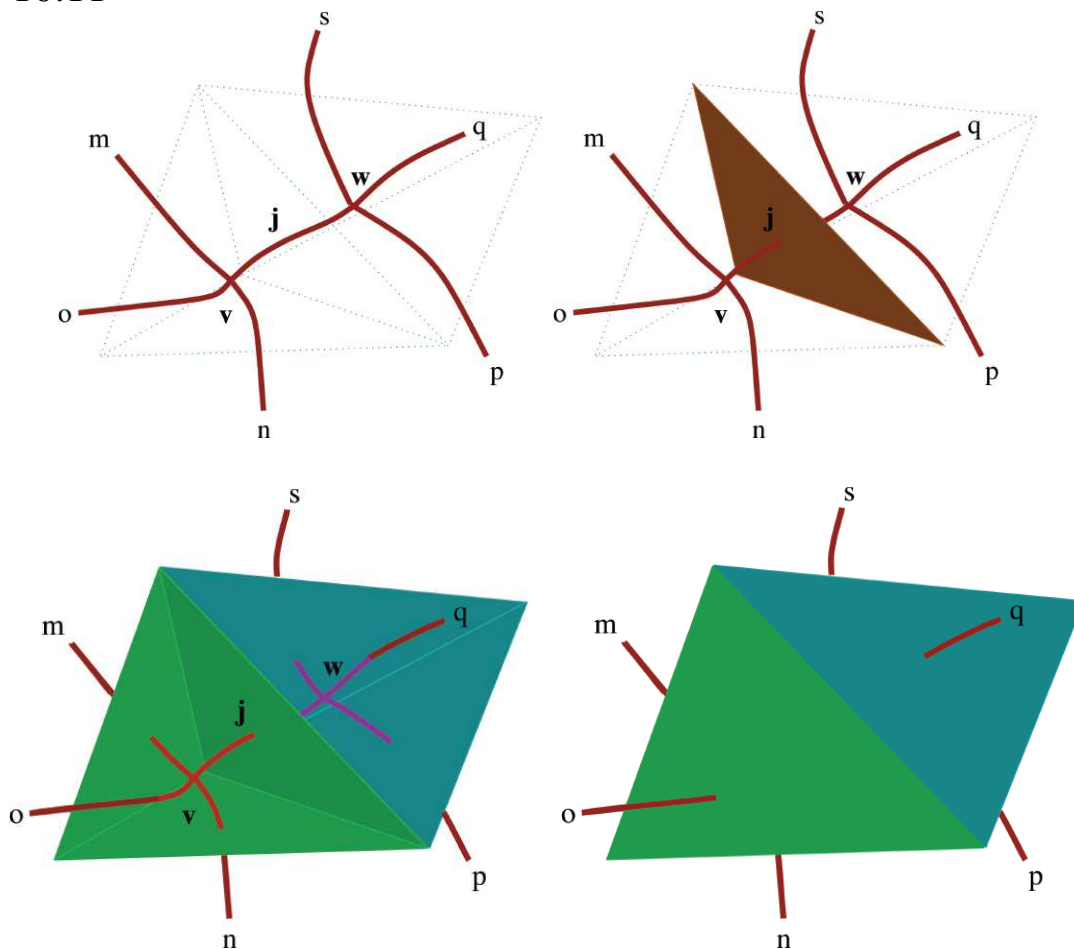
g) Jedno kvantum objemu



h) Větší objem

Obecně je ve spinové síti jedno kvantum plochy znázorněno jedinou čarou ( $e$ ), zatímco plochu složenou z mnoha kvant představuje mnoho čar ( $j$ ). Podobně je jediné kvantum objemu znázorněno jediným uzlem ( $g$ ), zatímco většímu objemu odpovídá více uzlů ( $h$ ).

Obr. 10.11



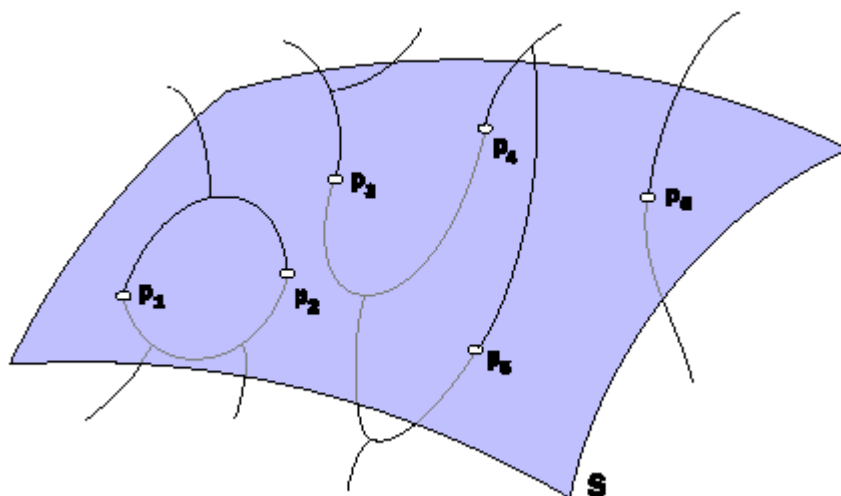
Spinová síť je tedy množina vrcholů (bodů) spolu se spojnicemi (hranami), které jsou označeny nějakou ireducibilní reprezentací grupy - v tomto případě  $SU(2)$  - a ve vrcholech jsou spojeny pomocí nějakých singletů  $SU(2)$ . Tato "kostra", vnořená do časoprostoru (avšak potenciálně existující nezávisle na něm), slouží jako model časoprostoru, který se tímto stává diskrétním. Například dvourozměrný povrch nějaké plochy je koncentrován v průsečících této plochy s hranami spinové sítě, a každý průsečík zhruba řečeno přispívá celočíselným násobkem (přesněji  $\sqrt{j(j+1)}$ ) renormalizované Planckovy plochy.

Spinové sítě jsou fundamentálnějším pojmem než mnohostěny: každé uspořádání mnohostěnu může být znázorněno ve spinové síti, ale platné spinové sítě představují kombinace objemů a ploch, které nemohou být zakresleny jako mnohostěny. Takové spinové sítě bychom mohli najít v prostoru zakřiveném silným gravitačním polem, nebo v rámci kvantových fluktuací geometrie prostoru v Planckově měřítku.

### Vznik obsahu a objemu v kvantové geometrii

Obsah dvojrozměrné plochy  $S$  jakožto útvaru v třírozměrné varietě není definován. Fyzikální stav gravitačního pole je charakterizován spinovou sítí. Obsah plochy je určen stavem jako součet určitých výrazů, které jsou v tomto stavu přiřazeny hranám, přes všechny průsečíky hran sítě s danou plochou (na obrázku 10.12 jsou to průsečíky  $p_1, \dots, p_6$ ). V jiném stavu mohou být síti přiřazena čísla, počet průsečíků, a tedy i plošný obsah úplně jiný.

Obr. 10.12

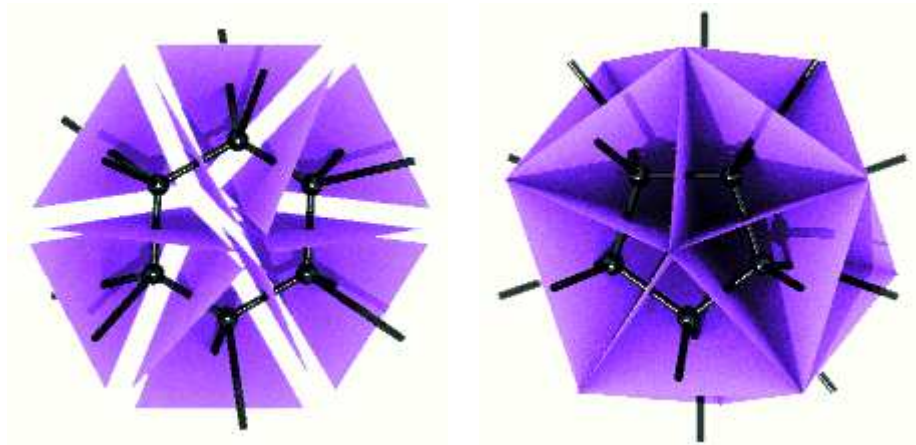


Co zjistíme při měření objemu oblasti? Jaké výsledky umožňuje jak kvantová teorie tak invariance diffeomorfismu? Pokud je geometrie časoprostoru spojitá, mělo by být výsledkem měření objemu jakkoli malé či velké oblasti kladné reálné číslo, které by se mohlo zcela libovolně přibližovat nulovému objemu. Je-li však geometrie zrnitá (diskrétní), pak by se měl výsledek měření skládat jen z diskrétní sady čísel a nemůže nabýt menší hodnoty, než jakou má nejmenší možný

objem. Tato otázka je podobná otázce, jakou energii mají elektrony, které obíhají kolem atomového jádra. Klasická mechanika předpokládá, že elektron může nabývat libovolných hodnot energie. Naproti tomu kvantová mechanika připouští výskyt jen určitých hodnot energie (energie mezi těmito hodnotami se nevyskytují) – viz obr. 10.2. Rozdíl je stejný jako mezi měřením něčeho, co spojitě plyne, jako voda v pojetí 19. století, a něčím, co se dá počítat, jako jsou atomy v této vodě.

Protože podle teorie LQG je i prostor složen z podobných "atomů", existuje jen omezený soubor čísel, která můžeme při měření objemu získat. Objem tak přichází v přesně vymezených kvantech. Prostor není spojitý, ale vyskytuje se jen ve specifických kvantovaných jednotkách plochy a objemu.

Obr. 10.13



Jak tyto kvantové stavy plochy a objemu vypadají? Skládá se prostor z mnoha malých krychliček nebo koulí? Není to tak jednoduché, můžeme však nakreslit grafy, které představují kvantové stavy objemu a plochy.

Abychom viděli, jak tyto diagramy fungují, představme si, že máme kus prostoru ve tvaru krychle, jak je ukázáno na obrázku 10.9. V našem obrázku jsme znázornili takovou krychli jako tečku s šesti vyčnívajícími čarami, které představují šest stěn krychle. K tečce potřebujeme připsat číslo, abychom upřesnili množství objemu, a na každou čáru napíšeme číslo, kterým specifikujeme velikost plochy, kterou daná čára představuje.

V dalším kroku předpokládejme, že na vrchní stěnu krychle postavíme čtyřboký jehlan, tedy útvar ve tvaru pyramidy. Tyto dva mnohostěny, sdílející společnou stěnu, budou vyznačeny jako dvě tečky (dva objemy)

spojené jednou z čar (společnou stěnou obou útvarů). Krychle má pět dalších stěn (dalších 5 vycházejících čar) a jehlanu zbývají ještě čtyři další stěny (další 4 vycházející čáry). Je zřejmé, o co složitější diagram bychom dostali, kdybychom ve svém příkladu pracovali i s jinými mnohostěny, než jen s krychlemi a jehlanami, přičemž každý objem by se stal bodem neboli uzlem a každá stěna povrchu mnohostěnu by byla znázorněna čarou, přičemž by tyto čáry spojovaly body stejně, jako společné stěny spojují mnohostěny v prostoru. Matematici nazývají takové diagramy grafy.

Nyní přišel čas, abychom ve své teorii opustili kresby mnohostěnů a zaměřili se pouze na grafy. Matematici, kteří popisují kvantové stavy objemu a plochy, nám poskytují soubor pravidel, která říkají, jak mohou být uzly a čáry spojené a jaká čísla jim lze v diagramu připsávat. Každý kvantový stav odpovídá jednomu diagramu a každý stav, který se řídí příslušnými pravidly, odpovídá jednomu kvantovému stavu. Teorie grafů je pohodlným zkráceným zápisem pro všechny možné kvantové stavy prostoru.

Grafy jsou lepším znázorněním kvantových stavů než mnohostěny. Zvláště proto, že některé grafy jsou pospojovány podivným způsobem, který nemůže být snadno převeden do úhledného obrázku s mnohostěny. Kupříkladu v zakřiveném prostoru nám v žádném obrázku nebudou mnohostěny na sebe přesně navazovat, ale graf můžeme pořád snadno nakreslit. Můžeme vzít graf a z něho spočítat, nakolik je prostor zakřiven. A protože právě zakřivení prostoru je tím, co vytváří gravitaci, formují právě takto grafy samotnou teorii gravitace.

Pro jednoduchost si často kreslíme grafy ve dvou rozměrech, ale je lepší si je představit v trojrozměrném prostoru, neboť právě ten znázorňují. Právě tady však na nás číhá koncepční past: čáry a uzly grafu nežijí v určitých místech prostoru. Každý graf je definován jen způsobem, jakým jsou jeho prvky pospojovány a jaký vztah mají k dobře definovaným hranicím, jako například k hranici B z obrázku 10.1. Spojitý trojrozměrný prostor, který v našich představách grafy vyplňují, jako samostatná entita *neexistuje*. Vše, co existuje, jsou spojnice a uzly grafu, ty *jsou* prostorem a způsob, jakým se spojují, definuje jeho geometrii.

Těmto grafům se říká spinové sítě, protože velké množství z nich se vztahuje k veličině zvané spin. Roger Penrose z Oxfordské univerzity na

počátku 60. let jako první vyslovil domněnku, že by spinové sítě mohly hrát roli v teoriích kvantové gravitace. V roce 1994 se ukázalo, že přesné výpočty jeho intuici potvrzují.

Jednotlivé uzly a hrany diagramů představují extrémně malé oblasti prostoru: uzel obvykle zaujímá objem jedné krychlové Planckovy délky, a hranou je obvykle ploška o obsahu jedné čtvereční Planckovy délky. V zásadě však neexistuje žádné omezení pro velikost a složitost spinových sítí. Kdybychom mohli nakreslit podrobný obrázek kvantového stavu našeho vesmíru, tedy geometrii jeho prostoru, jak je zakřivená a deformovaná gravitací galaxií, černých děr a všeho ostatního - dostali bychom obrovskou spinovou síť nepředstavitelné složitosti, která by obsahovala asi  $10^{184}$  uzlů.

Spinové sítě popisují geometrii prostoru. Ale co se vší hmotou a energií, která se v tomto prostoru nachází? Jak znázorníme částice a pole zaujímající polohy a oblasti v prostoru? Částice odpovídají určitým typům uzlů, které si znázorníme tak, že k některým uzlům přidáme navíc zvláštní značky. Pole, například elektromagnetické, jsou znázorněna přídatnými značkami na hranách grafu. Částice a pole pohybující se prostorem znázorňujeme těmito značkami, které se diskretními kroky pohybují v grafech.

Matematika vytvořená speciálně pro tento účel umožňuje nahlédnout za scénu téměř všech jevů ve vesmíru a může objasnit samotné základy naší reality. Pomocí smyčkové kvantové gravitace se Ashtekar přiblížil k naplnění Einsteinova snu a snad také k zodpovězení základních otázek fyziky, které se týkají záhad velkého třesku a černých děr.

Kvantová gravitace tedy přináší další revoluční pohled na vesmír: prostoročas je kvantován podobně jako hmota.

Otázka, proč se žádný objekt nemůže vtěsnat do polovičního objemu, než jaký má nejmenší buňka prostoru, z pohledu těchto "prostorových atomů" ztrácí význam. Vychází totiž z nesprávného předpokladu absolutního prostoru, v němž jsou umístěny všechny objekty od elementárních částic až po kupy galaxií. Prostor a čas však nejsou zcela fundamentálními entitami, ale jsou složeny ze základnějších struktur. Ashtekar přirovnává spinové sítě, matematicky popsané jako grafy, ke stavebnici z jednorozměrných vláken podobných polymerům. Pokud bychom mohli přírodu pozorovat s největším možným zvětšením, prostor a čas by se rozpustil a vystoupila by spinová síť, přesněji řečeno



kvantově mechanické superpozice všech možných konfigurací těchto entit. Mezi těmito grafy je "prázdkno". Spinové sítě neexistují v nějakém prostoru, ale samy prostor vytvářejí. Nejsou ničím jiným, než abstraktně definovanými vztahy, které určují, jak se spojují hrany dohromady a jak se vzájemně protínají.

Skutečnost, kdy prostor není homogenní, si lze demonstrovat na příkladu obrazu na plazmové obrazovce, který se rovněž skládá z malých pixelů, které z větší vzdálenosti nelze rozpoznat. Na jediné stránce této knihy by se mělo protínat  $10^{68}$  kvantových vláken.

Koncové body těchto otevřených grafů představují fermiony (tedy kvarky a leptony), z nichž je složena veškerá hmota, a Higgsovy bosony, které hmotě dávají její hmotnost. Bosony, které zprostředkovávají silové interakce mezi fermiony, jako fotony, vektorové bosony W a Z, gluony a gravitony, jsou projevem určitých excitovaných stavů spinové sítě, jako jsou změny "barvy" nebo váhy hran grafů. Podle Ashtekara něco představuje geometrii a něco jiného představuje pole. Hmota může existovat pouze tam, kde je geometrie excitována. Fyzikálně nemá smysl se ptát, co leží mezi hranami těchto grafů. Gravitony a další bosony nejsou fundamentálními entitami, ale pouze produktem spinových sítí. Naše obvyklá představa kauzality nemá ve spinových sítích žádný smysl. Dokonce čas je důsledkem variací excitovaných stavů a spojníc ve spinových sítích. V jistém smyslu tedy čas je stejnou iluzí jako prostor.

Celá říše reality pochází ze superpozic fluktuujícího pletiva spinových sítí na submikroskopické úrovni. My sami a všechno, co víme, jsou pouze obrazce ve spinových sítích.

## **Spinová pěna**

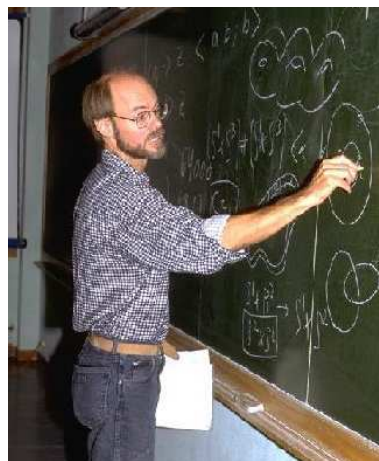
Další jednotící myšlenkou, je zdůraznění významu kauzality. Nejenže prostoročasová geometrie OTR určuje kauzální vztahy, platí to i naopak – kauzální vztahy mohou určovat geometrii prostoročasu, neboť většinu informací potřebných k rekonstrukci geometrie lze odvodit ze znalosti šíření světla. V dnešní době většina odborníků pracujících v oboru kvantové gravitace věří, že sama kauzalita je fundamentální vlastnost a to i tehdy, kdy už pojem klasického prostoru ztrácí smysl. Všechny zatím neúspěšnější přístupy ke kvantové gravitaci proto kombinují 3

základní principy: prostor je emergentní, jeho primární struktura je diskrétní a pro hlubší popis je klíčová kauzalita.

Se zatím nejúspěšnějším modelem tohoto typu přišli Renata Lollová a Jan Ambjorn v podobě modelu s tzv. **kauzální dynamickou triangulací**. Základní kauzální procesy jsou zde reprezentovány jednoduchými stavebními bloky, připomínajícími kostičky dětské stavebnice. Geometrie prostoročasu pak vzniká seskupování velikého množství těchto nepatrných dílků, z nichž každý představuje jeden elementární kauzální děj. Existuje přitom jen pár jednoduchých pravidel, podle nichž lze stavební bloky vrstvit na sebe a také jednoduchý vzorec, kterým lze následně určit kvantověmechanickou pravděpodobnost vzniklého modelu kvantovaného prostoročasu. Autorům se podařilo prokázat, že uvedený pozadově nezávislý model kvantové gravitace generuje klasický prostoročas se třemi prostorovými a jednou časovou dimenzí, který se vynoří z čistě kvantového světa s diskrétní avšak kauzální povahou. Ba co víc, podařilo se dokázat, že vypustíme-li předpoklad o mikroskopické platnosti kauzality, žádná klasická geometrie nevznikne.



**Renate Loll ( 1962 )**

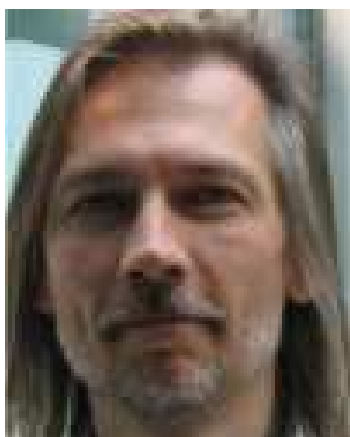


**Jan Ambjørn ( 1964 )**

Podle obecné teorie relativity se geometrie prostoru mění v čase. Záhyby a křivky prostoru se mění podle toho, jak se hmota a energie pohybuje, a samotným prostorem mohou procházet vlny stejně jako po hladině jezera. V LQG jsou tyto děje znázorněny změnami v grafech. Vyvíjejí se v čase řadou určitých "pohybů", při kterých se mění propojenost samotných grafů.

Když fyzici popisují jev v pojmech kvantové mechaniky, počítají pravděpodobnosti různých dějů. My budeme při popisu jevů s pomocí teorie LQG postupovat stejně, ať už půjde o částice a pole pohybující se ve spinových sítích nebo o samotnou geometrii prostoru, která se mění v čase. Thomas Thiemann z *Perimeter Institute for Theoretical Physics* ve Waterloo v Ontariu odvodil přesné kvantové pravděpodobnosti pro pohyby spinové sítě. Těmito pravděpodobnostmi je teorie zcela specifikována: máme k dispozici dobře definovaný postup výpočtu pravděpodobnosti jakéhokoli děje, ke kterému může dojít ve světě, řídicím se pravidly této teorie.

Einsteinova speciální a obecná teorie relativity spojují prostor a čas do jediného celku, zvaného časoprostor. Spinové sítě, které v teorii LQG představují prostor, se představě časoprostoru přizpůsobují přeměnou na tzv. "spinové pěny". Přidáním dalšího rozměru - času - hrany spinových sítí narostou do podoby dvojrozměrných povrchů, zatímco uzly se změní v hrany (viz obr. 10.16). Přejechy, kde se spinové sítě mění jsou nyní znázorněny uzly, kde se čáry stýkají v pění. Pěnový model časoprostoru navrhli poprvé Carlo Rovelli, Mike Reisenberger (Univerzita v Montevideu), John Barrett z Univerzity v Nottinghamu, Louis Crane z Kansaské státní univerzity, John Baez z Kalifornské univerzity a Fotini Makropoulou (Perimeter Theoretical Physics Institute).



**Michael Reisenberger (1969)**



**John W. Barrett (1970)**



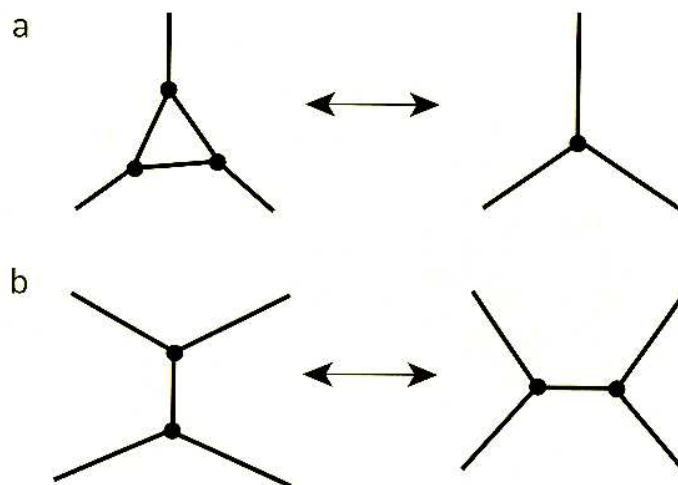
Louis Crane (1960)



Fotini G. Markopoulou-Kalamara (1971)

V časoprostorovém vnímání světa se momentka určitého času podobá řezu časoprostorem. Takovým řezem spinovou pěnou získáme spinovou síť. Protože je prostor definován jako diskrétní geometrie spinové sítě - je čas určen sledem vymezených pohybů, které přestavují síť, jak je ukázáno na obrázku 10.17. Tímto způsobem se čas také stává diskrétní veličinou.

Obr. 10.14

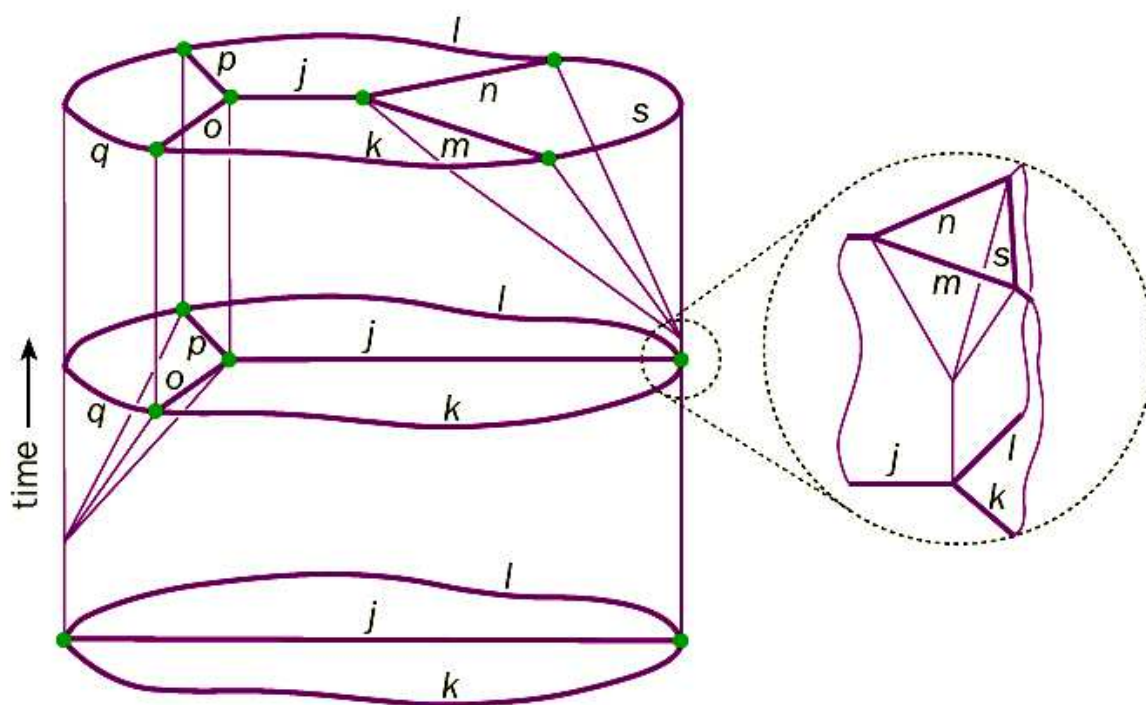


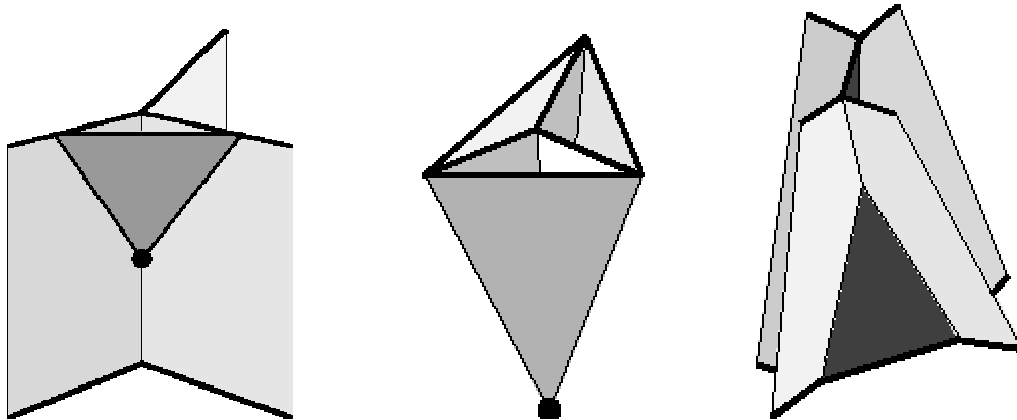
Změny v podobě prostoru, které nastávají například při průchodu hmoty nebo energie a s tím spojeném vysílání gravitačních vln, jsou znázorněny diskrétními změnami uspořádání nebo pohyby spinové sítě. V případě (a) na obr. 10.14 se propojená skupina tří objemových kvant slévá v jediné kvantum objemu; může nastat i opačný děj. V případě (b) se dva objemy v prostoru oddělí a nadále jsou spojeny jiným způsobem. V případě mnohostěňů by se dva mnohostěny nejprve spojily splnutím

jedné stěny, aby se vzniklý útvar později znovu rozdělil, přičemž rovina štěpení by se nacházela jinde než rovina, ve které splynuly stěny původních dvou mnohostěňů. K takovým pohybům ve spinové síti dochází nejen při velkorozměrových změnách v geometrii prostoru, ale také při kvantových fluktuacích v Planckově měřítku. Přidáním časového rozměru ke spinové síti, dostaneme spinovou pěnu (obr. 10.16).

Provedeme-li v nějakém časovém okamžiku řez spinovou pěnou, získáme opět spinovou síť; řada řezů v různých okamžicích nám poskytne rámec filmu zachycujícího evoluci spinové sítě v čase (obr. 10.17). Všimněte si ale, že evoluce, která se na první pohled zdá být hladkou a spojitou, je ve skutečnosti opravdu nespojitá. Všechny spinové sítě, které zahrnují červenou čáru představují navlas stejné uspořádání prostoru. Délka červené čáry nehraje roli - vše, co má pro geometrii význam, je způsob spojení čar a jaké číslo popisuje každou čáru. Právě to určuje, jak jsou kvanta objemu a plochy uspořádána a jak jsou velká.

Obr. 10.15





Obr- 10.16:: Každá spojnice ve spinové síti je asociována s kvantovým číslem plochy, zvaným „spin“, udávaným v jednotkách souvisejících s Planckovou délkou. Spinová síť typu (dole) se třemi spojnici nesoucími spiny  $j, k, l$  se vyvíjí ve dvou krocích do spinové sítě nesoucí spiny  $o, p, q, j, k, l, m, n, s$  (nahore).

Iniciační spinová síť má dva uzly, v nichž se potkávají 3 spojnice. Dále pak vertikální linie jejichž uzly definují hrany spinové pěny.

První vrchol – podobný vrcholu Feynmanova diagramu – leží v místě, kde se levá hrana rozvětjuje, v kterémžto bodě je formována intermediální spinová síť se spiny  $o, p, q, j, k, l$ . Hranu na pravém větvení v druhém interakčním uzlu jsme zvětšili.

Povrchy spinové pěny tvoří plochy opsané spojnici pohyblivými v čase. Toto rozšíření ukazuje, že k vrcholu jsou připojeny 4 hrany a 6 ploch s asociovanými spiny  $j, k, l, m, n, s$ . Spinová pěna jako taková, pak může být chápána coby nespojitý kvantový prostoročas.

Tak v diagramu na obr. 91 zůstává geometrie na prvních třech obrázcích konstantní, s třemi kvanty objemu a šesti kvanty povrchové plochy.

Potom se geometrie nespojitě mění v jedno kvantum objemu a tři kvanta povrchové plochy, jak ukazují poslední dva snímky. V tomto pojetí se

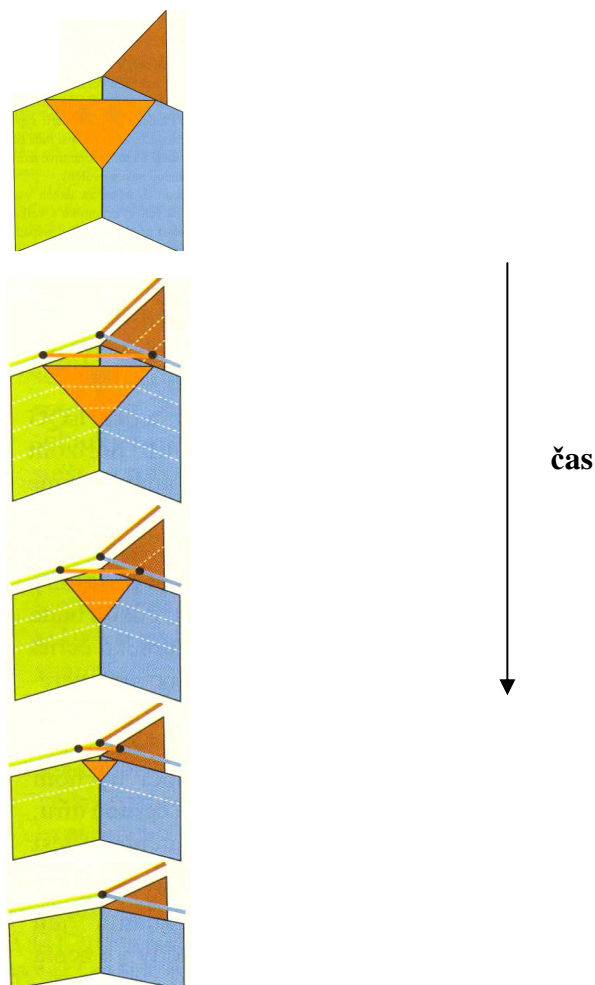
čas - definovaný spinovou pěnou - vyvíjí řadou náhlých diskrétních pohybů, a nikoli spojitým tokem. Ačkoli nám připodobnění k filmovým

políčkům významně pomůže při vizualizaci celého jevu, mnohem přesnější cestou k chápání evoluce geometrie je představa diskrétních

tiků hodin. Při jednom tiku je červené kvantum plochy přítomno, a v dalším tiku vlastně samo zmizení červeného kvanta tento "tik" definuje.

Doba, která uplyne mezi oběma "tiky" je přibližně rovna jednomu Planckovu času, tedy  $10^{-43}$  sekundy. Ale mezi oběma tiky žádný čas *neexistuje*: není tam žádné "mezi", stejně jako není žádná další vodní molekula mezi dvěma sousedícími molekulami vody.

Obr. 10.17



Ani čas tedy neubíhá jako voda v řece, nýbrž jako tikot hodin, přičemž každý "tik" trvá jednu Planckovu periodu:  $10^{-43}$  sekundy. Nebo přesněji, čas v našem vesmíru odměřuje tikot nespočetných hodin - v tom smyslu, že v každém místě spinové pěny, kde dochází ke kvantovému "pohybu", místní hodiny jednou "tiknou".

### Geometrie a topologie prostoročasu

Problém řešení Einsteinových rovnic se značně zjednoduší, když si předepíšeme vysoký stupeň **symetrie**; tím se sníží počet neznámých funkcí (metrických koeficientů) a rovnic. Skutečně, první přesné (a zároveň netriviální) řešení Einsteinových gravitačních rovnic bylo

nalezeno již v r.1916 K. Schwarzschildem pro sféricky symetrický případ.

Pro **centrálně symetrické** rozložení hmoty předpokládáme, že i vzbuzované gravitační pole bude centrálně symetrické. Nejprve budeme uvažovat případ, kdy centrálně symetrické rozložení hmoty se s časem nemění a gravitační pole je statické (níže však uvidíme, že tento předpoklad není nutný, výsledek bude stejný i pro nestatický případ při zachování centrální symetrie). Potom všechny fyzikální veličiny budou funkcí pouze vzdálenosti od středu symetrie. Dále budeme předpokládat, že prostoročas je **asymptoticky rovinný** - v dostatečně velkých vzdálenostech přechází postupně v rovinný Minkowskiho prostoročas.

Vztažnou soustavu v tomto případě je přirozené spojit se středem symetrie a použít sférické prostorové souřadnice  $(r, \vartheta, \varphi)$  s počátkem  $r = 0$  rovněž ve středu symetrie. Element prostoročasového intervalu lze potom hledat ve tvaru

$$ds^2 = -A(r)dt^2 + B(r)dr^2 + r^2(d\vartheta^2 + \sin^2\vartheta d\varphi^2) \quad (9.403)$$

takže metrické koeficienty

$$\begin{aligned} g_{tt} &= -A(r), \\ g_{rr} &= B(r), \\ g_{\vartheta\vartheta} &= r^2, \\ g_{\varphi\varphi} &= r^2 \sin^2\vartheta, \end{aligned} \quad (9.404)$$

jsou funkcemi pouze vzdálenosti  $r$  od středu symetrie. Souřadnice tohoto typu se nazývají **Schwarzschildovy souřadnice**. Jsou to v podstatě sférické souřadnice  $(r, \vartheta, \varphi)$  prostorové, kde radiální souřadnice  $r$  je definována jako vlastní délka příslušné kružnice (se středem v centru symetrie  $r = 0$ ) o poloměru  $r$  dělená  $2p$ , popř. odmocnina z vlastní plochy koule dělená  $4p$ . Souřadnicový čas  $t$  je měřen vzhledem ke vzdálené, asymptoticky rovinné oblasti.



Předpokládejme dále, že zdrojové těleso je prostorově omezené a sahá jen do vzdálenosti  $R$ ; při  $r > R$  je již vakuum ( $T^{ik} = 0$ ). Nejdříve budeme hledat tzv. **vnější řešení**, tj. metriku prostoročasu pro  $r > R$  vně tělesa - ve vakuu. Je tedy třeba řešit vakuové Einsteinovy rovnice  $R_{ik} = 0$ .

Christoffelovy koeficienty konexe v metrice ( 9.403 ) jsou

$$\begin{aligned}\Gamma_{rt}^t &= \frac{1}{2g_{tt}} \frac{d}{dr} g_{tt}, \\ \Gamma_{tt}^r &= \frac{1}{2g_{rr}} \frac{d}{dr} g_{tt}, \\ \Gamma_{rr}^r &= \frac{1}{2g_{rr}} \frac{d}{dr} g_{rr}, \\ \Gamma_{\vartheta\vartheta}^r &= -rg_{tt}, \\ \Gamma_{r\vartheta}^{\vartheta} &= \Gamma_{r\varphi}^{\varphi} = \frac{1}{r}, \\ \Gamma_{\varphi\varphi}^{\vartheta} &= -\sin\vartheta\cos\vartheta, \\ \Gamma_{\varphi\varphi}^r &= -rg_{rr}\sin^2\vartheta, \\ \Gamma_{\vartheta\varphi}^{\varphi} &= \frac{\cos\vartheta}{\sin\vartheta},\end{aligned}\tag{ 9.405 }$$

Einsteinovy rovnice  $R_{ik} = 0$  pak po úpravě dávají jen dvě nezávislé diferenciální rovnice

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr} g_{tt} &= \frac{1}{r} g_{tt} (1 + g_{rr}), \\ \frac{d}{dr} g_{rr} &= -\frac{1}{r} g_{rr} (1 + g_{rr}),\end{aligned}\tag{ 9.406 }$$

které mají řešení

$$g_{tt} = C_1 \left( 1 + \frac{C_2}{r} \right), \quad (9.407)$$

$$g_{rr} = \left( 1 + \frac{C_2}{r} \right) - 1,$$

kde  $C_1$  a  $C_2$  jsou integrační konstanty. Konstantu  $C_1$  volíme měřítkem škály časové souřadnice  $t$  (transformací  $t = C_1 \cdot t$  se konstanty  $C_1$  zbavíme). Z limitního přechodu k Newtonovu zákonu ( $g_{tt} \sim (1 - M/r)$  pro  $r \rightarrow \infty$ ) dostáváme, že konstanta  $C_2$  musí být rovna  $-2M$ , kde  $M$  je hmotnost zdrojového tělesa (tj. celková hmotnost uzavřená v kouli o poloměru  $r$  při  $r \rightarrow \infty$ ). Dostáváme tak **přesné řešení** Einsteinových rovnic ve vakuu pro sféricky symetrické gravitační pole; v této tzv. **Schwarzschildově geometrii** má element prostoročasového intervalu tvar

$$ds^2 = - \left( 1 - \frac{2M}{r} \right) dt^2 + \frac{dr^2}{1 - \frac{2M}{r}} + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2), \quad (9.408)$$

v geometrodynamických jednotkách; v běžných jednotkách je to

$$ds^2 = - \left( 1 - \frac{2GM}{c^2 r} \right) c^2 dt^2 + \frac{dr^2}{1 - \frac{2GM}{c^2 r}} + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2), \quad (9.409)$$

Zatím jsme uvažovali statický případ a předpokládali, že gravitační pole bude statické. Kdybychom tento předpoklad vypustili a připustili možnost závislosti metrických koeficientů (9.404) na čase při zachování sférické symetrie, tj.  $g_{tt} = -g_{tt}(r,t)$ ,  $g_{rr} = g_{rr}(r,t)$ , z Einsteinových rovnic  $R_{ik} = 0$  dostaneme po úpravě, že

$$\frac{\partial}{\partial t} g_{rr} = 0 \quad (9.410)$$

(takže  $g_{rr}$  nezávisí na čase) a  $g_{tt} = f(t)/g_{rr}$ , kde  $f(t)$  je funkce pouze času. Protože pro  $r \rightarrow \infty$  přechází vyšetřovaná metrika v metriku

Minkowského, kde je  $g_{tt} = -1$  a  $g_{rr} = 1$ , musí být  $f(t) = \text{const.}$  a na čase tedy nezávisí ani  $g_{tt}$ . Dospíváme tak k výsledku, že centrálně symetrické gravitační pole ve vakuu musí být **automaticky statické**, a to i tehdy, kdyby budící těleso např. radiálně pulzovalo (ovšem při zachování přesné sférické symetrie. Získané výsledky můžeme shrnout do následujícího tvrzení:

**Teorém 3.3** (Schwarzschildova-Birkhoffova věta)

V asymptoticky rovinném prostoročase je centrálně symetrické gravitační pole ve vakuu popsáno Schwarzschildovou geometrií s metrickou formou ( 9.408 ) ve Schwarzschildových souřadnicích. Toto pole je tedy **statické** a je určeno jen jediným parametrem - celkovou hmotností  $M$ .

Tento poznatek je velmi důležitý při studiu **gravitačního kolapsu** a vlastností **černých děr** - je to vlastně speciální případ teorému "**černá díra nemá vlasy**".



George David Birkhoff (1884 – 1944)

Rozeberme si vlastnosti Schwarzschildovy geometrie; protože nás bude zajímat celé Schwarzschildovo vnější řešení, budeme předpokládat, že budící hmota je soustředěna ve středu  $r = 0$  a všude jinde je vakuum. Podíváme-li se na prostoročasový element Schwarzschildovy geometrie ( 9.408 ), je na první pohled vidět, že není všude regulární. Při  $r \rightarrow 2M$  časová složka metrického tenzoru  $g_{tt} \rightarrow 0$  a prostorová radiální složka  $r \rightarrow \infty$ . Poloměr

$$r_g = 2M \equiv \frac{2GM}{c^2} \quad (9.411)$$

se nazývá **gravitační** neboli **Schwarzschildův poloměr** a příslušná sféra  $r = r_g = 2M$  **Schwarzschildova sféra**. Metrika ( 9.408 ) je samozřejmě singulární rovněž pro  $r = 0$ . Abychom si vyjasnili povahu těchto "singularit" Schwarzschildovy metriky (a uvidíme, že mezi oběma případy je principiální rozdíl), podívejme se nejprve na vlastnosti pohybu testovacích částic ve Schwarzschildově prostoročasu. Pohyb volné testovací částice ve Schwarzschildově poli je dán rovnicí geodetiky ( 1.35 )

$$\frac{d^2 x^i}{d\tau^2} + \Gamma_{kl}^i \frac{dx^k}{d\tau} \frac{dx^l}{d\tau} = 0, \quad (9.412)$$

kde koeficienty konexe  $G_{kl}^i$  vypočítáme ze složek metrického tenzoru v ( 9.408 ):

$$\begin{aligned} \Gamma_{rt}^t &= \Gamma_{rr}^r = \frac{M}{r^2} \frac{1}{1 - \frac{2M}{r}}, \\ \Gamma_{tt}^r &= -\frac{M}{r^2} \left( 1 - \frac{2M}{r} \right), \\ \Gamma_{\vartheta\vartheta}^r &= \Gamma_{\varphi\varphi}^r = \frac{-r}{1 - \frac{2M}{r}}, \end{aligned} \quad (9.413)$$

$$\Gamma_{r\varphi}^\varphi = \frac{1}{r},$$

$$\Gamma_{\vartheta\varphi}^\varphi = 0,$$

ostatní složky jsou buď s nimi symetrické nebo jsou rovny nule. Sférická symetrie nám umožňuje pro rovinu pohybu položit  $\vartheta = \pi/2$  (sledovat pohyb v ekvatoriální rovině), čímž rovnice pro souřadnici  $\vartheta$  odpadá. Zbývající rovnice jsou

$$\frac{d^2 t}{d\tau^2} + \frac{2M}{r^2} \frac{1}{1 - \frac{2M}{r}} \frac{dt}{d\tau} \frac{dr}{d\tau} = 0,$$

$$\frac{d^2 \varphi}{d\tau^2} + \frac{2}{r} \frac{d\varphi}{d\tau} \frac{dr}{d\tau} = 0,$$

$$\frac{d^2 r}{d\tau^2} + \frac{M}{r^2} \frac{1}{1 - \frac{2M}{r}} \frac{dr}{d\tau} \frac{dr}{d\tau} - \frac{M}{r^2} \left(1 - \frac{2M}{r}\right) \frac{dt}{d\tau} \frac{dt}{d\tau} - \frac{1}{1 - \frac{2M}{r}} \frac{d\varphi}{d\tau} \frac{d\varphi}{d\tau} = 0.$$

( 9.414 )

Vydělení první rovnice  $dt/d\tau$  dá

$$\frac{\frac{dt^2}{d\tau^2}}{\frac{dt}{d\tau}} + \frac{\frac{2M}{r^2}}{1 - \frac{2M}{r}} \frac{dr}{d\tau} = 0,$$

( 9.415 )

odkud integrací plyne

$$\ln \frac{dt}{d\tau} + \ln \left(1 - \frac{2M}{r}\right) = \text{const.}$$

( 9.416 )

neboli

$$d\tau = K \left(1 - \frac{2M}{r}\right) dt$$

( 9.417 )

kde integrační konstanta  $K$  souvisí s rychlostí částice (viz níže).

Analogická úprava druhé rovnice dává

$$\ln \frac{d\varphi}{d\tau} + 2 \ln r = \text{const.},$$

( 9.418 )

z čehož dostaneme rovnici

$$L \equiv r^2 \frac{d\varphi}{d\tau} = \text{const.}$$

( 9.419 )

vyjadřující zákon zachování momentu hybnosti  $L$ . Z třetí rovnice ( 9.414 ) pak dostaneme

$$\left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = \frac{1}{K^2} - \left(1 - \frac{2M}{r}\right) \left(1 + \frac{L^2}{r^2}\right). \quad ( 9.420 )$$

Mějme nyní částici padající radiálně ve Schwarzschildově poli ve směru ke středu  $r = 0$ . V rovnici ( 9.420 ) bude nyní

$$L = r^2 \frac{d\varphi}{d\tau} = 0 \quad ( 9.421 )$$

takže

$$\left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = \frac{1}{K^2} + 2\frac{M}{r} - 1 \quad ( 9.422 )$$

V limitě  $r \rightarrow \infty$  dostáváme

$$\left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = \frac{1}{K^2} - 1 \quad ( 9.423 )$$

takže  $1/K^2 - 1$  je rovno čtverci vlastní rychlosti  $v_\infty$ , kterou by měla částice v nekonečně velké vzdálenosti od středu. Tedy

$$\left(\frac{dr}{d\tau}\right)^2 = v_\infty^2 + \frac{2M}{r} \quad ( 9.424 )$$

což je shodou okolností stejný výsledek jako v Newtonově teorii. Z této rovnice můžeme vypočítat interval vlastního času  $\tau$ , který potřebuje částice aby se dostala z nějaké (konečné) vzdálenosti  $r = r_2$  do vzdálenosti  $r = r_1$  od středu:

$$\Delta\tau = \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{\sqrt{v^2 + \frac{2M}{r}}}$$

$$= \frac{1}{v_\infty} \left[ \sqrt{r_2^2 + \frac{2r_2M}{v_\infty^2}} - \sqrt{r_1^2 + \frac{2r_1M}{v_\infty^2}} - \frac{2M}{v_\infty^2} \ln \frac{\sqrt{r_2} + \sqrt{r_2 + \frac{2M}{v_\infty^2}}}{\sqrt{r_1} + \sqrt{r_1 + \frac{2M}{v_\infty^2}}} \right]$$

( 9.425 )

Tento interval vlastního času je vždy **konečný**, a to i pro  $r_1 = 0$ . Tedy volně padající testovací částice dosáhne jak "kritického" poloměru  $r = 2M$ , tak dokonce i bodu  $r = 0$ , za konečný vlastní čas.

Abychom stanovili tomu odpovídající interval souřadnicového času  $t$  (který je vlastním časem pozorovatele v nekonečnu), použijeme rovnice ( 9.420 ) a ( 9.417 ), což dává:

$$\left( \frac{dr}{dt} \right)^2 = \left( 1 - \frac{2M}{r} \right)^2 - K^2 \left( 1 - \frac{2M}{r} \right)^3$$

( 9.426 )

Limitní přechod  $r \rightarrow \infty$  ukazuje, že  $1 - K^2$  zde má význam souřadnicové rychlosti  $v_\infty$  v nekonečnu. Interval souřadnicového času potřebného pro pohyb ze vzdálenosti  $r_2$  do vzdálenosti  $r_1$  je tedy roven

$$\Delta t = \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{\left( 1 - \frac{2M}{r} \right) \sqrt{1 - K^2 \left( 1 - \frac{2M}{r} \right)}} =$$

$$= \frac{1}{\sqrt{M}} \left[ \frac{2\sqrt{r^3}}{3} + 4M\sqrt{r} + \sqrt{(2M)^3} \ln \frac{\sqrt{r} - \sqrt{2M}}{\sqrt{r} + \sqrt{2M}} \right]_{r_1}^{r_2}$$

( 9.427 )

pro nerelativistické částice  $1 - K^2 = v_\infty^2 \rightarrow 0$

$$\Delta t = r_2 - r_1 + 2M \ln \frac{r_2 - 2M}{r_1 - 2M} \quad (9.428)$$

pro relativistické částice  $1 - K^2 = v_\infty^2 \rightarrow 1$ . Interval souřadnicového času potřebného k dosažení bodu  $r = r_1$  se blíží nekonečnu při  $r_1 \rightarrow 2M$ .

Přicházíme tedy k poznatku, že z hlediska vnějšího pozorovatele se každá částice při přiblížení k poloměru  $r = 2M$  zpomaluje a potřebuje k jeho dosažení **nekonečně dlouhý čas**. Naproti tomu z hlediska pozorovatele padajícího spolu s částicí je poloměru  $r = 2M$  dosaženo za **konečný interval vlastního času**, tímto místem částice volně projde a posléze za konečný vlastní čas dosáhne středu  $r = 0$ . Vypočítáme-li na základě koeficientů konexe (9.413) komponenty Riemannova tenzoru křivosti ve Schwarzschildově prostoročase a přetransformujeme je do vztažné soustavy padajícího pozorovatele, budou (ty z nich, jež jsou nenulové) úměrné  $M/r^3$ , např.

$$R_{\partial\varphi\partial\varphi} = -R_{trtr} = \frac{2M}{r^3}, \quad (9.429)$$

$$R_{t\varphi t\varphi} = R_{t\varphi t\varphi} = -R_{r\partial r\partial} = -R_{r\varphi r\varphi} = \frac{M}{r^3},$$

takže na Schwarzschildově sféře dosahují hodnot řádu  $1/M^2$ ; podobně skalární invarianty (např.  $R = R_{iklm}R_{iklm} = 48M^2/r^6$ ) tenzoru křivosti, které nezávisí na souřadné soustavě. Křivost prostoročasu, a tedy i gradienty gravitačních sil (slapové síly), jsou na Schwarzschildově sféře konečné (a tím menší, čím je hmotnostní parametr  $M$  větší).

Dospíváme tak k závěru, že singulární chování Schwarzschildova prostoročasového elementu (9.408) pro  $r = 2M$  nemá svůj původ v singulárním charakteru geometrie prostoročasu na Schwarzschildově sféře, ale je způsobeno použitými Schwarzschildovými souřadnicemi, které se zde nehodí. Přejdem k jiné vhodné vztažné soustavě, např. k soustavě spojené s volně padajícími testovacími částicemi, tato pseudosingularita na Schwarzschildově sféře zmizí.



Geometrie samotného prostoročasu je na Schwarzschildově sféře zcela regulární, pozorovatel může přes Schwarzschildovu sféru volně projít během konečného intervalu vlastního času, nezjistí zde lokálně ani nic zvláštního a bude pokračovat dále ve svém pohybu. Zvláštnost prostoročasové geometrie na Schwarzschildově sféře nespočívá tedy v nějakých nenormálních lokálních vlastnostech, ale jak uvidíme dále, má význačnou globální vlastnost - je horizontem událostí.

Jinak je to s druhým singulárním místem v metrice ( 9.408 ) - bodem  $r = 0$ . Zde jak složky tenzoru křivosti ( 9.429 ), tak i jeho skalární invarianty dosahují nekonečných hodnot, jsou zde tedy nekonečně velké gradienty gravitačních sil. Částice, která se dostane do bodu  $r = 0$  již ve svém pohybu nemůže pokračovat dále, je těmito nekonečnými slapovými silami rozdrčena, doslova přestane existovat v rámci daného prostoročasu. Zde se jedná o skutečnou, **fyzikální singularitu** geometrie prostoročasu, kterou nelze odstranit žádnou volbou vztažné soustavy.

Souřadnicovou rychlost  $c_r$  světla v radiálním směru dostaneme, jestliže ve výrazu pro prostoročasový interval ( 9.408 ) položíme  $ds^2 = 0$  při  $d\varphi = d\vartheta = 0$

$$c_r = \left. \frac{dr}{dt} \right|_{ds=0} = 1 - \frac{2M}{r} \quad ( 9.430 )$$

Na Schwarzschildově sféře je souřadnicová rychlost světla v radiálním směru rovna nule. Čas, který potřebuje světlo aby se dostalo z bodu o souřadnici  $r = r_1$  do bodu  $r = r_2$  bude podle ( 9.430 )

$$\Delta t = \int_{r_1}^{r_2} \frac{dr}{\sqrt{1 - \frac{2M}{r}}} = r_2 - r_1 + 2M \ln \frac{r_2 - 2M}{r_1 - 2M}. \quad ( 9.431 )$$

Pro  $r_1 \rightarrow r_g = 2M$  se tento čas blíží nekonečnu pro libovolnou hodnotu cílového  $r_2 > r_1$ . Světlo vyzářené ze Schwarzschildovy sféry  $r = r_g$  potřebuje **nekonečně dlouhý čas** k tomu, aby se dostalo do kteréhokoliv místa více vzdáleného od středu. Z míst o souřadnicích  $r < r_g$  - z pod Schwarzschildovy sféry - se proto žádný objekt nemůže dostat ven,

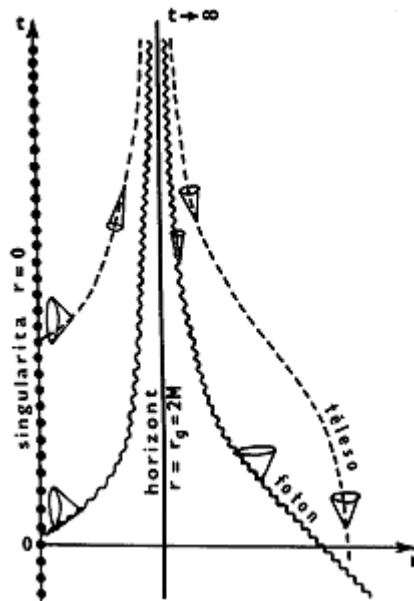
protože se odtud nemůže dostat ani světlo (a žádný objekt se nemůže pohybovat rychleji než světlo). Žádná událost, která probíhá uvnitř Schwarzschildovy sféry, se tedy nijak nemůže projevit vně a nemůže být z vnějšku nijak pozorovatelná. Schwarzschildova sféra je proto **horizontem událostí**, který ve smyslu **příčinnosti** odděluje vnitřní oblast od ostatního prostoročasu.

V oblasti Schwarzschildova horizontu mění složky metrického tenzoru

$$g_{rr} = \left(1 - \frac{2M}{r}\right) - 1, \quad (9.432)$$

$$g_{tt} = -\left(1 - \frac{2M}{r}\right),$$

svá znaménka: pro  $r > 2M$  je  $g_{rr} > 0$  a  $g_{tt} < 0$ , zatímco při  $r < 2M$  je  $g_{rr} < 0$  a  $g_{tt} > 0$ . Lze říci, že časová  $t$  a radiální prostorová  $r$  souřadnice si v jistém smyslu vzájemně **vymění úlohy**. Uvnitř horizontu úlohu toku času do budoucnosti přejímá neustálé zmenšování  $r$ . Prostorově světelné kužely jsou zde zcela **obráceny dovnitř**, takže každé reálné těleso se zde bude pohybovat tak, že  $r$  se neustále zmenšuje - musí tedy "padat" směrem ke středu  $r = 0$  (obr. 10.18).

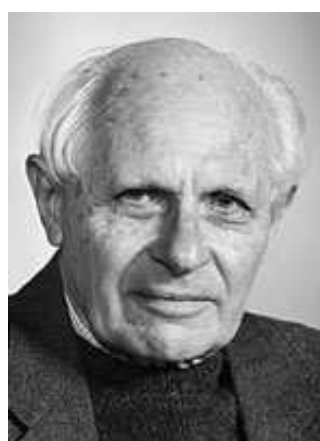


**Obr.10.18.** Prostorověčasový diagram radiálního pohybu testovacích částic a fotonů ve Schwarzschildově prostoročasu za použití obyčejných Schwarzschildových souřadnic.

Protože zdánlivá singularita na horizontu Schwarzschildovy geometrie je způsobena jen charakterem použité vztažné soustavy (Schwarzschildových souřadnic), nabízí se sledovat Schwarzschildův prostoročas pomocí souřadnic, které nemají tuto nepříjemnou vlastnost. Nejjednodušší co do realizace by byla vztažná soustava spojená s radiálně padajícími testovacími částicemi. Taková soustava sice nemá souřadnicovou singularitu, avšak není vhodná pro studium globálních geometrických vlastností (příliš složité transformační vztahy). Pro sledování geometrických vlastností Schwarzschildova prostoročasu je velmi výhodná tzv. Kruskalova-Szekeresova souřadnicová soustava, která vznikla spojením dříve zavedené Eddingtonovy-Finkelsteinovy smršťující se a rozšiřující se souřadnicové soustavy. Pro tento účel se nejprve zavádí modifikovaná souřadnice  $r^*$



**Martin David Kruskal (1925 – 2006)**



**George Szekeres (1911 – 2005)**



**Sir Arthur Stanley Eddington (1882 – 1944)**



**David Ritz Finkelstein (1929)**

$$r^* \equiv \int \frac{dr}{1 - \frac{2M}{r}} = r + 2M \ln|r - 2M| \quad (9.433)$$

$[r \in (0, \infty) \Rightarrow r^* \in (-\infty, \infty)]$  a dále izotropní souřadnice  $p$  a  $q$ :

$$\begin{aligned} p &= t + r^*, \\ q &= t - r^*. \end{aligned} \quad (9.434)$$

Význam těchto souřadnic je ten, že světelné geodetiky směřující ven jsou dány rovnicí  $q = \text{const.}$  a geodetiky směřující dovnitř rovnicí  $p = \text{const.}$  Schwarzschildova metrika v souřadnicích  $(q, r, \vartheta, \varphi)$  má pak tvar

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2M}{r}\right) dq^2 + 2dqdr + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2). \quad (9.435)$$

tato tzv. smršťující se Eddingtonova-Finkelsteinova souřadnicová soustava dobře (bez pseudosingularity) popisuje pád částic směrem pod gravitační poloměr, nikoliv však v opačném směru. Rozšiřující se Eddingtonova-Finkelsteinova souřadnicová soustava používá místo  $r$  a  $t$  souřadnice  $r$  a  $p$ , takže výraz pro metriku

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2M}{r}\right) dp^2 + 2dpdr + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2). \quad (9.436)$$

naopak dobře popisuje pohyb částic směrem ven, zatímco při pádu částic pod gravitační poloměr se objevuje pseudosingularita. Pro odstranění pseudosingularit a získání úplné extenze Schwarzschildovy geometrie se nabízí spojit obě tyto soustavy, tj. vyloučit  $r$  a použít souřadnice  $(q, r, \vartheta, \varphi)$ . Prostorčasový element Schwarzschildovy geometrie pak má tvar

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2M}{r}\right) dpdq + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.437)$$

Pro odstranění singulárního koeficientu  $1-2M/r$  je dále třeba provést vhodnou transformaci  $p' = p'(p)$ ,  $q' = q'(q)$ . Takovou transformaci našel Kruskal ve tvaru

$$\begin{aligned} p' &= e^{\frac{p}{4M}}, \\ q' &= e^{-\frac{q}{4M}}. \end{aligned} \quad (9.438)$$

V těchto nových souřadnicích má metrika tvar

$$ds^2 = -\left(\frac{16M^2}{r}\right) e^{-\frac{r}{2M}} dp' dq' + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad (9.439)$$

Abychom dostali tuto metriku v obvyklém tvaru se separovanými časovými a prostorovými členy, zavedeme nakonec místo izotropních souřadnic  $p'$  a  $q'$  časovou  $u$  a prostorovou  $v$  souřadnici:

$$\begin{aligned} u &= \frac{q' - p'}{2}, \\ v &= \frac{q' + p'}{2}, \end{aligned} \quad (9.440)$$

V Kruskalově soustavě jsou tedy souřadnice  $t$  a  $r$  nahrazeny bezrozměrnými časovými a radiálními prostorovými souřadnicemi  $u$  a  $v$  pomocí transformace

$$\left. \begin{aligned} u &= |r = 2M|^{1/2} e^{\frac{r}{4M}} \cosh \frac{t}{4M} \\ v &= |r = 2M|^{1/2} e^{\frac{r}{4M}} \sinh \frac{t}{4M} \end{aligned} \right\} \text{pro } r > 4M,$$

$$\left. \begin{aligned} u &= |r = 2M|^{1/2} e^{\frac{r}{4M}} \sinh \frac{t}{4M} \\ v &= |r = 2M|^{1/2} e^{\frac{r}{4M}} \cosh \frac{t}{4M} \end{aligned} \right\} \text{pro } r < 4M.$$

( 9.441 )

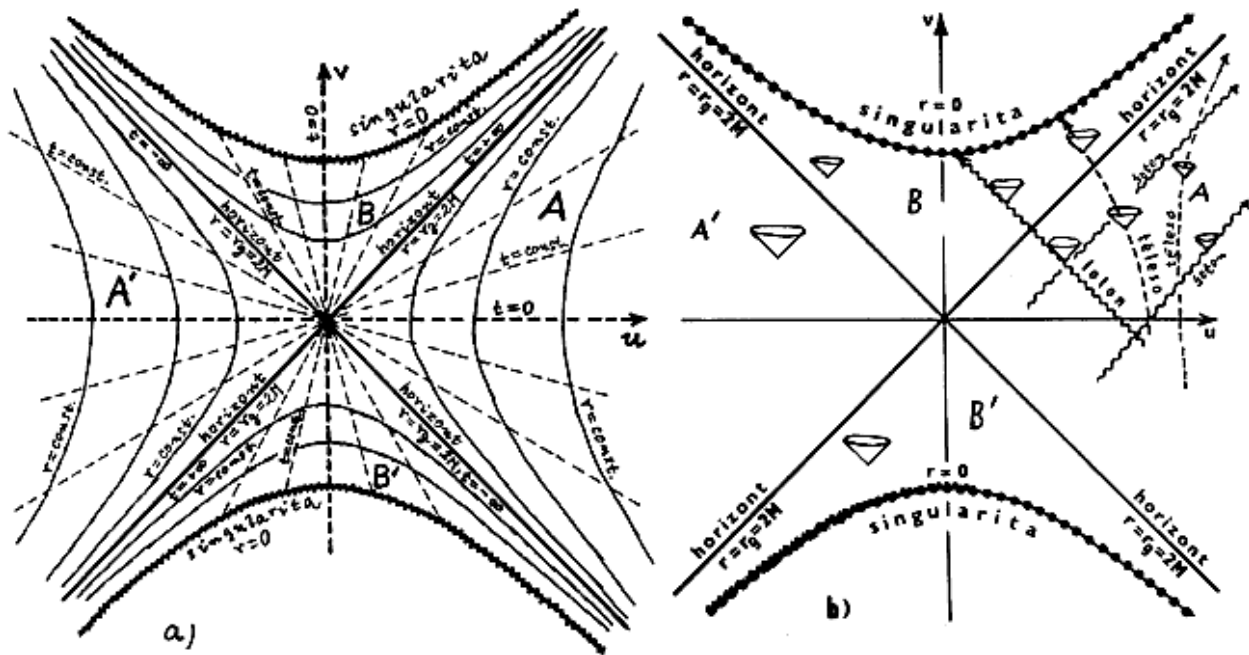
Jsou to tedy ve skutečnosti dvě navazující souřadnicové mapy (podobně jako např. u rovinného zobrazení zeměkoule). Prostorčasový element Schwarzschildovy geometrie má potom v Kruskalových souřadnicích tvar

$$ds^2 = - \left( \frac{16M^2}{r} \right) e^{-\frac{r}{2M}} (du^2 - dv^2) + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad ( 9.442 )$$

kde  $r$  jako funkce  $u$  a  $v$  je dáno rovnicí

$$(r - 2M) e^{\frac{r}{2M}} = u^2 - v^2. \quad ( 9.443 )$$

Z ( 9.443 ) je vidět, že metrika Schwarzschildovy geometrie v Kruskalových souřadnicích je regulární všude s výjimkou středu  $r = 0$  (kde se jedná o skutečnou fyzikální singularitu neodstranitelnou žádnou transformací souřadnicové soustavy).



**Obr. 10.19. Kruskalův prostoročasový diagram Schwarzschildovy geometrie.**

a) Souřadnicová síť ve vztahu ke Schwarzschildovým souřadnicím  $r$  a  $t$ .

b) Celková struktura prostoročasu a pohyb testovacích částic a fotonů.  $A$  je vnější asymptoticky rovinná oblast,  $B$  je vnitřní oblast pod horizontem.

Některé základní rysy Schwarzschildovy geometrie v Kruskalových-Szekeresových souřadnicích jsou schématicky znázorněny na

**Kruskalově diagramu** (což je prostoročasový diagram v Kruskalových souřadnicích  $u$  a  $v$ ) na obr. 10.19b, který můžeme srovnávat s

odpovídajícím diagramem ve Schwarzschildových souřadnicích na obr.

10.19. Především singularita  $r = 0$  je zde dána vztahem  $v^2 - u^2 = 1$ , což popisuje dvě oddělené singularity tak, jak je hyperbolami znázorněno na

obr. 10.19. Horizont  $r = 2M$  je zde tvořen dvěma přímkami  $u = \pm v$ .

Vnější oblast  $r > 2M$  je vyjádřena nerovností  $u^2 > v^2$ , což opět popisuje

dvě vnější oblasti. Pro radiální nulové (izotropní) geodetiky  $ds = 0$

dostáváme  $du = \pm dv$ ; tyto radiální světelné geodetiky jsou tedy přímky

pod úhlem  $45^\circ$  k osám Kruskalovy soustavy. Tato vlastnost je velmi výhodná, protože světelné kužely vypadají úplně stejně jako v diagramu

Minkowskiho rovinného prostoročasu STR. Reálná hmotná tělesa se tedy mohou v tomto Kruskalově diagramu pohybovat pouze pod úhlem

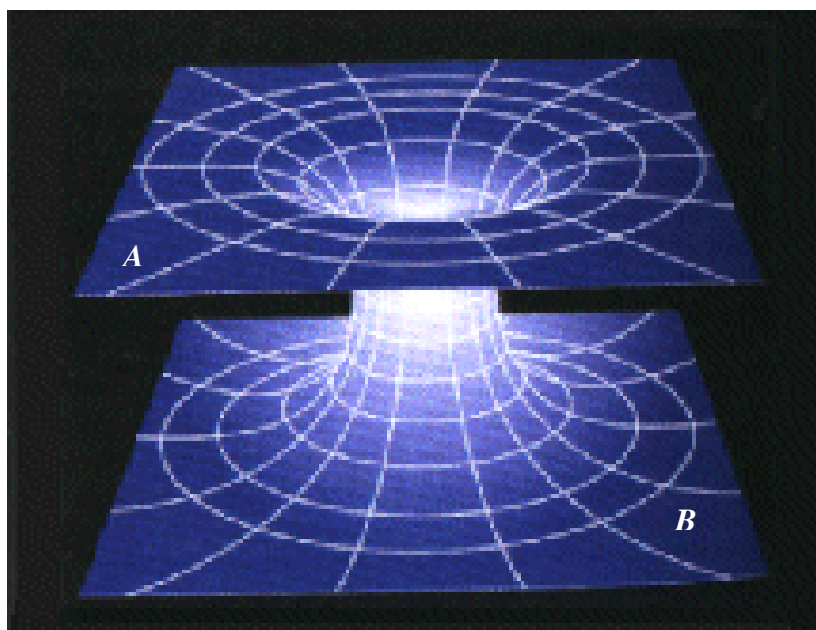
menším než  $45^\circ$  od svislé osy  $v$  (uvnitř prostoročasových světelných

kuželů). Rozbor geometrických vlastností Schwarzschildova

prostoročasu a sledování příčinných vztahů a pohybu hmotných objektů je zde proto daleko snadnější a názornější než v obyčejných

Schwarzschildových souřadnicích (srovnáme-li obr. 10.18 a 10.19b vidíme, že pohyb testovacích částic i fotonů vypadá daleko přehledněji na Kruskalově diagramu.

Velmi podivné je to, že z původního Schwarzschildova řešení obsahujícího jen jednu asymptoticky rovinnou vnější oblast  $r \rightarrow \infty$ , jeden horizont  $r = 2M$  a jednu singularitu  $r = 0$ , jsme přechodem ke Kruskalovým souřadnicím dostali prostoročas se dvěma vnějšími oblastmi, dvěma horizonty a dvěma singularitami. Vysvětlení je v tom, že prostoročas získaný přechodem ke Kruskalovým souřadnicím je **úplnou analytickou extenzí** původní Schwarzschildovy geometrie. Skutečný prostoročas  $M$ , který je řešením Einsteinových rovnic pro ostrovní sféricky symetrický případ, je rozsáhlejší varietou, než by se dalo očekávat z původního řešení ( 9.408 ) ve Schwarzschildových souřadnicích. Schwarzschildovy souřadnice jsou schopny obsáhnout jen část této úplné variety, zatímco Kruskalovy souřadnice ji obsáhnou celou.

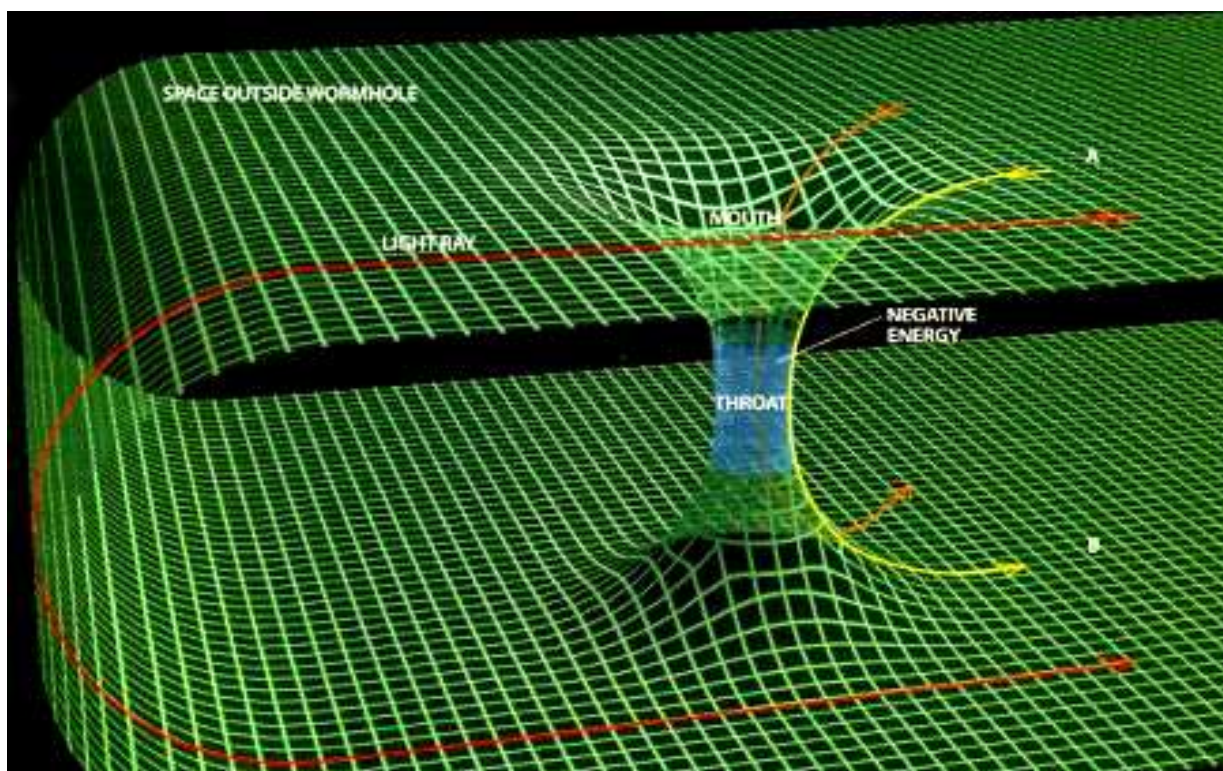


Obr. 10.20. Znázornění geometrické struktury řezu (prostorové hyperplochy)  $v = t = 0$ ,  $J = p/2$  Schwarzschildovým prostoročasem ve formě vnoření do pomocného trojrozměrného eukleidovského prostoru. Tento pomocný trojrozměrný prostor nemá fyzikální význam (je pouze prostředkem pro znázornění); význam má pouze vnitřní geometrie vnořené plochy, která ukazuje dvě asymptoticky rovinné oblasti  $A$  a  $B$  spojené Einsteinovým-Rosenovým mostem.



Jestliže oblast  $A$  na obr. 10.20 je původní vnější asymptoticky rovinnou oblastí Schwarzschildovy geometrie ("náš vesmír"), objevuje se ještě jedna zrcadlově obrácená asymptoticky rovinná oblast  $B$  na druhé straně diagramu, jakýsi "druhý vesmír". Vezmeme-li si řez Kruskalovým diagramem podél osy  $u$  (tedy řez  $t = 0$  podle obr. 10.19), vidíme, že kulové plochy  $r = \text{const.}$  s ubývajícím  $r$  nejprve normálně zmenšují svoje plochy, avšak ne k nule, ale k minimální hodnotě  $16\pi M^2$ , a potom znovu rostou, jako kdyby se rozšiřovaly do druhého asymptoticky rovinného prostoru. Názorně je tato situace zachycena na obr. 10.20, který je vnořením řezu  $t = 0$  s jedním vynechaným rozměrem do pomocného trojrozměrného prostoru. Úplná geometrie obsahuje v časovém řezu určitý "most", zvaný **Einsteinův-Rosenův most**, spojující dva různé asymptoticky rovinné vesmíry. Jak je jasně vidět z Kruskalova diagramu, Einsteinovým-Rosenovým mostem nemůže nikdo proniknout do druhého (zrcadlově obráceného) vesmíru, protože by se musel pohybovat nadsvětelnou rychlostí aby stačil uniknout singularitě. Za předpokladu obvyklé euklidovské globální topologie; při vhodné topologii by takový most mohl spojovat i dvě různá místa jednoho vícenásobně souvislého vesmíru, jak ukazuje obr. 10.21.

Obr. 10.21



Další zajímavou vlastností Schwarzschildova řešení, která je vidět z Kruskalova diagramu, je to, že v oblasti  $r < 2M$  má geometrie **dynamický charakter**. Sledujeme-li časové řezy (rovnoběžné s osou  $u$ ) Kruskalovým diagramem postupně od velkých záporných hodnot  $v$  až do velkých kladných hodnot  $v$  (tj. v postupu časové evoluce), budeme vidět zpočátku dva nesouvisející asymptoticky rovinné vesmíry, z nichž každý má svou singularitu  $r = 0$ . Jakmile řez přestane procházet dolní (minulou) singularitou, objeví se mezi oběma vnějšími oblastmi Einsteinův-Rosenův most. Tento most se bude rozšiřovat (maximální bude v řezu  $t = 0$ ) a pak zase zužovat, až nakonec při dotyku řezu s horní singularitou zanikne a opět zbudou dva nesouvisející vesmíry se svými singularitami. Lze říci, že most zanikne tak rychle, že jím žádný reálný objekt nemůže proniknout do druhého vesmíru (skončí vždy v singularitě). Geometrie Schwarzschildova řešení má v oblasti  $r < 2M$  dynamický charakter vlivem toho, že zde v důsledku výměny úloh časových a prostorových metrických komponent úlohu časové evoluce přebírá "evoluce" prostorová.

Důsledným rozbořením Schwarzschildovy geometrie se nám tak objevuje úplně jiná globální topologie, než by se dalo očekávat z "nevině vyhlížejícího" Schwarzschildova výrazu ( 9.408 ). Je na první pohled vidět, že topologie nebude eukleidovská v bodě  $r = 0$  kde je singularita; mohlo by se ale zdát, že toto je jediný rozdíl od obyčejných topologických vlastností. Úplná extenze však ukazuje zcela jinou globální topologii - dva různé asymptoticky rovinné "vesmíry" spojené "mostem", který má dynamický charakter.

Ukazuje se výhodným Kruskalův diagram ještě dále "vylepšit" zavedením konformní transformace převádějící oblasti nekonečna do konečných souřadnic. Vhodný transformační vztah bude:

$$\begin{aligned}\chi &= \operatorname{arctg}(v+u) - \operatorname{arctg}(v-u), \\ \eta &= \operatorname{arctg}(v+u) + \operatorname{arctg}(v-u).\end{aligned}\tag{ 9.444 }$$

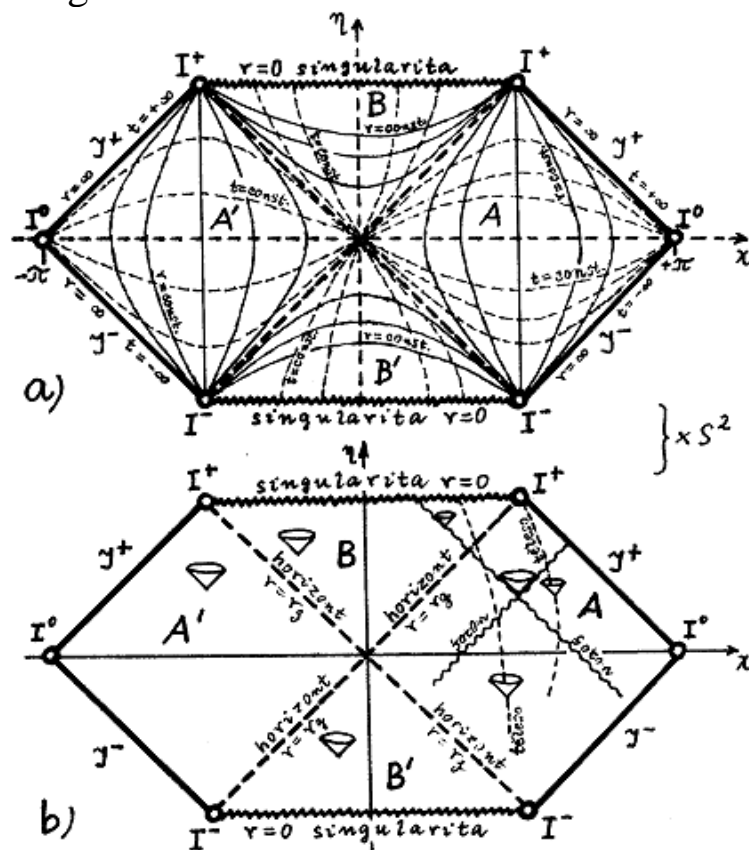
Vzniklá metrika má potom tvar

$$ds^2 = \frac{16M}{r} \frac{e^{\frac{r}{2M}}}{4 \cos \frac{2\eta + \chi}{2} \cos \frac{2\eta - \chi}{2}} (d\chi^2 - d\eta^2) + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2), \quad (9.445)$$

kde  $r(\eta, \chi)$  je dáno implicitním vztahem

$$(r - 2M) e^{\frac{r}{2M}} = \operatorname{tg} \frac{\eta + \chi}{2} \operatorname{tg} \frac{\eta - \chi}{2} \quad (9.446)$$

Příslušný **konformní Penroseův prostoročasový diagram** úplné analytické extenze Schwarzschildova řešení je znázorněn na obr. 10.22. Vlastnosti geometrie, pohyb částic a příčinné vztahy mezi jednotlivými částmi Schwarzschildova prostoročasu jsou zde vidět ještě názorněji než na Kruskalově diagramu.



**Obr.10.22. Penroseův-Kruskalův konformní prostoročasový diagram úplné extenze Schwarzschildovy geometrie.**

- a) Souřadnicové čáry ve vztahu ke Schwarzschildovým souřadnicím (hyperplochy  $r = \text{const.}$  a  $t = \text{const.}$ ).  
 b) Tvary světelných kuželů a radiální geodetiky časového a světelného typu.

Předchozí sféricky symetrický případ je možno poněkud zobecnit při zachování sférické symetrie tím, že budící těleso budeme uvažovat **elektricky nabité**. Pro zachování sférické symetrie musí být distribuce tohoto elektrického náboje též sféricky symetrická, protože gravitační pole je buzeno nejen hmotou zdrojového tělesa, ale i tenzorem energie-hybnosti elektromagnetického pole. Nesymetrické rozložení náboje by vedlo k nesymetrickému elektrickému poli, které by budilo nesymetrické gravitační pole.

Element prostoročasového intervalu bude mít opět stejný sféricky symetrický základní tvar ( 9.403 )

$$ds^2 = g_{tt} dt^2 + g_{rr} dr^2 + r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2) \quad ( 9.447 )$$

Rozdíl oproti předchozímu Schwarzschildovu řešení je nyní v tom, že vnější řešení nebude řešením Einsteinových rovnic bez pravé strany, ale pravou stranou zde bude tenzor energie-hybnosti elektromagnetického pole  $T_{ik}^{\text{elmag}}$  ( 2.197 ). V tomto případě se jedná o Coulombovské centrálně symetrické elektrostatické pole o intenzitě  $\mathbf{E} = E(r) \cdot \mathbf{e}_r$ , kde  $\mathbf{e}_r$  je jednotkový bázový vektor radiálního směru.

Protože Schwarzschildova radiální souřadnice  $r$  si zachovává ten význam, že plocha koule se středem v bodě symetrie, mající poloměr  $r$ , je rovna  $4\pi r^2$ , podle Coulombova zákona (Gaussovy věty) je  $E(r) = Q/r^2$ . Tenzor energie-hybnosti tohoto elektrického pole potom je (nediagonální složky jsou nulové)

$$T_{tt}^{\text{elmag}} = -T_{rr} = T_{\vartheta\vartheta} = T_{\varphi\varphi} = \frac{E^2(r)}{8\pi} = \frac{Q^2}{8\pi r^4} \quad ( 9.448 )$$

ten dosadíme do Einsteinových rovnic

$$R_{ik} = \frac{1}{2} g_{ik} R = 8\pi T_{ik}^{\text{elmag}} \quad ( 9.449 )$$

a pro sféricky symetrickou metriku (9.403) dostaneme podobným postupem jako při odvozování Schwarzschildova řešení opět dvě nezávislé diferenciální rovnice

$$\begin{aligned}\frac{d}{dr}g_{tt} &= \frac{1}{r}g_{rr}\left(1 + g_{rr} - \frac{Q^2}{r^2}g_{rr}\right), \\ \frac{d}{dr}g_{rr} &= -\frac{1}{r}g_{rr}\left(1 + g_{rr} - \frac{Q^2}{r^2}g_{rr}\right).\end{aligned}\tag{9.450}$$

Řešení této soustavy je

$$\begin{aligned}g_{tt} &= C_1\left(1 - \frac{C_2}{r} + \frac{Q^2}{r^2}\right), \\ g_{rr} &= C_1\left(1 - \frac{C_2}{r} + \frac{Q^2}{r^2}\right)^{-1},\end{aligned}\tag{9.451}$$

kde ze stejných důvodů jako ve Schwarzschildově případě musí být integrační konstanty  $C_1 = 1$  a  $C_2 = -2M$ . Konečný výraz pro element prostoročasového intervalu sféricky symetrického gravitačního pole buzeného sféricky symetrickým tělesem o celkové hmotnosti  $M$  a elektrickém náboji  $Q$  má tedy tvar

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2}\right)dt^2 + \frac{dr^2}{1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2}} + r^2(d\vartheta^2 + \sin^2\vartheta d\varphi^2),\tag{9.452}$$

v geometrodynamických jednotkách; v jednotkách SI je to

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2GM}{c^2r} + \frac{GQ^2}{c^4r^2}\right)c^2dt^2 + \frac{dr^2}{1 - \frac{2GM}{c^2r} + \frac{GQ^2}{c^4r^2}} + r^2(d\vartheta^2 + \sin^2\vartheta d\varphi^2).\tag{9.453}$$

Tato geometrie se nazývá **Reissnerova-Nordströmova geometrie**.



Hans Jacob Reissner (1874 – 1967)



Gunnar Nordström (1881 – 1923)

Parametr  $M$  zde má opět význam celkové **hmotnosti**, parametr  $Q$  význam celkového **elektrického náboje** měřeného vzdáleným pozorovatelem pomocí Gaussových integrálních toků vektoru  $\mathbf{E}$ , popř. pomocí analýzy pohybu nabitých testovacích částic.

Podle vzájemného poměru hodnot  $M$  a  $Q$  můžeme v Reissnerově-Nordströmově geometrii rozlišovat čtyři význačné případy lišící se globální geometrickou strukturou:

- a) Při  $Q = 0$ ,  $M \neq 0$  dostáváme Schwarzschildovu geometrii;
- b)  $0 < Q^2 < M^2$ ;
- c)  $0 > Q^2 = M^2$ ;
- d)  $Q^2 > M^2 > 0$ .

Nejprve rozebereme případ  $0 < Q^2 < M^2$ , který je fyzikálně nejzajímavější.

Reissnerova-Nordströmová metrika ( 9.452 ) je značně podobná Schwarzschildově metrice ( 9.408 ), avšak liší se tím, že výraz

$$1 - 2Mr + \frac{Q^2}{r^2} \quad ( 9.454 )$$

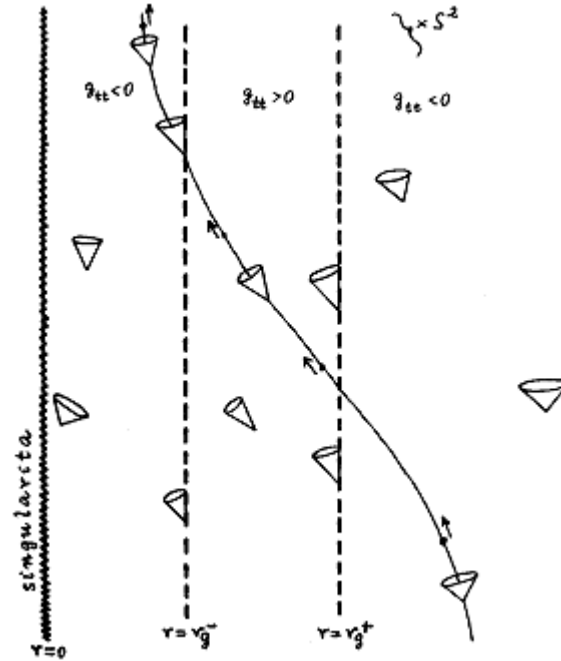
je v případě  $0 < |Q| < M$  roven nule pro dva "kořeny"  $r = r_g^+$  a  $r = r_g^-$ :

$$\begin{aligned} r_g^+ &= M + \sqrt{M^2 - Q^2}, \\ r_g^- &= M - \sqrt{M^2 - Q^2} \end{aligned} \quad (9.455)$$

V jednotkách SI jsou to hodnoty

$$\begin{aligned} r_g^+ &= \frac{G}{c^2} \left[ M + \sqrt{M^2 - Q^2} \right], \\ r_g^- &= \frac{G}{c^2} \left[ M - \sqrt{M^2 - Q^2} \right]. \end{aligned} \quad (9.456)$$

V Reissnerově-Nordströmově geometrii tedy existují **dva** "horizonty", kde metrika ( 9.452 ) není regulární - "**vnější**" **horizont**  $r = r_g^+$  a "**vnitřní**" **horizont**  $r = r_g^-$ . Vnější horizont  $r = r_g^+$  má podobný význam jako Schwarzschildova sféra ve Schwarzschildově prostoročase je to **horizont událostí**, oddělující příčinně vnitřní oblast od vnější; z ( 9.455 ) vidíme, že za přítomnosti elektrického náboje je gravitační poloměr  $r_g^+$  menší než  $r_g = 2M$  ve Schwarzschildově případě. Pod  $r = r_g^+$  jsou světelné kužely obráceny dovnitř směrem k  $r = 0$  (protože  $g_{tt} > 0$ ) a zdálo by se, že každý objekt jež se tam dostane nutně skončí v singularitě  $r = 0$ . Avšak na vnitřním horizontu  $r = r_g^-$  se světelné kužely opět začínají napřimovat (časová složka metrického tenzoru opět mění znaménko:  $g_{tt} < 0$ ) - je zde tedy možný pohyb částice tak, aby se vyhnula singularitě (obr. 10.23). Nemůže se však dostat přes vnější horizont (tj. horizont událostí) zpět do původního prostoročasu, ale nutně do "**jiného vesmíru**", který leží vzhledem k původnímu v absolutní budoucnosti (viz níže).



Obr.10.23: Kerrův prostoročasový diagram Reissnerovy-Nordströmovy geometrie (podobně bude situace vypadat i v Kerrově a Kerrově-Newmanově geometrii). Vnější horizont  $r = r_g^+$  je horizontem událostí (světelné kužely pod ním jsou obráceny dovnitř směrem k  $r = 0$ ). Pod vnitřním horizontem  $r = r_g^-$  se však světelné kužely začínají opět "napřimovat", takže světočára tělesa, které proniklo pod horizont  $r = r_g^+$ , nemusí nutně skončit v singularitě  $r = 0$ .

Singulární chování metriky ( 9.452 ) ve standardních souřadnicích na těchto horizontech je opět jen zdánlivé a může být odstraněno přechodem k vhodnějším souřadnicím podobným Kruskalovým. S pomocí modifikované souřadnice  $r^*$

$$r^* = \int \frac{dr}{1 - \frac{2M}{r} + \frac{Q^2}{r^2}} = r + \frac{(r_g^+)^2}{r_g^+ - r_g^-} \ln|r - r_g^+| - \frac{(r_g^-)^2}{r_g^+ - r_g^-} \ln|r - r_g^-|. \quad (9.457)$$

podobně jako při extenzi Schwarzschildovy geometrie zavedeme izotropní souřadnice

$$\begin{aligned} p &= t + r^*, \\ q &= t - r^*. \end{aligned} \quad (9.458)$$



Ty potom za účelem odstranění singulárního koeficientu v metrice dále přetransformujeme:

$$p' = -\exp\left[\frac{r_g^+ - r_g^-}{2(r_g^+)^2}(t - r^*)\right],$$

$$q' = -\exp\left[\frac{r_g^+ - r_g^-}{2(r_g^+)^2}(t + r^*)\right].$$
( 9.459 )

Po zavedení nových časových a prostorových souřadnic

$$u = \frac{q' - p'}{2},$$

$$v = \frac{q' + p'}{2},$$
( 9.460 )

má Reissnerova-Nordströmova metrika tvar

$$ds^2 = \frac{4(r_g^+)^4}{r^2} \frac{(r - r_g^+)(r - r_g^-)}{(r_g^+ - r_g^-)^2} \exp\left(-r \frac{r_g^+ - r_g^-}{(r_g^+)^2}\right) (du^2 - dv^2) -$$

$$- r^2 (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2).$$
( 9.461 )

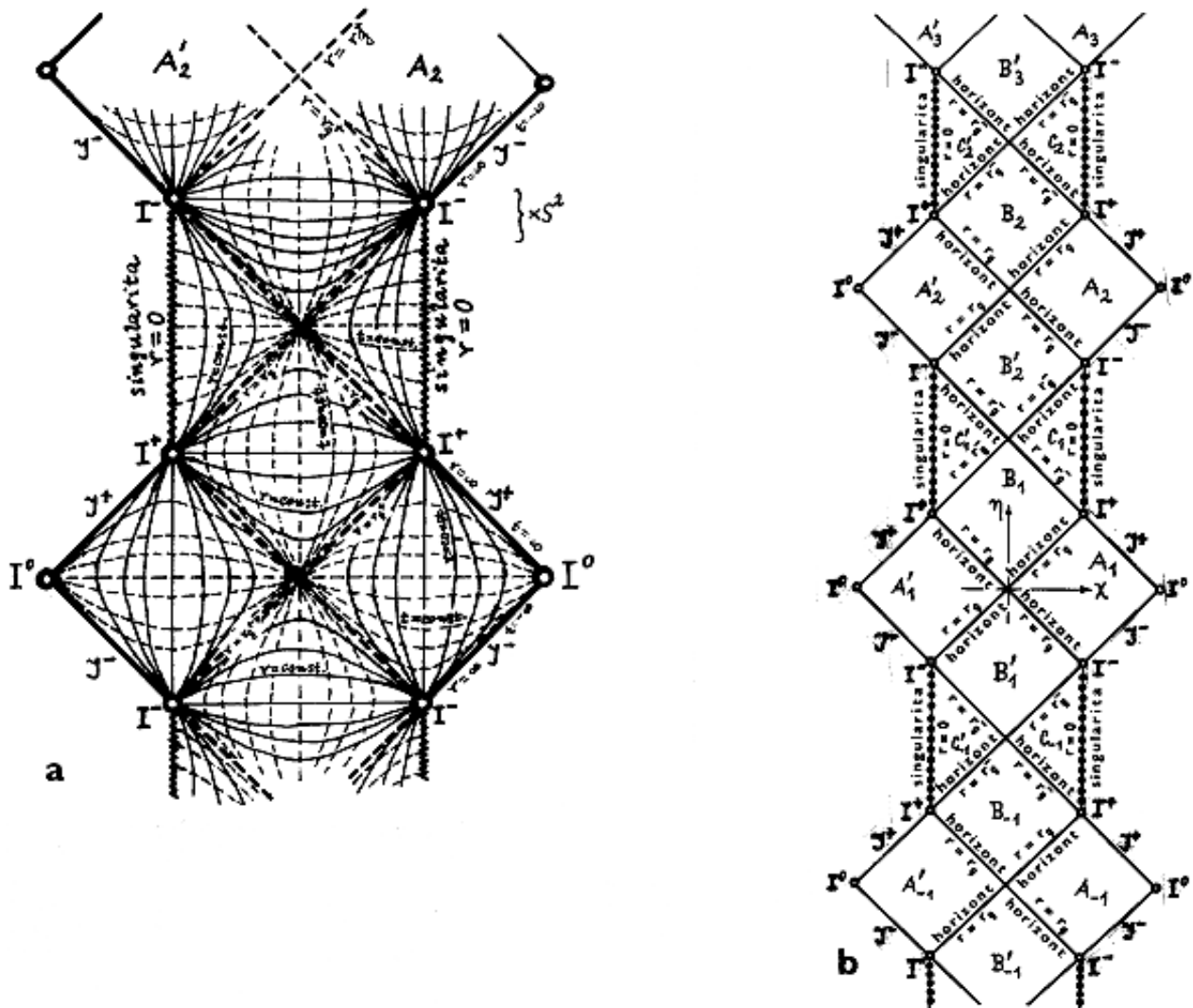
Po **konformní transformaci** za účelem názornější prezentace **asymptotické struktury** bude Reissnerova-Nordströmova geometrie popsána intervalem

$$ds^2 = F(\chi, \eta) (d\chi^2 - d\eta^2) + r^2(\chi, \eta) (d\vartheta^2 + \sin^2 \vartheta d\varphi^2)$$
( 9.462 )

kde

$$F(\chi, \eta) = \frac{\frac{(r_g^+)^2 (r - r_g^+)(r - r_g^-)}{r^2 (r_g^+ + r_g^-)^2} \exp\left(-r \frac{r_g^+ - r_g^-}{(r_g^+)^2}\right)}{\cos^2 \frac{\chi + \eta}{2} \cos^2 \frac{\chi - \eta}{2}} \quad (9.463)$$

Prostorový diagram konformního obrazu Reissnerovy-Nordströmovy geometrie pro fyzikálně nejpravděpodobnější případ  $0 < |Q| < M$  je na obr. 10.24. Geometrická struktura této úplné extenze Reissnerova-Nordströmova řešení je neočekávaně složitá. Objevuje se zde nekonečné množství periodicky se opakujících "vesmírů" (samostatných asymptoticky rovinných vnějších oblastí  $A_{\dots,-1,1,2,\dots}$ ), horizontů a singularit. Oproti Schwarzschildově geometrii (obr. 10.22), kde singularita jsou prostorového typu (a tedy pro každý objekt v oblasti  $B$  nevyhnutelné), jsou **singularity** Reissnerovy-Nordströmovy geometrie podle obr. 10.24 **časového typu** - jsou takříkajíc "časově omezené" a lze se jim vyhnout.



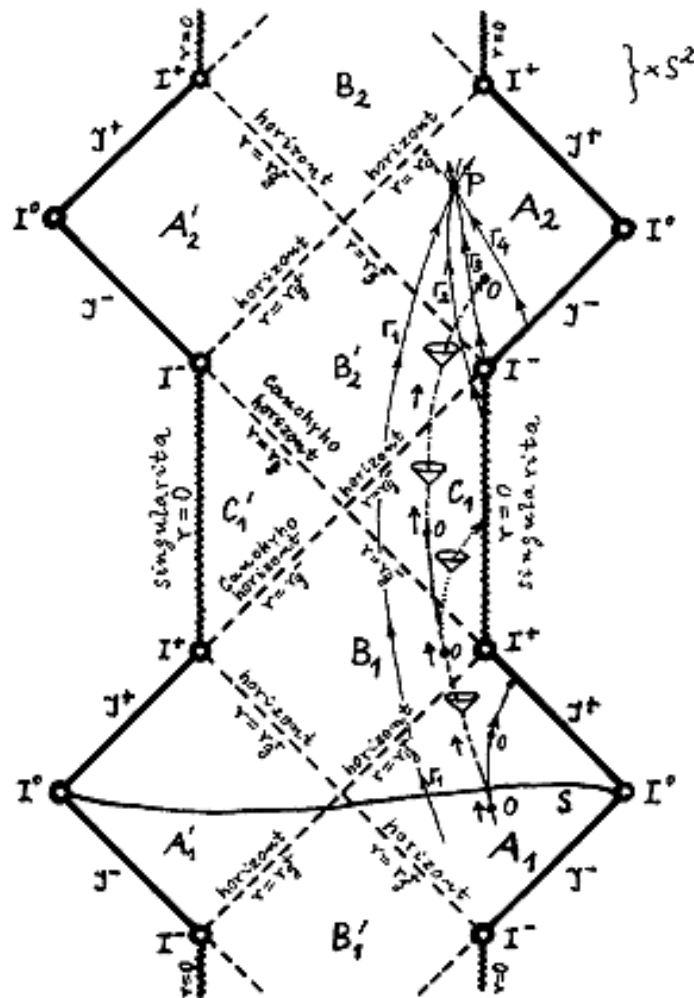
Obr.10.24. Penroseův konformní prostoročasový diagram úplné extenze Reissnerovy-Nordströmovy geometrie pro případ  $Q^2 < M^2$ .

a) Souřadnicová síť - hyperplochy  $r = \text{const.}$  a  $t = \text{const.}$

b) Globální geometrická struktura - nekonečně mnoho periodicky se opakujících vnějších oblastí ("vesmírů")  $A_{\dots,-1,1,2,\dots}$ , vnitřních oblastí  $B_{\dots,-1,1,2,\dots}$  a  $C_{\dots,-1,1,2,\dots}$ , horizontů a singularit.

Sledujme osud pozorovatele (jak je naznačeno na obr. 10.25), který při svém pohybu Reissnerovým-Nordströmovým prostoročasem pronikl pod vnější horizont  $r = r_g^+$ . Protože se dostal pod horizont událostí, nemůže se již nijak vrátit do původního vnějšího prostoru (oblasti  $A_1$ ) a má v podstatě dvě možnosti. Jednak doletět do singularity, kde jeho světočára (a tedy i jeho existence v rámci uvažované variety) definitivně skončí. To však není (na rozdíl od Schwarzschildova prostoročasu) nevyhnutelné, pozorovatel se může **singularitě vyhnout** a pohybovat se dále, až se objeví v druhé asymptoticky rovinné oblasti  $A_2$ , v **druhém**

"vesmíru", který leží vzhledem k výchozímu  $A_1$  v absolutní budoucnosti.



Obr.10.25. Pozorovatel  $O$  pohybující se ve vnější asymptoticky rovinné oblasti  $A_1$  Reissnerova- Nordströмова prostoročasu má tři možnosti.

Bud' to se bude neustále pohybovat v  $A_1$  (plná čára), takže se v limitě dostane do  $I^+$  nebo do  $A^+$ . Pokud však pozorovatel pronikne pod horizont  $r = r_g^+$  (čárkovaná trajektorie) do vnitřní oblasti  $B_1$ , projde i horizontem vnitřním  $r = r_g^-$  do oblasti  $C_1$ , kde má dvě možnosti: buď narazí na singularitu (tečkovaná dráha) kde je pohlcen a zničen, nebo se může vyhnout singularitě (čerchovaná trajektorie) a dostane se do další asymptoticky rovinné vnější oblasti  $A_2$ . Situace v tomto dalším "vesmíru"  $A_2$  přitom není zcela určena počátečními podmínkami na Cauchyho hyperploše  $S$ , jak je vidět např. v bodě  $p \rightarrow A_2$ .

Vidíme tedy, že reálný hmotný objekt pohybující se v Reissnerově- Nordströmově geometrii v rámci světelného kuželu může v principu cestovat mezi jednotlivými vesmíry, aniž by musel projít singularitou (na rozdíl od Schwarzschildovy geometrie, kde Einsteinovým- Rosenovým mostem by se dalo projít pouze nadsvětelnou rychlostí). Je

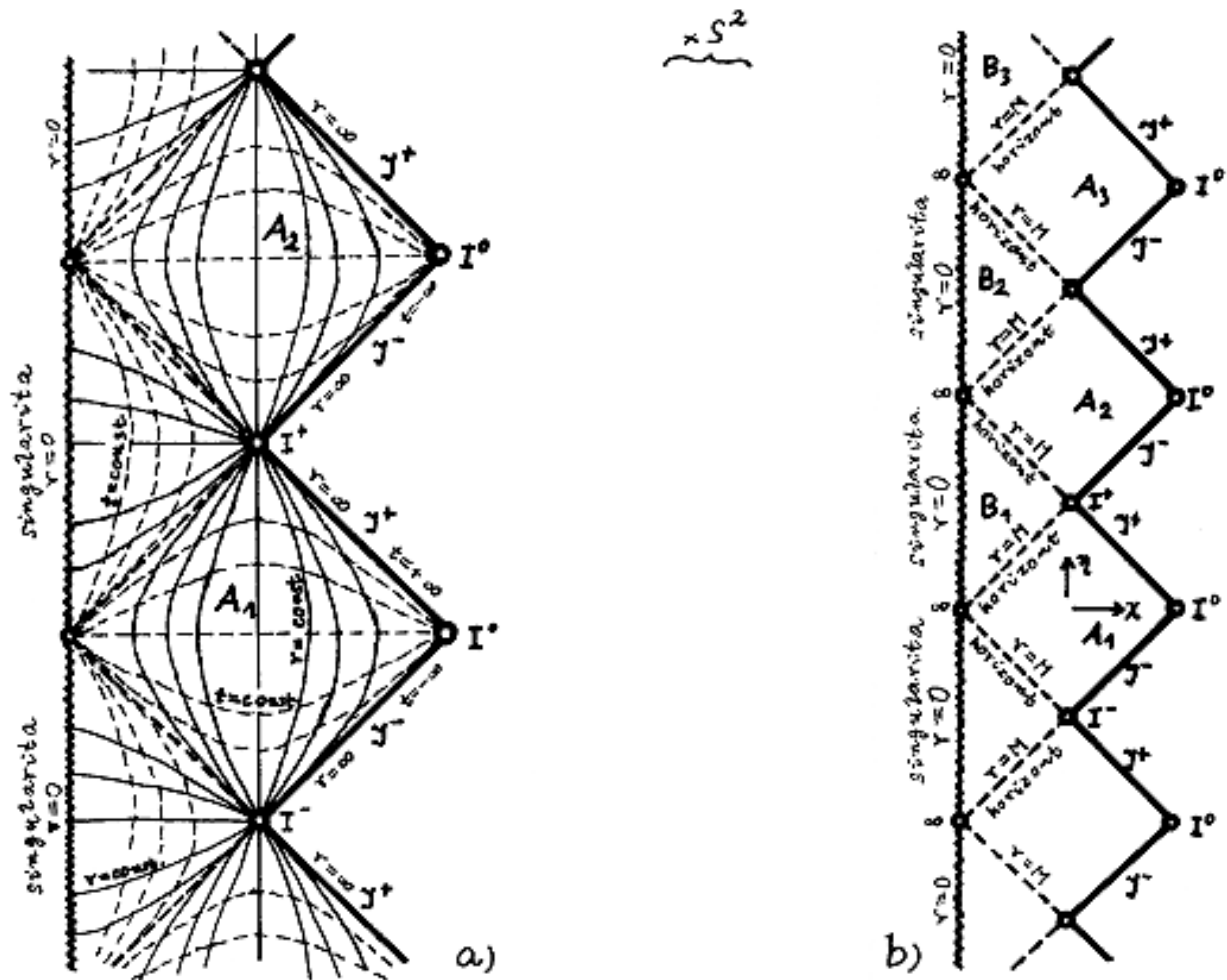
třeba zdůraznit, že toto cestování mezi různými vesmíry je možné pouze teoreticky v krajně idealizovaném modelu asymptoticky rovinného vesmíru bez jiných těles a polí s přesnou Reissnerovou-Nordströmovou nebo Kerrovou geometrií.

Podíváme-li se na **kauzální vztahy** tohoto druhého vesmíru vzhledem k původnímu, vidíme, že vnitřní horizonty  $r = r_g^-$  jsou zároveň Cauchyovými horizonty. Vezmeme-li si nějakou událost  $P$  v oblasti  $A_2$  a sledujeme, čím může být principiálně ovlivňována, vidíme, že sice může být ovlivňována geodetikami (např.  $G_1$ ) přicházejícími z oblasti  $A_1$  (a danými tedy počátečními podmínkami na vhodné Cauchyho hyperploše v  $A_1$ ), avšak mohou tam rovněž "nekontrolovaně" přicházet nové informace geodetikami (např.  $G_2, G_3, G_4$ ) z oblastí nekonečna minulosti  $\Gamma, \dot{A}^-$  a ze singularity, která je odtud "vidět". Tyto informace mohou **narušit** každou předpověď učiněnou na základě počátečních podmínek v oblasti  $A_1$ . Pozorovatel se tedy vynořil v oblasti prostoročasu (jiném "vesmíru"), který není jednoznačně určen počátečními podmínkami na žádné Cauchyho hyperploše v původní oblasti  $A_1$ .

Zkonfrontujme to s deterministickou ideou klasické (nekvantové) fyziky, kterou zformuloval již Laplace: Kdybychom v určitém okamžiku zjistili všechny fyzikální veličiny ve všech místech vesmíru (tj. okamžitý stav vesmíru - úplný soubor počátečních podmínek na Cauchyho hyperploše) a znali fyzikální zákony, kterými se všechny tyto veličiny řídí, mohli bychom neomezeně **předpovídat evoluci vesmíru**, tj. jeho stav kdykoliv v budoucnosti (nebo i minulosti). V úplné extenzi Reissnerovy-Nordströmovy geometrie však toto není splněno, existují zde Cauchyho horizonty (a tedy neexistují globální Cauchyovy hyperplochy) a jsou zde proto oblasti, jejichž stav není jednoznačně určen žádným souborem počátečních podmínek. Pouze ve vnější asymptoticky rovinné oblasti lze jednoznačně "předvídat" budoucnost z parciálních Cauchyho hyperploch. Tedy i v klasické fyzice (na níž je Reissnerova-Nordströmova geometrie jakožto řešení Einsteinových rovnic založena) může být možnost předvídat budoucnost omezena nejen praktickou nedostupností fyzikálních veličin ve všech místech vesmíru v určitém časovém okamžiku, ale principiálně též globální geometricko-topologickou strukturou prostoročasu.

Na obr. 10.25 každý bod oblasti  $B$  mezi  $r_g^+$  a  $r_g^-$  (kde plochy  $r = \text{const.}$  jsou prostorového typu) reprezentuje dvojrozměrnou kulovou plochu,

kteřá je uzavřenou pohlcující plochou. Pozorovatel  $O$  při svém průchodu plochou  $r = r_g^-$  (obr. 10.25) uvidí celou další historii asymptoticky rovinné vnější oblasti  $A_1$ , kterou opouští, za konečný čas. Každé těleso z této oblasti proto bude vidět s neomezeně narůstajícím fialovým posuvem. Z toho plyne, že Cauchyho horizont  $r = r_g^-$  je nestabilní vůči perturbacím počátečních podmínek na výchozí prostorové hyperploše  $S$ . Je jasné, že kosmologické otázky evoluce vesmíru  $A_1$ , který pozorovatel opouští, budou pro něj velmi důležité. Jestliže vesmír  $A_1$  bude v budoucnu třeba kolabovat, nevyhne se tomuto osudu ani pozorovatel  $O$ ; na horizontu  $r = r_g^-$  se setká s nekonečnou hustotou hmoty~energie, tedy nakonec vlastně se singularitou.

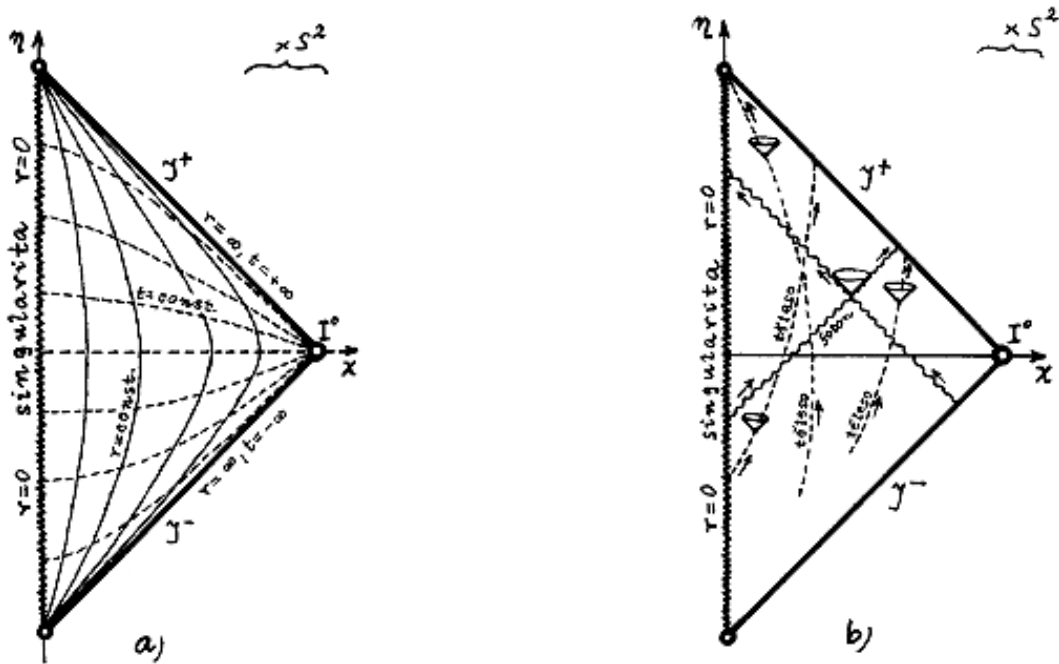


**Obr. 10.26.** Penroseův konformní prostoročasový diagram úplné extenze Reissnerovy-Nordströmovy geometrie pro případ  $Q^2 = M^2$ .

a) Hyperplochy (souřadnicové čáry)  $r = \text{const.}$  a  $t = \text{const.}$

b) Globální geometrická struktura - nekonečně mnoho periodicky se opakujících vnějších oblastí  $A$  a vnitřních oblastí  $B$ .

Pro případ  $Q = M$  má příslušný konformní prostoročasový diagram úplné extenze Reissnerovy-Nordströmovy geometrie tvar znázorněný na obr. 10.26 Je vidět opět nekonečně mnoho periodicky se opakujících "vnějších" oblastí  $A$  ( $M < r < \infty$ ) a vnitřních oblastí  $B$  ( $0 < r < M$ ). Vnější a vnitřní horizonty splývají ( $r_g^- = r_g^+ = M$ ), jedná se o speciální případ **extrémní černé díry**.



**Obr.10.27. Penroseův konformní prostoročasový diagram Reissnerovy-Nordströmovy geometrie v případě  $Q^2 > M^2$ .**

a) Souřadnicové čáry - hyperplochy  $r = \text{const.}$  a  $t = \text{const.}$

b) Globální geometrická struktura - tvary světelných kuželů a radiální pohyb těles a fotonů. Nejsou zde horizonty, singularita  $r = 0$  je "nahá" (je viditelná z kteréhokoliv světobodu).

V případě  $Q^2 > M^2$  není třeba žádnou extenzi hledat, protože prostoročas je nerozšiřitelný již v původních souřadnicích; je všude regulární kromě bodu  $r = 0$  – neodstranitelné fyzikální singularity prostoročasu.

Konformní prostoročasový diagram pro tento případ je na obr. 10.27. Horizont událostí zde není, jedná se o **nahou singularitu**.

Jestliže těleso, které je zdrojem gravitačního pole **rotuje**, nebude již buzené vnější gravitační pole centrálně symetrické, ale může být pouze **osově symetrické** (pokud je distribuce hmoty-energie v rotujícím tělese symetrická vzhledem k ose rotace). Přesné řešení Einsteinových rovnic (ve vakuu) pro takový axiálně symetrický případ našel R. Kerr v

r.1963; toto řešení bylo potom E. Newmanem zobecněno na případ elektrického náboje.

**Kerrova geometrie** je zobecněním Schwarzschildovy geometrie zhruba řečeno v tom smyslu, že Schwarzschildova geometrie je "kulová", zatímco Kerrova geometrie je obecně eliptická. V tzv. Boyerových-Lindquistových souřadnicích (které jsou eliptickým zobecněním Schwarzschildových souřadnic) má prostoročasový element Kerrovy geometrie tvar

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2Mr}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}\right) dt^2 + \frac{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}{r^2 - 2Mr + a^2} dr^2 + (r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta) d\vartheta^2 + \left(r^2 + a^2 + \frac{2Mra^2}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} \sin^2 \vartheta\right) \sin^2 \vartheta d\varphi^2 + \frac{4Mra}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} \sin^2 \vartheta d\varphi dt, \quad (9.464)$$

kde  $M$  je celková hmotnost (hmotnostní parametr),  $a = J/M$  je "specifický moment hybnosti" - celkový rotační moment hybnosti  $J$  dělený celkovou hmotností  $M$ .



Charles P. Boyer (1942)



Anders Linquist (1946)

Z výrazu pro prostoročasový element ( 9.464 ) je patrné (a potvrzuje to výpočet složek tenzoru křivosti  $R^i_{klm}$  a jeho skalárního invariantu), že Kerrova geometrie má **fyzikální singularitu** danou vztahem

$$r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta = 0. \quad (9.465)$$



Není to však bodová singularita jako ve Schwarzschildově řešení, ale **prstencová singularita**, která má v rovině kolmé k ose rotace tvar kružnice s poloměrem  $a$ .

Podobně jako v Reissnerově-Nordströmově geometrii, jsou i zde tři vyznačné speciální případy lišící se globální geometrickou strukturou prostoročasu:  $a^2 < M^2$ ,  $a^2 = M^2$  a  $a^2 > M^2$ .

Kerrova geometrie má obzvláštní důležitost pro případ  $M^2 > a^2$ , kdy popisuje vnější pole **stacionárních rotujících objektů**, především **černých děr**. Pro rotující černou díru je Kerrova geometrie přesným vakuovým řešením Einsteinových rovnic. Mimo černých děr však nalezení materiálního zdroje přesné Kerrovy geometrie, vedoucí podle Einsteinových rovnic k plynulému přechodu vnitřní metriky k vnější Kerrově metrice, není nikterak snadné. Tvar takového elipsoidního rotujícího zdroje a distribuce hmoty v něm musí splňovat určité velmi speciální podmínky. Kolem rotujících materiálních těles (planet, hvězd, galaxií) je tedy gravitační pole jen přibližně Kerrovské. Když R. Kerr příslušné řešení odvodil, jistě netušil, jak se toto "algebraicky speciální" řešení ukáže důležitým a obecným; ve světle teorému "černá díra nemá vlasy" bude každá stacionární nenabitá černá díra mít Kerrovu geometrii prostoročasu.

V uvažovaném případě  $a^2 < M^2$  existují dvě hodnoty  $r$ , pro něž je ve jmenovateli prostorové části metriky v ( 9.464 )  $r^2 - 2Mr + a^2$  rovno nule:

$$\begin{aligned} r_g^+ &= M + \sqrt{M^2 - a^2}, \\ r_g^- &= M - \sqrt{M^2 - a^2}. \end{aligned} \tag{ 9.466 }$$

Jsou zde tedy opět (podobně jako v Reissnerově-Nordströmově geometrii) přítomny dva horizonty - **vnější horizont** událostí  $r = r_g^+$  a **vnitřní horizont**  $r = r_g^-$  (který je Cauchyovým horizontem), na nichž je metrika ( 9.464 ) pseudosingulární. Každý objekt potřebuje k dosažení horizontu nekonečně dlouhý souřadnicový čas (avšak konečný interval vlastního času) a navíc též nekonečný úhel ( $\varphi \rightarrow \infty$ ) - vlivem strhávání

inerciálních soustav momentem hybnosti musí vykonat nekonečně mnoho oběhů kolem horizontu.

K odstranění této souřadnicové pseudosingularity (tj. k analytickému prodloužení metriky přes tyto plochy) se používá přechodu ke Kerrovým souřadnicím  $(v_+, r, \vartheta, \varphi_+)$  transformací

$$dv_+ = dt + \frac{r^2 + a^2}{r - 2Mr + a^2} dr, \quad (9.467)$$

$$d\tilde{\varphi}_+ = d\varphi + \frac{a}{r^2 - 2Mr + a^2} dr.$$

Tato transformace provádí nekonečné "stlačení" souřadnicového času  $t$  a nekonečné "rozkroucení" úhlové souřadnice  $\vartheta$  v okolí horizontu. Metrika (9.464) pak má v Kerrových souřadnicích tvar

$$ds^2 = -\left(1 - \frac{2Mr}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}\right) dv_+^2 + 2drdv_+^2 + (r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta) d\vartheta^2 + \frac{(r^2 + a^2) - a^2(r^2 - 2Mr + a^2) \sin^2 \vartheta}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} \sin^2 \vartheta d\tilde{\varphi}_+^2 - \frac{4Mr a \sin^2 \vartheta}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} dv_+ d\tilde{\varphi}_+, \quad (9.468)$$

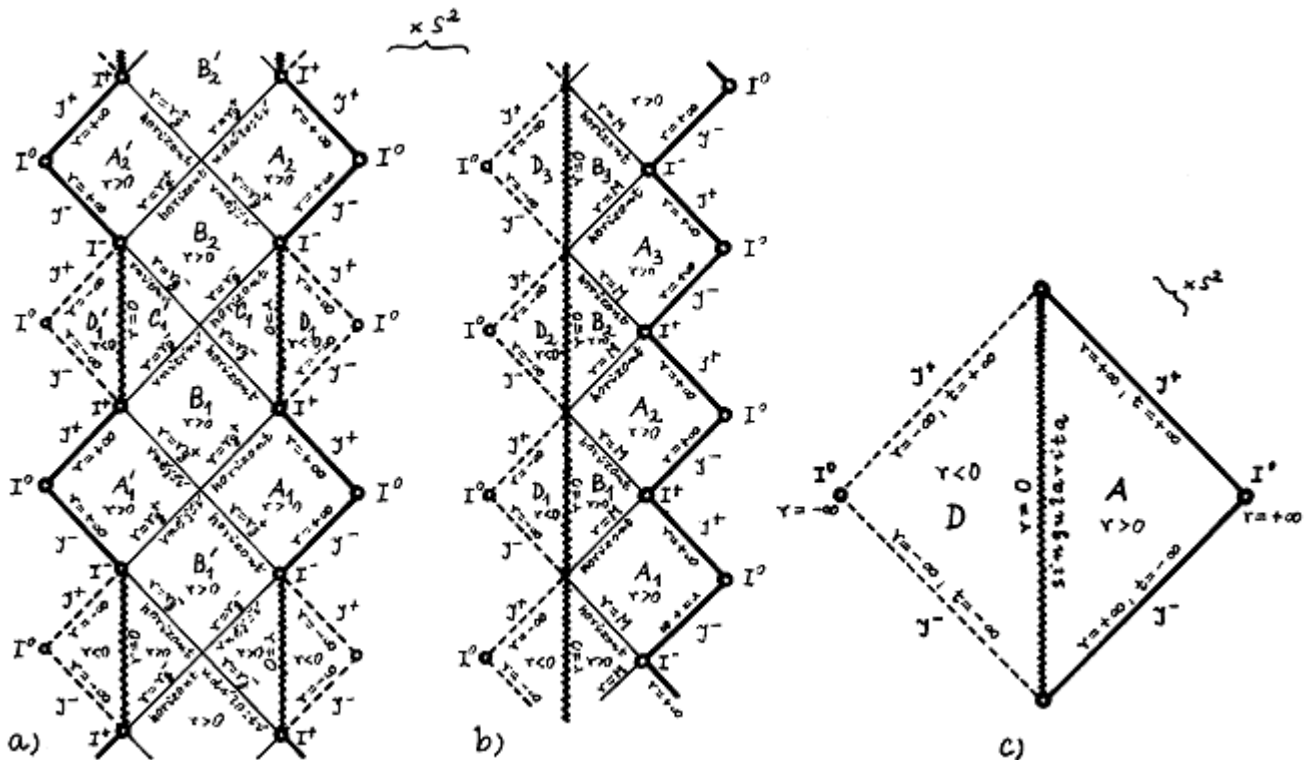
který je již analytický na  $r = r_g^+$  a  $r = r_g^-$ . **Úplná analytická extenze** se získá kombinací této metriky v souřadnicích  $(v_+, r, \vartheta, \varphi_+)$  a analogické metriky v souřadnicích  $(v_-, r, \vartheta, \varphi_-)$  daných transformací

$$dv_- = dt - \frac{r^2 + a^2}{r - 2Mr + a^2} dr, \quad (9.469)$$

$$d\tilde{\varphi}_- = d\varphi - \frac{a}{r^2 - 2Mr + a^2} dr.$$

**Konformní prostoročasový diagram** této úplné extenze Kerrovy geometrie je na obr. 10.28a. Globální struktura je zde podobná struktuře Reissnerova-Nordströmova prostoročasu, poněkud odlišná je však povaha skutečné singularity  $r = 0$ . Ukazuje se, že v Kerrově

prostorově má tato singularita **prstencovou strukturu** a je možno přes ni extrapolovat geometrii do záporných hodnot radiální souřadnice  $r$ .

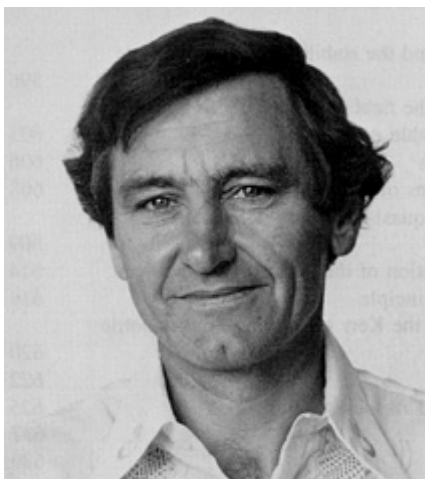


Obr.10.28. Konformní prostorově časový diagram úplné extenze Kerrovy geometrie podél osy symetrie.

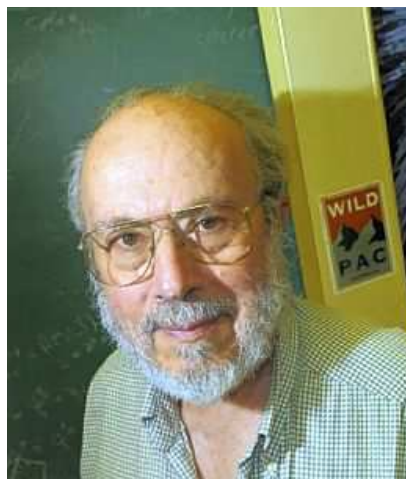
a) Příklad  $M^2 > a^2 > 0$ . b) Příklad  $M^2 = a^2$  (extrémní Kerrova geometrie). c) Příklad  $a^2 > M^2$  (Kerrova nahá singularita).

V případě  $M^2 = a^2$  je  $r_g^+ = r_g^- = M$ , vnitřní a vnější horizont spolu splývají. Úplná extenze této metriky znázorněná na obr. 10.28b má opět podobnou strukturu jako Reissnerova-Nordströmova geometrie při  $M^2 = Q^2$  s tím rozdílem, že je možné analytické prodloužení přes prstencovou singularitu do záporných  $r$ . Kerrova metrika v tomto případě popisuje prostorově časovou geometrii **extrémní** Kerrovy černé díry.

Pro  $a^2 > M^2$  je metrika ( 9.464 ) singulární pouze pro  $r = 0$ , což je skutečná singularita s prstencovou strukturou. Přes vnitřek této prstencové singularity lze řešení analyticky prodloužit do záporných hodnot  $r$  (obr. 10.28c). Žádný horizont zde není a singularita proto může oboustranně "komunikovat" s celým okolním prostorově časem - jedná se o **Kerrovu nahou singularitu**.



Roy Patrick Kerr (1934)



Ezra Ted Newman (1929)

Další zobecnění dostaneme, jestliže budeme uvažovat přítomnost osově symetrického elektromagnetického pole, tj. rotující axiálně symetrický zdroj bude mít **elektrický náboj**, který je rovněž axiálně symetricky rozložen. Geometrie prostoročasu kolem takového objektu se nazývá **Kerrova-Newmanova geometrie**; je to fakticky zkombinovaná Kerrova a Reissnerova-Nordströmova geometrie. Element prostoročasového intervalu (v Boyerových-Lindquistových souřadnicích) má tvar

$$\begin{aligned}
 ds^2 = & - \left( 1 - \frac{2Mr - Q^2}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} \right) dt^2 + \frac{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta}{r^2 - 2Mr + a^2 + Q^2} dr^2 + \\
 & + \frac{\sin^2 \vartheta}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} \left[ a^2 (r^2 - 2Mr + a^2 + Q^2) \sin^2 \vartheta + (r^2 + a^2)^2 \right] d\varphi^2 + \\
 & + \frac{2a \sin^2 \vartheta}{r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta} (Q^2 - 2Mr) d\varphi dt,
 \end{aligned}
 \tag{9.470}$$

kde  $Q$  je celkový elektrický náboj měřený vzdáleným pozorovatelem (buď pomocí toku vektoru elektrické intenzity  $\mathbf{E}$  uzavřenou plochou, nebo pomocí analýzy trajektorií nabitých testovacích částic). Stejně jako u Kerrova řešení, je i zde geometrie prostoročasu **stacionární a axiálně symetrická**. **Vnější horizont**  $r = r_g^+$  (horizont událostí) a **vnitřní horizont**  $r = r_g^-$  (Cauchyho horizont) mají poloměry

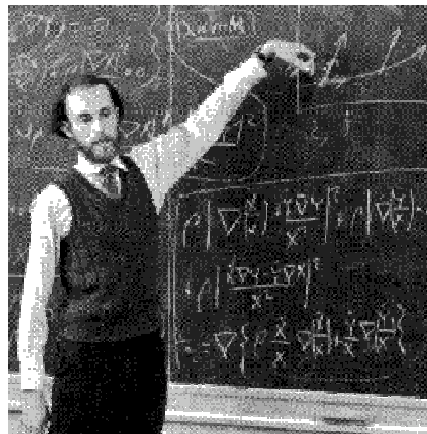
$$r_g^+ = M + \sqrt{M^2 - \frac{J^2}{M^2} - Q^2},$$

$$r_g^- = M - \sqrt{M^2 - \frac{J^2}{M^2} - Q^2}.$$
( 9.471 )

Globální geometrická struktura Kerrova-Newmanova prostoročasu je analogická jako u výše popsané Kerrovy geometrie. Jsou zde opět tři speciální případy:

$a^2 + Q^2 < M^2$  (černá díra),  
 $a^2 + Q^2 = M^2$  (extrémní Kerrova-Newmanova geometrie),  
 $a^2 + Q^2 > M^2$  (nahá singularita).

Carter ukázal, že v okolí prstencové singularity je oblast, v níž  $g_{jj} < 0$ ; zde axiální Killingův vektor  $\frac{\partial}{\partial \varphi}$  nabývá časový charakter, takže se zde objevují uzavřené světočáry časového typu (např. kružnice  $t = \text{const}$ ,  $r = \text{const}$ ,  $J = \text{const}$ ). V těchto oblastech kolem singularity tedy může dojít k **porušení kauzality**.



Brandon Carter (1942)

Velký význam Kerrovy-Newmanovy geometrie spočívá v tom, že je nejjobecnějším řešením pro stacionární axiálně symetrický asymptoticky rovinný prostoročas který má horizont událostí, tedy **nejjobecnějším řešením popisujícím černou díru** - v duchu teorému "černá díra nemá vlasy".

Pohyb testovacích částic (obecně nabitých) v obecném Kerrově-Newmanově prostoročase je podstatně komplikovanější než ve Schwarzschildově geometrii. I ve speciálním případě, když pohyb se bude dít jen v ekvatoriální rovině a nebudeme uvažovat elektrický náboj, bude trajektorie testovací částice v blízkosti horizontu (zvláště v ergosféře) rozhodujícím způsobem záviset mimo jiné na tom, zda moment hybnosti částice má souhlasný nebo opačný směr vzhledem k momentu hybnosti  $\mathbf{J}$  (tj. pohybuje-li se částice ve směru nebo proti směru rotace zdroje Kerrova pole).

Pohyb nabitých testovacích částic v důsledku působení elektromagnetických sil již obecně nebude probíhat po geodetikách; na pravé straně rovnice geodetiky bude místo nuly figurovat Lorentzova síla:

$$\frac{d^2 x^i}{d\lambda^2} + \Gamma_{kl}^i \frac{dx^k}{d\lambda} \frac{dx^l}{d\lambda} = \frac{q}{m} F_k^i \frac{dx^k}{d\lambda} \quad (9.472)$$

kde  $q$  je elektrický náboj testovací částice a  $F_{ik}$  je tenzor elektromagnetického pole spolupůsobícího jako zdroj dané Kerrově-Newmanovy geometrie.

Analýza pohybu testovacích částic v Kerrově-Newmanově poli se většinou provádí nikoli ze základní rovnice (9.472), ale pomocí jí ekvivalentních Hamiltonových-Jacobiho rovnic, z nichž se snadněji na základě symetrie stanovují integrály pohybu. Výsledné rovnice pohybu testovací částice s nábojem  $q$ , klidovou hmotností  $m_0$ , energií  $E$  vzhledem k nekonečnu, axiální složkou momentu hybnosti  $L_j$  a složkou  $p_j$  hybnosti odvodil Carter:

$$\begin{aligned} (r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta) \frac{dr}{d\lambda} = & \left\{ \left[ (r^2 + a^2) E - L_\varphi a - qQr \right]^2 - (r^2 - 2Mr + a^2 + Q^2) \cdot \right. \\ & \left. \left[ m_0^2 r + (L_\varphi - aE)^2 + p_\vartheta^2 + \left( a^2 (m_0^2 - E^2) + \frac{L_\varphi^2}{\sin^2 \vartheta} \right) \cos^2 \vartheta \right] \right\}^{\frac{1}{2}}, \end{aligned} \quad (9.473)$$

$$\begin{aligned}
(r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta) \frac{d\vartheta}{d\lambda} &= P_\vartheta, \\
(r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta) \frac{d\varphi}{d\lambda} &= -aE - \frac{L_\varphi}{\sin^2 \vartheta} + \frac{(r^2 + a^2)E - L_\varphi - qQr}{r - 2Mr + a^2 + Q^2}, \\
(r^2 + a^2 \cos^2 \vartheta) \frac{dt}{d\lambda} &= -a(aE \sin^2 \vartheta - L_\varphi) + (r^2 + a^2) \frac{(r^2 + a^2)E - L_\varphi - qQr}{r^2 - 2Mr + a^2 + Q^2}.
\end{aligned}
\tag{9.474}$$

Jelikož gravitační i elektromagnetické pole je stacionární a axiálně symetrické (tj. jak složky metriky  $g_{ik}$ , tak čtyřpotenciál  $A_k$  nezávisí na  $t$  a na  $\varphi$ ), budou při pohybu testovací částice následující veličiny konstantami (integrály) pohybu: energie  $E$  vzhledem k nekonečnu, axiální složka  $L_\varphi$  momentu hybnosti vzhledem k ose symetrie, elektrický náboj  $q$  částice a její klidová hmotnost  $m_0$  (která v každém bodě trajektorie souvisí se čtyřhybností částice vztahem

$$m_0 = \sqrt{-g^{ik} p_i p_k}. \tag{9.475}$$

Další integrál pohybu, který neplyne z uvedených symetrií, našel Carter:

$$C = P_\vartheta^2 + a^2 (m^2 - E^2) + \frac{L_\varphi^2 \cos^2 \vartheta}{\sin^2 \vartheta}, \tag{9.476}$$

protože tuto veličinu v dalším nebudeme potřebovat, do rovnic pohybu (9.474) jsme ji nezavedli.

Teorémy zmíněné v předchozím odstavci předpovídají existenci singularit v řadě fyzikálně reálných situací. Mnohá přesná řešení Einsteinových rovnic mají singularity. Singularity uvnitř černých děr mají tu důležitou vlastnost, že jsou obklopeny horizontem událostí, který je brání "vidět" a znemožňuje jakékoliv ovlivňování ostatního vesmíru danou singularitou.

Vzniká otázka, zda mohou existovat "**nahé**" ("obnažené") **singularity bez horizontu**. Například formálním položením  $Q^2 + J^2/M^2 > M^2$  ve

výrazu ( 9.464 ) pro Kerrovu-Newmanovu geometrii dostaneme tzv. Kerrovu nahou singularitu bez horizontu.

Podle dnešních poznatků je vysoce pravděpodobné, že taková nahá singularita vzniknout nemůže, každá singularita je "oblečena" do horizontu, což R. Penrose metaforicky nazval **principem kosmické cenzury** (uvádíme zde jeho stručné znění):

V původně nesingulárním (tj. vyvíjejícím se z nesingulárních počátečních podmínek na vhodné Cauchyho hyperploše podle zákonů OTR) asymptoticky rovinném prostoročase  $M$  se neobjeví žádná prostoročasná singularita, která by byla vidět z nekonečna - každá singularita, jež zde v průběhu evoluce vznikne (např. gravitačním kolapsem), bude **obklopena horizontem událostí**.

Teorém se podařilo plně dokázat až koncem 80. let minulého století pro případ extrémní Kerrový černé díry. Pod tímto důkazem jsou podepsáni především Bill Press, Steven Detweiler, Subrahmanyan Chandrasekhar, Saul Teukolsky, Bernard Whiting, James Ipser, James Hartle, Dan Wilkins a Werner Israel. Ukázali, že při snaze dosáhnout extrémní Kerrový černé díry budou vznikat stále mohutnější perturbace a oscilace horizontu, odchyloující jej od dokonalé sférické symetrie. V důsledku těchto nestabilit získá horizont nenulový kvadrupólový moment a bude vyzařovat mohutné gravitační vlny, odnášející z černé díry rotační kinetickou energii. Fyzikální princip tak přímo brání vzniku nahé singularity Kerrova typu.

Pro případ Kerrový – Newmanovy nahé singularity je situace komplikovanější a k důkazu platnosti principu kosmické cenzury se tentokrát neobejdeme bez kvantové teorie pole:

Párová produkce částic-antičástic v poli nahé singularity vede k toku kvantového záření z ní, čímž singularita ztrácí hmotnost, rotační moment hybnosti i elektrický náboj. Mechanismus kvantového vyzařování je poněkud odlišný než u černých děr a závisí na konkrétní prostoročasové struktuře nahé singularity (na tom, kam mohou jednotliví partneři v páru částice-antičástice "tunelovat", obr. 10.30). Kvantové vyzařování nahé singularity vede k jejímu "oblékání" do horizontu, tedy k přeměně na černou díru.





**William H. Press (1948)**



**Subrahmanyan Chandrasekhar  
(1910 - 1995)**



**Werner Israel (1931)**



**Steve Detweiler (1950)**



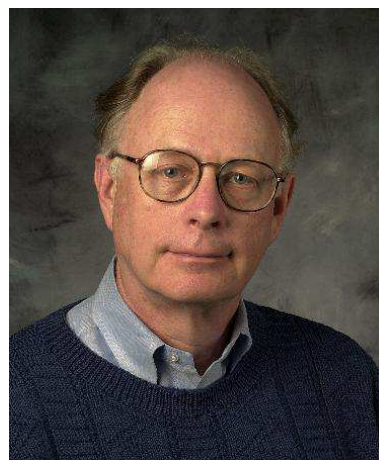
**Saul Teukolsky (1947)**



**Bernard Whiting (1953)**



**James R. Ipser (1943)**

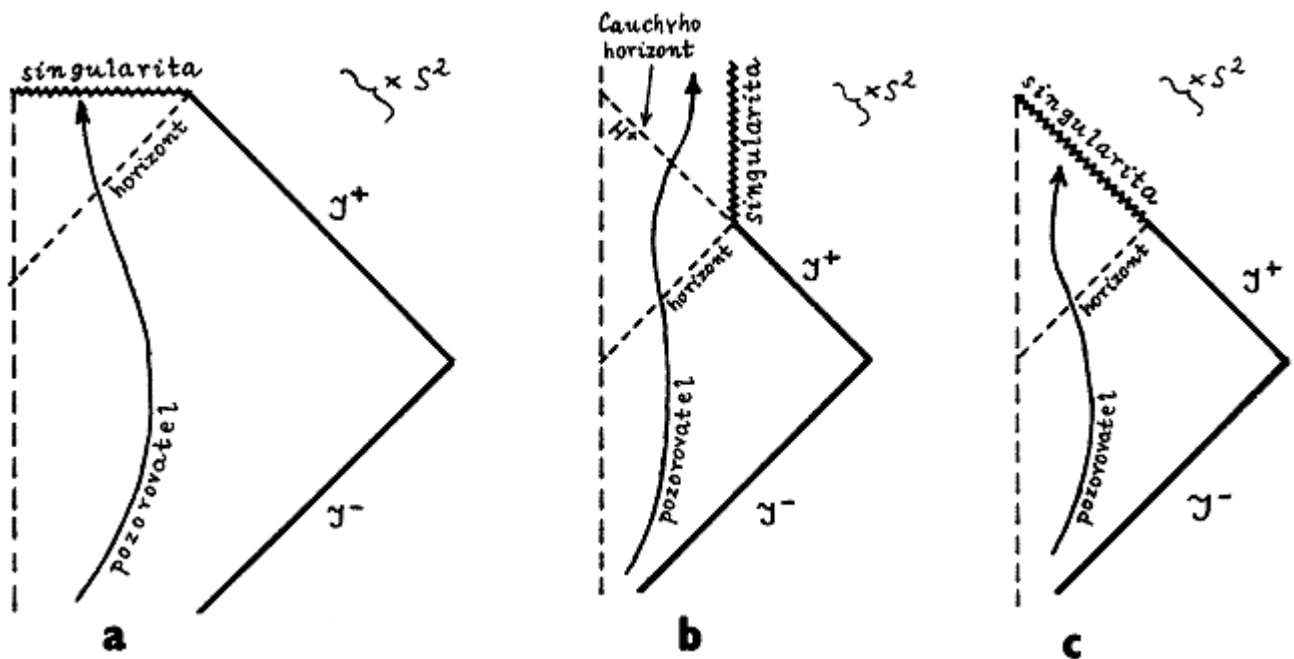


**James Burkett Hartle (1939)**



**Daniel Wilkins (19)**

Pod nahými singularitami podléhajícími kosmické cenzuře jsme zatím rozuměli "globálně" nahé singularity viditelné z nekonečna. Princip kosmické cenzury ve formulaci teorému 3.8 zabraňuje sice singularitám nekontrolovatelně ovlivňovat fyzikální děje "v nekonečnu" (v dostatečné vzdálenosti od singularity), nic však nehovoří o situaci v blízkosti samotné singularity. Jednalo by se tedy o "**lokálně nahou**" singularitu. Rozšířený (objektivně chápaný) princip kosmické cenzury by měl samozřejmě zakazovat i tyto lokálně nahé singularity.



**Obr. 10.29. Nestabilita prostoročasového charakteru singularity ve Schwarzschildově a Kerrově-Newmanově řešení vůči perturbacím ve vztahu k principu kosmické cenzury.**

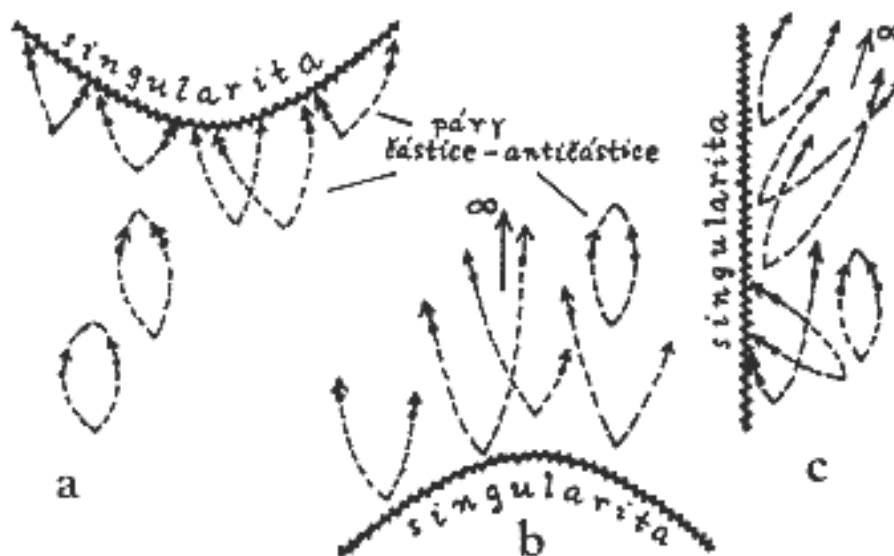
**a)** Pro přesně sféricky symetrický případ (bez perturbace) má v odpovídajícím Schwarzschildově řešení singularita všude prostorový charakter, takže žádný pozorovatel nemůže tuto singularitu uvidět předtím, než se s ní srazí - rozšířený princip kosmické cenzury je splněn.

**b)** Přidání i nepatrného momentu hybnosti nebo elektrického náboje vede ke Kerrově nebo Reissner-Nordströmově řešení, v němž singularita nabývá časový charakter. Pozorovatel pod vnitřním (Cauchyovým) horizontem může takovou singularitu vidět - je lokálně nahá.

**c)** Cauchyho (vnitřní) horizont  $H^+$  z obr. **b**) je však nestabilní vůči perturbacím ve vnější oblasti: signály z nekonečně vzdálených oblastí  $S$  nabudou na  $H^+$  nekonečně velký fialový posuv, takže slabá pole perturbací budou na  $H^+$  divergovat - v místě  $H^+$  tak vznikne singularita křivosti, která bude izotropního typu (nelineární efekty v poli velké křivosti by dokonce mohly vést ke vzniku singularity prostorového typu - srovnej s obr. 4.22). Princip kosmické cenzury by tak byl rovněž splněn.

Podívejme se, jak z tohoto hlediska obstojí singularity s nimiž jsme se setkali u nejjednodušších přesných řešení Einsteinových rovnic. Singularita  $r = 0$  ve Schwarzschildově sféricky symetrickém prostoročase zřejmě vyhovuje rozšířenému principu kosmické cenzury, protože má všude prostorový charakter (obr. 10.29a), takže lokálně nahá singularita zde není (singularitu nelze vidět před srážkou s ní). Schwarzschildova singularita je však nestabilní: dodání i nepatrného momentu hybnosti nebo elektrického náboje vede ke Kerrově nebo Reissnerově-Nordströmově řešení, kde singularita přestává být prostorová, ale je časového typu (obr. 10.29b). Z obr. 10.29b je vidět, že taková singularita je lokálně nahá, protože např. pozorovatel, jehož světočára je vyznačena, ji může vidět aniž se s ní srazí. Na obr. 10.25 jsme dokonce viděli situaci, kdy se pozorovatel může zcela vyhnout pohlčení singularitou a proniknout do dalšího "vesmíru", pro nějž zmíněná singularita bude globálně nahá (bude zde vidět i z nekonečna). Pro strukturu prostoročasu je zde však rozhodující vnitřní horizont  $r = r_g^-$ , který je Cauchyovým horizontem každé prostorové hyperplochy sahající do prostorového nekonečna. Pozorovatel, který prochází tímto vnitřním horizontem  $H^+(S)$ , uvidí celou budoucí historii vnějšího světa zhuštěnou do jediného časového okamžiku.

Pokud budou v počátečních podmínkách na Cauchyho hyperploše  $S$  přítomny nějaké perturbace (obecného charakteru - např. nějaká slabá pole), potom signály ze vzdálených oblastí  $S$  budou u horizontu  $H^+$  dosahovat nekonečně velký "fialový posuv", což povede k divergenci podél  $H^+$ . Vnitřní horizont je tedy **nestabilní vůči perturbacím** v prostorovém nekonečnu, takže v obecném případě (tj. ve skutečnosti) lze v místě  $H^+$  očekávat singularitu křivosti, která bude izotropního typu (obr. 10.29c); nelineární efekty v poli velké křivosti by mohly vést i k singularitě prostorového typu, jak je vyznačeno na obr. 10.22. Zdá se tedy, že v asymptoticky plochých prostoročasech OTR je rozšířený princip kosmické cenzury splněn.



**Obr.10.30. Možnosti kvantové produkce částic a antičástic v silném gravitačním poli v blízkosti singularity.**

- a) Pokud je singularita prostorového typu a nachází se v budoucnosti, nemají tyto částice kam odlétnout a jsou vždy pohlcovány singularitou.  
 b,c) Jestliže se singularita nachází v minulosti nebo je časového typu, existují časové nebo izotropní světočáry, podél nichž tyto částice a antičástice mohou odcházet pryč od singularity.

Charakteristickou vlastností lokálně nahé singularity je její "časová omezenost": existence takové křivky časového typu (světočáry po níž by se mohl pohybovat pozorovatel), na níž existují body *A* a *B* takové, že singularita leží v budoucnosti bodu *A* a v minulosti bodu *B*. Co se tedy týče vřezahrnující kosmologické singularity "velkého třesku", princip kosmické cenzury se na něj vlastně nevztahuje; nejedná se o lokálně nahou singularitu, protože před velkým třeskem žádný pozorovatel neexistoval.

### **Astrofyzikální důsledky smyčkové kvantové gravitace**

K Ashtekarově práci významně přispěl Ashtekarův bývalý doktorand Martin Bojowald, který dnes působí v Ústavu Maxe Plancka pro gravitační fyziku v Postupimi. Ukázal totiž, jak spinová síť mohla zažehnout velký třesk. Martin Bojowald se zabývá aplikacemi Ashtekarova formalismu na kvantovou kosmologii a na singularity v časoprostoru. Spojení mezi velkým třeskem a vnitřkem černé díry však existuje celá řada. Lee Smolin vyslovil hypotézu, že singularita v černé díře je "velký třesk", z něhož se narodí nový vesmír, potomek toho

původního, a díky předpokládané "mutaci" lze pak aplikovat zákony evoluční teorie.

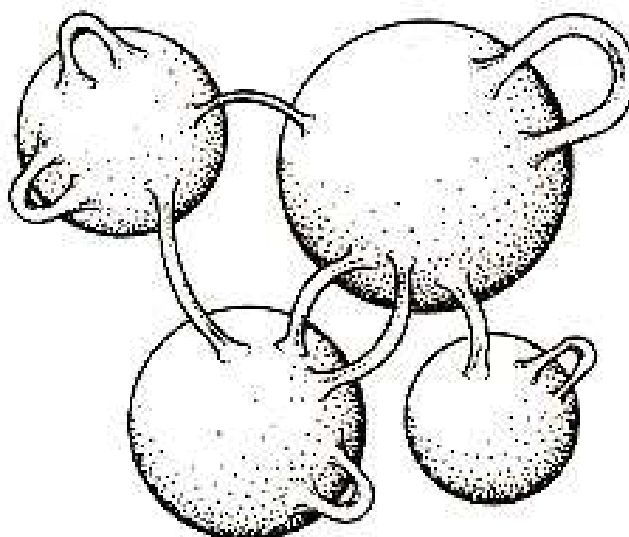


**Lee Smolin (1955)**



**Martin Bojowald (1975)**

Když se nám podaří zkoncentrovat hmotu zcela určitým způsobem, může vzniknout kolapsar jehož prostoročasová geometrie odpovídá např. Reissnerovu – Nordströmovu, či Kerrovu řešení, nebo jejich vzájemné kombinaci (tzv. Kerrova - Newmanova geometrie). Všechna tato řešení Einsteinových rovnic gravitačního pole obsahují červí díry, jakožto tunely spojující jednak různé oblasti našeho vesmíru (tzv. vícenásobná souvislost prostoročasu) a jednak ústící i do vesmírů jiných.



**Obr. 10.30: Červí díry vážící různé vesmíry samy se sebou tzv. uchy a k jiným vesmírům tzv. hrdly.**

Právě možnost vyfouknutí nového vesmíru skrze uměle nebo přirozeně vytvořenou červí díru vede k velmi lákavé myšlence, že dceřinné vesmíry mohou po vesmírech mateřských zdědit jejich fyziku. To vedlo v minulosti k formulaci velice zajímavé **hypotézy evoluce vesmírů** vyslovené v 80. letech minulého stol. rovněž např. Andrejem Lindem - autorem teorie chaotické inflace - dosud nejpřijímanějšího inflačního scénáře vzniku vesmíru, ale i dalšími autory, nezávisle na sobě. Tato hypotéza v podstatě říká, že vesmíry, jejichž fyzika dovoluje vznik velkého množství černých a potažmo i červích děr, jsou zároveň mimořádně příznivé pro vznik života. Mají dostatečnou hustou hmotu, ale nesmí být zas moc velká, neboť by pak měly příliš malou životnost a tedy nedostatek času pro tvorbu velkého množství červích děr. Musejí mít také přesně 3 velké prostorové dimenze a jednu časovou, atd.



**Charles Robert Darwin (1809 -1882)**

Zkrátka, pouze vesmír, který má velké předpoklady stvořit inteligentní život, má shodou okolností zároveň nejvyšší „fitness“ v Darwinovském smyslu tohoto slova, tj. nejvyšší schopnost plodit potomky a předávat svoje „geny“ – svoji fyziku – dceřiným vesmírům. To vede k domněnce, že ač je fyzika právě našeho vesmíru (v té změti nepřeborných možností které si vesmír při svém zrodu mohl zvolit) velice málo pravděpodobná, může být tento model přesto v superprostoru tím vůbec nejrozšířenějším, neboť vede k nejvyššímu počtu identických, nebo velmi podobných kopií. A právě jen tento model (či ještě několik málo jeho subspécií) je zároveň jediný slučitelný se vznikem biologického života (srov. antropický princip).

Co se týče energie-hmoty vesmíru, ta s hmotností oné počáteční černé

díry nikterak nesouvisí. Celková energie jakéhokoliv vesmíru (i toho našeho) je nula, takže i kvantová červí díra může na druhém konci expandovat do obřího vesmíru jako je ten náš, aniž by byl při tom porušen nějaký zákon zachování. To, co se z oné červí díry primárně vyfoukne je de facto pouze samotný prostoročas. Hmota se v něm objeví až coby důsledek zákonů zachování celkové energie (tj. klidové a vazebné) v kvantových polích.

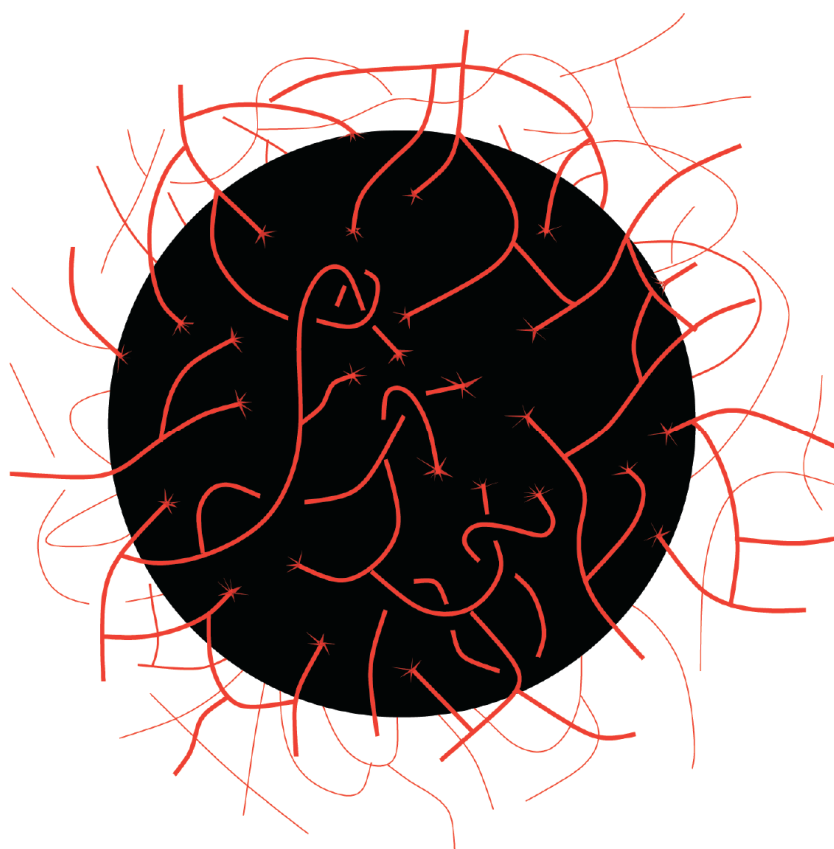
Černé díry jsou ústředním tématem pro testování kvantové geometrie. Zvláště jejich termodynamika je nepochybně klíčovým předmětem studia kvantové gravitace. Ashtekar již v minulosti úspěšně přispěl k jejich lepšímu pochopení v kontextu obecné teorie relativity. Nyní objevil, jak černé díry rostou. Avšak kvantová geometrie je schopna vysvětlit více, například jak se znovu smršťují. V roce 1974 zjistil Stephen Hawking, že černé díry kvantově vyzařují, čímž ztrácejí energii/hmotu.

Již Albert Einstein poukázal, že existuje taková možnost. Počátkem 20. století objevil, že hmota a záření nejsou dvě odlišné entity, ale že se mohou navzájem přeměňovat. Kvanta záření a hmoty jsou v podstatě totéž. Albert Einstein také ukázal, že geometrie je fyzikální entita podobně jako hmota. Proto se záření a hmota mohou přeměňovat v geometrii a naopak.

K matematickému úspěchu teorie se přidává i úspěch "fyzikální" - předpověď entropie čili informace spolykané černými dírami. Entropie by byla spojena s teplotou různou od nuly a to by skutečně znamenalo záření černé díry - v rozporu s naprostou čerností vyplývající z klasické teorie. Toto záření, musí být tedy čistě kvantový jev. J. Bekenstein a S. Hawking toto záření předvídali již v 70. letech minulého století na základě jiných úvah. Spojovali je s vytvářením dvojic částic (částice + antičástice) silnou gravitací v bezprostřední blízkosti černé díry. Známý Hawkingův jev byl tehdy odvozen semiklasickým postupem: Silná křivost prostoročasu (klasická přísada) povzbuzuje záření nějakého přítomného kvantového pole. Takovéto předběžné, v jistém smyslu nedůsledné úvahy nejsou ve fyzice ničím neobvyklým. Pomáhají předvídat výsledky, které jednou přinese dosud neexistující důslednější teorie. Je proto velmi významné, že nová teorie potvrzuje Hawkingův jev na fundamentálnější úrovni.

Základním principem kvantové geometrie je tvrzení, že existují kvanta geometrie. To je přesně ten kousek skládačky, která Stephenu Hawkingovi chyběla, protože uvažoval klasický prostoročas obecné teorie relativity. Ashtekar říká, že Hawking zcela nenaplnil Einsteinovu vizi, protože se kvantově zabýval pouze hmotou a energií. V kvantové geometrii je však také horizont událostí černé díry kvantován. Můžeme si jej představit jako povrch složený z elementárních buněk nul a jedniček. Každá tato nepatrná buňka odpovídá "vláknku" spinové sítě, která protíná horizont událostí. V případě černé díry o hmotnosti Slunce existuje  $10^{77}$  takových vláken a proto  $10^{10^{77}}$  různých kvantových stavů, které představují ohromnou entropii černé díry. Zvláštní lokální charakteristiky této spinové sítě tento horizont událostí definují. Když se černá díra kvantově vypařuje, tato vlákna se postupně ztrácejí. Při Hawkingově radiaci se kvanta horizontu černé díry přeměňují na kvanta hmoty a energie.

Obr. 20.31





Podle Ashtekara jde přesně o naplnění Einsteinovy představy, podle níž geometrie má fyzikální význam. Dokonce se přeměňuje v hmotu.

Tento proces neprobíhá spojitě, ale v celistvých krocích, protože je kvantován. Černá díra se proto nesmršťuje spojitě, ale chová se spíše jako excitovaný atom, který ztrácí energii po kvantech.

Kvantová geometrie má ještě jeden důsledek, který Ashtekar a jeho kolegové teprve zkoumají. Umožňuje se vyhnout singularitám uvnitř černých děr a velkého třesku. Snad také vyřeší známý paradox informace. Martin Bojowald předpokládá, že informace, která dopadá na černou díru, se neztrácí, ale znovu se objevuje v dceřinném vesmíru. Společným jmenovatelem řady problémů se **singularitami** a **nekonečny** v nekvantové i kvantové teorii pole, jsou limitní přechody typu  $r \rightarrow 0$ ,  $x \rightarrow 0$ ,  $t \rightarrow 0$  a pod., při nichž hodnoty polí (nebo i metriky prostoročasu) často divergují. Tyto limitní přechody jsou umožněny **spojitou povahou** prostoročasu, v němž můžeme chování fyzikálních polí vyšetřovat v principu až do nekonečně malých měřítek geometrického bodu.

V kvantové geometrii s **diskrétní strukturou prostoročasu** neexistují limitní přechody k nulovým prostorovým vzdálenostem a časovým intervalům, takže by neměly vznikat nekonečné divergující hodnoty polí a singularity prostoročasu.

### Smyčková kvantová kosmologie

Aplikace na Friedmannův model vesmíru vede k tomu, že škálový faktor  $a$  je škálovým faktorem triády, a tak záporné hodnoty  $a$  neznamenají zásadní problém – záporné  $a$  označuje pouze jinou orientaci triády.

I problém singularity má v kvantové geometrii přirozenější řešení.

Ve standardní kosmologii nebylo možné najít Hilbertův prostor vlnových funkcí, které by byly nulové v singulárním bodě  $a = 0$ .

V kvantové geometrii zdědí i škálový faktor  $a$  diskretnost metrických veličin.

Hamiltonovská vazba se dá vyjádřit operátorem objemu, operátory  $\hat{a}$  a  $\hat{V}$  mají stejné vlastní funkce  $|n\rangle$

$$\hat{a}|n\rangle \sim \sqrt{n}|n\rangle, \quad (9.477)$$

$$\hat{V}|n\rangle \sim l_P^3 \sqrt{\frac{|n|-1}{2} \frac{|n|}{2} \frac{|n|+1}{2}}. \quad (9.478)$$

Vlnovou funkcí vesmíru je pak superpozice stavů  $|n\rangle$ , kde koeficienty závisí na hmotném zdroji gravitace, např. na kvantovém skalárním poli  $\Phi$ .

Stavovou funkcí vyhovující hamiltonovské vazbě, je tedy

$$|s, \Phi\rangle = \sum_n s_n(\Phi) |n\rangle, \quad (9.479)$$

kde  $s$  označuje stav geometrie,  $\Phi$  stav skalárního pole.

Hamiltonovská rovnice vazby nabývá tvaru rovnice diferenční namísto rovnice diferenciální.

Problém singularity je řešen tím, že koeficient singulárního stavu  $|0\rangle$  v příslušné rovnici je roven nule, takže singulární stav v řešení vůbec nevystupuje.

Volbou uspořádání operátoru v hamiltonovské vazbě se dá modelovat inflace vesmíru.

Vyhnutí se singularitě je podstatným rozdílem ve srovnání se semiklasickým modelem standardní kvantové kosmologie.

Pro velká  $n$  se oba modely klasickému chování blíží.

Dalším výsledkem smyčkové kvantové kosmologie je existence minimální energie, řádově rovné Planckově energii  $E_p$  v počátečním stavu, když je průměr vesmíru v okolí hodnoty Planckovy délky.

## Perspektiva smyčkové kvantové gravitace

Einsteinova speciální teorie relativity stojí na dvou postulátech: prvním z nich je relativita pohybu, druhým je invariance rychlosti světla (Lorenzova invariance). Až do nedávné doby nebylo příliš známo, že lze sestavit konzistentní teorii s pozměněným druhým postulátem.

Konzistentní teorie s narušenou lorentzovskou invariancí se však před nedávnou dobou podařilo zkonstruovat a nazývají se obecně DSR (Double Special Relativity) teoriemi. Motivace pro tuto konstrukci je

jednoduchá – vyjdeme-li z představy, že Planckova buňka je nejmenším kvantem prostoru a Planckova energie naopak největším kvantem energie, pak se přirozeně vkrádá otázka, jak zachovat invarianci Planckovy délky a Planckovy energie vůči všem pozorovatelům nezávisle, na jejich relativní rychlosti. Tento zjevný problém si poprvé uvědomil až v roce 1999 Giovanni Amelino-Camelia. Vytvořil teorii, podle které se na subkvantových rozněrech relativistický efekt kontrakce délek odchyluje od předpovědí STR a na Planckově délce limitně zcela vymizí.



Andreas Albrecht ( 1957 )



John Moffat ( 1932 )

V roce 2000 Joao Magueijo, Andreas Albrecht, John Moffat a Lee Smolin rozpracovali modifikaci speciální teorie relativity založené na invarianci Planckovy délky. Jejich práce byla založena na staříčké a téměř zapomenuté myšlenkové konstrukci Vladimira Focka. Problém spočíval v tom, kterak zachovat principy STR ale pozměnit její pravidla tak, aby se všichni pozorovatelé shodli nejen na univerzální hodnotě rychlosti světla ale také na univerzální hodnotě Planckovy délky. Konstantní rychlostí se v této konstrukci pohybují pouze fotony s velmi malou energií. Nezávisle na této práci použil Giovanni Amelino-Camelia aparát matematické **teorie kvantových grup** rozvinuté britským matematickým fyzikem Shahn Majidem. Majidovým cílem bylo najít jednotné matematické vyjádření základních pojmů teorie relativity a kvantové teorie. Dospěl k revolučnímu zobecnění klasických symetrií ve formě kvantových grup a následné modifikaci Einsteinovy teorie relativity v kontextu tzv. **nekomutativní geometrie** – objevu matematického fyzika Alaina Connese. Jedním z velkých úspěchů nekomutativní geometrie je, že vede přímo ke standardnímu modelu.

Přepíše-li se Maxwellova elektrodynamika do nejjednodušší možné nekomutativní geometrie, dostaneme WSG elektroslabé sjednocení. Jinými slovy, automaticky se vynoří Higgsovo pole i elektroslabá interakce.



**Shahn Majid ( 1960 )**

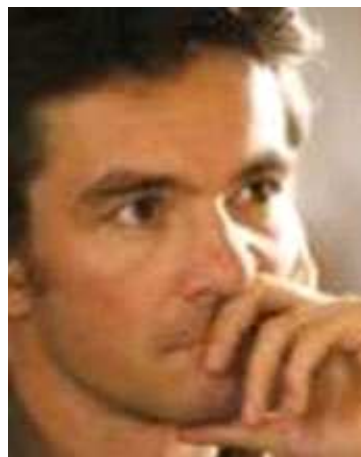


**Alain Connes ( 1947 )**

Tento matematický aparát se ukázal nezbytným k úspěšnému vyjádření DSR. Ukázalo se, že v teoriích DSR cestují fotony s vyšší energií nepatrně rychleji, než nízkoenergetické fotony. Pokud se však jejich energie blíží Planckově energii, roste jejich rychlost nade všechny meze. Protože ve velmi ranném vesmíru panovaly obrovské teploty a energie, byla podle DSR rychlost světla mnohem větší. Pokud by se potvrdila platnost DSR, staly by se všechny inflační modely zbytečnými, neboť všechny oblasti vesmíru kdysi mohly být v kauzálním kontaktu, a tudíž mohly snadno synchronizovat svoji teplotu. Roku 2001 se výše jmenované skupině teoretiků za významného přispění polského fyzika Jerzy Kowalskiho-Glikmana a francouzských teoretiků Laurenta Freidela a Etera Livina podařilo prokázat logickou bezespornost celé teorie na modelu třírozměrného prostoročasu. Ukázali, že DSR platí v libovolném světě, který má dva prostorové rozměry, kvantovou gravitaci a obsahuje hmotu. Na Planckovských rozměrech podle této nové teorie existuje absolutní vztažná soustava, umožňující absolutně rozlišit pohyb a klid částic. Úspěchy smyčkové kvantové gravitace z posledních let naznačují, že by se mělo brzy podařit zobecnit DSR i na čtyřrozměrný prostoročas.



Jerzy Kowalski-Glikman ( 1970 )



Laurent Freidel ( 1968 )

Největší výzvou pro LQG bylo objasnit, jak se z kvantového popisu vynořuje klasický prostoročas. V několika posledních letech bylo v tomto směru dosaženo velikého pokroku. Carlo Rovelli se svými spolupracovníky z centra pro teoretickou fyziku v Marseille před nedávnem dokázali, že smyčková kvantová gravitace generuje v nízkoenergetické limitě newtonovskou gravitaci. Na rozdíl od Newtonovy teorie však tato teorie generuje rovněž i gravitony. Výpočty ve vysokoenergetické limitě pak ukazují, že černé díry ve skutečnosti neobsahují vůbec žádné prostoročasové singularity. Kolabující hmota namísto ukončení své světočáry v singularitě projde tzv.

**prostoročasným odrazem**, na jehož konci pronikne do nově vytvořené prostoročasové oblasti (prostorově sériového vesmíru). Informace se tedy doopravdy neztrácejí – pouze přetečou do jiného vesmíru. Stejně metody byly použity rovněž ke studiu velice raného vesmíru. I v tomto případě je iniciační singularita eliminována a teorie předpovídá existenci vesmíru i před velkým třeskem (tehdy hovoříme o vesmírech sériově propojených v čase).

V roce 2006 objevila Fotini Makropoulou nový přístup k problému, jak vytvořit klasickou geometrii z fundamentálnější kvantové teorie. Její myšlenka vychází z představy, že částice musejí být jistým druhem emergentních excitací kvantové geometrie, který se šíří podobně, jako vlny v pevném či tekutém prostředí. Abychom však tímto způsobem zrekonstruovali celý standardní model, je nutno zmíněné emergentní

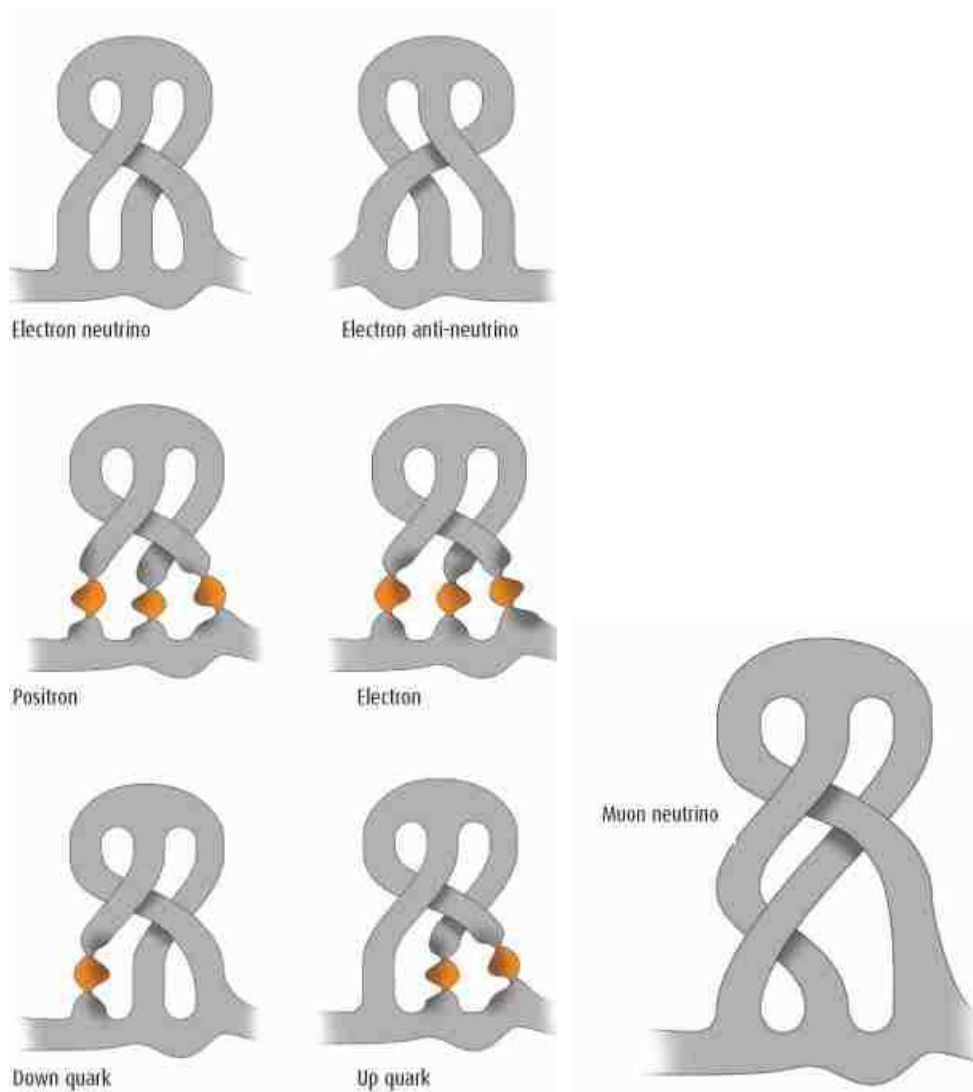
částice vyjádřit jako čistě kvantové objekty šířící se prostoročasem, jehož kvantový charakter lze zanedbat. Za běžných okolností se při interakci částic s okolím ztrácí informace o jejich kvantovém stavu. Tomuto jevu, známému jako **dekoherence** je velmi obtížné zabránit, o čemž dobře vědí např. konstruktéři kvantových počítačů, jejichž podstata spočívá právě v udržení čistých kvantových stavů, ačkoli jsou v kontaktu s okolím. Díky spolupráci s těmito odborníky, kteří velmi dobře vědí, za jakých okolností lze kvantové systémy v čistých kvantových stavech udržet, Makropoulou zjistila, že obdobné myšlenky je možné aplikovat i na problematiku vynořování částic z dynamického kvantovaného prostoročasu.

Problém zprvu vypadal obtížně, neboť kvantové geometrie předpovídané LQG jsou velmi komplikované. Stavby částic odpovídají grafům ve třírozměrném prostoru, který vyjma topologie nemá žádnou pevnou geometrii. Ta se odvozuje teprve na základě uvedených grafů. Teorie obsahuje spoustu dodatečných informací, které na první pohled s geometrií přímo nesouvisejí. Důvodem je, že hrany spojující různé vrcholy grafu se v třírozměrném prostoru mohou proplétat, uzlit a propojovat mnoha různými způsoby. Na jaře 2005 publikoval australský fyzik Sundance O. Bilson-Thompson článek, popisující proplétání smyček, které s vysokou přesností zachycují strukturu preonového modelu částic, o němž jsme hovořili v 9. kapitole. V tomto smyčkovém pojetí je preon chápán jako páska a různé druhy preonů odpovídají různým jejím přetočením. Tři takové pásky můžeme do sebe zaplést mnoha různými způsoby, jež přesně odpovídají všem různým částicím standardního modelu. To byl onen chybějící článek, který zbýval LQG k zahrnutí standardního modelu. Různé způsoby zaplétání a propojování hran grafu kvantového prostoročasu odpovídají různým druhům elementárních částic.



Sundance Osland Bilson-Thompson ( 1979 )

Obr. 10.32



Při vyšetřování malých odchylek pozoroval L. Smolin roku 1997, že poruchy mají podobu uzavřených smyček v prostoru a že jejich časový vývoj se shoduje s tím, který nastává u jednoduchých strunových modelů. Budoucnost ukáže, zda některý z uvedených postupů anebo nějaké sjednocení obou povede k úspěchu.

Následující velký cíl spočívá ve spojení známé fyziky nízkých energií s fundamentální fyzikou spinových sítí. Bylo by ohromným úspěchem, pokud by se podařilo celou známou fyziku podrobně odvodit z kvantové geometrie. Technickým mostem mohou být **stínové stavy**. Tím je míněn určitý druh projekce fyzikálních stavů do grafů. Avšak zásadní test kvantové geometrie by měl spočívat v jiném extrému, v popisu velkého třesku a černých děr. Jak jsme si již vysvětlili, kvantová fyzika nemizí velkým třeskem. Klasický prostoročas sice blízko velkého třesku zaniká, avšak spinová síť existuje dále. Představuje v určitém smyslu věčnost. Vesmír tedy nevzniká z "ničeho", protože "nic" jednoduše neexistuje. V tomto smyslu kvantová geometrie poskytuje filozofickou výhodu při řešení zdánlivě neřešitelných problémů. Její síla spočívá v nezávislosti na metrice prostoročasu na pozadí. Hmota a geometrie prostoročasu totiž vznikají společně kvantově mechanicky.

Černé díry a velký třesk jsou velmi exotické stavy. Snad však existuje možnost, jak testovat kvantovou geometrii pozorováním za méně extrémních podmínek. Giovanni Amelino-Camelia z Univerzity *La Sapienza* v Římě navrhl studovat fotony s velmi vysokou energií, které se pohybují vesmírem na velké vzdálenosti, jako jsou výtrysky záření gama nebo záření z roentgenových galaxií.



Giovanni Amelino-Camelia (1965)



V záření se mohou vyskytovat malé odchylky dráhy, které by mohly mít příčinu v rozptylu světelných vln na diskretních uzlech kvantové geometrie. Podobně jako spektrum atomu, také spektrum prostoročasu není spojité, ale diskretní.

Dokud nejsou k dispozici žádná měření, zůstává kvantová geometrie arénou teoretických fyziků. V současnosti se základy kvantové geometrie zabývají asi dvě desítky výzkumných skupin na celém světě a byly publikovány tisíce odborných článků. Zájem o kvantovou geometrii nadále roste. LQG získává stále větší popularitu a je pouze otázkou času, zda bude plodná nebo nikoliv.

Teorie superstrun interpretuje částice jako oscilující struny a na rozdíl od kvantové geometrie popisuje všechny čtyři silové interakce.

Její nevýhodou však je, že ji lze formulovat pouze v 10-rozměrném nebo 11-rozměrném prostoru. Přitom předpokládá metriku klasického prostoročasu obecné teorie relativity. Dodatečný vícerozměrný prostoročas však není kvantován, což je vlastnost, která je očekávána od úplné kvantové gravitace. Zde kvantová geometrie může zvítězit.

Roger Penrose je přesvědčen, že ze všech formulací kvantové gravitace, je Ashtekarova verze nejslibnější. Teorie superstrun přes všechny své teoretické úspěchy vyžaduje příliš mnoho složitých předpokladů, jako jsou dodatečné rozměry a supersymetrie, pro které nejsou žádné teoretické důvody. Navíc tato teorie neposkytuje příliš mnoho určitých a jednoznačných předpovědí pro budoucí experimenty. Podle Rovelliho nastal čas zkusit alternativní cestu.

## **Předpovědi a testy**

Načrtl jsem, co má teorie LQG vypovídat o prostoru a času v Planckově měřítku, ale v něm nemůžeme časoprostor zkoumat přímo, abychom tuto teorii ověřili. Takové rozměry jsou pro nás příliš malé. Jak tedy můžeme tuto teorii prověřit? Důležitým testem je to, zda je možné odvodit klasickou obecnou teorii relativity jako aproximaci teorie LQG: jinými slovy, pokud jsou spinové sítě podobné vláknům v kusu látky, je tento test analogický zkoumáním, zda můžeme určit elastické vlastnosti tkaniny tak, že zprůměrujeme vlastnosti tisíců vláken, z nichž je složena.

Popisují však spinové sítě po zprůměrování přes mnoho Planckových délek skutečně geometrii prostoru a jeho vývoj způsobem, který se zhruba shoduje, s "hladkou tkaninou" Einsteinovy klasické teorie? Jde o složitý problém, ale nedávno výzkumníci udělali významný pokrok v některých specifických případech, řekněme "v určitých uspořádáních materiálu". Například gravitační vlny s velkou vlnovou délkou, které se šíří v jinak plochem prostoru, mohou být popsány jako vzruchy specifických kvantových stavů, které popisuje teorie LQG.

Dalším plodným testem je zjištění, co může teorie LQG říci k dlouholetým tajemstvím gravitační fyziky a kvantové teorie: termodynamice černých děr, a zvláště jejich entropii, která je vztažena k neuspořádanosti. Fyzikové spočítali předpovědi, týkající se termodynamiky černých děr, s použitím hybridní přibližné teorie, která nahlíží kvantově-mechanicky na hmotu, ale nikoli na časoprostor. Plně kvantová teorie gravitace, jakou je třeba LQG, by měla být schopna tyto předpovědi reprodukovat. V 70. letech usoudil Jacob D. Bekenstein, nyní činný na Hebrejské univerzitě v Jeruzalémě, že černým díram musí být připsána entropie přímo úměrná ploše jejich povrchu. Krátce poté Stephen Hawking odvodil, že černé díry musí vyzařovat na teplotě ( 9.245 ). Analýza entropie příslušných kvantových stavů na horizontu černé díry, provedená za pomoci LQG potvrdila přesně Bekensteinovu a Hawkingovu předpověď.

Významnou předpovědí LQG, je nepatrně rozdílná rychlost šíření elektromagnetického záření různé frekvence ve vakuu, v důsledku diskrétnosti prostoru, který je protkán periodickou strukturou spinových sítí.

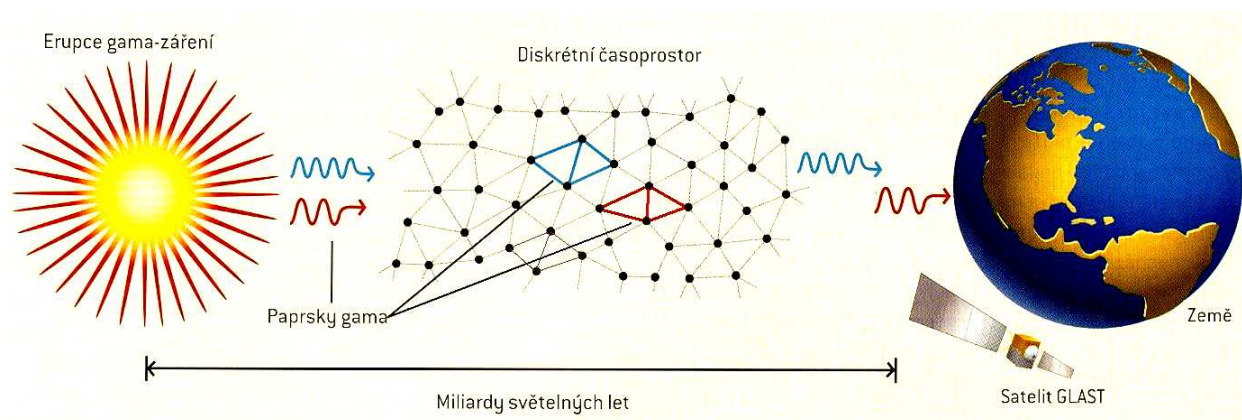
Radiace z dalekých kosmických explozí, při nichž se v důsledku vzájemné srážky neutronových hvězd, kvarkových hvězd, či černých děr uvolní v krátkém okamžiku až  $10^{50}$  J energie záření gama na různých frekvencích, by nám mohla poskytnout způsob, kterak otestovat správnost LQG. Erupce záření gama se odehrávají ve vzdálenostech mnoha miliard světelných let a každý emitovaný foton se musí prodrat hustým tkanivem gravitačních smyček spinové sítě vesmíru. Diskrétní povaha prostoru působí, že vysokoenergetické paprsky gama se pohybují nepatrně pomaleji, než paprsky s nízkou energií. Tento efekt je zanedbatelný, ale během dlouhé cesty světla prostorem se neustále

zvětšuje.



**J. Albert**

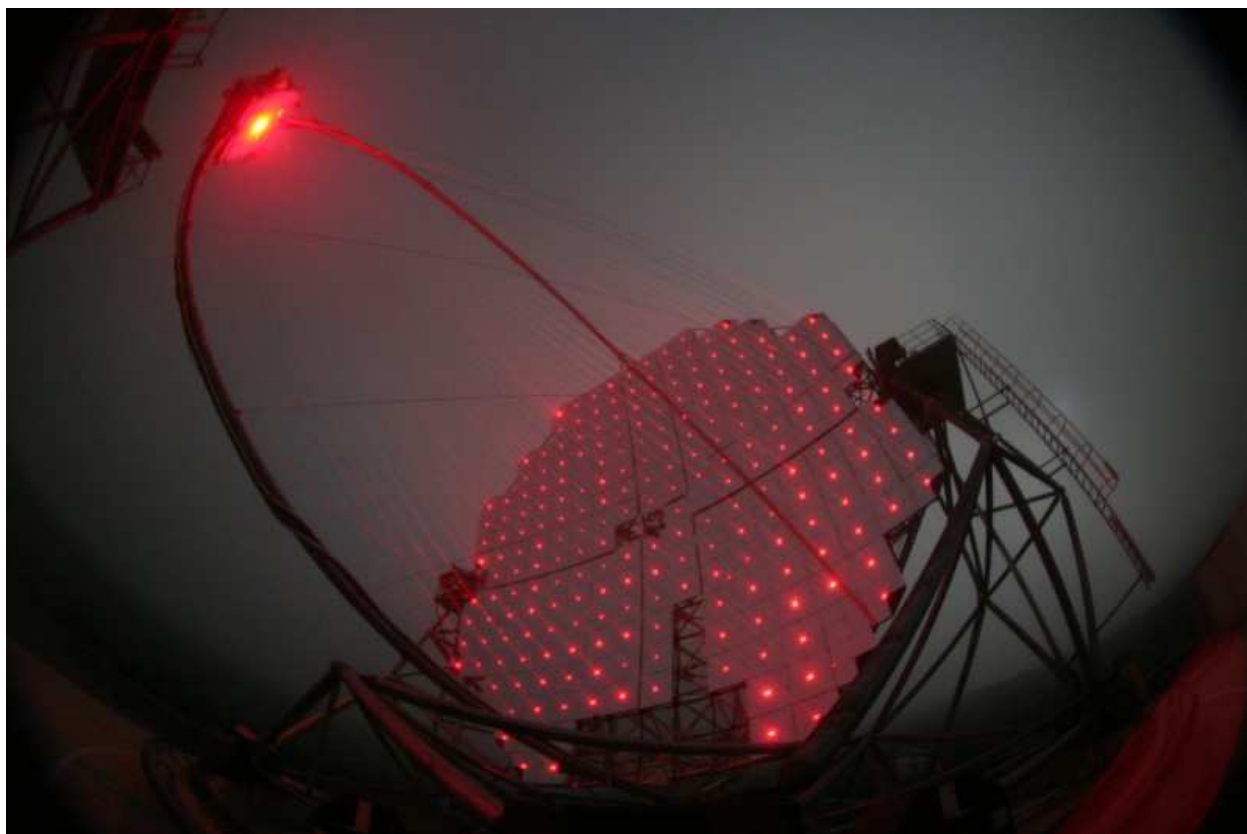
Ještě donedávna chyběla k potvrzení takto slabého efektu dostatečně citlivá technika. V srpnu roku 2007 však výzkumníci pracující na projektu gama teleskopu MAGIC pod vedením J. Alberta, ohlásili první experimentální potvrzení tohoto jevu předpovězeného dosud pouze teoriemi s diskretní strukturou prostoročasu, jako je LQG, či teorie cytoprostoru, o které pojednáme dále. Teleskop studoval metodou Monte Carlo záblesky gama záření z černé díry ve středu galaxie Markarian 501 v rozmezí energií řádově  $10^{10}$  eV až  $10^{17}$  eV a zaznamenal index lomu prázdného prostoru indukovaný kvantovou gravitací. Gama záření o vysoké energii přiletělo z galaxie vzdálené půl miliardy světelných let o 4 minuty později, než nízkoenergetické gama záření. Přitom by všechno gama záření z onoho místa mělo být vyzářeno ve stejný okamžik. Orbitální teleskop Fermi před nedávnem našel prodlevu 20 minut u gama záření ze vzdálenosti 12 miliard světelných let.



**Obr. 10.33:** Radiace z dalekých kosmických explozí, zvaných erupce záření gama, nám nabízí způsob, kterak otestovat správnost teorie smyčkové kvantové gravitace. Erupce záření gama, odehrávající se ve vzdálenosti mnoha miliard světelných let, emitují během velice krátké doby ohromné množství fotonů tvrdého záření gama. Podle předpovědi teorie kvantové smyčkové gravitace zaujímá každý foton v každém okamžiku malou oblast spojnic ve spinové síti, jenž tvoří prostor, kterým se foton pohybuje (ve skutečnosti se jedná o ohromný počet čar, ale pro jednoduchost jsme jich zde znázornili jen 5). Diskrétní povaha prostoru působí, že vysokoenergetické fotony se pohybují nepatrně pomaleji, než fotony s řádově nižší energií. Tento efekt, ač zcela nepatrný, se během nepředstavitelně dlouhé cesty fotonů od svého zdroje až k Zemi, neustále znásobuje. Pokud fotony dorazí k Zemi s malým leč měřitelným časovým rozdílem odpovídajícím rozdílu v jejich energii, bude to znamenat klíčovou podporu teorii smyčkové kvantové gravitace. Přístroje, uvedené do provozu po roce 2006, mají již pro takový experiment dostatečnou citlivost a první výsledky vycházejí velice slibně na podporu teorie.



**Obr. 10.34: Gama teleskop MAGIC (Major Atmospheric Gamma-ray Imaging Cherenkov)**



V teoriích kvantujících prostoročas lze mimo to předpokládat, že může být docela slabonce narušena jak Lorentzovská symetrie, tak i izotropie prostoru. Důležité je tedy sledovat nejenom vzdálenost a energii přicházejících fotonů, ale též směr, ze kterého přišly. MAGIC a FERMI zaznamenali u dosud změřených fotonů prodlevy v intervalu 1 sekunda až 20 minut. Zdánlivě si odporující výsledky mohou naznačovat, že v reálném světě je slabě narušeno daleko více symetrií, než jsme dosud předpokládali.

Tyto výsledky samozřejmě vyžadují korekci Einsteinovy teorie relativity, která předpovídá univerzální rychlost šíření světla nezávisle na frekvenci a směru. Několik teoretiků, mezi něž patří Giovanni Amelino Camelia z Římské univerzity, Joao Magueijo z Královské koleje v Londýně a Lee Smolin z *Perimeter Institute for Theoretical Physics* ve Waterloo v Ontariu, vyvinulo upravené verze Einsteinovy teorie, která bere v úvahu vysokoenergetické fotony cestující různými rychlostmi. V těchto teoriích se předpokládá, že univerzální rychlostí ve vesmíru je rychlost nízkoenergetických fotonů.



João Magueijo (1967)

Další možný efekt diskrétního časoprostoru zahrnuje kosmické částice o velmi vysoké energii. Již v roce 1966 učinili fyzici Georgij Zatsepin a Vadim Kuzmin a Kenneth Greisen předpověď, že protony kosmického záření s energií větší než  $3 \cdot 10^{19}$  elektronvoltů budou významně interagovat s reliktním pozadím, za vzniku  $\pi$ -mezonů, v důsledku čehož budou poměrně rychle ztrácet energii. O to větší záhadou bylo, když japonský experiment AGASA (Akeno Giant Air ShowerArray) zachytil více než 10 kosmických částic s energií řádově nad tímto limitem. To by ukazovalo na blízký intragalaktický původ těchto částic, který by byl

ovšem na základě našich soudobých znalostí astrofyziky velmi obtížně vysvětlitelný. Diskrétní struktura prostoru však může zvyšovat energii potřebnou k interakci, a tak umožnit i intergalaktickým protonům z kosmických paprsků o vyšší energii doletět až na Zemi. Pokud se pro výsledky pozorování AGASA nenajde jiné vysvětlení, může to znamenat, že jsme již detekovali diskrétní povahu prostoru.

Kromě toho, že teorie LQG dokáže činit předpovědi týkající se specifických jevů, například vysokoenergetických kosmických paprsků, nám také otevřela okno, skrze které můžeme studovat základní otázky kosmologie, například původ našeho vesmíru. Můžeme teorii použít ke studiu samých prvopočátků času, hned po velkém třesku. Obecná relativita předpovídá, že existoval první časový moment, ale tento závěr nebere v úvahu kvantovou fyziku (protože obecná relativita je nekvantovou teorií). Nedávné výpočty LQG, které provedl Martin Bojowald z Max-Planckova ústavu pro gravitační fyziku v Golmu v Německu ukazují, že velký třesk by mohl být vlastně velkým odrazem po předchozím velkém smrštění vesmíru. Teoretici nyní usilovně vyvíjejí předpovědi pro raný vesmír, které by mohly být ověřeny při budoucích kosmologických pozorováních. Není vyloučeno, že se ještě osobně dožijeme důkazu existence času před velkým třeskem.

Podobně závažná otázka se týká kosmologické konstanty – kladné nebo záporné hustoty energie, která by mohla prostupovat "prázdný" prostor. Nedávná pozorování vzdálených supernov a mikrovlnného kosmického pozadí silně naznačují, že tato energie existuje a že je pozitivní, což urychluje rozpínání vesmíru.



**Hideo Kodama**

Již v roce 1988, přitom Hideo Kodama z Tokijské univerzity odvodil z LQG rovnice popisující přesný kvantový stav vesmíru, který má kladnou kosmologickou konstantu.

V LQG zůstává ještě nevyřešeno mnoho otázek. Je třeba objasnit některé technické problémy a také bychom rádi porozuměli tomu, jak - pokud vůbec - musí být speciální relativita v oblastech extrémně vysokých energií upravena.

A konečně, rádi bychom pochopili, zda má LQG co říci ke sjednocení teorií: jsou různé síly, včetně gravitace, jen různými projevy jediné základní síly? Teorie strun je založena na ideji sjednocení, odborníci pracující na LQG se rovněž pokouší dosáhnout tohoto sjednocení.

LQG zaujímá velmi důležité místo ve vývoji fyziky. Je to, velmi nadějná cesta ke kvantové teorii obecné relativity, protože nečiní žádné zvláštní předpoklady kromě základních principů kvantové teorie a teorie relativity. Pozoruhodný směr, kterým se tato teorie vyvíjí, s předpokladem nespojitého časoprostoru popisovaného spinovými sítěmi a spinovými pěny, spíše vyplývá z matematiky samotné teorie, než aby byl do ní včleňován zvláštním postulátem.



## Úvod do stacionární teorie Cytoprostoru

### 1) Základy geometrického kvantování

#### a) Symetrická grupa

Náš výklad započneme permutacemi.

Permutace je izomorfismem obvykle konečné množiny na sebe.

Nechť  $p_1, \dots, p_n$  je permutace čísel  $1, \dots, n$ .

Této permutaci  $P$  přiřazujeme operaci převádějící

$$\begin{aligned} 1 &\rightarrow p_1 \\ 2 &\rightarrow p_2 \\ &\vdots \\ n &\rightarrow p_n \end{aligned} \tag{11.1}$$

což symbolicky píšeme jako

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_n \end{pmatrix} \tag{11.2}$$

příčemž pořadí sloupců na pravé straně je irelevantní.

Nechť nyní  $Q$  je permutace

$$Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ q_1 & q_2 & \dots & q_n \end{pmatrix}. \tag{11.3}$$

Pod operací **kompozice permutací**  $Q \circ R$  budeme rozumět zobrazení

$$\begin{aligned} 1 &\rightarrow p_1 \rightarrow q_{p_1} \\ &\vdots \quad \vdots \quad \vdots \\ n &\rightarrow p_n \rightarrow q_{p_n} \end{aligned} \tag{11.4}$$

tj.

$$Q \circ P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ q_{p_1} & q_{p_2} & \dots & q_{p_n} \end{pmatrix}. \quad (11.5)$$

**Identickou permutaci** definujeme jako

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix}, \quad (11.6)$$

a **permutaci inverzní k  $P$**  jako

$$P^{-1} = \begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \dots & p_n \\ 1 & 2 & \dots & n \end{pmatrix} \equiv \begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n \\ \bar{p}_1 & \bar{p}_2 & \dots & \bar{p}_n \end{pmatrix}. \quad (11.7)$$

Příklad: je-li

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 3 & 1 & 4 & 6 & 5 \end{pmatrix}; \quad Q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 2 & 1 & 4 & 5 & 6 & 3 \end{pmatrix} \quad (11.8)$$

Potom

$$Q \circ P = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 1 & 4 & 2 & 5 & 3 & 6 \end{pmatrix}; \quad P^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 3 & 1 & 2 & 4 & 6 & 5 \end{pmatrix}. \quad (11.9)$$

Množina permutací  $n$  prvků tvoří, jak se lze snadno přesvědčit, neabelovskou grupu řádu  $n!$  s neutrálním prvkem odpovídajícím identické permutaci a inverzním prvkem odpovídajícím inverzní permutaci.

Tuto grupu nazýváme **symetrickou grupou  $S_n$** .

Pro její studium je nutno zavést několik dalších pojmů.

Permutaci  $P: x \rightarrow x$  označíme za **transpozici**, existují-li  $x, y \in X$ ;  $x \neq y: P(x) = y, P(y) = x, \forall z \in X \setminus \{x, y\}: P(z) = z$ .

Jakoukoliv uspořádanou  $n$ -tici  $(x_1, x_2, \dots, x_n)$  nazveme **cyklem** permutace  $P$  délky  $n - 1$ , jestliže  $\forall i = 1, 2, \dots, n - 1 : P(x_i) = x_{i+1}$ ,  $P(x_n) = x_1$ .

Každou dvojici  $i, j$ , kde  $i < j$ ,  $P(i) > P(j)$  nazveme **inverzí** permutace  $P$ .

Libovolnou permutaci lze jednoznačně rozložit na cykly neobsahující společné elementy tj. tzv. **nezávislé cykly**.

Tak např. pro permutace z příkladu ( 11.8 ) má tento rozklad tvar

$$\begin{aligned} P &= (1, 2, 3) \circ (5, 6) \circ (4) \\ Q &= (3, 4, 5, 6) \circ (1, 2) \end{aligned} \quad (11.10)$$

Pořadí, ve kterém píšeme nezávislé cykly je irelevantní.

Cykly jednotkové délky jsou triviální a obvykle se explicitně neuvádějí.

Výše uvedený rozklad permutace  $P$  proto zapíšeme jako

$$P = (1, 2, 3) \circ (5, 6). \quad (11.11)$$

Libovolnou permutaci lze zkomponovat z cyklů délky 2, tj. transpozic. Např. permutaci  $P$  můžeme zkomponovat ze tří transpozic:

$$P = (1, 3) \circ (1, 2) \circ (5, 6). \quad (11.12)$$

Na rozdíl od rozkladu ( 11.11 ) zde vystupuje v prvních dvou cyklech tentýž element.

Díky tomu je pořadí transpozic v rozkladu permutace podstatné.

Permutace vzniklá kompozicí sudého resp. lichého počtu transpozic se nazývá permutací **sudou** resp. **lichou**.

Počet transpozic, z nichž je daná permutace složena, není sice určen jednoznačně, avšak jeho sudost či lichost ano.

**Operátorem parity** permutace  $P$  budeme rozumět číslo

$$\varepsilon_P \equiv \begin{cases} 1 & \text{pro sudou permutaci} \\ -1 & \text{pro lichou permutaci} \end{cases} \quad (11.13)$$

Pro tento operátor navíc platí:

$$\varepsilon_P = (-1)^{\text{množství inverzí } P} = (-1)^{\text{suma délek cyklů } P} = (-1)^{\text{množství cyklů liché délky}} = (-1)^k \quad (11.14)$$

kde  $k$  je počet transpozic  $T_i$  nutných k sestavení permutace

$$P = T_1 \circ T_2 \circ \dots \circ T_k . \quad (11.15)$$

Platnost této rovnosti se dokáže snadno:

Počet inverzí v dané permutaci nazveme **stupněm** této permutace a označíme  $S_P$ .

Potom platí:

$$\varepsilon_P = (-1)^{S_P} . \quad (11.16)$$

Zaměňme v permutaci vzájemně prvky  $a_i, a_j$ , ( $i < j$ ).

a) Jestliže  $j = i + 1$ , změní se počet inverzí o jednu a přepóluje se parita permutace.

b) Jestliže  $j > i + 1$ , potom tuto záměnu můžeme realizovat postupně pomocí  $(j - i) + (j - i - 1) = 2(j - i) - 1$  transpozic (tj. lichého počtu záměn dvou sousedních prvků).

Počet inverzí v permutaci se tím změní o liché číslo a tedy operátor parity permutace opět změní znaménko. ☺

Příklad:

Budiž dána permutace  $P = (2, 1, 3)$ .

Její stupeň  $S_P = 1$ .

Ukažme, že záměnou jejích protilehlých prvků získáme permutaci sudého stupně.

Lze toho docílit rozkladem permutace na systém transpozic, tj. postupnou záměnou dvojic sousedních prvků:

$$\underbrace{(2, 1, 3)}_{S_P=1} \mapsto \underbrace{(1, 2, 3)}_{S_P=0}; \underbrace{(1, 3, 2)}_{S_P=1}; \underbrace{(3, 1, 2)}_{S_P=2} . \quad (11.17)$$

Záměnu jsme tedy vskutku realizovali pomocí lichého počtu [ 3 ] transpozic, které změni stupeň permutace vždy o 1.

Parita výsledné permutace se proto změnila z původní liché na sudou, čímž změnil operátor parity své znaménko.

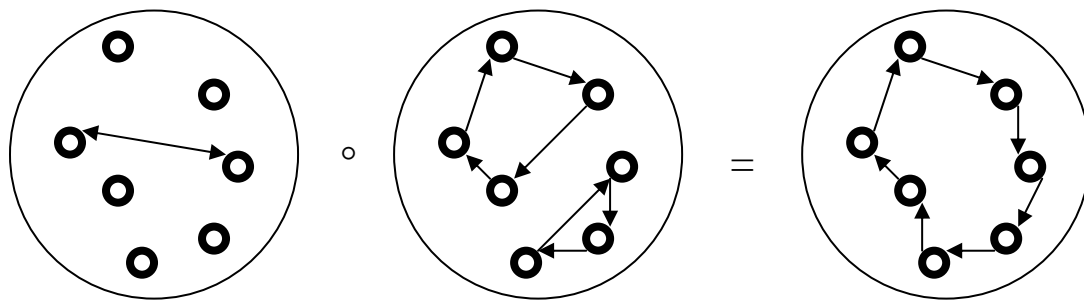
Každou permutaci lze rovněž složit z cyklů a každý cyklus délky  $n$  lze rozepsat na kompozici  $n$  transpozic.

Např.

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 3 & 4 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 2 & 1 & 3 & 4 \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 3 & 2 & 4 \end{pmatrix} \circ \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 \\ 1 & 2 & 4 & 3 \end{pmatrix}. \quad (11.18)$$

Můžete si také promyslet, kterak v permutaci, jež obsahuje dva cykly, lze tyto dva cykly „slepit“, složíme-li tuto permutaci s nějakou transpozicí přehazující navzájem dva prvky, každý z jednoho cyklu. A naopak, složíme-li tento cyklus znovu s touto transpozicí, dostaneme opět dva cykly.

Obr. 11.1



Nechť permutace  $P \in S_n$  sestává z  $\nu_1$  cyklů délky 1,  $\nu_2$  cyklů délky 2, atd., až  $\nu_n$  cyklů délky  $n$ .

Potom říkáme, že  $P$  má **cyklickou strukturu**

$$(1^{\nu_1}, 2^{\nu_2}, \dots, n^{\nu_n}). \quad (11.19)$$

Dvě permutace nazýváme **sduženými**, právě tehdy, mají-li tutéž cyklickou strukturu.

Cyklická struktura tedy charakterizuje třídy.  
Z definice čísel  $\nu_j$  je zřejmé, že

$$\sum_{j=1}^n j \cdot \nu_j = n . \quad ( 11.20 )$$

Každá  $n$ -tice celých nezáporných čísel  $\nu_j$  vyhovujících rovnici ( 11.20 ) udává jednu třídu grupy  $S_n$ .

Každé takové  $n$ -tici tedy odpovídá jedna ireducibilní reprezentace grupy  $S_n$ .

Každé cyklické struktury ( 11.19 ) je jedno-jednoznačně přiřazena  $n$ -tice čísel

$$\lambda_k \equiv \sum_{j=k}^n \nu_j \quad , k = 1, \dots, n . \quad ( 11.21 )$$

Je zřejmé, že

$$\lambda_1 \geq \lambda_2 \geq \dots \geq \lambda_n \geq 0 . \quad ( 11.22 )$$

Navíc z formule ( 11.21 ) vidíme, že

$$\sum_{k=1}^n \lambda_k = n . \quad ( 11.23 )$$

Každou  $n$ -tici celých čísel  $[\lambda] = [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]$  vyhovujících podmínkám ( 11.22 ), ( 11.23 ) nazýváme **rozkladem čísla  $n$** . (V symbolu pro rozklad vypisujeme pouze nenulová  $\lambda_k$ ).

Dospíváme tak k důležitému závěru: každému rozkladu  $[\lambda]$  čísla  $n$  odpovídá právě jedna ireducibilní reprezentace ( $D^{[\lambda]}$ ) grupy  $S_n$ .

Každému rozkladu  $[\lambda]$  čísla  $n$  lze jedno-jednoznačně přiřadit tzv.

**Yungovo  $[\lambda]$ -polyomino** sestávající z  $n$  buněk uspořádaných do řádků délky  $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n$  tak, že buňky  $k$ -tého řádku leží pod prvními  $\lambda_k$  buňkami řádku  $(k - 1)$ -ho.



Laurence Chisholm Young (1905 – 2000)

Pro ilustraci jsou v prvních dvou sloupcích tabulky 11.1 uvedeny všechny rozklady čísla  $n = 4$  a jim odpovídající polyomina. Rozklady jsme zapsali v běžně užívaném zkráceném tvaru:

$$[2^2] = [2, 2]$$

$$[2, 1^2] = [2, 1, 1]$$

( 11.24 )

*atd.*

Tab. 11.1

$\lambda$	Y-polyomino	Standardní schéma	Yamanouchyho symbol																		
[ 4 ]		<table border="1"><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td><td>4</td></tr></table>	1	2	3	4	(1,1,1,1)														
1	2	3	4																		
[ 3,1 ]		<table border="1"><tr><td>1</td><td>2</td><td>3</td></tr><tr><td>4</td><td></td><td></td></tr></table> <table border="1"><tr><td>1</td><td>3</td><td>4</td></tr><tr><td>2</td><td></td><td></td></tr></table> <table border="1"><tr><td>1</td><td>2</td><td>4</td></tr><tr><td>3</td><td></td><td></td></tr></table>	1	2	3	4			1	3	4	2			1	2	4	3			(2,1,1,1) (1,1,2,1) (1,2,1,1)
1	2	3																			
4																					
1	3	4																			
2																					
1	2	4																			
3																					
[ 2 <sup>2</sup> ]		<table border="1"><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>3</td><td>4</td></tr></table> <table border="1"><tr><td>1</td><td>3</td></tr><tr><td>2</td><td>4</td></tr></table>	1	2	3	4	1	3	2	4	(2,2,1,1) (2,1,2,1)										
1	2																				
3	4																				
1	3																				
2	4																				
[ 2,1 <sup>2</sup> ]		<table border="1"><tr><td>1</td><td>4</td></tr><tr><td>2</td><td></td></tr><tr><td>3</td><td></td></tr></table> <table border="1"><tr><td>1</td><td>2</td></tr><tr><td>3</td><td>4</td></tr></table> <table border="1"><tr><td>1</td><td>3</td></tr><tr><td>2</td><td>4</td></tr></table>	1	4	2		3		1	2	3	4	1	3	2	4	(1,3,2,1) (3,2,1,1) (3,1,2,1)				
1	4																				
2																					
3																					
1	2																				
3	4																				
1	3																				
2	4																				
[ 1 <sup>4</sup> ]		<table border="1"><tr><td>1</td></tr><tr><td>2</td></tr><tr><td>3</td></tr><tr><td>4</td></tr></table>	1	2	3	4	(4,3,2,1)														
1																					
2																					
3																					
4																					

Omezíme-li se v  $S_n$  pouze na permutace, které nechávají nezměněn  $n$ -tý element, tj. na permutace typu

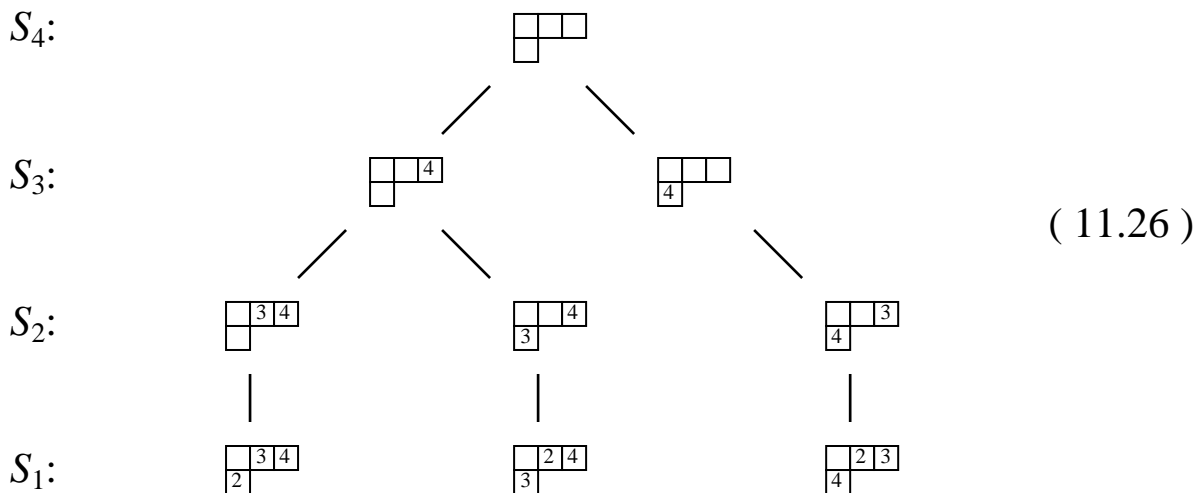
$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & \dots & n-1 & n \\ p_1 & p_2 & \dots & p_{n-1} & n \end{pmatrix}, \tag{11.25}$$

obdržíme podgrupu  $S_{n-1} \subset S_n$ , přičemž platí: ireducibilní reprezentace grupy  $S_n$  odpovídající danému Yungovu polyominu představují direktní součet ireducibilních reprezentací podgrupy  $S_{n-1}$  odpovídajících Yungovým polyominům vzniklým z výchozího, oddělením jedné buňky všemi možnými způsoby.

Každému takto vzniklému Y-polyominu odpovídá právě jedna ireducibilní reprezentace grupy  $S_{n-1}$  obsažená v uvažované reprezentaci.

Opakovaným užitím této věty můžeme rozložit každou ireducibilní reprezentaci grupy  $S_n$  na direktní součet ireducibilních reprezentací libovolné grupy  $S_m$  pro  $m < n$ .

Tak např. pro reprezentaci  $D^{[3,1]}$  grupy  $S_4$  tímto postupem dostáváme rozklad:



Číslo  $n$  zde značí element opuštěný při přechodu od Y-poliomina grupy  $S_n$  k Y-poliominu grupy  $S_{n-1}$ .

Uvažovaná reprezentace tedy představuje z hlediska grupy  $S_m$ ;  $m \leq 4$ , reprezentaci:

$$S_4 \equiv [4] \tag{11.27}$$

$$S_3 \equiv [3, 1] \oplus [4, 1] \tag{11.28}$$



$$S_2 \equiv ( \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} ) \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \quad (11.29)$$

$$S_1 \equiv \square \oplus \square \oplus \square \quad (11.30)$$

Grupa  $S_1$  je ovšem triviální – sestává z jediného elementu  $E$ .  
Její jediná ireducibilní reprezentace je jednorozměrná, neboť přiřazuje elementu identity číslo 1.

Oproti tomu je ireducibilní reprezentace  $D^{[3,1]}$  grupy  $S_4$  jak vidno trojrozměrná.

Zobecnění naznačeného postupu na libovolnou ireducibilní reprezentaci  $D^{[\lambda]}$  grupy  $S_n$  je zřejmé: do buněk Y-polyomina rozmístíme čísla 1, 2, ...,  $n$  tak, aby v každém řádku rostla zleva doprava a v každém sloupci shora dolů.

Takto zaplněné Y-polyomino  $[\lambda]$  představuje tzv. **standardní schéma**.

Nechť  $r_j$  udává řádek, ve kterém se v zadaném standardním schématu nachází číslo  $j$ .

### Yamanouchiho symbol

$$(r) \equiv (r_n, r_{n-1}, \dots, r_2, r_1) \quad (11.31)$$

jednoznačně popisuje odpovídající standardní schéma.

Povšimněme si, že v Yamanouchiho symbolu jsou čísla uspořádána tak, že vpravo od libovolného čísla  $k > 1$  se nachází nejméně tolik čísel  $(k - 1)$  jako čísel  $k$ .

Každému standardnímu schématu odpovídá jeden vektor báze reprezentace  $D^{[\lambda]}$  grupy  $S_n$ , který současně patří k bázi ireducibilní reprezentace podgrupy  $S_m$  ( $m < n$ ), odpovídající Yungovu polyominu vzniklému z uvažovaného schématu vynecháním buněk zaplněných posledními  $(n - m)$  čísly.

Počet standardních schémat tedy udává dimenzi ( $\equiv n_{[\lambda]}$ ) reprezentace  $D^{[\lambda]}$ .

Právě těchto symbolů použijeme k očíslování vektorů báze dané ireducibilní reprezentace grupy  $S_n$ .

Řekneme, že dvě Y-polyomina jsou **vzájemně sdružená**, jestliže se od sebe liší pouze záměnou řádků za sloupce.

Polyomino sdružené k  $[\lambda]$  označujeme jako  $[\lambda^*]$ .

Odpovídající reprezentace nazýváme rovněž **sdruženými**.

Snadno se lze přesvědčit, že sdružené reprezentace mají shodnou dimenzi.



**Takahiko Yamanouchi (1902 – 1986)**

Analogicky zavádíme pojem **sdruženého standardního schématu** a sdruženými pak nazýváme i odpovídající Yamanouchiho symboly. Každá grupa  $S_n$  ( $n \geq 2$ ) má právě dvě jednorozměrné navzájem sdružené reprezentace.

První z nich odpovídá Y-polyominu s jedním řádkem a přiřazuje každé permutaci jedničku (**úplně symetrická reprezentace**)

$$D^{[1^n]}(P) = 1. \quad (11.32)$$

Druhá odpovídá Y-polyominu s jedním sloupcem a přiřazuje každé permutaci její paritu (**úplně antisymetrická reprezentace**)

$$D^{[1^n]}(P) = \varepsilon_P. \quad (11.33)$$

Ostatní reprezentace jsou vícerozměrné.

Při volbě báze prostoru reprezentace  $D^{[\lambda]}$  grupy  $S_n$  výše naznačeným způsobem mají matice  $D^{[\lambda]}(P)$  pro všechny permutace  $P \in S_{n-1}$  kvazidiagonální tvar, odpovídající direktnímu součtu ireducibilních reprezentací grupy  $S_{n-1}$ .

Díky tomu můžeme zapsat matice libovolné reprezentace  $D^{[\lambda]}$  grupy  $S_n$ , známe-li matice ireducibilních reprezentací grupy  $S_{n-1}$  a matici odpovídající transpozici  $T \equiv (n-1, n)$  pro níž platí:

$$\hat{\mathbf{T}}|[\lambda]; r, r, r_{n-2}, \dots, 1\rangle = |[\lambda]; r, r, r_{n-2}, \dots, 1\rangle \quad (11.34)$$

$$\hat{\mathbf{T}}|[\lambda]; r, r-1, r_{n-2}, \dots, 1\rangle = -|[\lambda]; r, r-1, r_{n-2}, \dots, 1\rangle, \quad (11.35)$$

Pokud  $(r-1, r, r_{n-2}, \dots, 1)$  není možným Yamanouchiho symbolem.  $\forall r = s$ , pro něž také  $(s, r, r_{n-2}, \dots, 1)$  je možným Yamanouchiho symbolem, platí:

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{T}}|[\lambda]; r, s, r_{n-2}, \dots, 1\rangle &= \sigma_{rs} |[\lambda]; r, s, r_{n-2}, \dots, 1\rangle + (1 - \sigma_{rs}^2)^{1/2} \dots \\ &\quad \cdot |[\lambda]; s, r, r_{n-2}, \dots, 1\rangle, \end{aligned} \quad (11.36)$$

kde

$$\sigma_{rs} \equiv (\lambda_r - \lambda_s + s - r)^{-1}. \quad (11.37)$$

Takto zkonstruované matice reprezentace  $D^{[\lambda]}$  jsou unitární, reálné a symetrické.

Krom toho platí mezi maticovými elementy sdružených reprezentací jednoduchý vztah

$$D_{(\tilde{r})(\tilde{s})}^{[\tilde{\lambda}]}(P) = \Lambda_{(r)}^{[\lambda]} \cdot \Lambda_{(s)}^{[\lambda]} \cdot \varepsilon_P \cdot D_{(r)(s)}^{[\lambda]}(P), \quad (11.38)$$

kde  $\Lambda_{(r)}^{[\lambda]}$  je rovno +1 resp. -1 podle toho, zda Yamanouchiho symbol  $(r)$  je sudou resp. lichou permutací uspořádané  $n$ -tice čísel

$$\underbrace{(1, 1, \dots, 1)}_{\lambda_1 \text{ čísel}} \underbrace{(2, 2, \dots, 2, \dots)}_{\lambda_2 \text{ čísel}}. \quad (11.39)$$

Víme že direktní součin  $D^{[\lambda]} \otimes D^{[\mu]}$  obsahuje právě jednu reprezentaci  $D^{[n]}$  grupy  $S_n$  tehdy a jen tehdy, když  $[\lambda] = [\mu]$ .

Přitom odpovídající Clebsh – Gordanův ( C – G ) rozvoj má tvar

$$|\phi, [n]; (1)\rangle = (n_{[\lambda]})^{-1/2} \cdot \sum_{(r)} |\psi, [\lambda]; (r)\rangle |\phi, [\lambda]; (r)\rangle . \quad (11.40)$$

Zde a v dalších analogických formulích je třeba rozumět

$$[n] \equiv [n, 0, 0, \dots, 0] , \quad (11.41)$$

kdežto

$$[\lambda] \equiv [\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n] . \quad (11.42)$$

Z formule ( 11.39 ) vidíme, že pro charaktery sdružených reprezentací platí:

$$\chi^{[\tilde{\lambda}]}(P) = \varepsilon_P \cdot \chi^{[\lambda]}(P) . \quad (11.43)$$

Tedy

$$\frac{1}{n!} \cdot \sum_P \chi^{[1^n]}(P) \cdot \chi^{[\tilde{\lambda}]}(P) \cdot \chi^{[\mu]}(P) = \frac{1}{n!} \cdot \sum_P \chi^{[\lambda]}(P) \cdot \chi^{[\mu]}(P) = \delta_{[\lambda], [\mu]} , \quad (11.44)$$

kde jsme využily známé relace ortogonalit a toho, že

$$\chi^{[1^n]}(P) = \varepsilon_P . \quad (11.45)$$

Formule ( 11.44 ) však neříká nic jiného, než že direktní součin

$$D^{[\mu]} \otimes D^{[\tilde{\lambda}]} \quad (11.46)$$

obsahuje reprezentaci  $D^{[1^n]}$  ( a to právě jednou ) tehdy a jen tehdy, když  $[\mu] = [\lambda]$ .

Přitom odpovídající C – G rozvoj má tvar

$$|\phi, [1^n]; (1)\rangle = \left(n_{[\lambda]}\right)^{-1/2} \cdot \sum_{(r)} \Lambda_{(r)}^{[\lambda]} \cdot |\psi, [\lambda]; (r)\rangle |\phi, [\tilde{\lambda}]; (\tilde{r})\rangle. \quad (11.47)$$

Uvažujme soustavu  $N + M$  částic, v níž je interakce prvních  $N$  částic se zbývajícími  $M$  částicemi zanedbatelná.

Nechť  $\psi(1, \dots, N)$  resp.  $\phi(N + 1, \dots, N + M)$  je vlnová funkce popisující stacionární stav první resp. druhé skupiny.

Pokud jsou částice první skupiny rozlišitelné od částic skupiny druhé, potom funkce

$$\Psi(1, \dots, N + M) \equiv \psi(1, \dots, N) \cdot \phi(N + 1, \dots, N + M) \quad (11.48)$$

představuje vlnovou funkci stacionárního stavu uvažovaného systému. U nerozlišitelných částic je situace komplikovanější, neboť vlnové funkce se musejí při permutacích proměnných chovat předepsaným způsobem.

Pro analýzu této úlohy zavedeme tzv. **vnější součin reprezentací symetrických grup**:

Nechť  $n_{[\lambda]}$  funkcí  $\psi_{(r)}^{[\lambda]}$  tvoří bázi reprezentace  $D^{[\lambda]}$  grupy  $S_N$ , tj.

$$\hat{P} \psi_{(r)}^{[\lambda]}(1, \dots, N) = \sum_{(r')} D_{(r'), (r)}^{[\lambda]}(P) \cdot \psi_{(r')}^{[\lambda]}(1, \dots, N) \quad (11.49)$$

a nechť  $n_{[\mu]}$  funkcí  $\phi_{(s)}^{[\mu]}$  tvoří bázi reprezentace  $D^{[\mu]}$  grupy  $S_M$ , tj.

$$\hat{P} \phi_{(s)}^{[\mu]}(N + 1, \dots, N + M) = \sum_{(s')} D_{(s'), (s)}^{[\mu]}(P) \cdot \phi_{(s')}^{[\mu]}(N + 1, \dots, N + M). \quad (11.50)$$

$(M + N)$  proměnných můžeme rozdělit  $\binom{M + N}{N}$  způsoby do dvou

skupin tak, že do první skupiny připadne vždy  $N$  proměnných.

Každé dvojici funkcí  $\psi_{(r)}^{[\lambda]}$ ,  $\phi_{(s)}^{[\mu]}$  přiřadíme  $\binom{M + N}{N}$  funkcí

$$\Phi_{(r)(s)k}^{[\lambda][\mu]}(1, \dots, M + N) \equiv \psi_{(r)}^{[\lambda]}(j_1, \dots, j_N) \cdot \phi_{(s)}^{[\mu]}(j_{N+1}, \dots, j_{N+M}), \quad (11.51)$$

kde  $k = 1, \dots, \binom{M+N}{N}$ ;  $j_1, \dots, j_N$  jsou proměnné připadající do

první skupiny při  $k$ -tém z výše uvedených dělení.

Funkce ( 11.51 ) tvoří bázi reprezentace grupy  $S_{N+M}$ .

Tato  $n_{[\lambda]} \cdot n_{[\mu]} \cdot \binom{M+N}{N}$ -rozměrná reprezentace, kterou nazýváme

vnějším součinem reprezentace  $D^{[\lambda]}$  grupy  $S_N$  s reprezentací  $D^{[\mu]}$  grupy  $S_M$ , je reducibilní.

Její ireducibilní komponenty lze určit pomocí Y-polyomin s využitím následujícího postupu definujícího součin Y-polyomin.

- 1) V Y-polyominu  $[\mu]$  vyplníme všechny buňky prvního řádku číslem 1, druhého řádku číslem 2, atd.
- 2) Y-polyomina  $[\lambda]$  doplníme jednou buňkou označenou číslem 1 všemi možnými způsoby vedoucími k Y-polyominu o  $(n_{[\lambda]} + 1)$  buňkách.  
K takto vzniklým polyominům připojíme další buňku označenou číslem 1 všemi možnými způsoby ( viz však bod 3 ) vedoucími k Y-polyominu o  $(n_{[\lambda]} + 2)$  buňkách atd. až jsou vyčerpány všechny buňky Y-polyomina  $[\mu]$  označené číslem 1.  
Stejně postupujeme s buňkami označenými číslem 2 atd. dokud není vyčerpáno všech  $n_{[\mu]}$  buněk Y-polyomina  $[\mu]$ .
- 3) Všechna Y-polyomina v nichž je nyní v témže sloupci více než jedna buňka označená stejným číslem vynecháme.
- 4) Pro každé takto obdržené Y-polyomino zapíšeme posloupnost čísel tak, jak v něm postupně figurují čtena zprava doleva a shora dolů.  
Polyomino je přípustné jen tehdy, stojí-li v této posloupnosti vlevo od libovolného čísla  $k > 1$  alespoň tolik čísel  $(k - 1)$  jako čísel  $k$ . Nepřípustná polyomina vynecháme.
- 5) Všechna polyomina s identickým rozmístěním čísel je nutno považovat za polyomino jediné.

Pro ilustraci si nyní vypočteme vnější součin polyomin

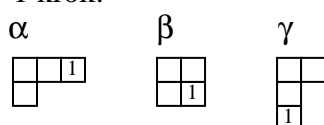


Dle bodu 1. vyplníme druhé polyomino

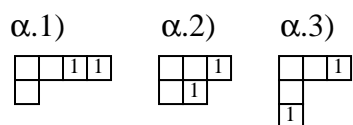


Dle bodu 2. doplňujeme první polyomino ve třech krocích:

1 krok:

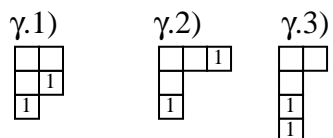
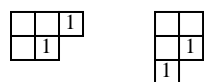


2. krok



( 11.52 )

beta.1)      beta.2)



Z nich jsou polyomina  $\beta.1)$ ,  $\gamma.1)$ ,  $\gamma.2)$  ekvivalentní polyominům  $\alpha.2)$ ,  $\beta.2)$ ,  $\alpha.3)$ , takže je dle bodu 5 můžeme vypustit, a dle bodu 3 je polyomino  $\gamma.3)$  nepřipustné.

3. krok:

$\alpha.1.1)$	$\alpha.1.2)$	$\alpha.1.3)$	
$\alpha.2.1)$	$\alpha.2.2)$	$\alpha.2.3)$	
$\alpha.3.1)$	$\alpha.3.2)$	$\alpha.3.3)$	( 11.53 )
$\beta.2.1)$	$\beta.2.2)$	$\beta.2.3)$	

Konfigurace  $\alpha.1.1)$ ,  $\alpha.2.1)$ ,  $\alpha.3.1)$ ,  $\beta.2.1)$ , jsou nepřípustné dle bodu 4.  
Celkem tedy

$$\begin{aligned}
 \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} &= \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus 2 \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \\
 &\oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} .
 \end{aligned}
 \tag{ 11.54 }$$

Jako další jednoduché příklady uveďme několik vnějších součinů úplně symetrických a úplně antisymetrických reprezentací grupy  $S_n$  :

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}
 \tag{ 11.55 }$$

$$\begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}
 \tag{ 11.56 }$$

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|} \hline \square \\ \hline \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array}
 \tag{ 11.57 }$$





Kde  $G_l^j$  je  $(l, j)$ -tým elementem nesignulární matice  $\mathbf{G}$ .  
Tato transformace převádí obecný vektor

$$|\psi_j\rangle = \sum_{j=1}^n \psi_j |\varphi_j\rangle \quad (11.65)$$

ve vektor

$$|\psi'\rangle = \hat{\mathbf{G}}|\psi\rangle = \sum_{j=1}^n \psi'_j |\varphi_j\rangle \quad (11.66)$$

kde

$$\psi'_j = \sum_{l=1}^n G_l^j \psi_l \quad ; j = 1, \dots, n . \quad (11.67)$$

O  $n$ -tici libovolných veličin  $\psi_j$  ( $j = 1, \dots, n$ ) říkáme, že představuje komponenty **kovariantního vektoru**, jestliže se při transformaci  $G \in \mathbf{GL}(n)$  chová podle vzorce (11.67).

Uvažujme nyní direktní součin  $N$  prostorů  $V^{(n)}$ :

$$V \equiv \prod_{i=1}^N \otimes V^{(n)}(i) . \quad (11.68)$$

Libovolný vektor z prostoru  $V$  můžeme vyjádřit jako

$$|\phi\rangle = \sum_{j_1, \dots, j_N=1}^n \phi_{j_1, \dots, j_N} \cdot |\varphi_{j_1}(1)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_N}(N)\rangle . \quad (11.69)$$

Elementu  $G \in \mathbf{GL}(n)$  přiřadíme operátor

$$\hat{\mathbf{G}} \equiv \prod_{i=1}^N \otimes \hat{\mathbf{G}}(i) . \quad (11.70)$$

Přitom

$$\hat{\mathbf{G}}|\phi\rangle = \sum_{j_1 \dots j_N} \phi'_{j_1 \dots j_N} \cdot |\varphi_{j_1}(1)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_N}(N)\rangle , \quad (11.71)$$

kde

$$\phi'_{j_1 \dots j_N} \equiv \sum_{l_1 \dots l_N} \Gamma_{j_1 \dots j_N}^{l_1 \dots l_N} \cdot \phi_{l_1 \dots l_N} , \quad (11.72)$$

$$\Gamma_{j_1 \dots j_N}^{l_1 \dots l_N} = G_{j_1}^{l_1} \cdot \dots \cdot G_{j_N}^{l_N} . \quad (11.73)$$

O libovolných dvou veličinách  $\phi_{j_1 \dots j_N}$  říkáme, že tvoří komponenty **kovariantního tenzoru**  $N$ -tého řádu, jestliže se při transformacích  $G \in \mathbf{GL}(n)$  chovají podle vzorce ( 11.72 ).

V prostoru ( 11.68 ) definujeme **operátory transpozic**

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{P}}(im) \cdot |\varphi_{j_1}(1)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_i}(i)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_m}(m)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_N}(N)\rangle &\equiv \\ &\equiv |\varphi_{j_1}(1)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_m}(i)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_i}(m)\rangle \cdot \dots \cdot |\varphi_{j_N}(N)\rangle . \end{aligned} \quad (11.74)$$

$n^N$ -rozměrné matice definované elementy ( 11.74 ) jsou **bisymetrické**, tj. platí

$$\Gamma_{j_1 \dots j_i \dots j_m \dots j_N}^{l_1 \dots l_i \dots l_m \dots l_N} = \Gamma_{j_1 \dots j_m \dots j_i \dots j_N}^{l_1 \dots l_m \dots l_i \dots l_N} \quad (11.75)$$

a tedy

$$\left[ \hat{\mathbf{G}}, \hat{\mathbf{P}}(im) \right] = 0 . \quad (11.76)$$

Operátory  $\hat{\mathbf{G}}$  tvoří reprezentaci grupy  $\mathbf{GL}(n)$  v prostoru  $V$ .

V témže prostoru vytvářejí operátory  $\hat{\mathbf{P}}(im)$  a jejich součiny reprezentaci symetrické grupy  $S_N$ .

V obou případech ( pro  $n, N > 1$  ) se jedná o reprezentace reducibilní. Jejich rozklad na ireducibilní komponenty velice usnadňují tzv.

**Yungovy operátory:**

Každému standardnímu schématu ( $\Leftrightarrow$  Yamanouchiho symbolu  $(r)$ ) přiřadíme **symetrizátor**

$$\hat{\mathbf{S}}((r)) \equiv \sum' \hat{\mathbf{P}} \quad (11.77)$$

a **antisymetrizátor**

$$\hat{\mathbf{Q}}((r)) \equiv \sum'' \varepsilon_p \cdot \hat{\mathbf{P}} , \quad (11.78)$$

kde suma  $\sum'$ , resp.  $\sum''$  probíhá přes všechny permutace které mění místa pouze symbolů nacházejících se v těchže řádcích, resp. sloupcích schématu.

Pro Yungovy operátory

$$\hat{\mathbf{Y}}((r)) \equiv \hat{\mathbf{Q}}((r)) \cdot \hat{\mathbf{S}}((r)) \quad (11.79)$$

platí

$$\hat{\mathbf{Y}}((r)) \cdot \hat{\mathbf{Y}}((r')) = \delta_{(r)(r')} \frac{N!}{n_{[\lambda]}} \hat{\mathbf{Y}}((r)) , \quad (11.80)$$

$$\sum_{(r)} \frac{n_{[\lambda]}}{N!} \hat{\mathbf{Y}}((r)) = 1 , \quad (11.81)$$

kde  $n_{[\lambda]}$  je dimenze reprezentace  $D^{[\lambda]}$  grupy  $S_N$  (rozklad  $[\lambda]$  odpovídá Yamanouchiho symbolu  $(r)$ ).

Díky tomu můžeme prostor ( 11.68 ) vyjádřit jako

$$V = \sum_{(r)} \oplus V_{(r)}, \quad (11.82)$$

přičemž

$$\forall |\psi\rangle \in V: \hat{Y}((r))|\psi\rangle \in V_{(r)}. \quad (11.83)$$

Suma ve formulích ( 11.81 ), ( 11.82 ) probíhá přes všechna schémata s celkovým počtem buněk rovným  $N$  a s počtem řádků nepřevyšujícím  $n$ .

Standardnímu schématu s  $m$  řádky odpovídá podprostor tenzorů, jejichž komponenty jsou úplně antisymetrické alespoň v jedné  $m$ -tici indexů.

Každý z nich však může nabývat pouze  $n$  různých hodnot.

Tedy, při  $m > n$  je tenzor identity roven nule.

Komutativita ( 11.76 ) zaručuje, že  $V_{(r)}$  je invariantním podprostorem operátoru  $\hat{G}$ .

Je možno ukázat, že  $V_{(r)}$  již neobsahuje žádné invariantní prostory a tedy  $V_{(r)}$  je prostorem ireducibilní reprezentace grupy  $GL(n)$ .

Reprezentace grupy  $GL(n)$  v podprostorech  $V_{(r)}$  a  $V_{(r')}$  jsou ekvivalentní právě tehdy, když  $(r)$  a  $(r')$  přísluší k témuž Y-polyominu.

Ireducibilní reprezentace grupy  $GL(n)$  realizované v prostoru kovariantních tenzorů  $N$ -tého řádu proto lze jednoznačně ( až na ekvivalenci ) charakterizovat pomocí Y-polyomin  $[\lambda]$  ( $\equiv U^{[\lambda]}$ ).

Je možné ukázat, že: 1) Ke každému Y-polyominu s  $N$  buňkami a ne více než  $n$  řádky existuje reprezentace  $U^{[\lambda]}$ .

2) Dimenze reprezentace  $U^{[\lambda]}$  je

$${}^n N_{[\lambda]} = \frac{\Delta(l_1, \dots, l_n)}{\Delta(n, n-1, \dots, 1)}, \quad (11.84)$$

kde

$$\Delta(x_1, \dots, x_n) \equiv \prod_{i < j} (x_i - x_j) \quad (11.85)$$

a

$$l_j \equiv n + \lambda_j - j . \quad ( 11.86 )$$

Jestliže matice

$$\mathbf{U}^{[\lambda_1, \dots, \lambda_n]}(G) \quad ( 11.87 )$$

tvoří reprezentaci  $U^{[\lambda_1, \dots, \lambda_n]}$ , potom také matice

$$(\det \mathbf{G})^m \cdot \mathbf{U}^{[\lambda_1, \dots, \lambda_n]}(G) \quad ( 11.88 )$$

tvoří pro libovolné celé  $m$  reprezentaci grupy  $GL(n)$ .

Pro  $m \geq -\lambda_n$  je tato reprezentace ekvivalentní s výše definovanou reprezentací

$$U^{[\lambda_1+m, \dots, \lambda_n+m]} . \quad ( 11.89 )$$

Pro  $m < -\lambda_n$  budeme formuli ( 11.88 ) považovat za definici reprezentace ( 11.89 ).

Je možné dokázat, že reprezentace

$$U^{[\lambda_1, \dots, \lambda_n]} ; \quad U^{[-\lambda_n, \dots, -\lambda_1]} \quad ( 11.90 )$$

jsou navzájem **kontragradiční**.

Vedle tenzorů kovariantních zavádíme analogicky **tenzory kontravariantní**.

Označme  $(j, l)$ -tý element matice  $(\mathbf{G}^{-1})^T$  jako  $G_l^j$  a definujme

$$\Gamma_{l_1 \dots l_N}^{j_1 \dots j_N} \equiv G_{l_1}^{j_1} \cdot \dots \cdot G_{l_N}^{j_N} . \quad ( 11.91 )$$

O libovolných  $n^N$  veličinách  $\phi^{j_1, \dots, j_N}$  říkáme, že tvoří komponenty kontravariantního tenzoru  $N$ -tého řádu, jestliže každému elementu  $G \in GL(n)$  odpovídá transformace

$$\phi^{j_1 \dots j_N} \rightarrow \phi'^{j_1 \dots j_N} \equiv \sum_{l_1 \dots l_N} \Gamma^{j_1 \dots j_N}_{l_1 \dots l_N} \cdot \phi^{l_1 \dots l_N}. \quad (11.92)$$

$n^N$ -rozměrné matice definované elementy ( 11.91 ) tvoří reducibilní reprezentaci grupy **GL**( $n$ ).

Její rozklad na ireducibilní komponenty  $\bar{U}^{[\lambda]}$  se provádí zcela stejně jako rozklad na komponenty  $U^{[\lambda]}$  v případě tenzorů kovariantních. Reprezentace  $\bar{U}^{[\lambda]}$  a  $U^{[\lambda]}$  jsou vzájemně kontrgradientní a tedy reprezentace

$$U^{[-\lambda_1, \dots, -\lambda_n]} ; U^{[\lambda_1, \dots, \lambda_n]} \quad (11.93)$$

jsou ekvivalentní.

Všechny  $n$ -rozměrné unitární, unimodulární matice tvoří grupu **Special unitary** ( **SU**( $n$ ) ).

Omezíme-li se ve formuli ( 11.87 ) na  $G \in \mathbf{SU}(n)$ , obdržíme reprezentaci grupy **SU**( $n$ ).

Je možno ukázat, že tato reprezentace je ireducibilní, tj. ireducibilní reprezentace grupy **GL**( $n$ ) zůstávají ireducibilními i z hlediska její podgrupy **SU**( $n$ ).

Z formule ( 11.89 ) však vidíme, že

$$U^{[\lambda_1, \dots, \lambda_n]} ; U^{[\lambda_1+m, \dots, \lambda_n+m]} \quad (11.94)$$

jsou vzhledem k unimodularitě, pro libovolné celé  $m$  ekvivalentními reprezentacemi grupy **SU**( $n$ ).

Speciálně pro  $m = -\lambda_n$  odtud plyne, že ekvivalentními reprezentacemi grupy **SU**( $n$ ) jsou

$$U^{[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_n]} ; U^{[\lambda_1-\lambda_n, \lambda_2-\lambda_n, \dots, 0]}. \quad (11.95)$$

Ve skutečnosti existuje jedno-jednoznačné přiřazení mezi Y-polyominy s počtem řádků nepřevyšujícím  $n - 1$  a ireducibilními reprezentacemi grupy **SU**( $n$ ).

Každému Y-polyominu uvedeného typu odpovídá právě jedna (až na ekvivalenci) ireducibilní reprezentace grupy  $SU(n)$  a reprezentace odpovídající různým polyominům jsou neekvivalentní.

Y-polyomina odpovídající rozkladům  $[\lambda_1, \dots, \lambda_{n-1}, 0]$  a  $[\lambda_1, \lambda_1 - \lambda_{n-1}, \dots, \lambda_1 - \lambda_2, 0]$  se navzájem doplňují do obdélníku délky  $\lambda_1$  a výšky  $n$ . Z předchozího plyne, že

$$U^{[\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{n-1}, 0]} ; U^{[\lambda_1, \lambda_1 - \lambda_{n-1}, \dots, \lambda_1 - \lambda_2, 0]} \quad (11.96)$$

jsou vzájemně kontrgradientní reprezentace grupy  $SU(n)$ .

Pro direktní součiny ireducibilních reprezentací grupy  $SU(n)$  platí

$$U^{[\lambda]} \otimes U^{[\mu]} = \sum_{[\nu]} \oplus U^{[\nu]} \quad (11.97)$$

kde suma probíhá přes všechna Y-polyomina, která jsou obsažena v součinu polyomin  $[\lambda]$ ,  $[\mu]$  a která nemají více než  $n$  řádků.

Např. pro grupu  $SU(3)$  z formule ( 11.54 ) plyne

$$U^{[2,1]} \otimes U^{[2,1]} = U^{[4,2]} \oplus U^{[4,1,1]} \oplus U^{[3,3]} \oplus U^{[3,2,1]} \oplus U^{[2,2,2]} . \quad (11.98)$$

Pro grupu  $SU(3)$  tak platí:

$$\begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \otimes \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} = \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & & & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \\ \hline \end{array} \oplus 2 \begin{array}{|c|c|c|} \hline \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \\ \hline \end{array} \oplus \begin{array}{|c|c|} \hline \square & \square \\ \hline \square & \square \\ \hline \end{array} \quad (11.99)$$

původní informace

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array} \quad (11.100)$$

se nám nyní transformuje na

$$\begin{array}{|c|c|c|c|c|c|c|c|c|c|} \hline \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square & \square \\ \hline \end{array} . \quad (11.101)$$



V následující kapitole se podíváme na způsob, kterým se v **teorii cytoprostoru** realizuje morfogeneze energie.

## 2) Úplný systém elementárních částic

V této kapitole se seznámíme s metodu tzv. **grupových plastifikací polyomin** a demonstrujeme si její praktické využití ve fyzice elementárních částic.

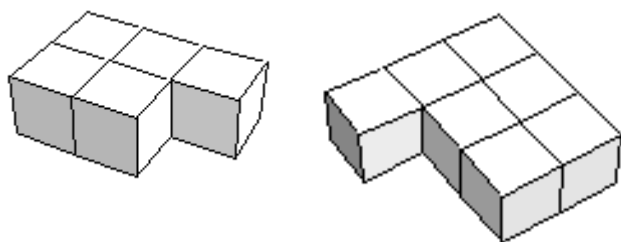
Naším cílem bude ukázat, že standardní model, redukující veškerou přírodu na pouhých 6 druhů kvarků a 6 druhů leptonů ještě nemusí být nejnižším patrem na stromě možných redukcí ve světě elementárních částic. Základní částici veškerého jsou kvantiony – přiřazujeme v **teorii cytoprostoru** plastifikované monomino, čili **1-stereomino** – viz obr. 11.2:

Obr. 11.2



Jako další příklad zde uvádíme několik plastifikovaných polyomin neboli krátce ***n*-stereomin**.

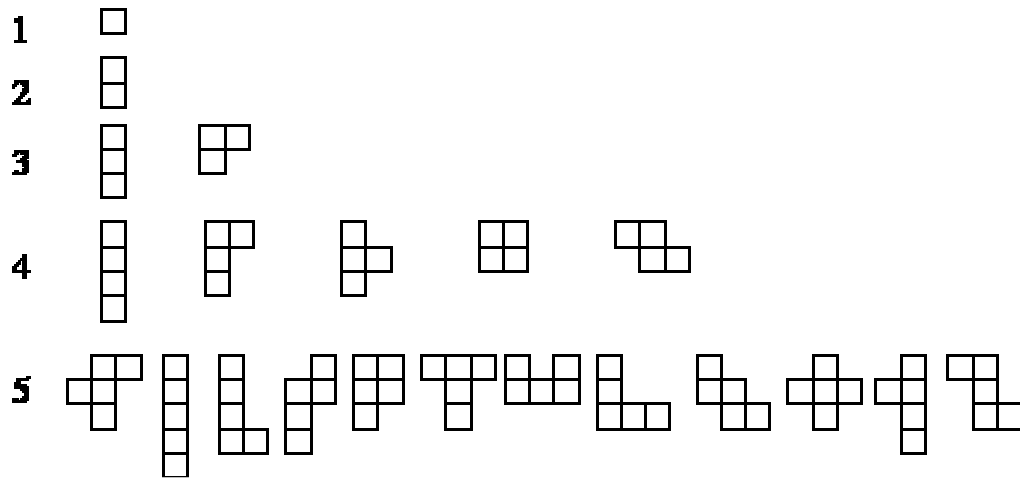
Obr. 11.3



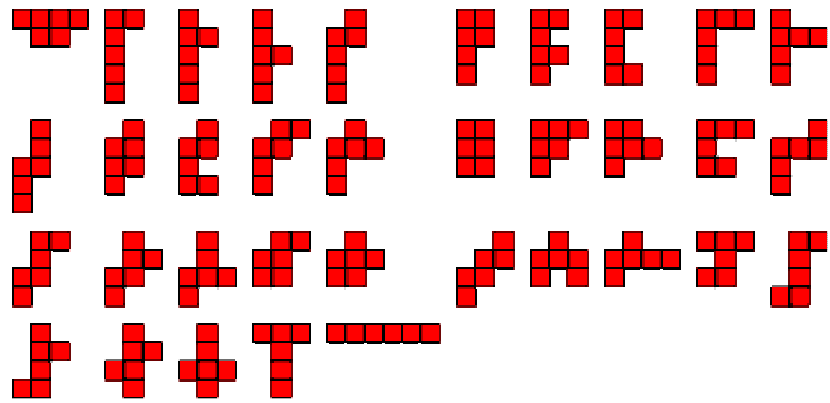
Ta by již mohla odpovídat určitým složeným částicím energie ~ hmoty. Na obr. 11.4 jsou znázorněna všechna existující *n*-omina pro  $n = 1, 2, \dots, 8$ , neboli monomina, domina, ... , oktomina.

Přitom polyomina lišící se pouze transformací rotace či reflexe, či jejich vzájemnou kombinací, zde považujeme za jeden a týž prvek množiny *n*-omin.

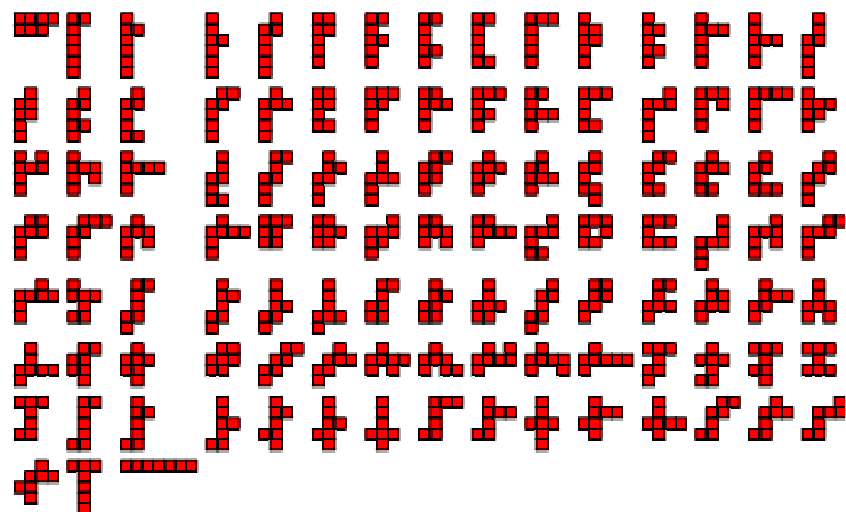
Obr. 11.4

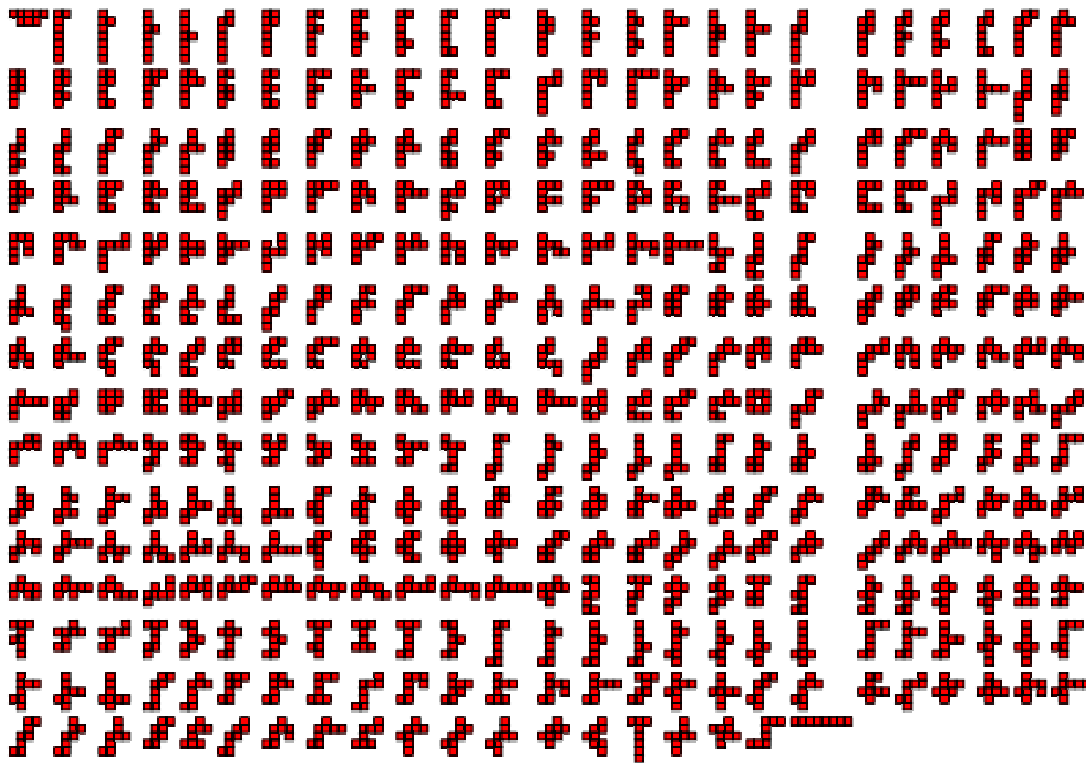


6



7





Pro každé  $n$  je k dispozici několik čísel vztahujících se k vyjádření počtu  $n$ -omin.

Tabulka 11.2 nám ukazuje hodnoty jednotlivých funkcí pro  $n = 1$  až  $n = 12$ , přičemž:

$e(n)$  = počet Y-polyomin tvořených množstvím  $n$  spojených monomin.

$g(n)$  = počet  $n$ -omin, nepočítáme-li rotace a zrcadlení.

$h(n)$  = počet  $n$ -omin, nepočítáme-li rotace.

$t(n)$  = celkový počet  $n$ -omin.

$s(n)$  = počet  $n$ -omin invariantních (až na rotace) vzhledem k zrcadlení

$a(n)$  = počet prvků  $h(n)$ , které přispívají jedním prvkem do  $t(n)$ .

$b(n)$  = počet prvků  $h(n)$ , které přispívají 2 prvky do  $t(n)$ .

$c(n)$  = počet prvků  $h(n)$ , které přispívají 4 prvky do  $t(n)$ .

Tab. 11.2

$n$	$e(n)$	$g(n)$	$h(n)$	$t(n)$	$s(n)$	$a(n)$	$b(n)$	$c(n)$
1	1	1	1	1	1	1	0	0
2	1	1	1	2	1	0	1	0
3	2	2	2	6	2	0	1	1
4	3	5	7	19	3	1	3	3
5	4	12	18	63	6	1	3	14
6	6	35	60	216	10	0	12	48
7	8	108	196	760	20	0	12	184
8	12	369	704	2725	34	3	41	660
9	16	1285	2500	9910	70	2	42	2456
10	20	4655	9189	36446	121	0	155	9034
11	24	17073	33896	135268	250	0	158	33738
12	29	63600	126759	505861	441	9	574	126176

Hodnoty  $s(n)$  se zdají být velmi podobné binomickým koeficientům, ale ne přesně.

Také existují zřejmé vztahy mezi těmito funkcemi, jako např.

$$h(n) = a(n) + b(n) + c(n) , \quad (11.102)$$

$$t(n) = a(n) + 2b(n) + 4c(n) , \quad (11.103)$$

$$s(n) = 2g(n) - h(n) , \quad (11.104)$$

$$3a(n) + 2b(n) = 4h(n) - t(n) . \quad (11.105)$$

Povšimněme si, že uspořádání vypočtená pomocí  $a(n)$  mají 4-směrnou symetrii, která znamená, že každý čtverec (kromě centrálního čtverce u lichého počtu) se musí objevit čtyřikrát.

Proto  $a(a)=0$  pro každé  $a$ , které po celočíselném dělení 4 dává zbytek 2 nebo 3.

Počet Y-polyomin pro dané  $n$  může být vyjádřen vztahem

$$e(n) = \frac{1}{2} \left( \frac{n(n+1)}{2} + \left[ \frac{n+2}{2} \right] + \operatorname{sgn}(n-8) \cdot \left[ \sqrt{n} \right] - \sum_{k=1}^n \left[ \frac{n}{k} \right] \right) , \quad (11.106)$$

kde  $[x]$  značí maximální celé číslo menší než  $x$  (např.  $[8,12] = 8$ ;

[8] = 7).

Již na konci 60. let minulého století vyslovil Murray Gell-Mann hypotézu, podle níž by se měly kvarky sestávat z ještě elementárnějších struktur, které nazval **preony**.

V kap. 8 jsme vyslovili předpoklad, že preony jsou elementárními částicemi které jsou základní stavební entitou z níž jsou vytvořeny všechny ostatní částice, tj. kvarky a leptony.

Preony nesou 4 význačné charakteristiky, jež mohou nabývat hodnot uvedených v následující tabulce:

Tab. 11.3

Chuť	A (acid)	B (bitter)
Teplota	-1; -2/3; -1/3; 0	0; 1/3; 2/3; 1
El. náboj	-2/3	1/3
Barva	1/3( R, G, B )	1/3( R, G, B )

(Upozorňujeme, že kvantové číslo T zvané teplota nemá žádný vztah k fyzikální veličině T zvané termodynamická teplota).

Teplota a barva jsou určeny kombinací orientace vektorů cytonové parity (viz kapitola 3) jednotlivých kvantonů uvnitř preonů.

Kombinací chuti a teploty vznikají vůně.

Jak ukazuje následující tabulka, preony se seskupují buď do dvojic s různou teplotou svých členů, tvoříce tak 6 druhů vůní kvarků, nebo do trojic s různou teplotou svých členů, tvoříce 6 druhů vůní leptonů s celkovou teplotou  $T = 0$ .

Protože může existovat i více než jedna kombinace různých teplot dávající tutéž sumu, může existovat více možností kterak nakombinovat z preonů jeden a tentýž kvark či lepton.

Kvarky a leptony se seskupují do dvojic jež se vzájemně odlišují svojí hmotností.

Proto zpravidla hovoříme o lehkých, středně těžkých a těžkých kvarcích či leptonech.

Tabulka 11.4 ukazuje že to není pouhá náhoda, neboť částice tvořící tyto dvojice mají vždy tutéž celkovou teplotu a liší se od sebe pouze chutí.

Tab. 11.4

Třída	Vůně kvarků	Značka	Vůně leptonů	Značka
Lehké	$A^{-2/3} B^1$ $A^{-1/3} B^{2/3}$ $A^0 B^{1/3}$	d	$A^{-1/3} A^0 B^{1/3}$	e
	$B^{1/3} B^0$	u	$B^{1/3} B^0 A^{-1/3}$	$\nu_e$
Středně těžké	$A^{-1/3} B^1$ $A^0 B^{2/3}$	s	$A^{-2/3} A^0 B^{2/3}$	$\mu$
	$B^{2/3} B^0$	c	$B^{2/3} B^0 A^{-2/3}$	$\nu_\mu$
Těžké	$A^0 B^1$	b	$A^{-2/3} A^{-1/3} B^1$ $A^{-1} A^0 B^1$	$\tau$
	$B^{2/3} B^{1/3}$ $B^1 B^0$	t	$B^{2/3} B^{1/3} A^{-1}$ $B^1 B^0 A^{-1}$	$\nu_\tau$

Tabulka 11.5 je přehledem základních kvantových charakteristik kvarků plynoucích z jejich vnitřní preonové struktury.

Tab. 11.5

		Vůně					
Kvantová čísla	Symbol	d	u	s	c	b	t
Chuť	t	AB	BB	AB	BB	AB	BB
Teplota	T	1/3	1/3	2/3	2/3	1	1
Baryonové číslo	B	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3	1/3
Elektrický náboj	Q	-1/3	2/3	-1/3	2/3	-1/3	2/3
Helicita	J	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2	1/2
Dolní projekce izospinu	$I_z^-$	-1	0	0	0	0	0
Horní projekce izospinu	$I_z^+$	0	1	0	0	0	0
Podivnost	$\sigma$	0	0	-1	0	0	0
Půvab	$\gamma$	0	0	0	1	0	0
Krása	$\beta$	0	0	0	0	-1	0
Pravda	$\tau$	0	0	0	0	0	1

Pro elektrický náboj každého kvarku pak platí následující vztah:

$$Q = \frac{B + I_z + \sigma + \gamma + \beta + \tau}{2} . \quad (11.107)$$

Způsob, kterak jsou z jednotlivých kvarků sestaveny ostatní hadrony ukazují následující tabulky.

Tabulky 11.6 – 11.9 představují úplný systém rodiny baryonů, coby bezbarvých soustav tří kvarků:

V tabulkách 11.6 a 11.7 je představena úplná rodina hyponukleonů (antiparalelně orientované spiny kvarků) a hypernukleonů (paralelně orientované spiny kvarků).

Tabulka 11.8 pak zahrnuje veškeré existující hyperony (jen v základním stavu – vyšší hyperonové rezonance se označují stejně, pouze s hvězdičkami na místě horního indexu).

Tab. 11.6

	$d$	$\bar{d}$	
$du$	$n$	$\bar{n}$	$\overline{du}$
$uu$	$p$	$\bar{p}$	
			$\overline{uu}$

Tab.11.7

	$du$	$\overline{du}$	
$s$	$\Lambda_s^0$	$\overline{\Lambda_s^0}$	$\bar{s}$
$c$	$\Lambda_c^+$	$\overline{\Lambda_c^-}$	$\bar{c}$
$b$	$\Lambda_b^0$	$\overline{\Lambda_b^0}$	$\bar{b}$
$t$	$\Lambda_t^+$	$\overline{\Lambda_t^-}$	$\bar{t}$

Tab. 11.8

	$d$	$u$	$s$	$c$	$b$	$t$	$\bar{t}$	$\bar{b}$	$\bar{c}$	$\bar{s}$	$\bar{u}$	$\bar{d}$	
$dd$	$\Delta^-$	$\Delta^0$	$\Sigma_s^-$	$\Sigma_c^0$	$\Sigma_b^-$	$\Sigma_t^0$	$\overline{\Sigma}_t^0$	$\overline{\Sigma}_b^+$	$\overline{\Sigma}_c^0$	$\overline{\Sigma}_s^+$	$\overline{\Delta}^0$	$\overline{\Delta}^+$	$\overline{dd}$
$uu$	$\Delta^+$	$\Delta^{++}$	$\Sigma_s^+$	$\Sigma_c^{++}$	$\Sigma_b^+$	$\Sigma_t^{++}$	$\overline{\Sigma}_t^{--}$	$\overline{\Sigma}_b^-$	$\overline{\Sigma}_c^-$	$\overline{\Sigma}_s^-$	$\overline{\Delta}^{--}$	$\overline{\Delta}^-$	$\overline{uu}$
$ss$	$\Xi_s^-$	$\Xi_s^0$	$\Omega_{ss}^-$	$\Omega_{sc}^0$	$\Omega_{sb}^-$	$\Omega_{st}^0$	$\overline{\Omega}_{st}^0$	$\overline{\Omega}_{sb}^+$	$\overline{\Omega}_{sc}^0$	$\overline{\Omega}_{ss}^+$	$\overline{\Xi}_s^0$	$\overline{\Xi}_s^+$	$\overline{ss}$
$cc$	$\Xi_c^+$	$\Xi_c^{++}$	$\Omega_{cs}^+$	$\Omega_{cc}^{++}$	$\Omega_{cb}^+$	$\Omega_{ct}^{++}$	$\overline{\Omega}_{ct}^{--}$	$\overline{\Omega}_{cb}^-$	$\overline{\Omega}_{cc}^-$	$\overline{\Omega}_{cs}^-$	$\overline{\Xi}_c^-$	$\overline{\Xi}_c^+$	$\overline{cc}$
$bb$	$\Xi_b^-$	$\Xi_b^0$	$\Omega_{bs}^-$	$\Omega_{bc}^0$	$\Omega_{bb}^-$	$\Omega_{bt}^0$	$\overline{\Omega}_{bt}^0$	$\overline{\Omega}_{bb}^+$	$\overline{\Omega}_{bc}^0$	$\overline{\Omega}_{bs}^+$	$\overline{\Xi}_b^0$	$\overline{\Xi}_b^+$	$\overline{bb}$
$tt$	$\Xi_t^+$	$\Xi_t^{++}$	$\Omega_{ts}^+$	$\Omega_{tc}^{++}$	$\Omega_{tb}^+$	$\Omega_{tt}^{++}$	$\overline{\Omega}_{tt}^{--}$	$\overline{\Omega}_{tb}^-$	$\overline{\Omega}_{tc}^-$	$\overline{\Omega}_{ts}^-$	$\overline{\Xi}_t^-$	$\overline{\Xi}_t^+$	$\overline{tt}$
$du$			$\Sigma_s^0$	$\Sigma_c^+$	$\Sigma_b^0$	$\Sigma_t^+$	$\overline{\Sigma}_t^-$	$\overline{\Sigma}_b^0$	$\overline{\Sigma}_c^-$	$\overline{\Sigma}_s^0$			$\overline{du}$
$ds$				$\Xi_{sc}^0$	$\Xi_{sb}^-$	$\Xi_{st}^0$	$\overline{\Xi}_{st}^0$	$\overline{\Xi}_{sb}^+$	$\overline{\Xi}_{sc}^0$				$\overline{ds}$
$us$				$\Xi_{sc}^+$	$\Xi_{sb}^0$	$\Xi_{st}^+$	$\overline{\Xi}_{st}^-$	$\overline{\Xi}_{sb}^0$	$\overline{\Xi}_{sc}^-$				$\overline{us}$
$dc$					$\Xi_{cb}^0$	$\Xi_{ct}^+$	$\overline{\Xi}_{ct}^-$	$\overline{\Xi}_{cb}^0$					$\overline{dc}$
$uc$					$\Xi_{cb}^+$	$\Xi_{ct}^{++}$	$\overline{\Xi}_{ct}^{--}$	$\overline{\Xi}_{cb}^-$					$\overline{uc}$
$sc$					$\Omega_c^0$	$\Omega_c^+$	$\overline{\Omega}_c^-$	$\overline{\Omega}_c^0$					$\overline{sc}$
$db$						$\Xi_{bt}^0$	$\overline{\Xi}_{bt}^0$						$\overline{db}$
$ub$						$\Xi_{bt}^+$	$\overline{\Xi}_{bt}^-$						$\overline{ub}$
$sb$						$\Omega_b^0$	$\overline{\Omega}_b^0$						$\overline{sb}$
$cb$						$\Omega_b^+$	$\overline{\Omega}_b^-$						$\overline{cb}$

Mezony jsou tvořeny páry kvark – antikvark a jejich fyzikální vlastnosti se liší v závislosti na vzájemné orientaci spinu obou kvarků. Ta může být buď paralelní (**vektorové mezony**), nebo antiparalelní (**skalární mezony**). jejich základní stav, spolu s prvním rezonančním stavem uvádí tabulka 11.9.



Tab. 11.9

Skalární mezony:

	$\bar{d}$	$\bar{u}$	$\bar{s}$	$\bar{c}$	$\bar{b}$	$\bar{t}$
$d$	$\eta^0$	$\pi^-$	$K^0$	$D^-$	$B^0$	$T^-$
$u$	$\pi^+$	$\pi^0$	$K^+$	$\overline{D^0}$	$B^+$	$\overline{T^0}$
$s$	$\overline{K^0}$	$K^-$	$\eta_s^0$	$D_s^-$	$B_s^0$	$\overline{T_s^-}$
$c$	$\overline{D^+}$	$D^0$	$\overline{D_s^+}$	$\eta_c^0$	$B_c^+$	$\overline{T_c^0}$
$b$	$\overline{B^0}$	$B^-$	$\overline{B_s^0}$	$B_c^-$	$Y^0$	$\overline{T_b^-}$
$t$	$T^+$	$T^0$	$T_s^+$	$T_c^0$	$T_b^+$	$Z^0$

Vektorové mezony:

	$\bar{d}^*$	$\bar{u}^*$	$\bar{s}^*$	$\bar{c}^*$	$\bar{b}^*$	$\bar{t}^*$
$d^*$	$\omega^0$	$\rho^-$	$K^{*0}$	$D^{*-}$	$B^{*0}$	$T^{*-}$
$u^*$	$\rho^+$	$\rho^0$	$K^{*+}$	$\overline{D^{*0}}$	$B^{*+}$	$\overline{T^{*0}}$
$s^*$	$\overline{K^{*0}}$	$K^{*-}$	$\phi^0$	$D_s^{*-}$	$B_s^{*0}$	$\overline{T_s^{*-}}$
$c^*$	$\overline{D^{*+}}$	$D^{*0}$	$\overline{D_s^{*+}}$	$\psi^0$	$B_c^{*+}$	$\overline{T_c^{*0}}$
$b^*$	$\overline{B^{*0}}$	$B^{*-}$	$\overline{B_s^{*0}}$	$B_c^{*-}$	$Y'^0$	$\overline{T_b^{*-}}$
$t^*$	$T^{*+}$	$T^{*0}$	$T_s^{*+}$	$T_c^{*0}$	$T_b^{*+}$	$Z'^0$

Skalární mezonové rezonance:

	$\bar{d}^{**}$	$\bar{u}^{**}$	$\bar{s}^{**}$	$\bar{c}^{**}$	$\bar{b}^{**}$	$\bar{t}^{**}$
$d^{**}$	$h^0$	$a^-$	$K^{**0}$	$D^{**,-}$	$B^{**0}$	$T^{**,-}$
$u^{**}$	$a^+$	$\phi^0$	$K^{**+}$	$\overline{D^{**0}}$	$B^{**+}$	$\overline{T^{**0}}$
$s^{**}$	$\overline{K^{**0}}$	$K^{**,-}$	$f^0$	$D_s^{**,-}$	$B_s^{**0}$	$\overline{T_s^{**,-}}$
$c^{**}$	$\overline{D^{**+}}$	$D^{**0}$	$\overline{D_s^{**+}}$	$\chi_c^0$	$B_c^{**+}$	$\overline{T_c^{**0}}$
$b^{**}$	$\overline{B^{**0}}$	$B^{**,-}$	$\overline{B_s^{**0}}$	$B_c^{**,-}$	$\chi_b^0$	$\overline{T_b^{**,-}}$
$t^{**}$	$T^{**+}$	$T^{**0}$	$T_s^{**+}$	$T_c^{**0}$	$T_b^{**+}$	$\chi_t^0$

Vektorové mezonové rezonance:

	$\overline{d}^{***}$	$\overline{u}^{***}$	$\overline{s}^{***}$	$\overline{c}^{***}$	$\overline{b}^{***}$	$\overline{t}^{***}$
$d^{***}$	$h'^0$	$b^-$	$K^{***0}$	$D^{***-}$	$B^{***0}$	$T^{***-}$
$u^{***}$	$b^+$	$\phi'^0$	$K^{***+}$	$\overline{D}^{***0}$	$B^{***+}$	$\overline{T}^{***0}$
$s^{***}$	$\overline{K}^{***0}$	$K^{***-}$	$f'^0$	$D_s^{***-}$	$B_s^{***0}$	$\overline{T}_s^{***-}$
$c^{***}$	$D^{***+}$	$D^{***0}$	$\overline{D}_s^{***+}$	$\chi_c^0$	$B_c^{***+}$	$\overline{T}_c^{***0}$
$b^{***}$	$\overline{B}^{***0}$	$B^{***-}$	$\overline{B}_s^{***0}$	$B_c^{***-}$	$\gamma_b^0$	$\overline{T}_b^{***-}$
$t^{***}$	$T^{***+}$	$T^{***0}$	$T_s^{***+}$	$T_c^{***0}$	$T_b^{***+}$	$\gamma_t^0$

Je na první pohled zřejmé, že pokud budou spiny vázány na preonové chuti, podobně jako náboje, není možno vytvořit fermionové stavy zároveň u kvarků (sudé kombinace chuti) i leptonů (liché kombinace chuti).

Na druhé straně, jsou-li spinové stavy určeny teplotou, pak stačí jednoduše přiřadit kladným teplotám helicitu 1, záporným teplotám helicitu 0 a nulové teplotě helicitu 1/2.

U všech kvarků i leptonů pak existuje alespoň jeden fermionový stav (viz tabulka 11.10).

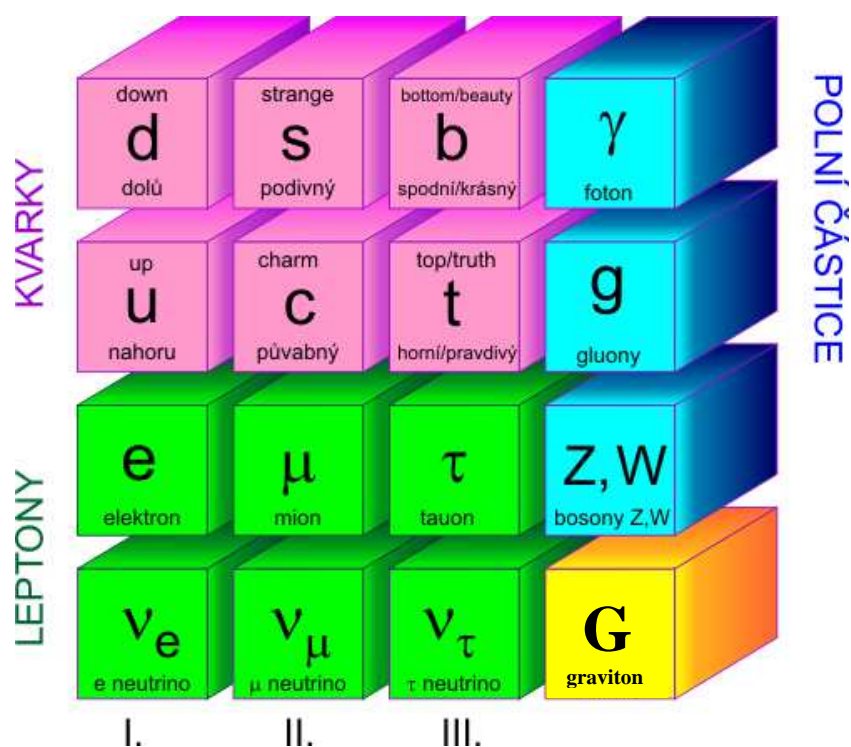
Otázkou však zůstává, jakou úlohu zde hraje oněch 6 zbývajících bosonových stavů, jimž snad kromě stavu ( $B^{2/3}B^{1/3}A^{-1}$ ), jenž by mohl efektivně vystupovat jako graviton  $G$  a stavu ( $A^{-2/3}A^{-1/3}B^1$ ), který by mohl reprezentovat nabitě vektorové bosony  $W^\pm$ , nelze připsat žádnou z dnes známých elementárních částic.

Jediným kandidátem z rodiny předpokládaných nabitých bosonů (neutrální bosony jsou tvořeny páry kvark – antikvark, lepton – antilepton a nepředstavují tedy z tohoto hlediska žádný problém) jsou dosud hypotetické **Axiony** – částice předpovídané grandunifikačními teoriemi, které by měly tvořit podstatnou část tzv. temné hmoty (dark matter) – záhadné neviditelné substance, tvořící drtivou většinu hmoty vesmíru.

Nyní můžeme jednoznačně přiřadit jednotlivým kvarkům a leptonům ale i některým bosonům jejich vnitřní preonovou strukturu:

Tab. 11.10

Kvarky		Leptony		Bosony	
Značka	Konfigurace	Značka	Konfigurace	Značka	Konfigurace
d	$A^0 B^{1/3}$	e	$A^{-1/3} A^0 B^{1/3}$	$A_1^-$	$A^{-2/3} B^1$
u	$B^{1/3} B^0$	$\nu_e$	$B^{1/3} B^0 A^{-1/3}$	$A_2^-$	$A^{-1/3} B^{2/3}$
s	$A^0 B^{2/3}$	$\mu$	$A^{-2/3} A^0 B^{2/3}$	$A_3^-$	$A^{-1/3} B^1$
c	$B^{2/3} B^0$	$\nu_\mu$	$B^{2/3} B^0 A^{-2/3}$	$A_0^+$	$B^{2/3} B^{1/3}$
b	$A^0 B^1$	$\tau$	$A^{-1} A^0 B^1$	W	$A^{-2/3} A^{-1/3} B^1$
t	$B^1 B^0$	$\nu_\tau$	$B^1 B^0 A^{-1}$	G	$B^{2/3} B^{1/3} A^{-1}$



Tab. 11.11: Tabulka elementárních částic. Číslicemi I, II a III jsou označeny tzv. generace částic

Zabývejme se teď otázkou, jak jsou jednotlivé preony vnitřně uspořádány z kvantionů, tj. z plastifikovaných monomin. Ukazuje se, že nejjednodušší způsob kterak by mohla příroda dosáhnouti plně funkčního systému elementárních částic je následující:

Budeme pracovat pouze s Y-stereominy stupně  $n = 3$  a  $n = 4$ . Spojme navzájem geometrické středy dvou sousedních buněk daného stereomina vektory  $\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2, \dots, \mathbf{n}_{n-1}$ .

Vyškrtneme-li z tohoto systému všechny lineárně závislé vektory, obdržíme bázi prostoru  $V$ , přičemž počet bázevých vektorů označíme

$$D \equiv \dim V . \quad ( 11.108 )$$

Všechny kyselé preonové stavy s teplotou  $T = 0$  pak lze modelovat na množině Y-stereomin stupně  $n = 3$ , v prostoru  $V$  dimenze  $D = 1$ .

Při teplotách  $T < 0$  je  $n = 4$ ,  $D = 2$ .

Hořkým preonovým stavům přiřazujeme tatáž  $n$  jako stavům kyselým při téže  $|T|$ , avšak dimenze  $D$  je vždy o jednotku vyšší.

Výběrovým kritériem je v tomto případě požadavek, aby se takto vzniklý útvar při  $SO(3)$ -rotacích o diskrétní úhly velikosti  $\pi/2$  jevil vždy opět jako Y-polyomino.



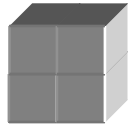
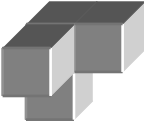



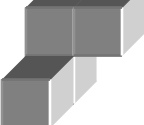
Co se týče jednoznačnosti přiřazení konkrétního stereomina k dané teplotě preonu pro  $T \neq 0$ , panuje dosud určitá nejistota.

Absolutní hodnota teploty různých preonů by např. mohla odrážet stupeň symetrie příslušných stereomin vzhledem k možným volbám orientace spinu jednotlivých kvantionů tvořících daný preon.

Vyjdeme-li z teploty  $T = 0$ , kde je stupeň symetrie nejvyšší (počet neekvivalentních kombinací spinů kvantionů generujících jednu a tutéž částici je zde nejnižší ze všech), pak lze předpokládat, že platí obecné pravidlo, podle něhož by měl být stupeň symetrie  $S$  nepřímo úměrný absolutní hodnotě teploty  $T$ .

Hledaný tvar jednotlivých preonů by tedy mohl vypadat např. takto:

Tab. 11.12

$ T $	A	B
0		
1/3		
2/3		
1		

To, zda je  $T > 0$  či  $T < 0$  pak závisí jednoduše na tom, jsou-li spiny jednotlivých kvantionů v preonech orientovány konstruktivně ( $J = 1$ ), nebo destruktivně ( $J = 0$ ).

To je určeno dalším výběrovým pravidlem jež je důsledkem **Pauliho vylučovacího principu**, který striktně vyžaduje rozlišitelnost jednotlivých kvantionů uvnitř preonu.

Z něho plyne požadavek, aby žádné dvě sousedící buňky neobsahovaly kvantiony se souhlasně orientovanými spiny.

Vzhledem k tomu, že helicity kvantionu může nabývat pouze dvou hodnot ( $\pm 1/2$ ), platí však toto pravidlo pouze pro částice, jejichž stupně volnosti jsou omezeny dimenzí  $D \leq 2$ .

Pro  $D > 2$  jsou kvantiony vzájemně rozlišitelné i tehdy, sousedí-li spolu dva kvantiony se souhlasně orientovanými spiny.

Tato kritéria lze splnit pouze za výše popsaného předpokladu o vzájemném vztahu dimenze  $D$ , stupně  $n$ , chuti  $t$  a teplotě  $T$  jednotlivých preonů, jak jej znázorňuje tab. 11.12.

Z fyzikálního hlediska nelze takto vytvořené struktury oddělit od ostatního vesmírného kontinua, neboť celý vesmír tvoří více či méně

koncentrovaná energie ~ hmota, jež zaujímá v prostoru vždy jistý tvar a navíc je ve stálém pohybu a víru neutuchajících proměn spjata s okolní energií ~ hmotou, na níž je přímo závislá.

Z tohoto předpokladu nyní vyjdeme při konstruování modelu tzv. **cytoprostoru**, který je založen na principech, jež dosti dobře korelují m.j. s **holografickým principem M-teorie** a tvoří základní pilíř o nějž se opírá celá teorie cytoprostoru.

### 3) Elementární úvod do teorie cytoprostoru

Základním přínosem teorie relativity je poznání, že polohové souřadnice a časové body událostí nemají samostatný invariantní význam, že prostor a čas tvoří sjednocené prostoročasové kontinuum.

Absolutní význam mají pouze prostoročasové intervaly.

V tomto ohledu by bylo nedůsledné měřit vzdálenosti ve čtyřrozměrném prostoročase v různých směrech různými jednotkami.

Ve směrech prostorových pomocí metru a podél časové osy v sekundách.

Podobně jako je přirozené měřit vzdálenosti v prostoru ve všech směrech pomocí týchž jednotek, je rozumné činit totéž i v prostoročase.

Vezmeme-li za základ jeden metr, je výhodné ocejchovat časovou osu tak, aby jeden dílek představoval vzdálenost, již urazí světlo za jednu sekundu.

Potom délku i čas budeme měřit v metrech, přičemž rychlost světla se v takto upravené souřadné soustavě bude jevit jako přímka  $t' = x$ , kde  $t'$  je **geometrodynamický čas**, tj. čas měřený v metrech.

Geometrodynamický čas pak souvisí s obyčejným časem  $t$  vztahem

$$t' = c \cdot t. \quad ( 11.109 )$$

Další základní fyzikální veličinou je hmotnost.

V Newtonovské fyzice má hmota dva základní projevy – setrvačnost a gravitaci, přičemž tyto projevy jsou nezávislé.

Úměrnost setrvačné a gravitační hmotnosti vystupuje v Newtonovské mechanice jako empirický fakt, který není v rámci teorie vysvětlitelný.

Pro kvantitativní vyjádření množství hmoty byla proto stanovena další veličina zvaná hmotnost, nezávislá na veličinách délky a času, za jejíž jednotku byl zvolen kilogram.

V obecné teorii relativity, která stírá rozdíl mezi setrvačností a gravitací, se hmotnost těles měří prostřednictvím jejich setrvačných projevů, jež jsou určeny mírou zakřivování prostoročasu.

To znamená, že hmotnost lze stanovit pomocí čistě geometrických měření v prostoročase – pomocí měření délek.

Gravitační působení tělesa o hmotnosti  $M$  udílí každé testovací částici umístěné ve vzdálenosti  $r$  od centra gravitace zrychlení

$$a \equiv \frac{d^2 r}{dt^2} = \frac{G \cdot M}{r^2}, \quad (11.110)$$

což lze přepsat v geometrodynamické soustavě jednotek jako

$$a' \equiv \frac{d^2 r'}{dt'^2} = \frac{G \cdot M}{c^2 \cdot r'^2} \equiv \frac{M'}{r'^2}. \quad (11.111)$$

Za **geometrodynamickou hmotnost** je pak přirozené zvolit veličinu s rozměrem délky:

$$M' = \frac{G \cdot M}{c^2}. \quad (11.112)$$

Porovnáme-li nyní tuto délku s **Comptonovskou vlnovou délkou** částice

$$\lambda = \frac{\hbar}{M \cdot c} \equiv M', \quad (11.113)$$

dospějeme okamžitě k vyjádření

$$\lambda = \left( \frac{G \cdot \hbar}{c^3} \right)^{\frac{1}{2}} \equiv l_h \approx 1,6 \cdot 10^{-35} \text{ m} . \quad ( 11.114 )$$

Fyzikální význam konstanty  $l_h$ , která se nazývá **Planckovou délkou**, je následující: rozlišení dvou blízkých bodů optickým mikroskopem vyžaduje kratší vlnovou délku použitého světla než je vzdálenost těchto bodů.

Protože energie fotonu je

$$E = \frac{h \cdot c}{\lambda} , \quad ( 11.115 )$$

vyžaduje rozlišení velmi blízkých bodů značnou energii ~ hmotu, která je samozřejmě zdrojem zakřivení prostoročasu ve svém okolí. V okamžiku, kdy se vlnová délka použitého fotonu rovná geometrodynamické délce jeho hmotnosti, ocitnou se vlivem nárůstu křivosti prostoročasu oba pozorované body uvnitř **Schwarzschildovy sféry**.

Pokus o změření tak malých vzdáleností proto nemůže být úspěšný.

Představa o spojitém prostoročasovém kontinuu tak ztrácí smysl.

Ukazuje se, že nemá smysl hovořit o prostorových intervalech kratších než  $l_h$  a rovněž o geometrodynamických časových intervalech kratších než je tato délka.

Z rovnosti ( 11.114 ) pak pro elementární kvantum času vyjádřené v klasických jednotkách plyne hodnota

$$t_h = \frac{t'}{c} = \frac{l_h}{c} \approx 5,4 \cdot 10^{-44} \text{ s} . \quad ( 11.116 )$$

zvaná **Planckův čas**.

Model cytoprostoru spočívá v důsledném domyšlení výše popsaných skutečností z hlediska jejich příčin a jejich důsledků.

V tomto modelu je veškerý prostor uvnitř kupovesmíru ve skutečnosti tvořen krychlovou mřížkou o straně jedné buňky rovné Plackově délce, zvanou **cytoprostorová mříž**.



Buňky cytoprostorové mříže vytvářejí zdánlivě homogenní substanci v níž nelze tvarově rozlišit jednotlivá plastifikovaná polyomina a struktury vyššího řádu vytvořené jejich vzájemným pospojováním. Přiřadíme-li však neočíslovaným buňkám plastifikovaných polyomin formálně např. nuly, můžeme je uvnitř cytoprostoru vzájemně rozeznávat.

Kinematika se pak v cytoprostoru dociluje přeléváním čísel mezi jednotlivými cytoprostorovými buňkami, přičemž struktura polyomin zůstává zachována, pokud mez nimi nedochází k interakcím.

Buňky očíslované přirozenými čísly ( tj. nikoliv nulou ) označujeme jako **buňky aktivované**.

Každé aktivované buňce cytoprostoru odpovídá v prostoročase kvantum energie  $E = h$  zvané kvantion, s nímž jsme se již seznámili v předešlé kapitole.

Buňky, jež jsou v daném časovém okamžiku na dané hypergrupě nulové, představují tzv. **inaktivní body této hypergrupy**.

Jsou to oblasti bez projevené energie, sloužící coby potenciál nezbytný pro zprostředkování jejího přenosu.

Ten se realizuje pomocí tzv. **primární cytorezonance**.

Z kap. 8 víme, že k tomu, aby mohl ve vesmíru plynout čas je zapotřebí neustálá výměna kvantionových **antionů** mezi jednotlivými kvantiony a **Blandriem**.

Tento pozoruhodný jev přenosu antionu se však podařilo plně fyzikálně objasnit teprve zavedením modelu cytoprostoru.

Kvazičástice sloužící k přenosu antionu mezi Blandriem a kvantiony byla nazvána **cyton**.

Jedná se o jedinou formu energie existující v cytoprostoru.

Právě energie přenášená ve formě cytonů tvoří prapůvod veškerého jsoucna.

Všechna rozmanitost myriád různých světů je jen důsledkem vyvěrání cytonové energie „na povrch“.

Cytonem nazýváme takovou buňku cytoprostoru, které je v čase  $t$  přiděleno tzv. **cytonové číslo**  $s \in N$ ,  $s \in \langle 1; 10^{62} \rangle$ .

Během svého pohybu může cyton postupně nabývat cytonových čísel ležících v uvedeném intervalu.

Uspořádaná  $n$ -tice těchto čísel pak tvoří tzv. **cytonový vektor**  $|\sigma\rangle$ .

Jelikož je cytoprostor trojrozměrný, pohybují se v něm cytony ve třech nezávislých, navzájem ortogonálních směrech.

V každé buňce se tak protínají hned tři možné dráhy, po nichž může přicházet cyton.

Těmto drahám říkáme **cytorezonanční chreody** (z řeckého *chreos* – cesta).

Každá cytorezonanční chreoda obsahuje řádově  $10^{62}$  buněk (průměr kupovesmíru vyjádřený v Plackových délkách).

Norma vektoru  $|\sigma\rangle$  tak může nabývat řádově  $10^{62}$  různých hodnot.

Proložíme-li cytoprostorem ortonormální soustavu souřadnou s počátkem v zadním levém dolním rohu cytoprostoru a zvolíme-li za normu vektoru kanonické báze  $\beta$  v takto zavedeném souřadném systému Planckovu délku, potom každý cytonový vektor jehož komponenty tvoří rostoucí posloupnost v této soustavě souřadnic budeme označovat v Diracově symbolice jako **bra-vektor**, kdežto cytonový vektor jehož komponenty tvoří klesající posloupnost cytonových čísel označíme za **ket-vektor**.

Cytonové vektory pak každé buňce cytoprostoru přiřadí uspořádanou trojici čísel, která tvoří polohový vektor buňky vzhledem k výše popsané bázi  $\beta$ .

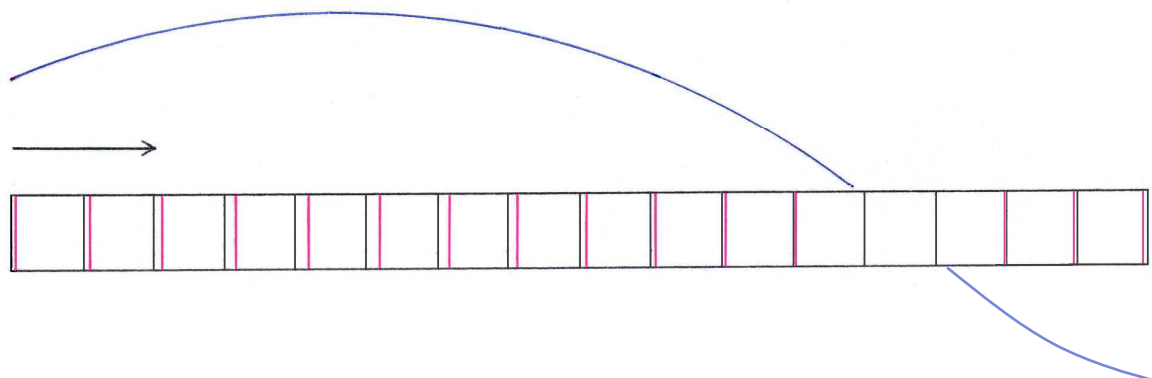
Princip primární cytorezonance však nespočívá v představě pouhého přelévání cytonového čísla buňkami dané chreody.

Cyton je totiž skutečnou kvazičásticí šířící se po chreodách cytoprostoru ve formě podélného vlnění.

Toto vlnění se realizuje postupným posunutím buněk dané chreody vůči naší hypergrupě o hodnotu  $\Delta l < l_h$ , jež se šíří po této chreodě mající charakter postupné vlny.

Na obr. 11.5 je schematicky znázorněn průběh primární cytorezonance po vybrané cytorezonanční chreodě v určité fázi jejího časového vývoje, včetně vlnové funkce  $\psi(r, t)$  příslušející cytorezonančnímu kvazikvantu.

Obr. 11.5



Odtud je vidět, že cytonové číslo ve skutečnosti nepředstavuje přesnou polohu cytonu na jeho chreodě v daném okamžiku, ale brž odpovídá pouze střední hodnotě této polohy tj.

$$s = \langle \psi | x_i | \psi \rangle \quad (11.117)$$

Kde  $x_i$  je  $i$ -tá souřadnice polohového vektoru  $\mathbf{r}$ .

Každá chreoda je v cytoprostoru jednoznačně určena trojicí souřadnic vzhledem k bázi  $\beta$ .

Je zjevné, že jedna z těchto souřadnic bude vždy rovna nule.

Nahradíme-li tuto nulovou souřadnici nejvyšší z hodnot všech složek vektoru  $|\sigma\rangle$ , popř. nejnižší z hodnot složek vektoru  $\langle\sigma|$ , obdržíme trojici souřadnic tzv. polohového vektoru  $\mathbf{x}$  kvantionu generovaného uvažovanou dvojicí cytonů.

Tento polohový vektor kvantionu je totožný s polohovým vektorem buňky, v níž se má daný kvantion zhmotnit.

Označíme-li

$$\dim |\sigma\rangle = \bar{s}_i, \quad (11.118)$$

umožní nám předchozí úvahy definovat tzv. **cytonovou paritu**.

Předpisem, v němž nahradíme nulovou souřadnici polohového vektoru příslušné chreody číslem  $\bar{s}_i$ , označeným pruhem kvůli rozlišení zcela určité chreody na níž došlo ke generaci konkrétního kvantionu dvojicí

cytonů:  $s^+$  s vektorem  $|\sigma\rangle$  a  $s^-$  s vektorem  $\langle\sigma|$ , je tato dvojice jednoznačně určena ( tj. lokalizována v cytoprostoru ).

Tento předpis budeme nazývat cytonovou paritou daného kvantionu v čase  $t$ .

Stojí za povšimnutí, že cytonová parita kvantionu je vektor totožný s polohovým vektorem  $\mathbf{x}$  tohoto kvantionu.

Jediný rozdíl je zde v označení  $i$ -té souřadnice pruhem, přičemž  $i$  je funkcí času.

Tento zápis lze formálně nahradit např. přiřazením pořadového čísla proužkované souřadnice vzhledem k bázi  $\beta = \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \mathbf{e}_3 \rangle$  do závorky, za polohový vektor daného kvantionu:

$$s_x^\pm(t) = (s_1, s_2, s_3) [i(t)] \quad ; i \in \{1, 2, 3\} , \quad ( 11.119 )$$

kde  $s_j$  jsou komponenty polohového vektoru  $\mathbf{x}$  kvantionu.

Princip generování hmoty v cytoprostoru je tedy založen na existenci cytorezonančních antičástic – **paracytonů**.

Průlet každého cytonu určitou chreodou ve směru  $|\sigma\rangle$  je v čase  $\pm\Delta t$  doprovázen pohybem paracytonu ve směru  $\langle\sigma|$  po téže chreodě.

Přitom platí  $\Delta t \leq 5 \cdot 10^{-106}$  s od okamžiku startu cytonu  $s^+$ .

Polohový vektor každého kvantionu určuje Blandrium na základě výpočtu fázového rozdílu vlny cytonu a paracytonu.

Tím obdrží cytonovou paritu jakožto generátor tohoto kvantionu.

Celý systém tvorby hmoty a prostoročasu tedy funguje následujícím způsobem:

Cyton  $s^+$  je vyslán Blandriem na kladný konec chreody  $a$  v čase  $t_0$ .

V čase  $t_1$  , pro který platí

$$|t_1 - t_0| = \Delta t , \quad ( 11.120 )$$

je vyslán paracyton  $s^-$  k zápornému konci téže chreody.

Poloha buňky, ve které dojde k jejich kolizi a vzniku kvantionu závisí na parametru  $t_x = t_1 - t_0$  .

Po srážce se tzv. **reliktová cytorezonance a anticytorezonance** vracejí zpět do Blandria po téže chreodě, po níž se realizovala primární cytorezonance, aby zde informovaly o průběhu celé transakce.

Blandrium je tak neustále obeznámeno s polohou a hybností každé částice ve vesmíru.

Všechny kolize cytonů v cytoprostoru vedou nejen k vytvoření kvantionu ale rovněž ke vzniku tzv. **sekundární cytorezonance**. Jedná se o důsledek nevratnosti procesu generování kvantionu jenž se projeví zbytkovým chvěním cytoprostoru šířícím se po rozpadu kvantionu od místa kolize, a to převážně ve směru kolmém na chreodu, na níž se kolize realizovala.

V následující kapitole bude ukázáno, že sekundární cytorezonance odpovídá za všechny druhy interakcí v přírodě, tj. za veškeré formy fyzikálních polí ale také např. za vznik setrvačných sil v neinerciálních vztažných soustavách.

Pozoruhodným důsledkem existence sekundární cytorezonance je také izotropie prostoru, který je přitom generován anizotropním cytoprostorem.

#### 4) Úvod do fyziky hypergrup

Z předešlého víme, že polyomina jsou symetrickými resp. antisymetrickými maticovými reprezentacemi.

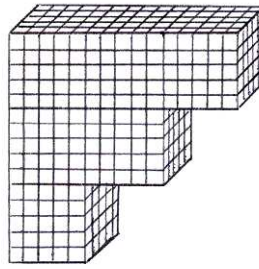
Plastifikovaná struktura polyomin, odpovídající vázané soustavě kvantionů, je tedy v jistém smyslu strukturalizovanou maticí.

V kap. 10 bylo popsáno (a v této kapitole bude podrobně dokázáno), že i kvantion má svoji vnitřní strukturu.

Přesněji řečeno, každý kvantion obsahuje ve svém nitru osminásobnou projekci našeho vesmíru, tzn., že každý kvantion typu 1 je tvořen opět kvantiony, ovšem samozřejmě typu -1.

V cytoprostoru tedy musíme brát v úvahu též vnitřní skelet jednotlivých buněk, tzv. **intrakvantionické cytoprostory**, krátce **intracytoprostory** (viz obr. 11.6).

Obr. 11.6



Každou buňku v našem cytoprostoru tak pomyslně rozdělíme na mřížku o straně jedné elementární buňky  $l = 10^{-96}$  m.

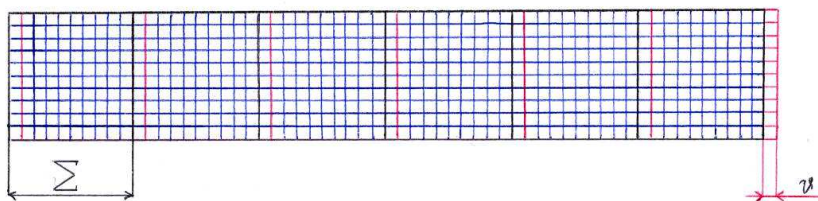
Pokud bychom v tomto stylu pokračovali dál, až k rozměru buňky  $l = \infty^{-2}$ , získáme nularozměrný model partonu v reálném pojetí, tj. řečeno jazykem moderních struníků-dirichletíků alias d-bránických teoretiků, obdržíme tzv. **d(0)-bránu**, čili **bodový chronor**.

My však při výkladu vlastností cytoprostoru nyní vystačíme s rozlišením  $10^{-96}$  m.

Přeneseme se teď do dvourozměrné analogie trojrozměrného cytoprostoru, abychom se blíže seznámili s tím, kterak se v teorii cytoprostoru řeší problematika tzv. **hypergrup**, s nimiž se čtenář mohl poprvé potkat již v kap. 8.

Pohledme na následující obrázek:

Obr. 11.7



Buňky cytoprostoru jsou zde vyznačeny černě.

Uvnitř každé buňky vidíme modře vykreslen intracytoprostor.

Všechny buňky cytoprostoru patřící do tzv. naší hypergrupy jsou černě orámovány.

Buňky, jež jsou vůči naší hypergrupě posunuty o vektor  $\vartheta$  patří do cizí hypergrupy a jsou označeny červeně.

Pro cizí hypergrupy tedy platí: je-li strana buňky  $\Sigma$  hypergrupy  $\alpha$  tvořena počtem  $n$  intracytoprostorových buněk, což zapisujeme

$$\Sigma_{\alpha} = n \cdot \lambda_h = l_h, \quad (11.121)$$

potom každá soustava buněk posunutá vůči hypergrupě  $\alpha$  o velikost vektoru

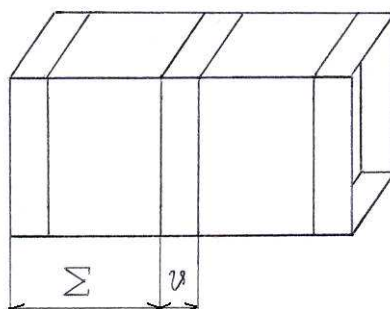
$$\vartheta = k \cdot \lambda_h, \quad (11.122)$$

kde  $\lambda_h$  je velikost intracytoprostorové buňky a  $k \in \{1, 2, \dots, n-1\}$ , tvoří cizí hypergrupu.

Číslo  $\vartheta = \|\vartheta\|$  nazýváme **hypergrupární bariérou** mezi dvěma různými hypergrupami, čili **interhypergrupární bariérou**.

Jak se jeví celá situace ve 3D-pohledu ukazuje obrázek 11.8.

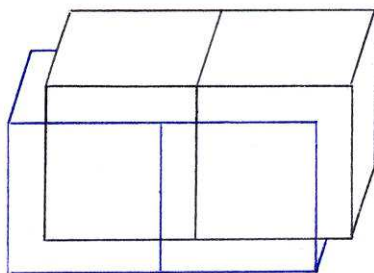
Obr. 11.8



Ty hypergrupy, jež jsou od naší hypergrupy  $\alpha$  odděleny příliš silnou interhypergrupární bariérou  $\vartheta$  nemají pro náš svět valného praktického významu, neboť účinný průřez jejich interakce s naší hypergrupou jde s rostoucím  $\vartheta$  velmi rychle k nule.

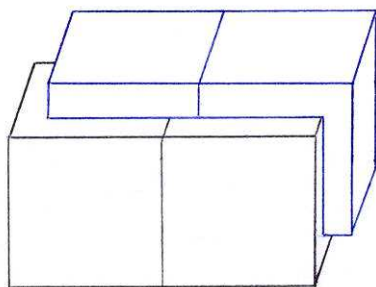
Uvažujeme-li vzájemnou translaci hypergrup pouze po horizontálách a vertikále tak, jak je to naznačeno v předchozím výkladu, potom v našem nejbližším okolí dostáváme celkem 6 přilehlých hypergrup. Pokud uvážíme ještě translaci po rovinných diagonálách, přidá se k těmto šesti blízkým hypergrupám ještě dalších 8 (viz obr. 11.9).

Obr. 11.9



A konečně, provedeme-li translaci hypergrup po prostorových diagonálách, jak naznačuje obr. 11.10, získáme dalších 8 hypergrup v naší těsné blízkosti.

Obr. 11.10



Celkem tak máme 22 hypergrup které jsou od té naší odděleny tou nejtenčí možnou interhypergrupární bariérou.

Protože jsou jednotlivé hypergrupy vzájemně posunuty, nemají za normálních okolností možnost mezi sebou interagovat, ačkoli jsou navzájem prolnuty.

Pozornému čtenáři jistě neuniklo, že má-li celý mechanismus generování vesmíru bezchybně fungovat, nesmí se na téže chreodě v jednu okamžiku vyskytovat více než jeden cytonový pár.

Doba života kvantionu odpovídá Planckovu času  $t_h$ , a nazývá se jak víme antion.

Označíme-li průměr vesmíru jako  $d$ , pak počet buněk cytoprostoru na jedné chreodě bude dán výrazem



$$n = \frac{3d}{l_h} . \quad ( 11.123 )$$

Z kap. 8 víme, že během rozpínání vesmíru se od sebe některé body prostoru vzdálili téměř na  $10^{11}$  světelných roků, což činí necelých  $10^{27}$  m.

Odtud

$$n \approx 10^{62} . \quad ( 11.124 )$$

Pro průměr kupovesmíru pak platí  $D \approx 3d$ .

Jak později ukážeme, pro poloměr kupovesmíru platí přesně

$$R = \sqrt{\frac{3c^2}{\pi\rho_v G}} , \quad ( 11.125 )$$

kde  $G$  je gravitační konstanta a  $\rho_v$  průměrná hustota vesmíru.

Pro rychlost cytonu nyní dostáváme hodnotu

$$v_s = \frac{n \cdot D}{t_h} \approx 6 \cdot 10^{132} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1} . \quad ( 11.126 )$$

Frekvenci na níž běží naše hypergrupa pak získáme coby podíl

$$F = \frac{v_s}{D} \approx 2 \cdot 10^{105} \text{ Hz} \quad ( 11.127 )$$

a jak již také víme, je

$$\Delta t \leq F^{-1} . \quad ( 11.128 )$$

Cytoprostor obsahuje celkem

$$N = n^3 \approx 10^{186} \quad ( 11.129 )$$

buněk na každé hypergrupě.  
Každou z buněk přitom může protéci až

$$\frac{c}{l_h} \approx 2 \cdot 10^{43} \quad (11.130)$$

bitů informace za jedinou sekundu.  
Celou hypergrupou tedy může proběhnout až

$$\frac{N \cdot c}{l_h} = \frac{N}{t_h} \approx 2 \cdot 10^{229} \text{ bit} \cdot \text{s}^{-1}. \quad (11.131)$$

Od počátku vesmíru uplynulo  $4 \cdot 10^{17}$  sekund.  
Za tuto dobu jím mohlo protéci maximálně

$$\frac{4 \cdot 10^{17}}{8 \cdot t_h} \cdot N \approx 10^{246} \text{ bit} \quad (11.132)$$

(Cytoprostor na naší hypergrupě generuje 8 vesmírů).  
V ideálním případě, kdy jsou všechny buňky dané hypergrupy  
zaplněny kvantiony (aktivovány) by činila hmotnost hypergrupy

$$M = \frac{E}{c^2} = \frac{N \cdot h}{c^2} \approx 7 \cdot 10^{135} \text{ kg}. \quad (11.133)$$

Skutečná gravitační hmotnost naší hypergrupy je však zhruba o 82  
řádů nižší než její mezní hmotnost  $M$ .

Protože vesmír obsahuje pouze omezené množství hmoty, musí být  
uzavřený a to znamená, že jeho poloměr  $r$  je zároveň poloměrem  
gravitačním, příslušejícím skutečné gravitační hmotnosti  $m_v$  tohoto  
vesmíru.

Pro její hodnotu tak dostaneme

$$m_v = \frac{r \cdot c^2}{2G} \approx 10^{53} \text{ kg}. \quad (1.134)$$

Hmotnost naší hypergrupy je osminásobkem této hmoty.  
Spočteme-li objem současného vesmíru:

$$V_v = \frac{4}{3} \pi \cdot r^3 \approx 10^{79} m^3, \quad (11.135)$$

snadno určíme jeho průměrnou hustotu

$$\rho_v = \frac{m_v}{V_v} \approx 10^{-27} kg \cdot m^{-3}. \quad (11.136)$$

Již elementární Newtonovská mechanika nám nyní pomůže určit poměrně přesný odhad Hubbleovy konstanty  $H$ .  
Z Newtonova gravitačního zákona

$$F = \frac{m_v \cdot m \cdot G}{r^2} = m \cdot g \quad (11.137)$$

vyplývá pro potenciální energii testovací částice hmotnosti  $m$  vztah:

$$E_p = -m \cdot g \cdot r = -\frac{m_v \cdot m \cdot G}{r} = -\frac{4\pi \cdot \rho_v \cdot m \cdot r^2 \cdot G}{3}. \quad (11.138)$$

Rychlost vzdalování této částice v důsledku rozpínání vesmíru je dána Hubbleovým zákonem

$$v = H \cdot r. \quad (11.139)$$

Její kinetická energie tedy je

$$E_k = \frac{1}{2} m \cdot H^2 \cdot r^2. \quad (11.140)$$

Takže celková energie  $E = E_k + E_p$  je tvaru

$$E = m \cdot r^2 \cdot \left( \frac{1}{2} H^2 - \frac{4}{3} \pi \cdot \rho_v \cdot G \right). \quad (11.141)$$

Je-li  $E$  nezáporná, částice se nikdy nemůže vzdálit do asymptotického nekonečna, protože pro velmi velká  $r$  je potenciální energie zanedbatelná a celková energie se blíží energii kinetické, která je vždy nezáporná.

Je-li naopak  $E$  kladná, může částice uniknout do nekonečna a ještě jí zbyde nějaká nenulová kinetická energie.

Pro přesně únikovou rychlost odtud plyne podmínka  $E = 0$ , což dává

$$\frac{1}{2} H^2 = \frac{4}{3} \pi \cdot \rho_v \cdot G. \quad (11.142)$$

Pro velikost Hubbleovy konstanty odtud máme

$$H \leq \left( \frac{8\pi \cdot \rho_v \cdot G}{3} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (11.143)$$

Naše dosavadní úvahy nás tak přivádějí k závěru, že hodnota  $H$  se pohybuje kdesi v poměrně těsné blízkosti čísla  $61 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1} \cdot \text{Mpc}^{-1}$ . Přestože tento výsledek zde byl odvozen na základě Newtonovské fyziky, platí i pro vysoce relativistický vesmír.

$\rho_v$  pak musí být interpretována jako celková hustota energie vesmíru dělená  $c^2$ .

Kvantově mechanicky vzato, odpovídá tato hustota množství přibližně  $10^{24}$  kvantionů na krychlový metr prostoru, neboť (jak bude později ukázáno – viz vztah (11.189)) hmotnost kvantionu činí

$$m_y = \frac{5}{8} \frac{h}{\pi l_h c z^5} \approx 7,3725 \cdot 10^{-51} \text{ kg}. \quad (11.144)$$

Z hlediska zákona zachování energie musí vesmír obsahovat v každém elementárním čase stejný počet

$$N_y = \frac{m_v}{m_y} \approx 10^{103} \quad (11.145)$$

kvantionů.

To nám umožní vypočít průměr Hawkingovy pseudosingularity pro celý vesmír.

Z rovnice

$$\frac{4}{3}\pi \cdot r^3 = N_y \cdot l_h^3 \quad (11.146)$$

získáme okamžitě

$$r = 0,24 \text{ m} \quad (11.147)$$

neboli

$$\phi \equiv 2r = 0,48 \text{ m} . \quad (11.148)$$

Po zhroucení vesmíru bude tedy průměr struktury **Baby universe** (Hawkingovy pseudosingularity) činit necelých půl metru.

A nyní trochu statistické fyziky:

V kupovesmíru lze v každém okamžiku nalézt jeden kvantion přibližně na každé

$$\frac{N}{N_y} \approx 10^{83} \quad (11.149)$$

buňce.

Pravděpodobnost nalezení kvantionu na jedné konkrétní chreodě během elementárního času  $t_h$  udává vztah

$$p = \frac{3N_y \cdot D}{N \cdot l_h} = \frac{3N_y \cdot n}{N} \equiv 3 \cdot 10^{-19} \% . \quad (11.150)$$

Na kvantion tedy narazíme zhruba na každé  $3 \cdot 10^{21}$  chreodě.  
Nyní přejdeme k základním časovým jednotkám, tj. k sekundám.  
Na jedné chreodě lze za jednu sekundu zaznamenat v průměru cca.

$$P = \frac{P}{t_h} \approx 6 \cdot 10^{22} \quad (11.151)$$

kvantionů.

Přibližně na každé  $2 \cdot 10^{39}$  buňce vybrané chreody lze tedy v průměru každou sekundu spatřit nějaký ten kvantion.

(Pokud se někomu náhodou zdá poslední údaj nepodloženě trojnásobně nadhodnocen, nechť si znovu důkladně prostuduje pojednání o struktuře cytoprostoru a ještě jednou si celou záležitost promyslí).

Na celkové množství  $3 \cdot 10^{124}$  chreod připadá v kupovesmíru  $10^{103}$  kvantionů.

To znamená, že na nějakých  $3 \cdot 10^{21}$  chreod připadá v elementárním čase v průměru jeden jediný kvantion.

K témuž výsledku jsme však dospěli již dříve poněkud jiným postupem, že ano.

Nyní je již snadné učinit řádový odhad operační rychlosti cytoprostoru pracujícího v běžném režimu:

$$Q = \frac{N_y}{t_h} = \frac{P \cdot m}{3} \approx 6 \cdot 10^{146} \text{ bit} \cdot \text{s}^{-1}, \quad (11.152)$$

kde  $m$  je počet chreod.

Z tohoto výkonu připadá na jednu chreodu

$$\frac{Q}{m} = \frac{P}{3} \text{ bit} \cdot \text{s}^{-1}. \quad (11.153)$$

Snadno nahlédneme, že od počátku tohoto vesmíru byla přibližně jen každá  $10^{22}$  buňka cytoprostoru alespoň jedenkrát aktivována

Blandriem, tj. obsazena kvantionem.

Ó jaké to plýtvání prostorem, není-liž pravda?

V závěru této části si ještě můžeme ukázat jednoduchý způsob, kterak přiřadit dynamické proměnné dokonce i samotným cytorezonančním kvazikvantům – cytonům.

Protože každý z cytonů nese energii potřebnou k vygenerování celého jednoho kvantionu, neboť jinak by po srážce s paracytonem tento pár úplně zanikl odevzdávše veškerou svou energii kvantionu a nedostávalo by se již energie pro sekundární cytorezonanci, musí být

$$h = \frac{m_s \cdot v_s^2}{2}, \quad (11.154)$$

neboli

$$m_s = \frac{2h}{v_s^2} \approx 3,7 \cdot 10^{-299} \text{ kg}. \quad (11.155)$$

Pro součet velikostí hybností páru cyton – paracyton dostáváme

$$p = 2m_s \cdot v_s \approx \frac{4h}{v_s}. \quad (11.156)$$

Čas potřebný k přepólování vektoru rychlosti cytonu z  $v_s$  na  $-v_s$  je

$$t = \frac{l_h}{v_s} = \sqrt{\frac{\hbar \cdot G}{c^3 \cdot v_s^2}} \approx 1,6 \cdot 10^{-184} \text{ s}. \quad (11.157)$$

Při spárování cytonů uvnitř cytoprostorové buňky tedy dosahuje jejich střední zrychlení velikosti

$$p = \frac{dv_s}{dt} = \frac{l_h}{t^2} = \sqrt{\frac{2\pi \cdot c^3 \cdot v_s^4}{h \cdot G}} \approx 6,2 \cdot 10^{332} \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}. \quad (11.158)$$

Síla, jíž přitom na sebe oba cytony vzájemně působí je rovna

$$F = \frac{dp}{dt} = \sqrt{\frac{32\pi \cdot h \cdot c^3}{G}} \approx 164 \text{ N}, \quad (11.159)$$

a jak později uvidíme, představuje napětí tzv. **lineárního chronoru** generujícího kvantion.

V následujícím odstavci prozkoumáme některé relativistické aspekty modelu cytoprostoru.

Ukážeme si, kterak amplituda cytorezonance ovlivňuje dobu života generovaného kvantionu, a jaký to má vliv na rychlost částic ve vesmíru.

Naším cílem bude postupně vybudovat důkaz fraktální teorie vesmíru.

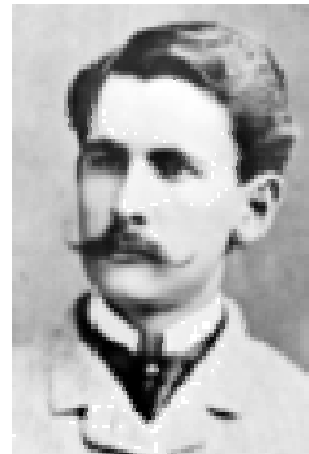
## 5) Cytoprostorová perspektiva teorie relativity

První známky toho, že náležité vysvětlení chování světla vyžaduje dramatickou změnu způsobu, jakým do té doby fyzikové vnímali svět, se objevily již nedlouho po roce 1887, kdy Michelson a Morley oznámili své definitivní experimentální výsledky.

V roce 1889 nabídl irský fyzik George Fitzgerald vysvětlení výsledků Michelsonova – Morleyova experimentu.



Albert Abraham Michelson (1852 – 1931)

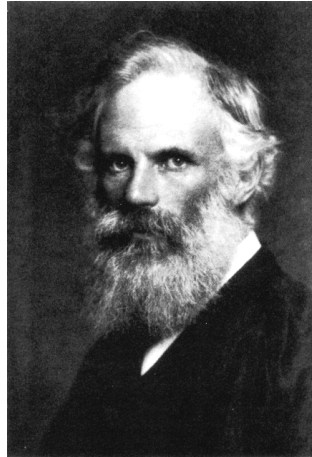


Edward Williams Morley (1838 – 1923)

Okolnost, že se při tomto experimentu nepodařilo naměřit jakoukoli změnu rychlosti světla z ohledem na směr, kterým se světlo pohybovalo relativně k Zemi, mohla být podle něj důsledkem smršťování celé experimentální aparatury (i samotné Země) ve směru pohybu.



Problém by to vyřešilo, neboť by tak rychlost světla relativně k zemi sice závisela na pohybu země „éterem“, ale měřicí aparatura by se smršťovala přesně v potřebné míře, aby to vyvolalo iluzi, že rychlost světla je stále  $c$ .



George Francis FitzGerald (1851 – 1901)

V 90. letech 19. století stejnou myšlenku nezávisle předložil i Hendrik Lorentz.

Lorentz však tuto myšlenku dovedl mnohem dále než FitzGerald.

V roce 1904 odvodil soubor rovnic známý jako **Lorentzovy transformace**, jež popisují, kterak se z pohledu pozorovatelů, kteří se pohybují odlišnými rychlostmi, transformují nejen délka pohybujícího se tělesa, nýbrž i čas a jeho další vlastnosti.

Své transformační rovnice Lorentz odvodil proto, aby matematicky popsal, jak by se elektromagnetická pole jevila různým pozorovatelům.

Tyto transformace totiž do Maxwellových rovnic vkládají relativní rychlosti pozorovatelů.

O rok později Albert Einstein ukázal, že tytéž transformační rovnice se hodí i pro popis mechanických systémů a jejich transformací z pohledu pozorovatelů pohybujících se různými rychlostmi.

Ukazují, kterak se z pohledu různě rychlých pozorovatelů jeví odlišně nejen délka a čas, nýbrž také rychlost a dokonce i hmotnost pohybujících se těles.

Lorentzovy výzkumy elektromagnetismu Einsteinovi posloužili coby odrazový můstek při odvozování speciální teorie relativity.

Klíčovým pojmem speciální teorie relativity je předpoklad, že vesmír a fyzikální zákony by se měly jevit stejné všem pozorovatelům,

nehledě na to, jak se pohybují (pamatujme však, že ve speciální teorii relativity máme co do činění pouze s konstantními rychlostmi, nikoli se zrychleními).

Tento předpoklad je znám jako **Lorentzova invariance**.

Z **Aspectova experimentu** (prvního experimentálního pozorování porušení slavných **Bellových nerovností**, tj. tzv. **EPR-paradoxu**, předpovídaného kvantovou teorií – viz 3. kapitola) vyplývá, že se musíme zřeknout lokální skutečnosti, a že buď vesmír „tam venku“ není skutečný, nebo že dochází k nějaké formě komunikace rychlejší než světlo (k Einsteinovu „strašidelnému působení na dálku“).

Bell poukázal na možnost, že „nejlacinějším řešením“ celé záhady je návrat k tomu druhu relativity, který existoval před Einsteinovou verzí, tedy k teorii, kterou vytvořili lidé jako Lorentz a Poincaré na základě předpokladu o reálné existenci éteru.

**Preferovaná souřadnicová soustava** podle těchto představ opravdu existuje, ale naše měřicí přístroje jsou pohybem zdeformovány právě tak, aby to zajistilo, že se nám nikdy nepodaří detekovat žádný pohyb „skrze éter“ (nebo „relativně k němu“).

Existence preferované soustavy souřadnic má velmi zajímavý důsledek: Přestože se věci v této preferované soustavě mohou pohybovat rychleji než světlo, v ostatních souřadnicových soustavách, ve kterých se vlivy podle všeho šíří jak rychleji než světlo, tak zpátky v čase, je to jenom určitým druhem optické iluze.

Pakliže existuje preferovaná soustava souřadnic, hodiny v této preferované soustavě budou odtikávat preferovanou rychlostí času. Jedním rázem se tím obnovují jak Newtonův absolutní prostor, tak jeho absolutní čas.

Pouze v Einsteinově verzi relativity, ve které jsou si všechny Lorentzovy souřadnicové soustavy vzájemně ekvivalentní, platí, že pohyb rychlejší než světlo znamená rovněž „skutečný“ pohyb zpátky v čase.

Bell tyto představy rozvinul v knize *Speakable and Unspeakable in Quantum Mechanics*.

Ukázal, jak použití predeinsteinovské myšlenky preferované soustavy souřadnic, kombinované s experimentálním faktem, že pohyb relativně k této soustavě souřadnic nepozorujeme, vede k obvyklé formě Lorentzových transformačních rovnic, takže nelze experimentálně určit, která, pokud vůbec některá, ze dvou rovnoměrně

se pohybujících soustav je opravdu v klidu a která se pohybuje. Bell zdůrazňuje, že Einsteinova teorie se od Lorentzovy verze liší filozofií i stylem.

Příslušný filozofický rozdíl vzniká proto, že poněvadž nelze říci, která ze dvou pohybujících se soustav (pokud vůbec některá z nich) je opravdu v klidu a která se opravdu pohybuje, pojmy „opravdu v klidu“ a „opravdu v pohybu“ nemají žádný smysl a důležitý je pouze relativní pohyb.

Stylový rozdíl je pak dán tím, že Einstein vychází z hypotézy, že fyzikální zákony se všem rovnoměrně se pohybujícím pozorovatelům jeví jako stejné, načež jednoduchým a elegantním způsobem odvozuje Lorentzovy transformace místo toho, aby začal od experimentálních důkazů a ke stejnému cíli dorazil delší cestou.

Právě tak, jako je tomu řekněme u Bohrovy kodaňské interpretace kvantové teorie a Everettovy interpretace mnoha vesmírů, které poskytují stejné odpovědi na kvantové problémy, stejné odpovědi ve všech praktických fyzikálních situacích poskytují i Lorentzova verze relativity a Einsteinova speciální teorie relativity. Nabízejí však rozdílné interpretace toho, co se děje.



**Hugh Everett (1930 – 1982)**

Poukaz na možnost, že speciální teorie relativity by nemusela být právě tím nejlepším způsobem, jak se dívat na svět, by koneckonců neměl vyvolávat příliš velký šok, protože už samotné její jméno nám oznamuje, že se – co se týče tvorby teorií relativity – nejedná o poslední slovo.

Je neúplná, protože na rozdíl od obecné teorie relativity nepracuje se zrychleným pohybem nebo s gravitací.

Obecná teorie relativity popisuje gravitaci v pojmech zakřivení prostoročasu. Místo abychom přemýšleli o nějakém mysteriózním působení na dálku (zvaném gravitace), zasahujícím ven ze Slunce a udržujícím Zemi na její oběžné dráze, obecná teorie relativity nabízí představu, že Slunce vytváří jakýsi „důlek“ v prostoročase, podobný důlku, který by vytvořila kuželková koule, kdybychom ji položili na nataženou gumovou plachtu.

Země, která zakřiveným prostoročasem sleduje dráhu nejmenšího odporu, je tak nucena obíhat kolem Slunce podobně jako kulička, jež krouží kolem důlku na gumové plachtě vytvořeného kuželkovou koulí.

V principu se gravitační vliv Slunce (nebo čehokoli jiného) šíří vesmírem věčně, i když rozsah zakřivení prostoročasu způsobeného Sluncem s rostoucí vzdáleností stále klesá.

Změny gravitačního působení lze vyvolat „pohupováním“ hmotnostmi kolem dokola v prostoročase, čímž vzniknou vlny (podobné vlnám, jaké byste vytvořili na gumové plachtě, kdybyste na ní pohupovali nahoru a dolů kuželkovou koulí), jež se šíří rychlostí světla.

Existenci těchto **gravitačních vln** předpověděla Einsteinova obecná teorie relativity a potvrdily ji výzkumy hvězdných soustav známých jako binární pulsary.

Kolem společného těžiště v nich obíhají dvě neutronové hvězdy, jež právě ve formě gravitačního záření ztrácejí tolik energie, že to vede k měřitelným změnám doby jejich oběhu.



Russell Alan Hulse (1950)



Joseph Hooton Taylor, Jr (1941)

Rozsah, v němž se tato oběžná doba mění, se přesně shoduje s konkrétní předpovědí obecné teorie relativity pro takový případ.

Příslušný objev byl považován za tak důležitý, že badatelé, kteří ho uskutečnili (Russell Hulse a Joe Taylor), za něj v roce 1993 obdrželi Nobelovu cenu.

Nicméně i když se gravitační záření pohybuje rychlostí světla, v jistém smyslu se gravitační působení tělesa jeví jako nelokální.

Gravitační pole je podle obvyklé představy rozšířeno všude v prostoru po všechen čas.

To může souviset s jinou záhadou, která s proměnlivou naléhavostí znepokojuje vědce po řadu desetiletí - záhadou setrvačnosti.

Má-li těleso změnit směr svého pohybu, nebo se začít pohybovat rychleji či pomaleji - na to vše je potřeba energie.

To je tak důležité, že takzvané lorentzovsky invariantní souřadnicové soustavy pozorovatelů, kteří se pohybují stálou rychlostí, bývají často označovány prostě jako **inerciální (setrvačné) soustavy**.

Ale jak vlastně objekt „ví“, že jeho pohyb se mění (nebo nemění)? V takovém vesmíru, jaký známe, se chování těles podle všeho jeví, jakoby svou rychlost „měřila“ vzhledem k průměrné poloze (resp. k těžišti) veškeré hmoty ve vesmíru. Známé je to jako **Machův princip**.

Einsteina tento princip při jeho formulaci obecné teorie relativity výrazně ovlivnil.

Je ovšem poněkud ironií, že přes veškeré Einsteinovy snahy obecná teorie relativity ve skutečnosti Machův princip či původ setrvačnosti nevysvětluje; dvojnásobnou ironií pak je to, že Machovi se Einsteinova teorie nelíbila, přestože ji pomáhal inspirovat.

Záhada setrvačnosti tedy přetrvává.

O speciální teorii relativity, jež zakazuje komunikaci rychlejší než světlo, se ví, že je neúplnou teorií vesmíru a že v podobě, v jaké ji rozpracoval Bell, vychází pro všechny praktické účely nastejno jako Lorentzova teorie, jež signalizaci rychlejší než světlo dovoluje.

Obecná teorie relativity, která je mnohem uspokojivější univerzální teorií než speciální teorie relativity, naproti tomu jako by v sobě měla určitým způsobem zabudovánu nelokálnost.

A má-li Machův princip jakýkoli pravdivý základ, pak ve vesmíru existuje preferovaná souřadnicová soustava.

Víme, že se vesmír rozpíná. Preferovanou souřadnicovou soustavou, specifikovanou průměrným rozložením veškeré hmoty ve vesmíru, je pak i ta, ve které toto rozpínání probíhá dokonale rovnoměrně do

všech směrů.

Víme též, že v prvních okamžicích svého zrodu byl vesmír vyplněn superhorkou „polévkou“ elektromagnetického záření.

Toto záření od té doby natolik ochladlo, že se přeměnilo ve slabý mikrovlnný rádiový šum o teplotě něco málo pod 3K, dodnes takřka rovnoměrně vyplňující celý vesmír.

Pozorovatel se tudíž nachází v klidu v preferované souřadnicové soustavě vesmíru i tehdy, když se nepohybuje relativně k záření kosmického pozadí.

Preferovanou souřadnicovou soustavu nám tak nabízí samotné elektromagnetické záření.

I sám Newton nastínil elegantní experiment, který podle všeho ukazuje, že ve vesmíru opravdu existuje preferovaná souřadnicová soustava.

Pozdější filozofové prohlásili, že tento experiment ukazuje právě to, co definuje absolutní standard klidu.

Newton ve své knize *Principia* v roce 1686 popsal, co se stane, když vezmete kbelík vody, zavěsíte ho na dlouhý provaz, tento provaz podélně napevno stočíte do spirály, načež ho pustíte.

Kbelík samozřejmě bude během rozvíjení provazu rotovat.

Hladina vody v něm nejprve zůstane na stejné úrovni, ale jak tření postupně přenesou rotaci kbelíku na samotnou vodu, rotovat začne i voda, a její hladina získá vydutý (konkávní) tvar - odstředivá síla totiž bude vodu tlačit ke stěnám kbelíku.

Když kbelík uchopíte, abyste jeho rotaci zastavili, voda bude rotovat dál s vydutou hladinou, její rotace se však začne zpomalovat a hladina bude stále plošší a plošší, dokud se pohyb vody nezastaví úplně a její hladina nebude opět zcela plochá.

Newton zdůraznil, že soudě podle vydutého tvaru hladiny, rotující voda „ví“, že rotuje.

Relativně k čemu však rotuje?

Relativní pohyb kbelíku a vody se zde jeví jako zcela nedůležitý.

Jsou-li jak kbelík, tak voda v klidu, bez jakéhokoli relativního pohybu, hladina vody je plochá.

Pokud kbelík rotuje a voda nikoli, její hladina je stále plochá, přestože existuje relativní pohyb vody a kbelíku.

Pokud voda rotuje a kbelík nikoli, existuje jejich relativní pohyb a hladina je vydutá.

Když však rotuje jak voda, tak kbelík, takže opět neexistuje žádný jejich relativní pohyb, i tehdy je hladina vydutá.

Voda tak, soudil Newton, „ví“, zda rotuje relativně k **absolutnímu prostoru**, nebo nikoli.

Zajímavým zřetelem této debaty je i fakt, že Einsteinovy rovnice produkují správný druh machovských vlivů, pouze pokud je ve vesmíru dostatek hmoty, aby se prostoročas gravitačně zakřivil „sám do sebe“.

V otevřeném vesmíru, zasahujícím ve všech směrech do nekonečna, nelze rovnice žádným způsobem uvést do rovnováhy s konečným množstvím setrvačnosti.

Obvykle to sloužilo jako argument proti tvrzení, že obecná teorie relativity zahrnuje Machův princip, protože lidé si mysleli, že vesmír nutně musí být otevřený.

Nyní se vše změnilo a podle všeho existují přesvědčivé důkazy, že vesmír je skutečně uzavřený.

Je vskutku těžké uvěřit, že by speciální teorie relativity mohla být chybná, že může existovat preferovaný klidový stav a je principiálně možno absolutně stanovit směr i velikost rychlosti kteréhokoli pohybu. Několika teoretikům však toto nedělá žádné potíže. Vyjma samotného Johna Bella je dalším z těchto průkopníků Ted Jacobson, který se zabývá smyčkovou kvantovou gravitací a jako první našel přesná řešení Wheelerovy – DeWittovy rovnice. Již dlouhá léta úspěšně rozvíjí konzistentní teorii s privilegovanou soustavou.

K dalším vizionářům, zpochybňujícím celý rámec teorie relativity, patří Joao Magueijo, o němž jsme již hovořili v desáté kapitole. Pak jsou zde nositelé Nobelovy ceny za fyziku Robert Laughlin a Grigorij Volovik, kteří vycházejí z myšlenky, že princip relativity není správný a platí pouze přibližně, neboť se ve skutečnosti jedná o emergentní jev. Z dalších vizionářů, úspěšně rozvíjejících dále tuto myšlenku, jmenujme např. Holgera Bech Nielsena z Ústavu Nielse Bohra a mnoho dalších.



Theodore A. Jacobson (1954)



Holger Bech Nielsen (1941)



Robert Betts Laughlin (1950)



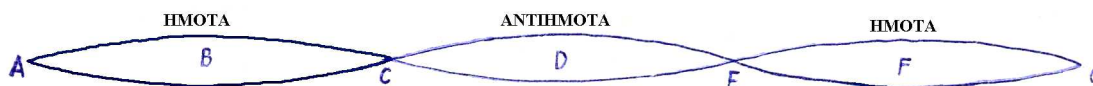
Grigorij Efimovič Volovik (1946)

## 6) Konstrukce lineárního chronoru

Aby mohla existovat hmota, musí se vyznačovat jistou vlastností, kterou je její vnitřní vibrace.

Rychlost hmototvorné vibrace činí v měřítku malých rychlostí,  $v = c$ . Tato vibrace nás posouvá (viz obr. 11.11) z nulového bodu **A** do bodu **B**.

Obr. 11.11





My však zkoumáme mechanistickou rychlost hmoty, aniž bychom brali v úvahu její rychlost kvantovou.

Zkrátka uvažujeme sami sebe jako klidovou inerciální soustavu.

To je důvod proč se domníváme, že se nalzáme v bodě **A**.

Říkáme, že naše **zdánlivá rychlost** je rovna nule a že bodu **C** odpovídá rychlost  $c$ .

Tato rychlost je však zdánlivou rychlostí v bodě **C**, která vzniká ignorací bodu **B**.

Skutečná rychlost je vždy o  $c$  vyšší, nežli rychlost zdánlivá.

Skutečná rychlost v bodě **C** je tedy rovna  $2c$ .

Letí-li světlo skutečnou rychlostí  $rv = 3c$ , stává se antihmotou.

Při  $rv = 4c$  se stává antisvětlem (viz tab. 11.13)

### Zoevistianova pohybová tabulka

Tab. 11.13

Oblast	Rychlost	Stav hmoty a záření	Relativní rychlost	Pohyb vůči nižší hypergrupě		Pohyb vůči vyšší hypergrupě	
				Reálná rychlost	Relativní rychlost	Reálná rychlost	Relativní rychlost
<b>A</b>	0	0	-c	4c	3c	-4c	-5c
<b>B</b>	c	hmota	0	5c	4c	-3c	-4c
<b>C</b>	2c	světlo	c	6c	5c	-2c	-3c
<b>D</b>	3c	antihmota	2c	7c	6c	-c	-2c
<b>E</b>	4c	antisvětlo	3c	8c	7c	0	-c

Rychlost v bodě **C** je vůči nám rychlostí světla, rychlost v bodě **D** souvisí s antihmotou vibrující vůči nám  $rv = 3c$ .

Bod **F**, který se již vůči nám nalzá na jiné hypergrupě vibruje rychlostí  $rv = 5c$ .

Vůči sobě sama je však bod **F** samozřejmě v relativním klidu.

Pro antihmotu **D** začíná hypergrupa bodem **C** a končí bodem **G**, kde začíná vůči bodu **D** další hypergrupa.

Pro naši hmotu **B** začíná hypergrupa bodem **A** a končí bodem **E**, kde pro nás začíná vyšší hypergrupa.

Pro antihmotu **D** je však bod **C** (tj. pro nás rychlost světla), začátkem nižší hypergrupy, stejně jako pro nás bod **A**.

Maximálně dosažitelná reálná rychlost vibrace v jedné hypergrupě je  $rv = 4c$ .

Ve vyšší hypergrupě je to taktéž  $4c$ , avšak vůči výchozí hypergrupě činí tato rychlost již dvojnásobek, tj.  $rv = 8c$ .

Translační rychlost tělesa tedy závisí na procentuálním splnění maximální rychlosti v jedné hypergrupě, tj.  $4c$ .

Přesahuje-li toto splnění 100 %, hovoříme o tzv.

### **interhypergrupárním pohybu.**

Sníží-li foton svoji rychlost o  $c$ , stává se částicí hmoty.

Sníží-li rychlost o  $2c$ , dostává se na relativní nulu a zároveň se mění na antifoton.

Při dalším snižování rychlosti je již součástí antihmoty na nižší hypergrupě.

Naopak, zvyšováním rychlosti se při několikanásobném překonání rychlosti světla, může dostat na vyšší hypergrupu.

Z toho plyne, že bod absolutní nuly relativně neexistuje a že tedy i rychlost kvantionu je vůči nám v každé hypergupě obecně jiná.



**David Joseph Zoevistian (1974)**

Vzhledem k Heisenbergově relaci neurčitosti

$$\Delta p \cdot \Delta x \geq \hbar \quad ( 11.160 )$$

se kvantion lokalizovaný v jedné cytoprostorové buňce, tj. na prostoru o straně  $\Delta x = l_h$ , pohybuje rychlostí extrémně blízkou rychlosti  $c$ , což jej m.j. posouvá do bodu **B** Zoevistianovy pohybové tabulky.

Pro jeho hybnost pak musí platit nerovnost

$$\Delta p = \frac{m_y \cdot c}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \geq \frac{\hbar}{l_h}, \quad (11.161)$$

kde rovnost nastane při dosažení tzv. **mezní rychlosti**.  
Provedeme-li substituci

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} = c^n, \quad (11.162)$$

můžeme ( 11.161 ) přepsat na

$$m_y \cdot c^{n+1} \approx \frac{\hbar}{l_h}, \quad (11.163)$$

odkud

$$c^{n+1} \approx \frac{\hbar}{l_h m_y} \approx c^6. \quad (11.164)$$

Srovnáním ( 11.162 ) a ( 11.164 ) odtud dostáváme mezní hodnotu Lorentzova faktoru která je ještě v souladu s kvantovou mechanikou:

$$\gamma = \frac{1}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}} \approx c^5. \quad (11.165)$$

Pozornému čtenáři jistě neuniklo, že konstanta na pravé straně ( 11.165 ) je nyní bezrozměrná, a i když její velikost je velmi blízká  $c^5$ , nejsme oprávněni ji označovat jako rychlost. Zavedeme pro ni tudíž alternativní bezrozměrné označení  $z = 299792458$ .

Dodáváme-li kvantionům energii, bude docházet k poklesu hodnot jejich relativního antionu, tj. k **dilataci času** a s ní související **kontrakci prostorových souřadnic** ve směru vektoru rychlosti. Z kvantové povahy cytoprostoru pak plyne, že rychlosti světla nelze v žádném případě dosáhnout, lze se jí pouze přiblížit až na určitou hodnotu  $\eta$ , kterou bude nyní naším úkolem určit. Za tímto účelem přepíšeme rovnici ( 11.165 ) na tvar

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \frac{(c - \eta)^2}{c^2}}} = z^5, \quad ( 11.166 )$$

odkud plyne pro velikost mezní prostoročasové rychlosti

$$v_{\max} = c - \eta = \left( \frac{z^{10} - 1}{z^{10}} c^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad ( 11.167 )$$

Umocněním rovnice ( 11.167 ) získáme kvadratickou rovnici pro neznámou  $\eta$

$$v_{\max}^2 = c^2 - \frac{c^2}{z^{10}} = (c - \eta)^2 \quad ( 11.168 )$$

která má řešení

$$\eta = \frac{c}{2z^{10}} \quad ( 11.169 )$$

(neboť člen  $\frac{c}{4z^{19}}$  je naprosto zanedbatelný).

Poznámka: pozoruhodným potvrzením tohoto výsledku je i netriviální skutečnost, že relativistická energie kvantionu, urychleného na výše vypočtenou mezní rychlost  $v_{\max}$ , odpovídá Plackově energii, tj. mezní energii částic, kterou jsme již dříve vypočetli na základě úvah o vztahu mezi vlnovou délkou a gravitačním poloměrem nehmotných

kvant. Toto neobyčejně krásné, nezávislé potvrzení logiky celé výše provedené konstrukce ukazuje, že se naše úvahy ubírají správným směrem a jejich výsledky dobře zapadají do mozaiky obecnějšího fyzikálního rámce).

Při dalším urychlování přejde energie částice do oblasti imaginárních hodnot a její rychlost vzroste na hodnotu

$$v = c + \eta. \quad (11.170)$$

Poté dochází s úbytkem energie k dalšímu urychlování až na rychlost

$$v = 2c - \eta. \quad (11.171)$$

Posuňme nyní počátek souřadnic do bodu **A** Zoevistianovy pohybové tabulky.

Při rychlosti  $v \in (0; c)$ , tj. v tzv. **neutrálním pásmu cytu** se při vzrůstající rychlosti tok relativního času urychluje.

Při rychlosti  $v = c + \eta$  začíná existovat hmota.

Při rychlosti  $v \in (c; 2c)$  se s narůstající rychlostí tok relativního času zpomaluje.

Při rychlosti  $v \in (2c; 3c)$  (tzv. **neutrální pásmo paracytu**) se s růstem rychlosti záporný čas urychluje (tok relativního času v tomto intervalu mění své znaménko).

Při  $v = 3c + \eta$  začíná existovat antihmota.

Při rychlosti  $v \in (3c; 4c)$  se při růstu rychlosti záporný tok relativního času opět zpomaluje.

Tzv. neutrální pásma představují nestabilní oblasti s imaginární energií.

S ubýváním energie zde rychlost vzrůstá dokud nedojde k vytvoření částic resp. antičástic, jež představují již stabilní konfigurace cytu resp. paracytu.

Úroveň hranice přechodu cytu a paracytu je víceméně fundamentální vlastností cytoprostoru, která se nám promítá do prostoročasu ve formě konstanty  $c$  a s ní souvisejících Lorentzových transformací.

Při přechodu cytu v paracyt a naopak, se vždy formálně mění znaménko toku relativního času.

U vzájemně prostoročasově oddělených struktur cytu a parasitu jakými jsou např. vesmír a antivesmír, je tato skutečnost fyzikálně irelevantní: to, co v našem vesmíru hodnotíme jako záporně elektricky nabitě, je v antivesmíru hodnoceno stejně, neboť oba systémy spolu nemohou vejít do vzájemné interakce, jež by odhalila různost elektrického náboje obou zkoumaných entit.

Jakmile však do našeho vesmíru, v němž je absolutní převaha cytu, pronikne částice jež je součástí paracytu, tj. antičástice, nabývá celá problematika na fyzikálním významu.

Již poměrně elementární vhled do podstaty legendární relativistické předpovědi existence pozitronu, pocházející od Paula Maurice Diraca (podrobné odvozování dalece přesahuje rámec této publikace), odhalí princip fyzikálních procesů spojených s přímou interakcí objektů cytu s objekty paracytu.

Vyjdeme z Einsteinova vztahu mezi hmotou a energií a použijeme Lorentzovu transformaci hmotnosti:

$$E = m \cdot c^2 = \frac{m_0 \cdot c^2}{\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}}, \quad (11.172)$$

kde  $m_0$  je klidová hmotnost částice.

Umocněním ( 11.172 ) dostaneme

$$E^2 = \frac{m_0^2 \cdot c^4}{1 - \frac{v^2}{c^2}} = m^2 \cdot c^4, \quad (11.173)$$

odkud již máme

$$\begin{aligned} m_0^2 \cdot c^4 &= \frac{m_0^2 \cdot c^4}{1 - \frac{v^2}{c^2}} \cdot \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m^2 \cdot c^4 \cdot \left(1 - \frac{v^2}{c^2}\right) = m^2 \cdot c^4 - m^2 \cdot v^2 \cdot c^2 = \\ &= E^2 - p^2 \cdot c^2, \end{aligned} \quad (11.174)$$

čili

$$E = \pm \sqrt{m_0^2 \cdot c^4 + p^2 \cdot c^2} . \quad ( 11.175 )$$

Z Einsteinova vztahu pro fotoefekt tak plyne vyjádření **úhlové frekvence De Broglieova vlnění** relativistické částice ve tvaru

$$\omega = \pm \frac{\sqrt{m_0^2 \cdot c^4 + p^2 \cdot c^2}}{\hbar} . \quad ( 11.176 )$$

Zatímco kladné znaménko odpovídá frekvenci běžné částice, záporná frekvence odpovídá jakémusi jejímu zrcadlovému protějšku, pohybujícímu se inverzně v čase (záporné intervaly prostorového typu postrádají geometrického významu).

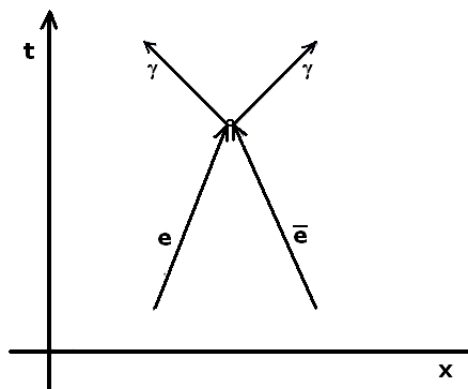
Diracova genialita spočívala v tom, že přiřkl fyzikální význam i těmto záporným řešením, což mu umožnilo předpovědět existenci antičástic ještě před jejich experimentálním objevem.

Z experimentů konaných na urychlovačích částic ve druhé polovině 20. století pak jednoznačně vyplynulo, že antičástice se v našem vesmíru vskutku pohybují ve své soustavě v inverzním čase.

Tuto skutečnost si ihned osvětlíme na následujícím Feynmanově diagramu znázorňujícím **anihilaci páru**.

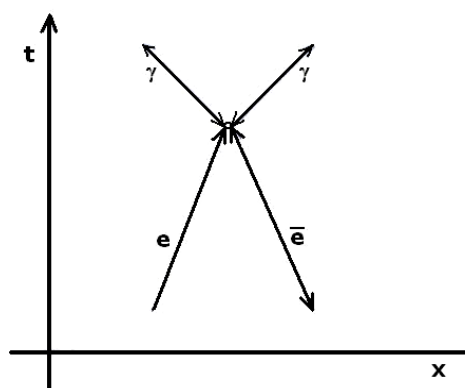
Zatímco v soustavě externího pozorovatele v cytu je anihilace zničením páru částice – antičástice při jejich vzájemné interakci,

Obr. 11.12



v soustavě částice je anihilace přeměnou částice v antičástici (tj. obrácením pohybu v čase) setkáním s fotonem.  
(Foton jakožto příslušník rodiny bosonů je tvořen virtuálními páry kvarků a leptonů, a je tedy svojí vlastní antičásticí. Jeho chování je tak invariantní vzhledem k inverzi času).

Obr. 11.13



Je to způsobeno tím, že externí pozorovatel v cytu nevnímá změnu znaménka plynutí času v bodě  $(x_0; t_0)$ , neboť se stále pohybuje ve směru kladné orientace osy  $t$ .

V nejmodernějších verzích **strunové teorie** se dokonce nyní testují konstrukce elementárních částic prováděné ve **vícedimenzionálním čase**.

Dělá-li nám trochu problémy představit si, co ve skutečnosti znamená vícedimenzionální čas, je možno použít analogii s např. dvourozměrným prostorem.

Zatímco v jednorozměrném prostoru lze vždy postupovat pouze podél jedné souřadnice, tj. buď dopředu, nebo dozadu, ve dvourozměrném prostoru již můžeme libovolně měnit směr pohybu, pouze nemůžeme nadskakovat (třetí rozměr není ještě k dispozici).

Co to tedy znamená z hlediska naší analogie vícerozměrného času? Každý kvantový systém si musí během procesu měření náhodně zvolit, do jakého stavu zkolabuje jeho vlnová funkce, tj. co bude finálním výsledkem našeho pozorování.

Dle dnes již klasické **Everettovy anizotropní interpretace** vícedimenzionálního času se však realizují i všechny ostatní možné výsledky pozorování, avšak vydají se po různých jiných časových



trajektoriích v rámci (minimálně) dvoudimenzionální časové roviny, takže s naší časovou linií již nejsou v kontaktu, a proto je nelze bezprostředně vnímat.

Dle **Deutschovy izotropní verze** teorie vícedimenzionálního času se navíc mohou dvě různé světočáry, znázorňující vývoj dvou oddělených systémů v prostoročase s dodatečnými časovými dimenzemi, setkat v nějakém světobodě.



**David Elieser Deutsch (1953)**

Stejně jako se v prostoru můžeme, poté co obejdeme blok, ocitnout znovu ve výchozím bodě, mohou se i dva různé kvantové systémy, jež kdysi bývaly jeden, opět setkat v nějakém jiném světobodě a spolu interferovat, čímž se dá úspěšně vysvětlit celá řada kvantových jevů. Myšlenka vícedimenzionálního času tedy není nová a zdaleka nesouvisí pouze se strunovou teorií.

Má-li však teorie strun kandidovat na teorii všeho, je přirozené, že se musí zabývat i těmito otázkami.

Je ovšem třeba zdůraznit, že mnozí fyzikové věří, že kvantová teorie by mohla být filozoficky konzistentní již v jednorozměrné časové verzi v rámci **transakční teorie** Johna G. Cramera z roku 1980, která byla vlastně inspirována staříčkou myšlenkou R. Feynmana a J. Wheelera z roku 1940 jež se stala později základem dnes veleúspěšné kvantové elektrodynamiky (QED) a nazývala se **absorbérovou teorií**.



**John G. Cramer (1934)**

Transakční teorie však funguje pouze za předpokladu, že podobně jako se v jednorozměrném prostoru můžeme pohybovat oběma směry, tak se i kvantové vlny pravděpodobnosti pohybují v čase kupředu i nazpět bez jakéhokoliv omezení.

John G. Cramer ve svém prvním článku o transakční teorii shrnul pět nezávislých principů, z nichž se skládá **kodaňská interpretace**:

- **Heisenbergův princip neurčitosti.** Podle principu neurčitosti dvojice „konjugovaných“ proměnných (jako je poloha a hybnost nebo energie a čas) nelze měřit se stejnou přesností ve stejný okamžik, neboť nemají v daný okamžik stejně definované hodnoty.
- **Bornův zákon pravděpodobnosti.** Podle tohoto zákona druhá mocnina absolutní hodnoty vlnové funkce odpovídá pravděpodobnosti toho, že se systém nachází ve stavu popsaném danou vlnovou funkcí.
- **Bohrův princip komplementarity.** Podle tohoto principu je Heisenbergův princip neurčitosti vnitřní vlastností přírody a nikoliv problémem měření. Pozorovatel, jeho měřící přístroj a měřený systém tvoří celek, který nelze rozdělit.
- **Heisenbergova interpretace znalosti.** Podle této interpretace vlnová funkce není fyzickou vlnou, která se pohybuje prostorem ani není přímým popisem fyzikálního systému, ale matematickým popisem znalosti pozorovatele, kterou získal měřením systému.
- **Heisenbergův pozitivismus.** Podle tohoto principu nemá smysl diskuse o aspektech reality, které leží za formalismem kvantové

mechaniky, neboť diskutované veličiny nebo fyzikální entity nelze měřit experimentálně.

První tři principy kodaňské interpretace slouží k propojení formalismu kvantové mechaniky s výsledky fyzikálního měření.

Poslední dva principy, formulované Heisenbergem, reagují na Einsteinovy kritiky „strašidelného působení na dálku“.

Podobné problémy souvisejí s obecným **problémem nelokálnosti**.

Uvažujme následující jev: excitovaný atom svoji energii ztrácí vyzářením fotonu.

Formalismus kvantové mechaniky tento jev reprezentuje vlnovou funkcí, která se šíří prostorem jako sférická vlna.

Druhá mocnina absolutní hodnoty vlnové funkce v určitém bodě prostoročasu udává pravděpodobnost výskytu fotonu v tomto bodě.

Když je foton pohlcen atomem stříbra fotografické desky, je jeho energie předána tomuto atomu.

Vlnová funkce fotonu prochází procesem, který se označuje jako **kolaps vlnové funkce**.

Vlnová funkce fotonu z celého časoprostoru zmizí kromě těsného okolí atomu, kterým byl foton zachycen.

Matematický formalismus redukuje vlnovou funkci na jedinou hodnotu, která odpovídá právě uskutečněnému jevu.

Toto vymizení vlnové funkce je součástí Einsteinovy kritiky.

Werner Heisenberg vysvětloval, že toto rozprostření vlnové funkce nepředstavuje reálnou vlnu šířící se prostorem rychlostí světla, ale reprezentaci znalosti pozorovatele.

Pokud pozorovatel foton ještě nedetekoval, má tento foton stejnou pravděpodobnost výskytu všude na čele sférické vlny.

Jakmile byl foton detekován, je pravděpodobnost jeho výskytu všude jinde rovna nule.

Problém s touto interpretací vyplývá z EPR paradoxu, kdy např. máme systém dvou polarizačně korelovaných fotonů, které se vzájemně pohybují v opačných směrech.

Dva pozorovatelé provedou měření, při němž vlnová funkce obou fotonů náhodně zkolabuje do některého z možných stavů.

Jejich měření však musí zůstat korelovaná.

Každý z pozorovatelů tak získá okamžitě informaci o obou fotonech, ačkoliv tyto fotony jsou od sebe vzdáleny natolik, že by mezi nimi principiálně nemělo dojít k tak rychlé výměně informace (dle teorie

relativity nelze přenášet informace mezi dvěma fyzikálními entitami nadsvětelnou rychlostí).

Tuto nelokálnost, která vyplývá z korelace informace, nelze odstranit. Transakční interpretace řeší problém nelokálnosti použitím „transakčního“ modelu kvantových jevů založeného, jak již bylo uvedeno výše, na absorbové teorii, kterou vypracovali Richard Phillips Feynman a John Archibald Wheeler roku 1940.

Podle absorbové teorie proces emise vytváří **advancované vlny** na stejném principu, jako běžné **retardované vlny**.

Ale když je retardovaná vlna v budoucnosti absorbována, ruší proces smaže stopy po advancovaných vlnách a jejich projevech.

Přijímač absorbuje retardovanou vlnu vytvořením druhé retardované vlny, která je identická ale přesně v opačné fázi, než byla retardovaná vlna z vysílače.

Obě vlny se vzájemně zruší a proto můžeme říci, že byla retardovaná vlna vysílače pohlcena.

Přijímač ale musí také vytvořit advancovanou vlnu, která se pohybuje v čase nazpět.

Ale tato vlna je zrušena advancovanou vlnou z vysílače, která má opačnou fázi.

Uvažujme systém dvou těles (při rozšíření úvahy na více těles se neobjevují žádné problémy).

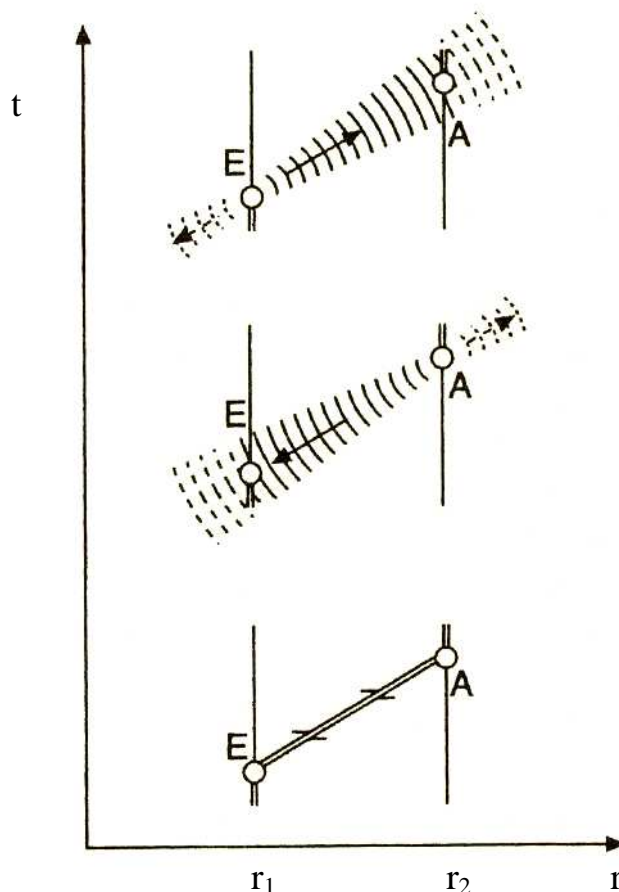
Jedno kvantově mechanické těleso se nachází v prostoročasovém bodě  $(r_1, t_1)$ , druhé, které s ním bude interagovat, je v bodě  $(r_2, t_2)$ .

Mezi oběma tělesy probíhá kvantově mechanický proces podle zákona zachování  $E = h \cdot \nu$ , kde  $\nu$  je frekvence vlnění (viz obr. 11.14).

1. "Vysílač" (E) v bodě  $(r_1, t_1)$  vysílá retardovanou „nabízející vlnu“  $\Psi$ . Tato vlna (stavový vektor) je fyzikální vlna a nikoliv (jako v Kodaňské interpretaci) pouze „pravděpodobnostní“ vlna.
2. „Přijímač“ (A) v bodě  $(r_2, t_2)$  přijímá nabízející vlnu a je tím donucen vyslat „potvrzující vlnu“, která je proporcionální vlně  $\Psi$  v bodě  $R_2$  zpětně v čase. Faktor proporcionality je  $\Psi^*$   $(r_2, t_2)$ .
3. Potvrzující vlna, kterou přijme „vysílač“ je  $\Psi \cdot \Psi^*$ . Můžeme předpokládat, že tato vlna odpovídá pravděpodobnosti, že transakce je kompletní (tj. proběhla interakce).

4. Výměna nabízející a potvrzující vlny pokračuje, dokud probíhá výměna energie a dalších zachovávaných se veličin, která je určena kvantovými okrajovými podmínkami systému. Mezi vysílačem a přijímačem je tedy stojatá vlna v prostoročasu, která odpovídá zachování energie a momentu hybnosti (a rotačního momentu). Vytvoření takové superpozice avancovaných a retardovaných vln (vln předcházejících se a zpožďujících se v čase) je ekvivalentem "kolapsu stavového vektoru" v Kodaňské interpretaci. Pozorovatel sleduje pouze kompletní transakci, kterou může interpretovat jako jedinou retardovanou vlnu (např. foton), který se pohybuje od vysílače k přijímači.

Obr. 11.14



Tento obrázek je shrnutím „transakční interpretace“ kvantové mechaniky, se kterou vystoupil John Cramer. Shora dolů: Zářič E vysílá „nabídkovou vlnu“ do budoucnosti a do minulosti (nahore). Zachytí ji absorbér A, který vysílá jako ozvěnu „potvrzující vlnu“ zpátky v čase k zářiči a do budoucnosti (střed). Nabídková vlna a potvrzující vlna se všude ve vesmíru vzájemně zruší vyjma oblasti na přímé dráze mezi absorbérem a zářičem, kde se vzájemně zesilují, aby vytvořily kvantovou transakci (dole).

Kolaps vlnové funkce v této souvislosti již není zásadním problémem. Proces kvantového měření probíhá v „okamžiku“, kdy je transakce (nabízející vlna odeslána, potvrzující vlna přijata, stojatá vlna vytvořena s pravděpodobností  $\Psi \cdot \Psi^*$ ) dokončena, což se stane přes určitý prostoročasový interval a proto nikdo nemůže určit okamžik kolapsu, ale pouze interval kolapsu (v souhlase s teorií relativity).

Dosud jsme se zabývali časově reverzibilním invariantem.

Ale hmotné částice jsou popsány **Schrödingerovou rovnicí**.

Pokud je  $\Psi$  řešením (tj. nabízející vlna), pak  $\Psi^*$  řešením není.

Potvrzující vlna však musí být časově obrácena a obecně musí být relativistickým invariantem, tedy řešením **Diracovy rovnice**.

V tomto případě nerelativistickým omezením není pouze jediná Schrödingerova rovnice, ale dvě Schrödingerovy rovnice: rovnice ve směru času má za řešení funkci  $\Psi$ , časově inverzní rovnice (kde  $i$  je nahrazeno  $-i$ ) má řešení  $\Psi^*$ .

Proto  $\Psi^*$  odpovídá potvrzující vlně,  $\Psi$  nabízející vlně.

Celý proces probíhá v prostoru (ve třech rozměrech).

Retardovaná nabízející vlna je vyslána ve všech prostorových směrech.

Objekty, které nabízející vlny přijmou, posílají nazpět své advancedované potvrzující vlny odesílateli.

Předpokládejme, že příjemci jsou označeni jako 1 a 2, s odpovídajícími změnami energie  $E_1$  a  $E_2$ .

Pak stavový vektor systému lze zapsat standardním způsobem jako superpozici vln.

Mohou proběhnout dvě možné transakce: výměna energie  $E_1$  s pravděpodobností  $P_1 = \Psi_1 \Psi_1^*$ , nebo výměna energie  $E_2$  s pravděpodobností  $P_2 = \Psi_2 \Psi_2^*$ .

V tomto případě jsou konjugované vlny advancedovanými vlnami s hodnotami v bodech  $R_1$  nebo  $R_2$ , případně podle pravidla 3. uvedeného výše.

Kolaps vlnové funkce probíhá v prostoročasovém intervalu.

Podle Bella žádná "teorie" nemůže být v souladu s kvantovou mechanikou, dokud nemá nelokální charakter.

V tomto smyslu je transakční interpretace **teorií skrytých proměnných**, neboť postuluje reálné vlny pohybující se v prostoročase.

Dokud není nabízející vlna pohlcena, nevytváří se žádná potvrzující vlna.

Tento mechanismus nepředstavuje žádný problém, protože se nepřenáší ani energie, ani moment hybnosti ani žádná jiná fyzikálně pozorovatelná veličina.

Problémy, jako je EPR paradox nebo Schrödingerova kočka, se v této teorii nevyskytují.

Jak již bylo řečeno dříve, v této interpretaci neexistuje žádný časový okamžik, v němž je transakce kompletní.

EPR paradox je argumentem nekompletnosti teorie, která proto vyžaduje objektivní realitu.

Transakční interpretace je takovou teorií, protože nabízející a potvrzující vlny jsou reálnými vlnami a nikoliv vlnami pravděpodobnosti.

Vzájemná korespondence avancovaných a retardovaných vln je základem transakční teorie, která vytváří těsný vztah mezi budoucností a minulostí, pomocí něhož se může přenášet energie, moment hybnosti a další kvantové veličiny.

Nelokálnost teorie spočívá především v tom, že minulost je jistým omezeným způsobem ovlivňována jevy v budoucnosti tak, jako je budoucnost ovlivněna jevy v minulosti.

Pokud například pozorujeme hvězdu vzdálenou několik stovek světelných let od Země, pak do našeho oka dopadají retardované vlny a současně z našeho oka vycházejí avancované vlny směrem k hvězdě.

Transakční teorie je učebnicovým příkladem jednorozměrné, leč izotropní teorie času.

Ukazuje se, že celá kvantová teorie je vskutku časově takřka invariantní.

Všechny běžné kvantové události mohou probíhat a také probíhají v čase tam i nazpět se stejnými výsledky (jsou vratné).

Čas je tedy pro elementární částice takřka izotropní.

Jakmile však do hry vstupuje veliké množství částic, začínají prudce klesat pravděpodobnosti, že se např. všechny částice shromáždí pouze

v jedné ze dvou spojených nádob, potažmo, že se ojetý vrak spontánně změní na luxusní mercedes.

Jinými slovy, řídicí úlohu v tomto případě přebírá **entropie**, která, jak známo z druhého zákona termodynamiky, spontánně nikdy neklesá s časem plynoucím určitým jedním směrem, čímž budí zdání že tento směr je jediným propustným směrem toku času.

Pro kvanta to však neplatí a proto ani běžný pojem kauzality, tak jak jej chápou makroskopické bytosti, neznamená v kvantovém světě téměř nic.

V izotropním čase není na kvantové teorii vskutku nic mystického. Teprve pokud trváme na zachování kauzality i pro kvantové systémy, stává se kvantovka opravdu těžko pochopitelnou teorií odporující zdravému rozumu.

Z toho, co zde bylo nyní řečeno, by se mohla jevit myšlenka cytu a paracytu zcela zbytečná.

Při vysokých energiích částic se však ukazuje, že šipka času není přeci jen pouhou termodynamickou iluzí alébrž fundamentální skutečností projevující se (i když velmi slabě a jen ve zcela specifických případech) i na úrovni samotných elementárních částic.

Zasvěcenější čtenáři již jistě tuší, že mám na mysli dnes již dostatečně experimentálně prověřený jev **porušení CP-invariance**:

V rámci kvantové teorie pole lze ukázat, že z požadavku relativistické invariance, lokality a mikrokauzality (tj. z vlastností týkajících se výhradně chování v prostoročase) plyne invariance vůči kombinované inverzi zahrnující nábojové sdružení (C), prostorovou inverzi (P) a časovou inverzi (T).

Výrok, že každá lokální relativistická kvantová teorie je CPT-invariantní, známý jako **CPT-teorém**, sehrál v moderní fyzice významnou roli.

Dnes existuje jeho rigorózní důkaz i v rámci axiomatické kvantové teorie pole.

Na druhé straně nyní máme k dispozici experimentální data, jež nade vší pochybnost potvrzují, že v přírodě dochází k narušení C-invariance, P-invariance i kombinované CP-invariance.

Protože dle výše zmíněného teorému se kombinovaná CPT-invariance musí vždy zachovávat, plyne z narušení CP-invariance též narušení T-invariance, tj. invariance fyzikálních procesů vzhledem k inverzi



času (poprvé pozorováno ve druhé polovině 90. let 20. století v ženevském CERNu při rozpadu neutrálních kaonů a antikaonů). To se v minulosti projevilo např. tím, že při vzniku vesmíru, v době před spontánním narušením symetrie grandunifikační interakce (**GUT**), došlo k velmi nepatrnému porušení rovnováhy mezi hmotou a antihmotou.

Tehdy existovalo ve vesmíru pouze šest druhů leptokvarků  $X$  a šest druhů leptokvarků  $Y$  jež spolu se svými antičásticovými protějšky  $\bar{X}$  a  $\bar{Y}$  umožňovaly volné přechody mezi kvarky a leptony např. při reakcích:

$$\begin{aligned} e + \bar{d} &\leftrightarrow X \leftrightarrow uu \\ \bar{\nu}_e + \bar{d} &\leftrightarrow Y \leftrightarrow du, \end{aligned} \quad (11.177)$$

apod., porušujících m.j. **zákon zachování baryonového čísla**.

Díky narušení CP-invariance však tyto procesy neproběhly symetricky.

V oblasti cytu byl tak vyprodukován řádově na miliardu párů kvark-antikvark resp. lepton-antilepton jeden kvark resp. lepton navíc.

V oblasti paracytu pak na miliardu párů kvark-antikvark resp. lepton-antilepton vznikl jeden přebytný antikvark resp. antilepton.

Zatímco páry částice-antičástice spolu záhy anihilovaly za vzniku fotonového záření jež dnes, po vychladnutí vesmíru, pozorujeme ve formě již zmíněného mikrovlnného reliktového pozadí, leptony a kvarky, jež neměly antičásticového partnera vytvořily v cytu veškerou baryonickou látku současného vesmíru, v paracytu pak všechny antileptony a antikvarky jež neměly částicového partnera vytvořily veškerou antibaryonickou látku současného antivesmíru.

Narušení T-invariance, tj. existenci preferovaného směru toku času v systémech cyt resp. paracyt, tedy vděčíme za svoji vlastní existenci. Bez této preference by ve vesmíru existovaly pouze fotony.

Nakonec je ještě třeba pro úplnost alespoň krátce zmínit slavnou Hawkingovu – Hartleho podmínku „**bez hranic**“ poprvé publikovanou v roce 1983, která jde v chápání času ještě mnohem dále

než výše jmenované teorie času, neboť staví časovou souřadnici na stejnou úroveň společně se souřadnicemi prostorovými:  
Zavedeme-li nejprve geometrodynamický čas vztahem

$$t' = c \cdot t , \quad ( 11.178 )$$

kde  $t$  je běžný čas měřený v sekundách, potom element prostoročasového intervalu je v Minkowského geometrii vyjádřen známou rovností

$$(ds)^2 = (dx)^2 + (dy)^2 + (dz)^2 - (dt')^2 , \quad ( 11.179 )$$

na níž na první pohled zaujme skutečnost, že v ní Časový parametr vystupuje se zápornou druhou mocninou.

S časem tedy nelze v OTR zacházet stejným způsobem jako s prostorem.

Počátkem 80. let 20. století si však Steven Hawking a Jim Hartle povšimli, že palčivý problém počáteční singularity vesmíru – na „okrajích“ času – lze elegantně vyřešit použitím triviální matematické transformace a sice vynásobením času imaginární jednotkou:

$$\tau = i \cdot t' . \quad ( 11.180 )$$

Tato jednoduchá transformace má však dosti dramatický účinek, neboť časový parametr v Einsteinových rovnicích převádí na roveň prostorových parametrů:

$$s^2 = x^2 + y^2 + z^2 + \tau^2 . \quad ( 11.181 )$$

V Hawkingově čtyřrozměrném prostoročase s imaginární časovou osou ( 11.180 ) se vesmír a všechny jeho části jeví jako zcela statické, nepodléhající žádným časoprostorovým změnám.

Teprve zanedbání imaginární jednotky u časové souřadnice (přechod k běžnému pojetí času) vytváří iluzi pohybu a jeho změn.

Známe jednoduché dvourozměrné příklady, jako je povrch koule, které jsou hladké, konečné a neobsahují žádné singulární body a žádné hranice.

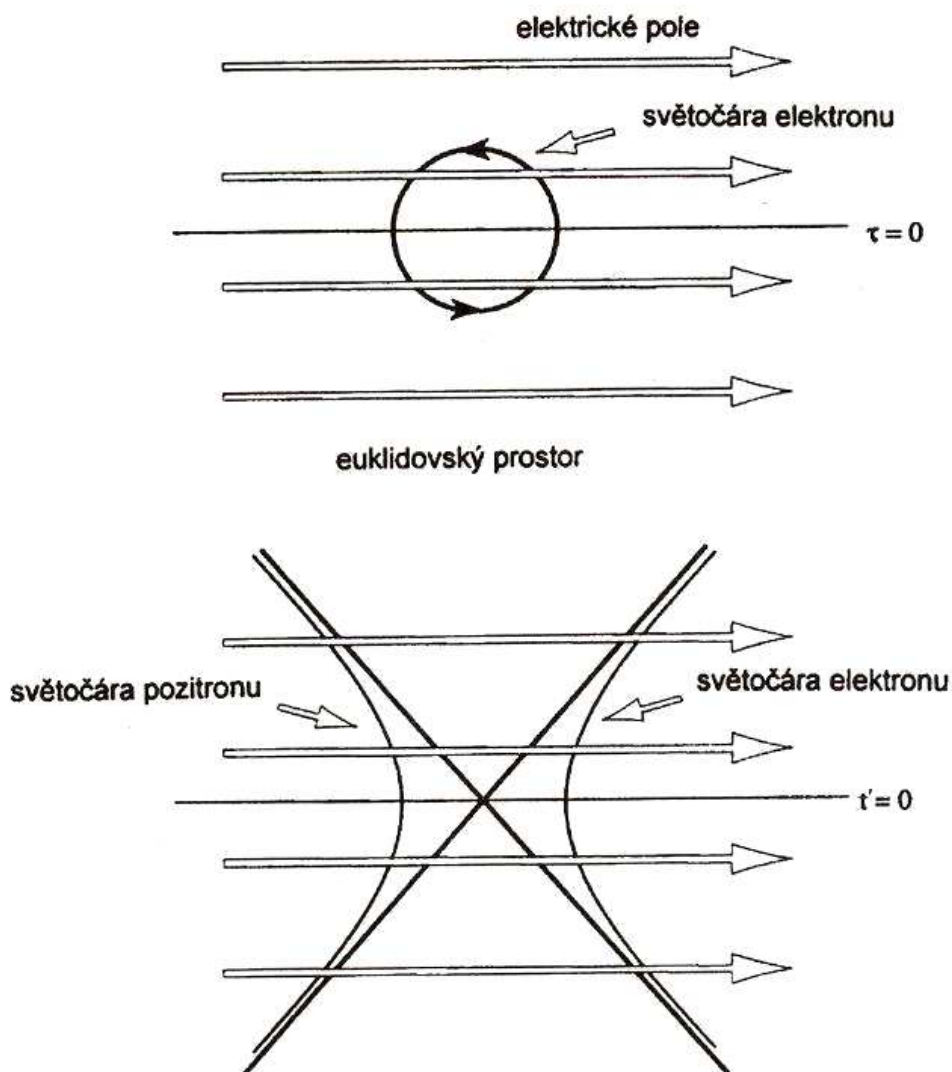
Celou mezní plochu čtyřrozměrného prostoročasu bychom tak mohli považovat za jediný hladký trojrozměrný povrch čtyřrozměrné koule. Již dlouhou dobu je známo, že v silném elektrickém poli můžeme vytvořit dvojici pozitivně a negativně nabitých částic.

Jeden způsob kterak tuto skutečnost vysvětlit, je všimnout si, že v plochém eukleidovském prostoročase s imaginární časovou osou se částice náboje  $q$ , jako např. elektron, pohybuje v homogenním elektrickém poli  $E$  po kružnici.

Tento pohyb můžeme analogicky prodloužit z imaginárního času  $\tau$  do reálného času  $t'$ .

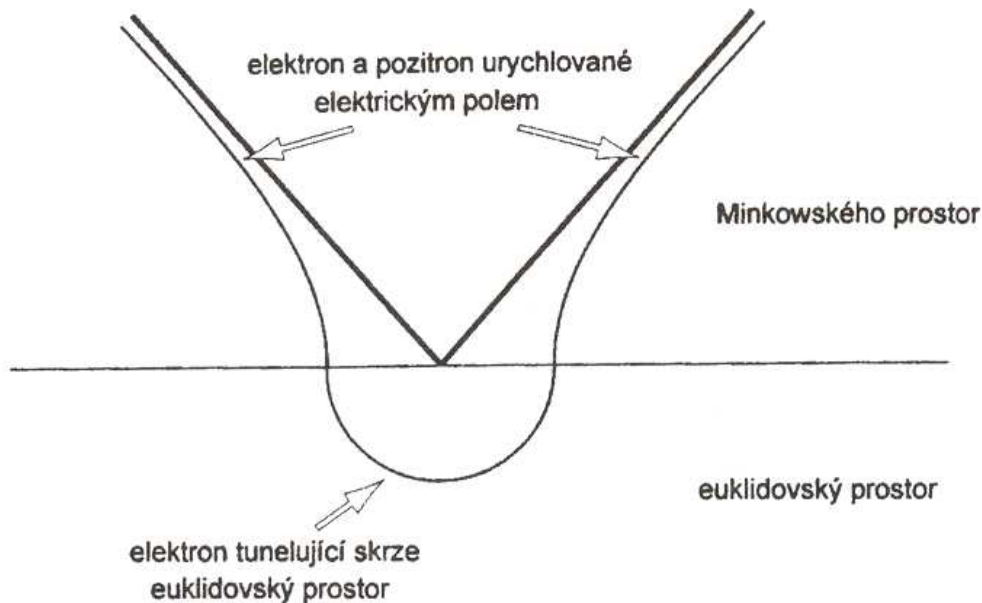
Dostaneme pár pozitivně a negativně nabitých částic urychleně se od sebe vzdalujících pod vlivem elektrického pole (viz obr. 11.15).

Obr. 11.15



Proces tvorby páru je pak popsán rozstříhnutím obou diagramů na poloviny podél os  $t' = 0$ , resp.  $\tau = 0$  a složením vrchní poloviny Minkovského diagramu s reálným časem a spodní poloviny eukleidovského řešení s imaginárním časem (viz obr. 11.16).

Obr. 11.16



Tím obdržíme obrázek, v němž jsou pozitivně a negativně nabitě částice vsutku jen jednou jedinou částicí.

Ta tuneluje skrze eukleidovský prostor z jedné Minkowského světočáry do druhé.

V prvním přiblížení je pravděpodobnost vytvoření páru rovna  $e^{-I}$ , kde eukleidovská akce je

$$I = \frac{2\pi \cdot m^2}{q \cdot E} . \quad ( 11.182 )$$

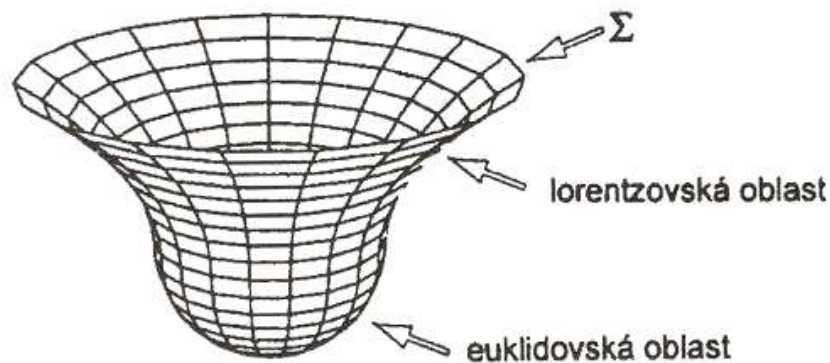
Tvorba párů v silném elektrickém poli byla pozorována experimentálně a její frekvence souhlasí s uvedenou hodnotou. Zavedení imaginárního času do kvantové kosmologie vedlo ke skutečné revoluci v našem chápání procesu kvantového generování vesmíru v prvopočátcích existence reálného času.

Podařilo se dokonce sestavit vlnovou funkci celého vesmíru a Schrödingerovu rovnici popisující její tvar v závislosti na imaginárním čase, podobně, jako v kvantové mechanice popisujeme reálně-časový vývoj vlnové funkce kvantových systémů.

Celá tato Hawkingova teorie přirozeně evokuje otázky po povaze vztahu mezi reálným časem každodenního života a imaginárním časem, jenž hraje zřejmě rozhodující úlohu za poněkud extrémních podmínek jaké panují na submikroskopických rozměrech a za ohromných hustot energie  $\sim$  hmoty.

Obdobnou situaci si lze představit i co se týče počátečního stavu vesmíru.

Obr. 11.17



Náš obvyklý pojem času je v tomto kvantově – kosmologickém prostředí překročen a stává se pouze dalším prostorovým rozměrem. Ve skutečnosti fyzici tohoto triku změny času na prostor už dříve často účelově používali k vyřešení jistých problémů v běžné kvantové mechanice, ačkoliv si přitom nepředstavovali, že čas se doopravdy stává prostorem.

Na konci výpočtu se jednoduše přesunuli zpět do rámce obvyklého výkladu v němž existuje jeden rozměr času a tři (kvalitativně odlišné) prostorové rozměry.

Radikální charakter Hawkingova – Hartleho kvantového přístupu k času spočívá v tom, že se s časem zachází tak, jako by se ve vrcholném kvantově gravitačním prostředí velkého třesku skutečně podobal prostoru.

Začínáme-li se vzdalovat od počátku vesmíru, očekáváme, že kvantové efekty se začnou vzájemně ovlivňovat a rušit, jak se hřebeny vln setkávají s vlnovými údolími a že vesmír bude se stále narůstající pravděpodobností sledovat klasickou dráhu.

Postupujeme-li zpátky směrem k počátku vesmíru, význačná povaha času jako kvalitativně odlišného od prostoru se stále více rozplývá a čas se postupně stává nerozlišitelným od prostoru.

Obvyklá povaha času však začíná krystalizovat již v prvních několika okamžicích po Planckově čase (násobeném samozřejmě ještě konstantou  $c$  a imaginární jednotkou).

Tato bezčasovost původního kvantového stavu byla Hartlem a Hawkingem navržena pro její úspornost a také proto, že obchází singularitu v počátečním stavu vesmíru.

Návrh bezhraničnosti je výhradou, že vlnovou funkci vesmíru určuje průměr přechodů omezených na čtyřrozměrné prostory s jedinou konečnou hladkou hranicí podobnou kulové hranici, o níž jsme hovořili výše.

Přechodová pravděpodobnost, kterou tento předpis poskytuje, má tvar, v němž nejsou žádné předchozí počáteční stavy.

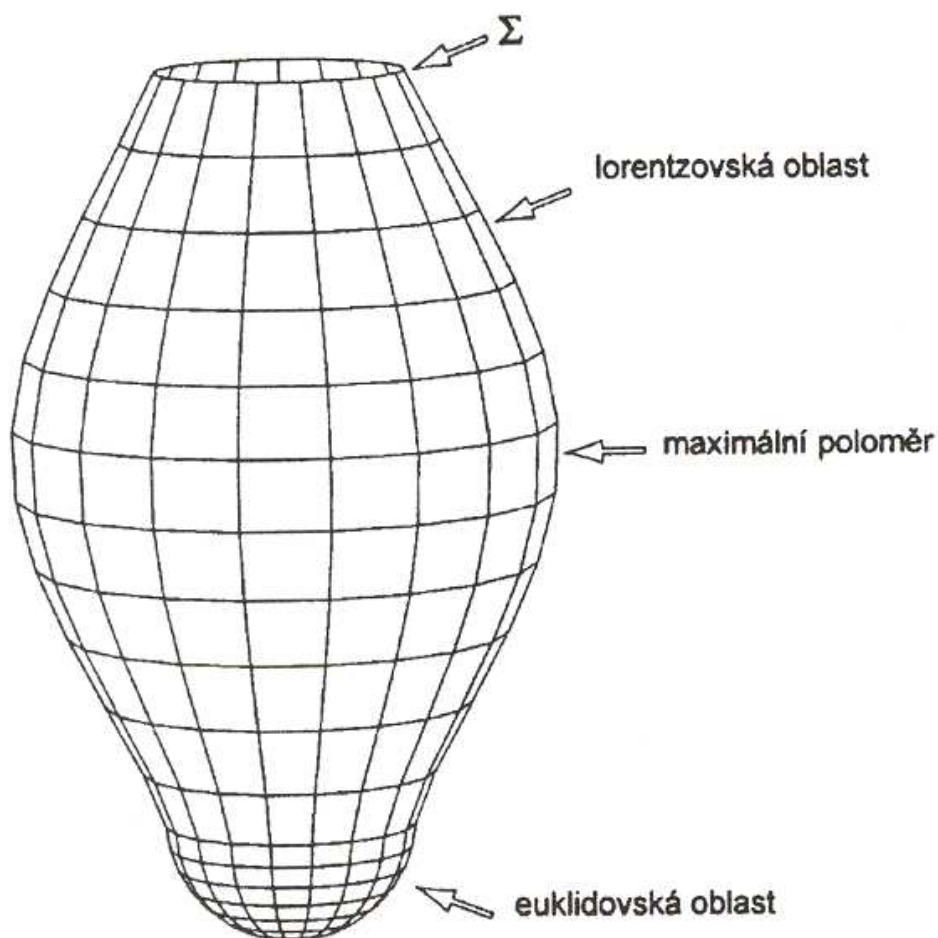
Podmínka bezhraničnosti je tudíž často popisována jako „stvoření z niče“.

Důsledkem této teorie je, že neexistuje žádný určitý okamžik nebo bod stvoření.

Celkovým obrazem situace, jenž získáváme na základě tohoto typu kvantového počátku je, že když zpětně pohlížíme směrem k tomuto okamžiku, jenž jsme nazývali nulou času, slábne samotná představa času a nakonec úplně přestává existovat.

Tento typ kvantového vesmíru vzniká právě tak, jak se zdají vznikat nekvantové kosmologie se singularitami ale nepočíná velkým třeskem, kde jsou hodnoty fyzikálních veličin nekonečné a kde je třeba upřesnit další počáteční podmínky.

Obr. 11.18



Ve světle předešlých úvah se tak ukazuje, že chápání času coby skalární veličiny neodpovídá zcela fyzikální realitě, neboť nejen délka časových intervalů ale též směr jímž se čas v daném okamžiku pohybuje hraje důležitou roli při modelování fyzikálních procesů ve vesmíru.

Proto v teorii cytoprostoru zavádíme tzv. **lineární chronor** coby vektor relativního času mířící v každé aktivní cytoprostorové buňce vždy do aktuálního směru cytonové parity pro daný kvantion. Z teorie cytoprostoru pak plyne, že lineární chronor, generovaný srážkou párovaných cytonů postupně ve všech osách cytoprostoru, rotuje okolo geometrického středu příslušné buňky úhlovou rychlostí  $\omega$ .

Víme-li, že tato rotace času indukuje v dané buňce vznik hmotného kvantionu, můžeme se pokusit velikost této úhlové rychlosti odvodit.

## 7) Konstrukce orbitálního chronoru

Představíme-li si lineární chronor jako nehmotnou úsečku (strunu) v prostoru  $E^3$ , rotující úhlovou rychlostí  $\omega$  střídavě kolem navzájem ortogonálních os (třetí osu neuvažujeme, neboť rotace lineárního chronoru neprobíhá ve skutečnosti spojitě), potom každým bodem své celkové trajektorie projde vektor času minimálně  $N$ -krát za sekundu, přičemž

$$N = \frac{1}{T} = \frac{\omega}{2\pi} . \quad ( 11.183 )$$

Položíme-li nyní

$$T = \pi \cdot t_h \quad ( 11.184 )$$

neboli

$$N = (\pi \cdot t_h)^{-1} . \quad ( 11.185 )$$

Čas se tím zprostorní (vektor času bude v jediném okamžiku orientován do všech význačných cytoprostorových směrů).

Pro velikost  $\omega$  odtud plyne

$$\omega = \frac{2}{t_h} \quad ( 11.186 )$$

a pro obvodovou rychlost

$$v = \omega \cdot r = \frac{l_h}{t_h} = c . \quad ( 11.187 )$$



Nyní zbývá dokázat, že se uvnitř cytoprostorové buňky zasažené párem cytonů čas nejen zprostorní ale též zhmotní.

Důkaz provedeme v úplné extenzi Minkowského geometrie.

Nejprve spojíme pozorovatele se soustavou pevnou v cytoprostoru.

To lze v praxi učinit nejpřesněji vztažením pozorovatele k mikrovlnnému reliktnímu záření vesmírného pozadí.

Např. sluneční soustava se v současnosti pohybuje vůči cytoprostoru rychlostí  $400 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$  ve směru souhvězdí Iva.

Zaměří-li se nyní pozorovatel pevný v cytoprostoru na jedinou aktivní cytoprostorovou buňku, a bude sledovat koncový bod rotujícího lineárního chronoru, potom hmotnost tohoto bodu vůči němu lorentzovsky vzroste na nekonečn násobek své klidové hodnoty. Aktivovaná buňka tedy pro tohoto pozorovatele získá konečnou energii.

Dokážeme nyní, že tato energie se číselně blíží hodnotě Planckovy konstanty  $h$ .

Vlastní moment hybnosti částice může dosahovat nejmenších hodnot

$0$  a  $\frac{\hbar}{2}$ . V případě  $0$  se jedná o bosony, které můžeme z dalších úvah

vyloučit, neboť nerespektují Pauliho vylučovací princip a tudíž nemohou vytvářet vzájemné vazby. Jak později ukážeme (viz vztah ( 11.333 )), můžeme moment hybnosti kvantionu aproximovat vztahem

$$\frac{\hbar}{2} \approx \frac{2m_y \cdot l_h \cdot cz^5}{5}, \quad ( 11.188 )$$

odkud již snadno přibližně vyjádříme jeho hmotnost

$$m_y \approx \frac{5}{8\pi} \frac{h}{l_h \cdot cz^5} \approx 10^{-50} \text{ kg} \quad ( 11.189 )$$

a energii

$$E_y = m_y \cdot c^2 \approx h. \quad ( 11.190 )$$

Ukázali jsme tedy, že energie  $E_y \approx h$  je nejmenším kvantem energie jež může být obsaženo ve hmotné částici.

Předpokládejme, že jediná cytoprostorová buňka obsahuje energii  $E > h$ .

To by však znamenalo, že jediná cytoprostorová buňka může v principu obsahovat i více než jednu hmotnou částici.

Potom však tato částice musí v cytoprostoru zaujímat objem  $V < l_h^3$ , což je zjevný spor s kvantovou geometrodynamikou. ☺

Položme nyní soustavu pozorovatele pevně spjatou s lineárním chronorem.

Tuto soustavu označme písmenem **A**.

Původní soustavu pevnou v cytoprostoru označíme **B**.

Čas v soustavě **A** pak poteče nekonečněkrát pomaleji ve srovnání s rychlostí toku času v soustavě **B**.

Úhlová rychlost rotace lineárního chronoru v soustavě **A** je tedy  $\omega = \infty$ .

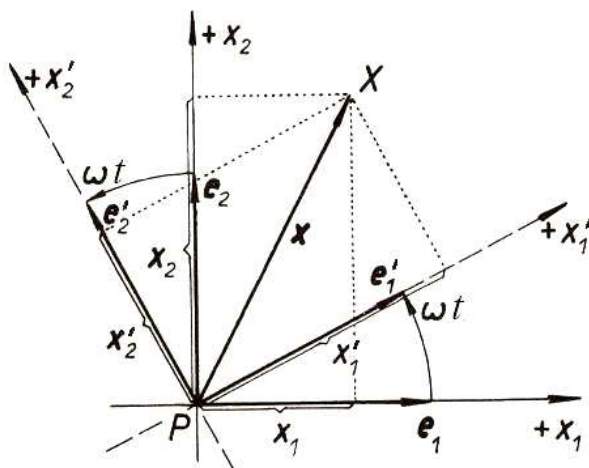
To však znamená, že koncový bod lineárního chronoru vytváří vzhledem k soustavě **A** souvislou uzavřenou smyčku.

Tedy rovněž z hlediska soustavy **A** se čas zprostornil.

Zbývá opět dokázat, že se z pohledu této soustavy čas rovněž zhmotní tak, jako tomu bylo z pohledu soustavy **B**.

Pro jednoduchost se omezíme pouze na dvourozměrný popis celého procesu: danou ortonormální bázi  $\beta = \langle \mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2 \rangle$  prostoru  $E_2$  otočíme o orientovaný úhel velikosti  $\omega t$  do báze  $\beta' = \langle \mathbf{e}'_1, \mathbf{e}'_2 \rangle$ .

Obr. 11.19



Máme za úkol najít rovnice které pro  $\mathbf{x} \in E_2$  popisují vztah mezi původními souřadnicemi  $\langle \mathbf{x} \rangle_\beta = (x_1, x_2)$  a novými souřadnicemi  $\langle \mathbf{x} \rangle_{\beta'} = (x_1', x_2')$ .

Vektor  $\mathbf{e}_1'$  resp.  $\mathbf{e}_2'$  má v původní bázi směrnik  $\omega t$  resp.  $\omega t + \pi/2$ . Protože platí

$$\begin{aligned} \cos\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right) &= -\sin(\omega t); \\ \sin\left(\omega t + \frac{\pi}{2}\right) &= \cos(\omega t), \end{aligned} \quad (11.191)$$

můžeme psát

$$\begin{aligned} \mathbf{e}_1' &= \mathbf{e}_1 \cdot \cos(\omega t) + \mathbf{e}_2 \cdot \sin(\omega t) \\ \mathbf{e}_2' &= -\mathbf{e}_1 \cdot \sin(\omega t) + \mathbf{e}_2 \cdot \cos(\omega t). \end{aligned} \quad (11.192)$$

Operátor přechodu od báze  $\beta'$  k bázi  $\beta$  tedy tvoří matice

$$\hat{\mathbf{R}} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & -\sin(\omega t) \\ \sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix}. \quad (11.193)$$

Tento operátor, jak snadno zjistíme, je ortonormální, takže platí

$$\hat{\mathbf{R}}^{-1} = \hat{\mathbf{R}}^T, \quad (11.194)$$

čili

$$\hat{\mathbf{R}}^{-1} = \begin{pmatrix} \cos(\omega t) & \sin(\omega t) \\ -\sin(\omega t) & \cos(\omega t) \end{pmatrix}. \quad (11.195)$$

Hledaná maticová rovnice

$$\langle \mathbf{x} \rangle_{\beta'}^T = \hat{\mathbf{R}}^{-1} \cdot \langle \mathbf{x} \rangle_\beta^T \quad (11.196)$$

po rozepsání do souřadnic pak dá soustavu rovnic popisujících vzájemný vztah mezi oběma uvažovanými bázemi:

$$\begin{aligned}x'_1 &= x_1 \cdot \cos(\omega t) + x_2 \cdot \sin(\omega t) \\x'_2 &= -x_1 \cdot \sin(\omega t) + x_2 \cdot \cos(\omega t).\end{aligned}\tag{ 11.197 }$$

Odtud po zderivování obou rovnic dostáváme

$$\begin{aligned}v'_1 &= \frac{dx_1}{dt} \cos(\omega t) - x_1 \cdot \omega \cdot \sin(\omega t) + \frac{dx_2}{dt} \sin(\omega t) + x_2 \cdot \omega \cdot \cos(\omega t) \\v'_2 &= -\frac{dx_1}{dt} \sin(\omega t) - x_1 \cdot \omega \cdot \cos(\omega t) + \frac{dx_2}{dt} \cos(\omega t) - x_2 \cdot \omega \cdot \sin(\omega t),\end{aligned}\tag{ 11.198 }$$

neboli

$$\begin{aligned}v'_1 &= v_1 \cdot \cos(\omega t) + v_2 \cdot \sin(\omega t) + \omega \left[ -x_1 \cdot \sin(\omega t) + x_2 \cdot \cos(\omega t) \right] \\v'_2 &= v_2 \cdot \cos(\omega t) - v_1 \cdot \sin(\omega t) - \omega \left[ x_1 \cdot \cos(\omega t) + x_2 \cdot \sin(\omega t) \right]\end{aligned}\tag{ 11.199 }$$

a vzhledem k ( 11.197 ) vyjádříme rychlost ještě jednodušeji

$$\begin{aligned}v'_1 &= v_1 \cdot \cos(\omega t) + v_2 \cdot \sin(\omega t) + \omega \cdot x'_2 \\v'_2 &= v_2 \cdot \cos(\omega t) - v_1 \cdot \sin(\omega t) - \omega \cdot x'_1.\end{aligned}\tag{ 11.200 }$$

Tuto soustavu opět zderivujeme a máme

$$\begin{aligned}a'_1 &= \frac{dv_1}{dt} \cos(\omega t) - v_1 \cdot \omega \cdot \sin(\omega t) + \frac{dv_2}{dt} \sin(\omega t) + v_2 \cdot \omega \cdot \cos(\omega t) + \omega \frac{dx'_2}{dt} \\a'_2 &= -\frac{dv_1}{dt} \sin(\omega t) - v_1 \cdot \omega \cdot \cos(\omega t) + \frac{dv_2}{dt} \cos(\omega t) - v_2 \cdot \omega \cdot \sin(\omega t) - \omega \frac{dx'_1}{dt},\end{aligned}\tag{ 11.201 }$$

čili

$$\begin{aligned}
 a'_1 &= a_1 \cdot \cos(\omega t) + a_2 \cdot \sin(\omega t) + \omega \cdot v'_2 + \omega \left[ -v_1 \cdot \sin(\omega t) + v_2 \cdot \cos(\omega t) \right] \\
 a'_2 &= -a_1 \cdot \sin(\omega t) + a_2 \cdot \cos(\omega t) - \omega \cdot v'_1 - \omega \left[ v_1 \cdot \cos(\omega t) + v_2 \cdot \sin(\omega t) \right].
 \end{aligned}
 \tag{11.202}$$

Porovnáním s rovnicemi ( 11.200 ) odtud plyne

$$\begin{aligned}
 a'_1 &= a_1 \cdot \cos(\omega t) + a_2 \cdot \sin(\omega t) + \omega \cdot v'_2 + \omega(v'_2 + \omega \cdot x'_1) \\
 a'_2 &= -a_1 \cdot \sin(\omega t) + a_2 \cdot \cos(\omega t) - \omega \cdot v'_1 - \omega(v'_1 - \omega \cdot x'_2),
 \end{aligned}
 \tag{11.203}$$

tj.

$$\begin{aligned}
 a'_1 &= a_1 \cdot \cos(\omega t) + a_2 \cdot \sin(\omega t) + 2\omega \cdot v'_2 + \omega^2 \cdot x'_1 \\
 a'_2 &= -a_1 \cdot \sin(\omega t) + a_2 \cdot \cos(\omega t) - 2\omega \cdot v'_1 - \omega^2 \cdot x'_2.
 \end{aligned}
 \tag{11.204}$$

Konstanta  $\omega$  zde má zřejmě význam úhlové rychlosti, takže

$$\boldsymbol{\omega} = \frac{\partial \mathbf{r}}{\partial \mathbf{t}}.
 \tag{11.205}$$

vektor  $\mathbf{r}$  je normálovým vektorem pohybu času a proto

$$r \equiv \|\mathbf{r}\| = konst = \pi \cdot l_h.
 \tag{11.206}$$

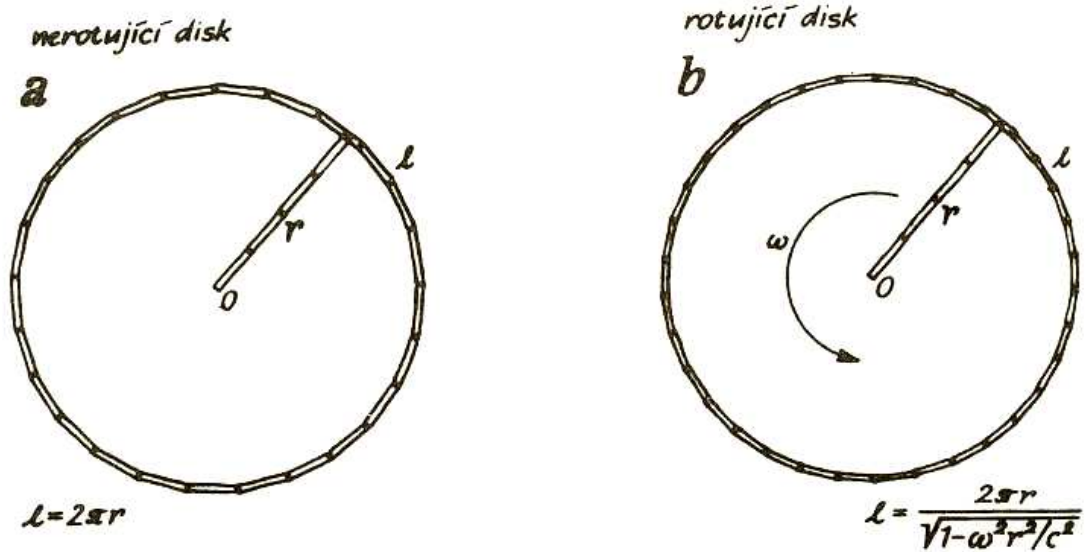
V Minkowského pseudoeukleidovském prostoročase s nímž zde máme co do činění (neboť hmota je zprvu rovna  $\infty^{-1}$ ) se v neinerciálních vztažných soustavách geometrie trojrozměrného prostoru stává neeukleidovskou.

Demonstrujme to na našem případu rotující vztažné soustavy dle obr. 11.20.

Mějme zprvu nerotující rovný kotouč, jehož střed tvoří počátek inerciální vztažné soustavy  $V$ .

Pozorovatel, který pomocí dostatečně krátkých měřících tyčí měří rozměry tohoto kruhového disku, změří jeho poloměr  $r$  a obvod  $l = 2\pi r$ , plně v souladu s eukleidovskou geometrií (viz obr. 11.20a).

Obr.11.20



Nyní disk roztočíme kolem jeho středu  $S$  úhlovou rychlostí  $\omega$  vzhledem k soustavě  $V$ .

Pozorovatel pevně spojený s rotujícím kotoučem naměří pomocí radiálně přikládaných měřících tyčí stejný poloměr  $r$  disku jako kdyby rotace nebylo.

Sleduje-li však nyní inerciální pozorovatel v soustavě  $V$  měřící tyče které experimentátor na rotujícím disku přikládá k jeho obvodu za účelem změření délky obvodu  $l$ , pohybují se tyto tyče vůči soustavě  $V$  ve směru své délky rychlostí  $v = \omega \cdot r$ .

Každá taková tyč pak bude zkrácena Lorentzovým faktorem

$$\gamma^{-1} = \sqrt{1 - \frac{\omega^2 \cdot r^2}{c^2}} \quad (11.207)$$

oproti své klidové délce (viz obr. 11.20b).

Pozorovatel na rotujícím disku proto zjistí, že mezi poloměrem a obvodem kruhového disku platí vztah

$$l = \frac{2\pi \cdot r}{\sqrt{1 - \frac{\omega^2 \cdot r^2}{c^2}}} \quad (11.208)$$

Poměr mezi délkou kružnice a jejím poloměrem je zde různý od  $2\pi$ . Geometrie rotujícího disku je tedy neeukleidovská.

Vnější inerciální pozorovatel to vysvětlí kinematicky pomocí Lorentzových transformací délek, zatímco pozorovatel rotující spolu s diskem to bude považovat za důsledek setrvačných sil působících na všechna tělesa, neboť pro něj jsou všechny části disku v klidu.

Prohlásí, že tyto setrvačné síly odchyľují geometrii prostoru od Eukleidovy, přičemž míra této neeukleidovosti, tj. zakřivení prostoru, je určena velikostí těchto setrvačných sil.

Úhlová rychlost pozorovatele na rotujícím disku v jeho vlastní soustavě pak bude dána vztahem

$$\Omega = \frac{S}{t \cdot r} = \frac{2\pi}{t \cdot \sqrt{1 - \frac{\omega^2 \cdot r^2}{c^2}}} . \quad (11.209)$$

Uvnitř aktivní cytoprostorové buňky navíc platí

$$t \equiv \|\mathbf{t}\| \equiv r = \frac{l_h}{2} , \quad (11.210)$$

což po dosazení do vztahu ( 11.209 ) a drobné úpravě dá konečný výsledek

$$\Omega = \frac{8\pi \cdot c}{l_h \cdot \sqrt{4c^2 - \omega^2 \cdot l_h^2}} , \quad (11.211)$$

kde  $\omega$  značí úhlovou rychlost kterou naměří inerciální pozorovatel pevně spojený se cytoprostorem.

Je zřejmé, že

$$\omega \rightarrow \frac{2c}{l_h} \Rightarrow \Omega \rightarrow \infty . \quad (11.212)$$

Položíme-li klidovou hmotnost lineárního chronoru

$$m_{t_0} = \infty^{-1}, \quad (11.213)$$

což vypadá jako velmi rozumný předpoklad, pak po dosazení do (11.204) máme

$$\begin{aligned} F'_1 &= 2k \cdot \omega \cdot v'_2 + k \cdot \omega^2 \cdot x'_1 \\ F'_2 &= -2k \cdot \omega \cdot v'_1 + k \cdot \omega^2 \cdot x'_2, \end{aligned} \quad (11.214)$$

kde  $k$  je nějaká konečná konstanta různá od nuly, takže platí

$$\begin{aligned} F'_1 &= F_1^c + F_1^o \neq 0 \\ F'_2 &= F_2^c + F_2^o \neq 0, \end{aligned} \quad (11.215)$$

kde  $F^c$  je síla Coriolisova a  $F^o \neq 0$  je síla odstředivá.



**Gaspard-Gustave de Coriolis (1792 – 1843)**

Nyní zbývá ještě určit velikost konstanty  $k$ , což by však ve světle předchozích úvah nemělo činiti žádný problém.

Konstanta  $k$  zřejmě vyjadřuje hledanou hmotnost chronoru, takže by mělo platit

$$k = \frac{E}{c^2} = \frac{h}{c^2}. \quad (11.216)$$

Odtud pro odstředivou sílu, která je zjevnou příčinou tenze lineárního chronoru (vnitřní pnutí kvantionu) dostáváme hodnotu



$$F^o = k \cdot \omega \cdot r = \frac{4 \cdot h}{l_h} = \sqrt{\frac{32\pi \cdot h \cdot c^3}{G}} \approx 164 \text{ N}, \quad (11.217)$$

zcela ve shodě se vztahem ( 11.159 ) odvozeným čistě jen na základě úvah o dynamice cytorezonančních kvazičástic cytonů. ☺

Ukázali jsme tedy, že rotace vektoru lineárního času iniciuje vznik rotující hmotné kružnice uvnitř cytoprostorové buňky.

Tento útvar budeme nadále nazývat **orbitálním chronorem**.

V následujícím oddílu podrobně prozkoumáme, jaké efekty můžeme v souvislosti s pohybem orbitálního chronoru očekávat.

## 8) Konstrukce sférického chronoru

Počátek soustavy souřadné vložíme do bodu, kolem kterého se orbitální chronor otáčí.

Rychlost  $n$ -tého bodu chronoru pak udává vztah

$$\mathbf{v}_n = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_n, \quad (11.218)$$

kde  $\boldsymbol{\omega}$  je okamžitá úhlová rychlost otáčení chronoru,  $\mathbf{r}_n$  je polohový vektor  $n$ -tého bodu chronoru.

Pro celkový impulsmoment  $\mathbf{B}$  pak platí

$$\mathbf{B} = \sum \mathbf{r}_n \times m_n \mathbf{v}_n = \sum m_n \mathbf{r}_n \times (\boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_n). \quad (11.219)$$

Rovnici ( 11.219 ) rozepíšeme do složek vyjádřených v integrálním tvaru:

$$\begin{aligned} B_1 &= \int \rho_l \left[ x_2 (\omega_1 x_2 - \omega_2 x_1) - x_3 (\omega_3 x_1 - \omega_1 x_3) \right] dl \\ B_2 &= \int \rho_l \left[ x_3 (\omega_2 x_3 - \omega_3 x_2) - x_1 (\omega_1 x_2 - \omega_2 x_1) \right] dl \\ B_3 &= \int \rho_l \left[ x_1 (\omega_3 x_1 - \omega_1 x_3) - x_2 (\omega_2 x_3 - \omega_3 x_2) \right] dl, \end{aligned} \quad (11.220)$$

kde  $\rho_l$  je lineární hustota chronoru,  $dl$  je element délky.

Po vytknutí složek vektoru úhlové rychlosti  $\boldsymbol{\omega}$ , který je společný pro celý chronor, můžeme rovnice ( 11.220 ) přepsat do tvaru

$$\begin{aligned} B_1 &= \omega_1 \int \rho_l \left[ (x_2)^2 + (x_3)^2 \right] dl - \omega_2 \int \rho_l x_1 x_2 dl - \omega_3 \int \rho_l x_1 x_3 dl \\ B_2 &= -\omega_1 \int \rho_l x_1 x_2 dl + \omega_2 \int \rho_l \left[ (x_1)^2 + (x_3)^2 \right] dl - \omega_3 \int \rho_l x_2 x_3 dl \\ B_3 &= -\omega_1 \int \rho_l x_1 x_3 dl - \omega_2 \int \rho_l x_2 x_3 dl + \omega_3 \int \rho_l \left[ (x_1)^2 + (x_2)^2 \right] dl . \end{aligned} \quad ( 11.221 )$$

Koeficienty u složek úhlové rychlosti mají rozměr shodný s rozměrem inerciálního momentu.

Z důvodu zjednodušení je označíme následujícím způsobem:

$$I_{ik} = \int \left[ (x_i)^2 \delta_{ik} - x_i x_k \right] \rho_l dl = I_{ki} , \quad ( 11.222 )$$

což po rozepsání dá

$$\begin{aligned} I_{11} &= \int \left[ (x_2)^2 + (x_3)^2 \right] \rho_l dl ; & I_{12} &= I_{21} = - \int x_1 x_2 \rho_l dl ; \\ I_{22} &= \int \left[ (x_1)^2 + (x_3)^2 \right] \rho_l dl ; & I_{13} &= I_{31} = - \int x_1 x_3 \rho_l dl ; \\ I_{33} &= \int \left[ (x_1)^2 + (x_2)^2 \right] \rho_l dl ; & I_{23} &= I_{32} = - \int x_2 x_3 \rho_l dl . \end{aligned} \quad ( 11.223 )$$

S tímto novým označením můžeme rovnice ( 11.221 ) přepsat na tvar

$$\begin{aligned} B_1 &= \omega_1 I_{11} + \omega_2 I_{12} + \omega_3 I_{13} , \\ B_2 &= \omega_1 I_{21} + \omega_2 I_{22} + \omega_3 I_{23} , \\ B_3 &= \omega_1 I_{31} + \omega_2 I_{32} + \omega_3 I_{33} . \end{aligned} \quad ( 11.224 )$$

Ve složkové symbolice můžeme celou soustavu ( 11.224 ) vyjádřit v kompaktním tvaru jako

$$B_i = \omega_j I_{ij} , \quad (11.225)$$

nebo, v symbolice operátorů, jako

$$\mathbf{B} = \hat{\mathbf{I}}\boldsymbol{\omega} . \quad (11.226)$$

V soustavě souřadnic spjaté s chronorem označíme složky vektoru  $\mathbf{B}$  po řadě  $\beta_1, \beta_2, \beta_3$ , složky polohového vektoru  $\mathbf{r}$  jako  $\xi_1, \xi_2, \xi_3$  a složky úhlové rychlosti  $\boldsymbol{\omega}$  coby  $\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3$ .

Nahradíme-li v rovnici (11.221)  $x_i \rightarrow \xi_i$ ,  $\omega_i \rightarrow \Omega_i$ , obdržíme

$$\begin{aligned} \beta_1 &= \Omega_1 \int \rho_l \left[ (\xi_2)^2 + (\xi_3)^2 \right] dl - \Omega_2 \int \rho_l \xi_1 \xi_2 dl - \Omega_3 \int \rho_l \xi_1 \xi_3 dl , \\ \beta_2 &= -\Omega_1 \int \rho_l \xi_1 \xi_2 dl + \Omega_2 \int \rho_l \left[ (\xi_1)^2 + (\xi_3)^2 \right] dl - \Omega_3 \int \rho_l \xi_2 \xi_3 dl , \\ \beta_3 &= -\Omega_1 \int \rho_l \xi_1 \xi_3 dl + \Omega_2 \int \rho_l \xi_2 \xi_3 dl + \Omega_3 \int \rho_l \left[ (\xi_1)^2 + (\xi_2)^2 \right] dl . \end{aligned} \quad (11.227)$$

Koeficienty u  $\Omega_i$  nyní označíme  $J_{ij}$ .

$$J_{ij} = \int \left[ (\xi_i)^2 \delta_{ij} - \xi_i \xi_j \right] \rho_l dl = J_{ji} , \quad (11.228)$$

tj.

$$\begin{aligned} J_{11} &= \int \rho_l \left[ (\xi_2)^2 + (\xi_3)^2 \right] dl ; & J_{12} &= J_{21} = - \int \rho_l \xi_1 \xi_2 dl ; \\ J_{22} &= \int \rho_l \left[ (\xi_1)^2 + (\xi_3)^2 \right] dl ; & J_{13} &= J_{31} = - \int \rho_l \xi_1 \xi_3 dl ; \\ J_{33} &= \int \rho_l \left[ (\xi_1)^2 + (\xi_2)^2 \right] dl ; & J_{23} &= J_{32} = - \int \rho_l \xi_2 \xi_3 dl . \end{aligned} \quad (11.229)$$

Rovnice (11.227) pak můžeme opět stručně zapsat jako

$$\beta_i = \Omega_j J_{ij} , \quad (11.230)$$

čili

$$\mathbf{B} = \hat{\mathbf{J}}\boldsymbol{\omega} . \quad ( 11.231 )$$

V soustavě souřadnic spjaté s orbitálním chronorem jsou souřadnice  $\xi_i$  s časem stálé a tedy i koeficienty  $J_{ij}$  jsou na rozdíl od koeficientů  $I_{ij}$  časově invariantní, konstantní veličiny.

Koeficientům  $J_{ij}$  budeme říkat **komponenty inercmomentu**.

Složky se shodnými indexy  $J_{11}, J_{22}, J_{33}$  budeme nazývat **inercmomenty** vůči osám souřadného systému.

Složky se smíšenými indexy  $J_{12}, J_{13}, J_{23}$  nazveme **deviačními momenty**.

Čtverec délky průvodiče  $n$ -tého bodu chronoru je

$$\xi'_i \xi'_i \equiv (\xi'_1)^2 + (\xi'_2)^2 + (\xi'_3)^2 , \quad ( 11.232 )$$

popř.

$$\xi_j \xi_j \equiv (\xi_1)^2 + (\xi_2)^2 + (\xi_3)^2 . \quad ( 11.233 )$$

V prvním faktoru položíme

$$\xi'_i = a_{ij} \xi_j , \quad ( 11.234 )$$

ve druhém

$$\xi'_i = a_{ik} \xi_k . \quad ( 11.235 )$$

Budeme se zabývat pouze takovými transformacemi, při nichž je invariantní délka průvodiče, tj.

$$\xi'_i \xi'_i = a_{ij} a_{ik} \xi_j \xi_k = \xi_j \xi_j . \quad ( 11.236 )$$

Takové transformace nazýváme **unitární**.

Podmínka ( 11.236 ) určuje jisté omezující podmínky na operátor

$$\hat{\mathbf{A}} = \{ a_{ij} \} . \quad ( 11.237 )$$

Pomocí Kroneckerova tenzoru přepíšeme ( 11.233 ) jako

$$\xi_j \xi_j = \delta_{jk} \xi_j \xi_k , \quad ( 11.238 )$$

což po dosazení do ( 11.236 ) dá

$$( a_{ij} a_{ik} - \delta_{jk} ) \xi_j \xi_k = 0 \quad ( 11.239 )$$

neboli

$$a_{ij} a_{ik} \xi_j \xi_k = \delta_{jk} \xi_j \xi_k . \quad ( 11.240 )$$

Tato rovnice musí platit pro všechna  $\xi_j, \xi_k$ , což vede k podmínce pro koeficienty transformace

$$a_{ij} a_{ik} = \delta_{jk} . \quad ( 11.241 )$$

Nyní najdeme inverzní transformaci k ( 11.234 ).

Za tím účelem vynásobíme tuto rovnici koeficientem  $a_{ik}$ , což dá

$$a_{ik} \xi'_i = a_{ij} a_{ik} \xi_j = \delta_{jk} \xi_j = \xi_k . \quad ( 11.242 )$$

Je tedy

$$\xi_k = a_{ik} \xi'_i . \quad ( 11.243 )$$

Z podmínky

$$\xi_k \xi_k = \xi'_i \xi'_i \quad ( 11.244 )$$

pak stejným postupem jako při odvozování ( 11.241 ) dostaneme

$$a_{ik}a_{jk} = \delta_{ij} . \quad ( 11.245 )$$

Mezi složkami  $\beta_i$  a  $\beta'_i$  resp.  $\Omega_j$  a  $\Omega'_j$  platí podle definice vektoru vztahy

$$\begin{aligned} \beta_i &= a_{li}\beta'_l , \\ \Omega_j &= a_{kj}\Omega'_k , \end{aligned} \quad ( 11.246 )$$

uvažujeme-li inverzní transformaci

$$\xi_j = a_{ij}\xi'_i \quad ( 11.247 )$$

k transformaci ( 11.234 ).

Dosadíme-li ( 11.246 ) do ( 11.230 ) dostáváme

$$a_{li}\beta'_l = a_{kj}\Omega'_k J_{ij} . \quad ( 11.248 )$$

Poslední rovnici vynásobíme koeficientem transformace  $a_{mi}$

$$a_{mi}a_{li}\beta'_l = a_{mi}a_{kj}\Omega'_k J_{ij} , \quad ( 11.249 )$$

a protože platí

$$a_{mi}a_{li} = \delta_{ml} , \quad ( 11.250 )$$

získáme užitím zřejmé identity

$$\delta_{ml}\beta'_l = \beta'_m \quad ( 11.251 )$$

rovnici

$$\beta'_m = \Omega'_k a_{mi}a_{kj} J_{ij} . \quad ( 11.252 )$$

Poslední rovnice je vyjádřením vztahu ( 11.230 ) v čárkované soustavě souřadnic.

Musí tedy mít tvar

$$\beta'_m = \Omega'_k J_{mk} . \quad ( 11.253 )$$

Porovnáním ( 11.251 ) a ( 11.253 ) dostáváme

$$J'_{mk} = a_{mi} a_{kj} J_{ij} . \quad ( 11.254 )$$

To je však transformační rovnice pro tenzor druhého řádu.

Rovnice ( 11.230 ) může tedy být splněna pouze když výraz  $J_{ij}$  je tenzorem druhého řádu.

Jelikož platí relace

$$J_{ij} = J_{ji} , \quad ( 11.255 )$$

jedná se navíc o symetrický tenzor.

V dalším textu pro něj budeme užívat označení **inerciální tenzor**.

Nyní se pokusíme přepsat druhou větu impulsovou

$$\left( \frac{d\mathbf{B}}{dt} \right)_S = \mathbf{M} \quad ( 11.256 )$$

do soustavy souřadnic spjaté s chronorem.

Budeme předpokládat, že soustava souřadnic pevná v chronoru a soustava souřadnic pevná v cytoprostoru mají společný počátek v bodě, kolem kterého se chronor otáčí.

Vektor  $\mathbf{M}$  převedeme do soustavy souřadnic spjaté s chronorem jednoduše tak, že v této soustavě vyjádříme jeho složky.

Označme je  $\mu_1, \mu_2, \mu_3$ .

Vyjádření derivace  $\left( \frac{d\mathbf{B}}{dt} \right)_C$ , tj. časové změny vektoru  $\mathbf{B}$  vůči soustavě souřadnic spjaté s chronorem, pomocí časové změny vektoru  $\mathbf{B}$  vzhledem k cytoprostoru  $\left( \frac{d\mathbf{B}}{dt} \right)_S$ , je již poněkud obtížnější.

Polohový vektor  $\mathbf{r}$  určitého pevného bodu chronoru je v soustavě spjaté s chronorem konstantní, kdežto v soustavě pevné v cytoprostoru se s časem mění.

Pro rychlost  $n$ -tého bodu chronoru vzhledem k různým soustavám tedy platí

$$\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)_C = 0, \quad (11.257)$$

$$\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)_S = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}, \quad (11.258)$$

čili

$$\left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)_S - \left(\frac{d\mathbf{r}}{dt}\right)_C = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}. \quad (11.259)$$

U jiných vektorů, jako např. u vektoru  $\mathbf{B}$  nemusí být derivace vůči chronoru nulová.

Mezi oběmi derivacemi však i nadále zůstává v platnosti vztah

$$\left(\frac{d}{dt}\right)_S - \left(\frac{d}{dt}\right)_C = \boldsymbol{\omega} \times \quad . \quad (11.260)$$

Speciálně pro vektor  $\mathbf{B}$  celkového impulsmomentu orbitálního chronoru platí

$$\left(\frac{d\mathbf{B}}{dt}\right)_S - \left(\frac{d\mathbf{B}}{dt}\right)_C = \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{B}. \quad (11.261)$$

Po dosazení rovnice ( 11.261 ) do druhé věty impulsové ( 11.256 ) získáme hledané vyjádření této věty v soustavě souřadnic spjaté s chronorem:



$$\left( \frac{d\mathbf{B}}{dt} \right)_C + \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{B} = \mathbf{M} . \quad ( 11.262 )$$

Rozepsáním této rovnice do složek dostaneme

$$\begin{aligned} \frac{d\beta_1}{dt} + \Omega_2\beta_3 - \Omega_3\beta_2 &= \mu_1 , \\ \frac{d\beta_2}{dt} + \Omega_3\beta_1 - \Omega_1\beta_3 &= \mu_2 , \\ \frac{d\beta_3}{dt} + \Omega_1\beta_2 - \Omega_2\beta_1 &= \mu_3 . \end{aligned} \quad ( 11.263 )$$

Dosadíme-li do ( 11.263 ) vyjádření  $\beta_i$  podle ( 11.230 ), přejdou rovnice ( 11.263 ) na tvar

$$\begin{aligned} J_{11} \frac{d\Omega_1}{dt} + J_{12} \frac{d\Omega_2}{dt} + J_{13} \frac{d\Omega_3}{dt} + \Omega_2\Omega_1 J_{31} + \Omega_2\Omega_2 J_{32} + \Omega_2\Omega_3 J_{33} - \\ - \Omega_3\Omega_1 J_{21} - \Omega_3\Omega_2 J_{22} - \Omega_3\Omega_3 J_{23} &= \mu_1 , \\ J_{21} \frac{d\Omega_1}{dt} + J_{22} \frac{d\Omega_2}{dt} + J_{23} \frac{d\Omega_3}{dt} + \Omega_3\Omega_1 J_{11} + \Omega_3\Omega_2 J_{12} + \Omega_3\Omega_3 J_{13} - \\ - \Omega_1\Omega_1 J_{31} - \Omega_1\Omega_2 J_{32} - \Omega_1\Omega_3 J_{33} &= \mu_2 , \\ J_{31} \frac{d\Omega_1}{dt} + J_{32} \frac{d\Omega_2}{dt} + J_{33} \frac{d\Omega_3}{dt} + \Omega_1\Omega_1 J_{21} + \Omega_1\Omega_2 J_{22} + \Omega_1\Omega_3 J_{23} - \\ - \Omega_2\Omega_1 J_{11} - \Omega_2\Omega_2 J_{12} - \Omega_2\Omega_3 J_{13} &= \mu_3 . \end{aligned} \quad ( 11.264 )$$

Proložíme-li třetí osu soustavy souřadnic spjaté s chronorem osou rotace, pak  $\Omega_1 = \Omega_2 = 0$ ,  $\Omega_3 \neq 0$ .

Pro složky  $\beta_i$  impulsmomentu pak podle ( 11.230 ) dostáváme vyjádření

$$\begin{aligned}
\beta_1 &= \Omega_3 J_{13} , \\
\beta_2 &= \Omega_3 J_{23} , \\
\beta_3 &= \Omega_3 J_{33} .
\end{aligned}
\tag{ 11.265 }$$

Jsou-li deviační složky inerciálního tenzoru  $J_{13}$  a  $J_{23}$  nenulové, má celkový impulsmoment nejen složku do směru osy rotace, ale i nenulové složky  $\beta_1$  a  $\beta_2$ .

Vektor  $\beta_i$  nemá tedy směr osy otáčení.

Z pohybových rovnic ( 11.264 ) pro rotaci orbitálního chronoru kolem třetí osy ( $\Omega_1 = \Omega_2 = 0, \Omega_3 \neq 0$ ) plyne

$$\begin{aligned}
J_{13} \frac{d\Omega_3}{dt} - (\Omega_3)^2 J_{23} &= \mu_1 , \\
J_{23} \frac{d\Omega_3}{dt} - (\Omega_3)^2 J_{13} &= \mu_2 , \\
J_{33} \frac{d\Omega_3}{dt} &= \mu_3 .
\end{aligned}
\tag{ 11.266 }$$

Nepokládáme-li osu rotace za osu, která je vazbami udržována v pevné poloze, nenulové hodnoty deviačních momentů v rovnici ( 11.266 ) způsobí, že osa rotace nebude mít vůči chronoru ani vůči cytoprostoru stálou polohu.

Osa začne chronorem i cytoprostorem putovat, a to i v případě, kdy výsledný moment vnějších sil působících na chronor je nulový.

Zodpovíme nyní otázku, zda v chronoru existují osy, vůči kterým jsou deviační momenty nulové.

Jde o to, nalézt v chronoru směry, v nichž je při rotaci impulsmoment rovnoběžný s osou rotace, tj.  $\mathbf{B} = k \cdot \boldsymbol{\omega}$ .

V soustavě spjaté s chronorem pak platí  $k = J$  tj.

$$\beta_i = J \cdot \Omega_i .
\tag{ 11.267 }$$

Dosadíme-li požadavek ( 11.267 ) do ( 11.230 ), dostáváme

$$J \cdot \Omega_i = J_{ij} \Omega_j .
\tag{ 11.268 }$$

Soustavu ( 11.268 ) rozepíšeme do složek a všechny členy převedeme na levou stranu:

$$\begin{aligned} (J_{11} - J) \Omega_1 + J_{12} \Omega_2 + J_{13} \Omega_3 &= 0, \\ J_{21} \Omega_1 + (J_{22} - J) \Omega_2 + J_{23} \Omega_3 &= 0, \\ J_{31} \Omega_1 + J_{32} \Omega_2 + (J_{33} - J) \Omega_3 &= 0. \end{aligned} \quad ( 11.269 )$$

Obdrželi jsme homogenní soustavu pro neznámé složky  $\Omega_i$  vektoru úhlové rychlosti.

Netriviální řešení získáme jen v případě, že matice soustavy ( 11.269 )

$$\hat{\mathbf{M}} = \begin{pmatrix} J_{11} - J & J_{12} & J_{13} \\ J_{21} & J_{22} - J & J_{23} \\ J_{31} & J_{32} & J_{33} - J \end{pmatrix} \quad ( 11.270 )$$

je singulární, tj.

$$\det \hat{\mathbf{M}} = 0. \quad ( 11.271 )$$

Čísla  $J_i$  tedy tvoří spektrum operátoru  $\hat{\mathbf{M}}$  a jak se lze snadno přesvědčit, jsou pro reálné hodnoty  $J_{ij}$  rovněž všechna tři  $J_i$  reálná. Existují tedy celkem tři konstanty  $J_1, J_2, J_3$ , splňující rovnici ( 11.271 ).

Každé z těchto tří konstant odpovídá jedno řešení rovnic ( 11.269 ), tj. jedna trojice složek  $\Omega_i$  vektoru úhlové rychlosti.

Rovnicemi ( 11.269 ) jsou však vektory  $\Omega_k$  určeny až na libovolnou konstantu.

Je-li  $\Omega_i$  jejím řešením, je řešením také  $k \cdot \Omega_i$ , neboť dosazením do ( 11.269 ) lze konstantu  $k$  ve všech rovnicích soustavy vykrátit.

Vlastními vektory operátoru  $\hat{\mathbf{M}}$  jsou pak jednotlivé vektory  $\mathbf{v}_k$  rovnoběžné se všemi  $\Omega_k$ .

Vektory  $\mathbf{v}_k$  jsou tedy jednotkovými vektory určujícími hledaný směr hlavních os rotace.

Lze ukázat, že jsou-li všechny konstanty  $J_1, J_2, J_3$  navzájem různé, jsou jim odpovídající vlastní vektory  $\mathbf{v}_k$  vzájemně ortogonální. K tomu stačí ukázat, že vlastní vektory tvoří bázi prostoru  $E^3$ . Protože jejich počet odpovídá stupni charakteristické rovnice ( 11.271 ) tzn. dimenzi  $E^3$ , ukážeme již jen jejich nezávislost, třeba takto: Kdyby

$$\sum \mu_k \mathbf{v}_k = \mathbf{0} , \quad ( 11.272 )$$

kde  $\mathbf{v}_k$  jsou vlastní vektory operátoru  $\hat{\mathbf{M}} : \vec{f}(\mathbf{v}_k) = J_k \mathbf{v}_k$ , tak by pro každé  $N$  platilo

$$\hat{\mathbf{M}}^N(\mathbf{v}) = J^N \mathbf{v} , \quad ( 11.273 )$$

neboli

$$\hat{\mathbf{M}}^N \left( \sum \mu_k \mathbf{v}_k \right) = \sum \mu_k J_k^N \mathbf{v}_k = \mathbf{0} . \quad ( 11.274 )$$

To je ovšem nekonečně mnoho nezávislých rovnic pro neznámou  $\mu_k$  což je neřešitelné, že ano. ☺

Podmínku ( 11.267 ) o rovnoběžnosti vektorů  $\boldsymbol{\omega}$  a  $\mathbf{B}$  lze tedy splnit alespoň pro jednu trojici vzájemně ortogonálních vektorů.

V libovolném tělese tedy existují pro každý bod nejméně tři tímto bodem procházející vzájemně ortogonální osy takové, že při rotaci kolem nich je celkový impulsmoment rovnoběžný s osou rotace.

Těmito osami lze samozřejmě proložit vektory kanonické báze, tj. osy ortonormální soustavy souřadné.

Předpokládejme, že objekt rotuje kolem třetí osy takto zvolené soustavy souřadnic.

Jelikož impulsmoment v uvažované soustavě souřadnic musí být rovnoběžný s osou rotace, tj. třetí osou, platí pro první a druhou složku rovnost  $\beta_1 = \beta_2 = 0$ .

Z prvních dvou rovnic ( 11.262 ) pak plyne, že v takto zvolené soustavě souřadné musí být  $J_{13} = J_{23} = 0$ .

Podobným rozbořem rovnic ( 11.265 ) pro rotaci kolem zbývajících dvou os dostaneme postupně  $J_{12} = J_{23} = 0$  pro rotaci kolem druhé osy a  $J_{12} = J_{13} = 0$  pro rotaci kolem první osy.

Odtud plyne závěr, že proložíme-li osy kartézské soustavy souřadnic těmi směry, ve kterých je při rotaci impulsmoment rovnoběžný s rotační osou, deviační momenty vymizí.

V takové soustavě souřadnic zůstanou nenulové pouze diagonální složky inerciálního tenzoru  $J_{11}, J_{22}, J_{33}$ , které jsou řešením rovnice ( 11.271 ), tj. platí:  $J_{11} = J_1, J_{22} = J_2, J_{33} = J_3$ .

Osám, vůči nimž deviační složky inerciálního tenzoru zmizely, říkáme **hlavní osy inerciálního tenzoru** a jim příslušejícím momentům  $J_1, J_2, J_3$  říkáme **hlavní inercmomenty**.

Proces, jehož jsme právě byli svědky se nazývá **diagonalizací tenzoru**.

Zvolíme-li soustavu souřadnic pevnou v chronoru ve směru hlavních os inerciálního tenzoru, zjednoduší se nám rovnice ( 11.264 ) na tvar

$$\begin{aligned} J_1 \frac{d\Omega_1}{dt} + \Omega_2 \Omega_3 (J_3 - J_2) &= \mu_1, \\ J_2 \frac{d\Omega_2}{dt} + \Omega_3 \Omega_1 (J_1 - J_3) &= \mu_2, \\ J_3 \frac{d\Omega_3}{dt} + \Omega_1 \Omega_2 (J_2 - J_1) &= \mu_3. \end{aligned} \quad ( 11.275 )$$

Zbývá ještě ukázat, kterak určit inercmoment vůči libovolné ose procházející bodem v němž známe inerciální tenzor.

Pro složku impulsmomentu rovnoběžnou s osou otáčení platí

$$\mathbf{B} \cdot \mathbf{v} = J \cdot \omega, \quad ( 11.276 )$$

kde  $\mathbf{B}$  je celkový impulsmoment a  $\mathbf{v}$  je jednotkový vektor kolineární s osou otáčení.

Projekce impulsmomentu do osy rotace je invariantní veličinou vzhledem k volbě souřadného systému (nezávisí na tom, zda jej upevníme v cytoprostoru či v chronoru).

Platí tedy rovněž

$$v_i \beta_i = J \cdot \omega , \quad ( 11.277 )$$

kde  $v_i$  jsou nyní složky jednotkového vektoru ve směru rotační osy v soustavě souřadnic pevné v chronoru.

Do rovnice ( 11.277 ) dosadíme vyjádření  $\beta_i$  podle ( 11.230 ) a dostaneme

$$v_i J_{ij} \Omega_j = J \cdot \omega . \quad ( 11.278 )$$

Při rotaci kolem pevné osy má vektor  $\Omega_j$  směr této osy, a proto

$$\Omega_j = v_j \omega . \quad ( 11.279 )$$

Dosazením posledního vztahu do rovnice ( 11.278 ) a pokrácením úhlové rychlosti  $\omega$  obdržíme hledané vyjádření inercmomentu  $J$  podle komponent inerciálního tenzoru  $J_{ij}$ , tj. **kontrakci inerciálního tenzoru**, ve tvaru

$$J = v_i v_j J_{ij} . \quad ( 11.280 )$$

V námi zkoumaném případě bude rozumné předpokládat, že vnější silové působení na chronor je omezeno toliko na kvantové fluktuace cytoprostoru a jako takové bude bez přijetí dalších dodatečných předpokladů (interhypergrupární komunikace apod.) zcela náhodné. Proto je vektorový součet všech silových momentů působících na chronor v každém okamžiku průměrně nulový.

Pro první přiblížení nám tento předpoklad bohatě postačí, avšak přesnější výsledky, jichž se dočkáme již v následující kapitole, budou vyžadovat zahrnutí i oněch výše jmenovaných kvantových (či spíše již subkvantových) fluktuací.

Předpokládejme, že osa rotační symetrie orbitálního chronoru je třetí souřadnou osou, tj.  $J_3 \neq J_1 = J_2$  .

Jeho pohyb je pak určen rovnicemi

$$\begin{aligned}
 J_1 \frac{d\Omega_1}{dt} + \Omega_2 \Omega_3 (J_3 - J_1) &= 0, \\
 J_1 \frac{d\Omega_2}{dt} + \Omega_3 \Omega_1 (J_1 - J_3) &= 0, \\
 J_3 \frac{d\Omega_3}{dt} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{11.281}$$

Z poslední rovnice systému plyne

$$\Omega_3 = \textit{konst.} \tag{11.282}$$

Časovou závislost zbývajících dvou složek vektoru  $\Omega_i$  získáme řešením soustavy prvních dvou diferenciálních rovnic systému (11.281), které nyní vyjádříme ve tvaru

$$\begin{aligned}
 \frac{d\Omega_1}{dt} + \Omega_2 \Omega_3 \frac{J_3 - J_1}{J_1} &= 0, \\
 \frac{d\Omega_2}{dt} - \Omega_1 \Omega_3 \frac{J_3 - J_1}{J_1} &= 0.
 \end{aligned}
 \tag{11.283}$$

Výraz

$$\Omega_3 \frac{J_3 - J_1}{J_1} \equiv \Omega \tag{11.284}$$

je vzhledem k (11.282) konstantní a má rozměr úhlové rychlosti.

Z první rovnice systému (11.283) vypočteme

$$\Omega_2 = -\frac{1}{\Omega} \cdot \frac{d\Omega_1}{dt} \tag{11.285}$$

a po zderivování podle času máme

$$\frac{d\Omega_2}{dt} = -\frac{1}{\Omega} \cdot \frac{d^2\Omega_1}{dt^2}. \tag{11.286}$$

Srovnáním této rovnice s druhou rovnicí systému ( 11.283 ) obdržíme diferenciální rovnici pro hledanou funkci  $\Omega_1 = \Omega_1 ( t )$ :

$$\frac{d^2\Omega_1}{dt^2} + \Omega^2\Omega_1 = 0 . \quad ( 11.287 )$$

Protože zřejmě platí

$$\Omega_1 \cdot \frac{d\Omega_1}{dt} = \frac{d}{dt} \left( \frac{1}{2} \Omega_1^2 \right) \cdot 1 \quad ( 11.288 )$$

a odtud rovněž

$$\frac{d\Omega_1}{dt} \cdot \frac{d^2\Omega_1}{dt^2} = \frac{d}{dt} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{d\Omega_1}{dt} \right)^2 \right] \cdot 1 , \quad ( 11.289 )$$

můžeme rovnici ( 11.287 ) rozšířit funkcí  $\frac{d\Omega_1}{dt}$ :

$$\frac{d\Omega_1}{dt} \cdot \frac{d^2\Omega_1}{dt^2} + \Omega^2 \cdot \frac{d\Omega_1}{dt} \cdot \Omega_1 = \frac{d\Omega_1}{dt} \left( \frac{d^2\Omega_1}{dt^2} + \Omega^2 \cdot \Omega_1 \right) = 0 \quad ( 11.290 )$$

a poté vyjádřit ve tvaru

$$\frac{d}{dt} \left[ \frac{1}{2} \left( \frac{d\Omega_1}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} \Omega^2 \cdot \Omega_1^2 \right] = 0 . \quad ( 11.291 )$$

To však znamená, že

$$\left( \frac{d\Omega_1}{dt} \right)^2 + \Omega^2 \cdot \Omega_1^2 = konst. \quad ( 11.292 )$$

Označíme-li



$$\text{konst.} = (k \cdot \Omega)^2, \quad (11.293)$$

získáme rovnici

$$\left( \frac{d\Omega_1}{dt} \right)^2 = \Omega^2 (k^2 - \Omega_1^2), \quad (11.294)$$

z níž již separací proměnných plyne výraz

$$\frac{d\Omega_1}{\sqrt{k^2 - \Omega_1^2}} = \Omega dt \quad (11.295)$$

Připravený k integrování.

Máme tedy integrální rovnici

$$\int \frac{d\Omega_1}{\sqrt{k^2 - \Omega_1^2}} = \int \Omega dt. \quad (11.296)$$

Zavedeme substituci

$$\Omega_1 = k \cdot \sin x \quad (11.297)$$

a odtud

$$\frac{d\Omega_1}{dt} = k \cdot \cos x \Rightarrow d\Omega_1 = k \cdot \cos x \cdot dx. \quad (11.298)$$

Vyintegrujeme nejprve levou stranu rovnice ( 11.295 ):

$$\begin{aligned} \int \frac{d\Omega_1}{\sqrt{k^2 - \Omega_1^2}} &= \int \frac{k \cdot \cos x}{\sqrt{k^2 - k^2 \cdot \sin^2 x}} dx = \int \frac{k \cdot \cos x}{k \cdot \sqrt{1 - \sin^2 x}} dx = \\ &= \int \frac{\cos x}{|\cos x|} dx = \int dx \end{aligned} \quad (11.299)$$

Porovnáním tohoto výsledku s pravou stranou rovnice ( 11.296 ) dostaneme

$$dx = \Omega dt , \quad ( 11.300 )$$

což po integraci dá konečný výsledek

$$x = \Omega t + \alpha . \quad ( 11.301 )$$

Dosazením do substituční rovnice ( 11.297 ) nyní nalézáme obecné řešení rovnice ( 11.287 ) ve tvaru

$$\Omega_1 = k \cdot \sin(\Omega t + \alpha) . \quad ( 11.302 )$$

Dosadíme-li toto řešení do první rovnice soustavy ( 11.283 ) dostáváme

$$\frac{d}{dt} [k \cdot \sin(\Omega t + \alpha)] = -\Omega \cdot \Omega_2 , \quad ( 11.303 )$$

což po provedení derivace dá

$$\Omega \cdot k \cdot \cos(\Omega t + \alpha) = -\Omega \cdot \Omega_2 , \quad ( 11.304 )$$

neboli

$$\Omega_2 = -k \cdot \cos(\Omega t + \alpha) . \quad ( 11.305 )$$

Konstanty  $k$  a  $\alpha$  lze určit z počátečních podmínek pohybu, tj. obvykle udáním vektoru  $\omega_0 = (\Omega_1^0, \Omega_2^0, \Omega_3^0)$  v čase  $t = 0$ .

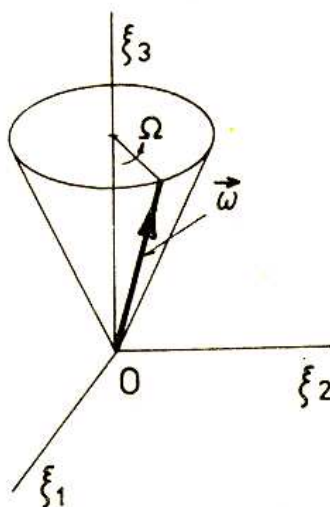
Předpokládejme, že všechny tři složky vektoru  $\omega_0$  jsou nenulové.

Potom ani jedna ze složek vektoru  $\omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$  nemůže být po celou dobu pohybu nulová.

Položíme-li počátek vektoru  $\omega$  do počátku souřadného systému, tj. do hmotného středu chronoru, lze rovnice ( 11.302 ), ( 11.305 ),

( 11.282 ) pokládat za parametrické rovnice trajektorie koncového bodu vektoru  $\omega$  v soustavě souřadnic spjaté s chronorem. Tyto rovnice však popisují kružnici o poloměru  $k$ , jež má střed na třetí souřadné ose  $\xi_3$  vzdálené  $\Omega_3$  od počátku soustavy souřadnic. Vektor úhlové rychlosti  $\omega$  tedy opisuje v tělese plášť (tzv. **polhodiového**) kužele a to **precesní rychlostí**  $\Omega$ .

Obr. 11.21



Z provedeného rozboru pohybu vektoru  $\omega$  v chronoru rovněž plyne, že jeho velikost  $\omega$  je s časem konstantní.

Vzhledem k volbě soustavy souřadnic ve směru hlavních os inerciálního tenzoru orbitálního chronoru mají rovnice ( 11.230 ) jednoduchý tvar

$$\begin{aligned} \beta_1 &= J_1 \Omega_1 , \\ \beta_2 &= J_2 \Omega_2 , \\ \beta_3 &= J_3 \Omega_3 . \end{aligned} \quad ( 11.306 )$$

V důsledku symetrie orbitálního chronoru (  $J_1 = J_2$  ) odtud plyne rovnost

$$\frac{\beta_1}{\Omega_1} = \frac{\beta_2}{\Omega_2} . \quad ( 11.307 )$$

Geometricky to znamená, že vektory  $\mathbf{B}$  a  $\boldsymbol{\omega}$  leží ve společné rovině s osou  $\xi_3$ .

Na obrázku 11.22 jsou naznačeny polohy zmíněných vektorů a výraz

$$\sqrt{\Omega_1^2 + \Omega_2^2} = \textit{konst.} \quad (11.308)$$

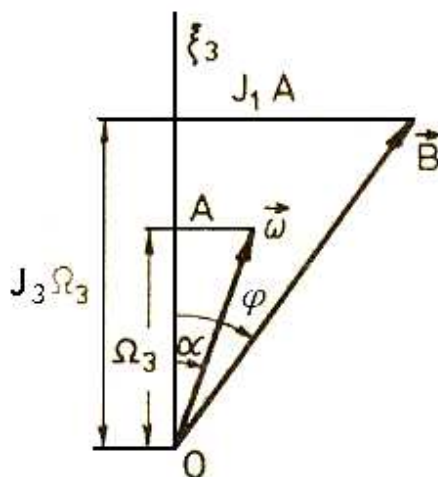
je ve shodě s ( 11.302 ) a ( 11.305 ) roven

$$\textit{konst.} \equiv A = k \cdot \sqrt{\sin^2(\Omega t + \alpha) + \cos^2(\Omega t + \alpha)} \quad (11.309)$$

a navíc, jak vyplývá z obr. 11.22,

$$\frac{\tan \varphi}{\tan \alpha} = \frac{J_1}{J_3}. \quad (11.310)$$

Obr. 11.22



Tento obrázek odpovídá případu  $J_1 > J_3$ .

Pro  $J_3 > J_1$  leží vektor  $\mathbf{B}$  blíže k ose  $\xi_3$  než vektor  $\boldsymbol{\omega}$ .

Konečně, pro sférický případ  $J_1 = J_3$  zřejmě platí  $\mathbf{B} \cdot \boldsymbol{\omega} = 1$ .

Vektor  $\boldsymbol{\omega}$  se otáčí kolem osy  $\xi_3$  úhlovou rychlostí  $\Omega$ .

Protože však vektory  $\boldsymbol{\omega}$  a  $\mathbf{B}$  leží ve společné rovině s osou  $\xi_3$ , musí rovněž vektor  $\mathbf{B}$  rotovat vůči soustavě pevné v chronoru úhlovou rychlostí  $\Omega$ , a to po plášti virtuálního kužele, který má však obecně jiný vrcholový úhel nežli kužel polhodiový.

Podle rovnice ( 11.256 ) je vektor  $\mathbf{B}$  pevný v cytoprostoru, neboť platí

$$\frac{d\mathbf{B}}{dt} = \mathbf{0} \quad ( 11.311 )$$

(výsledný moment vnějších sil působících na orbitální chronor je nulový).

Na obr. 11.23 je impulsmoment  $\mathbf{B}$  naznačen jako vektor ve směru třetí osy  $x_3$  soustavy souřadnic pevné v cytoprostoru.

Vektor  $\mathbf{B}$  leží dle výše provedených úvah v plášti kužele pevného vůči orbitálnímu chronoru, s vrcholovým úhlem  $2\varphi$ , jehož osou je osa  $\xi_3$  soustavy souřadnic pevné v orbitálním chronoru.

Na obrázku jsou znázorněny další dva kužele.

Kužel polhodiový a tzv. kužel **herpolhodiový** s vrcholovým úhlem  $\gamma = \varphi - \alpha$  a s osou procházející vektorem  $\mathbf{B}$ .

Protože, jak víme, osa  $\xi_3$  a vektory  $\boldsymbol{\omega}$  a  $\mathbf{B}$  leží v jedné rovině, dotýkají se polhodiový a herpolhodiový kužel podél přímky v níž leží vektor  $\boldsymbol{\omega}$ , tj. podél okamžité osy rotace orbitálního chronoru, která je v chronoru i cytoprostoru pevná.

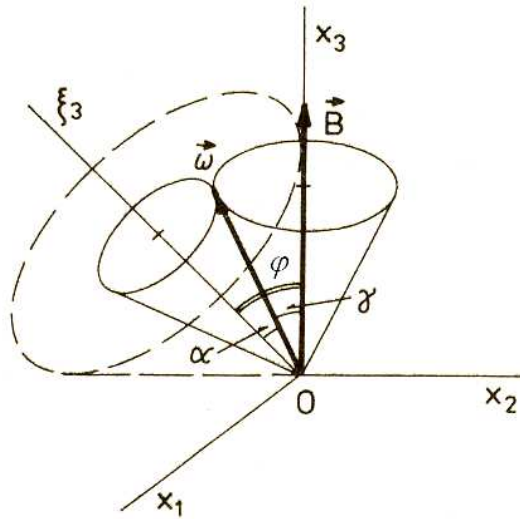
Podél dotykové přímky obou kuželů tedy nemůže docházet k „prokluzu“.

Pohyb volného orbitálního chronoru tak lze názorně popsat odvalováním polhodiového kužele po herpolhodiovém, bez vzájemného prokluzování.

Rychlost  $n$ -tého bodu orbitálního chronoru vůči jeho hmotnému středu udává vztah (viz obr. 11.23)

$$v_{S,n} = \left\| \boldsymbol{\omega} \times \mathbf{r}_{S,n} \right\| = r_{S,n} \cdot \omega \cdot \sin \alpha \quad ( 11.312 )$$

Obr. 11.23



Skutečnost, že námi zvolený bod  $n$  neleží na orbitálním chronoru nýbrž pouze na jeho rotační ose je samozřejmě irelevantní. Vyjádříme-li rychlost bodu  $n$  jako rychlost rotace kolem osy  $x_3$  pevné v cytoprostoru, můžeme pro její velikost psát vyjádření

$$v = r_{S,n} \cdot \Omega_p \cdot \sin \varphi . \quad ( 11.313 )$$

Porovnáním rovnice ( 11.312 ) a ( 11.313 ) dostáváme poměr velikosti precesní rychlosti  $\Omega_p$  a úhlové rychlosti otáčení chronoru  $\omega$  :

$$\frac{\Omega_p}{\omega} = \frac{\sin \alpha}{\sin \varphi} . \quad ( 11.314 )$$

Zadáním počáteční hodnoty  $\omega_0$  vektoru  $\omega$  v soustavě souřadnic spjaté s tělesem je dán úhel  $\alpha$ , neboť

$$\tan \alpha = \frac{A}{\Omega_3} = \frac{(\Omega_1^2 + \Omega_2^2)^{1/2}}{\Omega_3} \quad ( 11.315 )$$

a tím je podle ( 11.310 ) dán i úhel  $\varphi$ .

Rovnicí ( 11.314 ) je potom určena velikost precesní rychlosti  $\Omega_p$  .

Jelikož  $\Omega_3$  je třetí složka vektoru  $\omega$  v soustavě souřadnic spjaté s chronorem, zřejmě platí

$$\Omega_3 = \omega \cdot \cos \alpha , \quad ( 11.316 )$$

a tedy

$$\omega = \frac{\Omega_3}{\cos \alpha} . \quad ( 11.317 )$$

Dosazením ( 11.317 ) do ( 11.314 ) máme postupně

$$\frac{\Omega_p \cdot \cos \alpha}{\Omega_3} = \frac{\sin \alpha}{\sin \varphi} , \quad ( 11.318 )$$

$$\frac{\Omega_p}{\Omega_3} = \frac{\tan \alpha}{\sin \varphi} , \quad ( 11.319 )$$

$$\Omega_3 = \frac{J_1 \cdot \Omega}{J_3 - J_1} = \frac{\Omega_p \cdot \sin \varphi}{\tan \alpha} . \quad ( 11.320 )$$

Protože, jak již víme (viz ( 11.310 )), je

$$\tan \alpha = \frac{J_3 \cdot \tan \varphi}{J_1} , \quad ( 11.321 )$$

platí rovnost

$$\frac{\Omega_p (J_3 - J_1)}{J_1 \cdot \Omega} = \frac{\tan \alpha}{\sin \varphi} = \frac{J_3 \cdot \tan \varphi}{J_1 \cdot \sin \varphi} = \frac{J_3}{J_1 \cdot \cos \varphi} , \quad ( 11.322 )$$

odkud

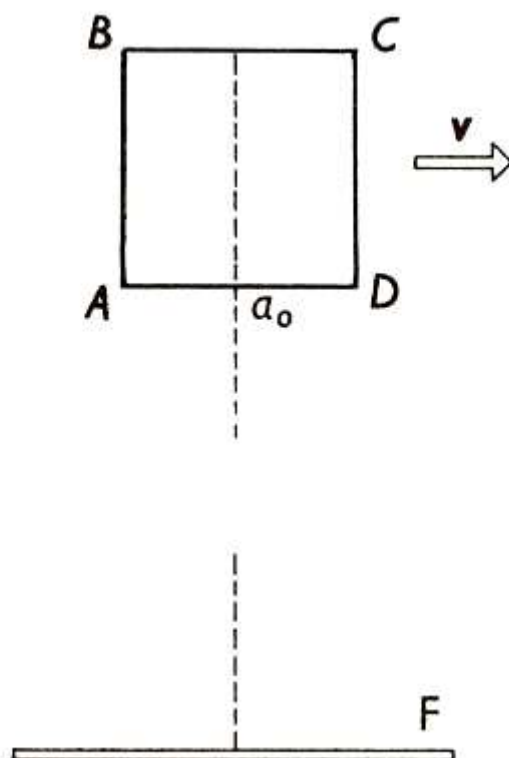
$$\Omega_p = \frac{\Omega \cdot J_3}{(J_3 - J_1) \cdot \cos \varphi} = \frac{\Omega_3 \cdot J_3}{J_1 \cdot \cos \varphi} . \quad (11.323)$$

Otázkou zůstává, jaká je mezní velikost úhlu  $\varphi$ , která je ještě v souladu s kvantovou povahou prostoročasu generovaného cytoprostorem.

Abychom si odpověděli na tuto otázku, provedeme nyní relativistický kvantový rozbor následujícího myšlenkového experimentu:

Těleso, jež má ve své soustavě tvar krychle a pohybuje se rychlostí  $v$  v naznačeném směru, fotografujeme z větší vzdálenosti v okamžiku, kdy optická osa fotografického přístroje prochází středem krychle a je kolmá k vektoru  $\mathbf{v}$  její rychlosti (viz obr. 11.24).

Obr. 11.24



Naším úkolem bude určit, jak by vypadal obraz krychle na fotografickém snímku, jestliže expozice trvala zanedbatelně krátký okamžik.



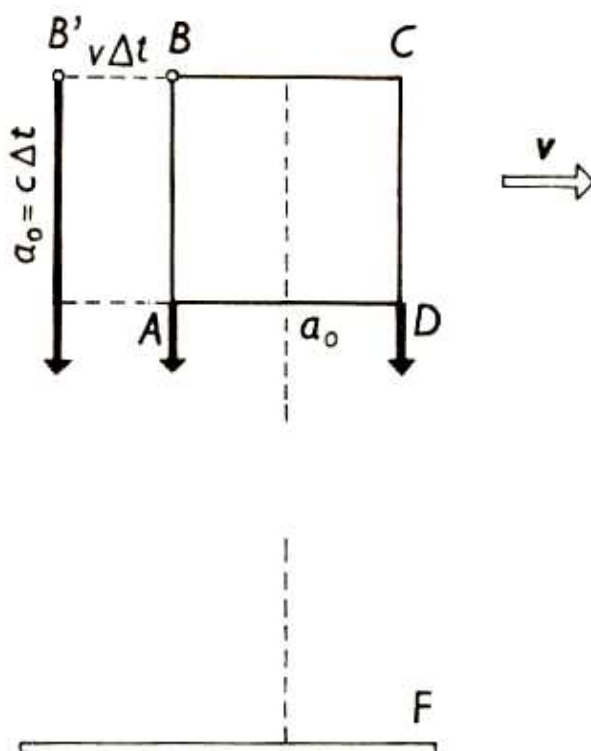
Světlo, které dopadne v daném okamžiku na fotografickou desku, bylo emitováno z povrchu krychle v různých časech, neboť jednotlivé body krychle jsou od fotografické desky vzdáleny různě.

V okamžiku, kdy na fotografickou desku F dopadne světlo z hrany AD, dopadne na ni též světlo z bodu B' ve kterém se nalézal bod B o dobu

$$\Delta t = \frac{a_0}{c} \quad (11.324)$$

dříve (viz obr. 11.25).

Obr. 11.25



Pro vzdálenost B' a B zřejmě platí

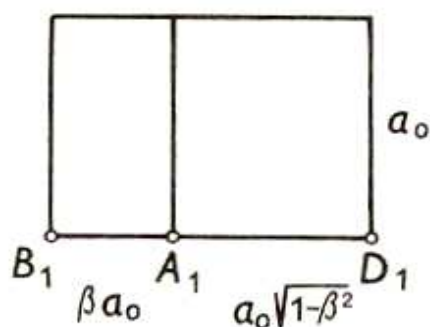
$$|B'B| = v \cdot \Delta t = a_0 \cdot \frac{v}{c} . \quad (11.325)$$

Hrana AD o vlastní délce  $a_0$  se v důsledku Lorentzovy transformace délky bude jevit jako úsečka délky

$$a'_0 = a_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} . \quad ( 11.326 )$$

Celkový vzhled krychle při jejím fotografování za daných podmínek tedy bude

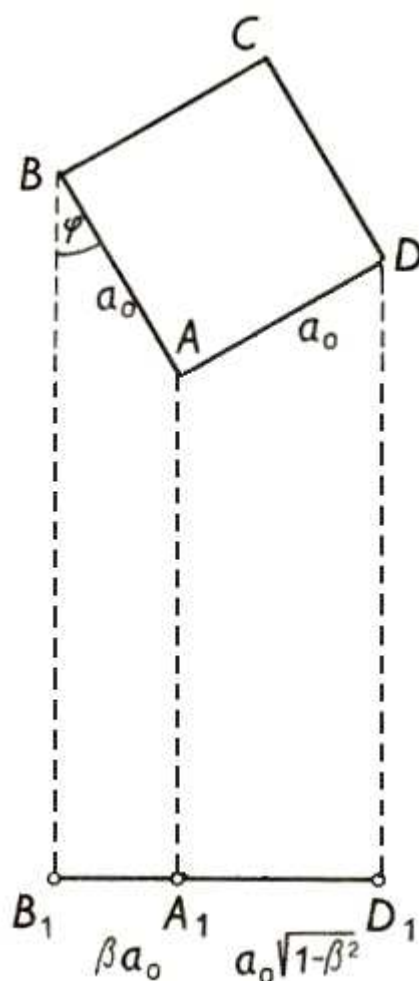
Obr. 11.26



což lze interpretovat jako průmět původní nehybné krychle pootočené o úhel  $\varphi$ , pro který platí

$$\sin \varphi = \frac{v}{c} . \quad ( 11.327 )$$

Obr. 11.27



Průmět hrany AB potočené krychle je totiž

$$|A_1B_1| = a_0 \cdot \sin \varphi = a_0 \cdot \frac{v}{c}, \quad (11.328)$$

a průmět hrany AD je

$$|A_1D_1| = a_0 \cdot \cos \varphi = a_0 \cdot \sqrt{1 - \sin^2 \varphi} = a_0 \cdot \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}. \quad (11.329)$$

Protože, jak již víme (viz vztah ( 11.166 )), platí pro mezní hodnotu Lorentzova faktoru  $\gamma$  vztah

$$\gamma_m^{-1} = \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = z^{-5}, \quad (11.330)$$

musí, srovnáním s ( 11.329 ) platit rovněž

$$\cos \varphi_m = z^{-5}, \quad (11.331)$$

čímž je vyjádřen hledaný mezní úhel  $\varphi_m$ .

Dosadíme-li tento úhel do vztahu pro velikost precesní rychlosti orbitálního chronoru ( 11.323 ), získáme hodnotu

$$\Omega_p = \frac{2cz^5}{\frac{l_h}{2}}, \quad (11.332)$$

což pro velikost obvodové rychlosti precesního pohybu dává

$$v_p = 2cz^5. \quad (11.333)$$

Tím je hotova konstrukce nového typu chronoru, tzv. **sférického chronoru** s dimenzí  $D = 3$ .

Hmotná povaha sférického chronoru se dokáže analogicky jako tomu bylo v případě chronoru orbitálního.

Sférický chronor je zřejmě elementární částicí totožnou s kvantionem, jehož existenci jsme předpokládali na základě prostších úvah již dříve. Bude jistě zajímavé, prozkoumat tento objekt poněkud podrobněji, coby entitu obývající svět, kde subkvantové perturbace na úrovni interhypergrupárních bariér cytoprostoru dosahují významných úrovní, takže náš předpoklad o nulovém momentu vnějších sil působících na chronor, který samozřejmě po vhodném časoprostorovém zprůměrování stále platí, nemusí již platit v každém prostoročasovém světobodě sférického chronoru.

Lze tedy očekávat jisté vnitřní deformace, projevivší se na subkvantové úrovni orbitálního chronoru, na jejichž rozbor se zaměříme v následujícím odstavci.

### 9) kvantování pohybu sférického chronoru

Nechť samosdružené operátory  $\hat{\mathbf{L}}_k$  ( $k = 1, 2, 3$ ) splňují komutační relace

$$[\hat{\mathbf{L}}_j, \hat{\mathbf{L}}_k] = i\varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{L}}_l, \quad (11.334)$$

potom pro pozitivně definitní operátor

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \equiv \hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2 + \hat{\mathbf{L}}_3^2 \quad (11.335)$$

platí

$$[\hat{\mathbf{L}}^2, \hat{\mathbf{L}}_k] = 0. \quad (11.336)$$

V příslušném Hilbertově prostoru tedy existuje báze tvořená společnými vlastními vektory operátorů  $\hat{\mathbf{L}}^2$  a  $\hat{\mathbf{L}}_3$ .

Definujme **posunovací operátory**

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \equiv \hat{\mathbf{L}}_1 \pm i \cdot \hat{\mathbf{L}}_2. \quad (11.337)$$

Ze samosdruženosti operátorů  $\hat{\mathbf{L}}_k$  plyne

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} = \hat{\mathbf{L}}_{\mp}^{\dagger}. \quad (11.338)$$

Komutační relace

$$[\hat{\mathbf{L}}_+, \hat{\mathbf{L}}_-] = 2\hat{\mathbf{L}}_3, \quad (11.339)$$

$$[\hat{\mathbf{L}}_3, \hat{\mathbf{L}}_{\pm}] = \pm \hat{\mathbf{L}}_{\pm}, \quad (11.340)$$

$$[\hat{\mathbf{L}}_{\pm}, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0, \quad (11.341)$$

jsou ekvivalentní relacím ( 11.334 ), ( 11.336 ).  
Operátor ( 11.335 ) lze vyjádřit jako

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- + \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hat{\mathbf{L}}_3 , \quad ( 11.342 )$$

nebo ekvivalentně

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = \hat{\mathbf{L}}_- \hat{\mathbf{L}}_+ + \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hat{\mathbf{L}}_3 . \quad ( 11.343 )$$

Nechť  $|l, m\rangle$  je normalizovaný společný vlastní vektor operátorů  $\hat{\mathbf{L}}^2$  a  $\hat{\mathbf{L}}_3$  pro který platí

$$\hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = l(l+1) |l, m\rangle , \quad ( 11.344 )$$

$$\hat{\mathbf{L}}_3 |l, m\rangle = m |l, m\rangle , \quad ( 11.345 )$$

$$\langle l, m | l', m' \rangle = \delta_{ll'} \delta_{mm'} , \quad ( 11.346 )$$

kde

$$l = l^* \geq 0 . \quad ( 11.347 )$$

Pomocí komutační relace ( 11.340 ) resp. ( 11.341 ) nalezneme

$$\hat{\mathbf{L}}_3 \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |l, m\rangle = (\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \hat{\mathbf{L}}_3 \pm \hat{\mathbf{L}}_{\pm}) |l, m\rangle = (m \pm 1) \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |l, m\rangle , \quad ( 11.348 )$$

resp.

$$\hat{\mathbf{L}}^2 \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |l, m\rangle = \hat{\mathbf{L}}_{\pm} \hat{\mathbf{L}}^2 |l, m\rangle = l(l+1) \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |l, m\rangle . \quad ( 11.349 )$$

Je-li tedy ket  $\hat{\mathbf{L}}_+|l, m\rangle$  resp.  $\hat{\mathbf{L}}_-|l, m\rangle$  nenulovým, potom je společným vlastním vektorem operátorů  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{L}}_3$  příslušejícím k vlastním hodnotám  $l(l+1)$ ,  $m+1$  resp.  $l(l+1)$ ,  $m-1$ .

Z definice ( 11.335 ) je zřejmé, že vektor  $|l, m\rangle$  je rovněž vlastním vektorem pozitivně definitního operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2$ , příslušejícím vlastní hodnotě  $l(l+1) - m^2$ .

V charakteristickém podprostoru operátoru  $\hat{\mathbf{L}}^2$  je tedy velikost vlastních hodnot operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  shora i zdola omezena nerovností

$$m^2 \leq l(l+1) . \quad ( 11.350 )$$

označme  $m_{\max}$  spektrální poloměr operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  v tomto podprostoru. Potom z ( 11.348 ) plyne

$$\hat{\mathbf{L}}_+|l, m_{\max}\rangle = 0 . \quad ( 11.351 )$$

Aplikací operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_-$  na obě strany této rovnosti dostaneme

$$\left( \hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 - \hat{\mathbf{L}}_3 \right) |l, m_{\max}\rangle = 0 . \quad ( 11.352 )$$

Odtud dostáváme pro  $m_{\max}$  rovnici

$$l(l+1) - m_{\max}(m_{\max} + 1) = 0 , \quad ( 11.353 )$$

viz ( 11.344 ), ( 11.345 ), ( 11.346 ).

Podmínce ( 2493 ) přitom vyhovuje pouze řešení

$$m_{\max} = l . \quad ( 11.354 )$$

obdobně nalezneme, že při daném  $l$  je spektrální minimum operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  rovno

$$m_{\min} = -l . \quad ( 11.355 )$$

Spočtěme nyní normu vektoru  $\hat{\mathbf{L}}_- |lm\rangle$ :

$$\begin{aligned} \|\hat{\mathbf{L}}_- |l,m\rangle\|^2 &= \langle l,m | \hat{\mathbf{L}}_+ \hat{\mathbf{L}}_- |l,m\rangle = \langle l,m | (\hat{\mathbf{L}}^2 - \hat{\mathbf{L}}_3^2 + \hat{\mathbf{L}}_3) |l,m\rangle = \\ &= l(l+1) - m(m-1), \end{aligned} \quad (11.356)$$

tj.

$$\|\hat{\mathbf{L}}_- |l,m\rangle\| = [(l+m)(l-m+1)]^{1/2}. \quad (11.357)$$

Pro  $l \neq 0$  je tedy vektor  $\hat{\mathbf{L}}_- |l,m\rangle$  s  $m = l$  nenulovým, a tedy vektor

$$|l,l-1\rangle \equiv \frac{\hat{\mathbf{L}}_- |l,l\rangle}{\|\hat{\mathbf{L}}_- |l,l\rangle\|} \quad (11.358)$$

vyhovuje rovnicím (11.344) a (11.346) s  $m = l - 1$ .

Naznačeným postupem nalezneme pro všechna  $m \geq 1 - l$

$$|l,m-1\rangle \equiv \frac{\hat{\mathbf{L}}_- |l,m\rangle}{\|\hat{\mathbf{L}}_- |l,m\rangle\|}. \quad (11.359)$$

Umíme tedy v každém charakteristickém podprostoru operátoru  $\hat{\mathbf{L}}^2$  zkonstruovat  $(2l+1)$  vlastních vektorů  $|l,m\rangle$  operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$ , příslušejících vlastním hodnotám

$$m = l, l-1, \dots, -l, \quad (11.360)$$

vycházejí z vektoru  $|l,l\rangle$  odpovídajícího maximální vlastní hodnotě operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  v tomto podprostoru.

Odtud je zřejmé, že číslo  $(2l+1)$  musí být celé kladné, a tedy  $l$  může být pouze celým nebo polocelým nezáporným číslem.



Aplikací operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_+$  na obě strany formule ( 11.359 ) dostaneme

$$\hat{\mathbf{L}}_+ |l, m\rangle = \left\| \hat{\mathbf{L}}_+ |l, m\rangle \right\| |l, m+1\rangle, \quad ( 11.361 )$$

kde

$$\left\| \hat{\mathbf{L}}_+ |l, m\rangle \right\| \equiv [(l-m) \cdot (l+m+1)]^{1/2} = \left\| \hat{\mathbf{L}}_- |l, m+1\rangle \right\|. \quad ( 11.362 )$$

Nyní již bez potíží nalezneme všechny maticové elementy

$$\langle l', m' | \hat{\mathbf{L}}_k |l, m\rangle, \quad k = 1, 2, 3. \quad ( 11.363 )$$

Z formulí ( 11.345 ), ( 11.359 ), ( 11.361 ) ihned plyne

$$\langle l', m' | \hat{\mathbf{L}}_1 |l, m\rangle = \frac{1}{2} \delta_{l'l'} \left[ \left\| \hat{\mathbf{L}}_- |l, m\rangle \right\| \delta_{m', m-1} + \left\| \hat{\mathbf{L}}_+ |l, m\rangle \right\| \delta_{m', m+1} \right], \quad ( 11.364 )$$

$$\langle l', m' | \hat{\mathbf{L}}_2 |l, m\rangle = \frac{i}{2} \delta_{l'l'} \left[ \left\| \hat{\mathbf{L}}_- |l, m\rangle \right\| \delta_{m', m-1} - \left\| \hat{\mathbf{L}}_+ |l, m\rangle \right\| \delta_{m', m+1} \right], \quad ( 11.365 )$$

$$\langle l', m' | \hat{\mathbf{L}}_3 |l, m\rangle = m \cdot \delta_{l'l'} \delta_{mm'}. \quad ( 11.366 )$$

Povšimněme si, že

$$\langle l, m | \hat{\mathbf{L}}_{1,2} |l, m\rangle = 0, \quad ( 11.367 )$$

tj. v každém vlastním stavu projekce impulsmomentu do vybraného směru  $\mathbf{n}$  je střední hodnota projekce impulsmomentu do roviny ortogonální na  $\mathbf{n}$  rovna nule.

(  $2l + 1$  ) – rozměrné matice  $\mathbf{L}^{(l)}$  definované elementy

$$\left( \mathbf{L}^{(l)} \right)_{m'm} \equiv \langle l, m' | \hat{\mathbf{L}} |l, m\rangle, \quad ( 11.368 )$$

představují realizace operátorů  $\hat{\mathbf{L}}$  v charakteristickém podprostoru operátoru  $\hat{\mathbf{L}}^2$ .

Tyto matice pochopitelně vyhovují komutačním relacím ( 11.334 ) a platí

$$\hat{\mathbf{L}} |l, m\rangle = \sum_{m'=-l}^l \mathbf{L}_{m'm}^{(l)} |l, m'\rangle . \quad ( 11.369 )$$

Pro nejnižší možné hodnoty  $l$  mají matice  $\mathbf{L}_k^{(l)}$  následující tvar (hodnota indexů  $m'$ ,  $m$  číslicích řádky a sloupce ubývá shora dolů a zleva doprava):

$$\mathbf{L}_k^{(0)} = 0 , \quad ( 11.370 )$$

$$\mathbf{L}_k^{(1/2)} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma}_k , \quad ( 11.371 )$$

kde

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad ( 11.372 )$$

jsou tzv. Pauliho matice a

$$\mathbf{L}_1^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{L}_2^{(1)} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{L}_3^{(1)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad ( 11.373 )$$

Definujme operátory

$$\hat{\mathbf{A}}_k \equiv \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{\mathbf{P}}_k - i \cdot \hat{\mathbf{X}}_k), \quad k = 1, 2 . \quad ( 11.374 )$$

$$\hat{\mathbf{B}} \equiv \hat{\mathbf{A}}_2 + i \cdot \hat{\mathbf{A}}_1 . \quad ( 11.375 )$$

Z komutačních relací mezi operátory impulsu a souřadnice nalezneme, že platí:

$$\left[ \hat{\mathbf{A}}_k, \hat{\mathbf{A}}_k^+ \right] = \frac{1}{2} \left[ \hat{\mathbf{B}}, \hat{\mathbf{B}}^+ \right] = 1, \quad (11.376)$$

$$\left[ \hat{\mathbf{A}}_1^+ \hat{\mathbf{A}}_1, \hat{\mathbf{A}}_2^+ \hat{\mathbf{A}}_2 \right] = \left[ \hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{B}}, \sum_{k=1}^2 \hat{\mathbf{A}}_k^+ \hat{\mathbf{A}}_k \right] = 0. \quad (11.377)$$

Z formule ( 11.376 ) plyne, že spektrum operátoru  $\hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{B}}$  resp.  $\hat{\mathbf{A}}_k^+ \hat{\mathbf{A}}_k$  probíhá hodnoty 0, 2, 4, ... , resp. 0, 1, 2, ... .  
Snadno se přesvědčíme, že

$$\hat{\mathbf{L}}_3 = \hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{B}} - \sum_{k=1}^2 \hat{\mathbf{A}}_k^+ \hat{\mathbf{A}}_k. \quad (11.378)$$

Komutativita ( 11.377 ) pak zaručuje, že spektrum operátoru ( 11.378 ) se získá kompozicí spekter operátorů  $\hat{\mathbf{B}}^+ \hat{\mathbf{B}}$  a  $\sum_k \hat{\mathbf{A}}_k^+ \hat{\mathbf{A}}_k$ .

Vlastní hodnoty operátoru ( 11.378 ) tedy mohou být pouze celočíselné:

$$m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots. \quad (11.379)$$

Z obecně platné formule ( 11.360 ) pak ihned vidíme, že v uvažovaném případě může  $l$  nabývat pouze celých nezáporných hodnot.

Funkce

$$P_l^m(x) \equiv \frac{(1-x^2)^{\frac{m}{2}}}{2^l \cdot l!} \frac{d^{l+m}}{dx^{l+m}} (x^2 - 1)^l, \quad l \in \mathbf{N}_0; \quad m \in \mathbf{N}; \quad |m| \leq l \quad (11.380)$$

je tzv. **přidružená Legendreova funkce**  $m$ -tého řádu a  $l$ -tého stupně.

Pro  $m = 0$  je

$$P_l^0(x) = P_l(x) \equiv \frac{1}{2^l \cdot l!} \frac{d^l}{dx^l} (x^2 - 1)^l . \quad (11.381)$$

Je zřejmé, že pro  $m > 0$  můžeme psát

$$P_l^m(x) = (1 - x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) . \quad (11.382)$$

platí

$$P_l^{-m}(x) = (-1)^m \frac{(l - m)!}{(l + m)!} P_l^m(x) , \quad (11.383)$$

$$P_l^m(-x) = (-1)^{l+m} P_l^m(x) , \quad (11.384)$$

$$P_l^m(1) = \delta_{m0} . \quad (11.385)$$

Lze dokázat, že  $P_l^m(x)$  má v intervalu  $x \in (-1; 1)$   $l - |m|$  nul.

Přidružené Legendreovy funkce tří sousedních stupňů jsou spolu vázány vztahem

$$x \cdot P_l^m(x) = \frac{1}{2l+1} \left[ (l+1-m) P_{l+1}^m(x) + (l+m) P_{l-1}^m(x) \right] . \quad (11.386)$$

Relace ortogonality

$$\int_{-1}^1 P_k^m(x) P_l^m(x) dx = 2 \frac{(l+m)!}{(2l+1)(l-m)!} \delta_{kl} , \quad (11.387)$$

je pro  $m = 0$  speciálním případem obecnějšího vzorce

$$\int P_l(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_1) P_k(\mathbf{n} \cdot \mathbf{n}_2) d\Omega = \frac{4\pi}{2l+1} P_l(\mathbf{n}_1 \cdot \mathbf{n}_2) \delta_{lk}, \quad (11.388)$$

kde  $\mathbf{n}$ ,  $\mathbf{n}_1$ ,  $\mathbf{n}_2$  jsou jednotkové vektory a  $d\Omega$  je element prostorového úhlu ve směru  $\mathbf{n}$ .

Pro  $m > 0$ ,  $n \geq 0$  platí rovněž relace ortogonality

$$\int_{-1}^1 P_l^m(x) P_l^n(x) \frac{1}{1-x^2} dx = \frac{(l+m)!}{m(l-m)!} \delta_{mn}. \quad (11.389)$$

Často se s výhodou využívá toho, že

$$\frac{1}{2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(x) = \delta(x-1). \quad (11.390)$$

Lze dokázat, že pro libovolná komplexní čísla  $x$ ,  $z$  vyhovující podmínce

$$|x| < \min \left| z \pm (z^2 - 1)^{1/2} \right| \quad (11.391)$$

platí

$$(1 - 2xz + x^2)^{-1/2} = \sum_{l=0}^{\infty} x^l P_l(z). \quad (11.392)$$

Výraz na levé straně se nazývá **generátorem Legendreových polynomů**.

Speciálním případem je rozvoj

$$\frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{X}|} = \frac{1}{R} \sum_{l=0}^{\infty} \left(\frac{r}{R}\right)^l P_l(\cos \Theta), \quad (11.393)$$

platný  $\forall \frac{r}{R} < 1$ , kde

$$r \equiv |\mathbf{x}|, \quad R \equiv |\mathbf{X}|, \quad \mathbf{x} \cdot \mathbf{X} = r \cdot R \cdot \cos \Theta. \quad (11.394)$$

Pro nekladná  $m$  můžeme přidružené Legendreovy funkce vyjádřit pomocí hyperbolometrických funkcí jako

$$P_l^m(x) = (-1)^m \frac{2^m}{|m|!} (1-x^2)^{\frac{|m|}{2}} F\left(l+1-m, -l-m, 1-m; \frac{1-x}{2}\right). \quad (11.395)$$

Speciálně pro Legendreovy polynomy odtud dostaneme

$$P_l(x) = F\left(l+1, -l, 1; \frac{1-x}{2}\right). \quad (11.396)$$

Pravá strana má smysl i pro komplexní  $l$  a  $x$ .

V tomto obecném případě je formule ( 11.396 ) definicí

### **Legendreových funkcí prvního druhu.**

Jako funkce komplexní proměnné  $z$  je  $P_\lambda(z)$  analytickou funkcí v komplexní polorovině s vyjmutou reálnou poloosou  $(-\infty; -1)$ .

Pomocí Legendreových funkcí definujeme **kulové funkce**

$$Y_{lm}(\vartheta, \varphi) \equiv (-1)^m \left[ \frac{(2l+1)(l-m)!}{4\pi(l+m)!} \right]^{\frac{1}{2}} P_l^m(\cos \vartheta) \exp(im\varphi). \quad (11.397)$$

Ty tvoří ortonormální bázi na jednotkové kouli, tj.

$$\int Y_{lm}^*(\mathbf{n}) \cdot Y_{l'm'}(\mathbf{n}) d\Omega = \delta_{ll'} \delta_{mm'}, \quad (11.398)$$

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}(\mathbf{n}) \cdot Y_{lm}^*(\mathbf{n}') = \delta^{(2)}(\mathbf{n} - \mathbf{n}'). \quad (11.399)$$

Impulsmoment klasické částice s polohovým vektorem  $\mathbf{X}$  a impulsem  $\mathbf{P}$  je, jak víme

$$\mathbf{B} = \mathbf{X} \times \mathbf{P} \quad (11.400)$$

což zapsáno ve složkách znamená

$$B_j = \varepsilon_{jkl} X_k P_l ; \quad j = 1, 2, 3 . \quad (11.401)$$

Podle principu korespondence jsou komponentám impulsmomentu přiřazeny operátory

$$\hat{\mathbf{B}}_j \equiv \varepsilon_{jkl} \hat{\mathbf{X}}_k \hat{\mathbf{P}}_l ; \quad j = 1, 2, 3 . \quad (11.402)$$

Vzhledem ke komutativitě samosdružených operátorů  $\hat{\mathbf{X}}_k, \hat{\mathbf{P}}_l$  (pro  $k \neq l$ ) jsou také operátory  $\hat{\mathbf{B}}_j$  samosdružené.

Pro zjednodušení zápisu nyní zavedeme operátory

$$\hat{\mathbf{L}}_j \equiv \frac{\hat{\mathbf{B}}_j}{\hbar} . \quad (11.403)$$

Experimentální data ukazují, že všechny tři komponenty  $x_1, x_2, x_3$  průvodiče  $\mathbf{x}$  jsou současně měřitelné a že jejich hodnota může ležet kdekoli v intervalu  $(-\infty, \infty)$ .

Odpovídající operátory musí proto komutovat a mít spojité spektrum probíhající tentýž interval.

To znamená, že

$$[\hat{\mathbf{X}}_j, \hat{\mathbf{X}}_k] = 0, \quad j, k = 1, 2, 3 \quad (11.404)$$

a pro každé  $x_j \in (-\infty, \infty)$  existují řešení rovnic

$$\hat{\mathbf{X}}_j |x_1, x_2, x_3\rangle = x_j |x_1, x_2, x_3\rangle, \quad j = 1, 2, 3, \quad (11.405)$$

neboli krátce

$$\hat{\mathbf{X}}|\mathbf{x}\rangle = \mathbf{x}|\mathbf{x}\rangle, \quad (11.406)$$

vyhovující normalizační podmínce

$$\langle x_1, x_2, x_3 | x'_1, x'_2, x'_3 \rangle = \delta(x_1 - x'_1) \delta(x_2 - x'_2) \delta(x_3 - x'_3), \quad (11.407)$$

tj.

$$\langle \mathbf{x} | \mathbf{x}' \rangle = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (11.408)$$

kde  $\delta$  je Diracova funkce.

Z kvantovací podmínky ( 11.404 ) plyne, že operátory jednotlivých komponent impulsu  $\hat{\mathbf{P}}_j$  ( $j = 1, 2, 3$ ) musí splňovat komutační relace

$$[\hat{\mathbf{P}}_j, \hat{\mathbf{P}}_k] = 0 \quad (11.409)$$

$$[\hat{\mathbf{P}}_j, \hat{\mathbf{X}}_k] = -i\hbar\delta_{jk}. \quad (11.410)$$

Pod  $\mathbf{P}$  je přitom nutno rozumět impuls kanonicky sdružený k  $\mathbf{X}$ .

Z komutačních relací ( 11.404 ), ( 11.409 ), ( 11.410 ) snadno nalezneme, že platí

$$[\hat{\mathbf{X}}_j, \hat{\mathbf{L}}_k] = [\hat{\mathbf{L}}_j, \hat{\mathbf{X}}_k] = i\epsilon_{jkl}\hat{\mathbf{X}}_l, \quad (11.411)$$

$$[\hat{\mathbf{P}}_j, \hat{\mathbf{L}}_k] = [\hat{\mathbf{L}}_j, \hat{\mathbf{P}}_k] = i\epsilon_{jkl}\hat{\mathbf{P}}_l, \quad (11.412)$$

tj.

$$[\hat{\mathbf{L}}_j, \hat{\mathbf{L}}_k] = i\epsilon_{jkl}\hat{\mathbf{L}}_l. \quad (11.413)$$

Pod pojmem operátor impulsmomentu (měřeného v jednotkách  $\hbar$ ) rozumíme



$$\hat{\mathbf{L}}^2 \equiv \hat{\mathbf{L}}_1^2 + \hat{\mathbf{L}}_2^2 + \hat{\mathbf{L}}_3^2 . \quad (11.414)$$

Díky komutačním relacím ( 11.413 ) platí

$$[\hat{\mathbf{L}}_j, \hat{\mathbf{L}}^2] = 0 . \quad (11.415)$$

Z formule ( 11.413 ) je zřejmé, že komponenty impulsmomentu nejsou navzájem kompatibilní.

Na druhé straně, vzorec ( 11.415 ) zaručuje současnou měřitelnost kterékoli komponenty impulsmomentu s jeho kvadrátem.

V Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$  tedy existuje báze tvořená společnými vlastními vektory operátorů  $\hat{\mathbf{L}}^2$  a  $\hat{\mathbf{L}}_j$ , kde  $j$  je jedno z čísel 1, 2, 3.

Určení jejich spektra provedeme v X-reprezentaci, kde

$$\hat{\mathbf{L}}_j = -i\varepsilon_{jkl}x_k \frac{\partial}{\partial x_l} . \quad (11.416)$$

Později uvidíme, že existuje úzká souvislost mezi operátory impulsmomentu a generátory rotací.

Nepřekvapuje tedy, že řešení problému vlastních hodnot se značně zjednoduší, přejdeme-li ke sférickým souřadnicím:

$$\begin{aligned} x_1 &= r \cdot \cos \varphi \cdot \sin \vartheta , \\ x_2 &= r \cdot \sin \varphi \cdot \sin \vartheta , \\ x_3 &= r \cdot \cos \vartheta . \end{aligned} \quad (11.417)$$

Standardním postupem nalezneme

$$\begin{aligned}\hat{\mathbf{L}}_1 &= i \cdot \left( \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cdot \cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{\mathbf{L}}_2 &= i \cdot \left( -\cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} + \cot \vartheta \cdot \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right), \\ \hat{\mathbf{L}}_3 &= -i \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi}\end{aligned}\quad (11.418)$$

a odtud

$$\hat{\mathbf{L}}^2 = - \left[ \frac{1}{\sin \vartheta} \frac{\partial}{\partial \vartheta} \left( \sin \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \vartheta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \vartheta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right]. \quad (11.419)$$

Fáze kulových funkcí ( 11.397 ) jsou nyní zvoleny tak, že je respektována **Condonova – Shortleyova konvence**

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \cdot Y_{lm}(\mathbf{n}) = \left\| \hat{\mathbf{L}}_{\pm} |l, m\rangle \right\| Y_{l, (m \pm 1)}(\mathbf{n}), \quad (11.420)$$

kde

$$\hat{\mathbf{L}}_{\pm} \equiv \hat{\mathbf{L}}_1 \pm i \cdot \hat{\mathbf{L}}_2 = \exp(\pm i \cdot \varphi) \left[ \pm \frac{\partial}{\partial \vartheta} + i \cdot \cot \vartheta \cdot \frac{\partial}{\partial \varphi} \right]. \quad (11.421)$$

Při této volbě fází také platí

$$Y_{lm}^*(\vartheta, \varphi) = (-1)^m Y_{l, -m}(\vartheta, \varphi). \quad (11.422)$$

Kulové funkce mají jednoduché transformační vlastnosti vzhledem k inverzi souřadných os.

Definujeme operátor  $\hat{\mathbf{P}}_x$  tak, že pro libovolnou funkci  $f(x, y, z)$  platí

$$\hat{\mathbf{P}}_x f(x, y, z) = f(-x, y, z). \quad (11.423)$$

Operátory  $\hat{\mathbf{P}}_y, \hat{\mathbf{P}}_z$  mají analogický význam.  
Speciálně pro sférické úhly platí:

$$\hat{\mathbf{P}}_x \varphi = \pi - \varphi \pmod{2\pi} , \quad (11.424)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_y \varphi = 2\pi - \varphi \pmod{2\pi} , \quad (11.425)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_z \varphi = \varphi , \quad (11.426)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_x \vartheta = \vartheta , \quad (11.427)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_y \vartheta = \vartheta , \quad (11.428)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_z \vartheta = \pi - \vartheta . \quad (11.429)$$

Pomocí formulí ( 11.383 ), ( 11.384 ) snadno nalezneme

$$\hat{\mathbf{P}}_x \cdot Y_{lm}(\mathbf{n}) = Y_{l,-m}(\mathbf{n}) , \quad (11.430)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_y \cdot Y_{lm}(\mathbf{n}) = (-1)^m \cdot Y_{l,-m}(\mathbf{n}) , \quad (11.431)$$

$$\hat{\mathbf{P}}_z \cdot Y_{lm}(\mathbf{n}) = (-1)^{l+m} \cdot Y_{lm}(\mathbf{n}) , \quad (11.432)$$

Prostorové inverzi všech tří souřadných os odpovídá operátor

$$\hat{\mathbf{P}} \equiv \hat{\mathbf{P}}_x \hat{\mathbf{P}}_y \hat{\mathbf{P}}_z . \quad (11.433)$$

Z formulí ( 11.430 ), ( 11.431 ), ( 11.432 ) vidíme, že

$$\hat{\mathbf{P}} \cdot Y_{lm}(\mathbf{n}) = (-1)^l \cdot Y_{lm}(\mathbf{n}) . \quad (11.434)$$

Shrňme nyní nejdůležitější z výše nalezených výsledků:

Dvojice operátorů  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{L}}_3$  tvoří úplnou soustavu komutujících operátorů v prostoru  $\mathcal{H}_\Omega$  funkcí bodů na jednotkové kouli.

Spektrum operátoru  $\hat{\mathbf{L}}^2$  je dáno jeho vlastními hodnotami  $l(l+1)$ , kde  $l$  probíhá všechna přirozená čísla včetně nuly.

Spektrum operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  je dáno množinou všech celých čísel.

V prostoru  $\mathcal{H}_\Omega$  existuje  $(2l+1)$  nezávislých vlastních vektorů operátoru  $\hat{\mathbf{L}}^2$  příslušejících vlastní hodnotě  $l(l+1)$ .

Tyto nezávislé vektory je vždy možno zvolit tak, že jsou současně vlastními vektory operátoru  $\hat{\mathbf{L}}_3$  příslušejícími vlastním hodnotám

$$m = -l, -l+1, \dots, l. \quad (11.435)$$

## 10) Konstrukce kubického subchronoru

### a) Grupa rotací

Uvažujme dvě navzájem splývající ortogonální soustavy souřadné, a natočme druhou z nich vůči první o  $R$  kolem počátku.

Označme  $(x_1, x_2, x_3)$  souřadnice bodu pevně spojeného s druhou soustavou.

Jeho souřadnicemi vůči první soustavě budou

$$x_j(R) = \sum_{k=1}^3 R_{jk} x_k \quad ; j = 1, 2, 3, \quad (11.436)$$

kde koeficienty  $R_{jk}$  závisejí na  $R$ .

Vektor

$$\mathbf{X}(R) = \sum_{j=1}^3 x_j(R) \mathbf{e}_j \quad (11.437)$$

tedy vznikne z vektoru

$$\mathbf{X} = \sum_{j=1}^3 x_j \mathbf{e}_j \quad (11.438)$$

rotací  $R$ .

Transformaci ( 11.436 ) lze snadno vyjádřit v maticovém tvaru:

$$\hat{\mathbf{X}}(R) = \hat{\mathbf{R}}\mathbf{X} . \quad (11.439)$$

Snadno se přesvědčíme, že operátor  $\hat{\mathbf{R}}$  je ortogonální a unimodulární. Libovolná rotace kolem počátku je ekvivalentní rotaci kolem nějaké osy procházející počátkem.

Otočení o úhel  $\varphi$  kolem osy určené jednotkovým vektorem  $\mathbf{n}$  označíme  $R(\mathbf{n}, \varphi)$ .

Pootočením kolem jednotlivých souřadných os odpovídají transformační matice

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}}(\mathbf{e}_1, \varphi) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \varphi & -\sin \varphi \\ 0 & \sin \varphi & \cos \varphi \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathbf{R}}(\mathbf{e}_2, \varphi) &= \begin{pmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix}, \\ \hat{\mathbf{R}}(\mathbf{e}_3, \varphi) &= \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (11.440)$$

Snadno se přesvědčíme, že platí

$$\hat{\mathbf{R}}(\mathbf{e}_j, \varphi) = \exp(-i \cdot \varphi \cdot \mathbf{M}_j) , \quad (11.441)$$

kde

$$\mathbf{M}_j \equiv i \frac{d}{d\varphi} \hat{\mathbf{R}}(\mathbf{e}_j, 0), \quad (11.442)$$

tj.

$$\mathbf{M}_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{M}_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{M}_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (11.443)$$

což můžeme stručně zapsat jako

$$(M_j)_{kl} = -i\epsilon_{jkl}. \quad (11.444)$$

Pootočení o úhel  $\varphi$  kolem libovolné osy  $\mathbf{n}$  odpovídá operátor

$$\hat{\mathbf{R}}(\mathbf{n}, \varphi) \equiv \exp(-i \cdot \varphi \cdot \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{M}}) \equiv \exp\left(-i \cdot \varphi \cdot \sum_{j=1}^3 n_j \mathbf{M}_j\right), \quad (11.445)$$

kde  $n_j$  jsou komponenty jednotkového vektoru  $\mathbf{n}$  ve výchozí soustavě souřadné.

Všechny možné rotace tvoří grupu zvanou **grupa rotací** třírozměrného prostoru.

Protože libovolnou třírozměrnou ortogonální unimodulární matici lze zapsat ve tvaru ( 11.445 ), jedná se o tříparametrickou kompaktní Lieovu grupu **Special ortogonal (SO(3))**.

Matice

$$-i \cdot \mathbf{M}_k, \quad k = 1, 2, 3 \quad (11.446)$$

jsou jejími generátory.

Z formule ( 11.444 ) zjistíme, že matice ( 11.443 ) vyhovují komutačním relacím pro impulsmoment

$$[\mathbf{M}_j, \mathbf{M}_k] = i\epsilon_{jkl} \mathbf{M}_l. \quad (11.447)$$

S Lieovou algebrou  $SO(3)$  jsme se tedy již v dostatečné míře seznámili v předchozí kapitole.

Povšimněme si, že strukturními konstantami  $SO(3)$  jsou

$$C_{jk}^l = \varepsilon_{jkl} \quad (11.448)$$

a

$$\eta_{jk} = -2\delta_{jk}, \quad (11.449)$$

tj. Levi-Civitův a Metrický tenzor. **Casimirův operátor**

$$\hat{C} \equiv \sum_{kl} \eta^{kl} \mathbf{M}_k \mathbf{M}_l, \quad (11.450)$$

kde  $\eta^{kl}$  jsou elementy matice  $\boldsymbol{\eta}^{-1}$ , pak není ničím jiným, než dvojnásobkem kvadrátu impulsmomentu.

Z uvedeného je zřejmé, že když  $\hat{\mathbf{L}}_k$  jsou operátory impulsmomentu v Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$ , potom operátory

$$\hat{\mathbf{D}}(\mathbf{n}, \boldsymbol{\varphi}) = \exp(-i \cdot \boldsymbol{\varphi} \cdot \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{L}}), \quad (11.451)$$

realizují v  $\mathcal{H}$  unitární reprezentaci grupy  $SO(3)$ .

Doplňme  $\hat{\mathbf{L}}^2$ ,  $\hat{\mathbf{L}}_3$  operátory komutujícími s  $\hat{\mathbf{L}}$  na úplnou soustavu komutujících operátorů.

Ortonormální bázi utvoříme z odpovídajících vlastních vektorů

$$|l, m, a\rangle. \quad (11.452)$$

Všechny níže uváděné maticové elementy jsou diagonální v  $a$  a na hodnotě tohoto parametru nezávislé.

Od explicitního uvádění parametru  $a$  proto v dalším upustíme.

Z formule (11.451) vidíme, že

$$\langle l, m | \hat{\mathbf{D}}(\mathbf{n}, \varphi) | l', m' \rangle = \delta_{ll'} D_{mm'}^{(l)}(\mathbf{n}, \varphi), \quad (11.453)$$

kde  $(2l + 1)$ -rozměrná matice

$$\mathbf{D}^{(l)}(\mathbf{n}, \varphi) \equiv \exp(-i \cdot \varphi \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}^{(l)}) \quad (11.454)$$

tvoří unitární ireducibilní reprezentaci grupy  $\mathbf{SO}(3)$ .

Necháme-li  $l$  probíhat všechna celá a polocelá nezáporná čísla, obdržíme všechny unitární reprezentace grupy rotací.

Pro libovolné pootočení kolem třetí souřadné osy z formule (11.454) dostáváme

$$D_{mm'}^{(l)}(\mathbf{e}_3, \varphi) = \delta_{mm'} \exp(-i \cdot m \cdot \varphi), \quad (11.455)$$

a tedy

$$D_{mm'}^{(l)}(\mathbf{e}_3, \varphi + 2\pi) = \exp(-2\pi \cdot i \cdot m) \cdot D_{mm'}^{(l)}(\mathbf{e}_3, \varphi). \quad (11.456)$$

Uvědomíme-li si, že při polocelém resp. celém  $l$  je také  $m$  polocelé resp. celé, vidíme, že platí

$$\mathbf{D}^{(l)}(\mathbf{e}_3, \varphi + 2\pi) = (-1)^{2l} \cdot \mathbf{D}^{(l)}(\mathbf{e}_3, \varphi). \quad (11.457)$$

Transformace  $R(\mathbf{e}_3, \varphi + 2\pi)$  je však identická s transformací  $R(\mathbf{e}_3, \varphi)$  takže matice (11.454) představují pro polocelá  $l$  dvojnásobně reprezentace grupy  $\mathbf{SO}(3)$ .

Jejich existence je odrazem dvojnásobné souvislosti grupy  $\mathbf{SO}(3)$ .

Úlohu univerzální pokrývací grupy v tomto případě hraje grupa  $\mathbf{SU}(2)$ .

Nyní ukážeme jakým způsobem je realizován homomorfismus

$$\mathbf{SU}(2) \rightarrow \mathbf{SO}(3). \quad (11.458)$$

Libovolnou matici  $\mathbf{U} \in \mathbf{SU}(2)$  lze zapsat ve tvaru



$$\hat{U}(\mathbf{n}, \varphi) = \exp\left(-i \cdot \mathbf{n} \cdot \mathbf{k} \cdot \frac{\varphi}{2}\right), \quad \varphi \in \langle 0; 4\pi \rangle. \quad (11.459)$$

Jestliže elementu  $\mathbf{U} \in SU(2)$  odpovídá transformace

$$\left(\xi^j\right)' = \sum_{k=1}^2 U_k^j \xi^k, \quad j = 1, 2, \quad (11.460)$$

kde  $U_k^j$  je  $(j, k)$ -tý element matice ( 11.459 ), pak veličiny  $\xi^1, \xi^2$  jsou **kontravariantními komponentami spinoru**.

Definujme

$$x_1 \equiv \frac{1}{2} \left[ (\xi^2)^2 - (\xi^1)^2 \right], \quad x_2 \equiv \frac{1}{2i} \left[ (\xi^1)^2 + (\xi^2)^2 \right], \quad x_3 \equiv \xi^1 \xi^2. \quad (11.461)$$

Snadno se přesvědčíme, že transformaci ( 11.460 ) spinoru odpovídá

$$x_j \rightarrow x'_j = \sum_{k=1}^3 R_{jk}(\mathbf{n}, \varphi) x_k. \quad (11.462)$$

Veličiny ( 11.461 ) se tedy transformují při pootočení o úhel  $\varphi$  kolem osy  $\mathbf{n}$  jako souřadnice vektoru.

Tím jsme dokázali monomorfismus zobrazení ( 11.458 ).

Vzhledem k tomu, že

$$\hat{\mathbf{R}}(\mathbf{n}, \varphi + 2\pi) = \hat{\mathbf{R}}(\mathbf{n}, \varphi) \quad (11.463)$$

ale

$$\hat{U}(\mathbf{n}, \varphi + 2\pi) = -\hat{U}(\mathbf{n}, \varphi), \quad (11.464)$$

není toto zobrazení izomorfním, ale pouze homomorfním. ☺

Označme  $\hat{\mathbf{R}}(\alpha, \beta, \gamma)$  operátor přechodu k soustavě vzniklé z výchozí následující sekvencí pootočení:

- 1) kolem osy  $\mathbf{e}_3$  o úhel  $\alpha \in \langle 0; 2\pi \rangle$
- 2) kolem osy  $\mathbf{e}'_2$  o úhel  $\beta \in \langle 0; \pi \rangle$
- 3) kolem osy  $\mathbf{e}''_3$  o úhel  $\gamma \in \langle 0; 2\pi \rangle$

tj.

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{R}}(\alpha, \beta, \gamma) &\equiv \exp(-i \cdot \gamma \cdot \mathbf{e}''_3 \cdot \hat{\mathbf{M}}) \cdot \exp(-i \cdot \beta \cdot \mathbf{e}'_2 \cdot \hat{\mathbf{M}}) \cdot \exp(-i \cdot \alpha \cdot \mathbf{e}_3 \cdot \hat{\mathbf{M}}) = \\ &= \exp(-i \cdot \alpha \cdot \mathbf{e}_3 \cdot \hat{\mathbf{M}}) \cdot \exp(-i \cdot \beta \cdot \mathbf{e}_3 \cdot \hat{\mathbf{M}}) \cdot \exp(-i \cdot \gamma \cdot \mathbf{e}_3 \cdot \hat{\mathbf{M}}) = \\ &= \exp(-i \cdot \alpha \cdot \mathbf{M}_3) \cdot \exp(-i \cdot \beta \cdot \mathbf{M}_2) \cdot \exp(-i \cdot \gamma \cdot \mathbf{M}_3). \end{aligned} \quad (11.465)$$

Díky komutační relaci ( 11.447 ) se totiž matice  $\mathbf{M}_k$  transformují jako komponenty vektoru, tj.

$$\hat{\mathbf{R}}\mathbf{M}_k\hat{\mathbf{R}}^{-1} = \sum_l R_{lk}\mathbf{M}_l, \quad (11.466)$$

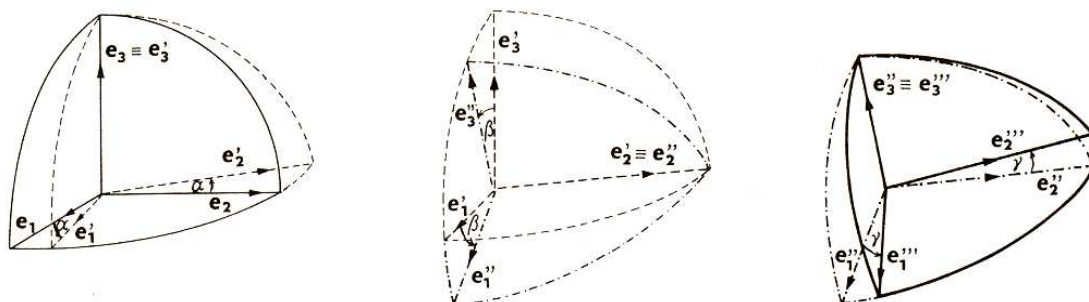
což lze ekvivalentně vyjádřit jako

$$\hat{\mathbf{R}} \cdot \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{M}} \cdot \hat{\mathbf{R}}^{-1} = \mathbf{n}' \cdot \hat{\mathbf{M}}, \quad (11.467)$$

kde  $\mathbf{n}'$  je vektor vzniklý natočením  $R$  vektoru  $\mathbf{n}$ , tj.

$$n'_j = \sum_k R_{jk}n_k. \quad (11.468)$$

Obr. 11.28



Z formule ( 11.467 ) ihned plyne, že také

$$\hat{\mathbf{R}} \cdot \exp(-i \cdot \varphi \cdot \mathbf{n} \cdot \hat{\mathbf{M}}) \hat{\mathbf{R}}^{-1} = \exp(-i \cdot \varphi \cdot \mathbf{n}' \cdot \hat{\mathbf{M}}), \quad (11.469)$$

a tedy speciálně pro Eulerovy rotace

$$\exp(-i \cdot \beta \cdot \mathbf{e}'_2 \cdot \hat{\mathbf{M}}) = \exp(-i \cdot \alpha \cdot \mathbf{M}_3) \exp(-i \cdot \beta \cdot \mathbf{M}_2) \exp(i \cdot \alpha \cdot \mathbf{M}_3) \quad (11.470)$$

a

$$\begin{aligned} \exp(-i \cdot \gamma \cdot \mathbf{e}''_3 \cdot \hat{\mathbf{M}}) &= \exp(-i \cdot \alpha \cdot \mathbf{M}_3) \cdot \exp(-i \cdot \beta \cdot \mathbf{M}_2) \cdot \exp(-i \cdot \gamma \cdot \mathbf{M}_3) \cdot \\ &\cdot \exp(i \cdot \beta \cdot \mathbf{M}_2) \cdot \exp(i \cdot \alpha \cdot \mathbf{M}_3). \end{aligned} \quad (11.471)$$

Po dosazení z posledních dvou formulí do prvního řádku výrazu ( 11.465 ) obdržíme vskutku výraz na pravé straně ( 11.465 ), čímž je rovnost ( 11.465 ) dokázána. ☺

Rotace ( 11.465 ) je v Hilbertově prostoru  $\mathcal{H}$  reprezentována unitárním operátorem

$$\hat{\mathbf{D}}(\alpha, \beta, \gamma) \equiv \exp(-i \cdot \alpha \cdot \hat{\mathbf{L}}_3) \cdot \exp(-i \cdot \beta \cdot \hat{\mathbf{L}}_2) \cdot \exp(-i \cdot \gamma \cdot \hat{\mathbf{L}}_3) \quad (11.472)$$

(srov. ( 11.451 )).

Přitom (srov. ( 11.453 ))

$$\langle l, m | \hat{\mathbf{D}}(\alpha, \beta, \gamma) | l', m' \rangle = \delta_{ll'} D_{mm'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) \quad (11.473)$$

a  $(2l + 1)$ -rozměrná matice

$$\mathbf{D}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) = \mathbf{D}^{(l)}(\mathbf{e}_3, \alpha) \cdot \mathbf{D}^{(l)}(\mathbf{e}_2, \beta) \cdot \mathbf{D}^{(l)}(\mathbf{e}_3, \gamma) . \quad (11.474)$$

Rovnost ( 11.474 ) můžeme zapsat ve složkách jako

$$D_{mm'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) = \exp(-i \cdot \alpha \cdot m) \cdot d_{mm'}^{(l)}(\beta) \cdot \exp(-i \cdot \gamma \cdot m') , \quad (11.475)$$

kde

$$d_{mm'}^{(l)} \equiv \langle l, m | \exp(-i \cdot \beta \cdot \hat{\mathbf{L}}_2) | l, m' \rangle . \quad (11.476)$$

Díky realitě maticových elementů operátoru  $i \cdot \hat{\mathbf{L}}_2$  je také unitární matice  $\mathbf{d}^{(l)}(\beta)$  reálnou a tedy ortogonální.

Platí tedy

$$\left[ \mathbf{d}^{(l)}(\beta) \right]^T = \left[ \mathbf{d}^{(l)}(\beta) \right]^{-1} . \quad (11.477)$$

Na druhé straně víme, že

$$\left[ \exp(-i \cdot \beta \cdot \hat{\mathbf{L}}_2) \right]^{-1} = \exp(i \cdot \beta \cdot \hat{\mathbf{L}}_2) , \quad (11.478)$$

tedy

$$\left[ \mathbf{d}^{(l)}(\beta) \right]^{-1} = \mathbf{d}^{(l)}(-\beta) . \quad (11.479)$$

Pro funkce  $d_{mm'}^{(l)}(\beta)$  tak dostáváme vztah

$$d_{mm'}^{(l)}(-\beta) = d_{m'm}^{(l)}(\beta) . \quad (11.480)$$

Rotace  $R(\mathbf{e}_2, \pi/2) \cdot R(\mathbf{e}_3, \pi/2)$  přenesou vektor ležící ve směru osy  $\mathbf{e}_2$  do směru osy  $\mathbf{e}_3$ .

Z formule ( 11.469 ) pak plyne, že

$$\hat{\mathbf{R}}(\mathbf{e}_2, \beta) = \hat{\mathbf{R}}\left(\mathbf{e}_3, -\frac{\pi}{2}\right) \cdot \hat{\mathbf{R}}\left(\mathbf{e}_2, -\frac{\pi}{2}\right) \cdot \hat{\mathbf{R}}(\mathbf{e}_3, \beta) \cdot \hat{\mathbf{R}}\left(\mathbf{e}_2, \frac{\pi}{2}\right) \cdot \hat{\mathbf{R}}\left(\mathbf{e}_3, \frac{\pi}{2}\right) , \quad (11.481)$$

a tedy

$$\mathbf{d}^{(l)}(\beta) = \mathbf{D}^{(l)}\left(-\frac{\pi}{2}, 0, 0\right) \cdot \mathbf{d}^{(l)}\left(-\frac{\pi}{2}\right) \cdot \mathbf{D}^{(l)}(\beta, 0, 0) \cdot \mathbf{d}^{(l)}\left(\frac{\pi}{2}\right) \cdot \mathbf{D}^{(l)}\left(\frac{\pi}{2}, 0, 0\right) \quad (11.482)$$

Ze složkového zápisu této maticové rovnosti dostáváme pro funkce  $d_{mm'}^{(l)}(\beta)$  vyjádření

$$d_{mm'}^{(l)}(\beta) = i^{m-m'} \cdot \sum_{m''=-l}^l \exp(-i \cdot \beta \cdot m'') \cdot d_{m''m}^{(l)}\left(\frac{\pi}{2}\right) \cdot d_{m''m'}^{(l)}\left(\frac{\pi}{2}\right) . \quad (11.483)$$

Formule ( 11.483 ) umožňuje výpočet matice  $\mathbf{d}^{(l)}(\beta)$  pro libovolné  $\beta$ , známe-li konstantní matici  $\mathbf{d}^{(l)}(\pi/2)$ .

Navíc z ní ihned vidíme, že platí

$$d_{m'm}^{(l)}(\beta) = (-1)^{m-m'} \cdot d_{mm'}^{(l)}(\beta) . \quad (11.484)$$

Ze vztahu ke grupě  $SU(2)$  je možno odvodit vzorec

$$d_{mm'}^{(l)}(\beta) = (-1)^{m-m'} \cdot \left[ \frac{(l+m)! \cdot (l-m)!}{(l+m')! \cdot (l-m')!} \right]^{\frac{1}{2}} \cdot \left( \cos \frac{\beta}{2} \right)^{2l} \cdot \sum_n \left[ (-1)^n \cdot \binom{l+m'}{n} \cdot \binom{l-m'}{l-m-n} \cdot \left( \tan \frac{\beta}{2} \right)^{m-m'+2n} \right] ,$$

( 11.485 )

kde suma probíhá přes všechna  $n$ , pro něž mají kombinační symboly smysl.

Speciálně odtud dostáváme

$$d_{mm'}^{(l)}(\pi) = (-1)^{l+m} \cdot d_{m,-m'} . \quad ( 11.486 )$$

Pomocí poslední formule se snadno dokáže relace

$$d_{mm'}^{(l)}(\beta) = d_{-m',-m}^{(l)}(\beta) . \quad ( 11.487 )$$

Z formulí ( 11.475 ), ( 11.484 ), ( 11.487 ) vidíme, že platí

$$D_{-m,-m'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) = (-1)^{m-m'} \cdot \left[ D_{mm'}^{(l)}(\alpha, \beta, \gamma) \right]^* . \quad ( 11.488 )$$

Nyní je na čase, abychom výsledky získané v posledních dvou kapitolách přeložili do fyzikálního jazyka:

Výsledkem měření kvadrátu impulsmomentu může být pouze některá z hodnot  $\hbar^2 l(l+1)$ , kde  $l \in \mathbb{N}_0$ .

Výsledkem měření libovolné komponenty impulsmomentu může být pouze celočíselný násobek  $\hbar$ .

Jestliže při měření kvadrátu impulsmomentu byla nalezena hodnota  $\hbar^2 l(l+1)$ , potom výsledkem simultánního měření jeho jedné komponenty může být pouze některá z  $(2l+1)$  hodnot  $\hbar \cdot m$ , kde  $m = l, l-1, \dots, -l$ .

Tento fakt souvisí s tzv. **prostorovým kvantováním**.

Impulsmoment  $\mathbf{B}$  pro nějž platí

$$\|\mathbf{B}\| = \hbar \cdot [l(l+1)]^{1/2} \quad ( 11.489 )$$

může s daným směrem  $\mathbf{n}$  svírat pouze úhly  $\Theta_m$ , pro něž platí

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{B} = \hbar \cdot m ; \quad m = -l, \dots, l , \quad ( 11.490 )$$

tj.

$$\cos \Theta_m = \frac{m}{\sqrt{l(l+1)}}. \quad (11.491)$$

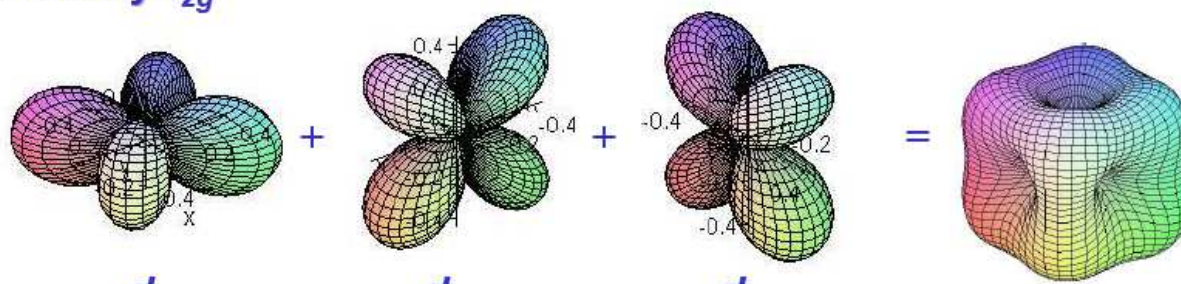
Vektor  $\mathbf{B}$  rotuje kolem vektoru  $\mathbf{n}$  opisujíc kuželovou plochu s vrcholovým úhlem  $2\Theta$ .

Z tohoto důvodu je střední hodnota projekce impulsmomentu do libovolného směru kolmého k  $\mathbf{n}$  nulová.

Pro kvantion ( $l = 1, m = 1$ ) má vrcholový úhel velikost  $\pi/2$ .

Obr. 11.29

orbitaly  $t_{2g}$

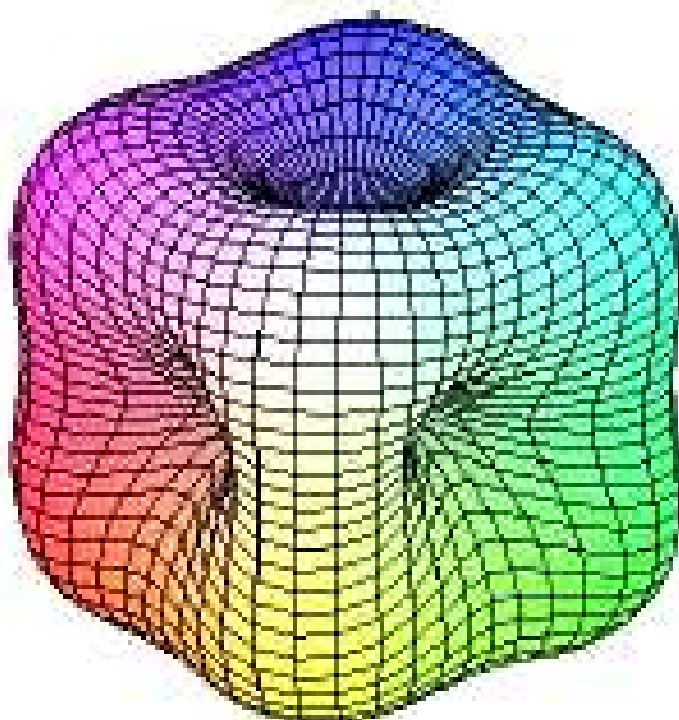


To ukazuje na možnou existenci nějakého druhu subchronoru, nacházejícího se kdesi uvnitř sférického chronoru, vykazujícího zjevnou hexaedrickou symetrii.

Proto si jej zatím pracovníčně nazveme **kubickým subchronorem**.

V následující sekci podrobněji prozkoumáme možnost existence tohoto útvaru.

Obr. 11.30



*b) Spinorová grupa*

Algebra  $SO(n)$  je lineárním obalem antisymetrických matic  $\mathbf{e}_{ij} = -\mathbf{e}_{ji}$ , které mají jednotku na místě  $(i, j)$  a minus jednotku na  $(j, i)$ , a tak splňují komutační relace

$$[\mathbf{e}_{ij}, \mathbf{e}_{kl}] = \delta_{jk} \mathbf{e}_{il} - \delta_{jl} \mathbf{e}_{ik} + \delta_{il} \mathbf{e}_{jk} - \delta_{ik} \mathbf{e}_{jl} . \quad (11.492)$$

Není těžké nahlédnout, že tytéž komutační relace budou splňovat matice  $\Gamma_{ij}$ , které získáme jako

$$\Gamma_{ij} = \frac{1}{4} (\Gamma_i \Gamma_j - \Gamma_j \Gamma_i) , \quad (11.493)$$

pokud matice  $\Gamma_i$  navzájem antikomutují a čtvercem každé z nich je jednotková matice  $\mathbf{E}$ , tj. platí

$$\Gamma_i \Gamma_j + \Gamma_j \Gamma_i = 2\delta_{ij} \mathbf{E} . \quad (11.494)$$



Jsou tedy **Diracovými  $\gamma$ -maticemi pro eukleidovský prostor.**

Takovéto matice lze získat např. tenzorovými součiny ( $n \bmod 2$ )

Pauliho matic rozměru  $2 \times 2$ , tedy maticemi rozměru

$$2^{(n \bmod 2)} \times 2^{(n \bmod 2)}.$$

Společně s Pauliho maticemi budou i tyto jejich tenzorové součiny hermitovské ve všech ortonormálních bázích, z čehož je zřejmá antihermitovost  $\Gamma_{ij}$ .

Explicitně lze psát

$$\Gamma_{2i-1} = (\boldsymbol{\sigma}_3)^{\otimes(i-1)} \otimes \boldsymbol{\sigma}_1 \otimes (\mathbf{E}_2)^{\otimes[(n \bmod 2)-i]}, \quad (11.495)$$

$$\Gamma_{2i} = (\boldsymbol{\sigma}_3)^{\otimes(i-1)} \otimes \boldsymbol{\sigma}_2 \otimes (\mathbf{E}_2)^{\otimes[(n \bmod 2)-i]}, \quad (11.496)$$

$$\Gamma_{2m+1} = (\boldsymbol{\sigma}_3)^{\otimes m} \quad \text{pro } n = 2m + 1, \quad (11.497)$$

kde  $\mathbf{E}_2$  zde značí jednotkovou matici rozměru  $2 \times 2$ .

Zároveň vidíme, že jsme získali co jsme chtěli, neboť zatímco pro generátory  $\mathbf{e}_{ij}$  grupy  $SO(n)$  bylo nejmenší kladné číslo  $\varphi$ , pro které

$$\exp(\varphi \cdot \mathbf{e}_{ij}) = \mathbf{E} \quad (11.498)$$

rovno  $2\pi$ , u matic  $\Gamma_{ij}$  je to  $4\pi$  (tedy až rotací o  $4\pi$  dostaneme jednotkový prvek grupy).

Pro lepší názornost si lze operátory  $\Gamma_k$  představit jako kombinace kreačních  $b_k^*$  a anihilačních  $b_k$  operátorů pro  $k = 1, \dots, l$  a  $Spin(2l - 1)$ , operátory  $\Gamma_{2k}$  pak jako kombinace kreačních a anihilačních operátorů pro  $k = l$  a  $Spin(2l)$ .

$$\Gamma_{2k-1} = (b_k + b_k^*), \quad (11.499)$$

$$\Gamma_{2k} = i(b_k - b_k^*).$$

Tyto operátory splňují relace

$$\begin{aligned} \{b_j, b_k^*\} &= \delta_{jk} , \\ \{b_j, b_k\} &= \{b_j^*, b_k^*\} = 0 , \\ b_k |0\rangle &= 0 , \end{aligned} \quad ( 11.500 )$$

kde  $\{a, b\} = ab + ba$  je antikomutátor a  $|0\rangle$  je vakuum – základní prvek báze, pomocí něhož vytváříme ostatní, působením kreačních operátorů  $b_1^* b_2^* |0\rangle \dots$ .

Snadno zkonstruujeme rovnost

$$\{\Gamma_j, \Gamma_k\} = 2\delta_{jk} . \quad ( 11.501 )$$

Operátory  $\Gamma_{ij}$  pak převádějí bosonové stavy na bosonové a fermionové stavy na fermionové (bosonové stavy vznikají působením sudého počtu operátorů na vakuum).

U  $Spin(2l - 1)$  jsou pak bosonové a fermionové prostory ekvivalentní, protože je lze na sebe vzájemně převádět operátorem  $\Gamma_{2k}$ , který komutuje se všemi  $\Gamma_{ij}$  pro  $\{i, j\} \subseteq \{1, 2, \dots, 2l - 1\}$ .

Proto má grupa  $Spin(2l - 1)$  jen jednu fundamentální reprezentaci o dimenzi  $2^{l-1}$ .

(Ponecháme čtenáři jako cvičení dokázat, že bosonový a fermionový prostor tvoří vzájemně komplexně sdružené reprezentace).

Operátor chiralita  $\gamma$  je součinem všech  $\Gamma$  matic

$$\gamma = i^{(n \bmod 2)} \cdot \Gamma_1 \cdot \Gamma_2 \cdot \dots \cdot \Gamma_n . \quad ( 11.502 )$$

U lichého  $n$ , kde nehraje chiralita takovou roli, neboť je jen jedna spinorová reprezentace, je otázkou konvence, zda vše ještě vynásobíme  $\Gamma_{n+1}$ .

Mocninu imaginární jednotky jsme napsali proto, aby byl  $\gamma$  hermitovský a jeho čtvercem byl jednotkový operátor, tj. aby jeho vlastní hodnoty byly  $\pm 1$ .

Nyní je pomalu na čase, abychom vysvětlili kosmetický rozdíl mezi grupou  $SO(n)$  a  $Spin(n)$ .

Ekvivalencí dvou rotování  $\hat{\mathbf{R}}_{(0)}$  a  $\hat{\mathbf{R}}_{(1)}$  mějme na mysli fakt, že existuje spojitě zobrazení

$$\{v \mapsto \hat{\mathbf{R}}_v\} : \langle 0,1 \rangle \rightarrow P, \quad (11.503)$$

kde  $P$  je **prostor rotování**, takové, že

$$\forall v \in \langle 0,1 \rangle : \hat{\mathbf{R}}_v(1) = \hat{\mathbf{R}}_0(1), \hat{\mathbf{R}}_{(0)}(t) = \hat{\mathbf{R}}_0(t), \hat{\mathbf{R}}_{(1)}(t) = \hat{\mathbf{R}}_1(t). \quad (11.504)$$

Jsou ekvivalentní, pokud lze plynule přejít od jednoho rotování ke druhému.

Nutnou podmínkou ekvivalence je rovnost koncových matic

$$\hat{\mathbf{R}}_{(0)}(1) = \hat{\mathbf{R}}_{(1)}(1).$$

Na rotováních zavedeme rozumnou binární operaci.

$$[\hat{\mathbf{R}}_0 \cdot \hat{\mathbf{R}}_1](t) = \begin{cases} \hat{\mathbf{R}}_0(2t) & \text{pro } 0 \leq t \leq 1/2 \\ \hat{\mathbf{R}}_0(1) \cdot \hat{\mathbf{R}}_1(2t-1) & \text{pro } 1/2 \leq t \leq 1 \end{cases} \quad (11.505)$$

(Polovinu času provádíme dvojnásobně zrychlenou rotaci  $\hat{\mathbf{R}}_0$  a druhou polovinu  $\hat{\mathbf{R}}_1$ ).

Jelikož  $[\hat{\mathbf{R}}_0 \cdot \hat{\mathbf{R}}_1](1) = \hat{\mathbf{R}}_0(1) \cdot \hat{\mathbf{R}}_1(1)$ , dostaneme grupu téměř izomorfní s  $SO(n)$ , až na jednu drobnost:

Rotování o  $2\pi$  kolem osy  $z$

$$\hat{\mathbf{R}}(t) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos 2\pi t & -\sin 2\pi t \\ 0 & \sin 2\pi t & \cos 2\pi t \end{pmatrix} \quad (11.506)$$

je ekvivalentní rotaci o  $2\pi$  kolem kterékoli jiné osy  $\xi$  (spojitým přechodem bude rotování o  $2\pi$  kolem osy, která bude plynule přecházet od osy  $z$  k ose  $\xi$  s tím, jak se  $v$  mění od 0 do 1).

Proto je také „nehybné“ rotování ( $\hat{\mathbf{R}}(t) = \mathbf{E}$ ) ekvivalentní rotaci o  $4\pi$  kolem jakékoli osy (z tohoto důvodu nemohou existovat žádné částice se spinem, jehož dvojnásobek není celé číslo), ale plynulý přechod od nehybného rotování k rotování o  $2\pi$  nenajdete.

Matematicky řečeno, grupa  $SU(2)$  je na rozdíl od grupy  $SO(3)$  **jednoduše souvislá**, protože každá uzavřená křivka (rotování) v ní je stažitelná do bodu.

A tak tvoří všechny třídy ekvivalentních rotování grupu  $Spin(n)$  (pro  $n = 3$  izomorfní  $SU(2)$ ) takovou, že existuje monomorfismus na  $SO(n)$ , který přiřadí vždy dvěma prvkům  $Spin(n)$  jeden prvek  $SO(n)$ .

### *c) Geometrické vlastnosti kubického subchronoru*

Z předchozího je zřejmé, že sférický chronor je současně exponován primární cytorezonancí vždy ve směru a proti směru všech tří cytoprostorových souřadných os, tj. v navzájem ortogonálních směrech.

Na prostředí uvnitř sférického chronoru přitom můžeme nahlížet jako na fyzikální kontinuum, neboť na úrovni sférického chronoru zatím nelze předpokládat žádnou strukturovanou vnitřní stavbu.

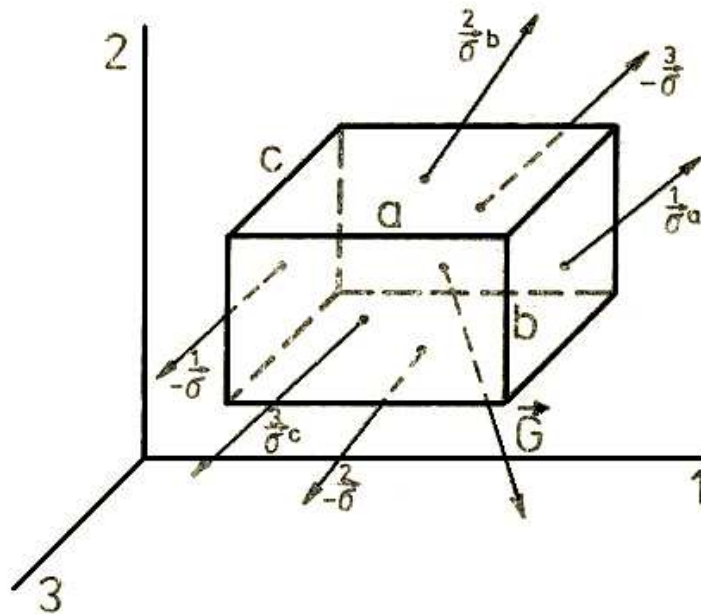
Cílem této kapitoly bude ukázat, že vnitřní struktura kvantionu skutečně existuje ale vzniká teprve coby sekundární produkt opakované expozice již jednou vytvořené primární struktury sférického chronoru.

O kontinuu v rovnováze hovoříme tehdy, je-li v rovnováze každá jeho část.

Při odvozování rovnice rovnováhy kontinua vyjdeme z úvah týkajících se konečného objemu kontinua.

Výhodné je zvolit za zkoumanou soustavu objem kontinua ve tvaru kvádrů s hranami délky  $a$ ,  $b$ ,  $c$ , rovnoběžnými se souřadnými osami.

Obr. 11.31



Podmínka rovnováhy o nulové výslednici vnějších sil pro uvažovaný kvádr zní

$$(\sigma^{1a} - \sigma^1)bc + (\sigma^{2b} - \sigma^2)ac + (\sigma^{3c} - \sigma^3)ab + \mathbf{G} \cdot abc = 0, \quad (11.507)$$

kde  $\sigma^i$  je vektor tenze působící na tu stranu plochy kolmé k  $i$ -té ose souřadného systému, která je obrácena k jejímu kladnému směru. Postupujeme-li ve směru růstu souřadnic  $x_i$ , napětí na první ploše kvádrů kolmé k první ose souřadné značíme  $-\sigma^1$ , napětí na druhé ploše kvádrů kolmé k první ose značíme  $\sigma^{1a}$ .

Obdobný je význam symbolů  $-\sigma^2$ ,  $\sigma^{2b}$ ,  $-\sigma^3$ ,  $\sigma^{3c}$ .

Objemovou sílu  $\mathbf{G}$  zavádíme obdobně jako hustotu limitním vztahem

$$\mathbf{G} = \lim_{v \rightarrow 0} \frac{\mathbf{F}}{V}. \quad (11.508)$$

Plošné síly  $\sigma^{1a}bc$ ,  $-\sigma^1bc$ ,  $\sigma^{2b}ac$ ,  $-\sigma^2ac$ ,  $\sigma^{3c}ab$ ,  $-\sigma^3ab$ , jsou stejně jako objemové síly  $\mathbf{G} \cdot abc$  vnějšími silami působícími na danou soustavu a proto klademe jejich součet v (11.507) roven nule.

Složky vektorů  $\sigma^i$  tvoří **tenzor napětí**  $\sigma_{ij}$ .

Vektorovou rovnici ( 11.507 ) pak můžeme zapsat ve tvaru  
(  $j = 1, 2, 3$  )

$$\left(\sigma_{1j}^a - \sigma_{1j}\right)bc + \left(\sigma_{2j}^b - \sigma_{2j}\right)ac + \left(\sigma_{3j}^c - \sigma_{3j}\right)ab + G_j \cdot abc = 0 . \quad ( 11.509 )$$

Podle diferenciálních vět o střední hodnotě lze rozdíly hodnot složek tenzoru napětí na dvou protilehlých stěnách vyjádřit jako součin vzdálenosti obou ploch a derivace složky podle souřadnice kolmé k uvažovaným plochám, přičemž hodnota derivace přísluší některému vnitřnímu bodu soustavy.

Tedy

$$\begin{aligned} \sigma_{1j}^a - \sigma_{1j} &= \left(\frac{\partial \sigma_{1j}}{\partial x_1}\right) \cdot a , \\ \sigma_{2j}^b - \sigma_{2j} &= \left(\frac{\partial \sigma_{2j}}{\partial x_2}\right) \cdot b , \\ \sigma_{3j}^c - \sigma_{3j} &= \left(\frac{\partial \sigma_{3j}}{\partial x_3}\right) \cdot c . \end{aligned} \quad ( 11.510 )$$

S uvážením rovnic ( 11.510 ) přepíšeme ( 11.509 ) na tvar

$$\left(\frac{\partial \sigma_{1j}}{\partial x_1}\right) \cdot abc + \left(\frac{\partial \sigma_{2j}}{\partial x_2}\right) \cdot abc + \left(\frac{\partial \sigma_{3j}}{\partial x_3}\right) \cdot abc + G_j \cdot abc = 0 . \quad ( 11.511 )$$

Provedeme-li limitní zmenšení objemu soustavy, hodnotu objemu  $abc$  můžeme v rovnici ( 11.511 ) vykrátit, a hodnoty jednotlivých parciálních derivací a složek  $G_j$ , které původně příslušely různým bodům uvnitř soustavy, přejdou v limitě na hodnoty příslušné stejnému bodu, ke kterému limitním postupem soustavu stáhneme. Pro tento bod pak platí rovnice

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + G_j = 0 , \quad ( 11.512 )$$

což je hledaná **rovnice rovnováhy kontinua**.

Síly uvažované v rovnici ( 11.507 ) představují všechny vnější síly působící na soustavu, i když kontinuum není v rovnováze.

Pro uvažovanou soustavu pak můžeme napsat větu o pohybu hmotného středu.

$$\left(\sigma^{1a} - \sigma^1\right) bc + \left(\sigma^{2b} - \sigma^2\right) ac + \left(\sigma^{3c} - \sigma^3\right) ab + \mathbf{G} \cdot abc = m \cdot \mathbf{a}_s , \quad ( 11.513 )$$

kde  $m$  je hmotnost soustavy a  $\mathbf{a}_s$  je zrychlení jejího hmotného středu.

Hmotnost  $m$  vyjádříme jako  $\rho \cdot abc$ , kde  $\rho$  je hustota v kterémkoli vnitřním bodě soustavy.

Translační vektor je

$$\mathbf{u}_j = x_j - y_j , \quad ( 11.514 )$$

kde  $x_j$  je souřadnice vnitřního bodu v čase  $t = 0$  a  $y_j$  je souřadnice tohoto bodu v čase  $\Delta t$ .

Zrychlení bodu kontinua je

$$a_j = \frac{d^2 y_j}{dt^2} = \frac{d^2 u_j}{dt^2} , \quad ( 11.515 )$$

(výchozí poloha  $x_i$  je časově invariantní).

Zrychlení těžiště soustavy bude

$$\mathbf{a}_s = \frac{d^2 \mathbf{u}_s}{dt^2} , \quad ( 11.516 )$$

kde  $\mathbf{u}_s$  je translační vektor končící v hmotném středu soustavy.

Rovnici ( 11.513 ) můžeme pak přepsat na tvar

$$\left(\sigma^{1a} - \sigma^1\right) bc + \left(\sigma^{2b} - \sigma^2\right) ac + \left(\sigma^{3c} - \sigma^3\right) ab + \mathbf{G} \cdot abc = \rho \cdot \frac{d^2 \mathbf{u}_s}{dt^2} \cdot abc , \quad ( 11.517 )$$

neboli

$$\frac{\partial \sigma_{ij}}{\partial x_i} + G_j = \rho \frac{d^2 u_j}{dt^2}, \quad (11.518)$$

což je **pohybová rovnice kontinua**.

Vyjádříme si nyní rovnici ( 11.514 ) v diferenciálním tvaru

$$dy_j = dx_j + du_j = dx_j + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \cdot dx_i. \quad (11.519)$$

Velikost vektoru  $dx_j$  na počátku děje činí  $(dx_j dx_j)^{1/2}$ .

Konečná vzdálenost dvou bodů původně se nalézajících v místech  $x_j, x'_j$ , kde

$$x'_j - x_j = dx_j, \quad (11.520)$$

je

$$dy_j = y'_j - y_j = (dy_j dy_j)^{1/2}. \quad (11.521)$$

Rozdíl čtverců těchto vzdáleností

$$dy_j dy_j - dx_j dx_j \quad (11.522)$$

nyní použijeme k popisu deformace kontinua v okolí bodu, jehož původní souřadnice jsou  $x_i$  a konečné  $y_i$ .

Vypočteme je jako funkci výchozích poloh bodů a zvoleného diferenciálního posunutí  $dx_i$  z těchto poloh.

Z rovnice ( 11.519 ) dostáváme



$$\begin{aligned}
dy_j dy_j &= (dx_j + du_j)(dx_j + du_j) = \left[ dx_j + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_l} \right) \cdot dx_l \right] \left[ dx_j + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \cdot dx_k \right] = \\
&= \left( \delta_{jl} + \frac{\partial u_j}{\partial x_l} \right) \cdot dx_l \cdot \left( \delta_{jk} + \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \cdot dx_k = \\
&= \left[ \delta_{jl} \delta_{jk} + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_l} \right) \cdot \delta_{jk} + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \cdot \delta_{jl} + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_l} \right) \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \right] \cdot dx_l dx_k .
\end{aligned} \tag{11.523}$$

Uvážíme-li, že

$$\delta_{jl} \delta_{jk} dx_l dx_k = dx_j dx_j , \tag{11.524}$$

$$\left( \frac{\partial u_j}{\partial x_l} \right) \delta_{jk} = \frac{\partial u_k}{\partial x_l} , \tag{11.525}$$

$$\left( \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \delta_{jl} = \frac{\partial u_l}{\partial x_k} , \tag{11.526}$$

Můžeme psát

$$dy_j dy_j = dx_j dx_j + \left[ \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_l} \right) \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \right] \cdot dx_l dx_k . \tag{11.527}$$

Označíme-li

$$\varepsilon_{lk} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\partial u_k}{\partial x_l} + \frac{\partial u_l}{\partial x_k} + \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_l} \right) \left( \frac{\partial u_j}{\partial x_k} \right) \right] = \varepsilon_{kl} , \tag{11.528}$$

což je tzv. **tenzor deformací**, dostáváme pro hledaný výraz (11.522) vyjádření

$$dy_j dy_j - dx_j dx_j = 2\varepsilon_{lk} dx_l dx_k . \tag{11.529}$$

Zvolíme-li nyní vektor  $dx_m$ , tj. směr výchylky z počátečního bodu  $x_i$ , udávají nám rovnice ( 11.529 ) změnu čtverce délky příslušnou danému směru.

Jsou-li deformace malé, potom jsou malé i změny translačního vektoru  $u_i$  se souřadnicemi  $x_j$ , takže parciální derivace  $\frac{\partial u_i}{\partial x_j}$  nabývají

malých hodnot.

Jejich vzájemné násobky jsou pak malými veličinami druhého řádu a lze je proto v tenzoru deformací zanedbat na rozdíl od členů kde se parciální derivace vyskytují samostatně.

Přímou úměrnost mezi napětím a deformací můžeme nyní vyjádřit vztahem

$$\sigma_{ij} = C_{ijkl} \varepsilon_{kl} , \quad ( 11.530 )$$

který udává, že složky  $\sigma_{ij}$  tenzoru napětí jsou lineární kombinací složek  $\varepsilon_{kl}$  tenzoru deformace.

Koeficienty  $C_{ijkl}$  tvoří tenzor čtvrtého řádu, charakteristický pro daný typ kontinua, pro nějž se užívá označení **tenzor elasticity kontinua**.

V homogenním kontinuu jsou při dané orientaci souřadného systému hodnoty jednotlivých koeficientů  $C_{ijkl}$  v každém bodě tytéž.

Kdyby byly všechny složky tenzoru elasticity vzájemně nezávislé, bylo by jich  $3^4 = 81$ .

Symetrie tenzorů  $\sigma_{ij}$ ,  $\varepsilon_{kl}$  a další podmínky redukují počet nezávislých koeficientů tenzoru elasticity v izotropním kontinuu na pouhé dva.

Tyto dva nezávislé koeficienty obvykle značíme  $\lambda$  a  $\mu$  a nazýváme je **Laméovými koeficienty**.

Využijeme-li Laméových koeficientů pro charakteristiku elastických vlastností izotropního kontinua, redukují se rovnice ( 11.530 ) na tvar

$$\sigma_{ij} = \lambda \cdot \delta_{ij} \cdot \text{tr} \varepsilon_{ij} + 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} = \lambda \cdot \delta_{ij} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 u_k}{\partial x_k^2} \right) + 2\mu \cdot \varepsilon_{ij} . \quad ( 11.531 )$$

Zanedbáme-li v tenzoru deformací člen vyššího řádu (viz poznámka na předchozí straně), obdržíme tzv. **tenzor malých deformací**

$$e_{ij} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial u_i}{\partial x_j} + \frac{\partial u_j}{\partial x_i} \right). \quad (11.532)$$

S jeho pomocí můžeme rovnici ( 11.531 ) pro malá napětí velmi dobře aproximovat jednodušší formulí

$$\tau_{ij} = \lambda \cdot \delta_{ij} \cdot \text{tr } e_{ij} + 2\mu \cdot e_{ij} = \lambda \cdot \delta_{ij} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + 2\mu \cdot e_{ij}, \quad (11.533)$$

kde  $\tau_{ij}$  je tzv. **tenzor malých napětí**, který je limitní formou tenzoru  $\sigma_{ij}$  pro malé deformující síly.

Po dosazení ( 11.533 ) do ( 11.518 ) dostaneme rovnici

$$\rho \cdot \frac{\partial^2 u_i}{\partial t^2} = (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial x_i} \left( \frac{\partial u_k}{\partial x_k} \right) + \mu \frac{\partial^2 u_i}{\partial x_j \partial x_j} = (\lambda + \mu) \frac{\partial}{\partial x_i} \text{div } \mathbf{u} + \mu \cdot \nabla^2 u_i. \quad (11.534)$$

Jestliže se rozruch šíří pouze v jednom směru, např. ve směru osy  $x$ , závisí výchylka  $\mathbf{u}$  pouze na této jedné souřadnici, tj.

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}(x, t). \quad (11.535)$$

Máme tak

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 u_x}{\partial x^2} - \frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 u_x}{\partial t^2} &= 0, \\ \frac{\partial^2 u_y}{\partial x^2} - \frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 u_y}{\partial t^2} &= 0, \\ \frac{\partial^2 u_z}{\partial x^2} - \frac{1}{c_t^2} \frac{\partial^2 u_z}{\partial t^2} &= 0. \end{aligned} \quad (11.536)$$

První rovnice ( 11.536 ) popisuje longitudiální vlnu šířící se ve směru osy  $x$ .

Zbylé dvě rovnice popisují transversální vlnění šířící se v tomtéž směru.

Rychlosti šíření obou druhů vln jsou dány vztahy (srov. ( 11.534 ))

$$c_l = \left( \frac{\lambda + \mu}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad ( 11.537 )$$

$$c_t = \left( \frac{\mu}{\rho} \right)^{\frac{1}{2}}, \quad ( 11.538 )$$

jejichž vzájemné porovnání poskytne pozoruhodnou nerovnost mezi oběma rychlostmi:

$$c_l \geq \sqrt{2} \cdot c_t . \quad ( 11.539 )$$

Stojí za povšimnutí, že fyzikální rozměr Laméových koeficientů je  $[\text{N} \cdot \text{m}^{-2}]$ .

Naším úkolem nyní bude vypočítat poměr rychlostí jakými se informace šíří po povrchu, resp. nitrem sférického chronoru.

Vyjdeme-li z hodnot vnitřní tenze  $F$  kvantionu dané vztahem ( 11.217 ), snadno vypočteme velikost vnitřního tlaku pod sférickým chronorem:

$$p = \frac{F}{S} = \frac{F}{\pi \cdot l_h^2} . \quad ( 11.540 )$$

Pro povrchové napětí sférického chronoru odtud plyne

$$\sigma = \frac{dE}{dS} = \frac{p \cdot r}{2} = \frac{p \cdot l_h}{4} = \frac{F}{4\pi \cdot l_h} , \quad ( 11.541 )$$

odkud získáme výraz pro celkovou energii kvantionu:

$$E = \sigma \cdot \int dS = E_p - E_v = \frac{F \cdot l_h}{4} = h , \quad ( 11.542 )$$

kde  $E_p$  resp.  $E_v$  jsou potenciální energie při povrchu, resp. uvnitř kvantionu.

Aby mohly kvantiony vytvářet složité komplexy, od elementárních částic až po živé organismy, musí být fermiony, tj. jejich spin  $I_m$  musí být poločíselný.

Jak brzy ukážeme, nemůže být  $I_m > \hbar/2$ .

Jistě bude přirozené předpokládat, že

$$E_p = \hbar \cdot I_m + h = \frac{1}{2} \hbar (4\pi + 1) . \quad ( 11.543 )$$

Z rovností ( 11.542 ), ( 11.540 ) plyne, že

$$E_v = \frac{\hbar}{2} \quad ( 11.544 )$$

a tedy podíl

$$\frac{E_p}{E_v} = 4\pi + 1 . \quad ( 11.545 )$$

Podle ( 11.538 ) je hledaný poměr rychlostí

$$\frac{v_p}{v_v} = \left[ \frac{\rho_v}{\rho_p} (4\pi + 1) \right]^{\frac{1}{2}} , \quad ( 11.546 )$$

kde  $\rho_p$  resp.  $\rho_v$  je hustota kinetické energie při povrchu resp. v nitru kvantionu.

Platí tedy

$$\frac{\rho_v}{\rho_p} = \frac{J_k \cdot \omega^2}{J_s \cdot \omega^2} = \frac{J_k}{J_s}, \quad (11.547)$$

přičemž  $J_k$  resp.  $J_s$  je inerciální moment kubického subchronoru resp. sférického chronoru.

S přihlédnutím k formuli ( 11.539 ) můžeme tedy psát

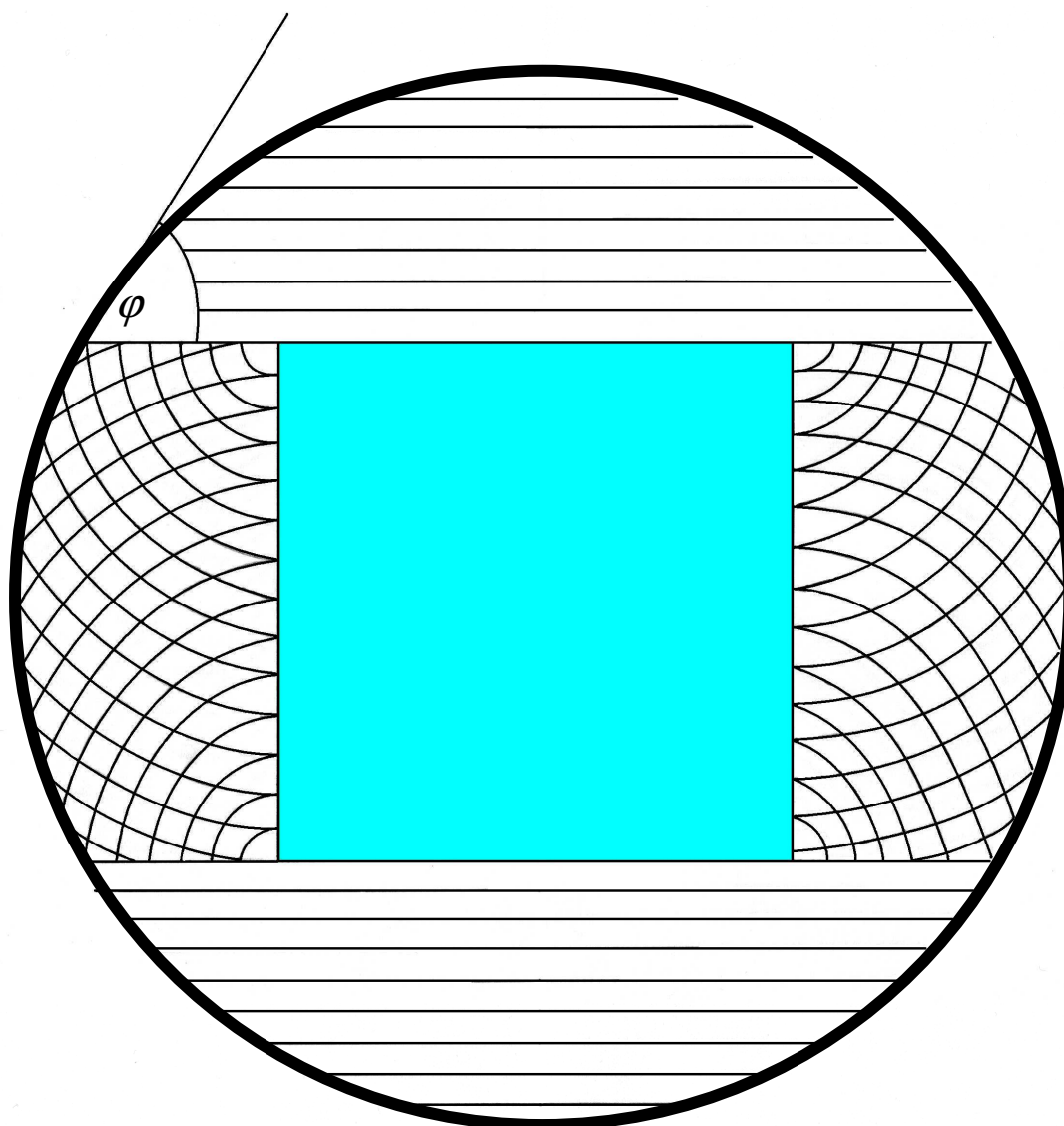
$$v_p = \left( \frac{E_p}{\rho_p} \right)^{\frac{1}{2}} \cdot \frac{1}{\sqrt{2}} = \left[ \frac{\hbar \cdot (4\pi + 1)}{2J_s \cdot \omega^2} \right]^{\frac{1}{2}}, \quad (11.548)$$

$$v_v = \left( \frac{E_v}{\rho_v} \right)^{\frac{1}{2}} = \left( \frac{\hbar}{J_k \cdot \omega^2} \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (11.549)$$

Projekce rychlosti rovinné cytoresonanční vlny, pohybující se napříč kvantonem, do sférického chronoru je zřejmě vyjádřena funkcí

$$v_{vs} = v_v \cdot (1 + \cot \varphi)^{1/2}, \quad (11.550)$$

Obr. 11.32



Máme tedy

$$\frac{v_p}{v_{vs}} = \left[ \frac{J_k \cdot (4\pi + 1)}{2J_s \cdot (1 + \cot \varphi)} \right]^{\frac{1}{2}} = \sin \varphi . \quad ( 11.551 )$$

Snadno nahlédneme, že úhel  $\varphi$  udává množinu bodů na povrchu sférického chronoru tvořící hranici oddělující oblast, na níž se rozruch šíří se formou transversálního vlnění stálou rychlostí  $v_p$  pohybuje pomaleji, než projekce rychlosti  $v_{vs}$  longitudiální rovinné vlny

postupující nitrem kvantionu rychlostí  $v_v$ , od oblasti, kde je již nerovnost mezi oběma rychlostmi opačná.

Odtud tedy poslední rovnost v ( 11.551 ).

Nyní vypočteme momenty  $J_s$  a  $J_p$ .

Pro inerciální moment sférického chronoru máme

$$J_s = \rho_v \cdot \frac{\pi}{2} \cdot \int_{-r}^r \sqrt{(r^2 + x^2)^4} dx = \frac{8}{15} \rho_v \cdot \pi \cdot r^5 . \quad ( 11.552 )$$

Pro výpočet inerciálního momentu kubického subchronoru použijeme ortonormální souřadný systém s osami rovnoběžnými s hranami subchronoru a počátkem v jeho geometrickém (tj. i hmotném) středu. Pro inerciální moment vůči ose  $z$  tak dostáváme

$$\begin{aligned} J_k &= \rho_v \cdot \int_V (x^2 + y^2) dV = \rho_v \cdot \left( \int_V x^2 dV + \int_V y^2 dV \right) = \\ &= \rho_v \left( \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} x^2 dx dy dz + \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} \int_{-L/2}^{L/2} y^2 dx dy dz \right) = \rho_v \cdot \frac{1}{6} \cdot L^5 , \end{aligned} \quad ( 11.553 )$$

kde  $L$  je délka hrany kubického subchronoru, kterou je naším úkolem určit.

Dosadíme-li nyní ( 11.552 ) a ( 11.553 ) do ( 11.551 ), dostaneme rovnici

$$\sin \varphi = \left[ \frac{15L^5 (4\pi + 1)}{48\pi \cdot r^5 (1 + \cot \varphi)} \right]^{\frac{1}{2}} . \quad ( 11.554 )$$

Velikost hrany  $L$  kubického subchronoru je zřejmě funkcí úhlu  $\varphi$ . Jednoduchá geometrická úvaha z pomoci obr. 11.33 ukáže, že tato závislost zní

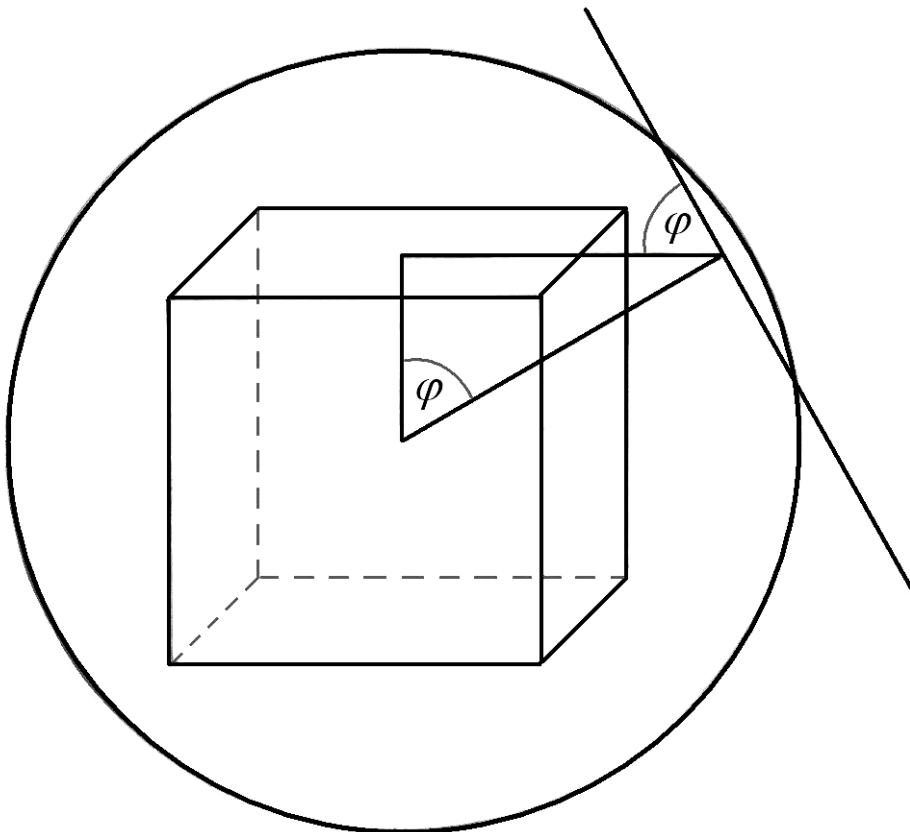
$$L = l_h \cdot \cos \varphi , \quad ( 11.555 )$$



takže po dosazení ( 11.555 ) do ( 11.554 ) získáme rovnici

$$\pi(1 + \cot \varphi) \cdot \sin^2 \varphi = 10(4\pi + 1) \cdot \cos^5 \varphi . \quad ( 11.556 )$$

Obr. 11.33



Řešením je úhel

$$\varphi \approx 1,0617 \text{ rad} \approx 60^{\circ}50' . \quad ( 11.557 )$$

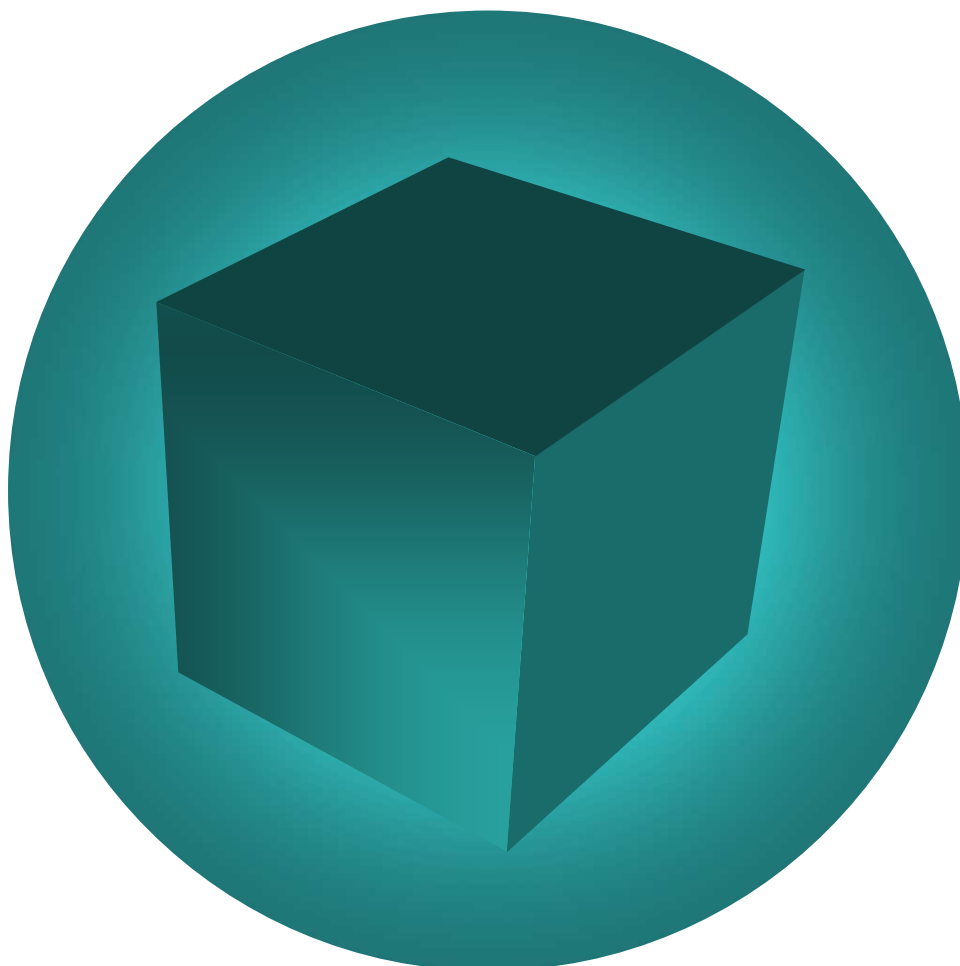
Dosadíme-li toto řešení zpět do vztahu ( 11.555 ), obdržíme dosti přesnou představu o skutečných rozměrech kubického subchronoru. Za předpokladu  $\lambda/\mu = 1$  kladeného na Laméovy koeficienty elastického tenzoru  $C_{ijkl}$  odtud vychází délka hrany kubického subchronoru

$$L \approx 7,8 \cdot 10^{-36} \text{ m} .$$

( 11.558 )

na následujícím obrázku si již můžeme prohlédnout nitro kvantionu téměř v celé jeho kráse.

Obr. 11.34



Vidíme, že délka hrany kubického subchronoru je téměř rovna poloměru sférického chronoru.

Vnořme se nyní do nitra tohoto zcela nového a nanejvýš pozoruhodného subkvantového světa.

V následujících kapitolách bude postupně podkryta jemná struktura existující uvnitř kubického subchronoru.

Již nyní však stojí za povšimnutí vnitřní jemná struktura vyplňující prostor mezi kubickým subchronorem a sférickým chronorem, jejíž dvourozměrný náčrt vidíme na obr. 11.32.

Právě tato struktura, kterou ztotožňujeme s Blandriem, je, jak jsme se již mohli přesvědčit, pro fungování cytoprostoru zcela klíčovou a stala se proto předmětem intenzivního bádání nově se rodícího vědního oboru zvaného **teologická fyzika**, či **fyzikální teologie**.

Protože výzkum je teprve na počátku, bylo by předčasné informovat již nyní o dílčích úspěších jichž bylo zatím na tomto poli bádání dosaženo.

Rozhodně se však k tomuto tématu ještě vrátím v některé ze svých budoucích prací, v době, kdy již tento mladičkový obor vykrytalizuje ve skutečnou vědu.

Pronikněme nyní společně do hlubin našeho subkvantového vesmíru a prozkoumejme podrobněji vibrační módy vyskytující se uvnitř kubického subchronoru.

## 11) Vnitřní struktura kubického subchronoru

Přepišme nyní první rovnici systému ( 11.536 ), popisující longitudiální vlnu, která jediná může vstupovat do nitra kubického subchronoru, na tvar s výchylkou označenou jako  $\Psi$  :

$$\frac{\partial^2 \Psi}{\partial x^2} = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial t^2} . \quad ( 11.559 )$$

Obecným řešením rovnice ( 11.559 ) netlumené monochromatické harmonické vlny šířící se ve směru  $x$  je funkce

$$\Psi = A \cdot \exp \left[ -i \cdot \omega \left( t - \frac{x}{v} \right) \right] . \quad ( 11.560 )$$

Všimněme si, že jednorozměrnou vlnovou funkci  $\Psi$  můžeme upravit do tvaru

$$\Psi = A \cdot \exp \left[ -i\omega \left( t - \frac{x}{v} \right) \right] = A \cdot \exp(-i\omega t) \exp \left( i\omega \frac{x}{v} \right) \equiv \psi \cdot \exp(-i\omega t) , \quad ( 11.561 )$$

v němž je  $\Psi$  součinem časově závislé funkce  $\exp(-i\omega t)$  a funkce polohy  $\psi$ .

Ve skutečnosti mají všechny vlny v konzervativních silových polích časovou závislost tohoto tvaru.

Dosadíme-li nyní  $\Psi$  do vlnové rovnice ( 11.559 ) a provedeme dvojnásobnou časovou derivaci, obdržíme po drobné úpravě rovnici

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} + \frac{\omega^2}{c^2} \psi = 0 , \quad ( 11.562 )$$

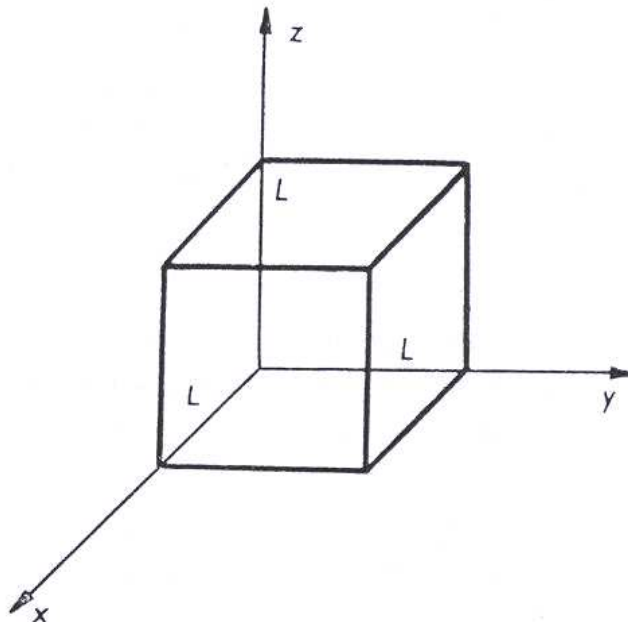
což je tzv. **stacionární vlnová rovnice**.

Její trojrozměrný tvar je

$$\nabla^2 \psi + \frac{\omega^2}{c^2} \psi = 0 . \quad ( 11.563 )$$

Řešme nyní tuto rovnici pro nitro kubického subchronoru, kde je na  $\psi$  kladena hraniční podmínka  $\psi = 0$  všude na stěnách subchronoru.

Obr. 11.35



Srovnáním ( 11.563 ) s ( 3.79 ) dostaneme separací proměnných formálně identické řešení ve tvaru degenerovaných stojatých vln,

příčemž v našem případě krychlové dutiny bude opět stupeň degenerace vůbec největší.

K tomu aby v krychlové dutině o straně  $L$  existoval mód ( 11.560 ), musí délka každé komponenty jeho vlnového vektoru být rovna celočíselnému násobku hodnoty  $\pi/L$ .

Módy můžeme znázornit zobrazením bodů  $(k_x, k_y, k_z)$  v třírozměrném prostoru.

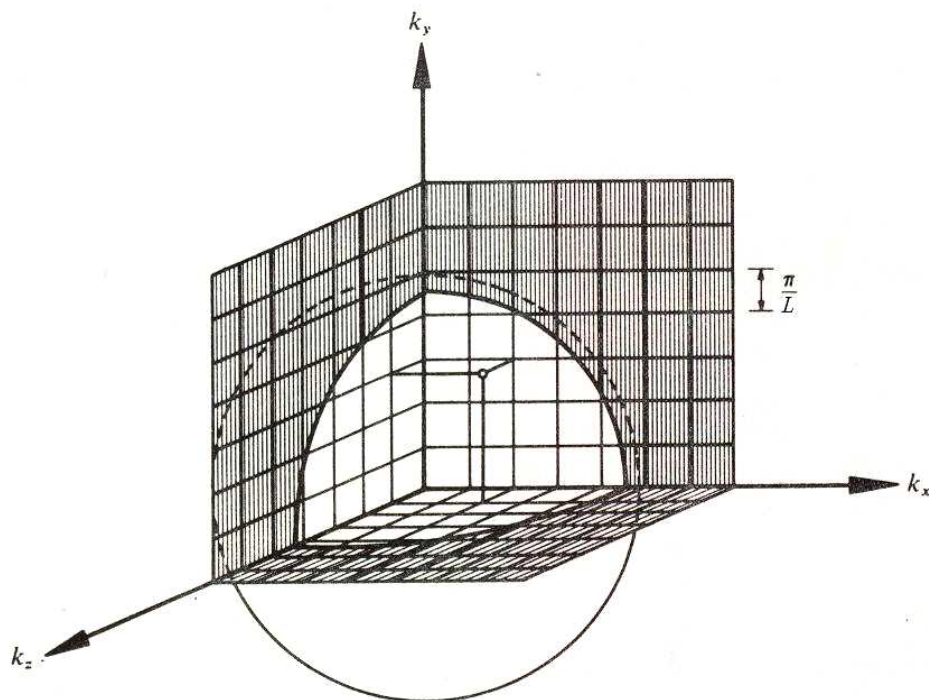
Z toho, co jsme si řekli o dovolených hodnotách komponent vlnového vektoru  $\mathbf{k}$  vidíme, že body reprezentující módy tvoří kubickou mřížku.

Počet módů s vlnovými vektory nepřesahujícími svou délkou  $k$  je zřejmě roven počtu módů obsažených v kouli o poloměru  $k$ .

Pokud se speciálně nezajímáme o těch několik módů, které mají vlnové délky srovnatelné s rozměry dutiny, bude  $k$  mnohem větší než mřížková konstanta  $\pi/L$ .

Koule pak obsahuje velmi veliký počet mřížkových bodů, které lze spočítat metodou ignorující zrnitost mřížky.

Obr. 11.36



Zjistili jsme, že každý bod mřížky zaujímá objem  $\left(\frac{\pi}{L}\right)^3$ .

Protože objem koule o poloměru  $k$  je  $\frac{4\pi \cdot k^3}{3}$  a protože mřížkové body, jež odpovídají módům, leží pouze v oktantu ve kterém všechny tři složky vlnového vektoru nabývají kladných hodnot, je hledaný počet módů dán vztahem

$$N(k) \equiv \frac{1}{8} \cdot \frac{4\pi \cdot k^3}{3} \left( \frac{L}{\pi} \right)^3 = \left( \frac{L^3}{6\pi^2} \right) \cdot k^3 = \left( \frac{V}{6\pi^2} \right) \cdot k^3, \quad (11.564)$$

kde  $V$  je objem dutiny.

Tuto metodu lze zobecnit na dutinu libovolného tvaru.

Pokud  $k$  odpovídá vlnovým délkám jež jsou mnohem menší než rozměry dutiny, nezávisí výsledek ( 11.564 ) na tvaru dutiny.

Zderivováním ( 11.564 ) můžeme určit počet módů v intervalu  $\langle k ; k + dk \rangle$ .

Označíme-li jejich počet  $g(k) dk$ , máme

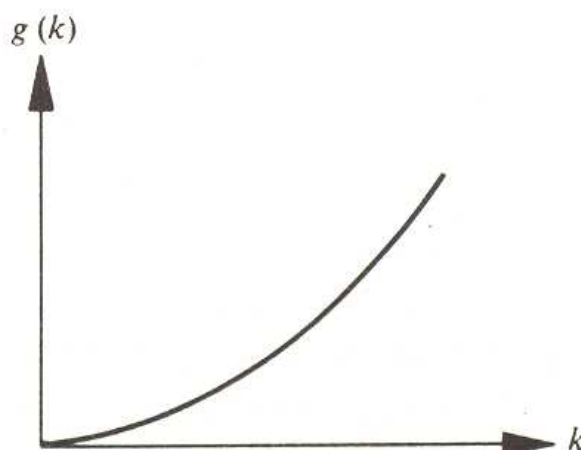
$$g(k) \equiv \frac{dN}{dk} = \left( \frac{V}{2\pi^2} \right) \cdot k^2. \quad (11.565)$$

veličinu  $g(k)$  nazveme **hustotou módů**.

Tento termín se vztahuje k hustotě se kterou jsou módy nahromaděny v jednotkovém intervalu  $k$ , nikoli k nějaké prostorové hustotě.

Reciproká hodnota hustoty módů odpovídá průměrnému přírůstku  $k$ , při přechodu od libovolného módu k nejbližšímu dalšímu.

Obr. 11.37

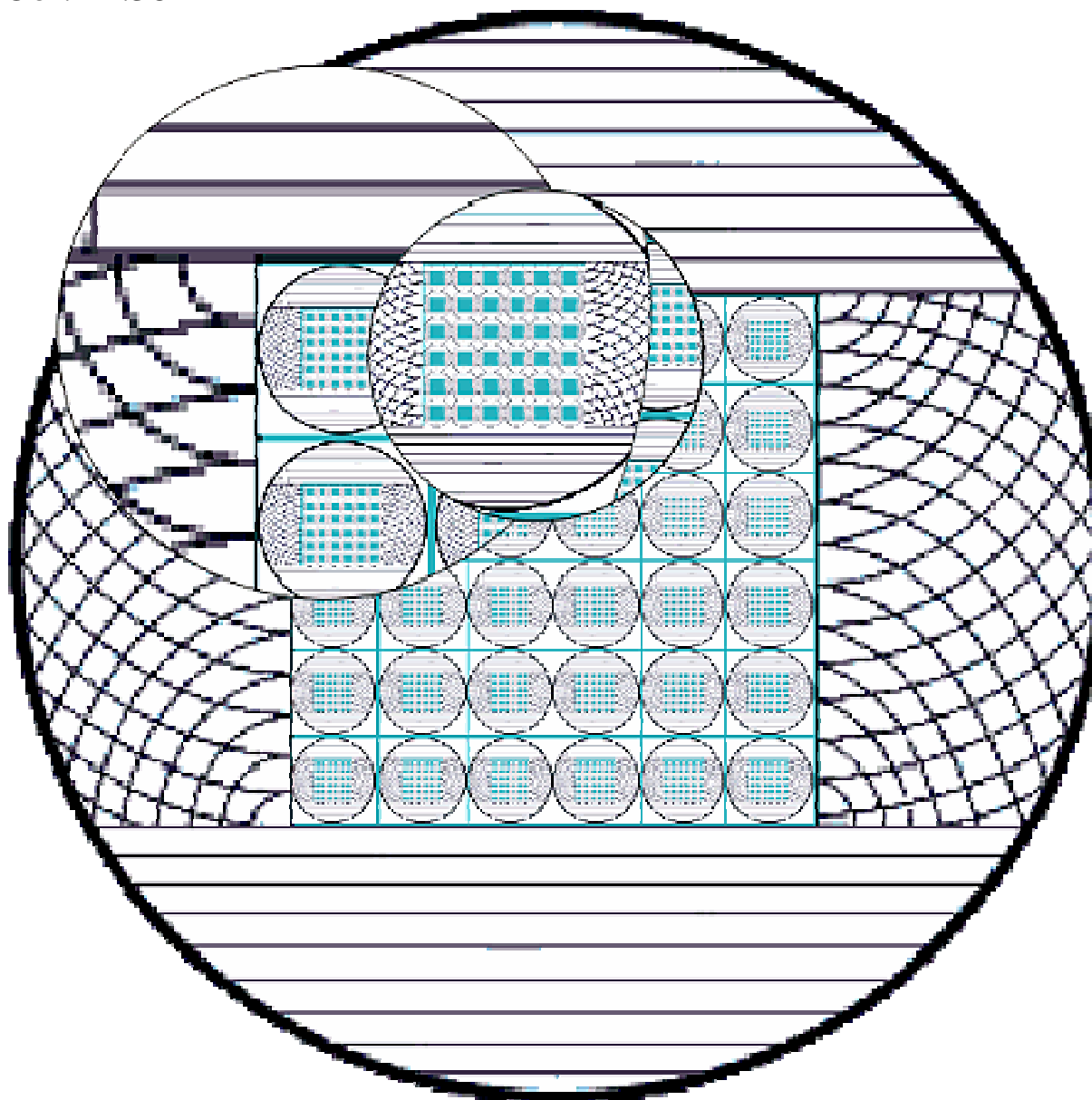


Nyní je již více než zřejmé, že se nám zde rýsuje první konkrétní důkaz existence fraktální struktury cytoprostoru.

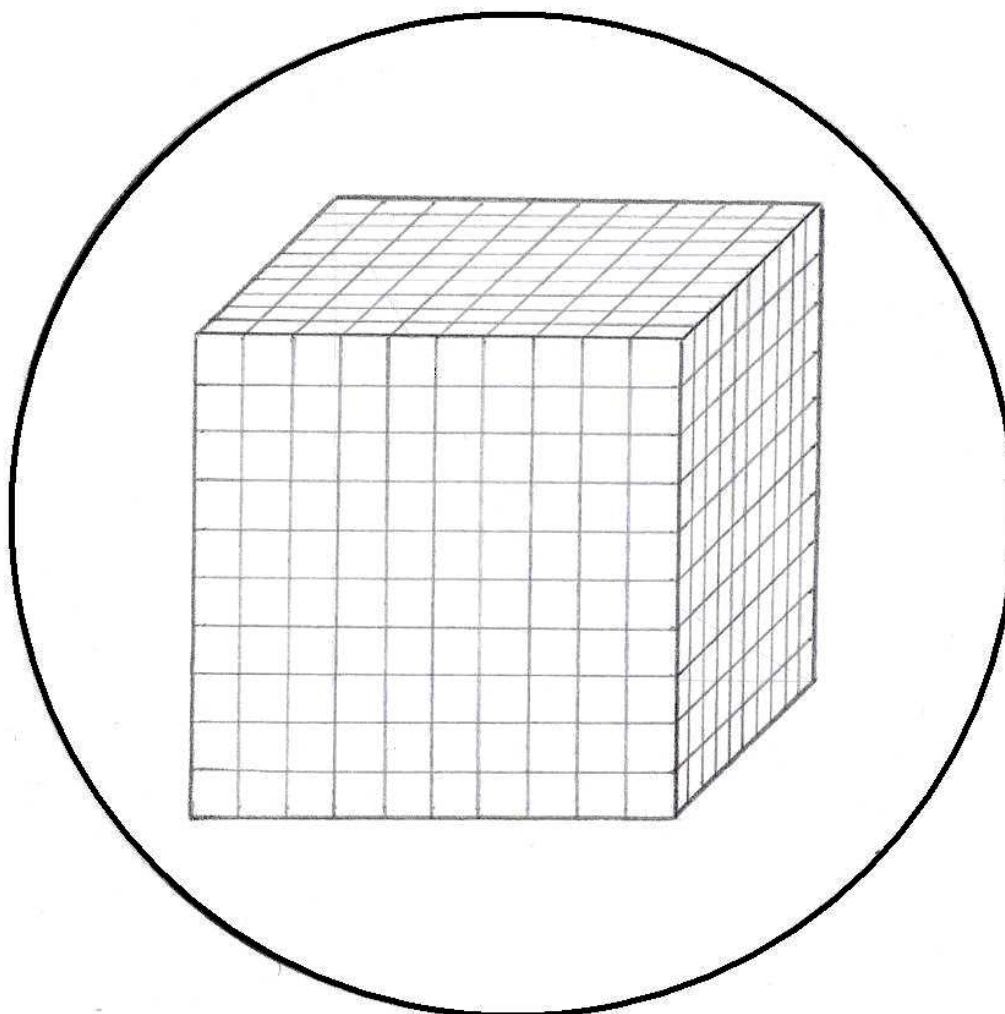
Ukázali jsme, že uvnitř kubického subchronoru, tj. na subkvantové délkové škále, existuje přesná analogie cytoprostoru (obr. 11.38), s nímž jsme se dosud byli zvyklí setkávat pouze v mega – a gigakosmickém měřítku.

To ukazuje na fascinující skutečnost, že se náš svět donekonečna opakuje na různých úrovních soběpodobnostního zobrazení, jakožto určitý nekonečný řetězec morfismů.

Obr. 11.38



Obr. 11.39



Tohoto poznatku můžeme využít mimo jiné pro odhad celkové životnosti vesmíru.

Proces generování kvantionu můžeme formálně přirovnat k lámání cytoresonančních vln na rozhraní dvou prostředí s odlišnými indexy lomu.

**Index lomu cytoresonance** na rozhraní cytoprostoru a kvantionu se určí jednoduchým způsobem: Rychlost postupu cytoresonanční vlny prostředím je dána obvyklým vztahem

$$v = \lambda \cdot f \quad ( 11.566 )$$

čili



$$f = \frac{v}{\lambda}, \quad (11.567)$$

kde  $\lambda$  a  $f$  jsou vlnová délka a frekvence této vlny.

Na rozhraní oněch dvou prostředí, kde se střetávají dvě cytorezonanční vlny uvnitř cytoprostorové buňky, tvarující zde kubický subchronor s vlastním cytoprostorem uvnitř, pak musí platit  $f = \text{konst.}$ , tj.

$$\frac{v_1}{\lambda_1} = \frac{v_2}{\lambda_2}, \quad (11.568)$$

kde  $\lambda_2$  je délka cytorezonanční vlny uvnitř kvantionu, která je vůči vlnové délce  $\lambda_1$  iniciační cytorezonanční vlny ve stejném poměru, jako je nově vytvořený cytoprostor vůči iniciačnímu cytoprostoru. Platí tedy rovnost

$$\lambda_2 = \frac{\lambda_1}{6 \cdot 10^{61}}. \quad (11.569)$$

Index lomu cytorezonance na membráně kvantionu pak snadno určíme ze známého vztahu

$$n = \frac{v_1}{v_2} = \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = 6 \cdot 10^{61}. \quad (11.570)$$

Index lomu kvantionu tedy udává poměr doby průběhu fyzikálních procesů v kupovesmíru oproti době průběhu týchž procesů uvnitř kvantionu.

Odtud můžeme ihned stanovit dobu trvání jedné vesmírné periody:

$$T = n \cdot t_h \approx 3,2 \cdot 10^{18} \text{ s} \quad (11.571)$$

neboť víme, že doba života klidového kvantionu je rovna Planckovu času  $t_h$ .

Jelikož, dle posledních měření, uplynula od počátku vesmíru již doba

$T = 4 \cdot 10^{17}$  s, nalézáme se nyní zhruba v jedné osmině jeho celkové doby života.

## 12) Termodynamika kubického subchronoru

Celkový počet módů, ve kterých se může hromadit energie v mřížce je roven  $3N$ , kde  $N$  je počet hmotných elementů v mřížce.

Podle ekvipartičního teorému je střední energie systému připadající na jeden stupeň volnosti při termodynamické teplotě  $T$  rovna

$$W = \frac{k \cdot T}{2}, \quad (11.572)$$

kde  $k$  je Boltzmannova konstanta.

Každý mód mřížky má dva stupně volnosti: svoji kinetickou energii a svou energii potenciální.

Mřížka má tedy jako celek  $6N$  stupňů volnosti, což dává celkovou energii

$$W = \frac{6N \cdot k \cdot T}{2} = 3N \cdot k \cdot T. \quad (11.573)$$

Položíme-li  $W = h$  snadno přiřadíme kubickému subchronoru

termodynamickou teplotu  $T \approx 8 \cdot 10^{-197}$  K.

Dosazením této hodnoty do vztahu pro střední kvadratickou rychlost elementů mřížky dostaneme (viz ( 11.129 ))

$$v = \sqrt{\frac{3k \cdot T}{m_y^{(-1)}}} = \sqrt{\frac{3k \cdot T \cdot N \cdot c^2}{h}} = c. \quad (11.574)$$

Hmota je tedy tvořena časem oscilujícím fázovou rychlostí  $c$ .

Při teplotě  $T \rightarrow 0$  se oscilace času zastaví a hmota ztratí svůj základní atribut – hmotnost.

To odpovídá bodu A Zoevistianovy pohybové tabulky.

Čas v tomto bodě plyne nekonečnou a zároveň nulovou rychlostí.

Dodáváme-li takovému hmotnému kontinuu termodynamickou teplotu, počne se stáčet tok času, čímž se čas zkvantuje a časové intervaly počnou dilatovat.

Jakmile urychlíme vibrace částice na úroveň bodu B Zoevistianovy pohybové tabulky, dosáhne dilatace času nekonečné hodnoty a čas počne plynout konečnou rychlostí.

Vnitřní struktury částic – kvantiony – zde již oscilují rychlostí světla  $c$ .

Nastává klidový stav hmoty.

Hmota se tedy tvoří z původní hodnoty  $m = 0$ , v důsledku takřka nekonečné dilatace času, jakožto inerciální hmotnost kmitajících kvantionů, pro něž se Lorentzovská transformace hybnosti blíží nekonečnu.

Vzhledem k tomu, že  $p = m \cdot v$ , pak i  $m$  vzroste nekonečněkrát, z nuly na konečnou hodnotu.

Při dalším zvyšování rychlosti, až do bodu C pohybové tabulky, čas a hmotnost nadále dilatují a prostor kontrahuje.

Při rychlosti  $v \rightarrow c$  již rychlost toku času a prostorové intervaly konvergují k nule, zatímco veličiny  $m$ ,  $p$ ,  $E$  divergují k nekonečnu.

Při nadsvětelné rychlosti, těsně za bodem C, je pak situace na systému paracyt obdobná opět stavu při teplotě  $T \rightarrow -0$  K.

(Termodynamické nuly nelze konečným počtem kroků dosáhnout, viz třetí zákon termodynamiky, lze ji však překročit směrem do záporných hodnot).

*Poznámka:* Všechny částice, pro které platí

$$\frac{G \cdot m}{c^2} < l_h \quad , \quad ( 11.575 )$$

tj. částice s hmotností menší než **Planckova hmota**, již samostatně nevytvářejí žádné gravitační pole, neboť jejich geometrodynamická hmotnost, jež je mírou zakřivování okolitého prostoročasu příslušnou částicí, nedosahuje ani nejmenší povolené délky – Planckovy délky.

Její inerciální hmotnost jí však zřejmě zůstává, o čemž se lze snadno přesvědčit experimentálně.

Situace na přechodové hranici cyt/paracyt je pak taková, že tok času se zde rovná nekonečnu a nule zároveň.

Doba života kvantionu zde totiž diverguje k  $\infty$ , což je analogické situaci, kdy kvantion nehybně setrvává na jedné jediné cytoprostorové buňce a rozpadá se nekonečněkrát za sekundu (nehybnost kvantionů vyžaduje sama definice termodynamické nuly).

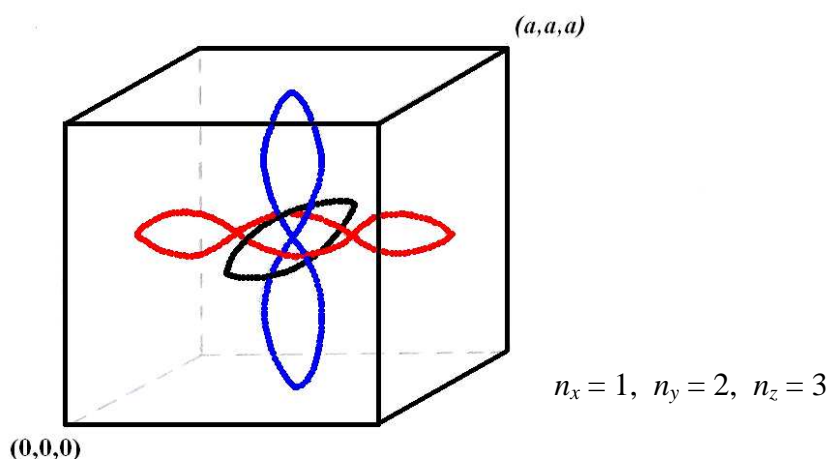
Připomeňme si, a mějme stále na paměti, že limitních bodů Zoevistianovy pohybové tabulky nelze žádným fyzikálně přípustným způsobem dosáhnout.

Fyzikální systémy se jim mohou vždy pouze do jisté, poměrně značné míry přiblížit z kterékoli strany, popř. kolem nich oscilovat.

Výše naznačené časoprostorové symetrie dovolují prodloužit řešení mnoha kvantově – mechanických problémů i do zdánlivě nepřipustných oblastí záporných hodnot.

Demonstrujme si to na příkladu základního vztahu kvantové optiky - **Planckova vyzařovacího zákona**. Uvažujme dutinu tvaru krychle o straně  $a$ .

Obr. 11.40



Umístíme-li do této dutiny elektromagnetické vlnění, pak Pro něj budou platit vztahy ( 11.559 ), ( 11.562 ) tj.

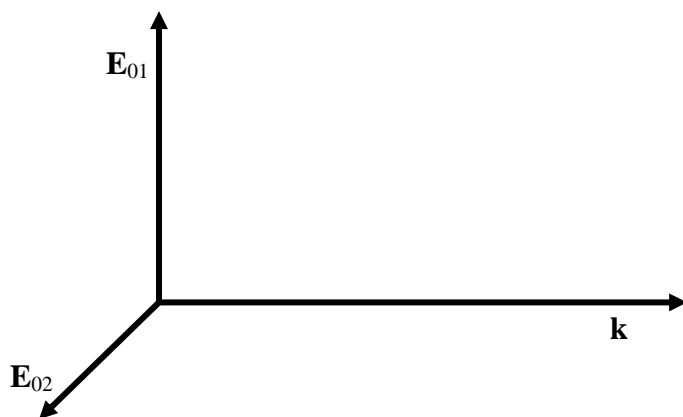
$$\frac{\pi^2}{a^2} \cdot (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2) = \frac{\omega^2}{c^2} . \quad (11.576)$$

odkud pro frekvenci konkrétního módu plyne

$$f = \frac{\omega}{2\pi} = \frac{c}{2a} \sqrt{n_x^2 + n_y^2 + n_z^2} = \|\mathbf{k}\| \cdot \frac{c}{2\pi} = \frac{c}{\lambda} . \quad (11.577)$$

každému  $k$  nyní přísluší dva lineárně polarizované módy, neboť elektromagnetické vlnění je transversální (viz obr. 11.41)

Obr. 11.41

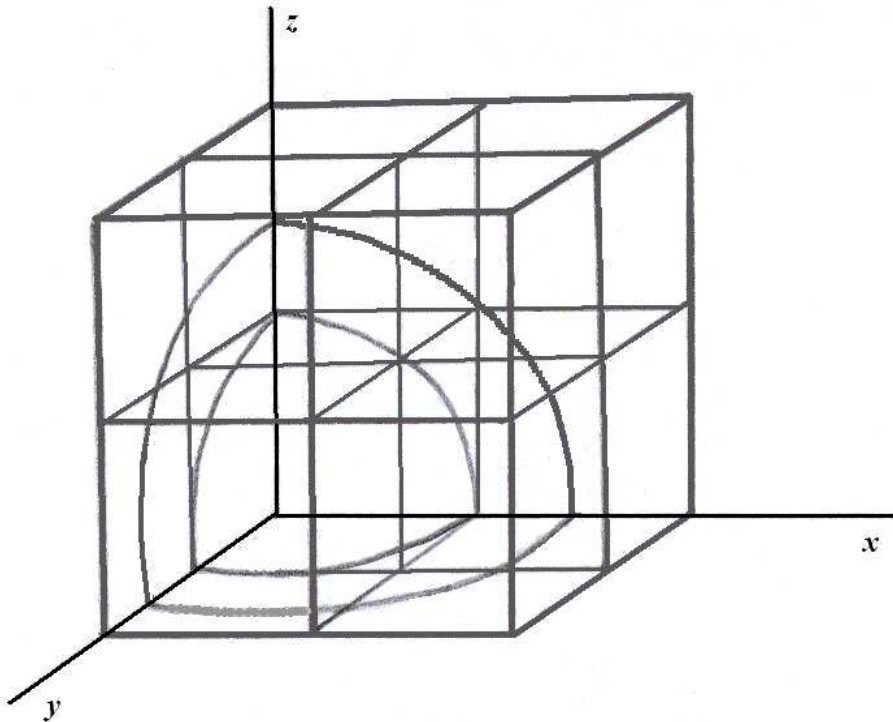


Spočtěme nyní celkový počet módů v dutině, ležících v intervalu frekvencí  $(f; f + df)$ .

Objem  $k$ -prostoru  $V$  se určí jako podíl polarizace módů a počtu oktantů, násobený objemem infinitesimální kulové vrstvy, tj.

$$V = \frac{2}{8} \cdot 4\pi \cdot k^2 dk = \pi \cdot k^2 dk . \quad (11.578)$$

Obr. 11.42



Hledaný počet módů pak dostaneme coby podíl objemu  $k$ -prostoru a objemu elementární buňky, tj.

$$N(k) = \frac{V}{\left(\frac{\pi}{a}\right)^3} = \frac{a^3 \cdot k^2}{\pi^2} dk . \quad (11.579)$$

Z formule ( 11.577 ) nyní můžeme vyjádřit

$$k^2 = \frac{4\pi^2}{c^2} \cdot f^2 , \quad (11.580)$$

odkud

$$dk = \frac{2\pi}{c} df , \quad (11.581)$$

což dosazeno do ( 11.579 ) dá hledané vyjádření

$$N(f) = \frac{a^3 \cdot \frac{4\pi^2 f^2}{c^2} \cdot \frac{2\pi}{c}}{\pi^2} df = \frac{8\pi \cdot a^3 \cdot f^2}{c^3} df . \quad (11.582)$$

Pro hustotu módů odtud plyne

$$g(f) = \frac{N(f)}{a^3} = \frac{8\pi \cdot f^2}{c^3} . \quad (11.583)$$

Celková energie záření připadající na jeden mód činí

$$E_n = n \cdot h \cdot f . \quad (11.584)$$

Rozdělení pravděpodobnosti energie jednoho módu v závislosti na teplotě dutiny je určeno Boseho – Einsteinovou statistikou:

$$P_f = C_n \cdot \exp\left(-\frac{E_n}{k \cdot T}\right) = C_n \cdot \exp\left(-\frac{n \cdot h \cdot f}{k \cdot T}\right) , \quad (11.585)$$

kde  $k$  je Boltzmannova konstanta a  $C_n$  je tzv. normovací konstanta. Součet energie záření přes všechny módy zřejmě tvoří geometrickou řadu, takže platí

$$\sum_{n=0}^{\infty} P_f(n) = \frac{C_n}{1 - \exp\left(-\frac{h \cdot f}{k \cdot T}\right)} = 1 . \quad (11.586)$$

Střední hodnota energie fotonů rovnovážného záření emitovaných do jednotlivých módů dutinového rezonátoru pak činí

$$\begin{aligned}\bar{E}_f &= \sum_{n=0}^{\infty} [P_f(n) \cdot E_n] = \\ &= \left[ 1 - \exp\left(-\frac{h \cdot f}{k \cdot T}\right) \right] \cdot h \cdot f \cdot \sum_{n=0}^{\infty} \left[ n \cdot \exp\left(-\frac{n \cdot h \cdot f}{k \cdot T}\right) \right].\end{aligned}\quad (11.587)$$

Označíme-li pro zjednodušení

$$\beta \equiv \frac{h \cdot f}{k \cdot T}, \quad (11.588)$$

potom můžeme řadu ( 11.587 ) snadno sečíst:

$$\begin{aligned}\sum_{n=0}^{\infty} [n \cdot \exp(-n \cdot \beta)] &= - \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{d\beta} [\exp(-n \cdot \beta)] = \\ &= - \frac{d}{d\beta} \sum_{n=0}^{\infty} e^{-n \cdot \beta} = - \frac{d}{d\beta} \frac{1}{1 - e^{-\beta}} = \frac{e^{-\beta}}{(1 - e^{-\beta})^2},\end{aligned}\quad (11.589)$$

odkud

$$\bar{E}_f = (1 - e^{-\beta}) \cdot \frac{h \cdot f \cdot e^{-\beta}}{(1 - e^{-\beta})} \cdot \frac{e^{\beta}}{e^{\beta} - 1} = \frac{h \cdot f}{e^{\beta} - 1}, \quad (11.590)$$

takže rozdělení intenzity vyzařování v závislosti na teplotě a frekvenci udává funkce

$$u_f(T, f) = g(f) \cdot \bar{E}_f = \frac{8 \cdot \pi \cdot f^2}{c^3} \cdot \frac{h \cdot f}{\exp\left(\frac{h \cdot f}{k \cdot T}\right) - 1} df. \quad (11.591)$$

Protože platí ( 11.577 ), tj.



$$df = \frac{f^2}{c} d\lambda; \quad \frac{f^3}{c^3} = \frac{1}{\lambda^3}, \quad (11.592)$$

platí rovněž

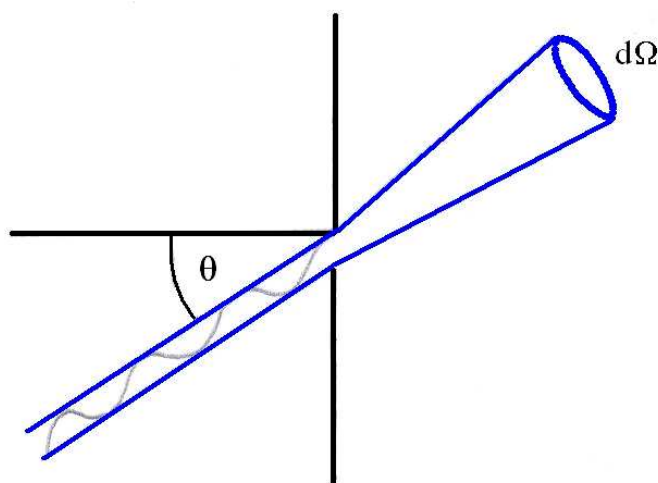
$$u_\lambda(T; \lambda) = \frac{8\pi \cdot h}{\lambda^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{kT \cdot \lambda}} - 1} \cdot \frac{c}{\lambda^2} d\lambda = \frac{8\pi \cdot h \cdot c}{\lambda^5} \cdot \frac{1}{e^{\frac{hc}{kT \cdot \lambda}} - 1} d\lambda. \quad (11.593)$$

nyní již můžeme vypočítat distribuční funkci pro hustotu energie vyzařované absolutně černým tělesem, v závislosti na teplotě rezonátoru.

**Měrnou zářivost** dutiny udává vztah (viz obr. 11.43)

$$L d\Omega = a \cdot u \cdot c \cdot \cos\theta d\Omega. \quad (11.594)$$

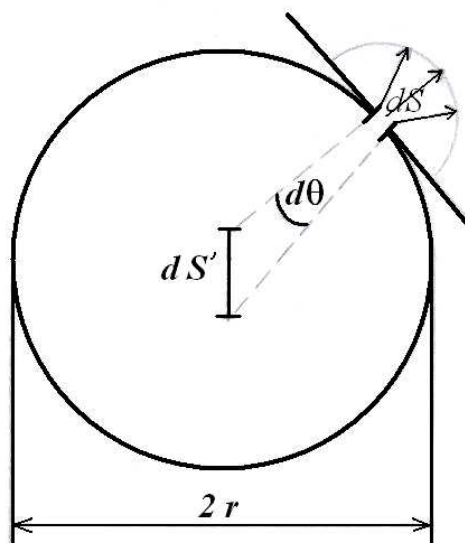
Obr. 11.43



Diferenciál výkonu vyzařovaného dutinou z plochy  $dS'$  štěrbinou  $dS$  pak činí (viz obr. 11.44)

$$dP = L d\Omega dS = L \frac{dS'}{r^2} dS. \quad (11.595)$$

Obr. 11.44



Odtud pro diferenciál intenzity vyzařování plyne

$$du = \frac{1}{c} \cdot \frac{dP}{dS} = \frac{L}{c \cdot r^2} dS . \quad (11.596)$$

**Intenzita vyzařování absolutně černého tělesa z celého jeho povrchu tedy bude**

$$u = 4\pi \cdot r^2 \cdot \frac{L}{c \cdot r^2} = \frac{4\pi \cdot L}{c} , \quad (11.597)$$

odkud plyne vyjádření měrné zářivosti ve tvaru

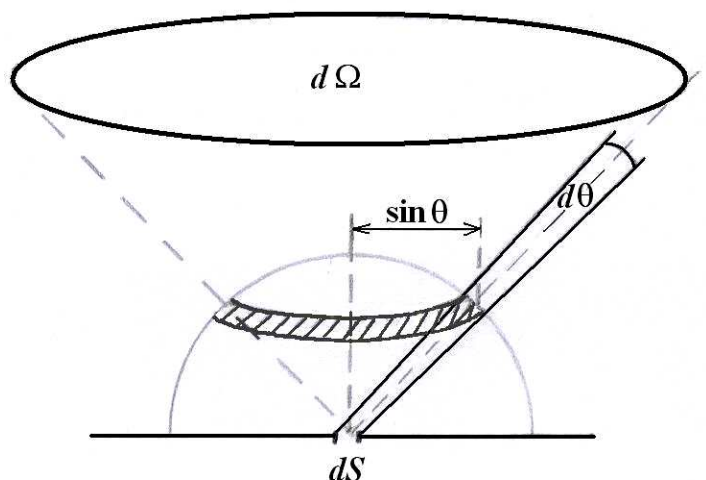
$$L = \frac{u \cdot c}{4\pi} . \quad (11.598)$$

podle obr. 11.45 vypočteme úhel  $d\Omega$ :

$$d\Omega = 2\pi \cdot \sin\theta d\theta , \quad (11.599)$$

kde  $\theta \in (0; \pi/2)$

Obr. 11.45



Dosazením ( 11.594 ) do ( 11.595 ) dostaneme pro diferenciál **zářivého výkonu** vyjádření

$$dP = S \cdot L \cdot \cos \theta \, d\Omega , \quad ( 11.600 )$$

odkud integrací plyne

$$P = 2\pi \cdot S \cdot L \cdot \int_0^{\pi/2} \cos \theta \cdot \sin \theta \, d\theta = \pi \cdot S \cdot L . \quad ( 11.601 )$$

Hledané vyjádření **hustoty vyzařované energie** pak zní

$$H_\lambda(T, \lambda) = \frac{P}{S} = \pi \cdot L(T, \lambda) . \quad ( 11.602 )$$

Srovnáním ( 11.602 ) a ( 11.597 ) dospíváme ke tvaru pro intenzitu

$$u = \frac{4}{c} \cdot H_\lambda , \quad ( 11.603 )$$

a srovnáním ( 11.603 ) a ( 11.593 ) získáme konečné vyjádření hustoty energie vyzařované absolutně černým tělesem:

$$H_{\lambda} = \frac{u \cdot c}{4} = \frac{2\pi \cdot h \cdot c^2}{\lambda^5 \left[ \exp\left(\frac{h \cdot c}{\lambda \cdot k \cdot T}\right) - 1 \right]} . \quad (11.604)$$

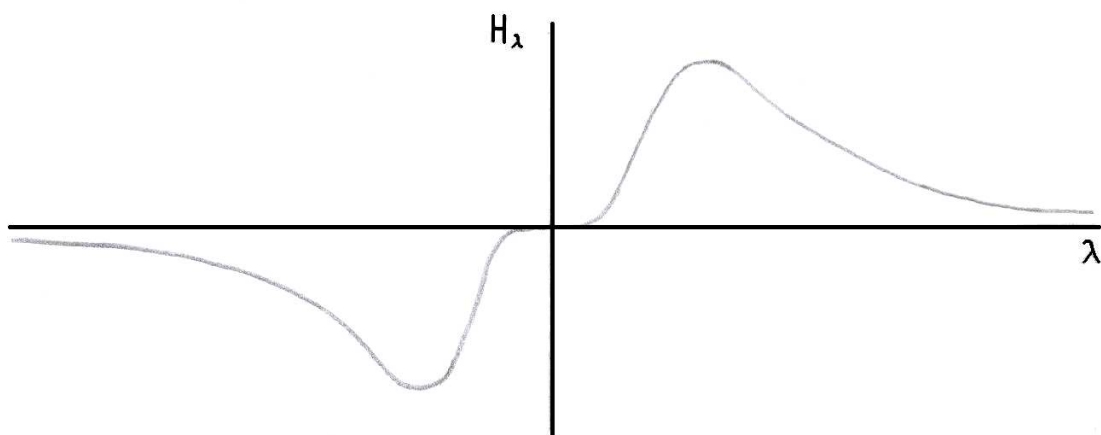
největší vadou na kráse tohoto vztahu je jeho výrazná asymetrie vůči inverzi času a termodynamické teploty.

Z hlediska cytu totiž musí energie záření pro kladné teploty ležet v prvním kvadrantu, zatímco pro teploty záporné v kvadrantu čtvrtém. Z hlediska paracytu to bude kvadrant druhý pro kladné teploty a třetí pro teploty záporné.

Úplně symetrický tvar Planckova vyzařovacího zákona tedy získáme drobnou úpravou vztahu ( 11.604 ) do finální podoby

$$H_{\lambda} = \frac{2\pi \cdot h \cdot c^2 \cdot T}{\lambda^5 \cdot |T| \cdot \left[ \exp\left(\frac{h \cdot c}{k \cdot |T \lambda|}\right) - 1 \right]} . \quad (11.605)$$

Obr. 11.46



## Verlindeova teorie gravitace

V létě roku 2009 použil Erik Verlinde teorii cytoprostoru k rozpracování konceptu gravitace jako entropické síly, který v lednu 2010 publikoval. Jeho článek ukazuje, že gravitaci (Newtonovu i Einsteinovu) lze odvodit ze statistického chování mikroskopických objektů, aniž by mezi nimi nějaká síla vůbec působila. Gravitaci tak popsal jako emergentní sílu.



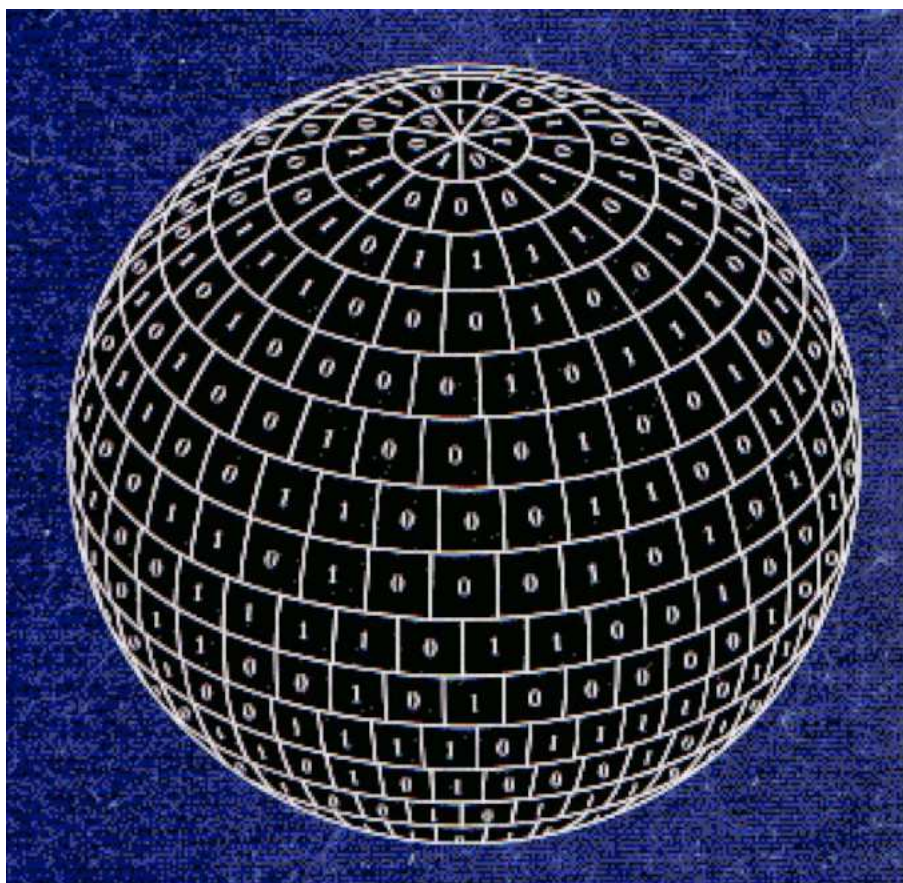
**Erik Peter Verlinde (1962)**

Když rozbijeme v místnosti lahvičku s voňavkou, ucítíme ji po chvíli v celé místnosti. Je to způsobeno difúzí, při které se molekuly vůně pohybují chaoticky a postupně se šíří prostorem. Dokonce lze zavést tzv. termodynamickou sílu (je úměrná gradientu koncentrace vůně), která je z makroskopického hlediska za šíření vůně zodpovědná. Původ této síly je v růstu entropie na mikroskopické úrovni a jde o typický příklad entropické síly. Erik Verlinde založil svou teorii gravitace na dvou předpokladech:

1. **V mikrosvětě platí holografický princip.** K primárním pojmům patří informace (entropie) lokalizovaná na hranici určité malé oblasti. Můžeme vyjít z představy, že svět malých rozměrů je rozdělen na cytoprostorové buňky, na jejichž hranicích (holografickém plátně) je nesena informace o vlastnostech jejich nitra. Existence prostoru a času uvnitř je důsledkem informace na povrchu buňky (jde o zásadní odlišnost od obecné relativity, kde jsou zdrojem času a prostoru tělesa

samotná). Mikrosvět je na elementární úrovni tvořen prostorovou mřížkou základních buněk (tzv. pixelizace světa). Na jejich tvaru nezáleží, podstatné je, že veškerá informace je uložena na hranicích buněk.

2. **V mikrosvětě platí druhá věta termodynamická**, tj pohyb částic způsobuje růst entropie na hranicích buněk (těm je přiřazena entropie a teplota). Pokud se částice v blízkosti stěny (holografického plátna) pohne o  $\Delta x$ , způsobí změnu entropie stěny o  $\Delta S$ . Na částici přitom působí síla daná energetickou bilancí  $T\Delta S = F\Delta x$ . V případě uzavřeného holografického plátna je tato entropická síla gravitací.



11.47: Informace lokalizovaná na hranici prostoru

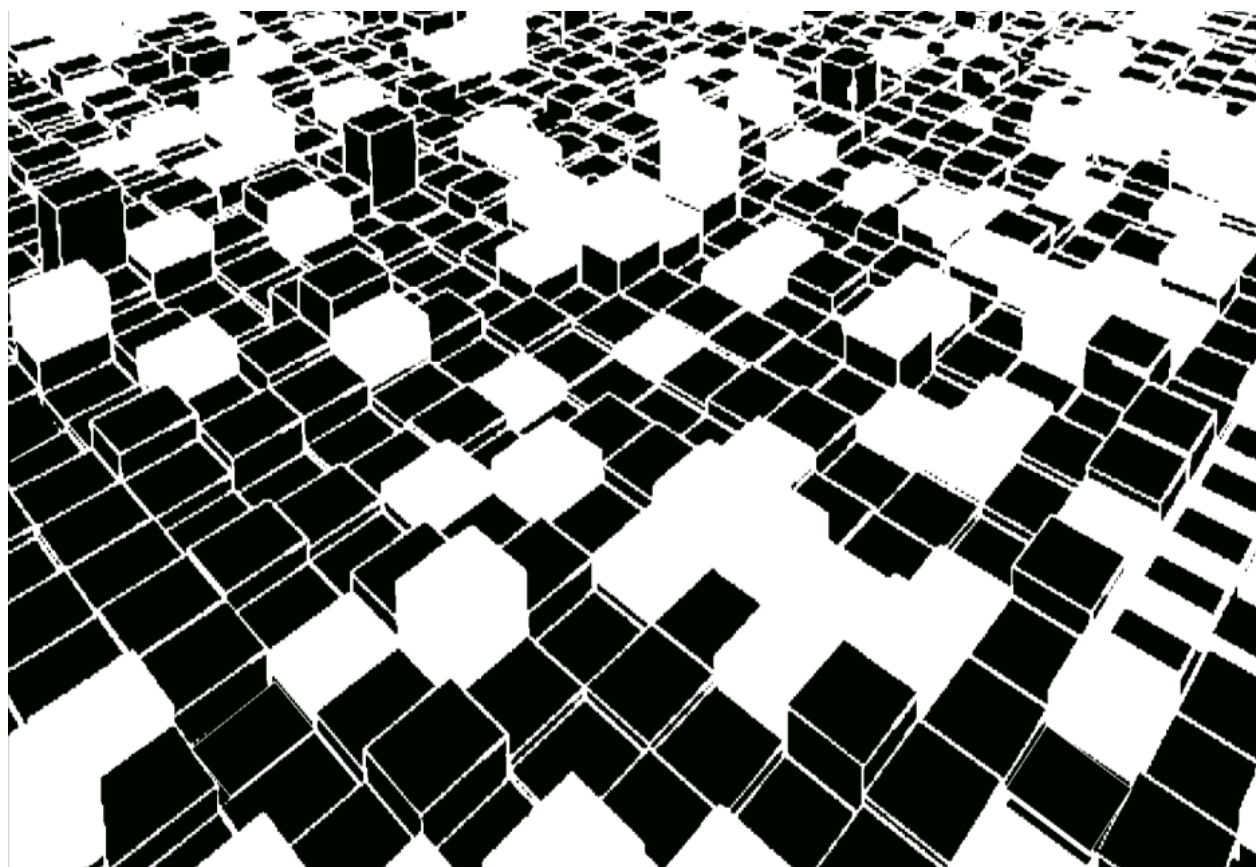
Verlindeovo pojetí řeší zcela neobvykle existenci prostoru a času. Prostor a čas se automaticky vynoří v důsledku existence informace (entropie) na uzavřeném holografickém plátně (hranici oblasti). Stejně tak jako vznikne prostor a čas, je i zákon setrvačnosti důsledkem existence informace na hranici oblasti. Verlinde ukázal, že růst

entropie v jeho holografickém světě vede na gravitační sílu (ať v Newtonově nebo v Einsteinově pojetí). Gravitační sílu tak chápe jako entropickou sílu, což znamená, že gravitace jakožto primární interakce neexistuje, je jen důsledkem statistického chování objektů mikrosvětla, stejně jako síla elastická. Základním vztahem pro entropickou sílu je energetická bilance

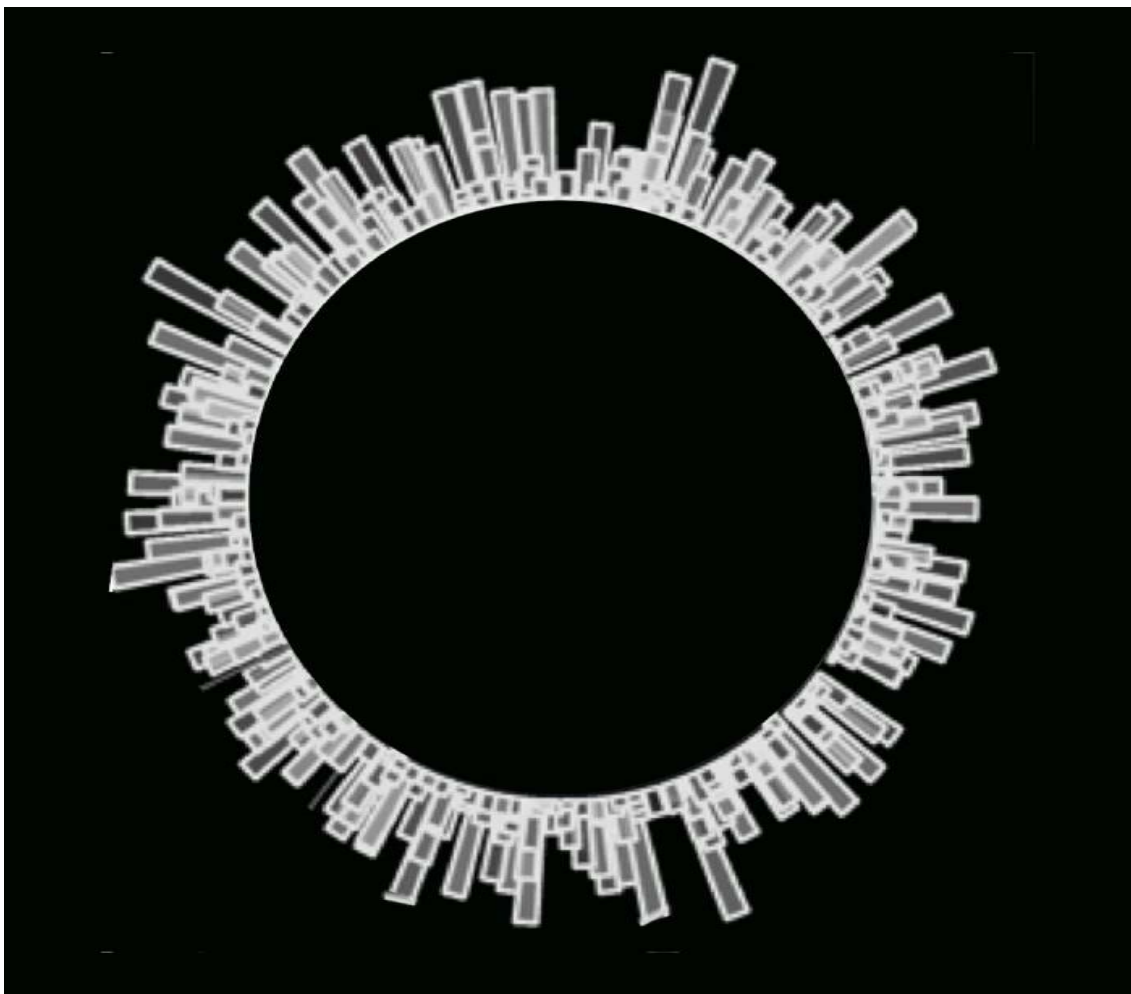
$$T\Delta S = F\Delta x. \quad ( 11.606 )$$

kde  $T\Delta S$  je v klasické termodynamice tepelná energie,  $F\Delta x$  je práce vykonaná při pohybu částice.

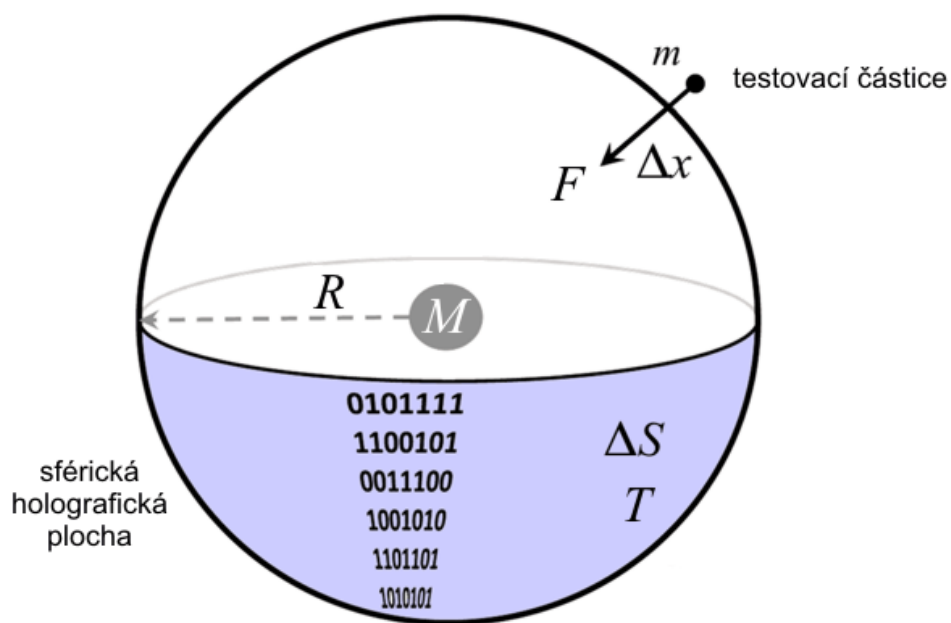
Předpokládejme nyní, že prostoročas není spojitý, ale je tvořen celulární sítí cytoprostorových buňek o Planckových rozměrech, jejichž povrch tvoří tzv. **holografické plátno**, na nějž se promítají veškeré informace z nitra buňky (holografický princip).



11.48: Informace lokalizovaná na hranici prostoru – 2D model



11.49: Povrch sférického subchronoru jako hologram



Obr. 11.50: Verlindeova holografická plocha



Informací na povrchu buňky jsou určeny vlastnosti prostoru a času a také rozložení hmoty  $M$  uvnitř buňky. Necht' se v blízkosti buňky pohybuje malá testovací částice o hmotnosti  $m$ . V důsledku jejího pohybu se změní entropie buňky o

$$\Delta S \sim m\Delta x. \quad (11.607)$$

Změna entropie je úměrná hmotnosti částice (dělením větší hmoty získáme více informace) a velikosti posunu částice. Teplotu povrchu sféry určíme z následující úvahy. Energie hmoty uvnitř musí být dána ekvipartičním teorémem, tj

$$Mc^2 = \frac{Nk_B T}{2}, \quad (11.608)$$

kde  $N$  je počet informačních bitů úměrný ploše holografického plátna, tedy  $R^2$ . Odsud máme:

$$T \sim \frac{M}{R^2}. \quad (11.609)$$

Prostým dosazením ( 11.608 ) a ( 11.609 ) do Verlindeovy formule pro entropickou sílu ( 11.606 ) máme okamžitě

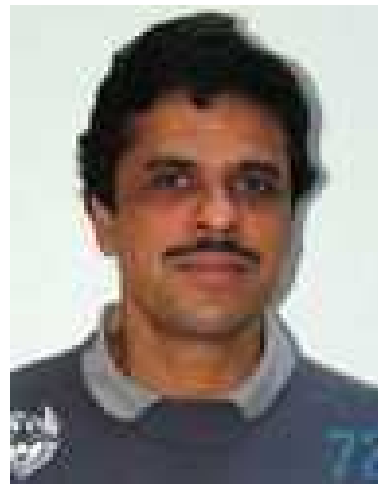
$$F \sim \frac{Mm}{R^2}, \quad (11.610)$$

tedy Newtonův gravitační zákon. Nikde jsme přitom nepředpokládali, že by na mikroskopické úrovni existovala gravitační síla. Gravitační síla se vynořila z informace uložené na povrchu holografického plátna spolu s časem, prostorem i zákonem setrvačnosti.

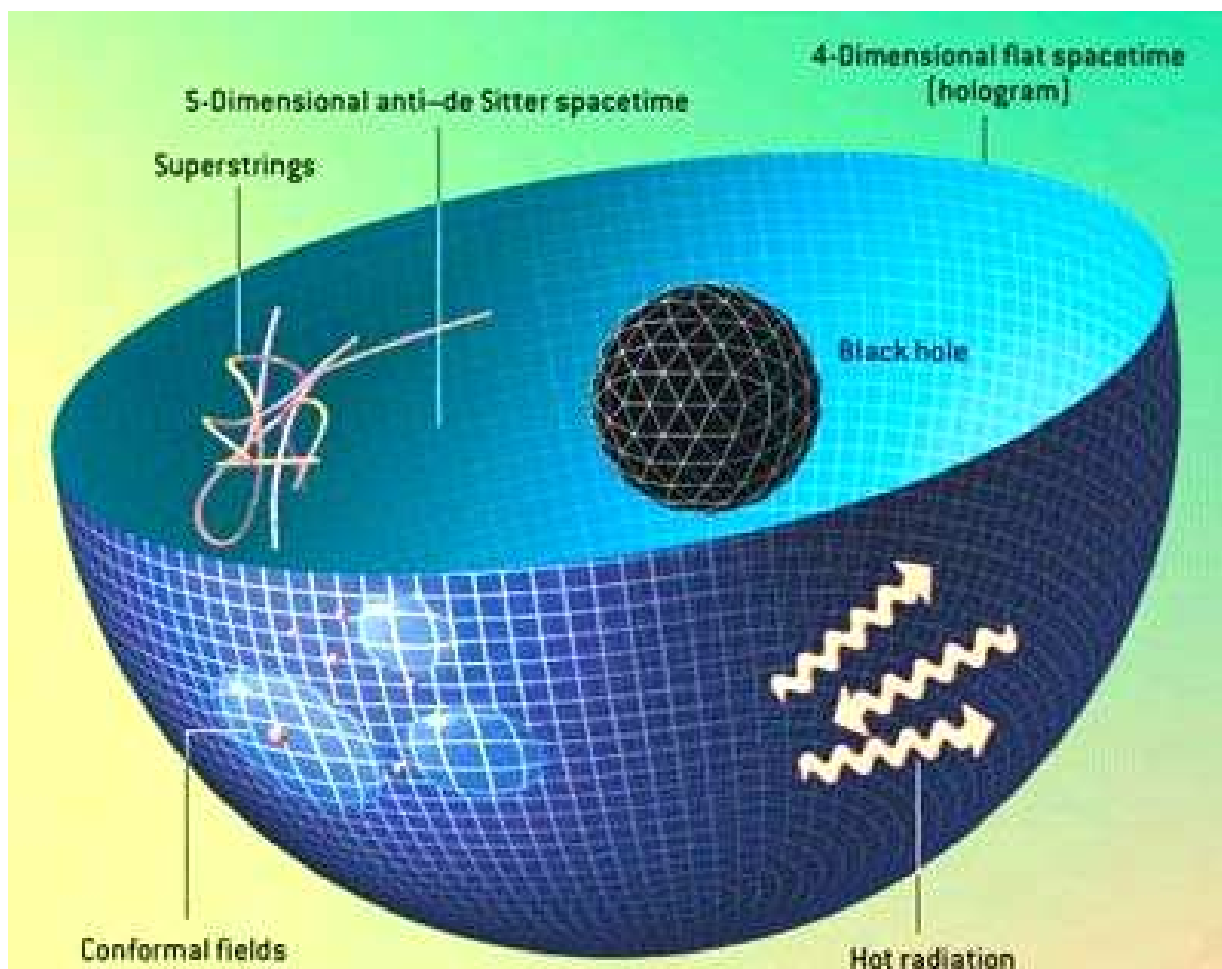
V únoru 2011 se britským fyzikům a odborníkům na kvantovou teorii informace Samuelu Braunsteinovi a Manasu Patrovi z Univerzity v Yorku podařilo na základě Verlindeových myšlenek odvodit spektrum Hawkingova vypařování černých děr bez použití časoprostoru zakřiveného obecnou relativitou. Publikovaný článek výrazně zdvihl vlnu zájmu o Verlindeovo pojetí gravitace.



**Samuel Leon Braunstein (1961)**



**Manas Kumar Patra (1978)**



**Obr. 11.51: Havkingovo záření z Verlindeovy teorie gravitace**

## Gravitační konstanta

Podívejme se nyní, zda stacionární teorie cytoprostoru dokáže stanovit rovněž i správnou velikost konstanty úměrnosti ve vztahu ( 11.610 ) a tedy předpovědět správně nejen funkční závislost, ale i skutečnou velikost gravitační síly.

Vztah ( 11.608 ) nejprve přepíšeme do tvaru

$$T = \frac{2Mc^2}{Nk_B}. \quad ( 11.611 )$$

Z formulí ( 11.611 ), ( 11.607 ), ( 11.606 ) pak plyne rovnost

$$F = \frac{2Mc^2}{Nk_B} \frac{\Delta S}{\Delta x} = \frac{2Mc^2}{Nk_B} \frac{m\Delta x}{\Delta x} = \frac{2mMc^2}{Nk_B} \equiv \frac{GmM}{R^2}. \quad ( 11.612 )$$

Srovnáním ( 11.134 ), ( 11.135 ), ( 11,136 ) plyne pro poloměr vesmíru  $r$  vztah

$$r = \sqrt{\frac{3c^2}{8\pi\rho_v G}}. \quad ( 11.613 )$$

Použitím rovnosti

$$R = 2\sqrt{2} \cdot r, \quad ( 11.614 )$$

plynoucí z geometrie kubického subchronoru, dostáváme výraz ( 11.125 ), který jsme původně pouze postulovali. Dosazením z ( 11.134 ), ( 11.144 ), do ( 11.145), máme

$$N = \frac{8m_v}{m_y} = \frac{32rz^5}{5\sqrt{2}} \sqrt{\frac{\pi c^3}{Gh}}, \quad ( 11.615 )$$

odkud již, dosazením z ( 11.125 ) a ( 11.613 ), máme konečný výsledek

$$G = \frac{2R^2 c^2}{Nk_B} = \frac{5}{4\pi k_B z^5} \sqrt{\frac{3hc^3}{\rho_v}}. \quad (11.616)$$

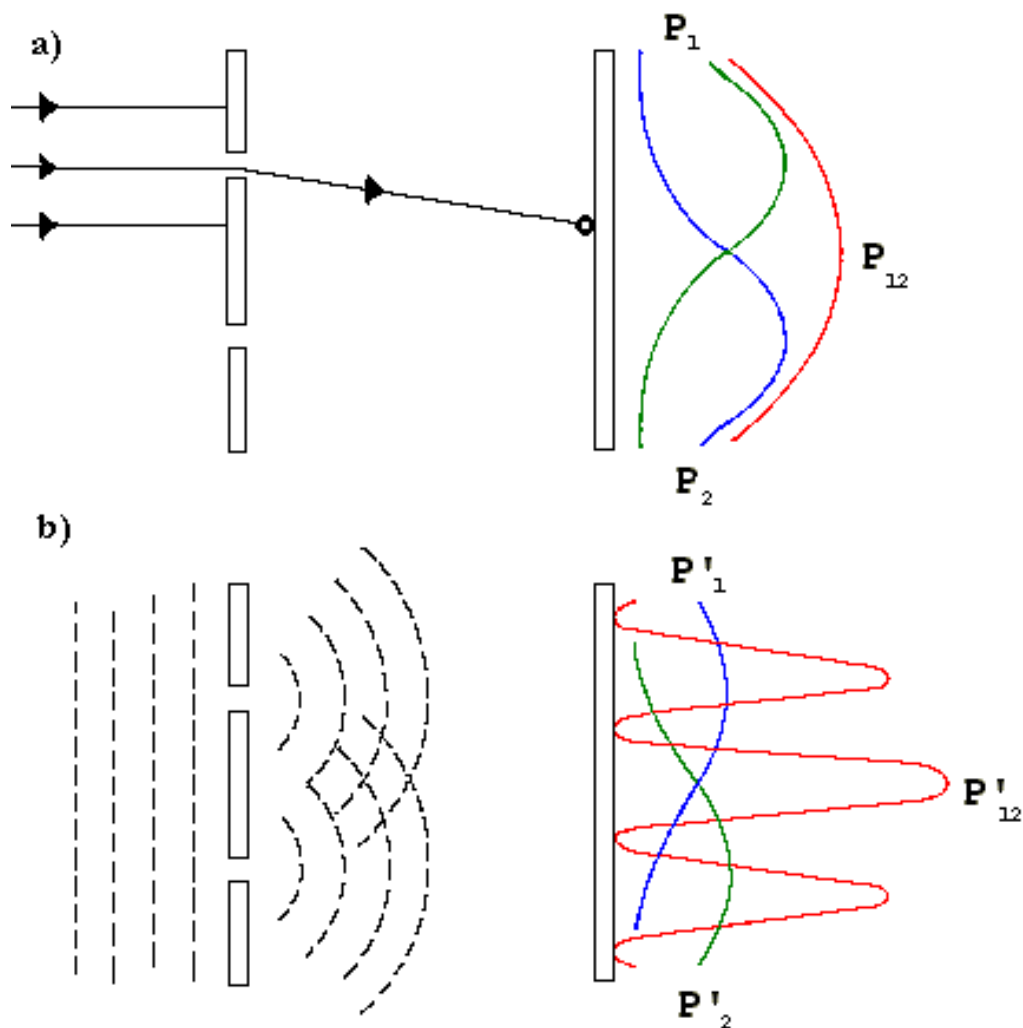
Povšimněme si závislosti gravitační konstanty na aktuální hustotě hmoty ve vesmíru, která odpovídá přibližně jednomu protonu na krychlový metr.

## Úvod do nestacionární teorie Cytoprostoru

### Kvantová mechanika

#### Dvoušterbinový experiment

Experimenty, o nichž zde nyní budeme hovořit, představují moderní rafinované verze klasického interferenčního **Youngova experimentu se dvěma šterbinami**, kterým na počátku devatenáctého století demonstroval Thomas Young, že světlo se při svém šíření chová jako vlnění a nikoli jako proud částic (korpusek), jak se domníval Newton (Interferenci na dvojšterbině ovšem pozoroval již F. M. Grimaldi a popsal ji ve svém díle "Fyzika světla, barev a duhy" vydaném roku 1665).



Obr. 12.1: Schematické znázornění pokusu se dvěma šterbinami: a) pro klasické částice, b) pro klasické vlny.



Francesco Maria Grimaldi (1618 – 1663)



Thomas Young (1773 – 1829)

Jedná se vlastně o jednoduchý experiment, při němž postupně vysíláme velké množství fyzikálních objektů téhož druhu proti přepážce, v níž jsou dva podélné otvory – štěrbin. Ty objekty, které štěrbinami projdou, jsou jimi ovlivněny a následně dopadnou na stínítko. Zde je místo dopadu každého objektu zaznamenáno. Získáme tak rozložení pravděpodobnosti, se kterou objekty na to které místo stínítka dopadají. Provedeme-li pokus s klasickými částicemi (např. s malými pevnými kuličkami), získáme rozložení pravděpodobnosti naznačené křivkou  $P_{12}$  na obr. 12.1a. Její tvar nepřekvapuje – je "hladký" s jediným maximem na ose a je prostým součtem obou jednošterbinových pravděpodobností  $P_1$  a  $P_2$  popisujících situaci, kdy vždy jednu z obou štěrbin zakryjeme. Provedeme-li naopak tentýž pokus s klasickými vlnami (např. v nádobce s vodou, jejíž hladinu na jedné straně od přepážky rozvlníme a na druhé straně v místě stínítka její maximální výšku v každém bodě proměřujeme), dostaneme naprosto odlišný výsledek naznačený křivkou  $P'_{12}$  na obr. 12.1b. Křivka není v tomto případě prostým součtem obou jednošterbinových rozložení  $P'_1$  a  $P'_2$ . Má více maxim a minim. Hovoříme o tzv. interferenci – vzájemném "ovlivňování" či "rušení". Interference je způsobena tím, že se v daném místě stínítka setkávají dvě vlny od obou štěrbin v různé fázi: maximum vzniká tam, kde se setkají dva "vrcholy" vln a minimum tam, kde se setká "vrchol" a "údolí". Je to právě tento **interferenční efekt, který ve dvojšterbinovém experimentu odlišuje vlny od částic**. Otázka po povaze objektů

mikrosvěta tedy vlastně zní : naměříme při dvojštěrbinovém experimentu s nimi rozložení pravděpodobnosti s interferenčními jevy nebo bez nich?



**Lester Germer (1896-1971, vlevo); Clinton Davisson (1881-1958, vpravo)**

Velikým překvapením, které přinesly difrakční pokusy Davissona a Germera ve dvacátých letech minulého století, bylo právě to, že elektrony, tedy něco, co bychom si chtěli představit jako malé kuličky, vykazovaly ve dvojštěrbinovém experimentu interferenční jevy, což se nedávno potvrdilo i přímými experimenty. I světlo je všeobecně považováno za ukázkový příklad vlnění, které může interferovat a které se šíří prostorem, aniž by při tom zaujímalo jakoukoli konkrétní polohu. Interferenční obrazec se přitom vytvoří i v tom případě, kdy zeslabíme intenzitu vysílaného světla natolik, že se v daném okamžiku bude v zařízení nacházet vždy jen jediný foton. To jasně dokazuje, že světlo, reprezentované po dopadu na stínítko jediným fotonem, nutně muselo interferovat pouze samo se sebou a projít tedy "oběma štěrbinami" současně.

To však platí jen do okamžiku, než jeho polohu začneme experimentálně zjišťovat například umístěním dodatečných detektorů v blízkosti štěrbin. Světlo se ihned přestane chovat jako vlnění a začne se projevovat jako "částice" – fotony: interferenční obrazec se již nebude vytvářet.

Souhrem lze říci (a veškeré doposud provedené experimenty to plně potvrzují), že v "čistém" pokusu se dvěma štěrbinami vždy pozorujeme interferenční rozložení míst dopadu (naznačené na obr. 12.1b.) – mikroobjekty se v tomto případě chovají jako **vlnění**, ať už jde o fotony, elektrony, neutrony, atomy atd. Jestliže však experiment navíc **doplňme libovolným detektorem** umožňujícím určit, kterou z obou štěrbin zkoumaný objekt prošel (t.j. získat informaci o realizované cestě), interferenční efekty zmizí a naměříme prosté **částicové** rozložení pravděpodobnosti dopadu (viz. obr. 12.1a).

Do formalismu kvantové teorie je zmíněné chování zabudováno prostřednictvím následujících tří pravidel:

1. Pravděpodobnost  $w$  dopadu na určité místo stínítka je dána

$$w = \langle \psi | \psi \rangle. \quad (12.1)$$

2. Může-li proces proběhnout přes několik **nerozlišitelných** mezistavů (zde představovaných průchody dvěma různými štěrbinami), pak se aditivně sčítají dílčí **vlnové funkce**. V našem případě je  $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$ , kde  $|\psi_1\rangle$  resp.  $|\psi_2\rangle$  jsou vlnové funkce odpovídající průchodu jen horní resp. jen dolní štěrbinou. V důsledku toho je (nenormovaná) pravděpodobnost dána

$$w = (\langle \psi_1 | + \langle \psi_2 |)(|\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle) = w_1 + w_2 + \langle \psi_1 | \psi_2 \rangle + \langle \psi_2 | \psi_1 \rangle. \quad (12.2)$$

Poslední dva "smíšené" členy popisují interferenci.

3. Jsou-li **mezistavy navzájem v principu rozlišitelné** (t.j. jsme-li v experimentu schopni určit, která z alternativ mezistavů nastala), sčítají se aditivně samy dílčí **pravděpodobnosti**, nikoli vlnové funkce, t.j.

$$w = w_1 + w_2. \quad (12.3)$$

Podle klasické mechaniky lze jednoznačně předpovědět výsledek libovolného měření provedeného na systému  $N$  hmotných bodů

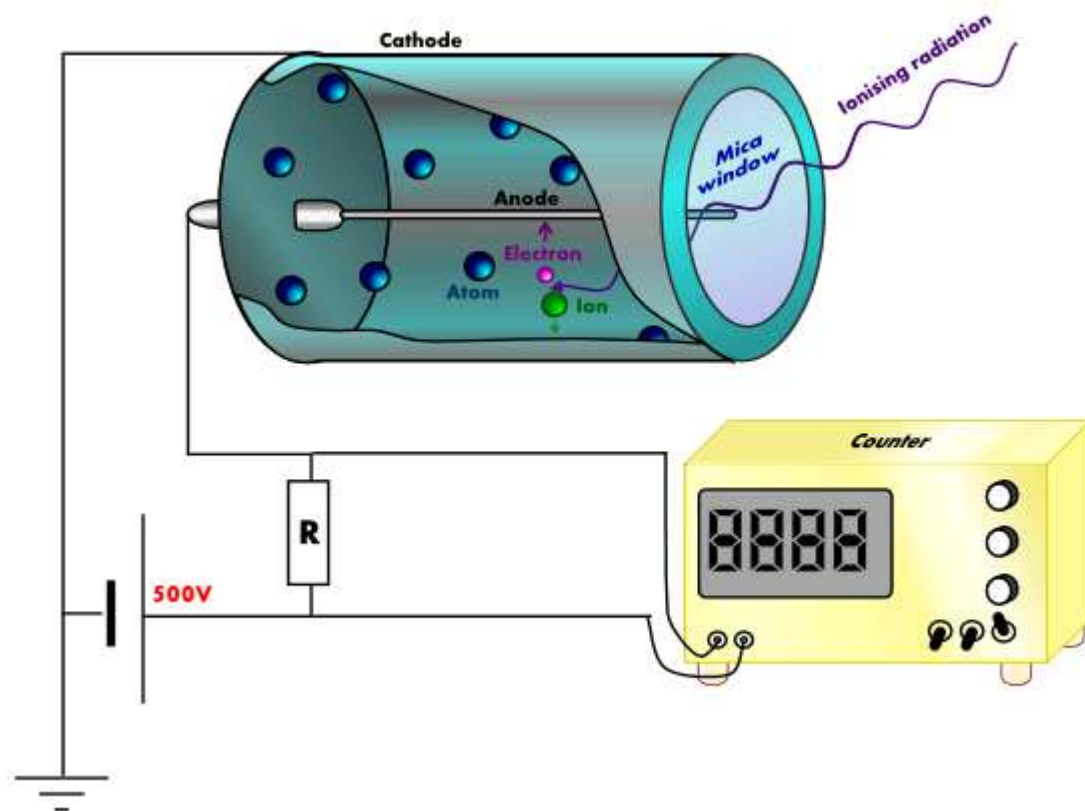


v okamžiku  $t$ , jsou-li známy hodnoty všech  $3N$  souřadnic a jim sdružených  $3N$  impulsů v témže okamžiku. Proto můžeme v rámci klasické mechaniky tvrdit, že stav soustavy hmotných bodů v okamžiku  $t$  známe, jestliže známe hodnotu všech souřadnic a impulsů v tomtéž okamžiku. Stav studované soustavy je dán tedy výsledkem všech nezávislých měření provedených na soustavě v uvedeném okamžiku.

Princip neurčitosti však vylučuje možnost provedení současného měření nekomutujících veličin částice s neomezenou přesností. Stav mikrosystému tedy výše uvedeným klasickým způsobem popsat nelze. Abychom mohli prohlásit, že uvažovaný systém se nalézá v určitém stavu, musíme současně určit hodnotu všech nezávislých veličin, jež jsou navzájem kompatibilní. Tyto veličiny tvoří tzv. **úplnou množinu pozorovatelných** (ÚMP). Pro daný systém však existuje celá řada různých ÚMP.

Jelikož kompatibilita je vlastnost vzájemná (je-li  $A$  kompatibilní s  $B$ , je také  $B$  kompatibilní s  $A$ ), jsou kompatibilní veličiny současně měřitelné. Kompatibilita však není vlastností tranzitivní, takže je-li  $A$  kompatibilní s  $B$  a  $B$  kompatibilní s  $C$ , není tím automaticky zaručena kompatibilita  $A$  s  $C$ .

Představme si zařízení zvané separátor  $S_{\{A\}}$ , které má tu vlastnost, že měřením ÚMP $\{A\}$  provedeným na systému prošlém jeho  $j$ -tým kanálem dá vždy vlastní hodnotu  $\{a\}_j$ . Separátorem může být např. zařízení sestávající ze separačního magnetu, který rozdělí protony vyletující z urychlovače podle jejich impulsů, doplněného o magnetickou čočku, která opět všechny fotony vrátí do společného svazku. Separátor sám o sobě nedovoluje určit, kterým z jeho kanálů systém prošel. K tomu je potřeba jej doplnit registračním přístrojem  $R_{\{A\}}$ . Tím může být např. soustava Geiger-Mülerových počítaců umístěných mezi separačním magnetem a čočkou. Jestliže víme který počítač pracoval, známe impuls protonu za separátorem. Nahradíme-li soustavu Geigerů clonami, obdržíme tzv. filtr. Soustava aparatur  $S_{\{A\}} + R_{\{A\}}$  představuje měřicí přístroj  $M_{\{A\}}$ .



Obr. 12.2: Schéma Geiger – Müllerova počítače



Hans "Gengar" Geiger (1882 – 1945)



Walther Müller (1905 – 1979)

Nahradíme-li separátor  $S_{\{A\}}$  clonamy, které uzavřou některé z kanálů, obdržíme filtr  $F_{\Sigma\{a\}}$ , kde suma probíhá přes všechny otevřené kanály tohoto zařízení. Filtr s jediným ( $j$ -tým) otevřeným kanálem nazýváme **filtrem s ideální rozlišovací schopností** a budeme jej značit  $F_{\{a\}_j}$ .

Výsledkem měření  $\dot{U}MP\{A\}$  provedeného na systému prošlém filtrem

$F_{\{a\}_j}$  je tedy vlastní hodnota  $\{a\}_j$ . Studovanému systému přiřadíme hilbertův prostor  $H$ . Filtru  $F_{\{a\}_j}$  přiřadíme projekční operátor  $\hat{P}_{\{a\}_j}$ , který projektuje do jednorozměrného podprostoru generovaného normalizovaným vektorem  $|\{a\}_j\rangle$ , tj.

$$\hat{P}_{\{a\}_j} = |\{a\}_j\rangle\langle\{a\}_j|. \quad (12.4)$$

Systému prošlému filtrem  $F_{\{a\}_j}$  přiřadíme paprsek určený vektorem  $|\{a\}_j\rangle$ . Říkáme, že uvažovaný systém se nalézá ve vlastním stavu  $\{A\}$  příslušném vlastní hodnotě  $\{a\}_j$  nebo stručněji, ve stavu  $|\{a\}_j\rangle$ .

Paprsek, určený vektorem  $|\{a\}_j\rangle$  je tedy zobrazením informace o studovaném systému, získané pomocí makroskopických přístrojů. Projekční operátor (12.4) přiřazený filtru  $F_{\{a\}_j}$  popisuje tuto

aparaturu pouze z hlediska její odezvy na studovaný systém. Témuž filtru, užijeme-li jej pro studium různých kvantových systémů, budou přiřazeny různé projekční operátory. Vlastním stavům  $\{A\}$  příslušným k vlastní hodnotám musíme přiřadit různé paprsky, jinak by náš popis neumožňoval rozlišení mezi stavy. Budeme dokonce uvažovat, aby tyto paprsky byly ortogonální:

$$\langle\{a\}_i|\{a\}_j\rangle = \delta_{ij}. \quad (12.5)$$

Připomeňme, že všechny vektory  $\lambda|\{a\}_i\rangle$  s libovolným  $\lambda \neq 0$ , popisují tentýž stav. Z výše naznačené realizace měřícího přístroje ( $S_{\{A\}} + R_{\{A\}}$ ) je zřejmé, že systém připravený ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$  projde filtrem  $F_{\{a\}_j}$  tehdy a jen tehdy, platí li  $i = j$ . Tato skutečnost může být snadno vystižena v rámci zavedeného formalizmu. Vzhledem k (12.5) dostaneme jako výsledek působení operátoru (12.4),

přiřazeného filtru  $F_{\{a\}_j}$ , na vektor  $|\{a\}_i\rangle$  popisující stav systému vstupujícího do filtru, vektor

$$\hat{P}_{\{a\}_j} |\{a\}_i\rangle = \delta_{ij} |\{a\}_j\rangle. \quad (12.6)$$

Pro  $i = j$  je vektor na pravé straně nenulový a popisuje stav systému po průchodu filtrem. Koeficient stojící u normalizovaného vektoru  $|\{a\}_i\rangle$  je shodný s pravděpodobností, že systém filtrem  $F_{\{a\}_j}$  projde, a ta je identická s pravděpodobností, že při měření  $\{A\}$  ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$  bude nalezena hodnota  $\{a\}_j$ .

Uvažujme nyní ÚMP  $\{B\}$ . Pokud  $\{B\} \neq \{A\}$ , tj. některé pozorovatelné z  $\{B\}$  jsou nekompatibilní s  $\{A\}$ , nelze pro všechna  $\{a\}_i$  s určitostí předpovědět výsledek měření  $\{B\}$  ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$ . Jinak bychom současně uskutečnili přesné měření  $\{A\}$  i  $\{B\}$ . Pokusme se tedy nalézt alespoň pravděpodobnost jednotlivých možných výsledků. Např. určíme pravděpodobnost toho, že systém, připravený ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$  projde filtrem  $F_{\{b\}_j}$ . Aplikujeme-li odpovídající projekční operátor vektor popisující stav systému vstupujícího do filtru, dostaneme

$$\hat{P}_{\{b\}_j} |\{a\}_i\rangle = u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} |\{b\}_j\rangle. \quad (12.7)$$

Vektor na pravé straně (12.7) (pokud je nenulový) popisuje stav systému prošlého filtrem  $F_{\{b\}_j}$ . Komplexní číslo

$$u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} \equiv \langle \{b\}_j | \{a\}_i \rangle, \quad (12.8)$$

stojící u tohoto vektoru, však ještě nemůže představovat hledanou pravděpodobnost  $w$ . Tou je, jak víme, teprve kvadrát jeho absolutní hodnoty:

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} \equiv \left| u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} \right|^2 \equiv \left| \langle \{b\}_j | \{a\}_i \rangle \right|^2. \quad (12.9)$$

Veličinu  $u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j}$  nazýváme amplitudou pravděpodobnosti přechodu ze stavu  $|\{a\}_i\rangle$  do stavu  $|\{b\}_j\rangle$ .

Z formulí (12.8), (12.9) okamžitě dostáváme důležitou rovnost

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} = w_{\{b\}_j \rightarrow \{a\}_i}, \quad (12.10)$$

tj. pravděpodobnost, že při měření  $\{B\}$  ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$  bude nalezena hodnota  $\{b\}_j$ , je stejná, jako pravděpodobnost nalezení  $\{a\}_i$  při měření  $\{A\}$  ve stavu  $|\{b\}_j\rangle$ . Skutečnost, že při měření  $\{B\}$  s určitostí nalezneme některou z vlastních hodnot  $\{b\}_j$  je vyjádřena vztahem

$$\sum_j w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} = 1, \quad (12.11)$$

tj.

$$\sum_j \langle \{a\}_i | \{b\}_j \rangle \langle \{b\}_j | \{a\}_i \rangle = 1. \quad (12.12)$$

Vzhledem k libovolnému ketu  $|\{a\}_i\rangle$  (ÚMP $\{A\}$  jsme nikterak nespecifikovali) musí být

$$\sum_j |\{b\}_j\rangle \langle \{b\}_j| = 1, \quad (12.13)$$

což je známá relace uzavřenosti – formule důležitá nejenom pro matematickou konzistentnost kvantové teorie, ale i pro celou řadu praktických výpočtů. Umožňuje např. ihned napsat rozvoj vektoru  $|\{a\}_i\rangle$  podle ortonormální báze  $\{|\{b\}_j\rangle\}$  ve tvaru

$$|\{a\}_i\rangle = \sum_j \langle \{b\}_j | \{a\}_a \rangle |\{b\}_j\rangle = \sum_j u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} |\{b\}_j\rangle. \quad (12.14)$$

Z uvedeného je zřejmé, že pravděpodobnost ( 12.9 ) je totožná s kvadrátem normy vektoru ( 12.7 ) a tedy

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} = \left\| \hat{P}_{\{b\}_j} |\{a\}_i\rangle \right\|^2 = \langle \{a\}_i | \hat{P}_{\{b\}_j} | \{a\}_i \rangle. \quad (12.15)$$

Jak již bylo řečeno, můžeme vlastní stav  $\{A\}$  příslušný k vlastní hodnotě  $\{a\}_i$  popsat nejen normalizovaným vektorem  $|\{a\}_i\rangle$  ale stejně dobře i libovolným vektorem

$$|\{a\}'_i\rangle = \lambda |\{a\}_i\rangle, \quad \lambda \neq 0. \quad (12.16)$$

Místo vztahu ( 12.15 ) pak dostaneme

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} = \frac{\langle \{a\}'_i | \hat{P}_{\{b\}_j} | \{a\}'_i \rangle}{\langle \{a\}'_i | \{a\}'_i \rangle}. \quad (12.17)$$

Na druhé straně je odtud zřejmé, že vektory lineárně nezávislé na  $|\{a\}_i\rangle$  nemohou popisovat vlastní stav  $\{A\}$  příslušný vlastní hodnotě  $\{a\}_i$ . Vskutku, necht'  $|\psi\rangle \neq 0$  popisuje tento stav, potom z formule ( 12.17 ) pro  $\{A\} = \{B\}$ ,  $i = j$  dostáváme

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{a\}_i} = \frac{|\langle \psi | \{a\}_i \rangle|^2}{\langle \psi | \psi \rangle} \leq \frac{\langle \psi | \psi \rangle \langle \{a\}_i | \{a\}_i \rangle}{\langle \psi | \psi \rangle} = 1, \quad (12.18)$$

Kde jsme využili formuli ( 12.5 ) a Schwarzovu nerovnost.



**Karl Hermann Amandus Schwarz (1843 – 1921)**

Při měření  $\{A\}$  na systému prošlém filtrem  $F_{\{a\}_i}$  však s určitostí nalezneme vlastní hodnotu  $\{a\}_i$ , tj.

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{a\}_i} = 1. \quad (12.19)$$

Znaménko rovnosti v ( 12.18 ) platí právě tehdy, když  $|\psi\rangle$  a  $|\{a\}_i\rangle$  jsou lineárně závislé. Tento závěr platí pro libovolnou ÚMP, a tedy žádné dva lineárně nezávislé vektory z  $H$  nemohou zobrazovat tentýž stav. Filtru  $F_{\{b\}_j}$  jsme přiřadili operátor

$$\hat{P}_{\{b\}_j} = |\{b\}_j\rangle\langle\{b\}_j|. \quad (12.20)$$

Rozlišovací schopnost většiny v praxi používaných filtrů je však horší. Pokusme se filtru s konečnou rozlišovací schopností  $F_{\Sigma\{b\}_j}$  přiřadit nějaký operátor  $\hat{P}_{\Sigma\{b\}_j}$ , který by měl následující vlastnost: jestliže systém vstupuje do filtru  $F_{\Sigma\{b\}_j}$  ve stavu popsaném vektorem  $|\varphi\rangle$ , potom

$$w = \frac{\langle\varphi|\hat{P}_{\Sigma\{b\}_j}|\varphi\rangle}{\langle\varphi|\varphi\rangle} \quad (12.21)$$

A po jeho průchodu bude ve stavu

$$\hat{P}_{\Sigma\{b\}_j} |\varphi\rangle. \quad (12.22)$$

Uvažujme nejprve filtr s nekonečně špatnou rozlišovací schopností (separátor), tj. zařízení které má otevřené všechny kanály a přitom nedovede rozlišit, kterým z nich systém prošel. Pomocí takového přístroje nemůžeme získat žádnou informaci o studovaném systému, takže jeho přítomnost či nepřítomnost je zcela irelevantní.

Takovému filtru tedy odpovídá operátor identity. Díky relaci (12.13) můžeme tento operátor vyjádřit ve tvaru

$$\hat{P}_{\Sigma\{b\}_j} = \sum_j |\{b\}_j\rangle\langle\{b\}_j| = \sum_j \hat{P}_{\{b\}_j}, \quad (12.23)$$

Kde suma probíhá přes všechny otevřené kanály filtru. Je přirozené předpokládat, že formule (12.23) platí i v případě filtru s libovolnou rozlišovací schopností. Naznačené sumy pak ovšem probíhají pouze přes ty vlastní hodnoty  $\{b\}_j$ , které odpovídají jeho otevřeným

kanálům. Ukažme, že takto definovaný operátor má sutečně vlastnosti vhodné k popisu filtru. Operátory přiřazené filtrům s ideální, stejně jako s nekonečně špatnou rozlišovací schopností, jsou zahrnuty ve vztahu (12.23) jako speciální případy. Díky ortonormalitě vektorů  $|\{b\}_j\rangle$  je operátor (12.23) projekčním, a tedy platí

$$\hat{P}_{\Sigma\{b\}_j}^2 = \hat{P}_{\Sigma\{b\}_j}, \quad (12.24)$$

Což zaručuje, že filtr vždy propustí systém prošlý stejným filtrem. Tuto vlastnost má každý filtr nezávisle na rozlišovací schopnosti – právě ona opravňuje užívání termínu „filtr“.

Ukažme, že i další vlastnosti operátoru (12.23) odpovídají experimentální skutečnosti. Nechť systém vstupuje do filtru ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$ . Podle (12.21), (12.22) je stav systému prošlého uvažovaným filtrem popsán vektorem

$$|\psi\rangle \equiv \hat{P}_{\Sigma\{b\}_j} |\{a\}_i\rangle. \quad (12.25)$$



Kvadrát jeho normy udává pravděpodobnost, že k tomuto přechodu dojde:

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \Sigma\{b\}_j} = \left\langle \{a\}_i \left| \hat{P}_{\Sigma\{b\}_j} \right| \{a\}_i \right\rangle. \quad (12.26)$$

Ket  $|\psi\rangle$  ve formuli ( 12.25 ) závisí na otevřených kanálech  $|\{b\}_j\rangle$  a (s výjimkou filtru s ideální rozlišovací schopností) také na počátečním stavu  $|\{a\}_i\rangle$ . Zatímco tedy stav systému připraveného filtrem s ideální rozlišovací schopností je jednoznačně určen filtrem samotným, v případě filtru s konečnou rozlišovací schopností již tomu tak není. Jest to přirozeným důsledkem skutečnosti, že pouze měření pomocí přístroje s ideální rozlišovací schopností poskytuje maximální možnou informaci o studovaném systému. Uvedená interpretace vektoru ( 12.25 ) není použitelná v případě  $|\psi\rangle = 0$ . To ovšem nevadí, neboť v tomto případě systém nikdy filtrem neprojde (viz ( 12.26 )).

Z formulí ( 12.15 ), ( 12.23 ), ( 12.26 ) vidíme, že

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \Sigma\{b\}_j} = \sum_j w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j}. \quad (12.27)$$

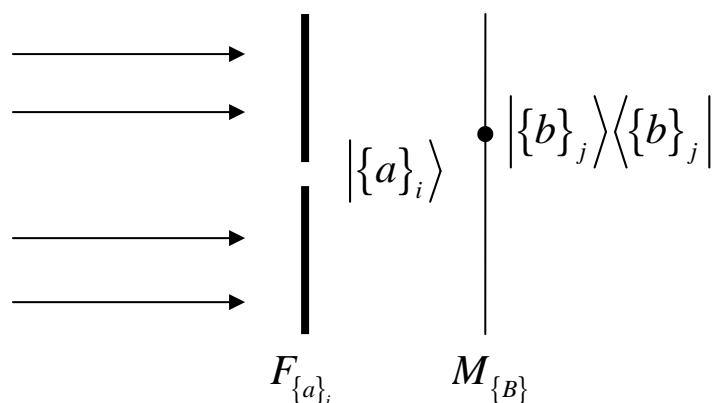
Tedy pravděpodobnost přechodu do kteréhokoli z možných koncových stavů je rovna součtu pravděpodobností přechodu do každého z těchto stavů. V uvažovaném případě bude systém ve skutečnosti po průchodu filtrem v jediném stavu popsánem vektorem ( 12.25 ). Tento vektor však může být vyjádřen jako lineární kombinace

$$|\psi\rangle = \sum_j u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} |\{b\}_j\rangle. \quad (12.28)$$

Vektory  $|\{b\}_j\rangle$  v ní vystupující pak reprezentují oněch několik možných koncových stavů. Demonstrujme si to na následujícím jednoduchém příkladu: elektron (studovaný systém) propustíme úzkou štěrbinou stínítka (filtru)  $F_{\{a\}_i}$ . Takto připravený elektron necháme

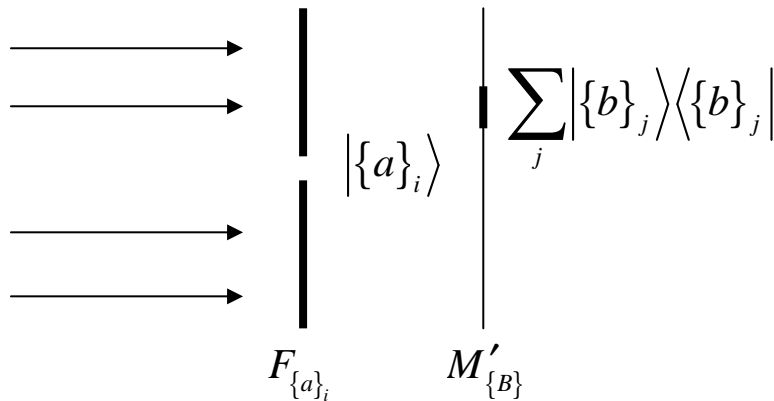
dopadat na fotografickou desku s ideálně jemnými zrny (měřicí přístroj  $M_{\{B\}}$ ). Zčernání  $j$ -tého zrna znamená naměření vlastní hodnoty  $\{b\}_j$ . Tato pravděpodobnost je identická s pravděpodobností, že uvažovaný elektron ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$  projde filtrem  $F_{\{b\}_j}$  s ideální rozlišovací schopností a je rovna ( 12.9 ).

Obr. 12.3



Nahradme nyní uvažovanou fotografickou desku jinou ( $M'_{\{B\}}$ ), jejíž zrna jsou větší. Je zřejmé, že  $m$ -té zrno desky  $M'_{\{B\}}$  zčerná pokaždé, kdy by zčernalo kterékoliv z ideálně jemných zrn desky  $M_{\{B\}}$ , nacházející se v místě zaujímaném tímto větším zrnem. Pravděpodobnost jeho zčernání je tedy rovna součtu pravděpodobností zčernání kteréhokoliv z ideálně jemných zrn, která by se nacházela v místě zaujímaném  $m$ -tým zrnem desky  $M'_{\{B\}}$ .

Obr. 12.4



Formule ( 12.27 ) vyjadřuje právě tento fakt. Výsledek ( 12.27 ) je tedy snadno pochopitelný v rámci klasických představ.

Postulát vyjádřený formulemi ( 12.21 ) – ( 12.23 ) má však i důsledky, které jsou z klasického hlediska nepochopitelné. Demonstrujme to na řešení následujícího jednoduchého problému. Ptejme se, jaká je pravděpodobnost, že měřicí přístroj  $M_{\{C\}}$  umístěný za filtrem  $F_{\Sigma\{b\}_j}$

naměří hodnotu  $\{c\}_k$ , jestliže do filtru vstupuje systém ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$ . Stav systému prošlého filtrem  $F_{\Sigma\{b\}_j}$  je popsán

normalizovaným vektorem ( 12.25 ). Pravděpodobnost, že výsledkem měření  $\{C\}$  na systému v tomto stavu bude hodnota  $\{c\}_k$ , je dána poměrem kvadrátů norem vektoru  $\hat{P}_{\{c\}_k}|\psi\rangle$  a vektoru  $|\psi\rangle$

(viz ( 12.21 )). Kvadrát normy posledního vektoru však udává pravděpodobnost, že uvažovaný systém projde filtrem  $F_{\Sigma\{b\}_j}$ . Hledaná pravděpodobnost je tedy dána výrazem

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \Sigma\{b\}_j \rightarrow \{c\}_k} = \langle \psi | \hat{P}_{\{c\}_k} | \psi \rangle, \quad ( 12.29 )$$

tj.

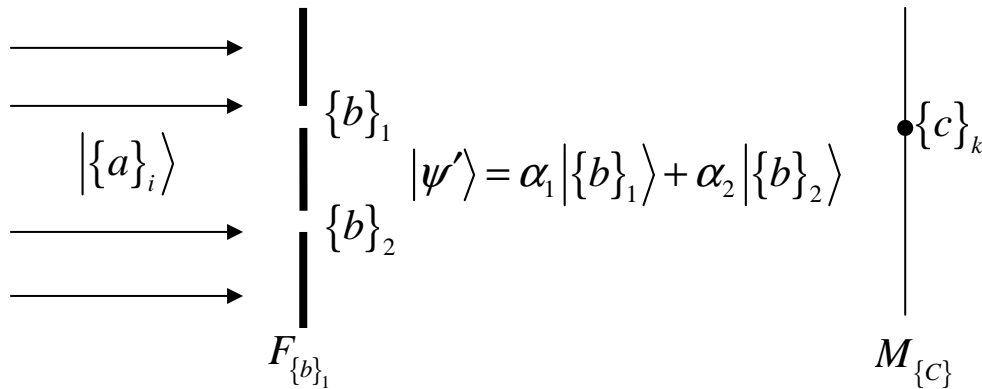
$$\begin{aligned}
 w_{\{a\}_i \rightarrow \Sigma\{b\}_j \rightarrow \{c\}_k} &= \left| \sum \langle \{c\}_k | \{b\}_j \rangle \langle \{b\}_j | \{a\}_i \rangle \right|^2 = \left| \sum_j u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j} u_{\{b\}_j \rightarrow \{c\}_k} \right|^2 = \\
 &= \left\| \hat{P}_{\{c\}_k} \hat{P}_{\Sigma\{b\}_j} | \{a\}_i \rangle \right\|^2.
 \end{aligned}
 \tag{12.30}$$

Snadno nahlédneme, že obecně platí: necht' systém ve stavu  $|\psi\rangle$  vstupuje do filtru  $\hat{P}_1$  za nímž je umístěn filtr  $\hat{P}_2$  atd. (rozlišovací schopnost filtrů je libovolná), potom pravděpodobnost, že systém projde prvními  $n$  filtry je rovna kvadrátu normy vektoru

$$\frac{\hat{P}_1 \hat{P}_2 \cdots \hat{P}_n |\psi\rangle}{\|\psi\|}
 \tag{12.31}$$

popisující stav systému prošlého těmito filtry.

Obr. 12.5



Fyzikální obsah tohoto výsledku pochopíme na příkladu znázorněném na obrázku 12.5. Elektron ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$  dopadá na stínítko se dvěma štěrbinami (filtr  $F_{\{b\}_1 + \{b\}_2}$ ), za nímž je umístěna fotografická deska s ideálně jemnými zrny (měřicí přístroj  $M_{\{c\}}$ ). Pravděpodobnost zčernání  $k$ -tého zrna desky (naměření hodnoty  $\{c\}_k$ ) je podle vztahu (12.30) rovna

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_1 + \{b\}_2 \rightarrow \{c\}_k} = |\alpha_1 \beta_1|^2 + |\alpha_2 \beta_2|^2 + 2 \operatorname{Re} \alpha_1 \beta_1 \alpha_2^* \beta_2^*, \quad (12.32)$$

kde

$$\alpha_j \equiv u_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_j},$$

$$\beta_j \equiv u_{\{b\}_j \rightarrow \{c\}_k}.$$

Zakryjeme-li druhou štěrbinu (viz obr. 12.6), dostaneme pro pravděpodobnost zčernání  $k$ -tého zrna předpověď

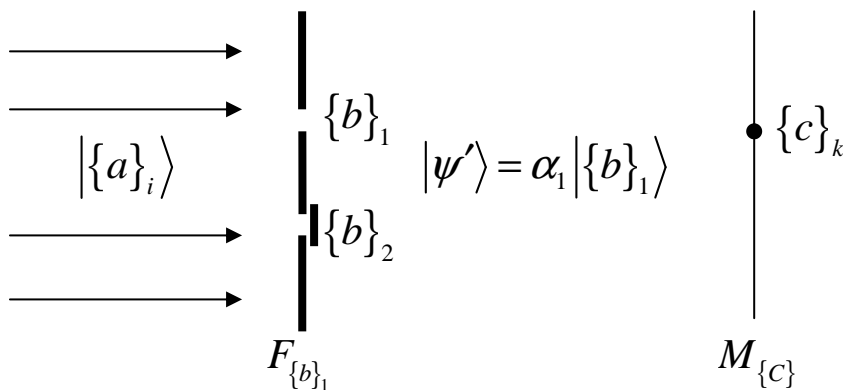
$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_1 \rightarrow \{c\}_k} = |\alpha_1 \beta_1|^2. \quad (12.33)$$

Obdobně, při zakrytí první štěrbinu, máme

$$w_{\{a\}_i \rightarrow \{b\}_2 \rightarrow \{c\}_k} = |\alpha_2 \beta_2|^2. \quad (12.34)$$

Pravděpodobnost zčernání  $k$ -tého zrna desky způsobeného elektronem prošlým filtrem se dvěma otevřenými štěrbinami se tedy obecně liší (posledním členem v (12.32)) od součtu pravděpodobností zčernání tohoto zrna způsobeného elektronem prošlým filtrem při otevřené pouze první, resp. druhé štěrbině. To ovšem vylučuje možnost interpretace stavu  $|\{a\}_i\rangle$  ve smyslu informace o pravděpodobnosti trajektorie, po které se elektron pohybuje.

Obr. 12.6



Za povšimnutí stojí, že pravděpodobnost ( 12.32 ) může být i menší než každá z pravděpodobností ( 12.33 ), ( 12.34 ). Speciálně, když

$$\alpha_1 \beta_1 = -\alpha_2 \beta_2 \neq 0, \quad ( 12.35 )$$

Potom elektron po průchodu stínítkem se dvěma otevřenými štěrbinami nikdy nedokáže způsobit zčernání  $k$ -tého zrna. K tomuto zčernání však s nenulovou pravděpodobností dojde, jakmile zakryjeme jednu ze štěrbin, kterýžto výsledek se z hlediska klasické mechaniky jeví zcela absurdním.

Zda je vyšetřovaná pravděpodobnost větší či menší při otevřených obou štěrbinách, než součet pravděpodobností při otevřených jednotlivých štěrbinách určuje znaménko výrazu  $2 \operatorname{Re} \alpha_1 \beta_1 \alpha_2^* \beta_2^*$ .

Uvědomíme-li si, že toto znaménko i velikost obecně závisí na  $k$  (na poloze vyšetřovaného zrna), vidíme, že postulát vyjádřený formulami ( 12.21 ) – ( 12.23 ) vede k předpovědi interferenčních jevů.

Skutečně, necháme-li na výše zmíněné stínítko dopadat svazek elektronů, z nichž každý je ve stavu  $|\{a\}_i\rangle$ , bude intenzita zčernání desky  $M_{\{C\}}$  v dané oblasti úměrná dříve vypočtené pravděpodobnosti zčernání odpovídajících zrn. Z předchozího je tedy zřejmé, že obrazec obdrženy ozařováním desky při střídavě otevřené první a druhé štěrbině bude odlišný od obrazce vzniklého při současně otevřených obou štěrbinách.

V minulosti se objevovaly snahy interpretovat interferenční jevy jako důsledek kolektivních vlastností velkého počtu mikroobjektů, tj. interpretovat výše uvedený popis stavu systému, jako popis stavu souboru mnoha mikrosystémů, který pro individuální mikrosystémy ztrácí smysl. Experimentálně se však prokázalo, že interference je záležitostí individuálních mikroobjektů. Např. v Jannosyho experimentu byla prokázána interference na velkém Michelsonově interferometru, při ozařování světlem tak malé intenzity, že průměrná vzdálenost mezi jednotlivými fotony převyšovala 19 km. Přitom každý foton přispěl k interferenčnímu obrazci jediným bodem. Obdržené rozdělení bylo odlišné, od prostého součtu intenzit

přicházejících z obou směrů. Každý foton tedy interferoval sám se sebou (jako by se odrazil současně od obou zrcadel interferometru).

Podívejme se na probraný příklad ještě z jiného hlediska. Na obr. 12.5 je znázorněno, jak lze systém připravit ve stavu

$$|\psi\rangle = \alpha_1 |\{b\}_1\rangle + \alpha_2 |\{b\}_2\rangle. \quad (12.36)$$

Tentýž systém se však může nacházet též ve stavu  $|\{b\}_1\rangle$  (viz obr. 12.6) nebo ve stavu  $|\{b\}_2\rangle$ . Říkáme proto, že stav  $|\psi\rangle$  je superpozicí stavů  $|\{b\}_1\rangle$  a  $|\{b\}_2\rangle$ . Je přirozené očekávat, že postupnými změnami přípravy systému vstupujícího do filtru  $F_{\{b\}_1+\{b\}_2}$  můžeme docílit libovolného poměru koeficientů  $\alpha_1/\alpha_2$ . Tím dospíváme k tzv. principu superpozice: jestliže vektory  $|\psi_1\rangle, |\psi_2\rangle$  popisují libovolné dva možné stavy určitého systému, potom tento systém může existovat též ve stavu popsaném vektorem

$$|\psi\rangle = \alpha_1 |\psi_1\rangle + \alpha_2 |\psi_2\rangle, \quad (12.37)$$

kde  $\alpha_1, \alpha_2$  jsou libovolná nenulová čísla. Libovolný stav  $|\psi\rangle$  systému vstupujícího do měřicího přístroje  $M_{\{B\}}$  můžeme považovat za superpozici vlastních stavů odpovídajících ÚMP  $\{B\}$ . Skutečně, z (12.13) plyne

$$|\psi\rangle = \sum_j \langle \{B\} = \{b\}_j | \psi \rangle | \{B\} = \{b\}_j \rangle, \quad (12.38)$$

kde výrazy typu  $|\{B\} = \{b\}_j\rangle$  zdůrazňujeme, že se jedná o vlastní stavy ÚMP  $\{B\}$ . Jestliže při měření byla nalezena hodnota  $\{b\}_k$ , je systém za měřicím přístrojem ve stavu  $|\{B\} = \{b\}_k\rangle$ . Proto říkáme, že měřením dochází k **redukci stavu**. V literatuře se lze pro tento děj setkat též s termínem **kolaps vlnové funkce**. Původní superpozice je měřením zredukována na jediný člen – pokud má měřicí aparatura

ideální rozlišovací schopnost, popř. několik členů – pokud je rozlišovací schopnost přístroje horší.

### Čisté a smíšené stavy

Uvažujme  $\hat{U}MP\{A\}$  sestávající z pozorovatelných  $A^{(1)}, A^{(2)}, \dots, A^{(n)}$ . Filtr, který popustí studovaný systém právě tehdy, když při měření  $A^{(1)}$  nalezneme hodnotu  $a_j^{(1)}$  (tj. má ideální rozlišovací schopnost z hlediska  $A^{(1)}$ ), je identický s dříve uvažovaným filtrem u něhož jsou otevřeny kanály odpovídající všem vlastním hodnotám  $\{a\}_i$   $\hat{U}MP\{A\}$ , pro které platí  $a_i^{(1)} = a_j^{(1)}$ . Takovému filtru je tedy přiřazen projekční operátor

$$\hat{I}_{a_j^{(1)}}^{(A^{(1)})} \equiv \hat{P}_{\Sigma\{a\}_i}, \quad (12.39)$$

Kde suma probíhá přes všechna  $i$ , pro něž platí  $a_j^{(1)} \in \{a\}_i$ . V praxi se obvykle setkáváme s případem, kdy jsou jednotlivé částice svazku připraveny poněkud odlišným způsobem, tj. např.  $N_1$  elektronů je připraveno ve stavu  $|\psi_1\rangle$ ,  $N_2$  elektronů ve stavu  $|\psi_2\rangle$ , atd. V tomto případě představuje svazek elektronů smíšený statistický soubor. Ke specifikaci smíšeného souboru musíme udat, které stavy a s jakou četností jsou v něm zastoupeny. Jestliže z něho vybereme náhodně jednu částici, potom je to s pravděpodobností

$$w_j = \frac{N_j}{N} \quad (12.40)$$

Elektron, který byl připraven ve stavu  $|\psi_j\rangle$ . Tuto informaci o elektronu nazýváme **smíšeným stavem** a říkáme, že elektron se nalézá v daném smíšeném stavu. O smíšeném stavu lze přitom hovořit i když pracujeme s jedinou částicí a nikoliv s celým jejich svazkem. Stačí jen když způsob jeho přípravy poskytuje výše uvedený druh informace. Připravíme-li obdobným způsobem celý svazek částic, získáme **smíšený soubor**.



Nesprávná interpretace pravděpodobnosti ( 12.40 ) bývá často zdrojem hrubých omylů. Předpokládejme, že  $|\psi_1\rangle = |\{A\} = \{a\}_1\rangle$ , kde  $\{A\}$  je nějaká ÚMP. Pravděpodobnost, že výsledkem měření  $\{A\}$  na elektronu nahodile vybraném z uvažovaného souboru bude  $\{a\}_1$ , může být podstatně odlišnoobnosti  $w_1$ . Ilustrujme to na svazku, v němž  $N_1$  elektronů je připraveno ve stavu  $|\psi_1\rangle \equiv |\{A\} = \{a\}_1\rangle$  a  $N - N_1$  elektronů ve stavu  $|\psi_2\rangle \equiv \sqrt{2} (|\{A\} = \{a\}_1\rangle + |\{A\} = \{a\}_2\rangle)$ . Jestliže z něho vybereme nahodile elektron, bude to s pravděpodobností  $w_1$  jeden z těch, jež byli připraveny ve stavu  $|\psi_1\rangle$  a s pravděpodobností  $w_2 = 1 - w_1$  jeden z těch, jež byly připraveny ve stavu  $|\psi_2\rangle$ . Provedeme-li měření  $\{A\}$  na této částici, potom jej s pravděpodobností  $w_1$  provádíme na elektronu ve stavu  $|\psi_1\rangle$ , kdy s určitostí obdržíme výsledek  $\{a\}_1$ , a s pravděpodobností  $w_2$  na elektronu ve stavu  $|\psi_2\rangle$ , kdy s pravděpodobností  $1/2$  získáme výsledek  $\{a\}_1$  a se stejnou pravděpodobností výsledek  $\{a\}_2$ . Tedy pravděpodobnost, že při měření  $\{A\}$  na nahodile vybraném elektronu uvažovaného souboru nalezneme hodnotu  $\{a\}_1$  je

$$w = \frac{w_1 + w_2}{2} > w_1. \quad ( 12.41 )$$

V obecném případě je pravděpodobnost, že elektron smíšeného souboru bude nalezen ve stavu  $|\psi_j\rangle$  ve výše naznačeném smyslu, vždy  $\geq w_j$ . Znaménko rovnost přitom platí jen tehdy, jestliže

$$\forall k \neq j : |\psi_k\rangle \perp |\psi_j\rangle. \quad ( 12.42 )$$

K popisu smíšeného stavu je výhodné používat matici hustoty

$$\hat{W} \equiv \sum_j w_j \hat{E}_j, \quad ( 12.43 )$$

kde projekční operátor  $\hat{E}_j$  odpovídá paprsku definovanému normalizovaným vektorem  $|\psi_j\rangle$ , tj.

$$\hat{E}_j \equiv |\psi_j\rangle\langle\psi_j|. \quad (12.44)$$

Označení typu  $\hat{P}$  rezervujeme pro projekční operátory související s charakteristickými podprostory ÚMP $\{B\}$ . Pro projekční operátory do charakteristických podprostorů jediné pozorovatelné  $A$  budeme užívat symboly typu  $\hat{I}$ . Vektory  $|\psi_j\rangle$  nemusí pro různá  $j$  představovat různé vlastní stavy téže pozorovatelné. Projekční operátor (12.44) jsme proto označili symbolem  $\hat{E}_j$ . Zdůrazněme, že pro  $j \neq k$  nemusí být součin  $\hat{E}_j\hat{E}_k = 0$ , na rozdíl od obdobných součinů operátorů  $\hat{P}$  nebo  $\hat{I}$ .

Uvažujme nyní veliký počet systémů, z nichž každý je připraven ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty (12.43). Vybereme-li nahodile jeden z nich, bude to s pravděpodobností  $w_j$  systém v čistém stavu  $|\psi_j\rangle$ . Z předchozího víme, že při měření ÚMP $\{B\}$  ve stavu  $|\psi_j\rangle$  obdržíme vlastní hodnotu  $\{b\}_k$  s pravděpodobností

$$w_{j \rightarrow \{b\}_k} = \langle \{b\}_k | \psi_j \rangle \langle \psi_j | \{b\}_k \rangle = \langle \{b\}_k | \hat{E}_j | \{b\}_k \rangle. \quad (12.45)$$

Tedy při měření  $\{B\}$  u nahodile vybraného systému z výše zmíněného smíšeného souboru obdržíme výsledek  $\{b\}_k$  s pravděpodobností

$$w_{\{b\}_k} = \sum_j w_j w_{j \rightarrow \{b\}_k} = \langle \{b\}_k | \hat{W} | \{b\}_k \rangle. \quad (12.46)$$

Každý ze systémů tohoto souboru je však ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty (12.43). Formule (12.46) tak udává pravděpodobnost výsledku  $\{b\}_k$  při měření ÚMP $\{B\}$  na systému ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty  $\hat{W}$ .

Pokud je hilbertův prostor  $H$   $m$ -rozměrným, můžeme veličiny  $\hat{W}$ ,  $|\{b\}_k\rangle$ ,  $\langle\{b\}_k|$  považovat za čtvercové matice  $m \times m$ .

Jednosloupcovou matici  $|\{b\}_k\rangle$  lze totiž identifikovat se čtvercovou maticí, jejíž první sloupec tvoří vektor  $|\{b\}_k\rangle$  a ostatní sloupce obsahují samé nuly. Zcela obdobně lze naložit s jednořádkovou maticí  $\langle\{b\}_k|$ . Prvá strana formule ( 12.46 ) pak představuje první diagonální (jediný nenulový) element součinu příslušných matic, a je tedy totožná se stopou tohoto součinu. Díky invarianci stopy součinu matic vůči jejich cyklické permutaci, můžeme vzorec ( 12.46 ) přepsat do tvaru

$$w_{\{b\}_k} = \text{Tr} \hat{W} |\{b\}_k\rangle \langle\{b\}_k| = \text{Tr} \hat{W} \hat{P}_{\{b\}_k} = \text{Tr} \hat{W}', \quad ( 12.47 )$$

kde

$$\hat{W}' \equiv \hat{P}_{\{b\}_k} \hat{W} \hat{P}_{\{b\}_k}. \quad ( 12.48 )$$

Pod stopou operátoru  $\hat{A}$  rozumíme obecně výraz

$$\text{Tr} \hat{A} \equiv \sum_k \langle \varphi_k | \hat{A} | \varphi_k \rangle, \quad ( 12.49 )$$

Kde  $\{|\varphi_k\rangle\}$  je ortonormální bázi  $H$ . Důležitý vztah ( 12.47 ) tak není omezen pouze na konečněrozměrné Hilbertovy prostory, ale platí zcela obecně. K tomu, aby pravděpodobnost ( 12.47 ) byla normalizována k jednotce, musí být stejně normalizovány i pravděpodobnosti  $w_j$  vystupující v matici hustoty ( 12.43 ), tj. musí platit

$$\sum_j w_j = \text{Tr} \hat{W} = 1. \quad ( 12.50 )$$

Často bývá výhodné pracovat s nenormalizovanou maticí hustoty, tj. s operátorem  $\hat{W}$  nesplňujícím podmínku ( 12.50 ). Potom místo vztahu ( 12.47 ) dostáváme

$$w_{\{b\}_k} = \frac{\text{Tr}\hat{W}'}{\text{Tr}\hat{W}}. \quad (12.51)$$

Není snad nutno zdůrazňovat, že systém, který vstoupil do filtru  $F_{\{b\}_k}$  ve smíšeném stavu  $\hat{W}$  a tímto filtrem prošel, se nachází v čistém stavu  $|\{b\}_k\rangle$ . O něco málo reální je otázka, v jakém stavu bude uvažovaný systém po průchodu filtrem  $F_{\Sigma\{b\}_k}$ , jehož rozlišovací schopnost není ideální. Z předchozího víme, že projde-li tímto filtrem systém který do něho vstoupil v čistém stavu popsaném normalizovaným vektorem

$$\frac{\hat{P}_{\Sigma\{b\}_k}|\psi_j\rangle}{\sqrt{w_{j\rightarrow\Sigma\{b\}_k}}} = \frac{\hat{P}_{\Sigma\{b\}_k}|\psi_j\rangle}{\|\hat{P}_{\Sigma\{b\}_k}|\psi_j\rangle\|} \quad (12.52)$$

je pravděpodobnost, že ke zmíněnému průchodu dojde.

Uvažujme smíšený soubor tvořený mnoha systémy, z nichž každý je ve smíšeném stavu  $\hat{W}$  (12.43). Systém nahodile vybraný z tohoto souboru bude s pravděpodobností  $w_j$  ve stavu  $|\psi_j\rangle$ . Tedy nahodile vybraný systém projde filtrem s pravděpodobností

$$w_{\Sigma\{b\}_k} = \sum_j w_j w_{j\rightarrow\Sigma\{b\}_k}. \quad (12.53)$$

Přitom po průchodu filtrem bude s pravděpodobností

$$\frac{w_j w_{j\rightarrow\Sigma\{b\}_k}}{w_{\Sigma\{b\}_k}} \quad (12.54)$$

ve stavu popsaném normalizovaným vektorem (12.52). Jinými slovy řečeno, systém, který vstoupí do filtru  $F_{\Sigma\{b\}_k}$  ve smíšeném stavu  $\hat{W}$ , projde tímto filtrem s pravděpodobností (12.53) a po průchodu bude ve stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{W}' = \sum_j w_j w_{j \rightarrow \Sigma\{b\}_k} \frac{\hat{P}_{\Sigma\{b\}_k} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \hat{P}_{\Sigma\{b\}_k}}{w_{j \rightarrow \Sigma\{b\}_k}} = \hat{P}_{\Sigma\{b\}_k} \hat{W} \hat{P}_{\Sigma\{b\}_k}. \quad (12.55)$$

Povšimněme si, že stopa matice hustoty

$$\text{Tr} \hat{W}' = \sum_j w_j \text{Tr} \hat{P}_{\Sigma\{b\}_k} |\psi_j\rangle \langle \psi_j| \hat{P}_{\Sigma\{b\}_k} = \sum_j w_j \langle \psi_j | \hat{P}_{\Sigma\{b\}_k} | \psi_j \rangle = w_{\Sigma\{b\}_k} \quad (12.56)$$

udává pravděpodobnost průchodu uvažovaným filtrem.

Uvažujme nyní tentýž systém prošlý stejným filtrem, doplněným o registrační přístroj  $R_{\{B\}}$ , dovolující určit, kterým z kanálů systém prošel. Pravděpodobnost průchodu  $k$ -tým kanálem je dána formulí (12.46). Pokud nezjišťujeme kterým z kanálů systém prošel ( $R_{\{B\}}$  je vypnutý), bude systém po průchodu ve smýšleném stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{W} = \sum_k w_{\{b\}_k} |\{b\}_k\rangle \langle \{b\}_k| = \sum_k \langle \{b\}_k | \hat{W} | \{b\}_k \rangle |\{b\}_k\rangle \langle \{b\}_k|, \quad (12.57)$$

takže

$$\hat{W}' = \sum_k \hat{P}_{\{b\}_k} \hat{W} \hat{P}_{\{b\}_k}. \quad (12.58)$$

Přitom její stopa

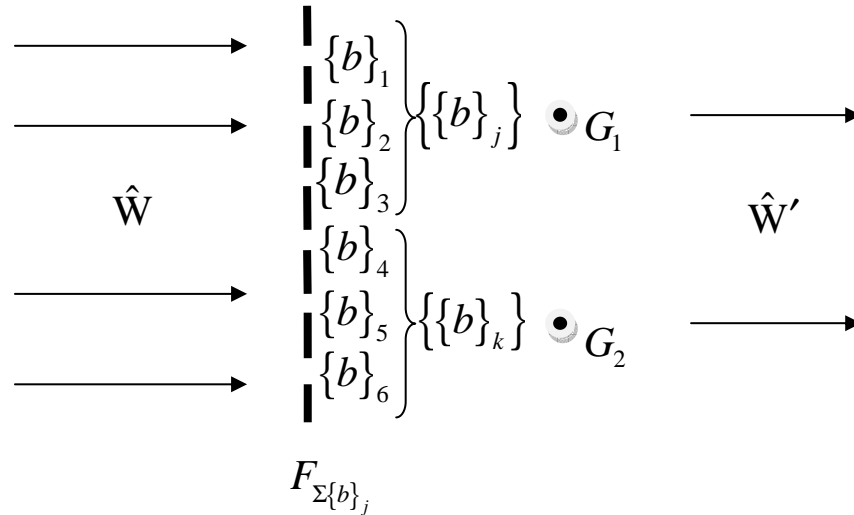
$$\text{Tr} \hat{W}' = \sum_k w_{\{b\}_k} = w_{\Sigma\{b\}_k} \quad (12.59)$$

udává pravděpodobnost průchodu libovolným z rozlišitelných kanálů zařízení  $F_{\Sigma\{b\}_k} + R_{\{B\}}$ .

Dosud jsme mlčky předpokládali, že registrační přístroj  $R_{\{B\}}$  má ideální rozlišovací schopnost. Pokusme se zobecnit předchozí výsledky i na případ, kdy registrační přístroj může mít rozlišovací

schopnost horší. Taková situace nastane např. v experimentu znázorněném na následujícím obrázku.

Obr. 12.7



Elektron ve smíšeném stavu popsaném normalizovanou maticí hustoty  $\hat{W}$  dopadá na stínítko s několika štěrbinami (filtr  $F_{\Sigma\{b\}_j}$ ). Geigerův počítač  $G_1$ , resp.  $G_2$  dá puls, kdykoliv elektron projde kterýmkoli ze skupiny kanálů  $\{\{b\}_j\}_1$ , resp.  $\{\{b\}_j\}_2$ . Zařízení  $R'_{\{B\}}$  tedy neumožňuje rozlišení mezi jednotlivými kanály za skupiny  $\{\{b\}_j\}_1$ , resp.  $\{\{b\}_j\}_2$ . Jestliže počítač  $G_1$  dá puls, znamená to, že systém prošel otevřenými kanály  $\{\{b\}_j\}_1$  a nachází se ve stavu (viz ( 12.55 ))

$$\hat{W}'_1 = \hat{P}_1 \hat{W} \hat{P}_1, \quad ( 12.60 )$$

kde

$$\hat{P}_1 \equiv \hat{P}_{\Sigma\{b\}_j} \quad ( 12.61 )$$

a sumace probíhá přes všechny kanály první skupiny. Z formule ( 12.59 ) vidíme, že pravděpodobnost pulsu je dána stopou matice hustoty ( 12.60 ), tj.

$$w_1 = \text{Tr} \hat{W}'_1. \quad (12.62)$$

Obdobnou úvahu lze zopakovat pro počítač  $G_2$ .

Obecně platí, že pokud je systém s pravděpodobností  $w_j$  ve smíšeném stavu popsaném normalizovanou maticí hustoty  $\hat{W}_j$ ,  $j = 1, 2, \dots$ , potom je tento systém ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{W} = \sum_j w_j \hat{W}_j, \quad (12.63)$$

se stopou

$$\text{Tr} \hat{W} = \sum_j w_j. \quad (12.64)$$

V uvažovaném případě je systém s pravděpodobností  $w'_l$  ve smíšeném stavu popsaném normalizovanou maticí hustoty

$$\hat{W}''_l = \frac{\hat{W}'_l}{w'_l}. \quad (12.65)$$

Tedy, nerozlišujeme-li který z počítačů pracoval, nalézá se systém za  $R'_{\{B\}}$  ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{W}' = \sum_l w'_l \hat{W}''_l = \sum_l \hat{W}'_l = \sum_l \hat{P}_l \hat{W} \hat{P}_l \quad (12.66)$$

jejíž stopa udává pravděpodobnost průchodu systému zařízením  $F_{\Sigma\{b\}_j} + R'_{\{B\}}$ .

Platnost tohoto výsledku není pochopitelně omezena pouze na experiment znázorněný na obr. 12.7. Projekční operátory  $\hat{P}_l$  opovídají otevřeným makroskopickým kanálům, mezi nimiž jsme schopni principiálně rozlišovat. Rozměr podprostoru odpovídajícího  $\hat{P}_l$  je roven počtu makroskopických kanálů, jež pomocí daného zařízení

principiálně rozlišit nemůžeme, zahrnutých do  $l$ -tého makroskopického kanálu. Pokud každý makroskopický kanál obsahuje pouze jeden kanál mikroskopický, redukuje se formule ( 12.66 ) na dříve nalezený vzorec ( 12.58 ). Také vztah ( 12.55 ) je zahrnut ve formuli ( 12.66 ) jako speciální případ odpovídající zařízení s jediným otevřeným makroskopickým kanálem. Čistý stav lze považovat za speciální případ stavu smíšeného. Odpovídající normalizovaná matice hustoty ( 12.43 ) se redukuje na projekční operátor do jednorozměrného podprostoru definovaného paprskem, který jsme dříve přiřadili témuž stavu. Např. stav připravený průchodem systému filtrem  $F_{\{a\}_i}$  můžeme popsat buď paprskem určeným normalizovaným vektorem  $|\{a\}_i\rangle$  nebo normalizovanou maticí hustoty

$$\hat{W} = \hat{P}_{\{a\}_i} = |\{a\}_i\rangle\langle\{a\}_i|. \quad ( 12.67 )$$

Konkrétní zápis matice hustoty  $\hat{W}$  obdržené jako výsledek výpočtů bývá dosti komplikovaný. Rozhodnout, zda nalezený operátor  $\hat{W}$  popisuje stav čistý nebo smíšený usnadňuje následující věta: Nechť  $\hat{W}$  je normalizovaná matice hustoty. Potom

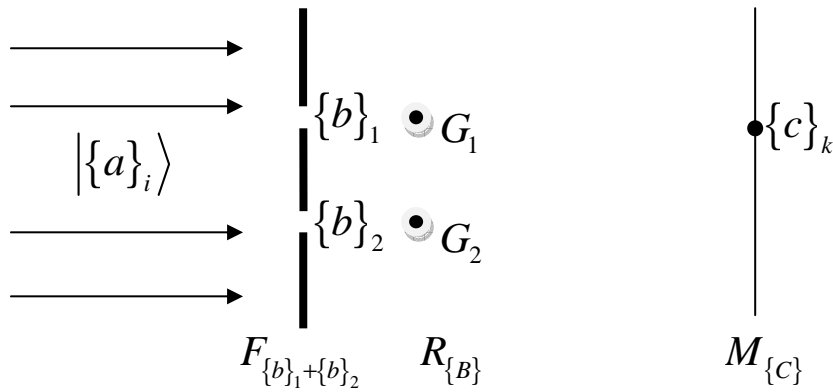
$$\text{Tr}\hat{W}^2 \leq 1, \quad ( 12.68 )$$

kde rovnost platí tehdy a jen tehdy, je-li popisovaný stav čistým.

Při analýze konkrétních případů je důležité si uvědomit, do jaké míry dané zařízení principiálně umožňuje rozhodnout, kterým z otevřených kanálů systém prošel (srov. ( 12.55 ), ( 12.58 ), ( 12.66 )). Můžeme to opět ilustrovat na jednoduchém příkladu znázorněném na obrázku 12.8. Jedná se o podobný experiment jako na obr. 12.5, pouze za každou šterbinou je navíc umístěn Geigerův počítač. Tyto dva počítače představují registrační přístroj  $R_{\{B\}}$  umožňující zjistit, kterým z kanálů filtru systém prošel.



Obr. 12.8



Uvědomíme-li si že čistý stav elektronu vstupujícího do filtru můžeme popsat maticí hustoty

$$\hat{W} = |\{a\}_j\rangle\langle\{a\}_j|, \quad (12.69)$$

potom ze vztahu ( 12.58 ) víme, že elektron, který se dostal za registrační přístroj  $R_{\{B\}}$ , v případě, kdy se nezajímáme o to, který z Geigerových počítaců pracoval, je ve smíšeném stavu popsaném maticí hustoty

$$\hat{W}' = \sum_{i=1}^2 \hat{P}_{\{b\}_i} |\{a\}_j\rangle\langle\{a\}_j| \hat{P}_{\{b\}_i} = \sum_{i=1}^2 w_{\{a\}_j \rightarrow \{b\}_i} |\{b\}_i\rangle\langle\{b\}_i|, \quad (12.70)$$

kde

$$w_{\{a\}_j \rightarrow \{b\}_i} \equiv \left| \langle\{b\}_i | \{a\}_j \rangle \right|^2. \quad (12.71)$$

Přitom pravděpodobnost, že se elektron dostane za soustavu Geigerů je rovna

$$w_{\{a\}_j \rightarrow \Sigma\{b\}_i} = \text{Tr} \hat{W}'. \quad (12.72)$$

Pravděpodobnost, že při měření ÚMP $\{C\}$  na elektronu ve smíšeném stavu  $\hat{W}'$  bude nalezena hodnota  $\{c\}_k$  je podle vztahu ( 12.51 ) rovna

$$w_{\{c\}_k} = \frac{\text{Tr}(\hat{P}_{\{c\}_k} \hat{W} \hat{P}_{\{c\}_k})}{\text{Tr} \hat{W}}. \quad ( 12.73 )$$

Tedy pravděpodobnost, že elektron, který vstupuje do filtru  $F_{\{b\}_1 + \{b\}_2}$  ve stavu  $|\{a\}_j\rangle$  způsobí zčernání  $k$ -tého zrna fotografické desky  $M_{\{c\}}$  je

$$\begin{aligned} w_{\{a\}_j \rightarrow \Sigma\{b\}_i \rightarrow \{c\}_k} &= w_{\{a\}_j \rightarrow \Sigma\{b\}_i} w_{\{c\}_k} = \text{Tr}(\hat{P}_{\{c\}_k} \hat{W} \hat{P}_{\{c\}_k}) = \langle \{c\}_k | \hat{W} | \{c\}_k \rangle = \\ &= \sum_{i=1}^2 w_{\{a\}_j \rightarrow \{b\}_i} w_{\{b\}_i \rightarrow \{c\}_k} = \sum_{i=1}^2 w_{\{a\}_j \rightarrow \{b\}_i} |\langle \{c\}_k | \{c\}_i \rangle|^2. \end{aligned} \quad ( 12.74 )$$

Přerušíme-li nyní přívod napětí na oba počítače v  $R_{\{B\}}$ , nebudeme schopni rozlišit, kterou ze štěrbin elektron prošel a pravděpodobnost, že  $k$ -té zrna z  $M_{\{c\}}$  zčerná je dána formulí ( 12.30 ). Svazek dopadající na  $M_{\{c\}}$  představuje čistý soubor, jehož každý elektron je ve stavu ( 12.25 ). Tento výsledek je však naprosto šokující a má nedozírné důsledky pro celou fyziku, včetně fyzikálního uchopení podstaty vědomí. Obsah vztahů ( 12.30 ) a ( 12.74 ) lze formulovat jako obecné pravidlo: jestliže přechod z daného počátečního stavu do daného stavu koncového může probíhat přes několik mezistavů, potom se aditivně skládají amplitudy pravděpodobnosti, jestliže v rámci daného experimentu není principiálně možno rozlišit jednotlivé mezistavy. Mikroobjekty se v tomto případě chovají jako vlnění. Princip komplementarity se se uplatní tehdy, doplníme-li experiment detektorem umožňujícím určit, kterou ze štěrbin zkoumaný systém prošel, tj. získáme-li informaci o realizované cestě. Jestliže v rámci experimentu jednotlivé stavy principiálně rozlišit můžeme, tehdy hovoříme o skládání pravděpodobností. V tomto případě interferenční jevy zmizí a naměříme prosté částicové rozložení pravděpodobnosti, viz obr. 12.1a. Toto chování objektů

mikrosvětla se zdá být nepochopitelné a paradoxní. Ukazuje na nutnost zásadní revize našeho pojmového aparátu a vžitých představ odvozených ze světa makroskopické zkušenosti. Úlohou každé fyzikální teorie je poskytnout co možná nejsprávnější kvantitativní předpovědi výsledků realizovatelných experimentů, na jejichž výklad teorie aspiruje. Z tohoto hlediska patří kvantová teorie bezesporu mezi nejúspěšnější teorie vůbec. Souhlas jejích předpovědí se skutečností je doslova udivující. Proto se kvantová teorie stala jedním ze základních pilířů moderní fyziky. Přes toto své takřka výsadní postavení, a snad právě proto, je kvantová teorie stále znovu a znovu vystavována nemilosrdné konfrontaci s novými přesnějšími a rafinovanějšími experimenty.

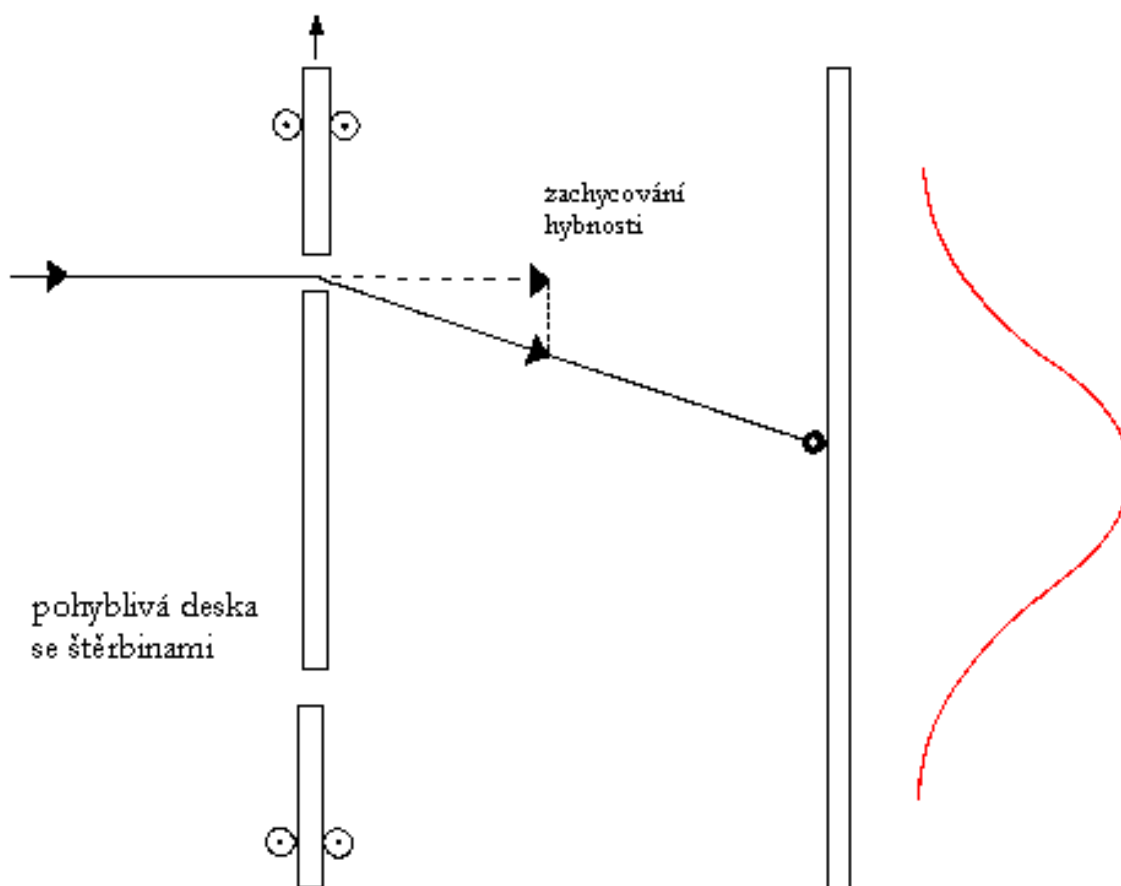
### **Einsteinova verze experimentu**

Popsané dualistické chování objektů mikrosvětla v pokusu se dvěma štěrbinami je z hlediska klasické fyziky nečekané a přímo vyzývá k experimentálnímu ověřování. Byl to sám Einstein, který v roce 1927 navrhl verzi Youngova pokusu, od níž si sliboval, že prokáže nekonzistenci kvantové mechaniky (Einstein totiž patřil k vůbec největším kritikům této teorie).

Podle Einsteina stačí uvolnit přední desku se štěrbinami tak, aby se mohla pohybovat ve směru naznačeném na obr. 12.8. Protože musí platit zákon zachování celkové hybnosti dopadajícího i prošlého fotonu a desky (o níž předpokládáme, že je na počátku v klidu), stačí sledovat pohyb desky po průchodu fotonu štěrbinami, abychom určili realizovanou dráhu. Pokud foton na obrázku prošel horní štěrbinou, bude se deska pohybovat směrem nahoru, prošel-li dolní, bude se pohybovat dolů. Podle Einsteina se na stínítku vytvoří Youngův interferenční obrazec a přitom jsme schopni určovat realizovanou dráhu, což je ve sporu s postuláty kvantové teorie. Jak však záhy ukázal Bohr, Einstein se ve svých úvahách dopustil chyby.

Heisenbergova relace neurčitosti totiž platí i pro přední pohyblivou desku. Chceme-li proto určit dostatečně přesně její pohyb (hybnost), stává se její poloha více neurčitou. Právě tato neurčitost v poloze štěrbin způsobí rozmazání interferenčního obrazce v důsledku ztráty

koherence (konstantního fázového posunutí podél obou drah v místě dopadu na stínítko) – přesně v souladu s pravidly kvantové teorie.



**Obr. 12.9.** Einsteinova verze pokusu se dvěma štěrbinami a světlem. Může-li se přední deska pohybovat, lze určovat realizovanou dráhu fotonů a interferenční obrazec se rozmáže.

Wootters a Zurek nedávno znovu podrobně analyzovali Einsteinovu verzi pokusu se dvěma štěrbinami a ukázali mimo jiné, že interferenční obrazec se rozmazává tím více, čím přesnější informaci o pohybu přední desky a tedy i o realizované cestě získáváme.



**William Wootters (1950)**

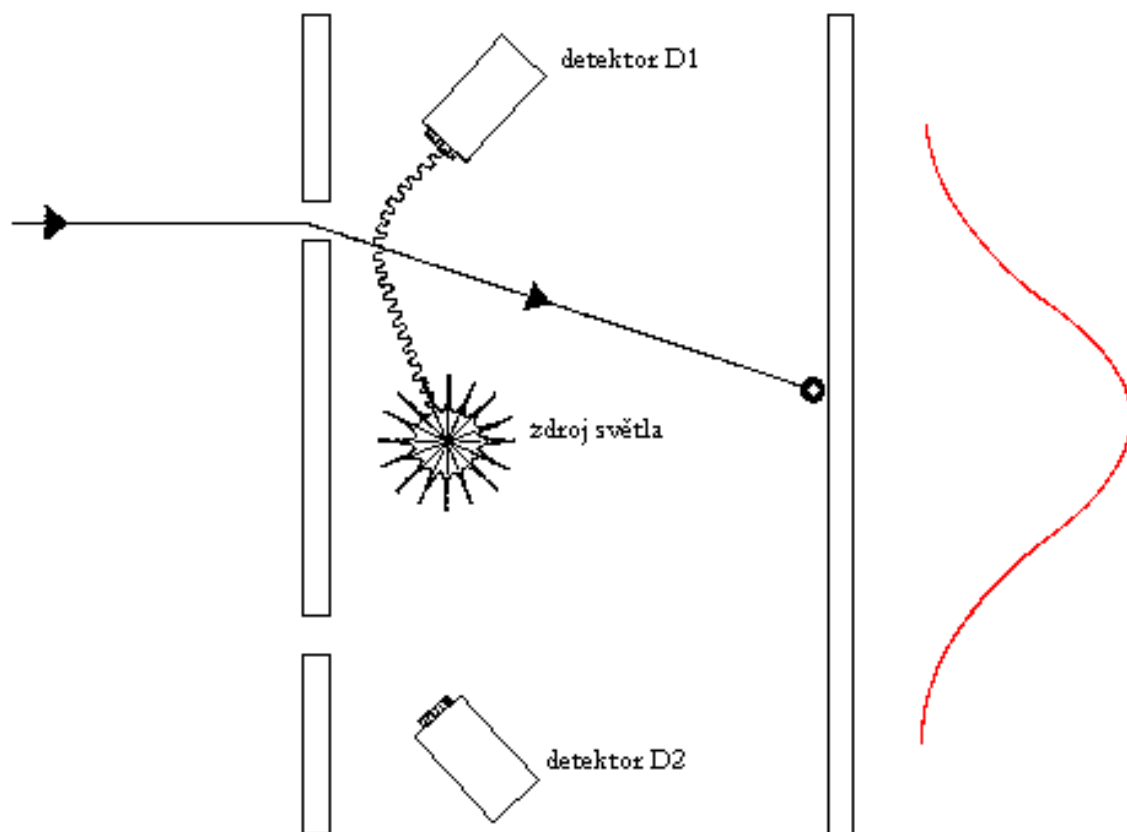


**Wojciech Hubert Zurek (1951)**

Je-li poloha desky naprosto jistá (např. při jejím upevnění), nevíme nic o její hybnosti ani realizované cestě a pozorujeme interferenční obrazec. Naopak při přesném změření hybnosti desky je realizovaná dráha již s jistotou určena, čemuž odpovídá rozmazaný "částicový" obrazec bez interference. Mezi těmito dvěma extrémními případy ovšem existuje **spojitý přechod**: bezpočet situací, při nichž zjistíme pohyb desky s jistou konečnou nepřesností, v důsledku čehož má i informace o realizované cestě pravděpodobnostní charakter. Tomu odpovídá obrazec na stínítku, jenž je kombinací (superpozicí) částicového a interferenčního, a to přesně v kontrastním poměru odpovídajícímu míře informace o realizované cestě. Čím zřetelněji chceme pozorovat vlnovou povahu světla, tím více se musíme vzdát informací o jeho částicových vlastnostech.

### **Feynmanova verze experimentu**

Jinou verzi dvouštěbinového pokusu uvádí Feynman ve svých slavných přednáškách z fyziky. Namísto světla (fotonů) předpokládá vysílání elektronů. Za štěrbinami je umístěn zdroj světla, viz. obr. 12.10. Proletne-li elektron horní štěrbinou, světlo se na něm rozptýlí a fotodetektor  $D_1$  namířený na tuto štěrbinu zaznamená záblesk. Naopak fotodetektor  $D_2$  zachytí záblesk jen v tom případě, kdy elektron projde dolní štěrbinou.



**Obr. 12.10. Feynmanova verze pokusu se dvěma štěrbinami a elektrony. Zjišťování realizované dráhy pomocí detektorů způsobí rozmazání interferenčního obrazce, neboť použité světlo ovlivňuje při rozptýlení prolétávající elektrony.**

Feynman podrobně propočítává, že i v tomto případě zjišťování dráhy elektronu pomocí fotodetektorů způsobí rozmazání interferenčního obrazce na stínítku. Je totiž třeba uvážit, že proces rozptýlení světla vysílaného ze zdroje S prolétávající elektron ovlivní: světlo se při rozptýlení chová jako foton nesoucí jistou hybnost a energii (nepřímo úměrné vlnové délce použitého světla). Jistá náhodná část hybnosti a energie se mezi fotonem a elektronem předá, koherence drah se poruší a interferenční proužky se rozmazou. Setkáváme se tu se situací pro mikrosvět charakteristickou: měření podstatným způsobem ovlivňuje měřený objekt. I ve Feynmanově verzi experimentu platí, že přechod mezi "částicovým" a "vlnovým" chováním elektronů je spojitý, a to v závislosti na vlnové délce použitého světla. Má-li světlo ze zdroje S vlnovou délku mnohem větší než je vzdálenost štěrbin, nejsme schopni rozhodnout, kterou z obou štěrbin elektron proletěl, neboť rozlišovací schopnost (přesnost lokalizace) je vždy větší než vlnová

délka. Na stínítku pozorujeme ostrý interferenční obrazec, neboť hybnost a energie fotonů je natolik malá, že nemůže podstatným způsobem prolétávající elektrony ovlivnit. Zkracujeme-li vlnovou délku použitého světla, zlepšuje se rozlišovací schopnost detektorů a roste naše schopnost určit, kterou štěrbinou elektron proletěl. Současně ovšem roste hybnost i energie fotonů a v důsledku toho i poruchy způsobené v pohybu elektronů procesem rozptylu. Interferenční obrazec se rozmazává a je de facto suprepozicí čistého interferenčního a částicového obrazce v poměru daném podílem vlnové délky ku vzdálenosti štěrbin. Blíží-li se vlnová délka k nule, podávají detektory naprosto spolehlivou informaci o realizované cestě elektronů, přičemž obraz na stínítku se, v souladu s pravidly kvantové teorie, stává výhradně částicovým. Feynmanův závěr je tedy pesimistický: "Zařízení umožňující určit, kterým otvorem elektron prošel, nemůže být natolik "jemné", aby při měření podstatně neporušilo interferenční obrazec. Nikdo dosud nenašel cestu, kterák obejít relaci neurčitosti".

Princip neurčitosti lze totiž odvodit úvahami o částicové povaze vln, namísto úvah o vlnové povaze částic, jak jsme to učinili ve 3. kapitole. Demonstrujme si to na jednoduchém příkladu: Abychom byli schopni provést měření např. polohy a hybnosti elektronu, musíme s ním vejít v interakci. Můžeme elektron zkoumat např. pomocí světla vlnové délky  $\lambda$ , jako na obr. 12.10. Fotony necháme dopadat na elektron, přičemž každý z fotonů nese hybnost  $h/\lambda$ . Velikost změny hybnosti elektronu po srážce s takovýmto fotonem bude přibližně téhož řádu, takže proces měření zavádí neurčitost hybnosti elektronu

$$\Delta p \approx \frac{h}{\lambda}. \quad (12.75)$$

Čím větší je tedy vlnová délka použitého světla, tím menší je výsledná neurčitost jeho hybnosti. Vzhledem k vlnovým vlastnostem použitého světla lze očekávat stanovení polohy elektronu s přesností v řádu jedné vlnové délky použitého světla, tj. v nejlepším případě

$$\Delta x \approx \lambda. \quad (12.76)$$

Čím kratší je vlnová délka, tím menší je neurčitost polohy elektronu. Dosazením ( 12.76 ) do ( 12.75 ) nalézáme, že přibližně platí relace neurčitosti

$$\Delta x \Delta p \geq h. \quad ( 12.77 )$$

Přesnější analýza vlnového klubka, provedená ve 3. kapitole, pak vede ke správnému tvaru ( 3.75 ) relace neurčitosti mezi polohou a hybností.

Lze ukázat, že za předpokladu, kdy lze stanovit polohu částice s přesností  $\Delta x$ , která je lepší, než  $1/2\pi$  vzdálenosti  $d$  mezi štěrbinami

$$\Delta x < \frac{d}{2\pi} \quad ( 12.78 )$$

mohli bychom určit, kterou ze štěrbin foton prošel. V tomto případě je však neurčitost  $\Delta p_x$  složky  $x$  její hybnosti

$$\Delta p_x \geq \frac{h}{4\pi\Delta x} > \frac{h}{2d}. \quad ( 12.79 )$$

Tato změna hybnosti znamená posunutí místa dopadu elektronu na stínítko o úsek

$$\delta = \frac{\Delta p_x}{p_y} l, \quad ( 12.80 )$$

kde  $l$  je vzdálenost štěrbin. Protože  $p_x \ll p$  (difrakční posun je malý ve srovnání se vzdáleností  $l$ ), je  $p_x \approx p$  a můžeme psát

$$\delta \approx \frac{\Delta p_x}{h} \lambda l > \frac{\lambda l}{2d}. \quad ( 12.81 )$$



To je však přesně vzdálenost mezi interferenčním maximem a minimem na interferenčním obrazci. Interakcí s fotony se tak interferogram rozmazává. Cenou za získání informace o realizované cestě elektronu je zánik interferenčního obrazce.

Tato a podobné úvahy evokují, že elektron má v každém čase určitou polohu i hybnost a že je to proces měření, který zavádí do kvantového světa neurčitost. Ve skutečnosti je však tomu naopak – neurčitost je vlastní povahou každého pohybujícího se tělesa. Ospravedlněním pro úvahy tohoto typu je velmi názorná ukázka nemožnosti obejít principu neurčitosti.

### **Verze experimentu s "jemnou" detekcí pomocí mikromaserů**

V 90. letech minulého století fyzikové Marlan O. Scully z Univerzity v Novém Mexiku, Julian Schwinger z Kalifornské Univerzity, Berthold Georg Englert a Herbert Walther z Institutu Maxe Plancka, navrhli a též uskutečnili další, tentokrát technicky velmi náročnou, modifikaci dvojštěrbínového experimentu, která umožňuje detekci realizované cesty. Přínos a hloubka jejich práce spočívá právě ve skutečnosti, že jimi prováděný způsob detekce je velmi "jemný", takže minimalizuje rušivé ovlivnění měřených objektů.



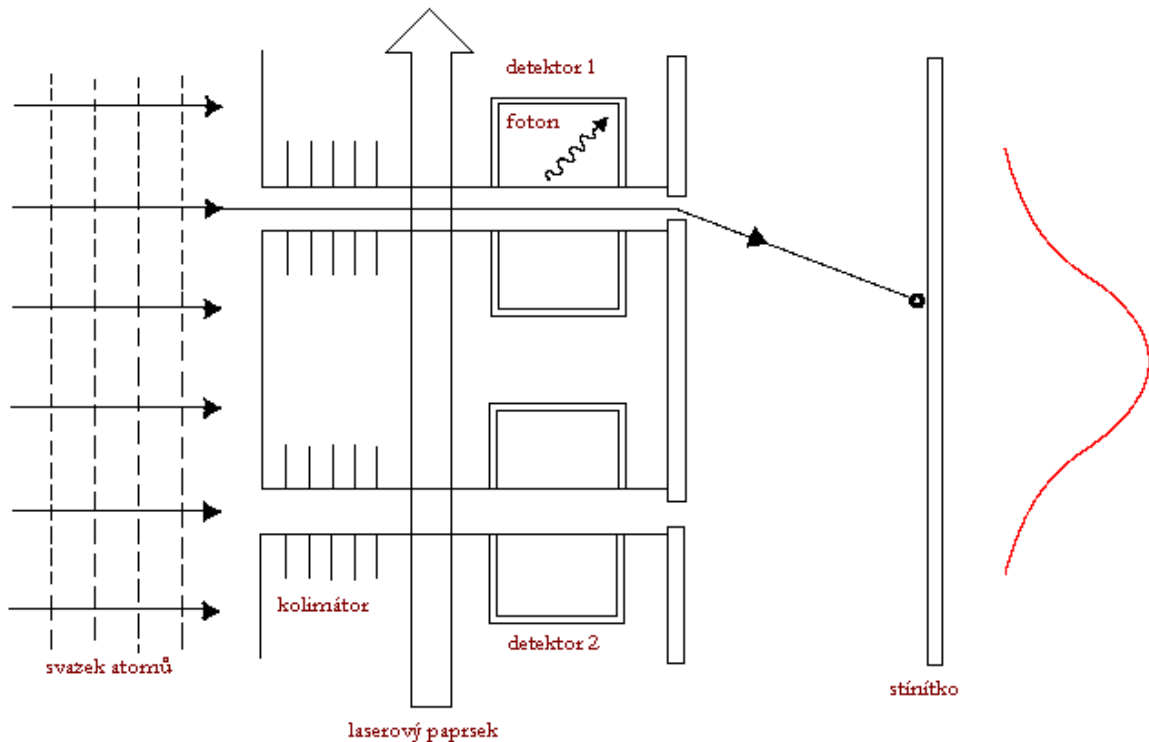
**Marlan Orvil Scully (1939)**



**Berthold Georg Englert (1954)**



**Herbert Walther (1935 – 2006)**



Obr. 12.11. Zařízení, které umožňuje zjistit realizovanou dráhu atomů. Fotony vyzářené vždy v jedné z dutin jsou nízkoenergetické, takže jejich emise nenarušuje pohyb atomů.

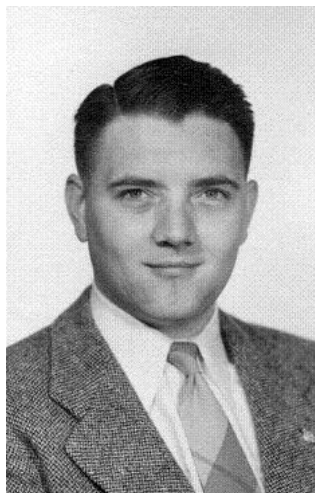
Schematické znázornění navrženého experimentu je na Obr. 12.11. Uvažujme proud atomů dopadající na desku se dvěma šterbinami. Za nimi jsou umístěny kolimátory, jež vytvoří dva rovnoběžné atomové svazky. Tyto pak odděleně procházejí dvěma detektory a následně dvěma ještě užšími šterbinami, díky nimž vznikne na stínítku obrazec. Podstata experimentu spočívá právě v použití atomů, které mají proti fotonům či elektronům složitou vnitřní strukturu elektronových slupek a tudíž i dodatečné stupně volnosti. Právě s jejich pomocí je možno atomy vhodným způsobem "označit" a poté detekovat. "Označení" se provádí vhodně "naladěným" intenzívním laserovým paprskem, jenž vybudí elektrony všech procházejících atomů ze základního do vysoce excitovaného stavu, jenž má za obvyklých okolností dlouhou dobu života. Excitované atomy každého svazku v zařízení ovšem procházejí dutinami maserového detektoru, které působí jako rezonátory, kde je situace zcela jiná. Elektrony zde mají silnou tendenci přecházet zpět do stavu nižšího, v důsledku čehož vždy dojde k vyzáření nízkoenergetických fotonů. Jejich detekcí lze rozlišit, zda atom prošel horní či dolní šterbinou. Důležité je, že fotony mají nízkou energii, a

proto proces jejich vyzáření nenarušuje podstatně pohyb mnohem těžších "mateřských" atomů.

Jedná se tedy o takřka ideální zařízení umožňující testovat základy kvantové teorie, která předpovídá, že kdykoli v zařízení získáme informaci o realizované cestě, interferenční obrazec se rozmaže. Měření provedená v Institutu Maxe Plancka v Garchingu to potvrdila. Prokázalo se, že vlnové a částicové chování kvantového systému (interference versus dráha) se navzájem vylučují. Navíc se jasně prokázalo, že to, co rozhoduje o výsledku pokusu, je samotná informace uchovaná v měřícím zařízení a nikoliv nekontrolovatelné vlivy vzniklé působením zařízení na měřený objekt. Zmíněná skutečnost implikuje vsutku "paradoxní" možnosti spočívající v tom, že pouhou manipulací s informací o realizované cestě lze ovlivnit výsledek pokusu, a to dokonce dlouho poté, co experiment proběhl.

### **Problém kvantového "smazávání" informace**

Jako první upozornil na tento pozoruhodný aspekt kvantové teorie koncem 70. let J. A. Wheeler a nazval odpovídající pokusy jako tzv. experimenty s opožděnou volbou (delayed-choice experiments). Jejich podstata spočívá v tom, že experimentátor může ve dvojštěrbinovém pokusu odložit své rozhodnutí, zda bude svým měřícím zařízením zjišťovat realizovanou dráhu mikroobjektu či ne (a "donutit" ho tím chovat se buď částicově nebo vlnově) až do doby, kdy mikroobjekt již dopadl na stínítko!

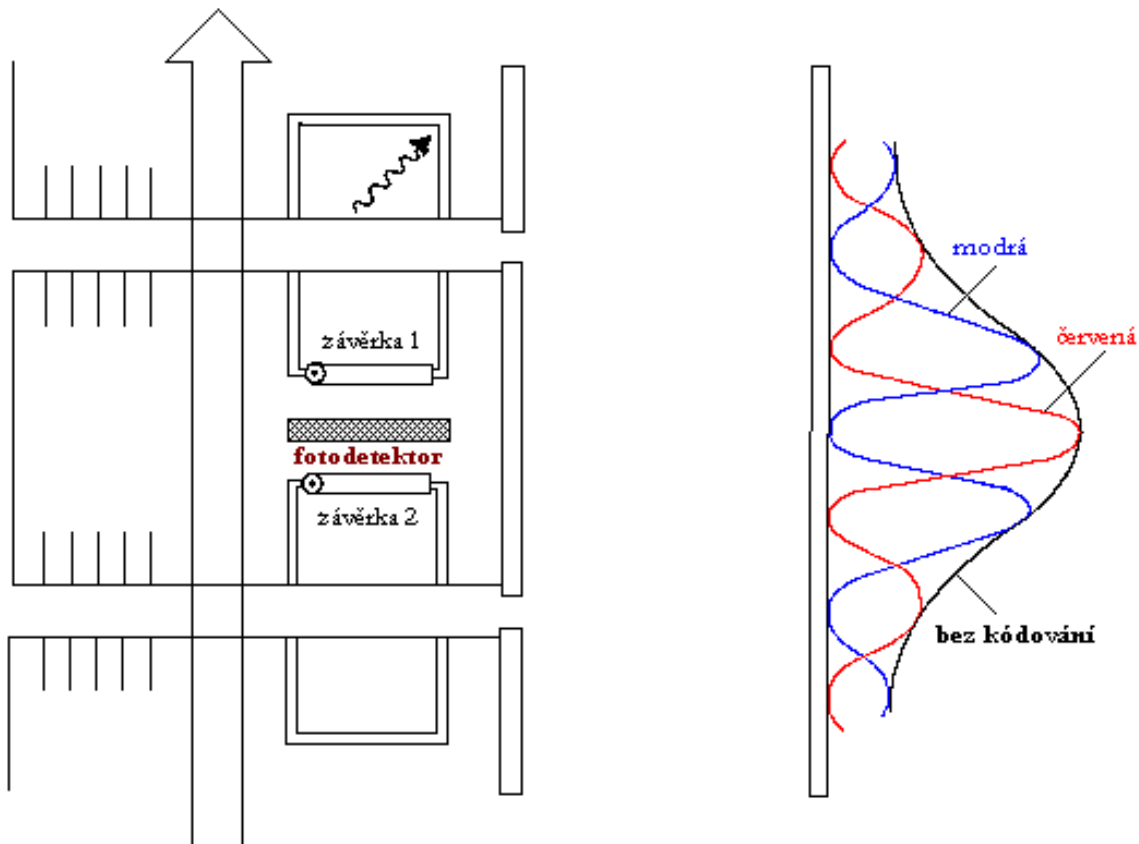


**Edwin Thompson Jaynes (1922 – 1998)**

Obdobně Edwin Jaynes formuloval počátkem 80. let tzv. **problémem kvantového smazávání** (quantum eraser problem). Jde o to, zda je či není možné znovuobnovit interferenční obrazec prostě jen tím, že dodatečně "vymažeme" informaci o realizované cestě uchovávanou v měřicím zařízení. Použitím či nepoužitím smazávacího mechanismu před měřením stavu maserových dutin můžeme, a to zcela dle naší libovůle, přinutit atomový svazek zaujmout:

- a) Stav se známou dráhou a nemožností zjistit interferenční jevy při jakémkoliv následujícím měření.
- b) Stav v němž se vlny od obou štěrbin nacházejí v měřitelné relativní fázi.

Interferenční jevy jsou tak nejen pozorovatelné, ale též předvídatelné. Můžeme se sami rozhodnout, který z nich realizovat a to i poté, co již interakce skončila a atomy se nalézají daleko od dutin, takže není myslitelný jakýkoliv fyzikální vliv na atom.



Obr. 12.12. Modifikace pokusu umožňující testování problému "kvantového smazávání".

Na obr. 12.12. je schematicky znázorněna modifikace předchozího pokusu v principu umožňující kvantové smazávání informace experimentálně provádět. Oproti zařízení na obr. 12.11. je přístroj doplněn jedním fotodetektozem se systémem dvou závěrek, umístěným mezi dutinami obou maserů. Na počátku experimentu jsou obě závěrky uzavřené. Excitovaný atom projde jednou z dutin (horní či dolní) a uloží zde emitovaný mikrovlnný foton, reprezentující informaci o realizované cestě. Zatímco foton rezonuje v dutině, atom projde celým zařízením a dopadne na jistém místě stínítka, kde zanechá stopu. Teprve poté otevřeme současně obě závěrky. Foton nacházející se v jedné z dutin má nyní možnost dopadnout na fotodetektor. Kvantová teorie předpovídá, že se tak stane s 50% pravděpodobností. Protože však v experimentu nejsme schopni rozlišit, zda foton dopadl na fotodetektor z horní či dolní dutiny, nepředstavuje signál z fotodetektoru informaci o realizované cestě, ale naopak skutečnost, že informace o realizované cestě (kterou bylo před otevřením závěrek ještě v principu možno získat) byla s jistotou smazána, neboť nyní již neexistuje. Stopu po dopadu atomu lze na stínítku označit barevně, a to v závislosti na signálu z fotodetektoru. Označme stopu například červeně, jestliže foton detekován byl a modře, jestliže foton detekován nebyl. Po průchodu mnoha atomů zařízením bychom podle kvantové teorie měli na stínítku spatřit interferenční obrazec složený střídavě z červených a modrých proužků, navzájem se doplňujících. Kvantová teorie tak řeší "Jaynesův paradox". Řešení spočívá právě v předpovědi (z hlediska prostého rozumu poněkud překvapivé), že fotodetektor po otevření závěrek zaregistruje foton pouze v polovině případů. Je to důsledek následující skutečnosti:

Vlnová funkce po průchodu atomu filtrem je dána vztahem

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{ \psi_1(\mathbf{r}) |1,0\rangle + \psi_2(\mathbf{r}) |0,1\rangle \} |a\rangle |d\rangle, \quad (12.82)$$

kde  $\psi_1(\mathbf{r})$ , resp.  $\psi_2(\mathbf{r})$  jsou prostorové části vlnových funkcí odpovídající průchodu horní, resp. dolní šterbinou. Ket  $|0,1\rangle$  popisuje stav, kdy jeden foton je v horní a žádný v dolní dutině, tj odpovídá

binární jednosloupcové matici  $\begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}$ . Ket  $|0,1\rangle$  popisuje stav opačný, tj.

$\begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$ . Ket  $|a\rangle$  popisuje vnitřní stavy atomu a  $|d\rangle$  je základní stav

fotodetektoru. Po formální substituci

$$\psi_{\pm}(\mathbf{r}) \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_1(\mathbf{r}) \pm \psi_2(\mathbf{r})\}, \quad (12.83)$$

$$|\pm\rangle \equiv \frac{1}{\sqrt{2}}\{|1,0\rangle \pm |0,1\rangle\},$$

lze vlnovou funkci ( 12.82 ) psát ve tvaru

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\{\psi_+(\mathbf{r})|+\rangle + \psi_-(\mathbf{r})|-\rangle\}|a\rangle|d\rangle. \quad (12.84)$$

Po otevření závěrek dojde k interferenci fotonů v dutinách s fotodetektorem. Protože je interakční hamiltonián symetrický, váže se jen na stav  $|+\rangle$  a nikoli na  $|-\rangle$ . Foton je proto zaregistrován jen v případě, kdy je atom popsán funkcí  $\psi_+(\mathbf{r})$  určující červené interferenční proužky. V případě kdy je atom popsán funkcí  $\psi_-(\mathbf{r})$ , k registraci fotonu nedojde a objeví se interferenční proužky modré. Četnost obou alternativ je stejná a proto je foton zaregistrován v polovině všech případů.

Ty případy, v nichž byl foton zaregistrován, tedy vytvoří na stínítku obrazec červených interferenčních proužků, zbylé případy doplní obrazec o modré "antiproužky". Odstraníme-li barevné kódování, interferenční obrazec se stane nepozorovatelným, neboť červené a modré interferenční proužky se navzájem doplňují. To je v souladu s principem komplementarity, neboť odstranění barevného kódování efektivně znamená, že fotodetektorem měření vůbec neprovádíme (neotevíráme závěrky) a informace o realizované cestě tak zůstává neporušeně uchována v dutinách.

Uvedený příklad dává užitečný vhled do samotné podstaty problému. Ono "paradoxní" objevení se interferenčních proužků po otevření závěrek je vlastně jen pouhým rozkladem celkového obrazce do dvou disjunktních podmnožin definovaných podle toho, zda byl foton emitovaný průchodem atomu dutinami detekován či nikoli. Klíčovou roli tu hraje **korelace** mezi místem dopadu atomu a stavem fotodetektoru po otevření závěrek. Není to tedy tak, že by jednotlivé atomy "věděly", kam na stínítku dopadnout dávno před tím, než jim to experimentální zařízení (a naše rozhodnutí) "řeklo". Naopak je to místo dopadu atomu, jež určuje výsledek měření fotodetektorem: pro atom dopadlý do místa červeného interferenčního proužku přejde fotodetektor po otevření závěrek do excitovaného stavu, zatímco pro atom z modrého antiproužku ne. Kauzalita zůstává i nadále v platnosti.

Atom připravený ve stavu  $\psi_+(\mathbf{r})$  označme nyní pro stručnost jako kvantovou entitu  $A$ , atom připravený ve stavu  $\psi_-(\mathbf{r})$  jako kvantovou entitu  $B$ . Interferenční proužek označíme  $a$ , interferenční antiproužek  $b$ . Z předešlého pak plynou obecná kvantová pravidla platná pro veškeré mikroobjekty:

Entita  $A$  může projít pouze jedním z otevřených kanálů a nese o tom informaci. Entita  $B$  projde zároveň všemi otevřenými kanály, avšak, je-li otevřen pouze jediný kanál, projde rovněž. Nenese ovšem žádnou informaci o realizované cestě. Entita  $A$  zanechává na měřícím zařízení  $M_{\{C\}}$  s ideální hrubostí zrna vždy obrazec  $a/2$  (rozumí se tím, že způsobí zčernání  $k$ -tého zrna fotografické desky v oblasti interferenčního proužku, a to s pravděpodobností  $1/2$ ). Entita  $B$  při otevřeném jediném kanálu zanechá na  $M_{\{C\}}$  rovněž obrazec  $a/2$ , při otevřeném větším množství kanálů však zanechá na  $M_{\{C\}}$  obrazec  $b$  (tj. způsobí zčernání  $k$ -tého zrna v oblasti interferenčního antiproužku s pravděpodobností 1). Diskuse o tom, zda entita  $B$  prošla jedním, či více kanály zároveň, pak ztrácí význam.

Z tohoto hlediska jsou jak místo dopadu, tak i výsledek měření fotodetektořem předem jednoznačně určeny stavem částice  $\psi_+(\mathbf{r})$ , resp.  $\psi_-(\mathbf{r})$ , vstupující do filtru.

Samotná realizace pokusů schematicky znázorněných na obr. 12.11 a Obr. 12.12 s "jemnou", nedestruktivní detekcí dráhy atomů pomocí mikromaserů je technicky nesmírně náročná. V zařízení se nachází vždy jen jediný atom rubidia. Velmi přesně "naladěný" laserový paprsek jej převádí do vysoce excitovaného stavu s hlavním kvantovým číslem  $n = 63$ . V dutině mikromaseru o velikosti 25 mm vyrobené z niobu a chlazené kapalným heliem přeskakuje ze stavu  $63p_{3/2}$  do stavu  $61d_{5/2}$ , čemuž odpovídá mikrovlnný foton frekvence 21,456 GHz. Příprava zmíněných experimentů proto probíhá ve špičkových laboratořích zaměřených na kvantovou optiku, především v Institutu Maxe Plancka v Garchingu.

### Princip ekvivalence

V předchozím jsme vybudovali schéma popisu stavů mikrosystémů. Jeho použití však vyžaduje znalost:

- a) spektra naměřitelných hodnot pro každou ÚMP
- b) úhlů mezi paprsky odpovídajícími vlastním stavům různých ÚMP.

Aby teorie byla vskutku fyzikální, je nutno uvedené schéma doplnit tak, aby samo poskytovalo zmíněné dvě informace. Ukažme si nyní, jak kvantová teorie tento problém řeší.

Uvažujme ÚMP  $\{A\}$  tvořenou dynamickými veličinami  $A^{(1)}, \dots, A^{(n)}$ .  $n$ -tici odpovídajících vlastních hodnot  $a_i^{(1)}, \dots, a_i^{(n)}$  budeme nadále označovat jako  $\{a\}_i$ . Každé pozorovatelné  $A^{(l)}$ ,  $l = 1, \dots, n$  přiřadíme samosdružený operátor

$$\hat{A}^{(l)} \equiv \sum_j a_j^{(l)} |\{a\}_j\rangle \langle \{a\}_j|. \quad (12.85)$$



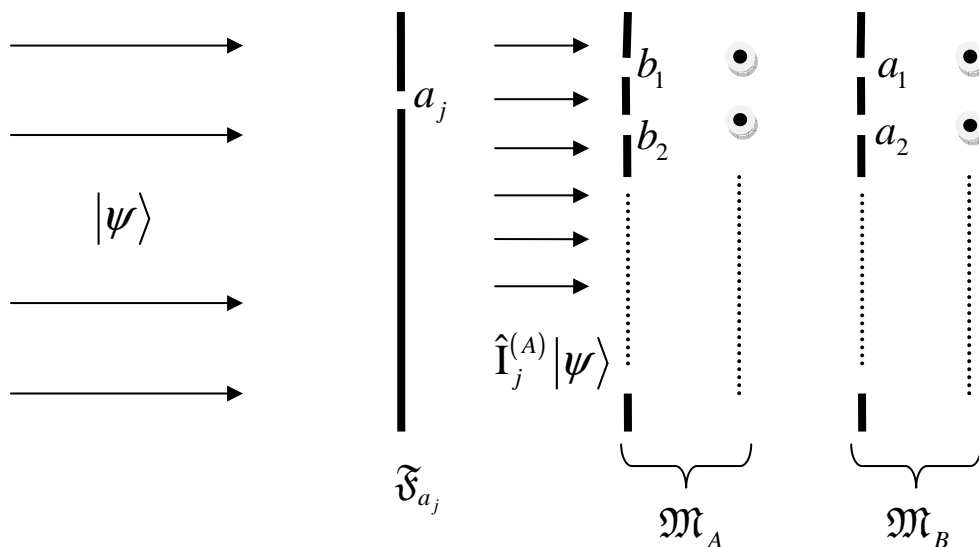
Připomeňme, že vektory  $|\{a\}_j\rangle$  tvoří ortonormální bázi  $H$  a  $a_j^{(l)}$  jsou reálná čísla. Z ortonormality vektorů  $|\{a\}_j\rangle$  plyne, že  $|\{a\}_i\rangle$  je společným vlastním vektorem všech  $n$  operátorů ( 12.85 ), příslušným k vlastním hodnotám  $a_j^{(l)}$ , tj.

$$\forall l = 1, \dots, n : A^{(l)} |\{a\}_i\rangle = a_i^{(l)} |\{a\}_i\rangle. \quad ( 12.86 )$$

Vzhledem k tomu, že zadáním vlastních hodnot ÚMP je jednoznačně definitoricky určen stav, existuje pro dané  $\{a\}_i$  jediné lineárně nezávislé řešení rovnic ( 12.86 ).

Operátory ( 12.85 ) tvoří úplný systém komutujících operátorů, odkud je ihned zřejmé, že operátory přiřazené dvojici kompatibilních dynamických proměnných navzájem komutují. Důležité je, že tvrzení lze také obrátit a platí, že operátory  $\hat{A}, \hat{B}$  přiřazené pozorovatelným  $A, B$  navzájem komutují tehdy a jen tehdy, pokud  $A, B$  jsou kompatibilní pozorovatelné. Pro důkaz posledního tvrzení uvažujme situaci znázorněnou na obrázku 12.13.

Obr. 12.13



System ve stavu  $|\psi\rangle$  dopadá na filtr  $\mathfrak{F}_{a_j}$  s otevřeným kanálem  $A = a_j$ . Filtry odpovídající jediné pozorovatelné budeme značit gotickými písmeny.  $\mathfrak{F}_{a_j}$  je tedy filtr, který připraví systém tak, aby při měření pozorovatelné  $A$  bude s jistotou nalezena hodnota  $a_j$ . Filtr  $\mathfrak{F}_{a_j}$  má tedy vzhledem k  $A$  ideální rozlišovací schopnost, avšak vzhledem k ostatním nezávislým pozorovatelným (pokud existují) náležitým též ÚMP má rozlišovací schopnost nekonečně špatnou. Podobně též měřicí přístroje, vztahující se k jediné pozorovatelné, budeme značit gotickým písmenem  $\mathfrak{M}$ . Jestliže systém projde filtrem  $\mathfrak{F}_{a_j}$ , bude ve stavu

$$\hat{\mathbf{I}}_j^{(A)}|\psi\rangle \neq 0, \quad (12.87)$$

v němž vstoupí do měřicího přístroje  $\mathfrak{M}_B$ . Jestliže  $\mathfrak{M}_B$  naměří hodnotu  $B = b_l$ , vyjde z něho systém ve stavu

$$\hat{\mathbf{I}}_l^{(B)}\hat{\mathbf{I}}_j^{(A)}|\psi\rangle \neq 0. \quad (12.88)$$

V tomto stavu nyní provedme měření pozorovatelné  $A$ . Z předchozího víme, že kvantová teorie předpovídá pravděpodobnost

$$w_{a_k} = \frac{\langle \psi | \hat{\mathbf{I}}_j^{(A)}\hat{\mathbf{I}}_l^{(B)}\hat{\mathbf{I}}_k^{(A)}\hat{\mathbf{I}}_l^{(B)}\hat{\mathbf{I}}_j^{(A)} | \psi \rangle}{\langle \psi | \hat{\mathbf{I}}_j^{(A)}\hat{\mathbf{I}}_l^{(B)}\hat{\mathbf{I}}_j^{(A)} | \psi \rangle} \quad (12.89)$$

nalezení hodnoty  $a_k$  při měření  $A$  ve stavu (12.88). Komutační relace

$$[\hat{\mathbf{A}}, \hat{\mathbf{B}}] = 0 \quad (12.90)$$

zaručuje, že pro všechna  $k, l$  platí

$$[\hat{\mathbf{I}}_k^{(A)}, \hat{\mathbf{I}}_l^{(B)}] = 0. \quad (12.91)$$

Využijeme-li ještě ortogonalitu

$$I_k^{(A)} I_j^{(A)} = \delta_{kj} I_j^{(A)}, \quad (12.92)$$

obdržíme z formule ( 12.89 )

$$w_{a_k} = \delta_{kj}, \quad (12.93)$$

což zaručuje, že výsledkem měření pozorovatelné  $A$  bude hodnota  $a_j$ . Jinými slovy, přítomnost přístroje  $\mathfrak{M}_B$  nenarušila měření  $A$ , takže  $B$  je vskutku kompatibilní s  $A$ .

Podmínka ( 12.90 ) je invariantní vůči vzájemné záměně pozorovatelných  $A$  a  $B$ . Kompatibilita je tedy vlastností vzájemnou. Upozorníme, že z kompatibility pozorovatelných  $A$ ,  $B$  ještě neplyne lineární závislost vektorů ( 12.87 ), ( 12.88 ). O vektoru ( 12.88 ) můžeme pouze říci, že patří do téhož charakteristického podprostoru operátoru  $\hat{A}$ , jako vektor ( 12.87 ). Není tedy pravdou, že jsou-li veličiny  $A$ ,  $B$  kompatibilní, potom měřením  $B$  ve vlastním stavu pozorovatelné  $A$  se tento stav nezmění. Analogické tvrzení o vlastní hodnotě ovšem pravdivé je.

Ke konstrukci operátorů dle předpisu ( 12.85 ) potřebujeme znát jak spektrum, tak i směry odpovídající vlastním stavům pro každou ÚMP. Pokud bychom však uměli zadat operátory odpovídající pozorovatelným nějakým předpisem nezávislým na ( 12.85 ), potom řešením matematického problému vlastních hodnot těchto operátorů (viz rovnice ( 12.86 )) bychom obdrželi jak spektrum, tak i charakteristické podprostory odpovídající jednotlivým prvkům spektra, čímž by se pochopitelně predikativní síla teorie nesmírně zvětšila. Pokusme se proto o takové přiřazení operátorů pozorovatelným.

Z předchozího víme, že

- a) operátor odpovídající libovolné pozorovatelné musí být samosdružený,
- b) rozhodující úlohu hrají komutační relace mezi operátory přiřazenými různým pozorovatelným.

Využijeme nyní faktu, že studium fyzikálních makrosystémů z hlediska kvantové teorie musí principiálně vést k prakticky ekvivalentním výsledkům, jako studium stejných makrosystémů prostřednictvím klasické fyziky. Podrobnější rozbor ukazuje, že klasický přístup nevede ke sporu s experimentem v procesech, v nichž všechny podstatné změny akce jsou mnohem menší, než redukovaná Planckova konstanta. Na klasickou teorii můžeme tedy nahlížet jako na limitní případ teorie kvantové pro  $\hbar \rightarrow 0$ . Podobně např. speciální relativita přechází v nerelativistickou fyziku v limitě  $c \rightarrow \infty$ . Míjíme tím, že kvantová teorie přechází v klasickou tehdy, jestliže se Planckova konstanta stává zanedbatelnou. Obdobně speciální relativita přechází v nerelativistickou fyziku pro systémy, pohybující se rychlostmi zanedbatelnými vzhledem k rychlosti světla. Očekáváme tedy, že základní vztahy mezi dynamickými veličinami mají v kvantové teorii analogickou strukturu, jako v teorii klasické. V klasické mechanice hrají důležitou úlohu Poissonovy závorky

$$[A; B] \equiv \sum_j \left( \frac{\delta A}{\delta q_j} \frac{\delta B}{\delta p_j} - \frac{\delta A}{\delta p_j} \frac{\delta B}{\delta q_j} \right), \quad (12.94)$$

kde  $A, B$  jsou dynamické veličiny vyjádřené jako funkce kanonických souřadnic a impulsů  $q_j, p_j$ . Snadno se lze přesvědčit, že platí

$$\begin{aligned} [A; B] &= -[B; A], \\ [\alpha_1 A_1 + \alpha_2 A_2; B] &= \alpha_1 [A_1; B] + \alpha_2 [A_2; B], \\ [A_1; [A_2; A_3]] + [A_2; [A_3; A_1]] + [A_3; [A_1; A_2]] &= 0, \\ [A_1 A_2; B] &= A_1 [A_2; B] + [A_1; B] A_2, \\ [A; \alpha] &= 0. \end{aligned} \quad (12.95)$$

Zcela analogické algebraické relace obdržíme, jestliže nahradíme funkce  $A_i, B$  operátory  $\hat{A}_i, \hat{B}$  a Poissonovy závorky komutátory. Tato skutečnost přivedla Diraca k velice důležitému objevu tzv.

**kontovacích podmínek:** Necht'  $A_j$ ,  $j = 1, 2, 3$  jsou dynamické proměnné, pro které platí

$$[A_1; A_2] = A_3, \quad (12.96)$$

potom jim přiřazené samosdružené operátory splňují komutační relaci

$$[\hat{A}_1; \hat{A}_2] = c\hat{A}_3, \quad (12.97)$$

kde  $c$  je univerzální konstanta. Speciálně, je-li některá z veličin  $A_i$  konstantou, potom jí odpovídající operátor je operátorem identity vynásobeným toutéž konstantou.

Samosdruženost operátorů  $\hat{A}_j$  a rozměrové důvody vyžadují, aby  $c$  byla ryze imaginární veličina rozměru akce, neboli

$$c = ikh, \quad (12.98)$$

kde  $k$  je konstanta úměrnosti, již jsme ve 3. kapitole jsme stanovili jako

$$k = \frac{1}{2\pi}, \quad (12.99)$$

odkud

$$c = i\hbar. \quad (12.100)$$

Poznamenejme, že právě z tohoto důvodu se dnes za výchozí

konstantu považuje  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$  a nikoliv  $h$ .

### Důsledky Heisenbergova principu neurčitosti

Částice, která existuje po dobu kratší než je její comptonovský čas a poté zaniká na dobu delší než je Planckův čas, nebo se materializuje posunuta o více než jednu cytoprostorovou buňku, se nazývá **virtuální**

**částicí.** Kvantiony, které nejsou od sebe na jedné a téže chreodě vzdáleny o celočíselný násobek Plankovy délky se k sobě principiálně nikdy nemohou přiblížit tak, aby mohly vzájemně přímo interagovat a proto říkáme, že se nalézají na různých hypergrupách.

Jak víme z předchozího, je čas v cytoprostoru kvantován, přičemž kvantem časového toku je antion ( $\sim 10^{-60}$  s). Nejmenším kvantem času rozpoznatelným v prostoročase je Planckův čas ( $\sim 10^{-43}$  s). Částici času nazýváme **Blandrion**

Důsledkem kvantování času a prostoru je Heisenbergův princip neurčitosti, díky kterému se mohou kvanta energie v prostoročase spontánně tvořit a opět zanikat. Vzhledem ke kvantování času zřejmě dochází ke vzniku energie kvantionů jen na základě Heisenbergovy

relace neurčitosti  $\Delta t \cdot \Delta E \geq \frac{\hbar}{2}$ .

Na úrovni polí se pak tento proces jeví jako generování kvant energie v důsledku lokálních rotací kvant prostoru a času.

Ve snaze určit energii kvantového systému s maximální přesností tak získáme pouze údaj o rotačním momentu kvant prostoročasu a naopak maximálně nepřesný údaj o veličině  $\Delta t$ .

Při  $\Delta E \rightarrow \hbar$  však dochází k náhlé skokové změně Heisenbergova vztahu, neboť zde jakékoliv fluktuace a sekundární cytorezonance, jež způsobují kvantovou neurčitost, velmi rychle konvergují k nule a ztrácejí tedy vliv na další průběh stále se zpřesňujících měření, probíhajících již na úrovni jednotlivých kvantionů či subplanckovské úrovni.

Vzhledem k tomu, že kvantový princip neurčitosti je důsledkem zejména sekundární cytorezonance, dovoluje tento model popsat částici v termínech běžného čtyřrozměrného prostoročasu coby vlnku v oceánu kvantového potenciálu tvořeného interferencí všech vln sekundární cytorezonance z celého vesmíru.

S tím souvisí pojmy jako indukované chreody, kvantový Chladnyho efekt a kvantová gravitace, o nichž zde budeme postupně podrobněji hovořit.

Časově proměnné kvantové fluktuace prostoročasu, v němž se pohybuje kvantový systém spolu se sekundárními cytorezonancemi vyvolanými rozpadem kvantionů uvnitř tohoto systému i v jeho okolí,

se navenek projevují jako vlnové vlastnosti částice, v dobré shodě s předpovědí Schrödingerovy rovnice o časoprostorové distribuci amplitudy pravděpodobnosti. Amplitudu pravděpodobnosti Schrödingerovy vlny lze v tomto smyslu interpretovat jako jistou formu silového pole tlačícího kvantiony do zcela určitých oblastí cytoprostoru.

Vzhledem k tomu, že Schrödingerova rovnice v důsledku principu neurčitosti popisuje pravděpodobnostní povahu kvantového světa, nabízí se otázka, jak vlastně souvisí pravděpodobnostní povaha kvantové teorie, daná Bornovou interpretací vlnové funkce, s na první pohled mechanistickým modelem cytoprostoru, podle kterého by přesná znalost okamžité polohy, hybnosti a stáří všech kvantionů na naší a několika nejbližších hypergrupách měla stačit k oživení Laplaceova démona, tzn. možnosti předvídání veškerých událostí minulých i budoucích se značnou přesností (míra toho, do jak vzdálené budoucnosti resp. minulosti bychom mohli nahlížet přirozeně závisí na množství analyzovaných hypergrup, popř. na našich možnostech čerpat informace přímo z Blandria).

V praxi je pochopitelně úloha prekognice značně komplikována predestinačním paradoxem. Predestinační paradox přitom nutně závisí na existenci svobodné vůle ve smyslu vědomé vůle. Kvantová nahodilost nás tak přivádí na stopu samé podstaty vědomí.

Skutečnost, že teorie cytoprostoru nepřipouští žádné vznikání energie z „ničeho“, jakož i skutečnost, že experimentálně dobře potvrzená Bohrova interpretace vlnové funkce a s ní související pravděpodobnostní povaha kvantové mechaniky jsou založeny na Heisenbergově principu neurčitosti, ukazují na nutnost zásadní syntézy obou dvou přístupů.

### **Elitzurův – Vaidmanův jev, nulová měření**

Podle kvantové teorie je vlnová funkce fotonu rozprostřena po rozsáhlé oblasti prostoru. Pokud té vlně (popisované pouze matematicky) postavíme do cesty např. fotografickou desku, k vyloučení energie z té vlny dojde jen v jednom jediném bodě vlny, kde nastane zčernání jediného zrna fotografické emulze. Tento proces je navíc pouze náhodný a pravděpodobněji k němu dochází v těch místech, kde má vlna větší amplitudu. Vlnová funkce tak

nepředstavuje žádnou reálnou energii spojitě rozprostřenou v celém jejím objemu, jako je tomu třeba u vln na mořské hladině. Její amplituda (přesněji řečeno kvadrát její absolutní hodnoty) reprezentuje pouze pravděpodobnost detekce kvanta této energie v některém jejím bodě.



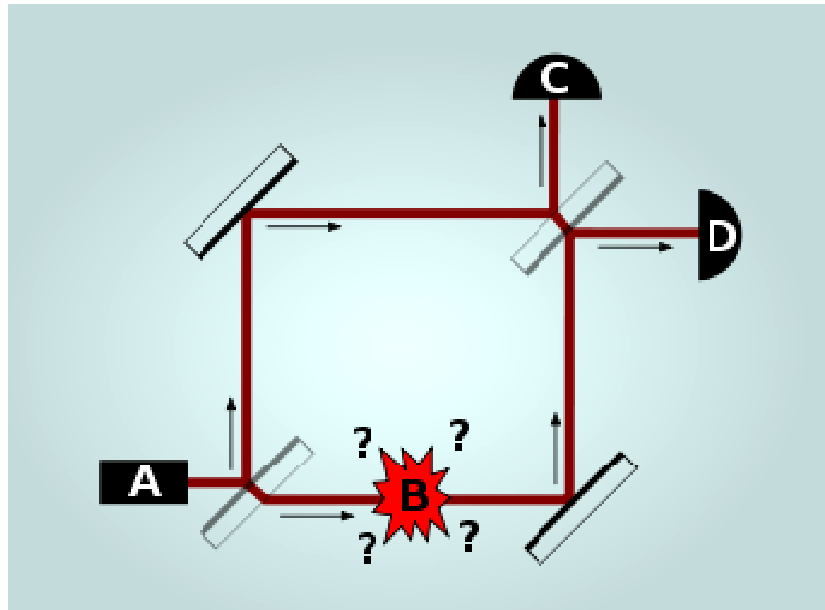
**Avshalom Cyrus Elitzur (1957)**



**Lev Vaidman (1955)**

Tato skutečnost dostává měřitelný význam v okamžiku, kdy využijeme k detekci nikoliv fyzikální část částice (tzn. reálnou energii), ale naopak tu ryze matematickou část (imaginární) a provedeme tzv. nulová měření. Představme si nyní modelovou situaci, kdy teroristé mají 100 bomb, z nichž zhruba polovina má roznětku se skrytou vadou. Pro plánovaný teroristický útok potřebují 14 stoprocentně funkčních bomb. Jak je ale detekovat aniž by je při tom zároveň odpálili? Z hlediska klasické mechaniky je úkol neřešitelný. Z hlediska kvantové mechaniky však ano. Podivuhodným rysem kvantové mechaniky je totiž skutečnost, že nám dovoluje testovat co by se mohlo stát, aniž by se to opravdu stalo. Kvantová mechanika tedy testuje to, o čem filozofové hovoří jako o potencialitě. Roznětka se opatří detektorem schopným ji spustit i v případě, že na něj dopadl jediný foton určité vlnové délky. Před dopadem na detektor se fotonu postaví do cesty polopropustné zrcadlo skloněné pod úhlem  $45^\circ$ .





Obr. 12.14: Schematické znázornění Elitzur – Vaidmanova jevu

Zdálo by se, že nastalá situace odpovídá skutečnosti, kdy se od zrcadla odrazí právě polovina fotonů a druhá polovina jím projde. Z hlediska kvantové mechaniky je však takovýto přístup zcela nesprávný. Ve skutečnosti se každý foton nalézá v superpozici obou dvou stavů, odpovídajících jak průchodu, tak i odrazu. Polopropustné zrcadlo tedy pouze oddělí tu část vlnové funkce, která nese reálné kvantum energie, od té části vlnové funkce, která je čistě matematická. Dělení je zcela náhodné, takže zhruba v polovině případů dopadne na detektor reálný foton a bomba vybuchne. Ve druhé polovině případů však dopadne na detektor holá vlnová funkce, tj. čistě matematický objekt, který nese žádnou energii a tudíž nemůže roznětku spustit. Poté obě dvě struktury (reálný foton a holou vlnovou funkci) opět propojíme a necháme interferovat. Provedeme to následovně: zrcátko detektoru bomby je vůči směru pohybu dopadající vlny skloněno pod úhlem  $45^\circ$  a část fotonového svazku, která se od polopropustného zrcadla odrazila, dopadá na plně reflexní plochu skloněnou rovněž pod úhlem  $45^\circ$ . Oba svazky se poté znovu setkají na druhém polopropustném zrcadle, v místech A a B jsou detektory fotonů. Předpokládejme, že středy obou polopropustných zrcadel leží ve vrcholech čtverce, jehož strany určují dráhy fotonů a odraz se děje vždy na povrchu zrcadla. Předpokládejme dále, že testovaná bomba je zmetek. Vlna, která procházela po horní dráze a skončila v detektoru B, neprošla ani jedním z polopropustných zrcátek, zatímco vlna běžící po spodní

dráze prošla oběma. Optická dráha druhé vlny je tedy delší a tloušťku zrcátka lze volit tak, aby se po setkání obě dvě vlny interferencí vyrušily. Naproti tomu, obě vlny, které skončí v A, prošly jen jednou tloušťkou zrcátka, dopadají tedy do A ve stejné fázi a interferencí se zesilují. V případě, kdy je bomba zmetek, se tak může vyskytnout signál pouze v detektoru A ale nikdy v detektoru B.

V případě, že je testovaná bomba funkční, není zrcátko na jejím senzoru úplně pevné a změnil se tedy v měřicí přístroj. Bomba pak měří, ve kterém stavu se foton nalézá po kontaktu s prvním polopropustným zrcadlem – je to buď stav „foton dorazil k bombě“, nebo stav „foton nedorazil k bombě“. Pakliže foton prošel skrz polopropustné zrcadlo, pak dorazil k bombě, my jsme měli smůlu a o bombu jsme přišli. Obstaráme si tedy novou a zkusíme to znovu. Existuje 50% pravděpodobnost, že se foton od prvního polopropustného zrcadla odrazil, k bombě tedy nedospěl a tato neexplodovala. Tím jsme však provedli nulové měření, neboť po ověření funkčnosti použité bomby (což je možno provést např. jejím odpálením někdy v budoucnu) můžeme získat informaci o tom, že foton s měřícím zařízením (bombou) vůbec neinteragoval, což znamená, že musel jít po horní dráze. Tím pádem ale nemá s čím interferovat a po kontaktu s druhým polopropustným zrcadlem může s pravděpodobností 50% dopadnout na detektor B a se stejnou pravděpodobností na detektor A. Ve druhém případě se o bombě nic nedozvíme, neboť detektor A registruje fotony i v případě, že je bomba zmetek. Pokud však registroval foton detektor B, pak s jistotou víme, že jsme našli funkční bombu.

Klíčovým bodem této úvahy je fakt, že funkční bomba funguje jako měřicí přístroj, což zabrání destruktivní interferenci v B přesto, že foton s bombou vůbec neinteragoval – říkáme, že proběhlo tzv.

### **nulové měření.**

Z původního počtu 100% bomb jsme tedy určili 50% potenciálně funkčních, z nichž jsme ale polovinu odpálili a z té zbylé poloviny (25% původního počtu bomb) jsme polovinu z určitostí identifikovali jako funkční (12,5% původního počtu bomb) a u té druhé poloviny si stále ještě nejsme jistí. Situace v této skupině je nyní tedy obdobná, jako na počátku a celý experiment tak můžeme na této skupině zopakovat. Získáme tím dalších 12,5% ze vstupního počtu testovaných bomb, což představuje 1,5625% z původního počtu a

stejný podíl bomb u kterých si opět nejsme jisti. Ve třetím iteračním kroku z těchto podezřelých bomb vybereme dalších 12,5% funkčních, což vzhledem k původnímu počtu představuje již pouhých 0,1953%. Ve čtvrtém iteračním kroku k nim přibude dalších 0,0244% atd. Po sečtení této řady dospíváme k závěru, že z původního počtu podezřelých bomb jsme schopni tímto postupem záskat cca. 14,1% funkčních kusů, což je 28,2% z původního počtu funkčních kusů. Jde o jev vsutku pozoruhodný, který je v ostrém rozporu s klasickou mechanikou a navíc je na současné technologické úrovni experimentálně testovatelný. Experimentální ověření výše popsaného Elitzurova – Vaidmanova jevu prakticky uskutečnili Zeilinger, Kwiat, Weinfurter a Kasevich v roce 1994.



**Anton Zeilinger (1945)**



**Paul Kwiat (1968)**



**Harald Weinfurter (1960)**



**Mark A. Kasevich (1967)**

Vidíme, že jestliže holá vlnová funkce dopadla na funkční detektor bomby, bude interferogram jiný nežli v případě, že dopadla na

detektor vadný. Pouhá matematická struktura – funkce komplexní proměnné – tak vydala svědectví o reálném zařízení, k jehož diagnostice byla použita.

Budoucí význam těchto vlastností přírody lze očekávat zejména při konstrukci kvantových procesorů, jakým je velmi pravděpodobně i sám lidský mozek. V těchto počítačích se bude prolínat reálná a imaginární část světa způsobem, který možná v důsledku poprvé povede k umělému vytvoření entity známé jako **vědomí**.

Každý foton, ač se jedná o bodovou částici (v mlžné komoře zanechává lineární stopu, na fotografické desce způsobí zčernání vždy jen jediného zrna), a tedy může projít vždy jen jednou cestou (např. štěrbinou), reaguje svým chováním velmi citlivě na fakt, jsou-li otevřeny i další (teoreticky dokonce libovolně vzdálené) možné cesty, či nikoliv. Podle toho si pak volí místo, kam může a kam nemůže dopadnout. Pozoruhodné je, že experiment dopadne úplně stejně i v případech, kdy provedeme nulová měření, kdy jsou otevřeny např. dvě štěrbinové ale za jednou z nich je umístěn detektor, který by ohlásil, že danou štěrbinou prošla částice.

Procházející částice pak okamžitě reagují na skutečnost, je-li detektor zrovna zapnutý, či nikoliv a podle toho si volí, zda dopadnou na fotografické desce do míst, kam by dopadla částice (dva pruhy), či naopak do míst, kam by dopadla vlna (série ostrých interferenčních maxim a minim). Pozoruhodné opět je, že na zapnutý či vypnutý stav detektoru reagují částice okamžitě (tedy nekonečnou rychlostí) a to i ty částice, které se náhodně rozhodly projít tou ze štěrbin, za níž se žádný detektor nenachází, takže s ním nemohly vejít v přímou interakci a "osahat si" zda je vypnutý, či zapnutý (jedná se o jakousi kvantovou obdobu mimosmyslového vnímání).

## **EPR – paradox**

Mějme dva fermiony se spinem 1/2 v singletním stavu

$$|\chi\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_1|\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1|\uparrow\rangle_2) \quad (12.101)$$

(tzv. **entanglovaný pár**, či krátce **entanglement**) které se od sebe vzdalují. Necht' obě částice letí podél osy  $y$  a pozorovatel  $A$  (Alice) měří částici 1 letící ve směru  $+y$ , pozorovatel  $B$  (Bob) měří stav částice 2 letící ve směru  $-y$ .

V době, kdy jsou od sebe obě částice natolik vzdáleny, že můžeme jejich vzájemnou interakci zanedbat a rovněž světlu trvá velmi dlouho překonání této vzdálenosti, měří Alice spinový průmět  $s_\alpha^{(1)}$  v rovině  $xz$  ve směru  $\alpha$  (vzhledem k ose  $z$ ) a v zápětí měří Bob průmět spinu  $s_\beta^{(2)}$  ve směru  $\beta$  pro druhou částici. Pro jednoduchost budeme měření provádět v jednotkách  $\hbar/2$ .



**Boris Podolsky (1896 - 1966)**



**Nathan Rosen (1909 - 1995)**

Studujme nejprve případ, kdy  $\alpha = \beta = 0$  :

Vzhledem k izotropii prostoru dá měření průmětu spinu do libovolného směru týž výsledek, tj.  $\pm 1$ . Naměří-li Alice hodnotu  $s_z^{(1)} = +1$ , je po tomto měření systém ve stavu

$$|\mathcal{X}\rangle = |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2. \quad (12.102)$$

Bob na tomto stavu tudíž naměří  $s_z^{(2)} = -1$ . Naopak, naměří-li Alice průmět  $s_z^{(1)} = -1$ , pak po měření zkolabuje systém do stavu

$$|\mathcal{X}\rangle = |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2 \quad (12.103)$$

a Bob naměří  $s_z^{(2)} = +1$ .

V obou případech platí

$$s_z^{(1)} s_z^{(2)} = -1. \quad (12.104)$$

Jelikož ve stavu ( 12.101 ) jsou oba výsledky měření Alice stejně pravděpodobné, je

$$\langle \hat{s}_z^{(1)} \rangle = \langle \hat{s}_z^{(2)} \rangle = 0, \quad (12.105)$$

kdežto

$$\langle \hat{s}_z^{(1)} \hat{s}_z^{(2)} \rangle = -1. \quad (12.106)$$

Nechť nyní  $\alpha = \pi/2$ ,  $\beta = 0$ :

Vzhledem k tomu, že osa kvantování spinu je libovolná, můžeme singletní stav ( 12.101 ) přepsat rovněž do tvaru

$$|\mathcal{X}\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}} (|x, \uparrow\rangle_1 |x, \downarrow\rangle_2 - |x, \downarrow\rangle_1 |x, \uparrow\rangle_2), \quad (12.107)$$

kde  $|x, \uparrow\rangle$  resp.  $|x, \downarrow\rangle$  je vlastní vektor průmětu spinu  $\hat{s}_x$  s vlastním číslem  $+1$ , resp.  $-1$ , přičemž v bázi vlastních vektorů operátoru  $\hat{s}_z$  jsou tyto vektory dány jako

$$\begin{aligned} |x, \uparrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle + |\downarrow\rangle), \\ |x, \downarrow\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle - |\downarrow\rangle). \end{aligned} \quad (12.108)$$

Naměří-li nyní Alice průmět  $s_x^{(1)} = +1$ , je po tomto měření systém ve stavu

$$|\mathcal{X}'\rangle = |x, \uparrow\rangle_1 |x, \downarrow\rangle_2 \quad (12.109)$$

a vzhledem k ( 12.108 ) dá tedy měření  $s_z^{(2)}$  se stejnou pravděpodobností hodnotou  $+1$  jako  $-1$ . Naměří-li Alice hodnotu  $s_x^{(1)} = -1$ , přejde po měření systém do stavu

$$|\mathcal{X}'\rangle = |x, \downarrow\rangle_1 |x, \uparrow\rangle_2 \quad (12.110)$$

a vzhledem k ( 12.108 ) obdrží Bob opět se stejnou pravděpodobností hodnoty  $s_z^{(1)} = \pm 1$ . Výsledkem mnoha měření tak budou střední hodnoty

$$\langle \hat{s}_x^{(1)} \rangle = \langle \hat{s}_z^{(2)} \rangle = 0, \quad (12.111)$$

ale tentokrát rovněž

$$\langle \hat{s}_x^{(1)} \hat{s}_z^{(2)} \rangle = 0. \quad (12.112)$$

Zobecníme nyní předchozí výsledky pro obecný směr  $\alpha$ . Bez újmy na obecnosti můžeme i nyní položit  $\beta = 0$ , neboť výsledný efekt závisí pouze na rozdílu  $\alpha - \beta$ .

Sestrojíme nejprve operátor průmětu spinu do směru

$$\mathbf{n} = (\sin \vartheta \cos \varphi, \sin \vartheta \sin \varphi, \cos \vartheta) \quad (12.113)$$

daného sférickými úhly  $\vartheta$  a  $\varphi$ . Podle definice je

$$\hat{s}_{\mathbf{n}} = \hat{\mathbf{s}} \cdot \mathbf{n} = \begin{pmatrix} \cos \vartheta & e^{-i\varphi} \sin \vartheta \\ e^{i\varphi} \sin \vartheta & -\cos \vartheta \end{pmatrix}. \quad (12.114)$$

Nechť je elektron popsán obecnou spinovou funkcí

$$\chi = \begin{pmatrix} e^{ia} \cos c \\ e^{ib} \sin c \end{pmatrix}, \quad (12.115)$$

pak z požadavku

$$\hat{s}_n \begin{pmatrix} e^{ia} \cos c \\ e^{ib} \sin c \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ia} \cos c \\ e^{ib} \sin c \end{pmatrix} \quad (12.116)$$

po jednoduchých úpravách nalezneme

$$\begin{aligned} \varphi &= b - a, \\ \vartheta &= 2c. \end{aligned} \quad (12.117)$$

Singletní stav nyní můžeme přepsat pomocí vlastních vektorů průmětu  $\hat{s}_\alpha$  coby

$$|\alpha, \uparrow\rangle = \left[ \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\uparrow\rangle + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\downarrow\rangle \right]. \quad (12.118)$$

Vektor  $|\alpha, \downarrow\rangle$  je ortogonální k (12.118), takže

$$|\alpha, \downarrow\rangle = \left[ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\uparrow\rangle - \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\downarrow\rangle \right]. \quad (12.119)$$

Analogicky k (12.101) a (12.107) tedy dostáváme

$$|\chi\rangle_s = \frac{1}{\sqrt{2}} \left( |\alpha, \uparrow\rangle_1 |\alpha, \downarrow\rangle_2 - |\alpha, \downarrow\rangle_1 |\alpha, \uparrow\rangle_2 \right). \quad (12.120)$$

Po měření  $s_\alpha^{(1)}$  Alicí s výsledkem +1 přejde systém do stavu



$$|\chi'\rangle = |\alpha, \uparrow\rangle_1 \left[ \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\uparrow\rangle_2 - \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\downarrow\rangle_2 \right], \quad (12.121)$$

odkud je vidět, že měřením  $s_z^{(2)}$  Bobem získáme hodnoty +1 resp. -1 s pravděpodobnostmi  $P_{\uparrow} = \sin^2 \frac{\alpha}{2}$ , resp.  $P_{\downarrow} = \cos^2 \frac{\alpha}{2}$ . V případě, že Alice naměří naopak -1, plynou z (12.118), pravděpodobnosti výsledků měření Boba  $P_{\uparrow} = \cos^2 \frac{\alpha}{2}$ , resp.  $P_{\downarrow} = \sin^2 \frac{\alpha}{2}$ .

Tak jako dříve bude tedy výsledkem mnoha měření

$$\langle \hat{s}_{\alpha}^{(1)} \rangle = \langle \hat{s}_{\alpha}^{(2)} \rangle = 0, \quad (12.122)$$

ale

$$\begin{aligned} \langle \hat{s}_{\alpha}^{(1)} \hat{s}_z^{(2)} \rangle &= \frac{1}{2} \left( 1 \cdot 1 \cdot \sin^2 \frac{\alpha}{2} + 1 \cdot (-1) \cdot \cos^2 \frac{\alpha}{2} \right) + \\ &+ \left( (-1) \cdot 1 \cdot \cos^2 \frac{\alpha}{2} + (-1) \cdot (-1) \cdot \sin^2 \frac{\alpha}{2} \right) = \\ &= \sin^2 \frac{\alpha}{2} - \cos^2 \frac{\alpha}{2} = -\cos \alpha. \end{aligned} \quad (12.123)$$

Prvý člen obsahuje příspěvky od  $s_{\alpha}^{(1)} = +1$ , druhý od  $s_{\alpha}^{(1)} = -1$ , každý s váhou 1/2. Pro obecnou volbu  $\alpha$  a  $\beta$  můžeme tento výsledek ještě zobecnit na

$$\langle \hat{s}_{\alpha}^{(1)} \hat{s}_z^{(2)} \rangle = -\cos(\alpha - \beta). \quad (12.124)$$

Nalezené výsledky jsou překvapující, neboť ukazují, že výsledek měření pozorovatele  $B$  závisí na měření pozorovatele  $A$ , přestože v okamžiku měření mohou být obě částice libovolně daleko.

Analogické myšlenkové experimenty vedly v roce 1935 trojici badatelů Einsteina, Podolského a Rosena k formulaci tzv. **EPR**

**paradoxu**, podle něhož je kvantová mechanika závislá na skutečnosti, kterou Einstein nazval **strašidelným působením na dálku**.

### **Teorie skrytých proměnných**

Šokující výsledky kvantové mechaniky, popsané podrobně v předešlém odstavci vedly řadu fyziků k přesvědčení, že kvantová teorie není úplnou teorií a že její pravděpodobnostní charakter je důsledkem existence skrytých proměnných, které pouze nejsme schopni identifikovat. Podle této myšlenky zdánlivě oddělené objekty ve skutečnosti mohou reagovat na určitý proces probíhající v pozadí. Velmi zjednodušenou analogií je stín tanečníka vrhaný reflektory na dvě plátna na opačných stranách jeviště. Oba stíny se mění současně podle pohybů tanečníka po jevišti. Pokud bychom byli schopni pozorovat pouze ony stíny, zdálo by se, že spolu interagují jakýmsi mysteriózním způsobem, zahrnujícím strašidelné působení na dálku. Ve skutečnosti však reagují na základnější proces probíhající v pozadí. Podle teorie skrytých proměnných je statistický charakter důsledkem toho, že měřené veličiny závisí na skrytém parametru  $\lambda$ , jehož přesnou hodnotu neznáme a v důsledku toho při určování veličiny  $A$  měříme střední hodnotu

$$\langle A \rangle_{sp} = \int A(\lambda)P(\lambda)d\lambda, \quad (12.125)$$

kde  $P(\lambda) \geq 0$  je hustota pravděpodobnosti, se kterou jsou skryté parametry rozloženy

$$\int P(\lambda)d\lambda = 1. \quad (12.126)$$

Aby nezpochybnitelné výsledky kvantové mechaniky zůstaly zachovány, je potřeba předpokládat, že každá veličina  $A$  nabývá pouze hodnot splývajících s vlastními hodnotami operátoru  $\mathbf{A}$ .

## Bellova nerovnost a Aspectův experiment

Studujme opět singletní systém dvou fermionů popsany v odstavci EPR paradox, přičemž ve shodě s principem lokálnosti předpokládejme, že měření  $s_n$  provedená Alicí a měření  $s_m$  uskutečněná Bobem jsou nezávislá. Definujme veličinu

$$X = \langle s_\alpha s_\beta \rangle_{sp} + \langle s_\alpha s_{\beta'} \rangle_{sp} + \langle s_{\alpha'} s_{\beta'} \rangle_{sp} - \langle s_{\alpha'} s_\beta \rangle_{sp}, \quad (12.127)$$

kde  $s_\alpha$  resp.  $s_{\alpha'}$  jsou dva možné průměty naměřené Alicí a  $s_\beta$  resp.  $s_{\beta'}$  dva možné průměty naměřené Bobem. Dle definice (12.127) platí

$$\begin{aligned} X(\alpha, \alpha', \beta, \beta') &= \\ &= \int P(\lambda) [s_\alpha(\lambda)s_\beta(\lambda) + s_\alpha(\lambda)s_{\beta'}(\lambda) + s_{\alpha'}(\lambda)s_{\beta'}(\lambda) - s_{\alpha'}(\lambda)s_\beta(\lambda)] d\lambda = \\ &= \int P(\lambda) [s_\alpha(\lambda)\{s_\beta(\lambda) + s_{\beta'}(\lambda)\} + s_{\alpha'}(\lambda)\{s_{\beta'}(\lambda) - s_\beta(\lambda)\}] d\lambda. \end{aligned} \quad (12.128)$$

Jelikož všechny průměty spinu nabývají pouze hodnoty  $\pm 1$ , je vždy jedna ze složených závorek v (12.128) rovna  $\pm 2$  a druhá nule. Pro každé  $\lambda$  je tak integrand v hranaté závorce v (12.128) roven buď  $\pm 2s_\alpha$  nebo  $\pm 2s_{\alpha'}$ .

Jelikož  $|s_\alpha(\lambda)| = |s_{\alpha'}(\lambda)| = 1$  platí

$$|X| \leq 2 \int P(\lambda) |s_\alpha(\lambda)| d\lambda = 2 \int P(\lambda) |s_{\alpha'}(\lambda)| d\lambda = 2, \quad (12.129)$$

kde jsme použili normování pravděpodobnosti (12.126). Získanou nerovnost odvodil John Bell v roce 1964.

Bellova nerovnost poprvé umožnila kvantitativní srovnání předpovědí teorie skrytých proměnných s předpověďmi kvantové mechaniky.

Kvantověmechanický výsledek obdržíme s použitím (12.123)

$$X(\alpha, \alpha', \beta, \beta') = -\cos(\alpha - \beta) - \cos(\alpha - \beta') - \cos(\alpha' - \beta') + \cos(\alpha' - \beta). \quad (12.130)$$

Označíme-li

$$\begin{aligned}\vartheta_1 &= \alpha - \beta, \\ \vartheta_2 &= \beta' - \alpha, \\ \vartheta_3 &= \alpha' - \beta',\end{aligned}\tag{ 12.131 }$$

pak

$$\vartheta \equiv \vartheta_1 + \vartheta_2 + \vartheta_3 = \alpha' - \beta,\tag{ 12.132 }$$

a ( 12.130 ) je funkcí tří proměnných, jejíž extrém plyne z podmínek

$$\sin \vartheta_1 = \sin \vartheta_2 = \sin \vartheta_3 = \sin \vartheta,\tag{ 12.133 }$$

$X$  můžeme dále vyjádřit jako funkci jediné proměnné  $\vartheta$

$$X(\vartheta) = \cos(3\vartheta) - 3\cos(\vartheta).\tag{ 12.134 }$$

Funkce ( 12.134 ) je znázorněna na obrázku 12.15 a jak je patrné, existují hned 4 intervaly hodnot  $\vartheta$ , ve kterých je Bellova nerovnost narušena.

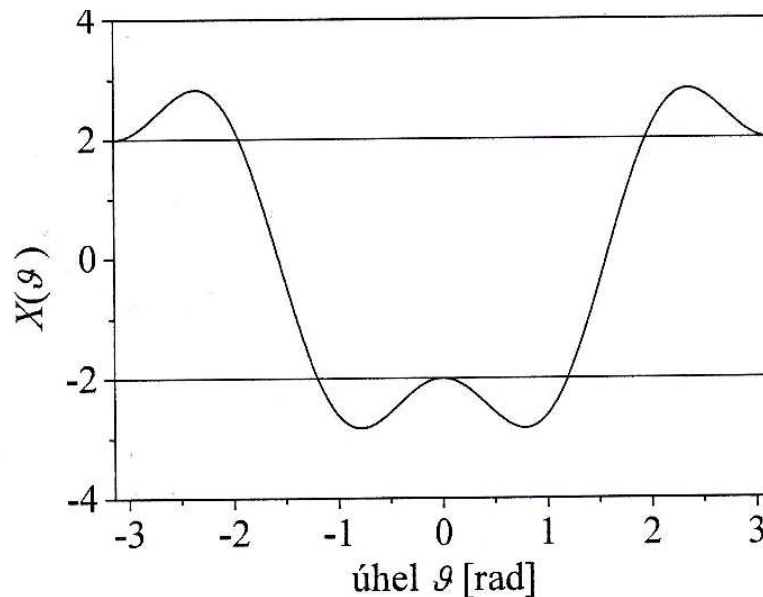


**John Stewart Bell (1928 – 1990)**



**Alain Aspect (1947)**

Experimentální rozhodnutí, který z obou výše obdržených výsledků odpovídá realitě není jednoduché vzhledem k značným obtížím při přípravě kvantového systému do stavu ( 12.101 ).



**Obr. 12.15:** Kvantová mechanika předpovídá průběh funkce  $X(\vartheta)$ , který nevyhovuje Bellově nerovnosti reprezentované konstantami  $X = \pm 2$ .

Na počátku 80. let minulého století však provedl tým francouzských fyziků pod vedením Alaina Aspecta sérii přesných měření polarizačních stavů fotonů, ve kterých se statisticky významnou pravděpodobností potvrdili narušení Bellových nerovností a tedy nelokální charakter kvantové mechaniky (Einsteinovo strašidelné působení na dálku).

### Kvantová teorie s pilotní vlnou

Podstatou této teorie je představa, že kvantové objekty mohou existovat jako skutečné částice s ostrou hodnotou hybnosti a polohy, avšak jejich vlastnosti nemůžeme změřit s neomezenou přesností. Podle tohoto obrazu je chování částice v kvantovém světě určeno nějakým dodatečným polem, které se mění způsobem, jež nelze přímo pozorovat. Skryté změny tohoto pole pak určují chování částic na kvantové úrovni.

Tuto teorii předložil již v roce 1925 Louis de Broglie. Teorie byla založena na představě, že ačkoli je např. elektron v podstatě klasickou částicí, jeho chování určuje tzv. **pilotní vlna** která se řídí pravidly kvantové pravděpodobnosti a na elektron silově působí. Tato myšlenka se zdánlivě ocitla v kritických potížích, když v roce 1932 von Neumann uveřejnil svoji převratnou knihu o kvantové teorii. Jeho

knihy obsahovala mimo jiné i údajný důkaz, že žádná teorie se skrytými proměnnými nemůže náležitě popsat chování objektů v kvantovém světě. Protože byl von Neumann jedním z nejšpičkovějších matematiků své doby, nikoho nenapadlo hlouběji zkoumat jeho důkazy a jeho chyby si tak zpočátku vůbec nikdo nevšiml.

Na vcelku školáckou chybu ve von Neumannově důkazu upozornila jako první matematicka Grete Hermannová v roce 1935, podrobnější matematický rozbor celého von Neumannova omylu pak zveřejnil John Bell v roce 1966.



**Grete (Henry) Hermann (1901 – 1984)**

Začátkem 50. let minulého století se americký fyzik David Bohm spolu s dalšími badateli pustili do rozvoje takové interpretace kvantové mechaniky, která se nese v duchu teorií skrytých proměnných a funguje přitom stejně dobře, jako klasická kodaňská interpretace. Nicméně pohled na kvantovou skutečnost, jež skýtá, je zcela odlišný. Bohm tento svůj pohled na podstatu skutečnosti shrnul v knize *The Ghost in the Atom*.

Podle Bohmovy interpretace mají částice vždy ostrou hodnotu polohy i hybnosti, avšak jakýkoliv pokus o jejich změření rozmaže tyto informace změnou pilotní vlny související s částicemi.

„Šťouchnutí do pilotní vlny na jednom místě (např. změřením polohy elektronu) okamžitě změní tvar pilotní vlny všude jinde, což ovlivní všechny částice ve sféře jejího působení. Protože způsob, jakým pilotní vlna ovlivňuje částice, zpětně určuje její tvar, nezáleží na tom, jak silná vlna na tom či onom místě je. Dokud do příslušného místa vlna zasahuje, změna jejího tvaru ovlivňuje všechny tamější částice.

Klíčové přitom je, že pilotní vlna na poruchu v jednom konkrétním místě reaguje okamžitě v celém svém objemu. Sama pilotní vlna má tedy nelokální charakter.

Bell v roce 1966 dokázal, že teorie skrytých proměnných mohou fungovat právě za předpokladu nelokálnosti. Zároveň ale ukázal, že nelokálnost musí zahrnovat dokonce každá myslitelná interpretace kvantové reality. V tomto roce totiž Bell publikoval své slavné nerovnosti, jejichž porušení by znamenalo, že je jednou pro vždy potřeba zavrhnout pojem **lokální skutečnosti**. Slovo „lokální“ v této souvislosti znamená, že neexistuje žádná komunikace rychlejší než světlo ve vakuu a slovem „skutečnost“ je míněna existence světa nezávisle na našich pozorováních.

Když bylo později experimentálně potvrzeno, že příroda vskutku Bellovy nerovnosti porušuje, bylo ihned zřejmé, že se musíme minimálně jednoho z těchto dvou pojmů vzdát.

Máme-li být úplně přesní, pak Bellova nerovnost ve skutečnosti vlastně vůbec nezávisí na kvantové mechanice. Porušení Bellových nerovností vyžaduje zavržení lokální skutečnosti dokonce i v případě, že by se časem kvantová mechanika ukázala jako nesprávná či neúplná teorie.

Vlnová funkce, ačkoliv zřejmě stojí v samých základech fyzikální reality, sama se poněkud vymyká čemukoli, co jsme zvyklí nazývat fyzikálním systémem. Jednak není přímo pozorovatelná – lze ji detekovat pouze pomocí částic. Na tom by nebylo nic až tak zvláštního – např. fyzikální pole lze detekovat rovněž jen s pomocí testovacích částic. Mnohem závažnější vlastností vlnové funkce je skutečnost, že se může měnit jakoby v celém prostoru najednou. Změny se v ní šíří takovou závratnou rychlostí, že v rámci přesnosti našeho měření času dané Planckovou škálou, nastávají v celém prostoru jakoby naráz. Prakticky byla tato vlastnost testována v experimentu Alaina Aspecta, během narušení Bellových nerovností. Protože se ale tímto způsobem nemohou přenášet v prostoročase žádné informace nadsvětelnou rychlostí, není tím narušena teorie relativity.

Bohm myšlenku, že vše je propojeno se vším, jakož i okamžitě ovlivňováno veškerými událostmi ve vesmíru prostřednictvím pilotní vlny, dále rozvinul. Vystoupil s názorem, že zdánlivě nezávislé objekty ve skutečnosti reagují na určitý proces, který probíhá

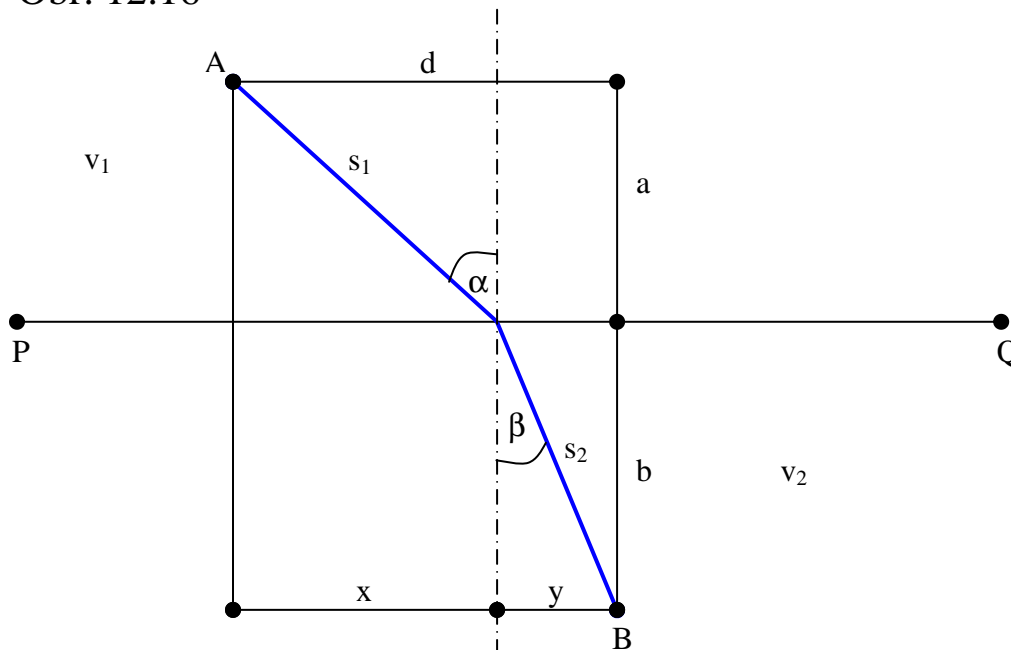
v pozadí. V pozdějších verzích své teorie Bohm navrhl, že u základního řádu v pozadí světa se jedná o pole tvořené nekonečným počtem překrývajících se vln a toto překrývání vln produkuje lokální jevy, jež vnímáme jako částice.

Všechny tyto myšlenky jsou víceméně analogické přístupu ke kvantové mechanice, který vyvinul Richard Feynman pod názvem **kvantování dráhových integrálů**, o kterém jsme se krátce zmínili v deváté kapitole. Uvažujme nyní následující myšlenou situaci:

Budiž bod A stanovištěm plavčíka a bod B místem na moři, kde tonoucí zoufale volá o pomoc. Přímka procházející body P, Q budiž rozhraním mezi mořem a souší.

Označme  $v_1$  rychlost, kterou se plavčík, spěchající na pomoc tonoucímu, pohybuje po souši a  $v_2$  rychlost, jíž se pohybuje v moři. Úkol zní nalézt takovou trajektorii z bodu A do bodu B, po níž se plavčík dostane k tonoucímu za co nejkratší čas.

Obr. 12.16



Z Pythagorovy věty pro délku trajektorie dostáváme

$$s = \sqrt{a^2 + x^2} + \sqrt{b^2 + y^2} \quad (12.135)$$

což je funkce dvou proměnných  $x, y$ , kterou dále upravíme na tvar



$$s = \sqrt{a^2 + x^2} + \sqrt{b^2 + (d - x)^2} \quad (12.136)$$

čímž jsme eliminovali proměnnou  $y$ . Pro čas  $t$  potom platí

$$t = \frac{s}{v} = \sum_{i=1}^2 \frac{s_i}{v_i} = \frac{\sqrt{a^2 + x^2}}{v_1} + \frac{\sqrt{b^2 + (d - x)^2}}{v_2}. \quad (12.137)$$

Nyní vypočteme derivaci času podle  $x$ :

$$\begin{aligned} \frac{dt}{dx} &= \frac{d}{dx} \left( \frac{\sqrt{a^2 + x^2}}{v_1} + \frac{\sqrt{b^2 + (d - x)^2}}{v_2} \right) = \\ &= \frac{1}{v_1} \frac{d}{dx} (a^2 + x^2) \frac{d}{dx} \sqrt{u} + \frac{1}{v_2} \frac{d}{dx} (b^2 + d^2 - 2dx + x^2) \frac{d}{dx} \sqrt{w} = \\ &= \frac{1}{v_1} 2x \frac{1}{2\sqrt{u}} + \frac{1}{v_2} (2x - 2d) \frac{1}{2\sqrt{w}} = \frac{1}{v_1} \frac{x}{\sqrt{u}} - \frac{d - x}{v_2 \sqrt{w}} = \\ &= \frac{1}{v_1} \frac{x}{\sqrt{a^2 + x^2}} - \frac{1}{v_2} \frac{d - x}{\sqrt{b^2 + (d - x)^2}} = \frac{\sin \alpha}{v_1} + \frac{\sin \beta}{v_2}. \end{aligned} \quad (12.138)$$

Pro minimální čas tak musí platit

$$\frac{dt}{dx} = 0 \quad (12.139)$$

( $t_{\max} = \infty$ ) takže dostáváme konečný výsledek pro hledanou dráhu

$$\frac{\sin \alpha}{\sin \beta} = \frac{v_1}{v_2}. \quad (12.140)$$

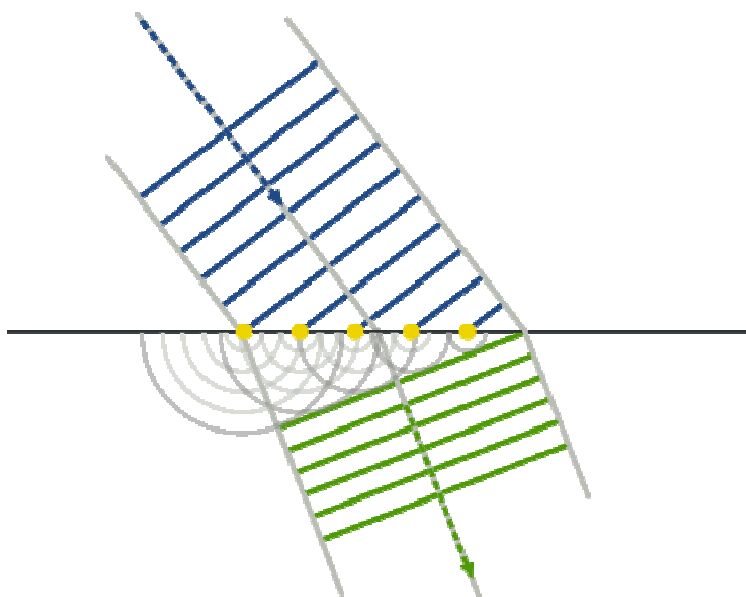


Willebrord Snellius (1580 – 1626)



Christiaan Huygens (1629 – 1695)

To je ovšem známý Snellův zákon, který lze odvodit rovněž z Huygensova principu vlnové mechaniky a tedy např. i optiky (viz obr. 12.17).



Obr. 12.17: Vysvětlení Snellova zákona na základě Huygensova principu

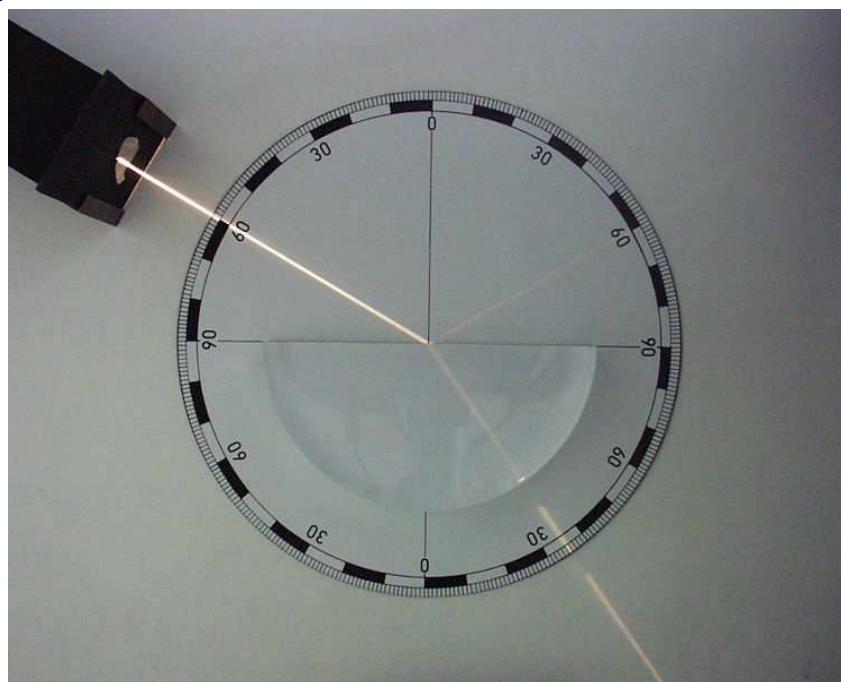
Fotony se tedy vždy šíří takovou cestou, která jim zabere minimální čas, což je věta známá jako **Fermatův princip**.



**Pierre de Fermat (1601 – 1663)**

Podle Feynmanovy metody kvantování dráhových integrálů je touto cestou právě ta, kde se rozdíl časů pro blízké dráhy blíží nule. Pro tyto dráhy se pravděpodobnosti skládají konstruktivně a posilují se. Pro „bláznivé“ dráhy fotonů, které leží daleko od optimální dráhy s minimem času, se projevuje daleko větší rozdíl v časech pro blízké dráhy, pravděpodobnosti těchto drah se skládají destruktivně a vzájemně se vyruší. Namísto, aby se řeklo, že foton se šíří každou z možných cest, jejichž pravděpodobnosti se navzájem skládají, můžeme stejně tak uvažovat, že každou z možných cest se šíří pilotní vlna, která vytváří kvantový potenciál, jenž udržuje foton na cestě nejmenšího odporu, což bude zároveň cesta s minimem času.

Obr. 12.18



## Amplituda pravděpodobnosti coby druh silového pole

Předpokládejme, že se částice vlivem kvantových fluktuací prostoročasu posune náhodně v prostoru v plackově čase o 1 planckovu délku. Pokud ji v čase  $t_0$  lokalizujeme v bodě  $\mathbf{r}$  vlnového klubka, pak v čase  $t_0 + n \cdot t_h$  bude její nejpravděpodobnější pozicí povrch sféry vzdálené o  $n^{\frac{1}{3}} \cdot l_h$  od bodu  $\mathbf{r}$ . Ve skutečnosti však je prostorová distribuce pravděpodobnosti nalezení částice dána kvadrátem normy vlnové funkce (srov. ( 3.67 )):

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{2\hbar\pi^{\frac{5}{4}}d^{\frac{1}{2}}} \int \int \exp\left(\frac{\mathbf{p}\mathbf{r}}{i\hbar} - \frac{(r-a)^2}{2d^2}\right) d^3\mathbf{r} \exp\frac{\frac{p^2}{2m}t - \mathbf{p}\mathbf{r}}{i\hbar} d^3\mathbf{p} \quad ( 12.141 )$$

Vlnové klubko se tedy efektivně chová jako silové pole udržující částici blízko svého středu.

## Kvantový potenciál

V minulém odstavci jsme poodhalili krásu kvantových teorií s pilotní vlnou. V nich vystupuje kvantová vlna jako reálná fyzikální entita (čemuž je ovšem třeba přispůsobit i tvar Schrödingerovy rovnice), která se šíří prostorem vysoce nadsvětelnou rychlostí (je možné zachovat i podsvětelnou rychlost šíření kvantových vln, což však vyžaduje rozdělení vln na tzv. reatardované a advancované, které se šíří zpět v čase. V této, tzv. transakční interpretaci KM, o níž jsme se zmínili v jedenácté kapitole, se někdy advancované vlny ztotožňují s hermitovsky sdruženou vlnovou funkcí, která tvoří v klasické KM spolu s normální vlnovou funkcí popisující běžnou retardovanou vlnu, diracovský braket určující právě distribuci pravděpodobnosti výskytu částice v prostoru).

Pole kvantových vln velkého souboru částic pak tvoří velice složitý dynamický kvantový potenciál v celém prostoru, na který jsou citlivá všechna kvanta. Kvantový potenciál v okolí stínítka (filtru) se dvěma šterbinami se bude dosti radikálně lišit od kvantového potenciálu v okolí stínítka (filtru) s otevřenou pouze jedinou šterbinou. Kvantum,

které do takového prostředí vyšleme (upozorňuji, že ono prostředí je určováno i kvantovým potenciálem buzeným ve svém okolí samotnou testovací částicí a interferujícím s kvantovými potenciály všech částic filtru) se octne v jakémsi „morfogenetickém“ poli, které bude okamžitě reagovat na aktuální stav filtru. Částice tak bude setřásána do minim kvantového potenciálu a ta se budou u různých filtrů (s různým počtem štěrbin) pochopitelně lišit. To je pravý důvod, proč přítomnost druhé štěrbinou ovlivňuje stav částice, která se při tom rozhodla projít pouze tou první.

Víme ale také, že když jednu částici páru nalezneme náhodně ve stavu  $A$ , zaujme v tom samém okamžiku druhá částice stav  $B$ , bez ohledu na jejich vzájemnou vzdálenost. Jakým kanálem se spolu dorozumívají? Kvantová mechanika nám tu ve skutečnosti podhaluje jedno z největších tajemství vesmíru.

Tímto problémem se zabývali po značnou část života např. David Bohm, Richard Feynman, John Wheeler či v současnosti třeba John Cramer. Principiálním problémem přitom nepředstavuje princip neurčitosti, který je jen pouhým důsledkem hlubších zákonitostí, jimiž se řídí příroda. Zásadní otázkou spíše je, proč mají částice vlnovou, či vlny částicovou povahu, jaká je skutečná fyzikální podstata děje zvaného kolaps vlnové funkce a jak je možné, že probíhá v celém prostoru naráz. Je primární entitou korpuskule a vlnová funkce teprve čímsi, co okolo sebe korpuskule vytvářejí, či je primární entitou vlna a kvanta jsou pouhou iluzorní záležitostí vznikající v důsledku neschopnosti atomární látky (tvořené, hodně zjednodušeně řečeno, celočíselným násobkem půlvln) vysílat a přijímat energii jinak, než po kvantech? KM na tyto otázky odpověď nezná, pouze našla vhodný matematický aparát simulující pozorované chování kvantových entit a schopný dávat poměrně rozsáhlé předpovědi, které jsou v souladu s následným pozorováním. Výše jmenovaní autoři se však snažili nalézt fundamentálnější odpovědi, než je jen pouhá matematická simulace. Viděli jsme, že kupř. David Bohm položil základy teorie tzv. pilotní vlny, která dává adekvátní kvantově mechanické předpovědi. V tomto modelu světa je primární entitou částice, která kolem sebe šíří vlnění podobně, jako loďka na vodní hladině. Interakcí mnoha částic (např. testovací částice + všechny částice tvořící experimentální aparaturu) dochází k interferenci vlnových příspěvků od každé ze zúčastněných částic (teoreticky od každé částice ve Vesmíru). Interferencí těchto vln

vzniká v prostoru velmi složitý kvantový potenciál, který je obecně dosti obtížné spočítat a který nutí volnou testovací částici putovat mnohem pravděpodobněji v blízkosti minim tohoto potenciálu, nežli jeho maxim. Pro jednoduchá uspořádání, pro něž se podařilo kvantový potenciál nalézt, se výsledky nikterak nelišily od předpovědí klasické kvantové teorie. Dokonce i podle klasické kvantové teorie vychází, že objekty ležící ve vesmíru uvnitř horizontu, se mohou vzájemně ovlivňovat a jejich vlnové funkce spolu tudíž interferují. V této souvislosti se někdy hovoří o Vesmíru jako o gigantickém hologramu, v němž každá část je latentním obrazem celku.

Vlnovou funkci částice můžeme obecně napsat jako

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \sqrt{\rho(\mathbf{r}, t)} \exp[i\varphi(\mathbf{r}, t)], \quad (12.142)$$

kde

$$\rho(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 \quad (12.143)$$

je úměrná hustotě pravděpodobnosti a

$$\varphi(\mathbf{r}, t) = \arg[\psi(\mathbf{r}, t)] \quad (12.144)$$

reprezentuje fázi vlnové funkce. Protože v řadě experimentů se zajímáme o  $|\psi|^2$ , zdálo by se, že fáze nehraje v kvantových procesech žádnou roli. Ve speciálně postavených interferenčních experimentech ji však přesto musíme brát v úvahu.

Podobně je tomu rovněž v případě nízkoteplotních experimentů, se supravodivými či supratekutými kvantovými systémy. V dynamice těchto kvantových kapalin a v jejich topologických vlastnostech hraje fáze dokonce rozhodující roli. Tyto soustavy jsou popsány tzv. **makroskopickou vlnovou funkcí**, která má tvar formálně shodný s (12.142), avšak  $\rho$  je zde úměrné nikoliv pravděpodobnosti nalezení částice, nýbrž přímo hustotě kondenzátu neboli makroskopickému počtu částic v základním kvantovém stavu. Fázový faktor  $\varphi$  je pak

makroskopickou fází tohoto kondenzátu. Makroskopická vlnová funkce tvoří základ fenomenologického popisu všech kvantových kapalin. Pokud se u těchto kapalin nalézá obrovský počet částic v jediném kvantovém stavu, dostává vlnová funkce  $\psi(\mathbf{r}, t)$  klasickou interpretaci. Kondenzát pak můžeme považovat za makroskopickou kvantovou částici.

Vlnovou funkci  $\psi(\mathbf{r}, t)$  je rovněž možno formulovat pomocí klasické akce  $S$  a poté definovat dráhu částice pomocí Hamiltonova principu jako trajektorii, podél níž je akce  $S$  minimální. Vlnová funkce má v tomto formalismu tvar

$$\psi = |\psi| \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right) = |\psi| \exp(i\varphi) = \sqrt{\rho} \exp\left(\frac{iS}{\hbar}\right), \quad (12.145)$$

s jejíž pomocí lze formulovat tzv. **hydrodynamickou formu Schrödingerovy rovnice**.

Dosadíme-li do klasické Schrödingerovy rovnice ( 3.16 ) vlnovou funkci ( 12.145 ), dostaneme dvě nelineární rovnice:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \left( \frac{\rho}{m} \nabla S \right) &= 0, \\ \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{1}{2m} (\nabla S)^2 + V_s + Q_m &= 0, \end{aligned} \quad (12.146)$$

kde

$$Q_m = \frac{\hbar^2}{m} \left( \frac{\nabla^2 \rho}{\rho} + \frac{(\nabla \rho)^2}{\rho^2} \right) \quad (12.147)$$

je **kvantový potenciál**. Položíme-li

$$\mathbf{J} = \frac{S}{m}, \quad (12.148)$$

kde  $\mathbf{J}$  značí proudovou hustotu částic, pak z první rovnice ( 12.146 ) dostaneme

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \operatorname{div} \mathbf{J} = 0, \quad ( 12.149 )$$

což je rovnice kontinuity známá z klasické hydrodynamiky (odtud pojmenování hydrodynamická verze Schrödingerovy rovnice), popř. elektrodynamiky (jedná-li se o proud nabitých částic).

Druhá rovnice ( 12.146 ) odpovídá klasické Jacobiho rovnici, v níž se ovšem vyskytuje nový člen  $Q_m$  tj. kvantový potenciál. Pro  $Q_m = 0$  dostáváme rovnice klasické mechaniky.

Kvantovou mechaniku tak můžeme interpretovat jako klasickou mechaniku doplněnou o kvantový potenciál  $Q_m$ , který závisí na hustotě částic  $\rho$  a jejím gradientu. Vlnovou funkci  $\psi$  pak můžeme interpretovat jako kvantové pole doprovázející každou jednotlivou částici, dynamika částic je řízena gradientem fáze či akce a proudová hustota bude dána vztahem

$$\mathbf{J} = \frac{\rho}{m} \nabla S = \frac{\hbar}{m} \nabla \varphi. \quad ( 12.150 )$$

Hydrodynamická formulace Schrödingerovy rovnice, známá také jako **mechanika s kvantovým potenciálem**, smazává historicky vyhloubenou propast oddělující od sebe klasickou a kvantovou fyziku, zdůrazňujíc jednotu našeho světa.

### **Kvantový Chladního efekt**

Nahodilost je jen jednou stranou mince kvantové mechaniky. Druhou stranu představuje interference amplitud (vlnové chování). Teorie se musí vypořádat s oběma problémy.

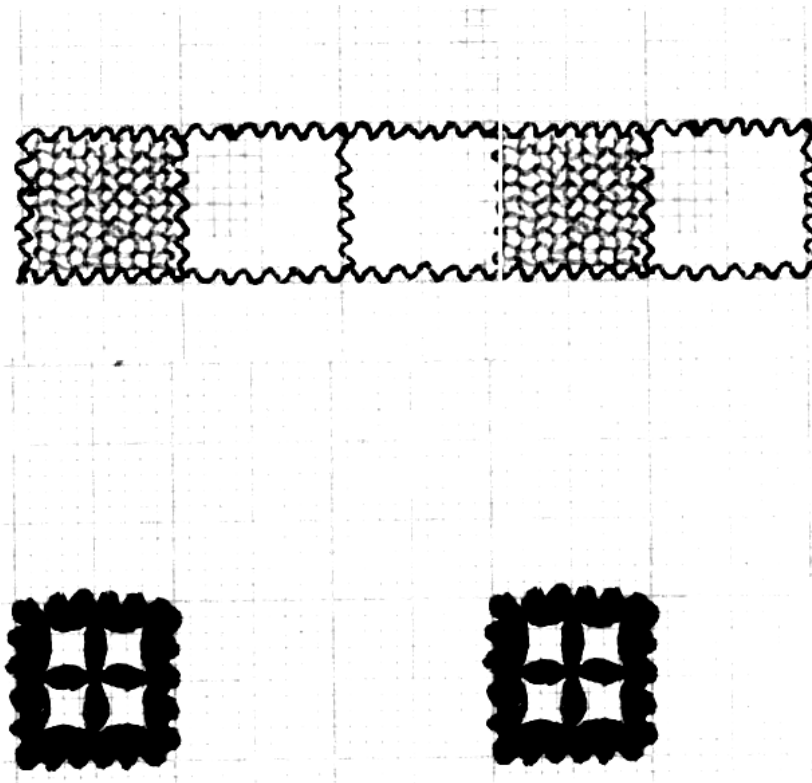
Fluktuace mikrometriky prostoročasu, se kterými jsme se setkali v deváté kapitole, jsou zdrojem energie pro tvorbu virtuálních párů a tedy fyzikálního vakua.



Jak ukazuje Obr. 12.19, projevují se fluktuace prostoročasu na úrovni mikroskopické (subplanckovské), stejně jako na úrovni megaskopické.

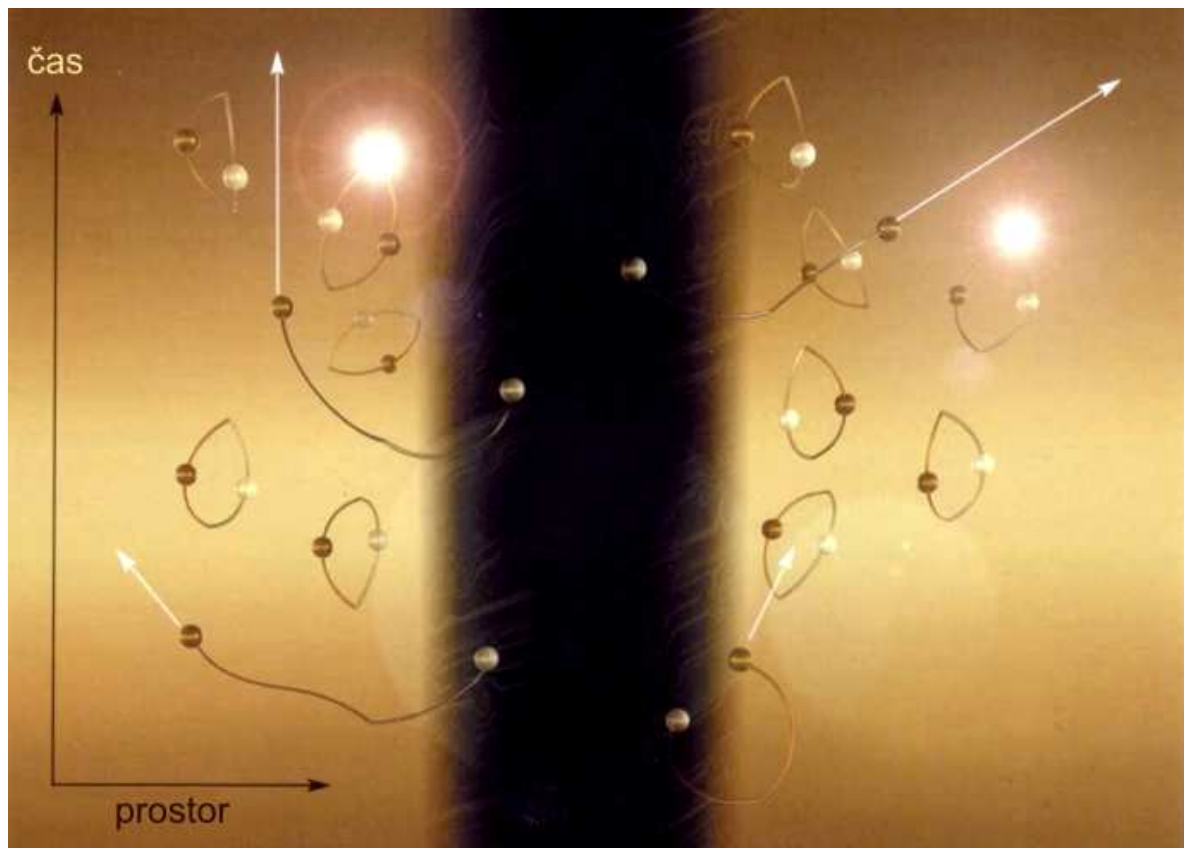
Kvantové fluktuace prostoročasu v subplanckovských měřítkách samozřejmě nemají charakter fyzikálních singularit (jejichž samu existenci jsme již vyvrátili), vnější projevy kvantových fluktuací však mohou připomínat vznikání kvantových černých děr, které během zlomku sekundy opětovně zanikají, zatímco z jimi vyzářené energie se opětovně rodí nové.

Obr. 12.19

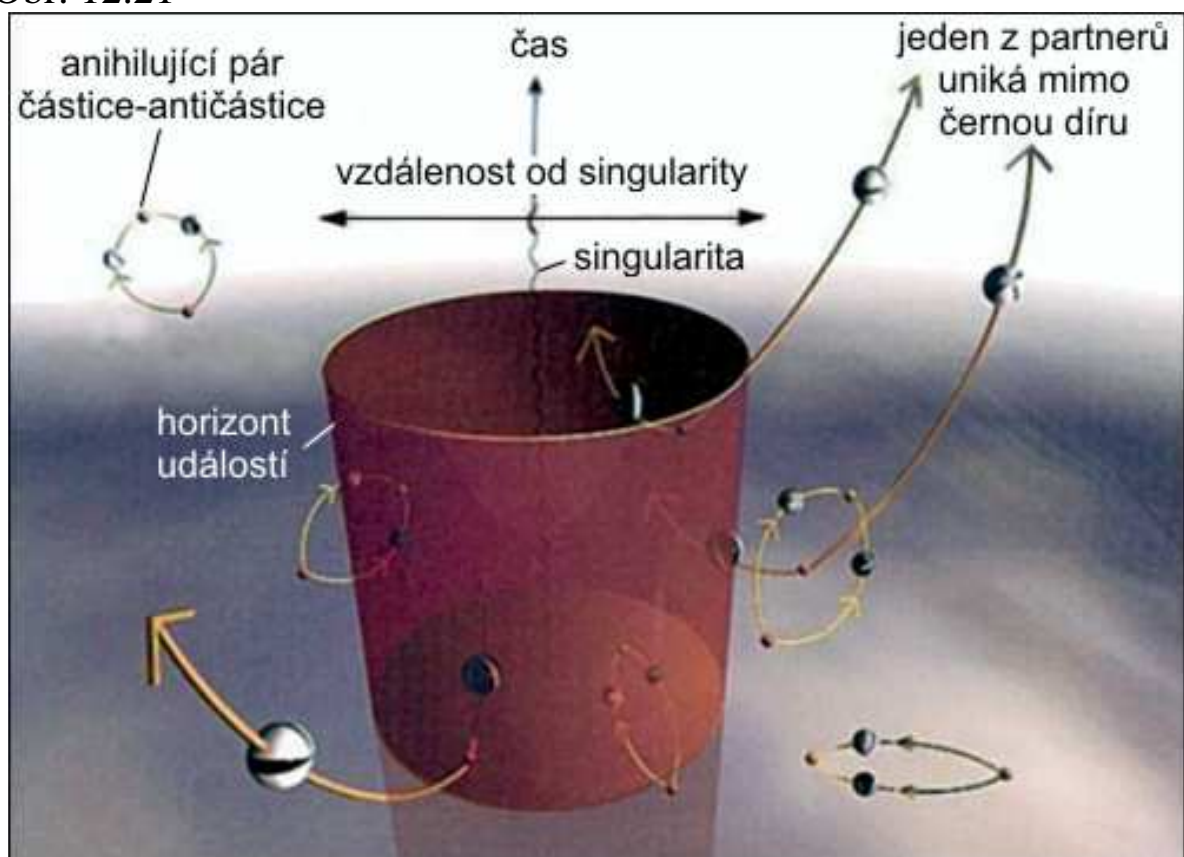


Je třeba si uvědomit, že sekundární cytorezonance může být zdrojem jak křivosti prostoročasu (která se může v extrémním případě úplně uzavřít a vytvořit černou díru), tak i kvantových fluktuací prostoročasu. Rotace kvantionu přirozeně vede k polarizaci sekundární cytorezonance, která je příčinou polarizace virtuálních párů v jeho okolí. Náboj vícekvantionové částice je kvantovým součtem momentů jednotlivých kvantionů a polarizace vakua v okolí takovéto částice pak může indukovat pole značné intenzity.

Obr. 12.20



Obr. 12.21



Uvnitř preonů se kvantiony pohybují po komplikovaných uzavřených drahách rychlostí světla. Rychlost světla je přirozenou nejvyšší možnou rychlostí kvantionu, díky níž získává kvantion hmotnost (viz Zoevistianova pohybová tabulka). Při urychlování preonu (které, jak víme, souvisí se změnami rychlosti a energie generujících cytonů) se zpomaluje četnost srážek generujících cytonů pro daný kvantion, což efektivně vede ke zpomalení jeho rotace. V důsledku toho se prodlužuje jeho doba života (antion).

Přeměna fermionu na boson se realizuje explifikací (rozvinutím) uzavřených drah kvantionů uvnitř preonů. Kvantiony se začínají pohybovat přímočaře – fermion se přeměňuje v boson. Přeměna bosonu ve Fermion probíhá přesně opačným způsobem, tzn. kompaktifikací trajektorie kvantionů.

Evoluce vlnové funkce je v KM určena deterministicky, příslušnými pohybovými rovnicemi (Schrödingerova, Klein - Gordonova, Diracova). Stav, který naměříme v nějakém čase  $t$ , je funkcí tvaru vlnové funkce, která do tohoto času dospěla a náhodného čísla generovaného v okamžiku měření přírodním generátorem náhodných čísel. Ten představují kvantové fluktuace prostoročasu, popř. různých dalších polí negravitačního původu, které působí na částici po celou dobu její existence, tedy i v okamžiku měření.

Vlnová funkce prochází běžnou deterministickou evolucí, jako bychom řešili rovnice klasické mechaniky a v okamžiku měření cosi vygeneruje náhodné číslo v intervalu řekněme  $\langle 0,1 \rangle$  a toto číslo se pak převáží kvadrátem absolutní hodnoty vlnové funkce v tomto okamžiku. Výsledkem je skutečně měřená hodnota.

Onen generátor náhodných čísel, za který jsou považovány kvantové fluktuace prostoročasu, přitom nemusí být ničím magickým, podivně korelovaným pro celý entanglement měřených částic, či dokonce pro celý vesmír. Pro každé měření je použit nezávislý generátor náhody (kvantové fluktuace prostoročasu obecně v jiném místě a čase). Při kvantové teleportaci a jiných jevech, souvisejících s narušením Bellových nerovností, je podstatná pouze korelace té vlnové funkce, která zde působí jako váha.

KM je tedy vhodným objektem pro počítačové modelování metodami monte carlo a také se zde tato metoda ve stále masivnější míře prosazuje. Na počátku máme vlnovou funkci, jejíž časová evoluce je popsána deterministicky. Jednotlivé částice pak můžeme generovat metodou monte carlo (jak jsem popsal výše), coby náhodně generované hodnoty vážené přes kvadrát normy vlnové funkce.



**Obr. 12.22: Simulace kvantového Chladniho efektu vyvolaná akustickými vlnami v látkovém prostředí posypaném drobnými zrnky písku v roli částic setřásaných do minim kvantového (v tomto případě akustického) potenciálu.**

Pokud použijeme Bohmovu metodu kvantového potenciálu, můžeme model napsat třeba tak, že vezmeme reciprokou hodnotu kvadrátu absolutní hodnoty vlnové funkce (stavového vektoru) a prohlásíme ji za potenciál. Evoluci částice v tomto kvantovém potenciálu pak simulujeme monte carlo např. jako náhodnou procházku s náhodným krokem v tomto potenciálovém poli (které se samo o sobě ještě obecně vyvíjí v čase dle příslušných KM rovnic), jež funguje jako váha pro každý náhodně zvolený krok. Po  $x$  krocích pak provedeme měření. Subkvantové vibrace prostoročasu „pod částicí“, které zde vlastně tímto modelujeme, vedou při vhodné volbě parametrů ke shodě s předpovědí KM.

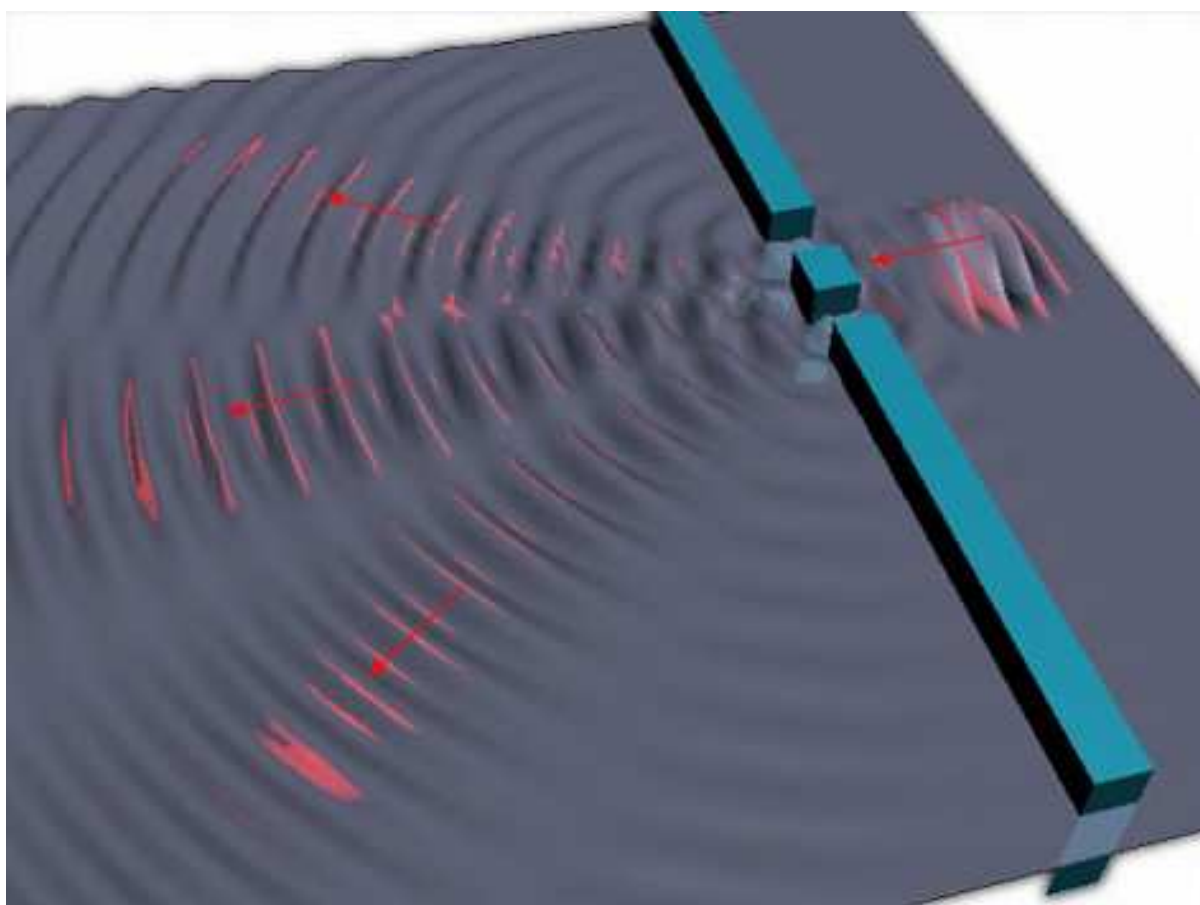


**Ernst Florens Friedrich Chladni (1756 – 1827)**

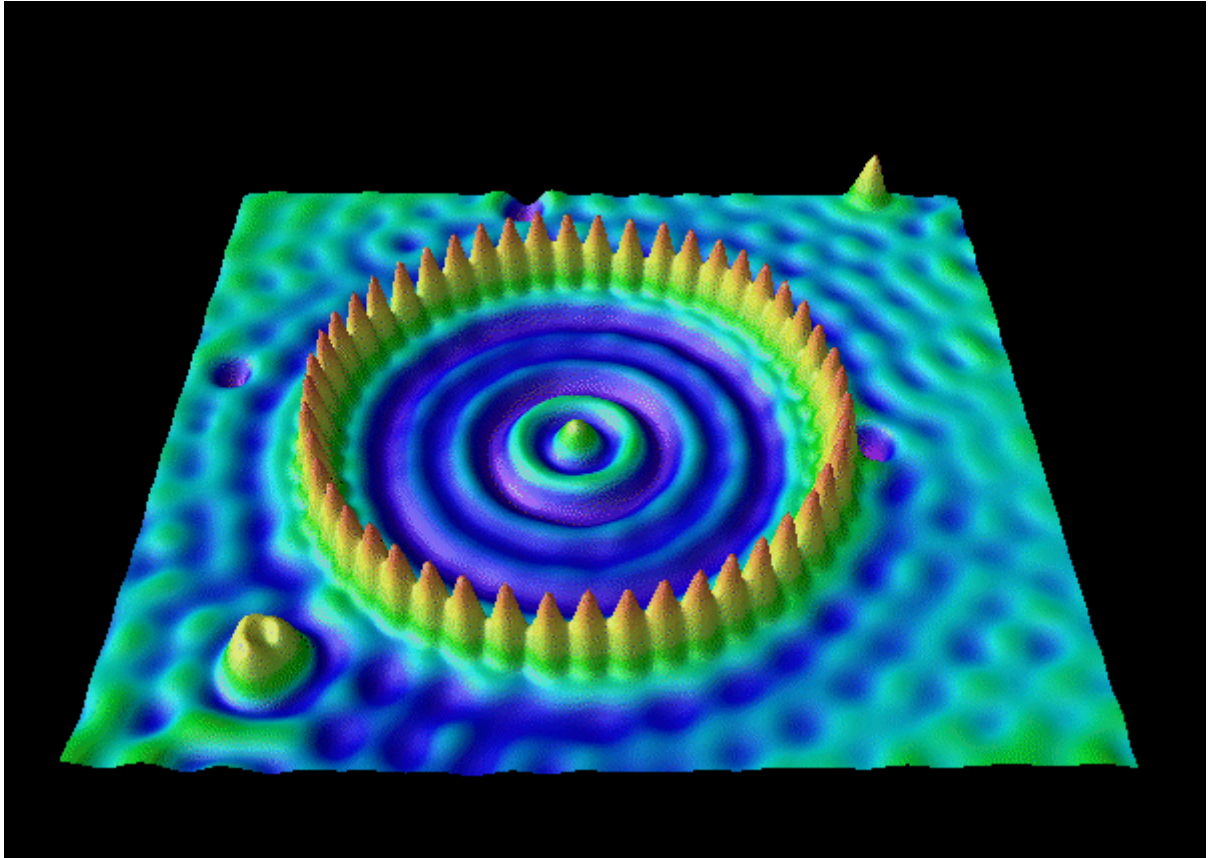
Vlnová funkce (resp. kvadrát její normy) reprezentuje distribuci pravděpodobnosti, se kterou naměříme všechny možné výsledky. To, co pak ale skutečně naměříme, je jenom jeden konkrétní výsledek (kolaps vlnové funkce).

Všechny předpovědi KM popř. obecnější KTP obstály při experimentálním testování, takže snad vyjma výpočtu energie vakua a několika dalších ojedinělých nesouladů jde o dobrý matematický model reality. To ale neznamená, že je úplný, tzn., že neobsahuje žádné ad hoc postuláty a tedy v sobě nese prapříčiny všeho. Příklad s kolapsem vlnové funkce, popsáný výše, je toho ukázkou. Přitom kvantové fluktuace prostoročasu mohou v tomto konkrétním a pro naše porozumění fyzikální realitě dosti zásadním případě, hledané vysvětlení nabídnout.

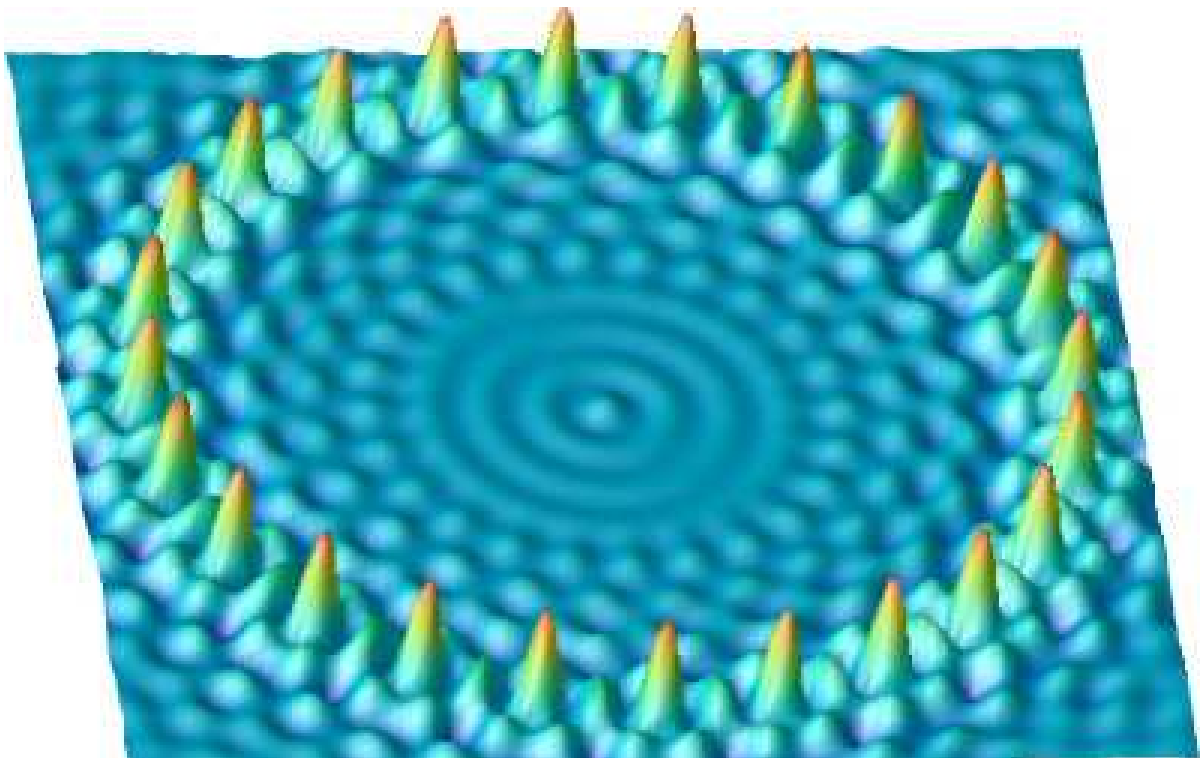
Jsou-li částice  $A$ ,  $B$  propletené, pak výsledek měření na  $A$ , dává jednoznačně předem výsledek měření  $B$ . Propletené jsou ve skutečnosti vlnové funkce – přesněji řečeno, stav systému je popsán jedinou vlnovou funkcí. V nejjednodušším případě, kdy Alice i Bob měří podél stejné osy, máme dva možné stavy – dvě ostrá minima, kam se může naše částice skutálet. V okamžiku měření Alice se vygeneruje náhodně jeden z možných stavů. O tom který z nich to bude, rozhodne právě zmiňovaný generátor. Protože toto minimum je již obsazené, nezbývá, než aby stav, který vygeneruje svým měřením bob, zaujal druhou zbývající polohu.

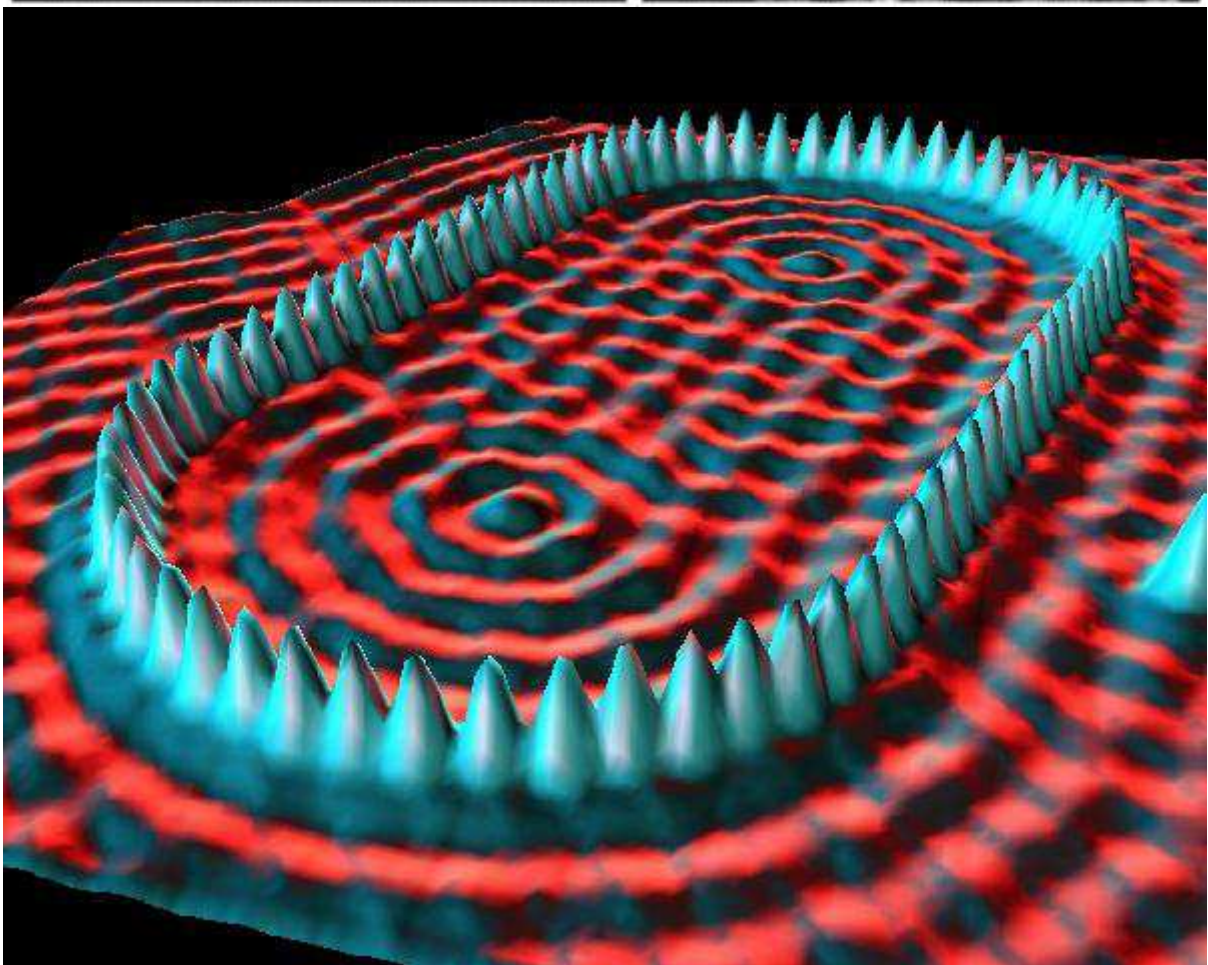
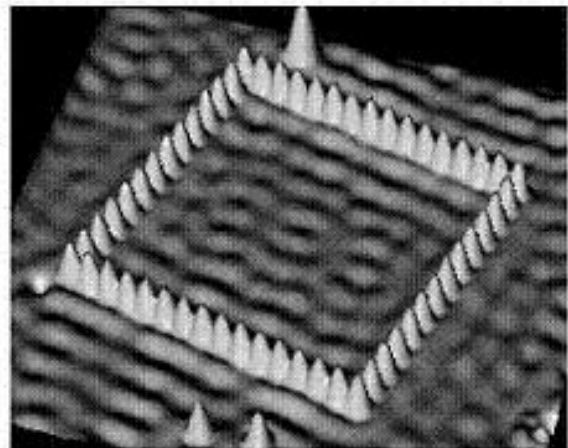
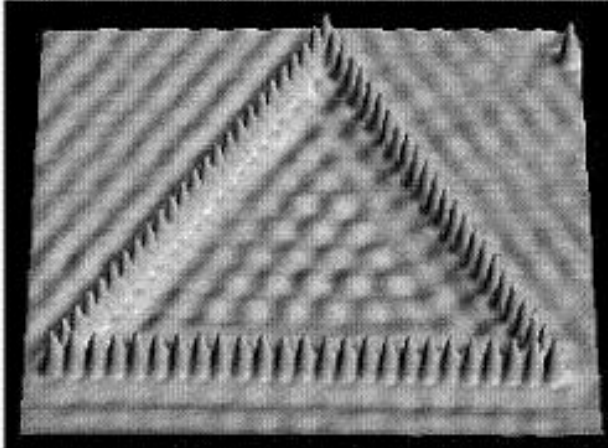
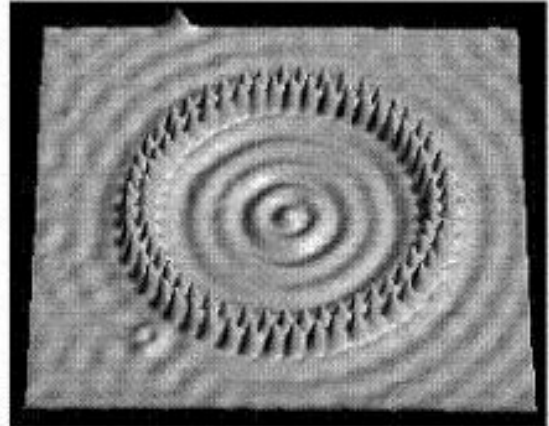
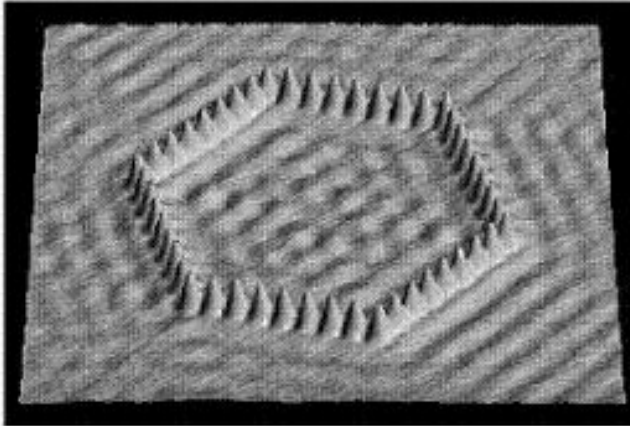


Obr. 12.23: Simulace průběhu kvantového potenciálu ve dvouštěrbinovém experimentu

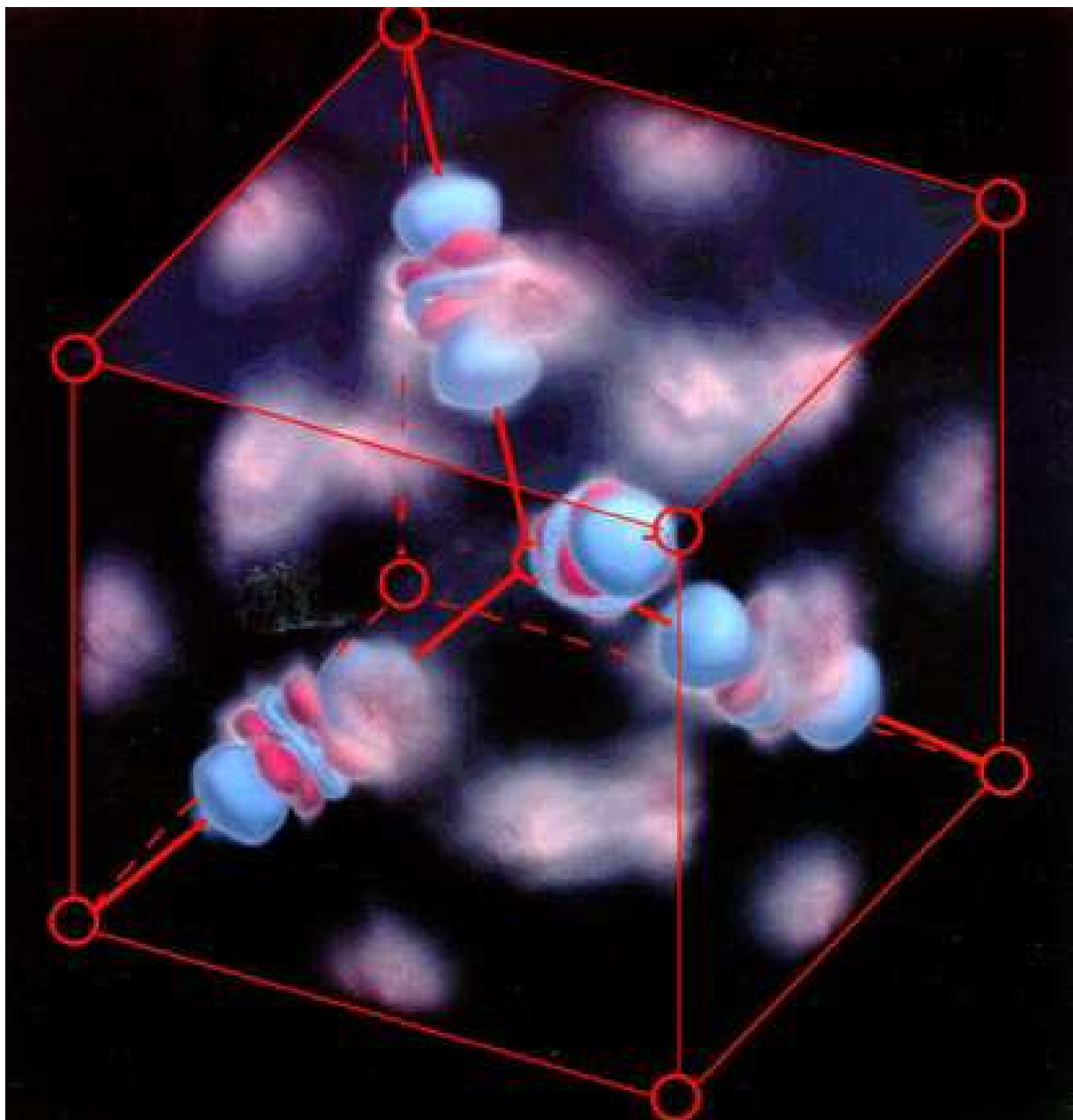


Obr. 12.24: Skenovacím tunelovým elektronovým mikroskopem pořízené fotografie kvadrátů norem vlnových funkcí (kvantového potenciálu) elektronů uvězněných uvnitř různě tvarovaných „ohrádek“ tvořených uspořádanými atomy železa.









**Obr. 12.25:** Fotografie (nikoli počítačová simulace) elektronových oblaků v molekulovém orbitalu Cu<sub>2</sub>O. Zdroj: Arizona State University

Zavedení avancovaných vln do KM je jistě velikým posunem vpřed v našem myšlení a chápání fyzikální reality. Minimálně na EPR entanglovaných párech můžeme tento mechanismus nelokální prostoročasové komunikace přímo pozorovat. Vlnové funkce částic mohou být navzájem provázány právě prostřednictvím retardovaných a avancovaných vln, nezávisle na faktické prostorové vzdálenosti těchto částic. Na druhé straně, lze výsledky experimentů Yangova typu dobře interpretovat i KM s pilotní vlnou. Avancované vlny tak

vlastně zůstávají doménou výhradně jen EPR. Se vším ostatním se lze snadno vypořádat i standardnějšími nástroji. Na druhé straně je pozoruhodné a svým způsobem i velice krásné, že též hermitovsky sdružené vlnové funkce zde získávají na fyzikálním významu, takže po matematické stránce se tato teorie jeví úplnější než ta Schrödingerova.

## **Sekundární cytorezonance a její kvanta**

Původně byla rychlost cytonů vypočtena coby nejnižší rychlost potřebná k tomu, aby model fungoval. Posléze se však ukázalo, že síla, která působí na cytonový pár uvnitř cytoprostorové buňky (síla, jež generuje orbitální chronor) je při této rychlosti naprosto identická se silou, kterou je napínán lineární chronor díky své vlastní rotaci, na základě relativistických kvantových efektů zmíněných v 11. kapitole. Přitom takto provedený výpočet oné síly je zcela nezávislý na tom, jak rychle se cyton pohybuje. Rychlost cytonu tak byla vlastně potvrzena dvěma nezávislými výpočty. Jeden vycházel ze struktury cytoprostoru jako takové (aby to fungovalo), a druhý byl ryze relativisticky kvantově mechanický. Oba dva však nakonec dospěly k naprosto stejné hodnotě napětí, což je pozoruhodným potvrzením správnosti teorie.

Cytony existují jako samostatné kvazičástice na pozadí cytoprostoru (přesněji dané cytoprostorové chreody) až do chvíle, než dojde v určité cytoprostorové buňce k jejich srážce. Takováto buňka je pak po dobu Planckova času tzv. aktivovanou buňkou cytoprostoru – generují se v ní chronory v pořadí : 1) lineární chronor, 2) orbitální chronor, 3) sférický chronor, 4) kubický subchronor. A uvnitř kubického subchronoru se vytvoří další mikrokopie cytoprostoru – intracytoprostor. Po uplynutí Planckova času se buňka deaktivuje („praskne“), vnitřní vesmír zanikne (do té doby v něm ale uplyne cca.  $3,2 \cdot 10^{18}$  s vlastního času) a z místa, kde k tomu došlo, se začne šířit tzv. sekundární cytorezonance, o níž jsme zde již několikrát hovořili. Ihned po aktivaci buňky se však děje ještě jedna důležitá věc. Po téže chreodě, po níž před okamžikem přiběhly oba cytony, se zpět k Blandriu šíří tzv. reliktová cytorezonance. Ve skutečnosti se prostoročas (nejprve však ale intracytoprostor) vytváří uvnitř

sférického chronoru a tohoto procesu se účastní 2 druhy vlnění. Transversální vlnění, které postupuje po povrchu sférického chronoru konečnou rychlostí  $v_1$ , a longitudinální vlnění postupující vnitřkem

konečnou rychlostí  $v_2$ . Poměr mezi oběma rychlostmi  $\frac{v_1}{v_2} = \sqrt{2}$ .

To vede v důsledku k vytvoření kubického subchronoru uvnitř sférického chronoru. Kubický subchronor je v kubický útvar o hraně  $7,8 \cdot 10^{-36}$  m, uvnitř kterého se sám utvoří intracytoprostor. Přesný mechanismus jeho vzniku jsme vypočetli v kap. 11, spolu s příslušnými indexy lomu cytorezonance na rozhraní intracytoprostoru, z nichž m.j. vyplývá i celková doba života vesmíru (dnes se nalézáme zhruba v 1/8 jeho celkové délky trvání).

Struktura, vyplňující prostor mezi sférickým chronorem a kubickým subchronorem, se zove Blandrium a pro fungování cytoprostoru je zcela klíčovou.

Uvnitř kubického subchronoru se nalézá krychlová dutina fungující jako rezonátor. Vnitřní prostředí uvnitř dutinového rezonátoru kubického subchronoru, jímž se může šířit vlnění, tvoří, jak již víme čas, který se po zásahu buňky párem cytonů uvnitř na Planckův okamžik prudce roztočí a následkem této rotace získá na krátko nejen vlastnosti elastického kontinua, ale zároveň se i zhmotní. Stojaté vlnění, které v tomto rezonátoru existuje, tvoří prostorovou mřížku z uzlů a kmiten. Kmitny představují cytoprostorové buňky a souvislá řada buněk spojující dvě protilehlé strany kubického subchronoru sluje chreodou (z řeckého chreos - cesta). Cytorezonanční kvazikvanta – cytony – postupují ve formě longitudinálního vlnění právě a pouze po chreodách, podobně, jako se šíří světelné vlnění (které je ovšem transversálním) v laserovém paprsku. Přitom interference primární cytorezonance se stojatým vlněním uvnitř rezonátoru (cytoprostorem) způsobuje, že se cytony primární cytorezonance, postupující podél dané chreody, objevují právě a pouze v kmitnách cytoprostorové mřížky (buňkách). Protože cytony existují pouze v diskrétních bodech cytoprostoru (či jakékoliv jeho soběpodobnostní kopie v rámci fraktální rekurse v intracytoprostoru), může docházet k jejich srážce a následnému generování kvantionu, právě a pouze uvnitř cytoprostorové buňky. Po srážce dvou cytonů v této prázdné buňce se vytvoří v jejím středu warpová bublina, která se prudce rozpíná a

v jejím nitru vznikne regulerní prostoročas, zatímco na jejím okraji se utvoří nové Blandrium chránící nitro před vnějšími poli sekundární cytorezonance. Kvantion rotuje kolem svých os obvodovou rychlostí  $2c^3$  v naší soustavě, která v jeho soustavě odpovídá rychlosti světla  $c$ . Touto rychlostí obletí signál kvantion za dobu jeho života ( $10^{-60}$  s) tj. antion.

Během jedné otáčky uběhne v kvantionu čas, který odpovídá v naší soustavě času, jenž potřebuje světelný signál k jednomu oběhu kupovesmíru ( $3,2 \cdot 10^{18}$  s), což je životnost kupovesmíru. Uvnitř kvantionu odpovídá tato doba jednomu antionu. Po jejím uplynutí se kvantion včetně Blandria rozpadá a jeho vnitřní energie se přeměňuje na sekundární cytorezonanci, která se šíří cytoprostorem od místa rozpadu kvantionu. Cytoprostorová buňka „obývaná“ kvantionem se vyprázdňuje a je připravena přijmout další cytonový pár.

Sekundární cytorezonance se od primární liší jednak amplitudou, a jednak tím, že se šíří cytoprostorem všemi směry bez ohledu na chreody. Na rozdíl od primární cytorezonance, jdoucí spořádaně po chreodách, je sekundární cytorezonance, jdoucí napříč, tlumeným vlněním. Pokud bychom pozorovali cytoprostor skrze filtr zviditelňující pouze sekundární cytorezonanci, spatřili bychom potenciálovou hyperplochu identickou s vlnovou funkcí v rámci hydrodynamické formy Schrödingerovy rovnice (kvantový potenciál).

### **Vlnová funkce v kubické mřížce a izotropie prostoru**

Uvažujme kvantion, který se může nalézat v jedné ze dvou možných poloh, přičemž v každé z nich je ve stejných vnějších podmínkách. Předpokládejme, že existuje určitá amplituda pravděpodobnosti, že kvantion přejde z jedné z těchto dvou možných poloh do druhé a samozřejmě stejná amplituda pro opačný proces. Pro kvantion pak existují dva možné stavy s přesně určenými energiemi. Velikosti obou amplitud jsou v obou stavech konstantní v čase a jejich fáze se v čase mění se stejnými frekvencemi. Vyskytuje-li se na počátku kvantion v jedné poloze, přejde po určitém čase do druhé a za nějaký čas se opět přehoupne do původní polohy – změny amplitudy jsou podobné pohybu dvou spřažených kyvadel.

Nyní si představme cytoprostorovou mříž, kde každá buňka

představuje energetickou jamku (lokální minimum) pro každý kvantion. Existuje jistá amplituda pravděpodobnosti, že se kvantion přesune do sousední jamky, odkud se může přesunout do další polohy, ale také se může vrátit zpět do původní. Situace je nyní podobná nekonečnému počtu navzájem spřažených kyvadel, neboli šíření vln elastickým kontinuem.

Uvažujme zpočátku pro jednoduchost jednorozměrný případ – šíření kvantionu po chreodě. Necht' jsou v posloupnosti buněk chreody jednotlivé buňky očíslovány jednotlivými bázovými stavy kvantionu uvnitř dané buňky. Každý kvantový stav  $|\varphi\rangle$  dané chreody lze potom popsat s pomocí bázových stavů  $|n-1\rangle, |n\rangle, |n+1\rangle$ , kde  $|n\rangle$  odpovídá bázovému stavu, kdy je zaplněna  $n$ -tá buňka chreody. Lze to provést jednoduše tak, že udáme všechny amplitudy  $\langle n|\varphi\rangle$  toho, že se stav  $|\varphi\rangle$  nachází v některém z bázových stavů, neboli amplitudy toho, že se kvantion vyskytuje v některé buňce. Stav  $|\varphi\rangle$  lze proto psát jako superpozici bázových stavů

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle \langle n|\varphi\rangle. \quad (12.151)$$

Dále předpokládejme, že kvantion může s určitou amplitudou přejít do buňky na jedné nebo druhé straně. Uvažujme nejjednodušší případ, v němž může kvantion jedním krokem přecházet pouze do nejbližších sousedních buněk. Necht' je amplituda takového přechodu za

jednotku času  $\frac{iA}{\hbar}$ . Označíme-li dále amplitudu  $\langle n|\varphi\rangle \equiv C_n$ , můžeme

rovnici (12.151) zapsat ve tvaru

$$|\varphi\rangle = \sum_n |n\rangle C_n. \quad (12.152)$$

$|C_n(t)|^2$  je potom pravděpodobnost toho, že v čase  $t$  nalezneme kvantion v  $n$ -té buňce chreody. Hamiltonovy rovnice popisující tento systém tedy nabývají tvaru

$$i\hbar \frac{dC_n(t)}{dt} = E_0 C_n(t) - A C_{n+1}(t) - A C_{n-1}(t). \quad (12.153)$$

Koeficient  $E_0$  představuje vazebnou energii kvantionu kdyby se nemohl odpoutat od buňky a představuje výběr nuly na stupnici energií. Další člen je amplituda toho, že kvantion za jednotku času přeskočí z  $(n + 1)$ -ní do  $n$ -té buňky a poslední člen vyjadřuje amplitudu přeskočení z  $(n - 1)$ -ní do  $n$ -té buňky.

Aby bylo chování každého stavu  $|\varphi\rangle$  úplně popsáno, je třeba napsat Hamiltonovu rovnici pro každou amplitudu  $C_n$ . Protože chreda obsahuje řádově  $10^{62}$  buněk, nedopustíme se velké nepřesnosti, budeme-li předpokládat, že počet buněk a tedy i stavů je nekonečný. Pokusme se nejprve nalézt stavy s přesně určenou hodnotou energie, neboli případy, v nichž se všechny amplitudy s časem nemění buď vůbec a nebo s touž frekvencí. Řešení budeme hledat ve tvaru

$$C_n = a_n e^{\frac{-iEt}{\hbar}}. \quad (12.154)$$

Komplexní číslo  $a_n$  představuje časově nezávislou část amplitudy toho, že kvantion nalezneme v  $n$ -té buňce. Po dosazení (12.154) do (12.153) získáme nekonečný počet rovnic o nekonečnu neznámých  $a_n$ :

$$Ea_n = E_0 a_n - Aa_{n+1} - Aa_{n-1}. \quad (12.155)$$

Označme nejprve buňky podle polohy: buňka  $n$  nechť se nachází v místě  $x_n$ , buňka  $n + 1$  v místě  $x_{n+1}$ . Je-li vzdálenost mezi středy buněk  $l_h$ , potom platí

$$x_{n+1} = x_n + l_h. \quad (12.156)$$

Zvolíme-li počátek v buňce číslo nula, máme

$$x_n = n l_h. \quad (12.157)$$

Rovnice (12.154) a (12.155) přepíšeme jako

$$C_n = a(x_n) e^{\frac{-iEt}{\hbar}}, \quad (12.158)$$

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_{n+1}) - Aa(x_{n-1}).$$

S použitím vztahu ( 12.156 ) můžeme druhou rovnici ( 12.158 ) přepsat ve tvaru

$$Ea(x_n) = E_0 a(x_n) - Aa(x_n + l_h) - Aa(x_n - l_h). \quad (12.159)$$

Protože číslo  $l_h$  je velmi malé, můžeme výrazy v závorkách ( 12.159 ) považovat za diferenciály a rovnici ( 12.159 ) řešit jako běžnou lineární diferenciální rovnici s konstantními koeficienty.

Hledejme tedy řešení ve tvaru

$$a(x_n) = e^{ikx_n}. \quad (12.160)$$

Po dosazení do rovnice ( 12.159 ) dostaneme

$$Ea_n = E_0 e^{ikx_n} - Ae^{ik(x_n+l_h)} - Ae^{ik(x_n-l_h)}. \quad (12.161)$$

Celou rovnici můžeme dělit  $e^{ikx_n}$  a máme

$$E = E_0 - Ae^{ikl_h} - Ae^{-ikl_h} = E_0 - 2A \cos(kl_h). \quad (12.162)$$

Při libovolném výběru konstanty  $k$  tedy existuje řešení, jehož energie je určena rovnicí ( 12.162 ). Pro různou volbu  $k$  dostáváme různé energie, takže existuje nekonečný počet řešení. Je to důsledek toho, že jsme vycházeli z předpokladu nekonečného počtu bázových stavů.

Rovnice ( 12.160 ) určuje pro každé  $k$  veličiny  $a(x_n)$ , takže amplitudy  $C_n$  můžeme psát jako

$$C_n = e^{ikx_n} e^{\frac{iEt}{\hbar}}. \quad (12.163)$$

Činitel  $e^{ikx_n}$  představuje závislost amplitud na poloze. Když přecházíme od jedné buňky ke druhé, zjišťujeme, že amplitudy oscilují.

Uvědomme si, že amplituda se chová v prostoru jako komplexní oscilace, tzn. její velikost je stejná ve všech buňkách, ale fáze v daném čase se při přechodu od buňky k buňce mění o hodnotu  $ikl_h$ .

Imaginární část  $C_n$  je oscilující funkcí, ale její fáze je posunuta o  $\pi/2$ .

To znamená, že druhá mocnina absolutní hodnoty (součet druhých mocnin reálné a imaginární části) je stejná pro všechna  $C$ . Zvolíme-li konkrétní  $k$ , dostaneme stacionární stav se stejnou pravděpodobností v libovolné buňce – žádná buňka není preferována. Pouze fáze se mění od buňky k buňce a navíc v závislosti na čase.

Z rovnice ( 12.163 ) je vidět, že reálná a imaginární část amplitudy se šíří cytoprostorem jako vlny

$$\psi_{\text{Re}} = \text{Re} e^{i\left[kx_n - \frac{Et}{\hbar}\right]}, \quad \psi_{\text{Im}} = \text{Im} e^{i\left[kx_n - \frac{Et}{\hbar}\right]}, \quad ( 12.164 )$$

kde směr šíření závisí na znaménku  $k$ .

Z rovnice ( 12.162 ) je zřejmé, že energie může ležet pouze v intervalu od  $E_0 - 2A$  pro  $k = 0$  až po  $E_0 + 2A$  při  $k = \pm \frac{\pi}{l_h}$ . Energie tedy může

nabývat libovolných hodnot z určitého intervalu energií, mimo tento interval ale žádnou. Stačí tedy vzít  $k$  z určité ohraničené oblasti a získáme všechna možná řešení.

Prozkoumejme blíže, co se děje při malých  $k$ , tedy tehdy, když se amplituda při přechodu od jedné buňky ke druhé mění poměrně pomalu. Vybereme si takovou stupnici energií, aby platilo  $E_0 = 2A$ .

Pak se energetické minimum buňky posune na nulovou hodnotu energie. Pro dostatečně malá  $k$  můžeme psát

$$\cos(kl_h) \approx 1 - \frac{k^2 l_h^2}{2} \quad ( 12.165 )$$

a energie ( 12.162 ) přejde na tvar



$$E = Ak^2l_h^2. \quad (12.166)$$

Energie je tedy přímo úměrná kvadrátu vlnového čísla amplitud  $C_n$ . Jak popíšeme celou situaci v případě, že víme, že kvantion s určitou energií je lokalizován v určité oblasti se známou distribucí pravděpodobnosti? Můžeme toho dosáhnout superpozicí několika řešení (12.163), v nichž se hodnoty  $k$  a tedy i energie od sebe nepatrně liší. Amplituda  $C_n$  se bude měnit v závislosti na poloze, neboť jednotlivé členy spolu budou vzájemně interferovat za vzniku vlnového klubka (3.67), pohybujícího se grupovou rychlostí (3.51), kde  $\omega = \frac{E}{\hbar}$ . Namísto  $E$  dosadíme výraz (12.166) a máme

$$v = \frac{2Al_h^2}{\hbar}k. \quad (12.167)$$

Kvantiony se tedy pohybují rychlostí úměrnou charakteristické hodnotě  $k$ . Když z rovnice (12.167) vyjádříme  $k$  a dosadíme do (12.166), dostaneme výraz

$$E = \frac{1}{2}m_{ef}v^2, \quad (12.168)$$

kde

$$m_{ef} = \frac{\hbar^2}{2Al_h^2} \quad (12.169)$$

je konstanta nazývaná **efektivní hmotnost**. Vidíme tedy, že kinetická energie kvantionu je analogická kinetické energii klasické částice. Všiměme si ještě, že

$$p \equiv m_{ef}v = \hbar k, \quad (12.170)$$

což je výraz pro impuls volné částice.

Aplikujme nyní tyto výsledky na celý trojrozměrný cytoprostor. Umístíme-li počátek souřadnic do některé z buněk, můžeme pro všechny buňky cytoprostoru psát

$$x = n_x l_h, \quad y = n_y l_h, \quad z = n_z l_h, \quad (12.171)$$

kde  $n_x, n_y, n_z$ , jsou libovolná celá čísla. Podobně jako v jednorozměrném případě se i nyní mohou amplitudy  $C(x, y, z)$  měnit v závislosti na čase. Podle našich předpokladů lze psát Hamiltonovy rovnice jako

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{dC(x, y, z)}{dt} = & E_0 C(x, y, z) - A_x C(x + l_h, y, z) - A_x C(x - l_h, y, z) - \\ & - A_y C(x, y + l_h, z) - A_y C(x, y - l_h, z) - \\ & - A_z C(x, y, z + l_h) - A_z C(x, y, z - l_h). \end{aligned} \quad (12.172)$$

Hledáme opět stacionární stav, v němž se všechna  $C$  mění v závislosti na čase stejným způsobem:

$$C(x, y, z) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)}. \quad (12.173)$$

Dosazením (12.173) do (12.172) dostáváme podmínku pro řešení

$$E = E_0 - 2A_x \cos(k_x l_h) - 2A_y \cos(k_y l_h) - 2A_z \cos(k_z l_h). \quad (12.174)$$

Vlnová čísla  $k_x, k_y, k_z$ , tvoří složky vlnového vektoru  $\mathbf{k}$ , takže rovnici (12.173) můžeme upravit do kompaktní vektorové podoby

$$C(x, y, z) = e^{-\frac{iEt}{\hbar}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}. \quad (12.175)$$

Amplituda se mění jako komplexní rovinná vlna pohybující se v trojrozměrném prostoru ve směru vektoru  $\mathbf{k}$ , s vlnovým číslem

$$k = \left( k_x^2 + k_y^2 + k_z^2 \right)^{\frac{1}{2}}. \quad (12.176)$$

Jsou-li všechna tři čísla  $A_x, A_y, A_z$  kladná a  $k$  je malé, potom je závislost  $E = E(\mathbf{k})$  poměrně jednoduchá. Rozvineme-li kosiny tak, jak jsme to udělali v případě (12.166), dostáváme

$$E = E_{\min} + A_x l_h^2 k_x^2 + A_y l_h^2 k_y^2 + A_z l_h^2 k_z^2. \quad (12.177)$$

Uvažujeme-li jednoduchou kubickou mřížku s mřížkovou konstantou  $l_h$ , potom lze očekávat, že

$$A_x = A_y = A_z \equiv A. \quad (12.178)$$

Máme tak

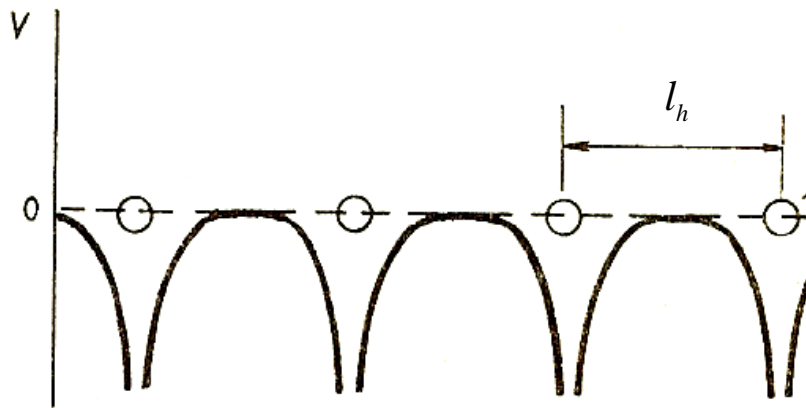
$$E = E_{\min} + A l_h^2 (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) = E_{\min} + A l_h^2 k^2 \quad (12.179)$$

Docházíme tedy k závěru, že trojrozměrné vlnové klubko, vytvořené superpozicí mnoha kvantiových stavů s přibližně stejnou energií, se pohybuje cytoprostorem stejně, jako klasická částice s určitou efektivní hmotností obyčejným prázdným prostorem, který je homogenní a izotropní.

Podotkněme ještě, že i při kubické symetrii se koeficienty  $A_x, A_y, A_z$  mohou navzájem lišit, pokud je stav kvantionu v buňkách asymetrický (např. v přítomnosti vnějšího pole). V takovém případě závisí efektivní hmotnost kvantionu lokalizovaného v buňce na směru jeho pohybu. Částice může mít v přítomnosti silového pole např. jinou setrvačnost ve směru  $x$  než ve směru  $z$  – prostor přestává být izotropní. Pro podrobnější popis uvedené situace se zavádí tenzorová veličina zvaná **tenzor efektivní hmotnosti** s jehož pomocí lze přeformulovat např. Einsteinovy rovnice gravitačního pole.

## Pásový model cytoprostoru – Brillouinovy zóny

Kvantion se pohybuje v cytoprostoru v oblasti periodického potenciálu, následkem čehož dochází k difrakčním jevům, jež omezují hybnost kvantionu na jisté oblasti hodnot odpovídající dovoleným energetickým pásům. V rámci této představy tak interakce mezi obsazenými buňkami ovlivňují chování jednotlivých kvantionů nepřímým působením skrze mřížku, kterou tyto interakce vytvářejí.



Obr. 12.26: Potenciální energie kvantionu v periodické struktuře cytoprostorových buněk.

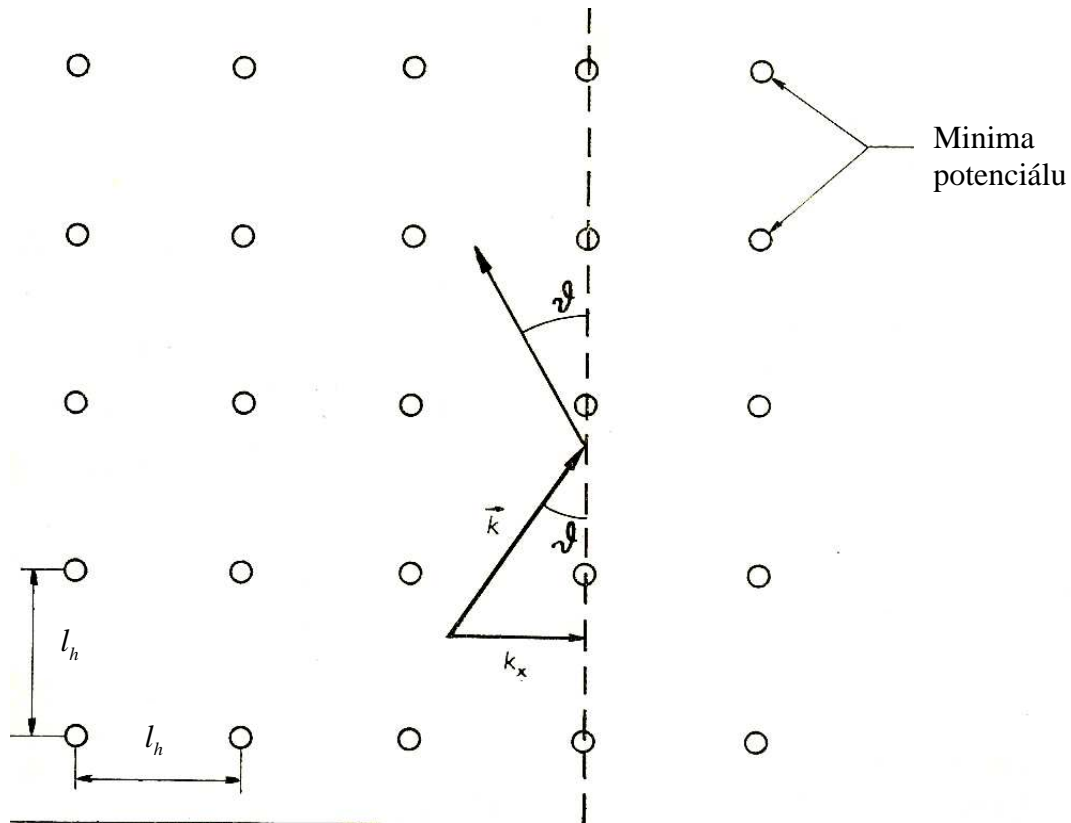
Braggův vztah pro vlnové číslo  $k$  je

$$k = \frac{n\pi}{l_h \sin \vartheta}, \quad (12.180)$$

např. k Braggovu odrazu od svislých řad dochází tehdy, když složka

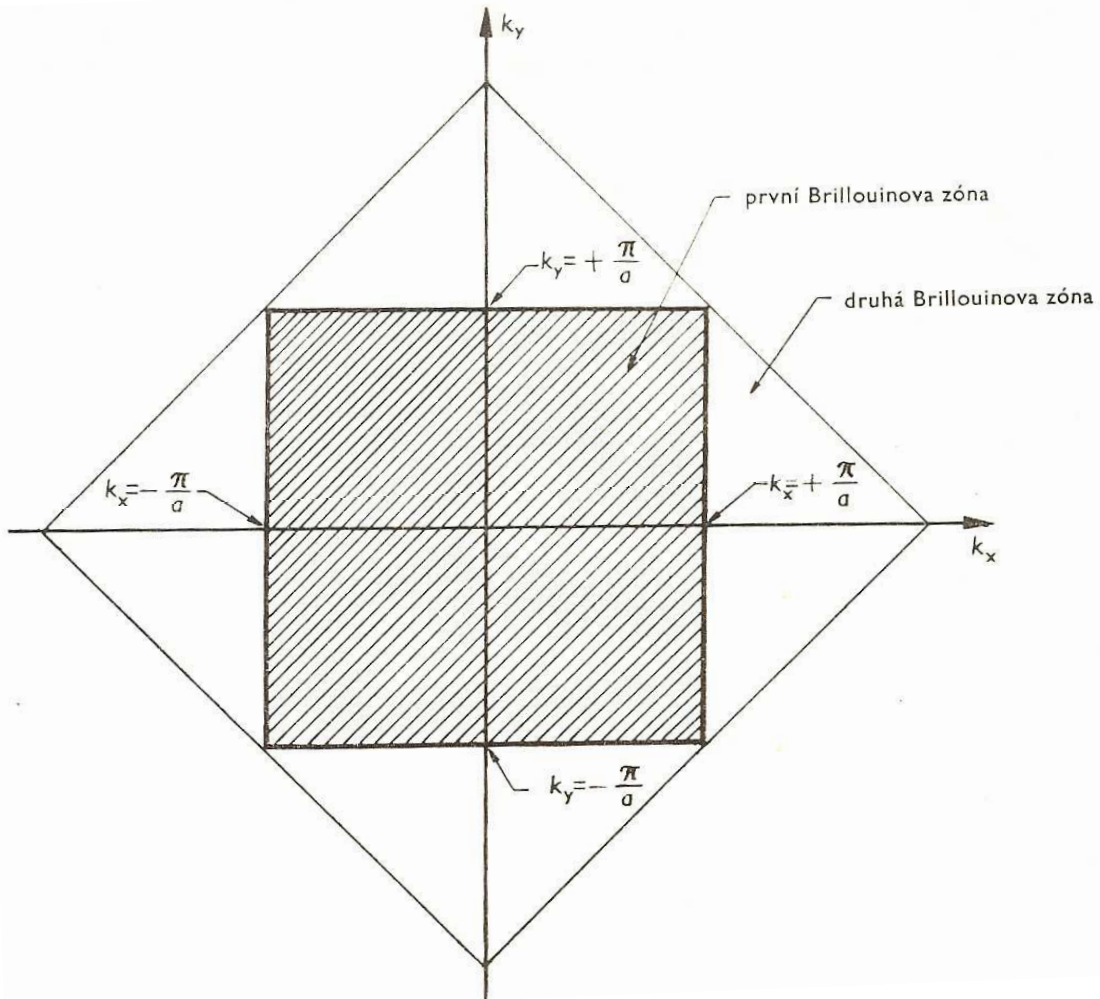
$$k_x = \frac{n\pi}{l_h}, \quad (12.181)$$

apod. Jeli  $k$  menší než  $\pi/l_h$ , může se kvantion volně pohybovat mřížkou v libovolném směru. Při  $k = \pi/l_h$  kvantionům difrakce brání v pohybu ve směru chred a čím vyšší je  $k$ , tím omezenější jsou možné směry pohybu. Pro  $k = \sqrt{2}\pi/l_h$  pak dochází k difrakci kvantionů dokonce i při diagonálním pohybu mřížkou.



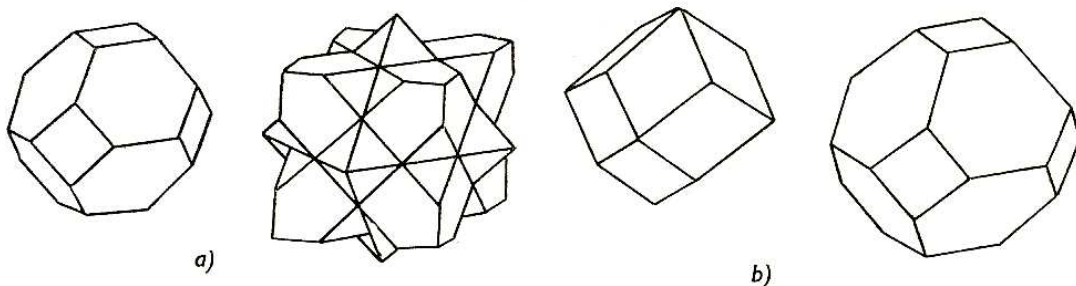
Obr. 12.27: Braggův odraz od svislých řad nastává při  $k_x = \frac{n\pi}{l_h}$

Oblast  $k$ -prostoru, kterou mohou kvantiony s malým  $k$  obsazovat, aniž podléhají difrakci, se nazývá **první Brillouinova zóna**. Kvantiony z intervalu  $\sqrt{2}\pi/l_h > k > \pi/l_h$ , které již nespádají do první Brillouinovy zóny, jsou obsaženy v tzv. **druhé Brillouinově zóně** (viz obr. 12.28.).



Obr. 12.28: První a druhá Brillouinova zóna dvojrozměrné čtvercové mřížky s obecnou periodou  $a$ .

Rozšíření tohoto rozboru na reálné trojrozměrné struktury pak vede k 3D Brillouinovým zónám znázorněným na obrázku 12.29.



Obr. 12.29 První a druhá Brillouinova zóna  
 a) plošně centrované kubické struktury,  
 b) prostorově centrované kubické struktury.

Všiměme si, že na hranicích Brillouinových zón se kvantiony s vlnovým číslem odpovídajícím této hranici  $k = \pm n\pi/l_h$  efektivně chovají, jako částice s nulovou klidovou hmotností, ačkoliv mohou mít značnou energii. Působením i slabého vnějšího pole se jejich celková energie změní jen málo, ale změna hybnosti bude veliká. Částice v blízkosti Brillouinovy zóny tedy reaguje na působící sílu, jako kdyby měla velmi malou hmotnost.

Záporná efektivní hmota se vyskytuje při vysokém  $k$ , kdy se kvantion nalézá blízko vnější hranice Brillouinovy zóny. Zvětšení energie kvantionu se zde projevuje zvětšením celkové energie mřížky. Vlnové klubko podléhá ve větší míře difrakci a kvantion reaguje na dodávanou energii zmenšením své hybnosti (viz Zoevistianova pohybová tabulka).

Efektivní hmota je tedy kladná ve spodní části energetického pásu, kde zvýšení energie je provázeno zvýšením hybnosti kvantionů, a záporná v horní části pásu, kde je zvýšení energie provázeno poklesem hybnosti.

### Grupová a fázová rychlost sekundární cytorezonance

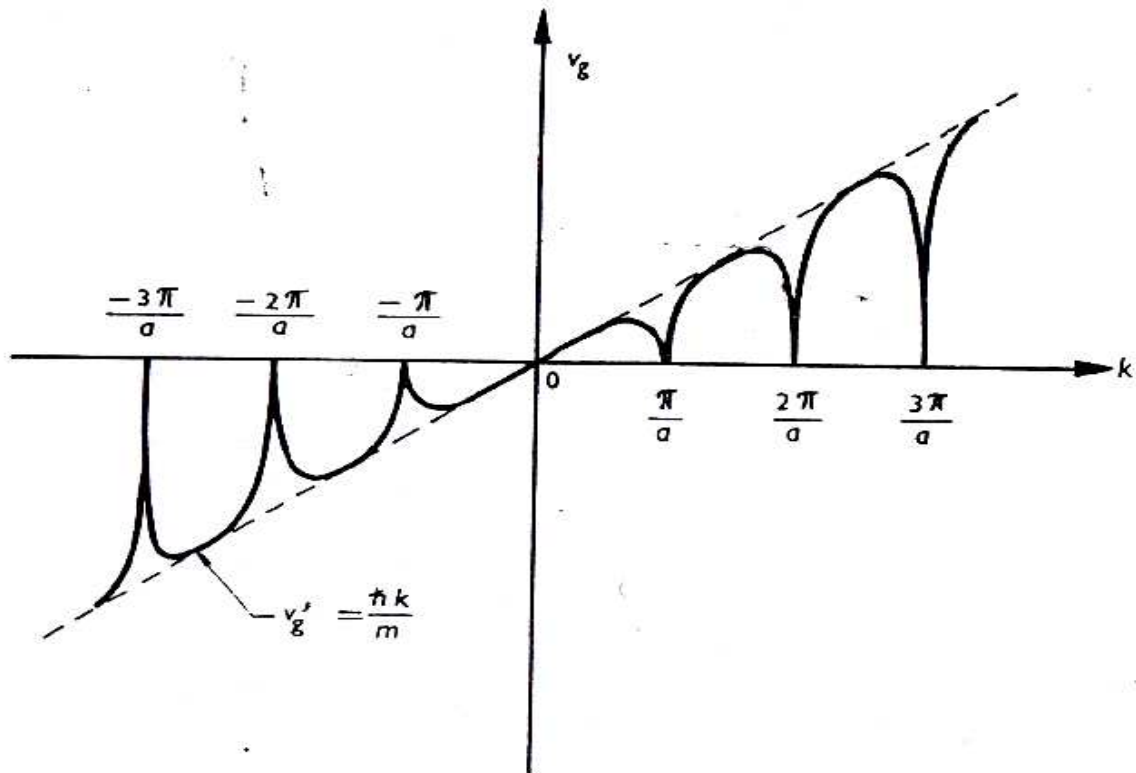
Rychlost vlnového klubka, která je vlnovým ekvivalentem rychlosti částice, je dána vztahem ( 3.51 ), kde

$$\omega = 2\pi k = \frac{E}{\hbar}, \quad ( 12.182 )$$

takže platí

$$v_g = \frac{d\omega}{dk} = \frac{1}{\hbar} \frac{dE}{dk}. \quad ( 12.183 )$$

Obrázek 12.30 ukazuje závislost  $v_g$  na  $k$  ve směru osy  $x$  u jednoduché čtvercové mřížky.



Obr. 12.30: Grupová rychlost  $v_g$  jako funkce vlnového vektoru  $k$  ve směru  $x$  pro mřížku z obr. 12.28. Přerušovaná čára znázorňuje stejnou závislost pro volnou částici v homogenním prostoru.

Přerušovaná čára představuje tuto závislost pro volnou částici v homogenním prostoru, kde platí

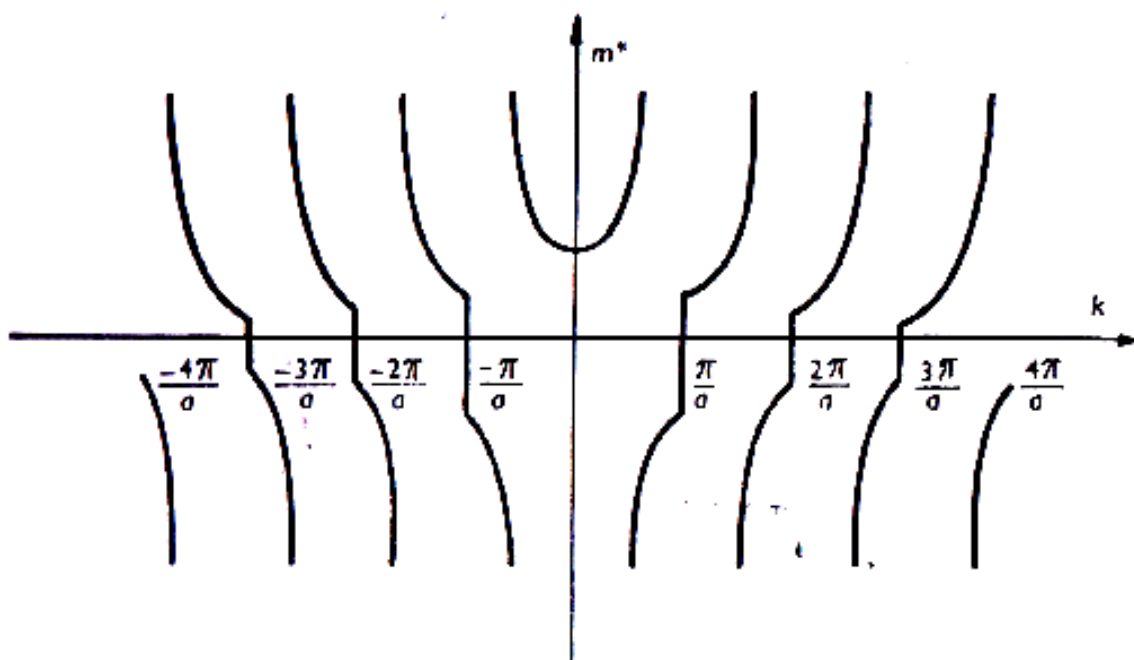
$$k = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{p}{\hbar} = \frac{mv'_g}{\hbar}, \quad (12.184)$$

odkud pro grupovou rychlost takovéto částice plyne

$$v'_g = \frac{\hbar k}{m}. \quad (12.185)$$

Odchytky  $v_g$  od  $v'_g$  v okolí bodu  $k = \pm n\pi/l_h$  odpovídají odchylkám energie částice uvnitř mřížky od hodnoty  $\frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ , které jsou důsledkem difrakce kvantionových vln periodickou mřížkou. Rovnost  $v_g = 0$  na hranicích Brillouinovy zóny  $k = \pm n\pi/l_h$  plyne z toho, že vlny jsou zde stojaté a reprezentují nehybné částice.

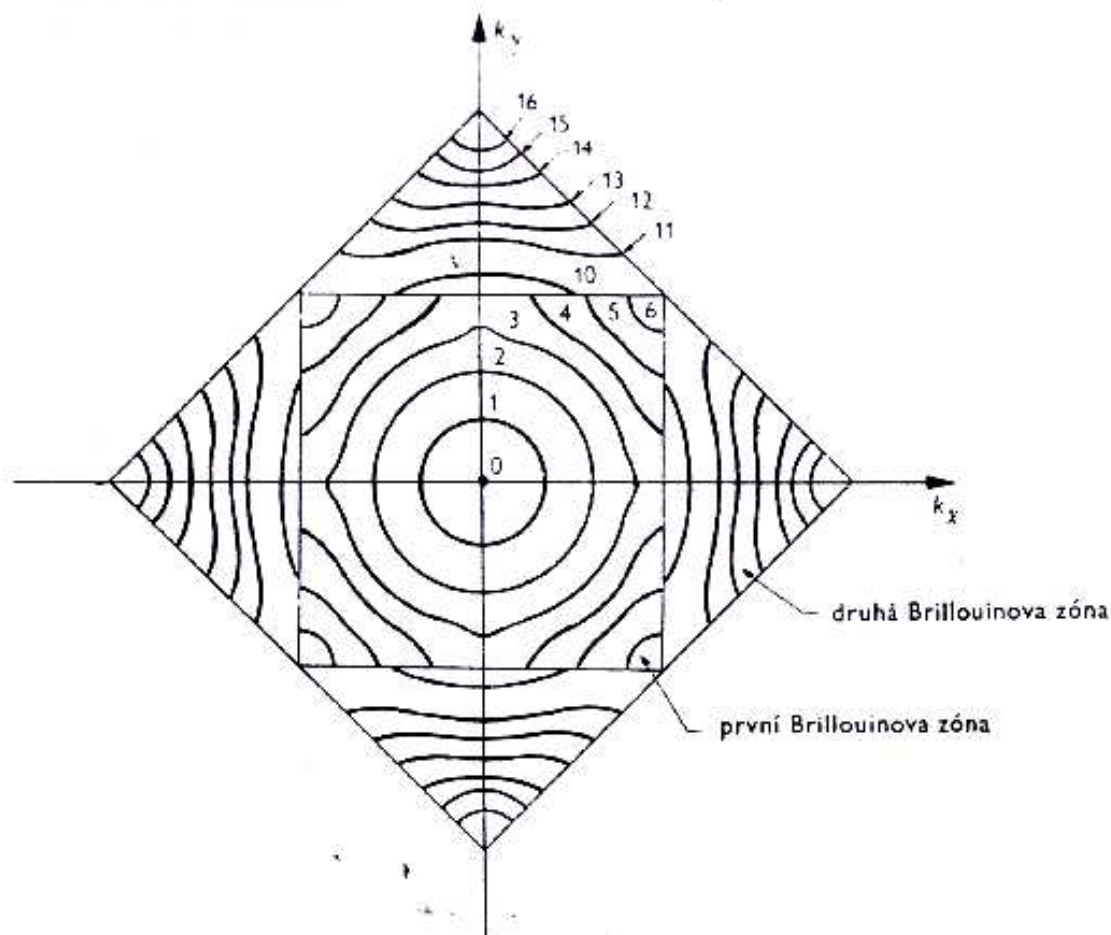




Obr. 12.31: Závislost efektivní hmoty kvantionu pohybujícího se čtvercovou mřížkou, na vlnovém čísle  $k$ .

### Vliv celulární struktury cytoprostoru na pohyb cytonů

Prozkoumejme nyní energii cytonů v každé Brillouinově zóně. Je-li  $k \ll \frac{\pi}{a}$ , kde  $a$  je perioda obsazených (aktivních) buněk cytoprostoru, cyton s mřížkou prakticky neinteraguje. Jelikož energie takového cytonu závisí na  $k^2$ , tvoří ekvienergetické hladiny ve dvourozměrném  $k$ -prostoru prostě kruhy konstantního  $k$ . S rostoucím  $k$  tyto hladiny stále více houstnou a deformují se, neboť čím blíže je cyton hranici Brillouinovy zóny v  $k$ -prostoru, tím blíže je difrakci v reálné mřížce.

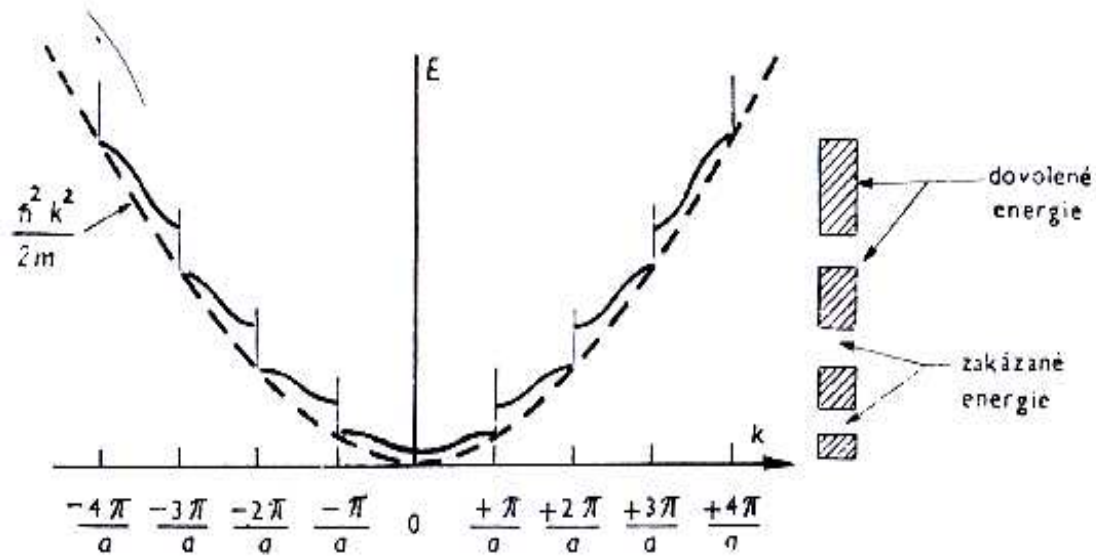


**Obr. 12.32:** Ekvienergetické hladiny v první a druhé Brillouinově zóně čtvercové mřížky

V terminologii částic dochází k difrakci pochopitelně v důsledku interakce cytonu s periodickým útvarem aktivních cytoprostorových buněk. Obr. 12.33 ukazuje závislost  $E$  na  $k$  ve směru  $x$ . Pro  $k \rightarrow \frac{\pi}{a}$

roste  $E$  pomaleji, než v případě volného cytonu (rozuměj, cytonu pohybujícího se prázdným cytoprostorem). V bodě  $k = \frac{\pi}{a}$  má  $E$  dvě

hodnoty, z nichž menší náleží první Brillouinově zóně a větší druhé Brillouinově zóně, mezi nimiž leží určitý zakázaný pás. Tentýž obraz se opakuje, postupujeme-li k vyšším Brillouinovým zónám.



Obr. 12.33: Energie cytonu v závislosti na vlnovém čísle ve směru  $x$ , v porovnání se stejnou závislostí pro prázdný cytoprostor (přerušovaná čára).

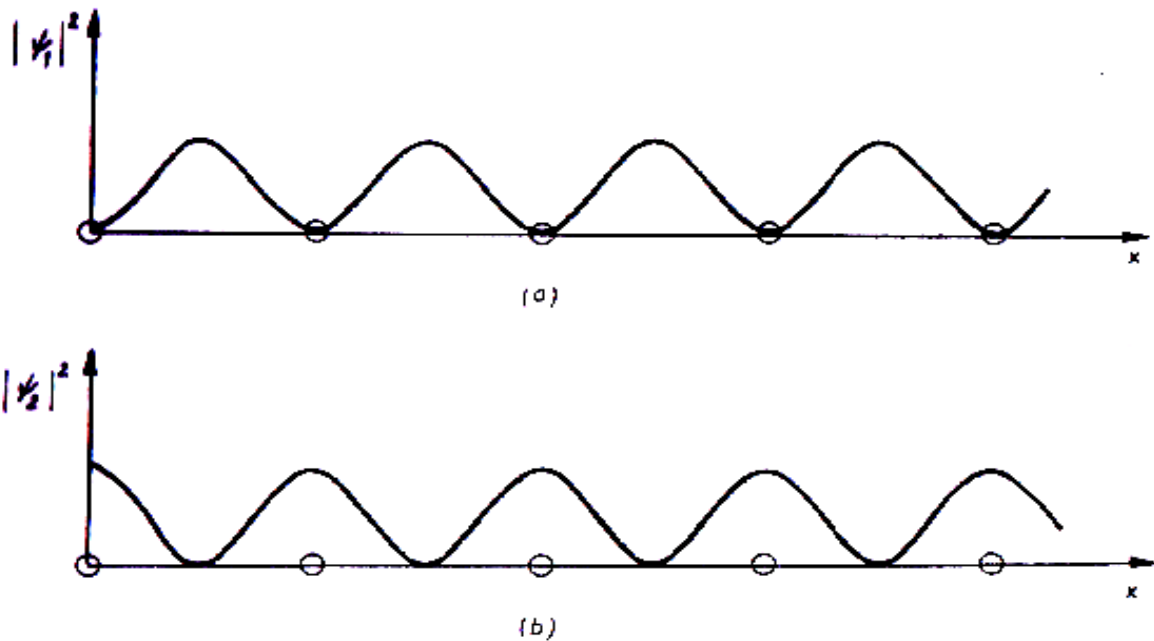
Vysvětlení tohoto jevu je poměrně jednoduché: Při  $k = \pm \frac{\pi}{a}$  nastává

Braggův odraz vln a proto jediným řešením Schrödingerovy rovnice jsou stojaté vlny s vlnovou délkou rovnou periodě mřížky aktivních buněk:

$$\begin{aligned}\psi_1 &= A \sin \frac{\pi x}{a}, \\ \psi_2 &= A \cos \frac{\pi x}{a}.\end{aligned}\tag{12.186}$$

Hustoty pravděpodobnosti  $|\psi_1|^2$ ,  $|\psi_2|^2$  jsou zakresleny na obr. 12.34.

Vidíme, že  $|\psi_1|^2$  má svá minima v aktivních buňkách, zatímco  $|\psi_2|^2$  zde má svá maxima. Potenciál cytonového pole je tedy nejnižší v místě již obsazených buněk. Proto jsou energie  $E_1$ ,  $E_2$  spojené se stojatými vlnami  $\psi_1$ ,  $\psi_2$  navzájem různé. Při  $k = \pm \frac{\pi}{a}$  nejsou možná žádná jiná řešení, a tedy žádný cyton nemůže mít energii mezi  $E_1$  a  $E_2$ .

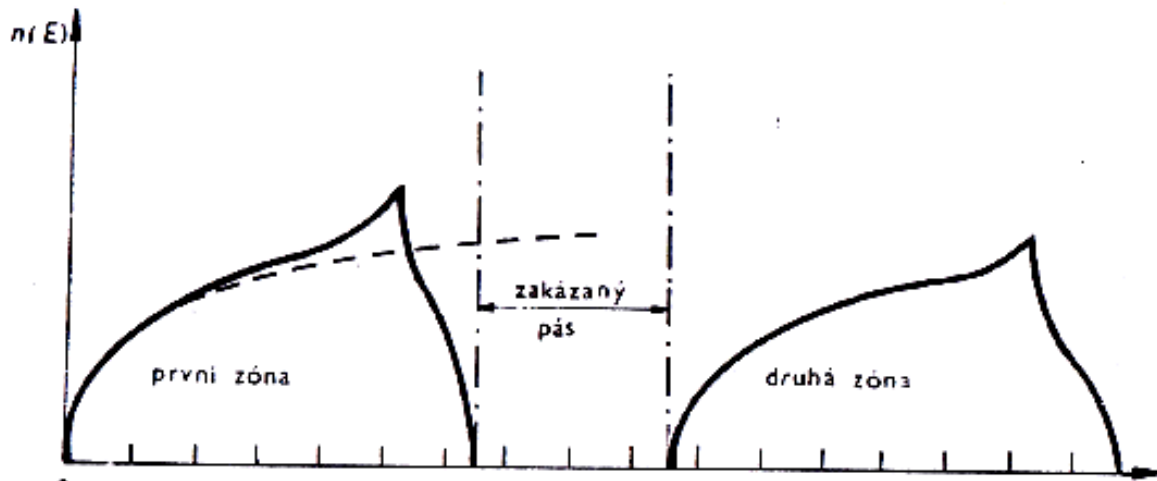


Obr. 12.34: Rozdělení hustoty pravděpodobnosti  $|\psi_1|^2$  a  $|\psi_2|^2$

Obr. 12.35 ukazuje rozdělení cytonových energií odpovídající Brillouinovým zónám na obr. 12.32. Čárkovaná čára odpovídá rozdělení pro cytony v prázdném cytoprostoru. Vidíme, že s rostoucí energií v blízkosti látkových polí, přesahuje počet možných energetických stavů cytonu počet stavů bez přítomnosti těchto polí, což je především důsledek deformace ekvienergetických hladin mřížkou. Pro každou energii totiž existuje více různých hodnot  $k$ . Při

$k = \pm \frac{\pi}{a}$  pak ekvienergetické hladiny dosahují hranic první

Brillouinovy zóny a začíná se projevovat energetický zákaz ve směrech  $k_x, k_y$ , i když ostatní směry jsou stále dovolené. Při dalším zvětšování energie jsou možné energetické stavy cytonů stále více omezeny na rohy zóny a četnost  $n(E)$  postupně klesá až k nule.



Obr. 12.35: Rozdělení energie cytonů v Brillouinových zónách z obr. 12.32, v porovnání se stejným rozdělením pro prázdný cytoprostor (přerušovaná čára).

Ačkoliv mezi sousedními Brillouinovými zónami musí být v libovolném směru zakázaný pás, mohou různé zakázané pásy překrývat pásy dovolených energií v jiných směrech, takže v cytoprostoru jako celku žádný zakázaný pás neexistuje.

### Transakční interpretace Hilbertova prostoru

Zrekapitulujme si krátce základní poznatky o cytoprostoru, které jsme odvodili v předešlé kapitole:

Blandrium, je obří dutý kulovitý útvar obklopující místní kupu vesmírů.

Vnitřní povrch Blandria má tvar krychle (zvané **kubický subchronor**) o hraně cca.  $3 \cdot 10^{27}$  m.

Vnější povrch (tzv. **sférický chronor**) je tvaru koule, jejíž poloměr zhruba odpovídá hraně kubického subchronoru.

Vnitřní struktura Blandria je velmi složitou sítí tzv. **cytorezonančních chreod** – tenounkých vlnodů o průměru Planckovy délky ( $1,6 \cdot 10^{-35}$  m) a délce  $3 \cdot 10^{27}$  m, jimiž se nepředstavitelnými rychlostmi cca.  $6 \cdot 10^{132}$  m · s<sup>-1</sup> pohybují cytorezonanční kvazikvanta – **cytony**.

Cytoprostorová síť připomíná gigantický počítačový procesor, či obří vesmírný mozek běžící na závratné frekvenci  $2 \cdot 10^{105}$  Hz, s operační rychlostí neuvěřitelných  $6 \cdot 10^{146}$  bit · s<sup>-1</sup>.

V prvním přiblížení si můžeme Blandrium představit jako obří duté krychlové zrcadlo. Z něho v prvním vstupu vylétávají s malým fázovým zpožděním 2 cytony na přesně opačných stranách cytoprostoru a míří proti sobě po téže chreodě. Je jasné, že se v určité buňce cytoprostoru srazí a jejich energie dá vznik kvantionu. Jistá zbytková energie z této srážky se ale odrazí zpět k Blandriu – to je známá reliktová cytorezonance. Protože nedošlo ke srážce přesně ve středu cytoprostoru, tyto 2 cytony dorazí zpět k Blandriu s toutéž vzájemnou retardací, jen v opačné fázi. Cyton, který byl vyslán jako první, dolétne nyní jako poslední.

Blandrium vlastně nedělá nic jiného, než že se snaží vytvářet statický vesmír. Chová se tedy jako dokonalý pozorovatel, který svým pozorováním kapky vody na rozpálené plotně způsobí, že se tato nikdy nevypaří (bylo experimentálně dokázáno), neb v důsledku neustálého pozorování nemohou jednotlivé částice v ní měnit svůj kvantový stav (jejich vlnová funkce je obrazně řečeno neustále zkolabovaná a nemůže tudíž měnit kvantový stav částice). Blandrium tak vlastně jen zesiluje příchozí cytony z reliktních na primární a převrací časový sled jejich příchodu a odchodu. Chreoda příchodu při tom vždy odpovídá chreodě následného vyslání.

To by samo o sobě vedlo k absolutně statickému vesmíru se všemi částicemi zamrzými v neměnné poloze na věky ve svých buňkách. Avšak, jak jistě tušíte, je zde ještě ta nezbedná sekundární cytorezonance, alias kvantový potenciál, šířící se izotropně celým cytoprostorem a vytvářející v něm systém potenciálových vrcholků a prohlubní, které mohou ovlivňovat fázi postupu spořádaných cytonů, postupujících po chreodách. Cyton, je na své chreodě střídavě (nepatrně) zpomalován či urychlován v závislosti na tom, zda postupuje v poli sekundárních cytorezonancí (kvantovém potenciálu) ve směru kladného či záporného gradientu. To vede k tomu, že se dříve vyzářené cytony vracejí do Blandria s obecně jinou fází (co do absolutní hodnoty), než byla ta, s níž byly vyzářeny. Protože Blandrium reaguje na základě přijatých reliktových cytonů, vede toto zkreslení příchozí informace k poruchám „vidění“ Blandria, které tak může vystřelit cytony do úplně jiné buňky, než do které střílelo o „okénko“ dříve. Dá se to opět přirovnat k mrkajícimu pozorovateli,

který pozoruje kapku vody na rozpálené plotně. Při každém mrknutí se mu molekuly rozpohybují (zkolabovaná vlnová funkce se obnoví), čímž nakonec nedokáže zabránit varu a vypaření kapky.

Sekundární cytorezonance má na svědomí pohyb částic ve vesmíru. Má toho ale ve skutečnosti na svědomí daleko více. Mějmež shluk hmotných částic a v jeho blízkosti další hmotnou částici. Protože každý kvantion této částice je postupně exponován ve všech 3 osách (chreodách) vedoucích k jeho buňce, bude muset část cytonů procházet přes pole masívní sekundární cytorezonance, kterou budí onen shluk částic opodál. To povede k fázové změně, která způsobí, že každý další obraz naší částice bude naexponován o nějakou tu buňku blíže našemu shluku. To způsobí vznik efektivní síly, která, jako by testovací částici přitahovala k onomu shluku částic (hmotnému tělesu). Dostáváme tak gravitaci (vlastně bez gravitace). Podobně lze modelovat i další druhy polí, pokud ty zdrojové částice navíc třeba ještě roztočíme (přiřadíme jim spiny). Tím získáme silnější a navíc směrově závislé sekundární cytorezonance odpovídající např. elektrickým a magnetickým polím mezi částicemi.

Struny v cytoprostoru vznikají následkem jakéhosi "zhmotňování čau", což je jinak přesně definovaný relativistický jev k němuž dochází na úrovni Planckovy délky následkem aktivace cytoprostorové buňky zásahem dvojice cytonů postupujících vzájemně proti sobě po jedné a téže chreodě (viz konstrukce lineárního, orbitálního a sférického chronoru). Jak již jsme popsali výše, cytony při své pouti cytoprostorem procházejí oblastmi sekundární cytorezonance, která se šíří coby určité zbytkové chvění cytoprostoru z místa srážek dalších cytonů. Fyzikální vlivy sekundární cytorezonance na rychlost primární cytorezonance (šíření cytonů), vede v okolí velkých hmot (zdrojů masívní sekundární cytorezonance) k efektům urychlování a zpomalování rychlosti cytonů. Proti směru šíření sekundární cytorezonance se cytony zpomalují, po směru naopak urychlují. Výsledkem je skutečnost, že když umístíme hmotnou částici do blízkosti hmoty, bude docházet k posunu fáze vektoru cytonové parity cytonů letících směrem od hmoty směrem dopředu a zároveň zpomalování (posunu fáze vektoru cytonové parity směrem dozadu) cytonů letících ve směru opačném. Ke srážkám

cytonů generujícím tuto částici, tedy dochází ve stále menší vzdálenosti od oné hmoty – částice začne na hmotu volně padat. Protože cytoprostorové chreody tvoří ve skutečnosti prostorovou mřížku, je každá cytoprostorová buňka aktivována postupně ze všech tří směrů a proto to může fungovat. Pro úplnost je třeba ještě dodat, že charakter sekundární cytorezonance je velmi složitý a závisí nejen na vibračních módech strun, jako je tomu u gravitace, ale rovněž na rotačních módech. Jak již bylo řečeno výše, krom přitažlivých sil tak můžeme v cytoprostoru poměrně snadno modelovat i síly odpudivé.

Dá se ale i ukázat, že sama pohybující se částice ve svém okolí budí nehomogenní pole sekundární cytorezonance (kvantovou vlnu), která sama způsobuje fázový posun primárních a reliktových cytonů, takže dokonale zmatené Blandrium, ač se vehementně „snaží“ udržet částici v klidu, pokaždé ji zase nastřelí o nějakou tu buňku dál dopředu. To efektivně vede k setrvačnému pohybu a případné odporové síle vůči jeho změně (setrvačné síle). Dostáváme tak jedním rázem též Machův princip.

### **Čas z hlediska dynamické teorie cytoprostoru**

Pro nalezení odpovědi na otázku fyzikální podstaty času, si nejprve musíme odpovědět na zdánlivě triviální otázku, proč se mohou tělesa v prostoru pohybovat, jinými slovy, proč mohou částice měnit svůj kvantový stav.

Když elektron v excitovaném atomu přeskakuje z hladiny na hladinu, není to tak, že by se vyskytoval (jak energeticky tak prostorově) spojitě ve všech mezistavech existujících mezi oběmi hladinami. Mezi hladinami má totiž vlnová funkce (udávající pravděpodobnost jeho nalezení/výskytu) nulu. Přejít, doprovázený vyzářením (pohlcením) fotonu o energii rozdílu hladin, tedy vypadá tak, že elektron na jedné hladině jednoduše přestane existovat a na druhé hladině se objeví.

Již před stoletím se podařilo nalézt transformační vztahy popisující správně, jak se transformuje čtyřrozměrný prostoročas v závislosti na rychlosti soustav (Minkowského metrika). Na čas tedy nelze nahlížet jako na něco, co si vymysleli lidé aby nezapomněli kdy jít na oběd a



co si plyne nezávisle na fyzikálních dějích v něm. Čas je těmito ději (např. přítomností gravitačního i dalších polí) zpětnovazebně ovlivněn. Čas je tedy úplně stejně fyzikální jako elektrický proud nebo teplo a je ovlivnitelný fyzikálními ději v něm probíhajícími.

Dle OTR nelze bez hmoty dost dobře zavést ani čas, ani prostor. V moderních teoriích gravitace se navíc ukazuje, že nejen že je prostor a čas závislý na hmotě (a jejích pohybech), ale sama hmota je jakýmsi způsobem zpětně vytvořena z prostoru a času. Jak se ukázalo, největší problém fyziky 20. století tkvěl v představě spojitého prostoročasu, kde i rozměry o velikosti geometrického bodu mají svůj význam. Nejen gravitace, jakožto síla, jejímž charakterem jsou lokální odchylky v prostoročasové metrice (zakřivení geometrie prostoročasu) se ukázala být na tento mylný popis prostoročasového kontinua velmi citlivá, ale i popis ostatních interakcí je závislý na této nesprávné představě pozadí. Kvantová teorie ukázala, že energii lze předávat či odebrat hmotě pouze po kvantech. OTR pak dokázala, že i gravitační vlny odnášejí přesně vypočitatelnou energii. Na základě představy spojitého prostoročasu se však dosud nedařilo tuto energii ve vlně nějak lokalizovat ani kvantovat (přiřadit příslušné kvantové operátory). Vše se změnilo, když Abhay Ashtekar se svými spolupracovníky v 80. letech minulého století vytvořil teorii, podle které existují atomy samotného prostoročasu. V desáté kapitole jsme si ukázali, že ve smyčkové kvantové gravitaci se prostor a čas kvantují a z nepatrných kvant prostoru a času je zde vytvořena tzv. spinová pěna sestávající ze skutečně „hmatatelných“ atomů prostoročasu, jejichž projevy (např. na rychlost šíření světelných paprsků) jsme již dnes schopni měřit.

Čas není jen způsob vyjádření pohybu již existujících částic uvnitř již existujícího prostoru. Čas je entita, která je samou podstatou těchto částic (podstatou energie a jejích kvant) a stejně tak je zcela určující pro formování prostoru. Zároveň je však energetickými strukturami, které sám vytváří, zpětně ovlivňován a tvarován. Popis přírody v jazyku, kde již prostor a čas nejsou redukovatelné na nekonečně malé body, ale jsou tvořeny dále nedělitelnými atomy, vedl k revoluci v možnostech kvantového popisu gravitace a lepšímu porozumění tomu, co se děje ve středu černých děr, proč se černé díry vypařují a jak vlastně vznikl vesmír. Periodická struktura prostoročasu sestávajícího

z drobných atomů prostoru a času (tzv. spinové pěny) pak vedla k předpovědi, že i v absolutním vakuu by se fotony různých energií měly pohybovat nepatrně různými rychlostmi, podobně, jako když se foton pohybuje v periodické struktuře rezonátorů – ty mohou být tvořeny buď rezonančními dutinami ve vakuu (magnetron, klystron, permaktron, linac), nebo atomy tvořícími látkové prostředí a podle předpovědi smyčkové kvantové gravitace také i periodickým uspořádáním atomů prostoročasu.

Struny v cytoprostoru vznikají následkem jakéhosi "zhmotňování čau", což je jinak přesně definovaný kvantově - relativistický jev k němuž dochází na úrovni Planckovy délky následkem aktivace cytoprostorové buňky zásahem dvojice cytonů postupujících vzájemně proti sobě po jedné a téže chreodě (viz konstrukce lineárního, orbitálního a sférického chronoru). Jak již bylo popsáno výše, cytony při své pouti cytoprostorem procházejí oblastmi sekundární cytorezonance, která se šíří coby jisté zbytkové chvění cytoprostoru z místa srážek dalších cytonů. Fyzikální vlivy sekundární cytorezonance na rychlost primární cytorezonance (šíření cytonů), které jsem popsal rovněž výše, vedou v okolí velkých hmot (zdrojů masívní sekundární cytorezonance) k efektům urychlování a zpomalování rychlosti cytonů. Proti směru šíření sekundární cytorezonance se cytony urychlují, po směru naopak zpomalují. Výsledkem je skutečnost, že když umístíte hmotnou částici do blízkosti hmoty, bude docházet k posunu fáze vektoru cytonové parity cytonů letících směrem od hmoty směrem zpátky a zároveň urychlování (posunu fáze vektoru cytonové parity směrem dopředu) cytonů letících ve směru opačném. Ke srážkám cytonů generujícím tuto částici, tedy dochází ve stále menší vzdálenosti od oné hmoty – částice začne na hmotu volně padat. Protože cytoprostorové chreody tvoří ve skutečnosti prostorovou mřížku, je každá cytoprostorová buňka aktivována postupně ze všech tří směrů, což umožňuje fungování tohoto modelu i v třírozměrném prostoru. Pro úplnost je třeba ještě zopakovat, že celkový charakter sekundární cytorezonance je velmi komplikovaný a závisí nejen na vibračních módech stun, jako je tomu u gravitace, ale rovněž na rotačních módech. Jak jsme byli svědky, krom přitažlivých sil tak můžeme v cytoprostoru poměrně snadno modelovat i síly odpudivé.

## Vznik síly v Cytoprostoru

### a) elektromagnetická interakce

Každá částice složená z kvantionů, obsahuje za každý kvantion jeden vektor majoritní orientace sekundární cytoresonance.

V nenabitých částicích jsou všechny vektory majoritní orientace sekundární cytoresonance rozmístěny chaoticky, což znamená, že se navzájem významně ruší.

Jinak tomu ovšem je u částic nabitých.

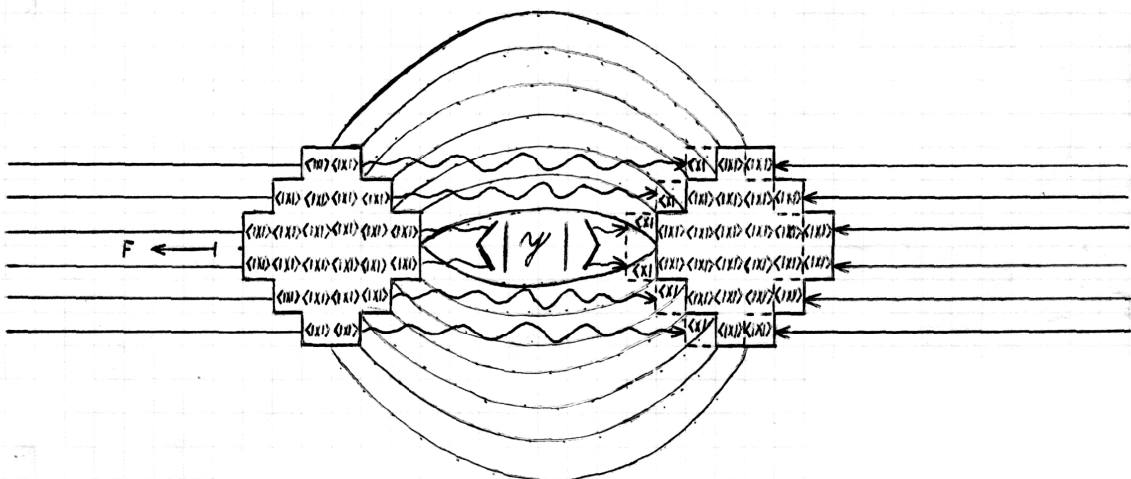
Nejmenší takovouto částicí je nejlehčí z rodiny elektricky nabitých leptonů – elektron.

U něho poprvé narážíme na pojem pole, jehož úplný model a popis, patří k největším triumfům nestacionární teorie cytoprostoru.

Elektromagnetická interakce je důsledkem jisté převahy stejných vektorů majoritní orientace sekundární cytoresonance, tj. vektorů ortogonálních na srážkové braketě ve vyšetřované doméně, která se tak stává zdrojem pole.

Jestliže k sobě dostatečně přiblížíme dvě takovéto domény, a to nesouhlasnými póly, (viz obr. 12.36), vytvoříme dva vzájemně opačné vektory sekundární cytoresonance, které dají vznik braketu sekundární cytoresonance.

Obr. 12.36



Oblast působení tohoto braketu rezonuje nejbouřlivěji právě v blízkosti naší hypergeupy.

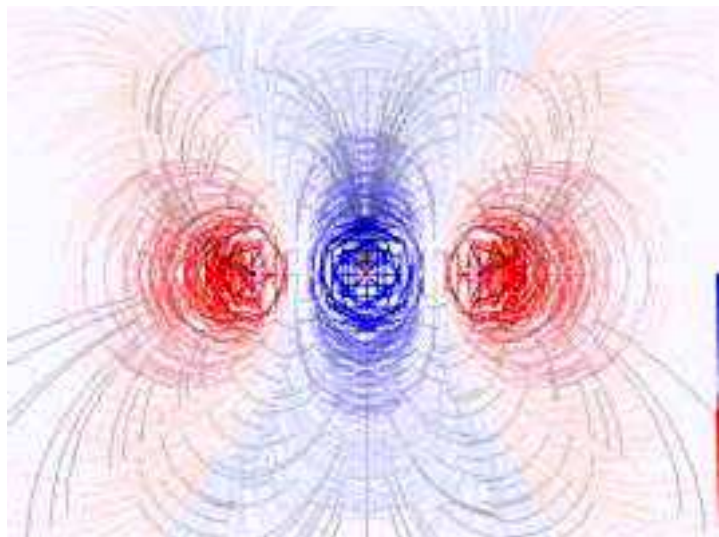
Sekundární cytorezonance je zde natolik intenzivní, že se její výrazný útlum dostaví až ve vzdálenosti od  $\langle y|y \rangle$ , která převyšuje průměr zdrojových domén.

Z obrázku 12.36 je patrné, že dráha cytonu, procházejícího touto oblastí sekundární cytorezonance, bude výrazně pozměněna, zatímco paracyton přicházející z opačné strany, se ze své chreody vychyluje jen minimálně.

To má za následek zpomalení cytonu, jehož srážka s paracytonem se tak uskuteční poněkud blíže braketu  $\langle y|y \rangle$ , než kdyby sekundární cytorezonance nebylo.

Výsledkem tohoto procesu je plynulá translace domén vůči sobě. Částice se tedy přitahují, resp. odpuzují v důsledku rozdílné hustoty antionu na jejich pólech.

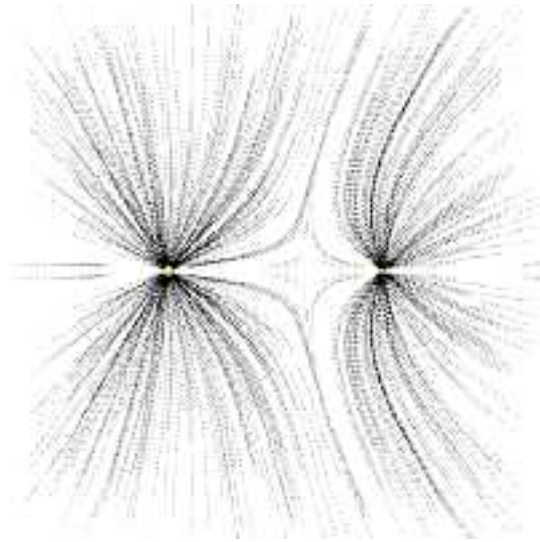
Obr. 12.37



Potenciální dilatace času s tím spojená je zdrojem již zmíněné translace domén ve směru  $\langle x|$ , která však může být kompenzována spolu se sekundární cytorezonancí braketu  $\langle y|y \rangle$ , je-li přítomna síla  $\mathbf{F}$ , vytvářející ket  $|x \rangle$  interagující s bra  $\langle x|$  translahované domény při znovuoobnovení  $\langle x|x \rangle$  a následné anihilaci  $\langle y|y \rangle$  sekundární cytorezonance. Tento proces je pochopitelně pouze dočasný. Po obnovení braketu  $\langle x|x \rangle$  tento velmi záhy opět anihiluje za opětovného vzniku vektoru  $\langle x|$  a  $\langle y|y \rangle$ .

V zápětí však opět začíná působit ket  $|x\rangle$  a celý výše popsaný proces (který má za následek, že částice ve vesmíru dokážou navzájem držet pohromadě aniž by od sebe samovolně odpadly nebo se zhroutily jedna do druhé) se opakuje a to mnohamiliardkrát za sekundu. Zdrojem síly a s ní spojeného pohybu, jsou tedy ve skutečnosti rozdíly v hustotě toku času na různých místech prostoru. Podobné mechanismy působí rovněž při odpuzování částic. Podívejme se nejprve na obrázek 12.38, znázorňující siločáry pole sekundární cytorezonance dvou souhlasných nábojů.

Obr. 12.38



Nejprve je třeba zavést vhodný Hilbertův prostor cytonové parity. Tento prostor je popsán bilineární formou  $\langle x|\bar{x}\rangle$  která automaticky definuje polaritu.

Cyton  $x$  můžeme rozlišit od paracytonu  $\bar{x}$  právě a pouze dle hodnoty interhypergrupární bariéry jejich tunelového efektu.

Jak je zřejmé z obrázku 12.38, vytváří okolo sebe souhlasné náboje slabou sekundární cytorezonanci, která je nutí expandovat.

Suma braketů

$$\sum_{i,j}^n (\langle x|\bar{x}\rangle_i + \langle \bar{x}|x\rangle_j) \quad (12.187)$$

vytváří mezi náboji tzv. mrtvou zónu sekundární cytorezonance, což má za důsledek orientované odpuzování těchto nábojů

$$\begin{aligned} \langle x | \bar{x} \rangle &\rightarrow \langle x |, \\ \langle \bar{x} | x \rangle &\rightarrow | x \rangle. \end{aligned} \quad ( 12.188 )$$

Kmitáním elektrických nábojů v cytoprostoru se vytvářejí vlny sekundární cytorezonance (elektromagnetické vlny) v souladu s Maxwellovou elektrodynamikou. Tyto vlny se pohybují prostorem formou postupujících oscilací interhypergrupární bariéry.

Důsledkem je silné potlačení cytorezonančního útlumu pro tyto vlny (podobně, jako se vlny primární a sekundární cytorezonance šíří po chreodě jako solitony) a možnost interakce energoclusterů cytorezonančních vln (fotonů) s látkou.

**Energoclustery** nazýváme ty oblasti vln sekundární cytorezonance, u nichž je interhypergrupární bariéra s naší hypergrupou blízka nule.

Energoclustery (obvykle zaujímají několik kvintiliard cytoprostorových buněk) v interakci s hmotnými částicemi vykazují korpuskulární povahu – viz fotoefekt. Elmag. vlny mohou také zpětně působit na své zdroje. Např. elektrický náboj elektronu se v elmag. poli roztočí (spin) zatímco impulsmoment elektronu zůstává nulový. Braket cytonové parity elektronu tedy v elmag. poli rotuje.

### **Kvantová podstata fotonů**

Fotony tvoří základ našeho popisu toho, kterak látka (složená z hmotných částic) dokáže emitovat a nebo přijímat elektromagnetickou energii. Tak např. v atomech jsou energetické hladiny diskrétní a tedy i elektromagnetická energie, kterou atomy mohou ztrácet a opět přijímat, může být také jen diskrétní. Tato kvanta elektromagnetické energie jsou právě fotony. Ve vakuu, tedy mimo interakci s látkou, ale foton samozřejmě nikdy nikdo nepozoroval. Dokonce i KTP popisuje distribuci energie ve volně se šířící elmag. vlně dosti neurčitě – foton je jakoby všude a zároveň nikde.

Pro dlouhé vlnové délky navíc nastává u fotonů problém v tom, že látka už není schopna tak malé energie přijímat ani vysílat po kvantech, takže např. pro kilometrové vlny, bude stále obtížnější je

vytvořit tak, aby každá z nich nesla jen jediné kvantum energie a stejně tak bude problém takovou vlnu donutit, aby někde v látce vyvolala nějaký bodový efekt pohlcení onoho jediného fotonu.

Ve skutečnosti je foton berličkou, kterou si zavedli fyzikové k tomu, aby byli schopni lépe uchopit experimentálně průkazný fakt, že látka za jistých podmínek vyzařuje a pohlcuje elmag. energii po kvantech úměrných frekvenci. To ale ve skutečnosti neznamená nic jiného, než že elmag. pole uvnitř látky dokáže kreovat fermionové páry (je to konec konců odvoditelné ze základních zákonů zachování – elmag. pole ve vakuu žádné páry vytvořit nemůže). Tvorba elektron – pozitronového páru je známá již mnoho let. Krom elektron – pozitronových párů mohou v látce stejně tak dobře vznikat i kvark – antikvarkové, preon – antipreonové, či dokonce parton – antipartonové páry, které již zjemní čárové spektrum emitovaných fotonů natolik, že se našim spektrometrům, (které sotva rozliší rozdíl 1 Hz u RTG záření na frekvenci  $10^{20}$  Hz) jeví jako spojitě Comptonovské kontinuum. Přitom je balíček energie nesené polem předán spektrometru teprve v látkovém prostředí, kde jediné je elmag. vlna schopna kreovat pár. Všude jinde (ve vakuu) se elmag. energie může nerušeně šířit spojitě, v nekvantované formě, jako spojitě vlnění popisované Maxwellovou elektrodynamikou.

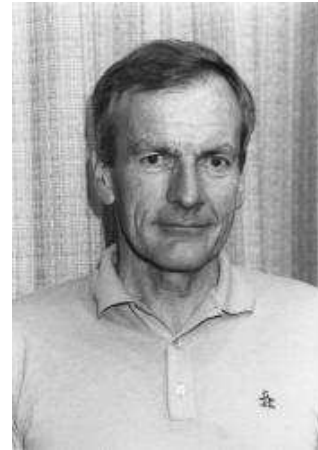
### **Základy mřížkové KTP**

V mnoha případech se vlastnosti magnetických materiálů zkoumají za pomoci tzv. mřížových modelů. Jde o jednoduchý systém, ve kterém jsou ve vrcholech pravidelné mříže lokalizovány magnetické momenty (zpravidla spiny). Ty podle určitého předpisu interagují s nejbližšími sousedy. První takový model vzniknul již v roce 1925. Od té doby se mřížové modely magnetik velmi rozšířily. Ukázalo se, že s jejich pomocí lze zjišťovat nejen chování různých magnetických materiálů, ale i na první pohled poněkud odlišných systémů, například plynů, plazmatu a nebo chování kvarků uvnitř nukleonu. Statistické chování mřížových modelů se velmi často modeluje na základě Monte Carlo metod.

## Isingův - Pottsův model – nejjednodušší mřížkové modely



**Ernst Ising (1900 – 1998)**



**Renfrey Burnard Potts (1925 – 2005)**



**Lars Onsager (1903–1976)**



**Pierre Curie (1859 – 1906)**

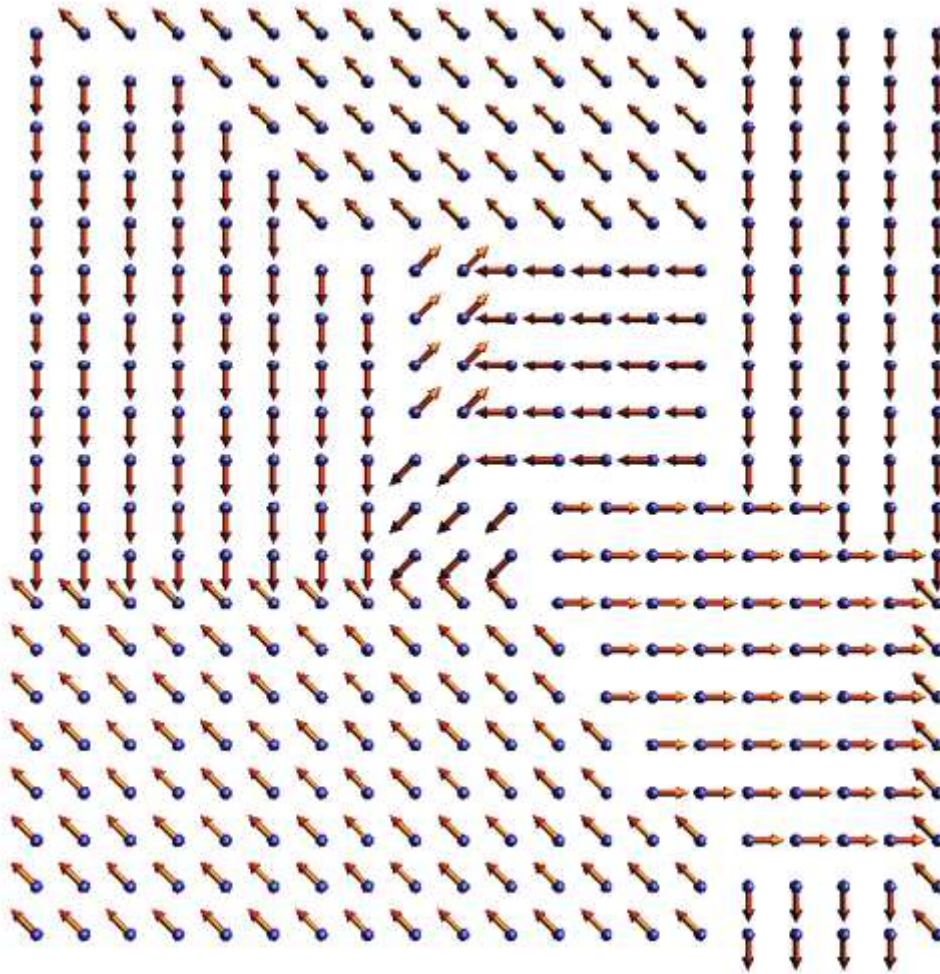
Nejjednodušší model pochází již z 20. let minulého století. Jde o soustavu spinů na mříži, z nichž každý může mít jen dva stavy (například nahoru a dolů nebo  $+1$  a  $-1$ ). Dva sousední spiny k celkové energii přispívají hodnotou  $E = -Js_1s_2$ , kde spiny  $s_1$  a  $s_2$  mohou nabývat  $+1$  nebo  $-1$ . Při nízké teplotě jsou preferovány stavy s co možná nejnižší energií, tedy pro  $J > 0$  je preferováno rovnoběžné uspořádání spinů (feromagnetikum) a pro  $J < 0$  střídající se spiny (antiferomagnetikum). Úlohu v jedné dimenzi analyticky vyřešil v rámci své disertační práce Ernst Ising v roce 1925. Ukázal, že v lineárním řetězci spinů nedochází k žádnému fázovému přechodu. Ve dvou dimenzích (spiny na plošné mříži) našel řešení Lars Onsager v roce 1944. Zde dochází při určité teplotě  $T_C$  k typickému Curieovu přechodu. Při teplotách nižších než  $T_C$  se tvoří domény shodně



orientovaných spinů. Systém se chová feromagneticky. Při absolutní nule jedna z domén převládne a zaujme celý prostor. Při teplotách vyšších, než je  $T_C$ , jsou spiny rozmístěny chaoticky a střední magnetizace je velmi nízká. Přechod mezi oběma fázemi má charakter fázového přechodu druhého druhu (k přechodu není třeba latentní teplo, magnetizace je spojitou funkcí teploty, susceptibilita má skok).

Přestože je Isingův model feromagnetik velmi jednoduchý a popisuje feromagnetika jen přibližně, má velký význam jako takový. Snadno lze ukázat, že systém je ekvivalentní statistickému modelu pohybu atomů, ve kterém vrchol mříže buď atom obsahuje, či nikoli (tzv. mřížový plyn). Ze dvou lineárních Isingových řetězců je možné spárovat tzv. kvantový žebřík a studovat na něm uvěznění kvarků, ve vyšších dimenzích je možné simulovat vlastnosti některých typů strun nebo zkoumat vlastnosti renormalizace kvantových teorií. Poněkud paradoxně tak strunoví teoretici s vděkem sahají po modelech s diskretní metrikou, aby byli schopni provádět předpovědi.

Nejjednodušším zobecněním Isingova modelu je Pottsův model, ve kterém mohou spiny mít  $Q$  různých hodnot (mířit  $Q$  směry, tzv.  $Q$ -stavový model). Interakční předpis pro dva sousední spiny zůstává obdobný, výsledkem je  $-J$ , pokud jsou sousední spiny shodně orientované a nula, pokud různě. Opět je tedy při nízké teplotě zjevná preference souhlasných stavů a dochází k tvorbě domén. Za vysokých teplot jsou spiny uspořádány chaoticky, mezi oběma fázemi existuje Curieův fázový přechod, obdobně jako u Isingova modelu. Model je pojmenován podle australského fyzika Renfreyho Pottse.



Obr. 12.39: Dvozměrný osmistavový Pottsův model, nízkoteplotní fáze s doménami.

## Složitější modely

### $Z_Q$ model

Jedná se opět o  $Q$ -stavový dvozměrný model, v němž spiny můžeme charakterizovat diskrétními úhly. Interakční energie nejblížešších sousedů je dána formulí  $E = -J \cos(\alpha_1 - \alpha_2)$ . Model má pro velká  $Q$  tři fáze: Nízkoteplotní uspořádanou fázi s charakteristickými doménami, dále „soft“ fázi při středních teplotách, při které se sousední spiny svou orientací liší jen velmi málo. Vznikají charakteristické víry spinů nebo spinové vlny. Další fází je vysokoteplotní chaotická fáze. Fázový přechod z nízkoteplotní fáze k „soft“ fázi se nazývá Curieův přechod ( $T_C$ ), fázový přechod ze „soft“ fáze do vysokoteplotní

neuspořádané fáze se nazývá Kosterlitzův-Thoulessův přechod ( $T_K$ ). Jde o přechod, při kterém je spojitá susceptibilita (na rozdíl od přechodů druhého druhu).

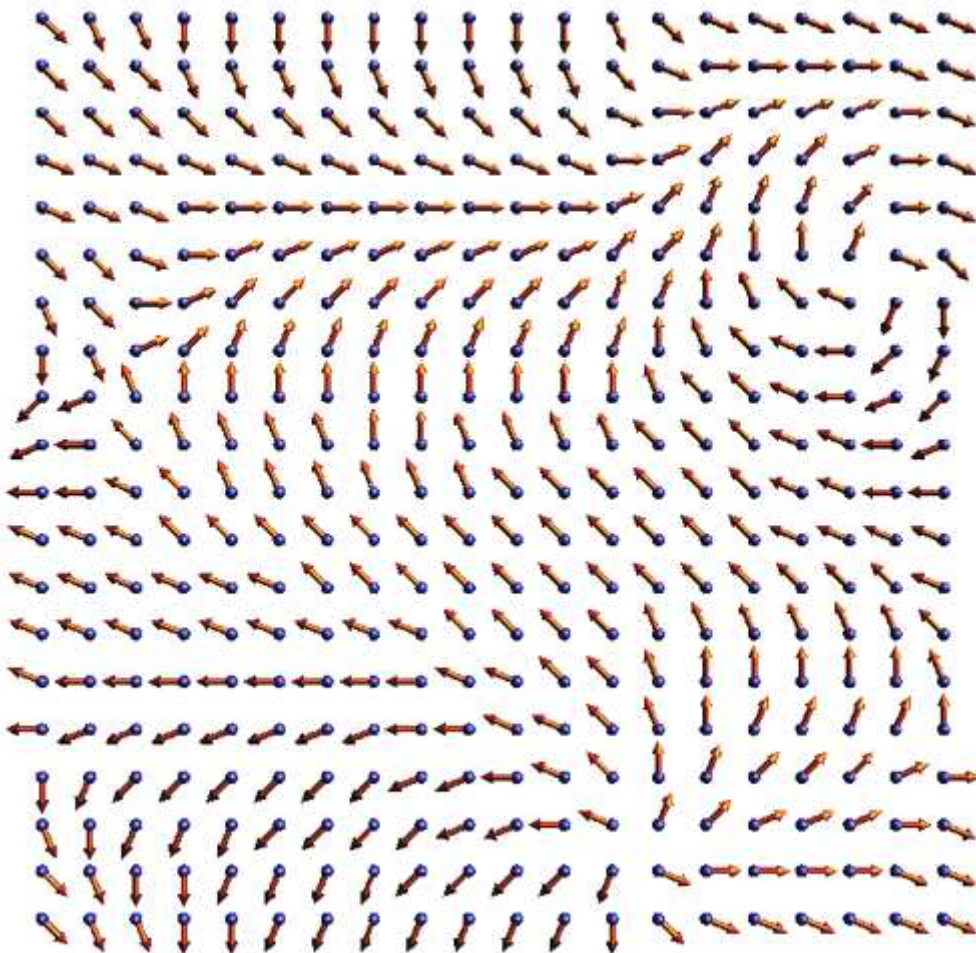


**John Michael Kosterlitz (1944)**



**David James Thouless (1934)**

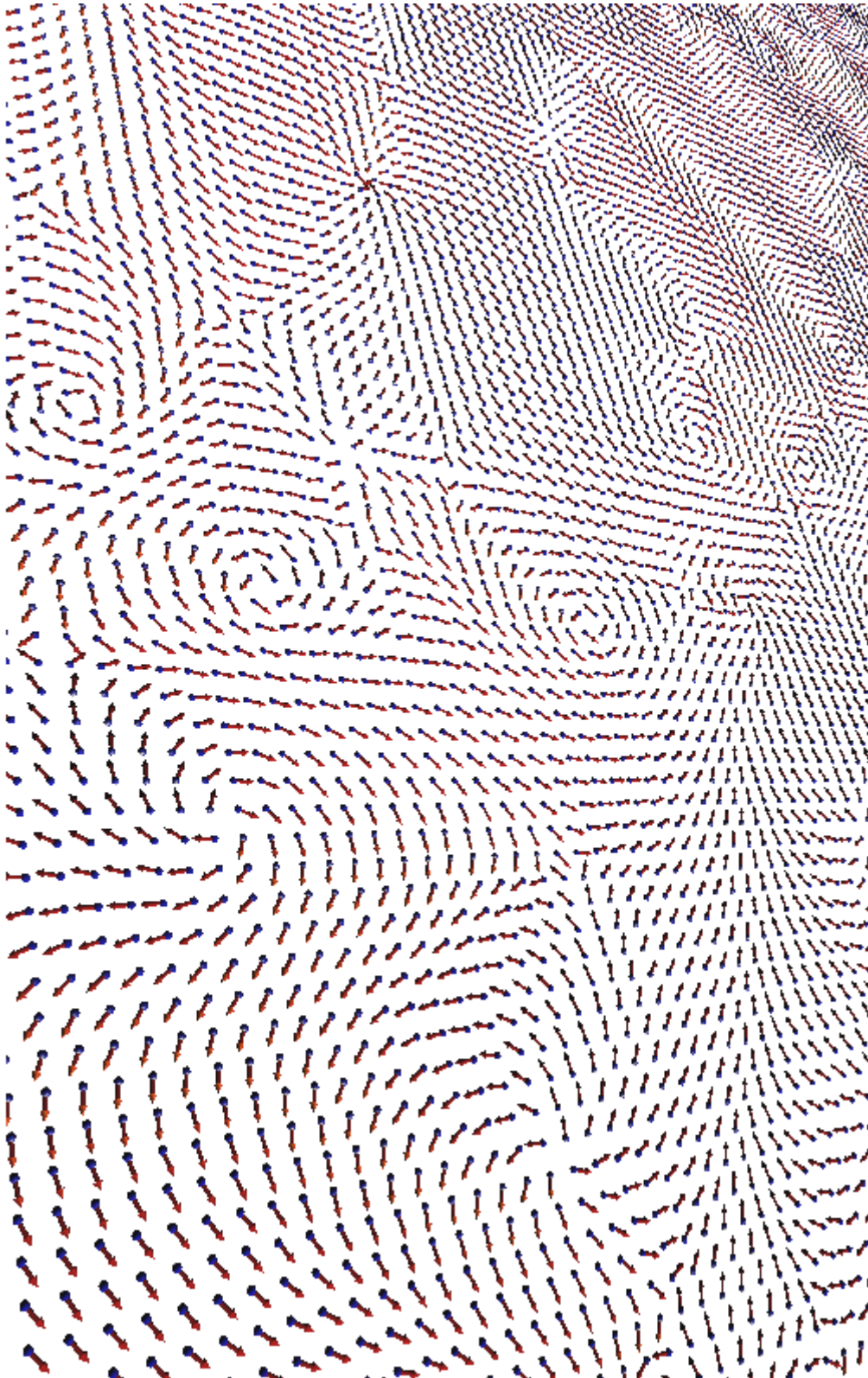
Ke ztrátě kvaziuspořádanosti při přechodu ze „soft“ do chaotické fáze dochází díky příčným fluktuacím neboli tzv. Goldstoneovým módům. Přechod opačným směrem (od neuspořádané ke kvaziuspořádané „soft“ fázi) lze chápat jako narušení rotační symetrie, při kterém se objeví Goldstoneovy módy fluktuací. Přechod je nazván podle amerického fyzika Johna Michaela Kosterlitze a skotského fyzika Davida Thoulesse.



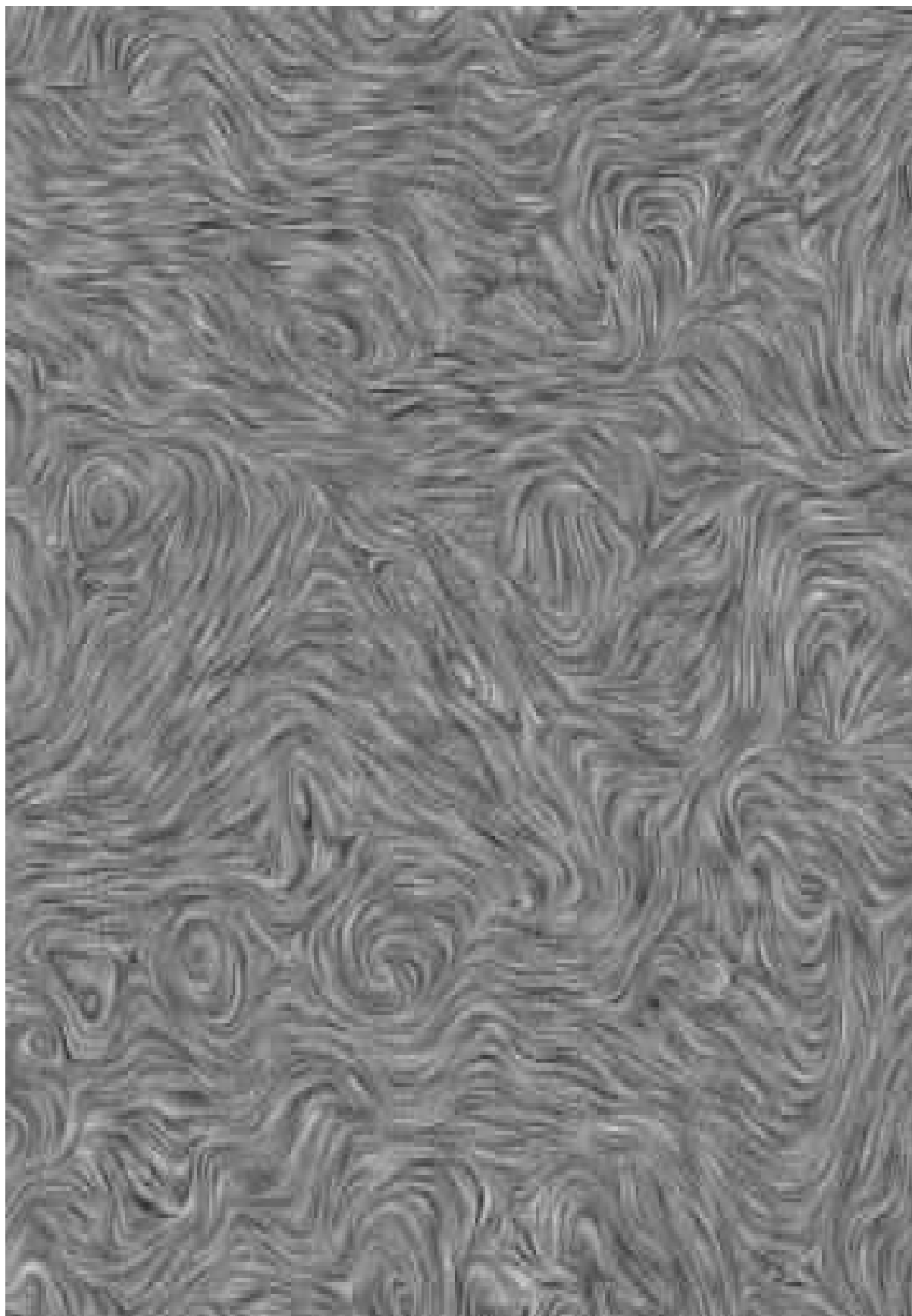
Obr. 12.40: „Soft“ fáze v  $Z_{16}$  modelu.

## Heisenbergův model a XY model

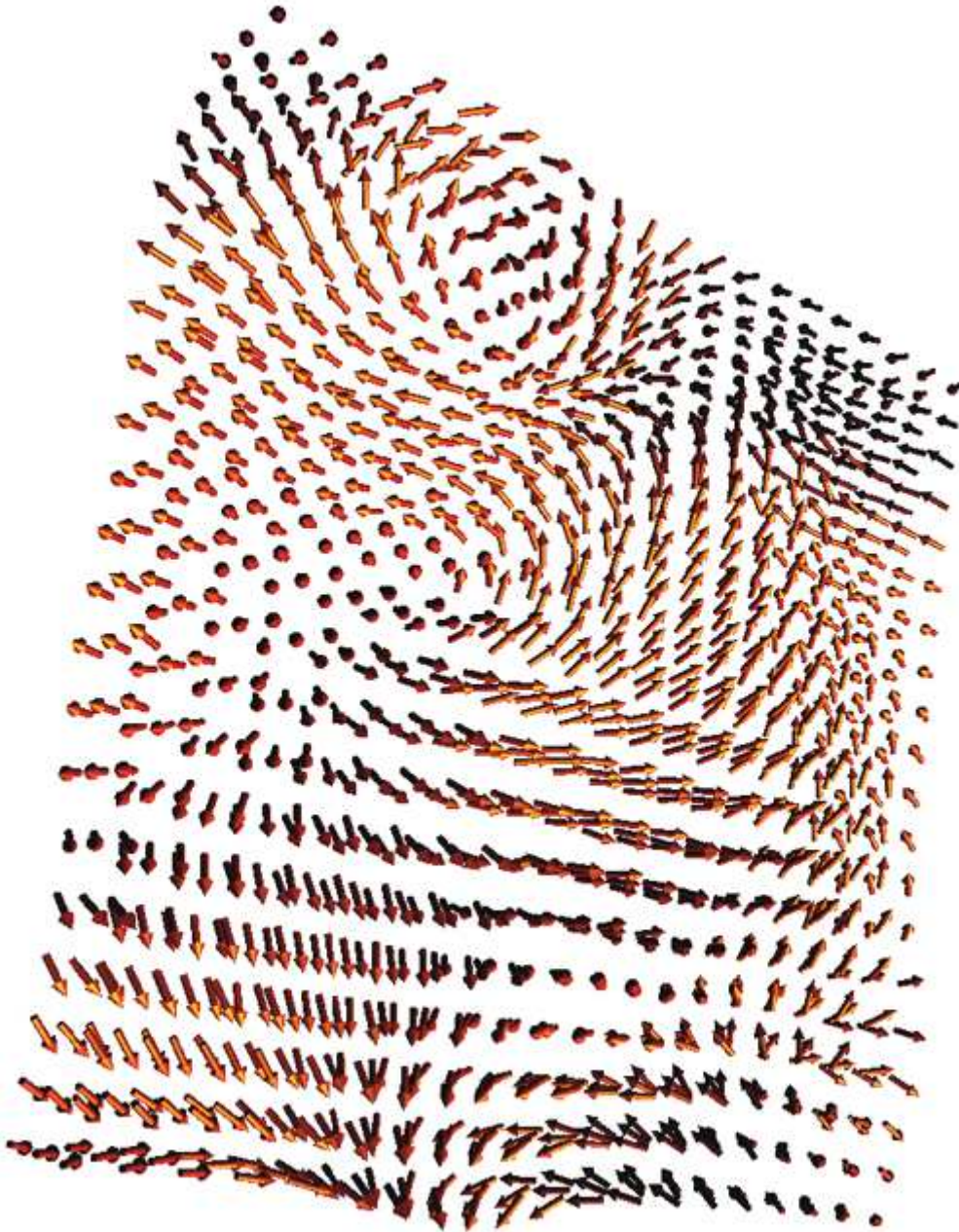
Jde o spojité modely, které připouštějí veškeré orientace spinů. Energetický předpis je stejný, jako u  $Z_Q$  modelu, ale spiny mohou mít libovolnou orientaci. Třírozměrná varianta se nazývá Heisenbergův model, dvojrozměrná varianta se nazývá XY model. Modely mají jen dvě fáze: pro nízkoteplotní „soft“ fázi jsou charakteristické dvojice vírů a spinové vlny; vysokoteplotní fáze má spiny orientovány chaoticky. Obě fáze jsou oddělené Kosterlitzovým - Thoulessovým přechodem. Materiály popisované Heisenbergovým modelem nemají fázi s doménami. K Heisenbergovým magnetům patří například materiál označovaný GSO s chemickým složením  $Gd_2Sn_2O_7$ .



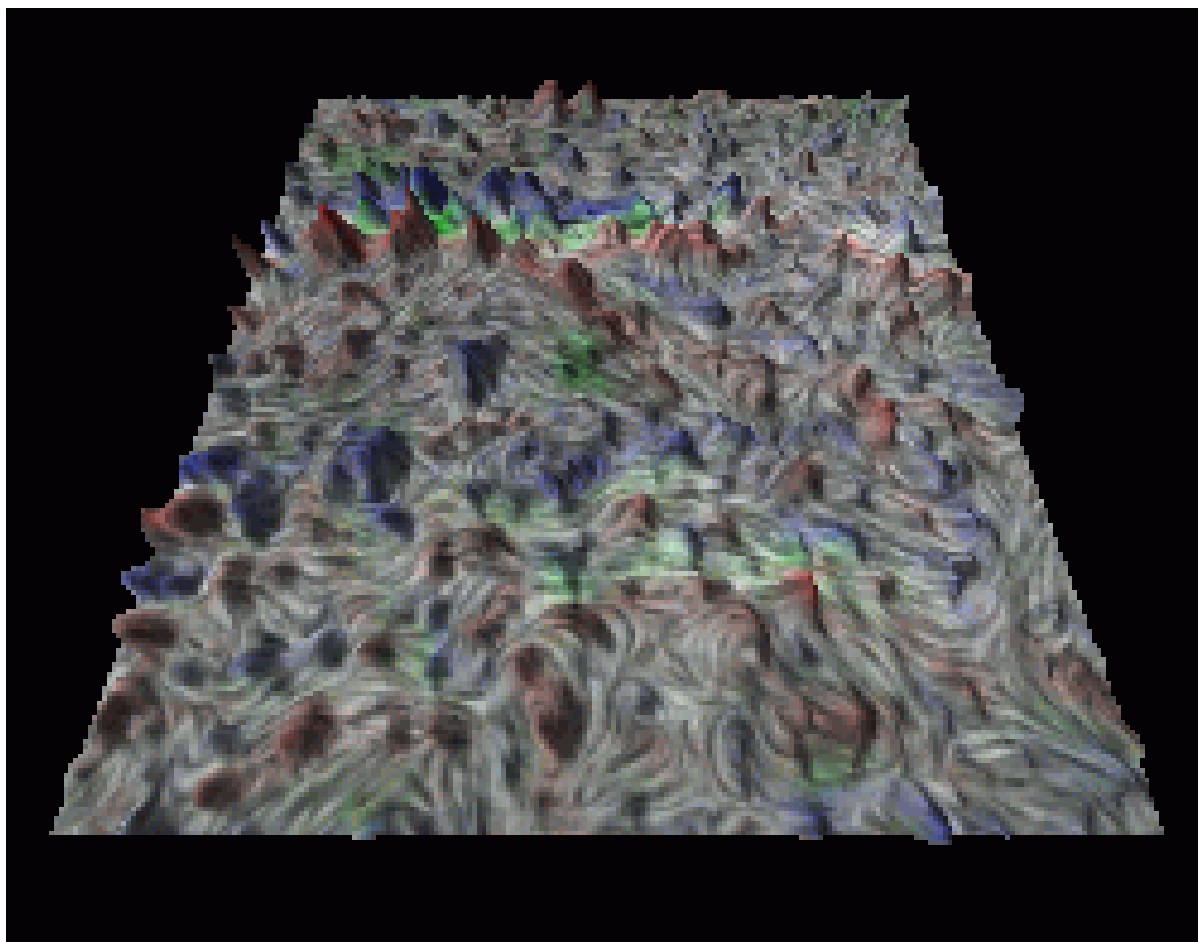
**Obr. 12.41: Dvojměrný Heisenbergův model, nízkoteplotní „soft“ fáze.  
Simulace se  $150 \times 150$  spiny.**



**Obr. 12.42: Spojité vyjádření Heisenbergova 2D modelu**



Obr. 12.43: Třírozměrný Heisenbergův model, fáze s typickými víry a spinovými vlnami.



Obr. 12.44: Spojité vyjádření Heisenbergova 3D modelu

### Hubbardův model

Ani bouřlivě se rozvíjející výpočetní technika neumožňuje simulace elektronových systémů s mnoha (například  $10^{23}$ ) elektrony.

V takových situacích se pokoušíme sledovaný systém rozumně zjednodušit. Natolik rozumně, aby ještě popisoval vlastnosti skutečné látky, kterou chceme zkoumat. Představme si, že elektrony mohou být lokalizovány jen v určitých místech, například ve vrcholech pravidelné mříže. Tak je tomu třeba v krystalických látkách, kde je elektron v blízkosti určitého iontu. Nicméně modely elektronů na mříži mají mnohem širší uplatnění a lze pomocí nich obecně modelovat systémy se silně korelovanými elektrony, například vysokoteplotní supravodiče.

K nejjednodušším modelům tohoto typu patří tzv. Hubbardův model. Elektrony jsou kreovány a anihilovány ve vrcholech mříže tak, aby jejich chování odpovídalo energii systému při dané teplotě. Energie



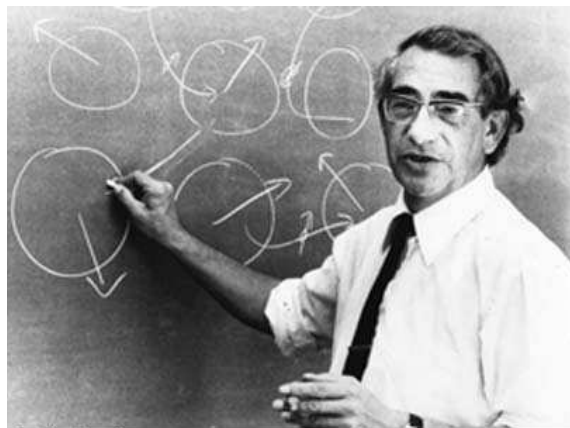
systemu se skládá ze dvou odlišných členů. První člen je dán interakcí *nejbližších sousedů* (součet přes všechny dvojice nejbližších vrcholů). Dva nejbližší sousedé  $\langle a, b \rangle$  přispějí k celkové energii výrazem

$$E_{\langle a, b \rangle} = -t \left( c_{a\uparrow}^+ c_{b\uparrow}^- + c_{a\downarrow}^+ c_{b\downarrow}^- + c_{b\uparrow}^+ c_{a\uparrow}^- + c_{b\downarrow}^+ c_{a\downarrow}^- \right). \quad (12.189)$$

Vazební konstanta této interakce je označena  $t$ , symbol  $c^+$  označuje kreaci elektronu se spinem  $\uparrow$  nebo  $\downarrow$  v daném vrcholu, symbol  $c^-$  anihilaci. Tento člen umožňuje „přeskakování“ či „tunelování“ elektronů z jednoho vrcholu mříže do druhého. Druhá část energie je součtem přes *všechny vrcholy*, každý vrchol přispěje k celkové energii výrazem

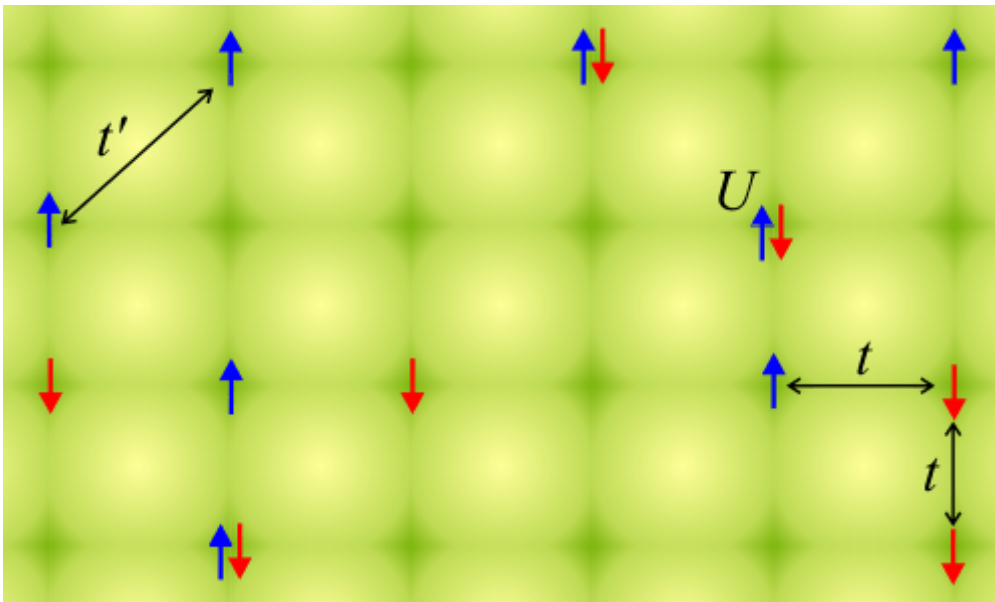
$$E_a = U n_{a\uparrow} n_{a\downarrow}. \quad (12.190)$$

Symbol  $n$  znamená počet jedinců se spinem  $\uparrow$  nebo  $\downarrow$  v daném vrcholu. Kladná vazební konstanta  $U$  znamená repulzi elektronů na malých vzdálenostech: Pokud je ve vrcholu jeden elektron se spinem  $\uparrow$  a jeden elektron se spinem  $\downarrow$ , přispějí k celkové energetické bilanci kladnou hodnotou  $U$ , pokud je ve vrcholu jediný elektron, přispěje tento vrchol nulovou hodnotou. Za nízkých teplot jsou preferovány stavy s co možná nejnižší energií, tedy jediný elektron ve vrcholu mříže. Oba energetické členy znamenají v jistém smyslu párovou interakci. První člen se týká interakce elektronů ve dvou nejbližších vrcholech mříže. Druhý se týká interakce dvojice elektronů v jednom jediném vrcholu (Coulombická repulze). V reálných materiálech je podíl vazebních konstant  $U/t$  mezi 10 až 50.



**John Hubbard (1931–1980)**

Model navrhl anglický fyzik John Hubbard v roce 1963 k popisu chování elektronů v pevných látkách. Pomocí Hubbardova modelu lze snadno simulovat přechod látky mezi vodivým a nevodivým stavem. Dnes se model využívá k popisu chování ultrachladných atomů zachycených v optické mříži. Původní model byl navržen pro dva fermiony, později se objevila i bosonová varianta Hubbardova modelu a různé další užitečné modifikace. Modely se nemusí omezovat na pravoúhlou mříž, interakce nemusí probíhat jen mezi nejbližšími sousedy, ale například i mezi sousedy na úhlopříčce s vazební konstantou  $t'$ , uvažují se modely v mnoha dimenzích, atd.



Obr. 12.45: Hubbardův 2D model.

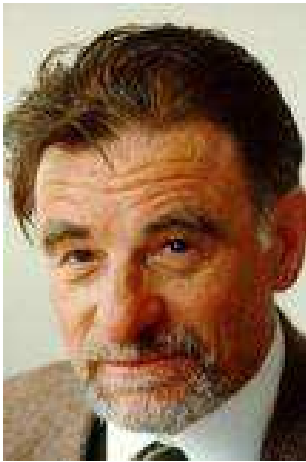


Jozef Špalek (1949)



Sir Nevill Francis Mott (1905 – 1996)

V roce 1977 polský fyzik Jozef Špalek upravil Hubbardův model pro velké hodnoty interakční konstanty  $U$  do podoby se dvěma párovými interakcemi mezi nejbližšími vrcholy mříže. Model byl nazván podle označení vazebních konstant těchto interakcí jako tzv. t-J model. Člen s vazební konstantou  $t$  je podobný prvnímu členu Hubbardova modelu. Druhý člen s vazební konstantou  $J = 2t^2/U$  obsahuje skalární součin dvou sousedních spinů, obdobně jako Heisenbergův model. Pomocí tohoto modelu se podařilo vysvětlit chování Mottových izolátorů včetně jejich feromagnetizmu. Později se t-J model stal úspěšným i při vysvětlení vysokoteplotní supravodivosti keramických materiálů, například  $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ , kterou objevili Karl Alex Müller a Johannes Georg Bednorz v roce 1986.



**Karl Alexander Müller (1927)**

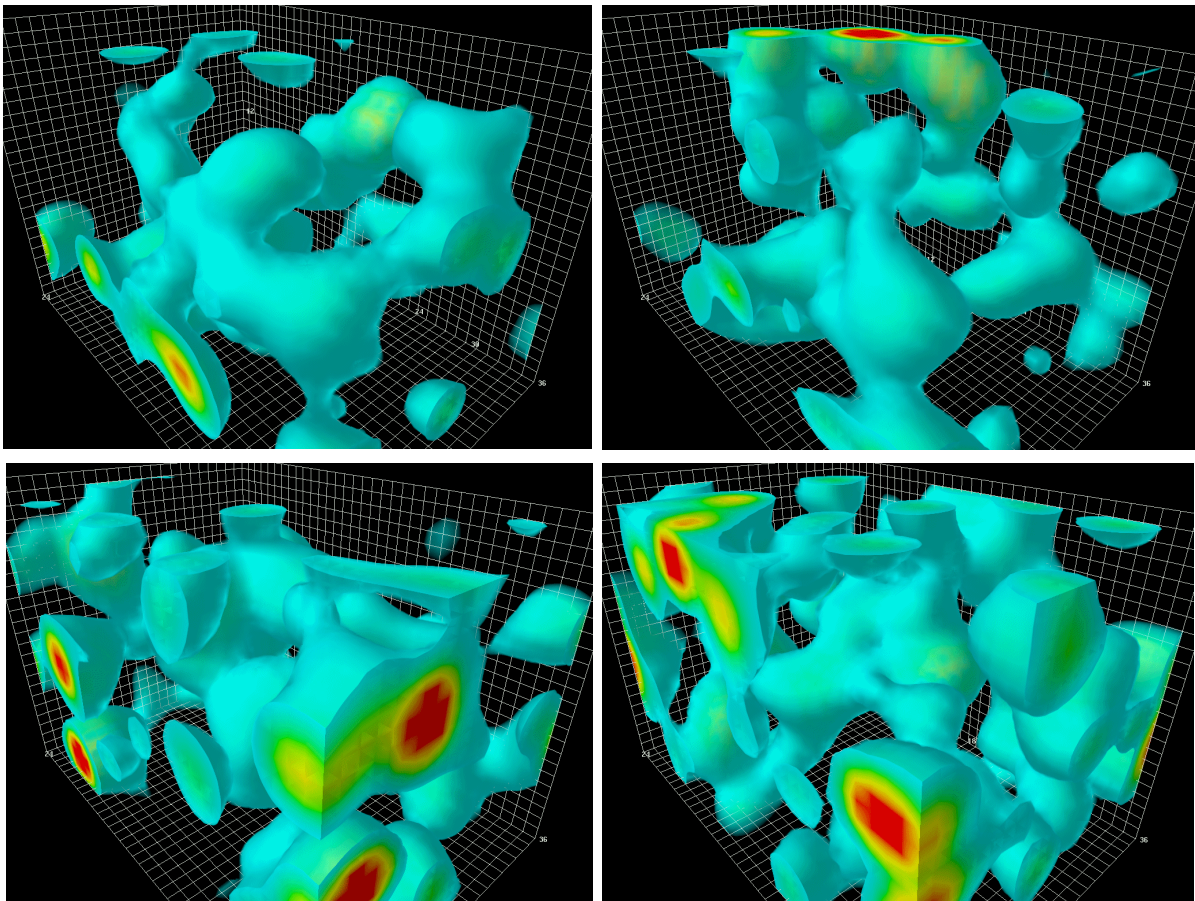


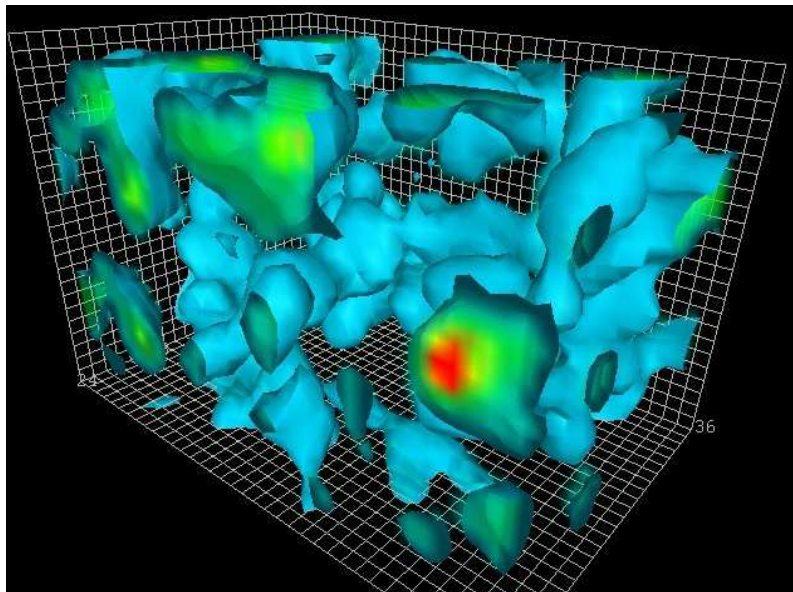
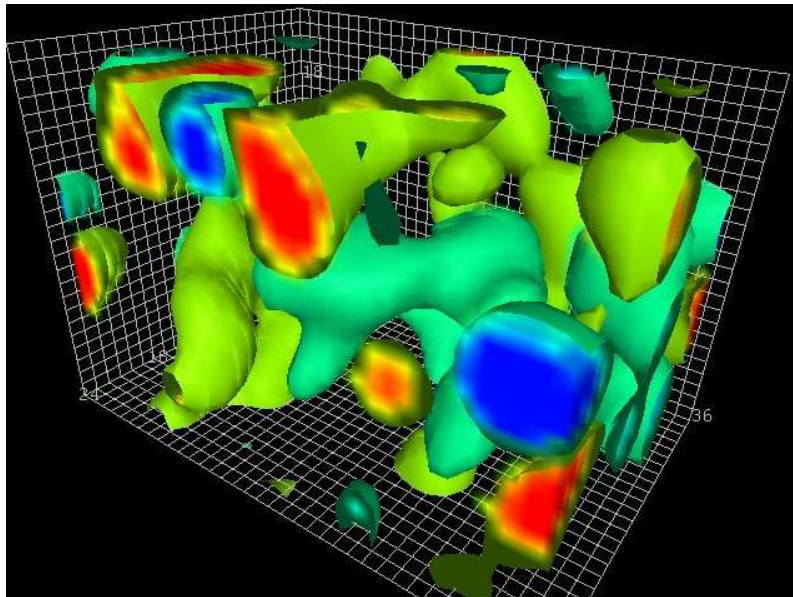
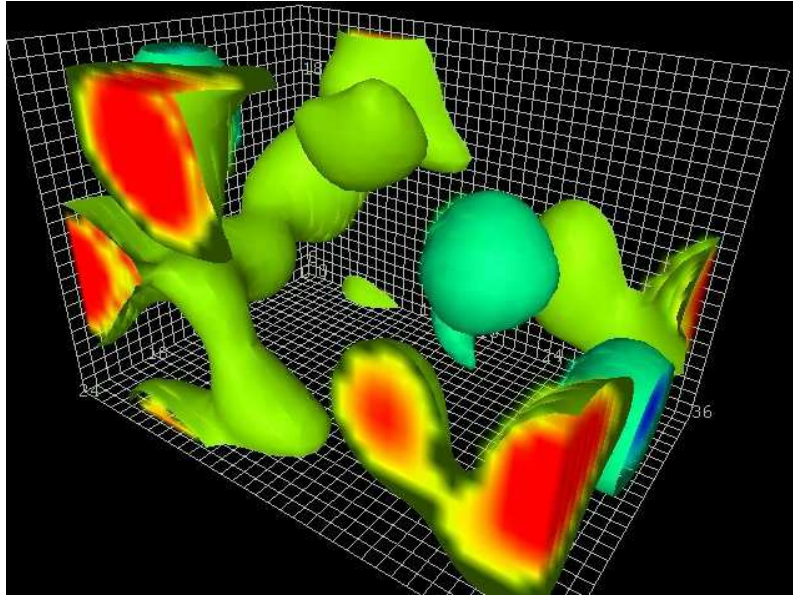
**Johannes Georg Bednorz (1950)**

***b) silná jaderná interakce*****Kvantová chromodynamika na diskrétní mřížce**

Kvantová chromodynamika (QCD) je současnou teorií silné interakce. Standardní metody výpočtu, jako je například poruchová teorie, u QCD selhávají. Jednou z alternativ je diskretizace prostoru a výpočty na mřížce, v jejíž vrcholech jsou lokalizovány kvarky a gluonová pole. V sérii obrázků 12.46 vidíme typickou časoprostorovou strukturu gluonového pole. Výpočetní oblast má rozměry  $2,4 \times 2,4 \times 3,6$  fm. Znázorněna je hustota energie gluonového pole. Autorem je F. Wilczek - nositel Nobelovy ceny za teorii silné interakce z roku 2004.

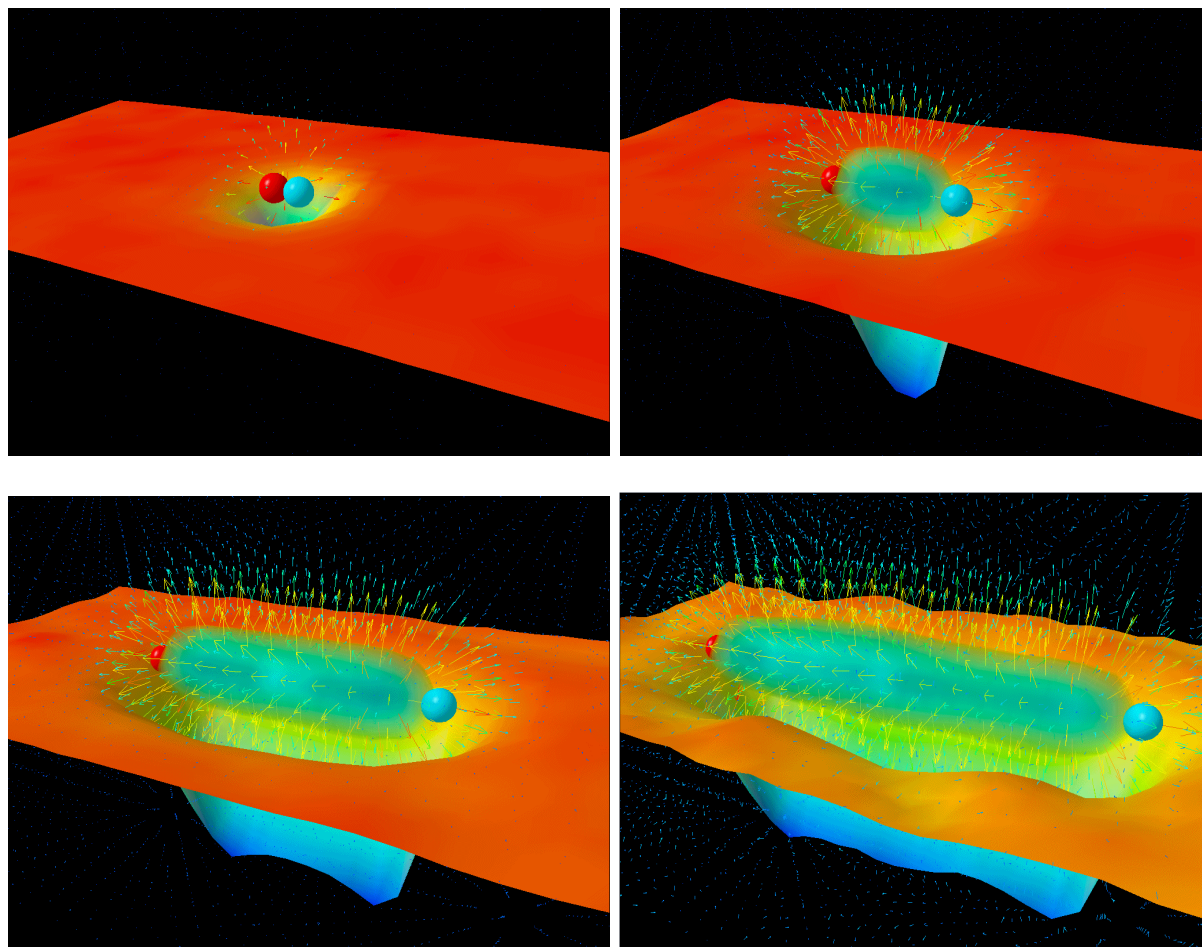
Obr. 12.46





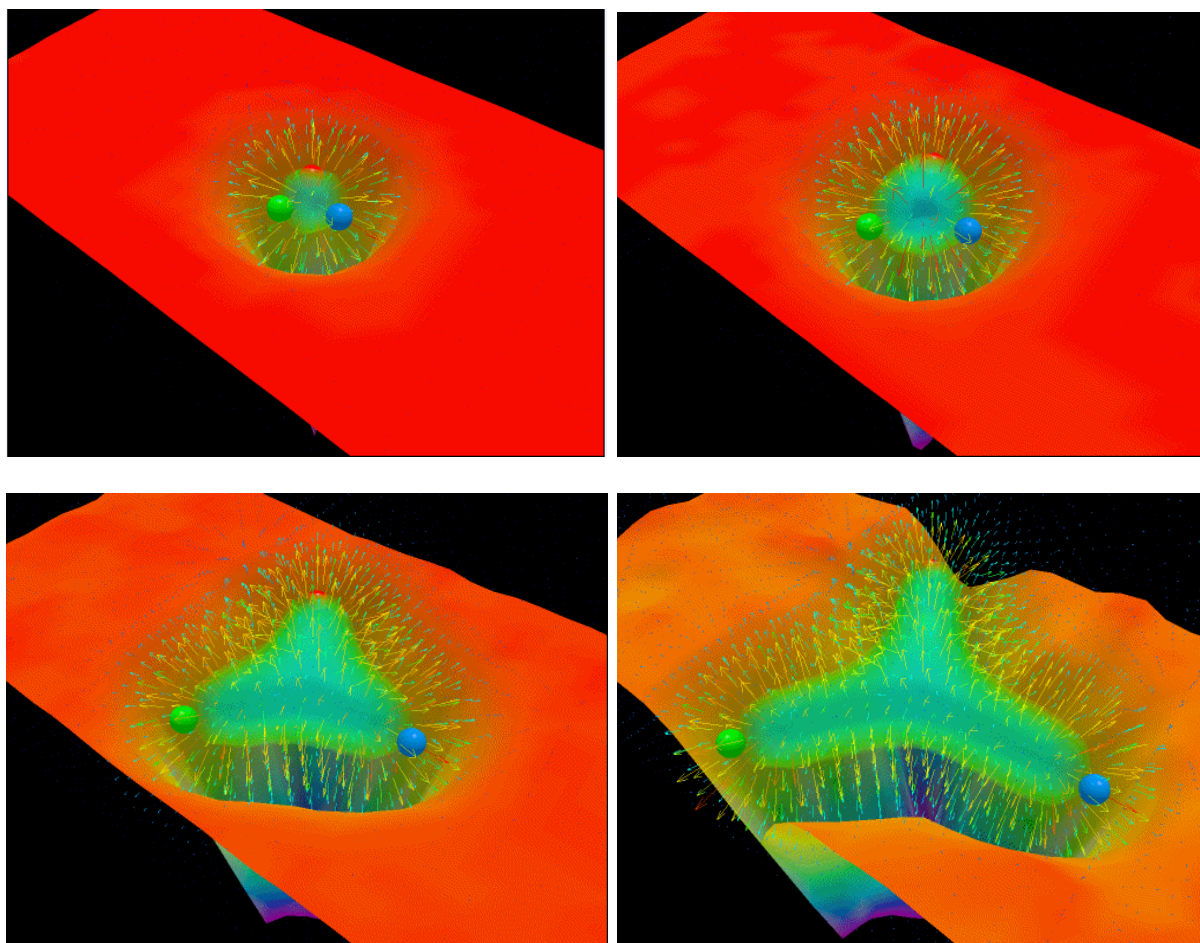
V sérii obrázků 12.47 je znázorněna vazba kvarku a antikvarku v mezonu, tzv. gluonová nit. Vzdálenost kvarků se mění od 0,125 fm do 2,25 fm (1,3-násobek průměru protonu). Povšimněte si, že průměr gluonové niti se nemění. Prohnutá plocha představuje hustotu energie v rovině procházející středy páru kvark-antikvark. Vektorové pole zobrazuje gradient hustoty energie.

Obr. 12.47



V sérii 12.48 je stejným způsobem znázorněna vazba tří kvarků v baryonu.

Obr. 12.48



Z teorie silné interakce, neboli kvantové chromodynamiky je velmi obtížné získávat předpovědi přímým výpočtem. U elektromagnetické interakce je energie vazby podstatně menší než klidová energie vázaných částic (například elektronu a protonu v atomu vodíku). U silné interakce je tomu naopak. Energie vazby tří kvarků v protonu je podstatně větší než hmotnosti jednotlivých kvarků. Standardní poruchová teorie (rozvoj řešení do řad) u silné interakce selhává. Se vzdáleností kvarků jejich vzájemné silové působení neubývá, jak tomu je u elektromagnetické interakce, ale naopak roste. To vede k uvěznění kvarků do oblasti o rozměrech  $10^{-15}$  m a selhání poruchového přístupu. Za běžných podmínek není možné získat volný, nevázaný kvark.

Jednou z možností, jak získávat současnými výpočetními prostředky předpovědi z kvantové chromodynamiky je řešení problému neporuchovým přístupem, s pomocí diskrétní mříže.

## Mřížková chromodynamika

Díky QCD mají fyzici k dispozici základní rovnice popisující silnou jadernou sílu, jenže zabralo celé dekády, než se jim ve výpočtech podařilo dopracovat k nějakým smysluplným a reálným číslům. Řešení rovnic je ve většině případů, když ne zcela nemožné, tak aspoň velmi obtížné.

Fyzici se ale nutně potřebovali hnout z místa. Naštěstí to netrvalo tak dlouho a po čase spatřila světlo světa nová výpočetní metoda, tzv. mřížková QCD. Navrhli ji nezávisle Kenneth Wilson a Alexandr Poljakov roku 1974. Její hlavní myšlenkou je Yangovou – Millsovu kvantovou teorii pole dobře definovat a učinit ji nezávislou na jakémkoli poruchovém rozvoji konstruováním teorie v nikoliv spojitým prostoročase, ale na diskrétní mřížce o konečném počtu bodů. Hladký časoprostor uvnitř nukleonu se nahrazuje sítí jednotlivých izolovaných bodů, což umožňuje eliminovat problémy s nekonečny, které jinak dělají kvantové teorie pole problematickými.

Kvarky a leptony jsou lokalizovány ve vrcholech prostorové mříže a mohou se přemisťovat jen podél spojnic, kde působí Yangova – Millsova pole (gluony). Takové metody se nazývají LQCD (Lattice Quantum ChromoDynamics) a jsou v mnohém podobné mřížovým modelům feromagnetik kterými jsme se zabývali doposud. Přímými předchůdci LQCD jsou Hubbardův model a t-J model.

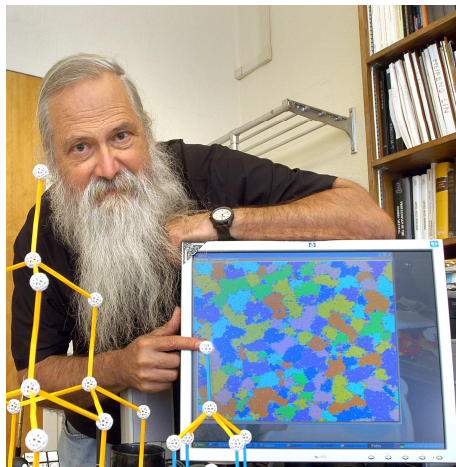
Feynmanova metoda integrálů přes trajektorie vede ve spojitým prostoru k nekonečněrozměrným integrálům, s nimiž nedokážeme dobře zacházet. V mřížkové kalibrační teorii se však Feynmanovy integrály stávají konečněrozměrnými a dobře definovanými díky diskrétní povaze mřížky.

Čím menší je rozestup vrcholů, tím více se výsledky přibližují skutečnému kontinuu. Často se provádějí výpočty s různou velikostí mříže a výsledky se extrapolují k nulové vzdálenosti vrcholů mříže. Pro částice lokalizované na mříži může maximální hybnost nabývat hodnotu  $p \sim \hbar/a$ , kde  $a$  je mřížková konstanta (vzdálenost vrcholů). Plyne to z Heisenbergových relací neurčitosti. V mřížových modelech jsou tak přirozeným způsobem oříznuty nekonečné hodnoty, které se



vyskytují v kvantové chromodynamice na časoprostorovém kontinuu a obtížně se odstraňují pomocí renormalizace. I přes podstatné zjednodušení se pohybují LQCD výpočty na samé hranici možností dnešních superpočítačů. Výpočty se provádějí pro nerealisticky velké hmotnosti kvarků. Lehké kvarky mají totiž velkou korelační délku (jsou korelovány i se vzdálenými sousedy) a takové výpočty vyžadují příliš rozsáhlé mříže.

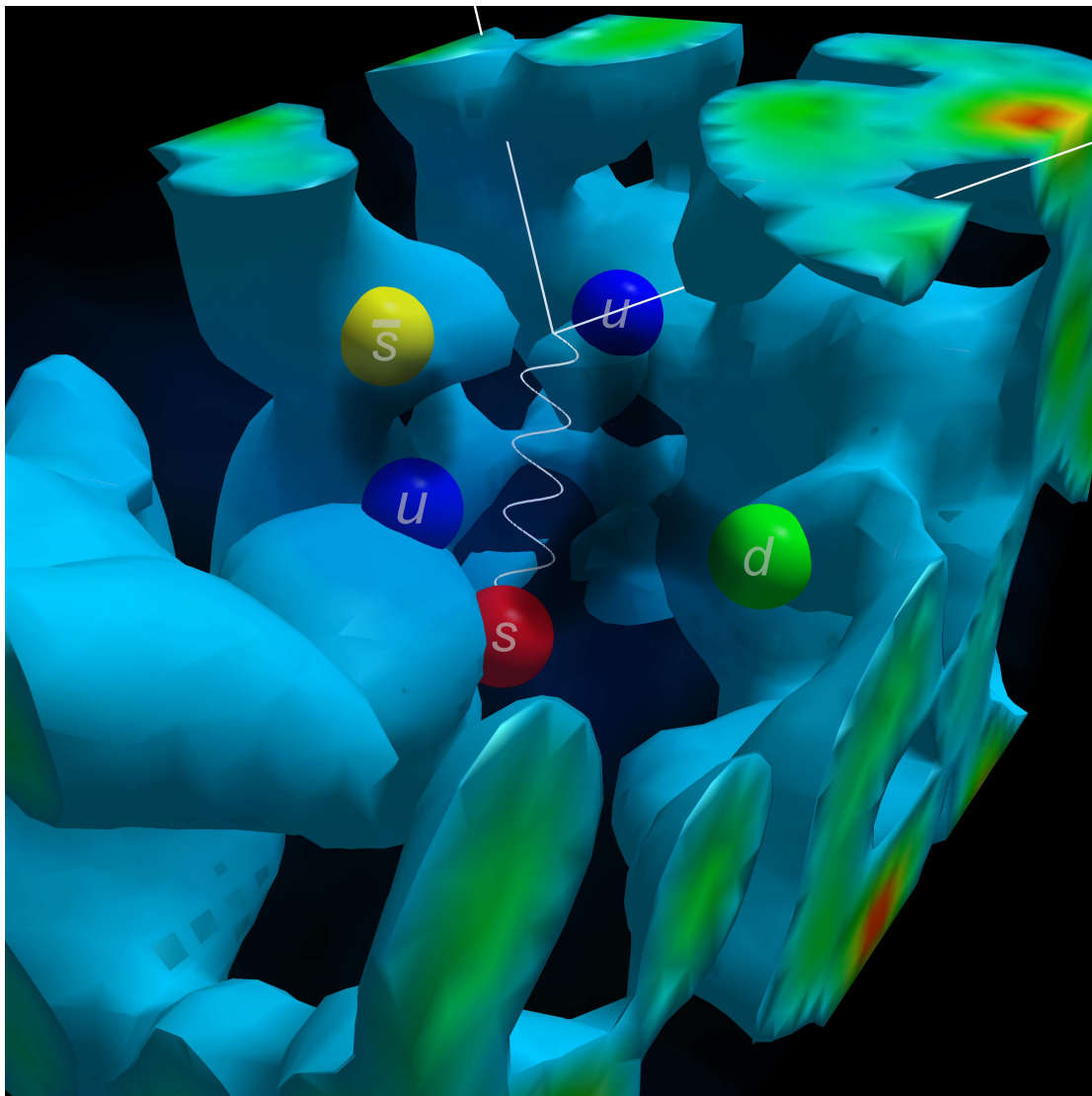
Ačkoli si Wilson a Poljakov vypůjčili tento nápad z fyziky kondenzovaných látek, a mnohé techniky vyvinuté fyziky kondenzovaných látek dávaly jistý vhled do mřížkové kalibrační teorie, vesměs se zakládaly na různých aproximačních schématech, jejichž oprávněnost v daném dílčím případě byla víceméně pochybná. Výjimku tvoří výpočetní metody založené na algoritmu Monte Carlo. První výpočty tohoto druhu v mřížkové kalibrační teorii učinil roku 1979 Michael Creutz v Brookhavenu. Moderní multiprocessorové počítače schopné pracovat rychlostí stovek teraflops dávají výsledky v dobré shodě s experimentální skutečností.



**Michael John Creutz (1944)**

Pomocí LQCD byl zkoumán fázový přechod mezi uvězněnými kvarky a kvark-gluonovým plazmatem. Právě z výpočtů pomocí LQCD vyplynulo, že tento přechod probíhá při energii 170 MeV na částici. Tomu odpovídá teplota řádově  $2 \times 10^{12}$  K, tedy cca stotisíckrát vyšší teplota, než je v nitru Slunce. Obdobných podmínek se podařilo dosáhnout po šesti letech experimentů v roce 2000 na urychlovači SPS ve středisku CERN, kde bylo objeveno kvark-gluonové plazma.

LQCD se dnes využívá při simulaci uvěznění kvarků, v teorii strun, při hledání axionů i v mnoha dalších aplikacích.



**Obr. 12.49:** LQCD počítačová simulace nitra hyperonu. Červená, zelená a modrá kulička znázorňují kvarky v hyperonu. Ostatní oblasti jsou gluonová pole (97 % hmotnosti hyperonu). modrý a žlutý objekt znázorňují excitaci gluonového pole – pár kvark-antikvark

Pokud by kvarky existovaly samostatně, což je ovšem za normálních okolností nemožné, příspěvek jejich individuálních hmotností k celkové hmotnosti nukleonu by činil pouhé jedno procento. A to je překvapivě málo.

Nabízí se tedy otázka co tvoří oněch zbývajících 99 procent hmotnosti. Nebo jinými slovy, co je podstatou běžné hmoty. Odpověď nejen na tyto otázky hledal mezinárodní výzkumný tým pod vedením Stephana Dürra z Institutu Johna von Neumanna v německém Jülichu. Jeho primárním úkolem ale bylo provést teoretický výpočet hmotnosti protonu. Podle teorie kvantové chromodynamiky (QCD) je oněch 99 procent hmotnosti uloženo v energii vazby, která kvarky váže k sobě.

Podobně jako i jiné virtuální částice, gluony neustále vznikají a zanikají, jakoby z ničeho, a to díky kvantovým fluktuacím. Ale jak vidno, jejich „existenci“ nelze při výpočtech hmotností nukleonů opomenout, neboť tvoří podstatnou součást silné vazby.

S virtuálními gluony fyzici sice při kalkulacích hmotností nukleonů běžně počítali, avšak stále opomíjeli jiné důležité složky vakua, a sice virtuální páry kvarků a antikvarků. I ty se, stejně jako gluony a ostatní virtuální částice, ustavičně vynořují z kvantového vakua, aby vzápětí opět mizely v nicotě. Jejich vliv celou věc ještě víc komplikuje, nukleony se již vůbec nejeví jako jednoduché částice složené ze tří kvarků jako na začátku našich úvah, ale jsou složitým propletením všech možných stavů, které je nutné do výpočtů zahrnout.



**Stephan Dürr (1974)**

Dürrova skupina se potýkala s neobyčejně složitým úkolem, neboť výpočty s virtuálními kvarky představují práci s více než 10 triliardami čísel. Na Zemi zatím neexistuje počítač, který by byl schopen pojmout do své paměti tak obrovské množství dat a proto

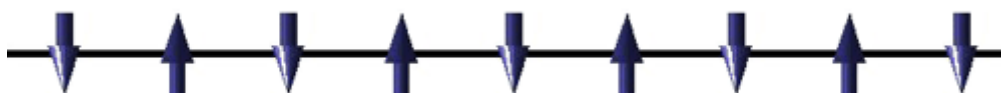
vědci museli k výpočtu použít hned celou počítačovou (paralelní) síť o výkonu 200 teraflops.

Nakonec bylo jejich úsilí korunováno zaslouženým úspěchem – jimi vypočtená hmotnost protonu se od experimentálně zjištěných hodnot liší o pouhá 2 %. To má sice stále daleko k přesnosti výpočtů dosahované v kvantové elektrodynamice (ve výpočtech dosud provedených až do 3. řádu poruchového rozvoje zde bylo dosaženo shody s experimentem lepší než  $10^{-8}$  %), znamená to však skutečně velký skok kupředu, neboť předchozí pokusy pracovaly s 10 % chybou.

### Spinový žebřík a uvěznění kvarků

Uvěznění kvarků v mezonu nebo baryonu je zatím chápáno jen rámcově. Není například jasné, jakou hmotnost budou mít lehčí mezony, na které se rozpadá mezon těžší (když dojde k „přetržení“ gluonové niti). Proto může být užitečné zkoumat podobně uvězněné systémy jiného charakteru. Na konci roku 2009 byl pozorován obdobný jev v tzv. spinových žebřících. Popišme si tento objev podrobněji.

Začněme s jednorozměrným řetězcem antiferomagnetika (obr. 12.50). V základním stavu jsou sousední spiny seřazeny antiparalelně (opačně orientované spiny přispějí k energii nižší hodnotou než souhlasně orientované spiny). Základní stavy (stavy s nejnižší možnou energií) existují dva (liší se orientací spinů) a při extrémně nízké teplotě dojde k narušení symetrie a výběru jednoho ze dvou základních stavů.



Obr. 12.50: Základní stav antiferomagnetického řetězce

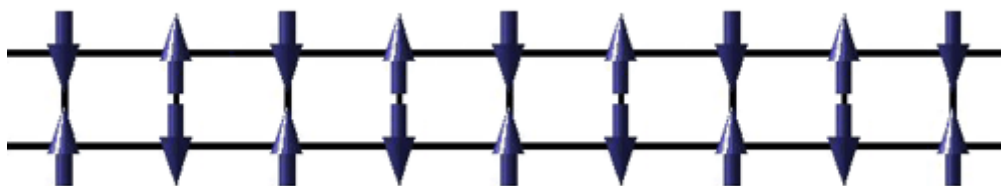
Zvýšíme-li nyní teplotu, dojde ke zvýšení energie řetězce. Díky teplotním fluktuacím se objeví oblast obrácených spinů (na obr. 12.51 je vyznačena červeně). Jde vlastně o část druhého základního stavu, která je vnořena do již existujícího základního stavu. Obrácená oblast

je od okolí oddělena tzv. *doménovými stěnami* (A, B) neboli *spinony*. Doménová stěna (spinon) je tvořena dvojicí stejně orientovaných spinů, které jsou nositeli teplotní fluktuace (souhlasně orientované spinny mají vyšší energii než nesouhlasně). Takové excitace (spinony) se vždy objevují po dvojicích, jsou nositeli nevykompenzovaného spinu ( $1/2$ ) v řetězci a celková energie řetězce nezávisí na vzdálenosti obou spinonů. Pohyb spinonu podél řetězce nemění celkovou energii řetězce. Spinon se chová jako volná kvazičástice, která není nijak korelována s druhým spinonem. Oba současně vzniklé spinony nejsou nijak vázané.

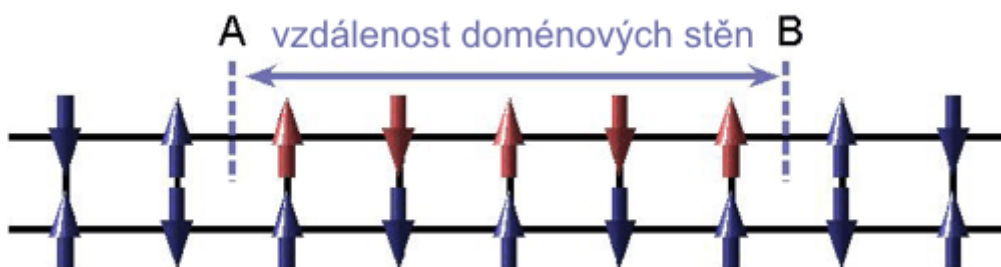


Obr. 12.51: Dvojice doménových stěn (spinonů)

Uvažujme nyní dva antiferomagneticky provázané řetězce spinů, tzv. *spinový žebřík*. Jeden ze dvou základních stavů žebříku je na obr. 12.52. Pokud nyní zvýšíme teplotu, objeví se v jednom z řetězců opět teplotní fluktuace – oblast obrácených spinů ohraničená dvěma spinony (doménovými stěnami). Situace je ale nyní velmi odlišná. Oblast obrácených spinů má shodný směr se spinny sousedního řetězce a celá oblast tak přispívá ke zvýšení energie žebříku. Čím větší je vzdálenost spinonů A a B (doménových stěn), tím vyšší je energie spinového žebříku. Oba spinony jsou nyní silně vázané a energie jejich vazby roste s jejich vzdáleností! Situace je obdobná dvojici kvarku a antikvarku uvězněné v mezonu. Zde také roste energie vazby se vzdáleností kvarků, což kvarkům neumožňuje uniknout z vázaného stavu. Ani v žebříku se jeden spinon nemůže vzdálit od druhého. Existuje zde i další paralela. Kvarky mají neceločíselný náboj a teprve jejich vázané stavy se navenek jeví tak, jakoby měly celočíselný náboj. Obdobně je každý spinon nositelem nevykompenzovaného spinu ( $1/2$ ) a teprve dvojice vázaných spinonů má celočíselný spin.



Obr. 12.52: Základní stav spinového žebříku

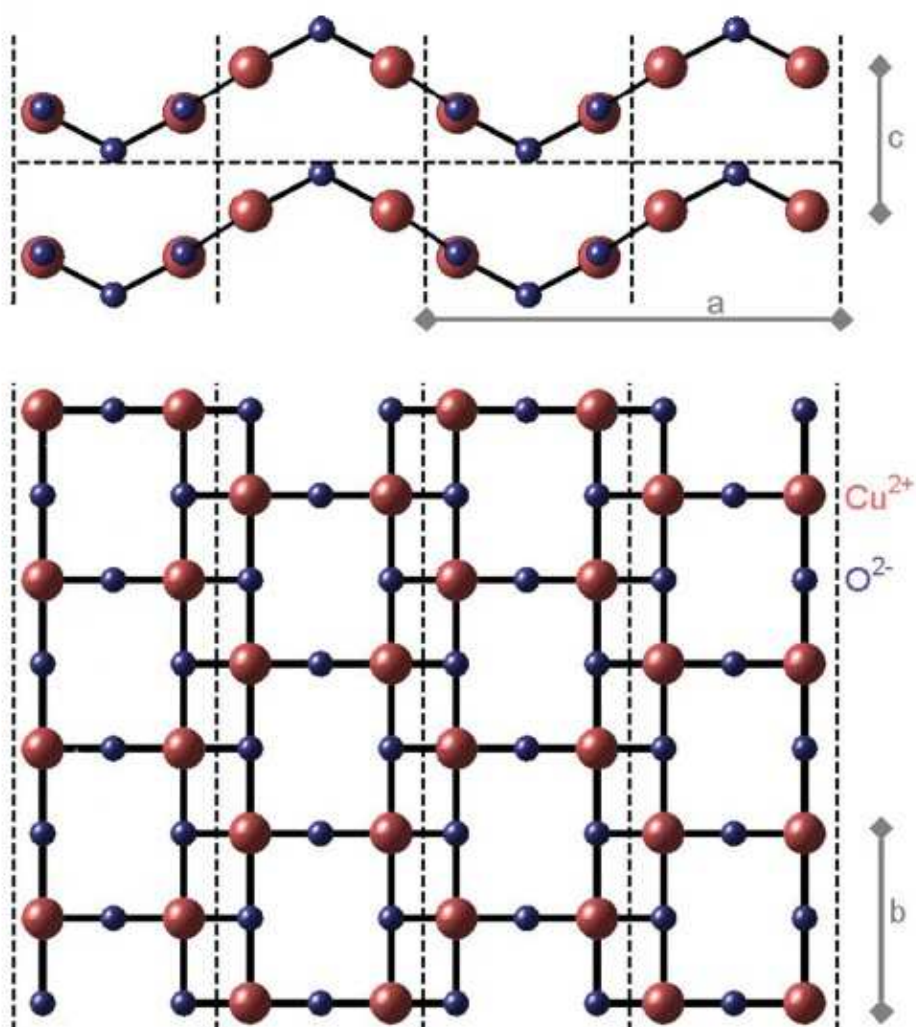


Obr. 12.53: Excitovaný stav spinového žebříku

Kvantové žebříky je možné snadno numericky simulovat a zjišťovat tak vlastnosti uvězněných jedinců. Důležité je, že na sklonku roku 2009 Bella Lake z Helmholtzova centra v Berlíně pozorovala se spolupracovníky uvězněné stavy dvou spinonů ve spinovém žebříku i experimentálně. Jednalo se o oxid  $\text{CaCu}_2\text{O}_3$ . Materiál byl zkoumán za pomoci ohybu neutronů. Při vysokých energiích byly patrné samostatné lineární řetězce s dvojicemi nevázaných spinonů. Při nízkých energiích došlo ke spárování řetězců do spinových žebříků a spinony začaly být vázané obdobným způsobem jako kvarky v baryonech. Otevírá se zde mimořádně zajímavá možnost numerických simulací a přímých experimentů s uvězněnými spinony, která může objasnit zatím nevyřešené otázky kvantové chromodynamiky.



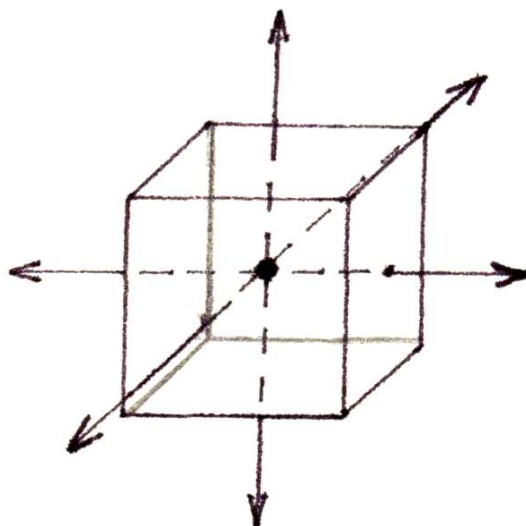
Bella Lake (1973)



Obr. 12.54: Schéma spinového žebříku  $\text{CaCu}_2\text{O}_3$ . Nahoře je pohled z boku, dole pohled shora. Vzdálenost  $a$  je 0,9949 nm,  $b$  je 0,4078 nm a  $c$  je 0,3460 nm. Ionty  $\text{Cu}^{2+}$  mají spin  $1/2$  a jsou vyznačeny červeně.

U kvarků je vůně parametrem spojeným s jeho hmotností, kdežto barva je opět určena polarizací braketu cytonové parity, která může nabývat celkem tří vektorových stavů.

Obr. 12.55



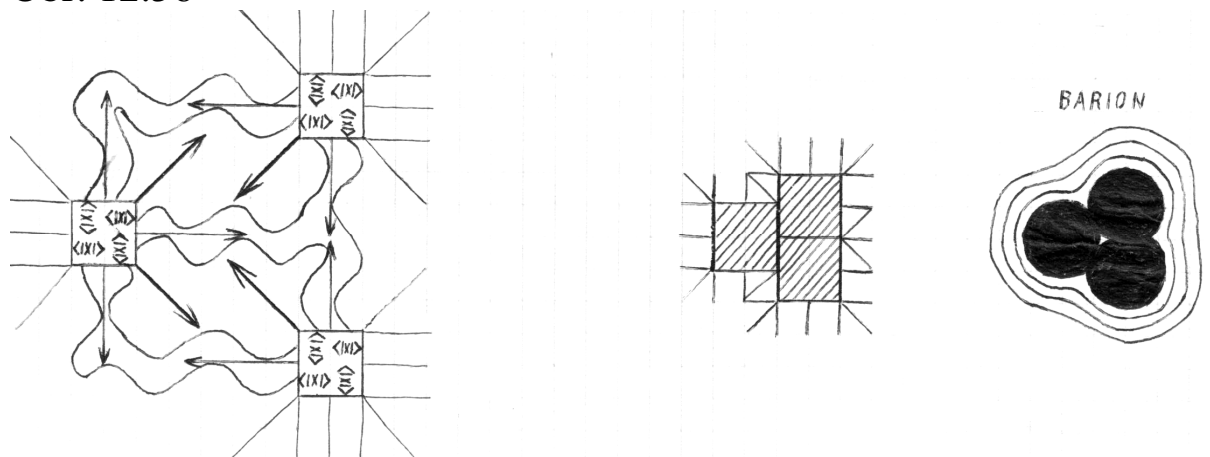
Orientace kvarkového braketu je ovlivněna orientací cytoresonančního vektoru gluonu, který s daným kvarkem interaguje. Z kvantové chromodynamiky vyplynulo, že síla, kterou se tři různobarevné kvarky vzájemně přitahují, roste úměrně s jejich vzájemnou vzdáleností. Vektorová analýza provedená na základě nestacionární teorie cytoprostoru však ukázala také to, že tato vzdálenost nesmí výrazně překročit rozměr  $10^{-15}$  m.

Při překonání této interkvarkové vzdálenosti již interakce mezi kvarky začíná se vzrůstající vzdáleností prudce klesat.

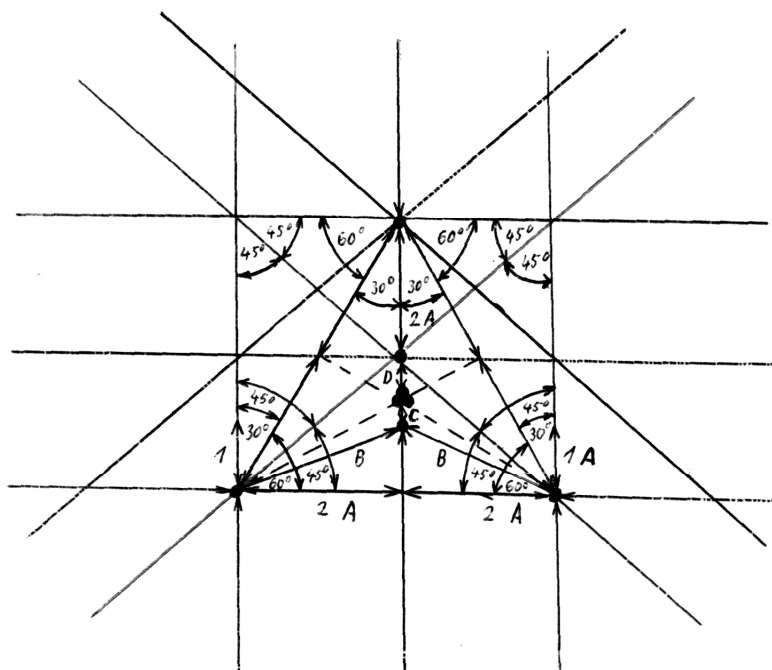
Obrázky 12.56, 12.57, znázorňují (velmi zjednodušeně) kvarkový model baryonu a hlavní vektory působení sekundární cytoresonance pro 3 různobarevné kvarky.



Obr. 12.56



Obr. 12.57



$$B = \sqrt{A^2 + (2A)^2} = \sqrt{5A^2}$$

( 12.191 )

$$C = 2A = D$$

Leptony a kvarky jsou, jak víme ze stacionární teorie cytoprostoru, tvořeny shlukem preonů, jež spolu interagují granunifikačně.

### *c) gravitační interakce*

Ve druhé kapitole jsme viděli, že ve čtyřrozměrném prostoročase nelze od sebe oddělit jako olej a vodu pohyb v prostoru a pohyb v čase. Prostoročas je jednolitě kontinuum a veškeré pohyby je potřeba uvažovat pouze v rámci tohoto kontinua. Správným způsobem popisu pohybu pak již není obyčejná třírozměrná rychlost a zrychlení, ale čtyřrychlost a čtyřzrychlení. Z druhé kapitoly rovněž víme, že v prostoročase se vše pohybuje čtyřrychlostí světla. Všechny objekty ve vesmíru mají tedy stejnou velikost čtyřrychlosti. Objekty, které se pohybují rychleji v prostoru se proto musí pohybovat pomaleji v čase a naopak. Objektům, které se pohybují rychlostí světla v prostoru (fotony, gravitony) již nezbyvá žádná složka rychlosti ve směru časové osy a proto se v čase nepohybují vůbec.

Gravitační pole je nejen zakřivený prostor, ale též zakřivený čas. Těleso vypuštěné z klidu, má ve skutečnosti už na počátku čtyřrychlost rovnou rychlosti světla. Akorát že tato rychlost všechna míří ve směru časové osy. Prostoročas je ale v gravitačním poli zakřiven a vektor času tak (velmi obrazně řečeno) již není kolmý na vektory prostoru – těleso, pohybující se zprvu pouze ve směru časové osy, tak postupně získává nenulovou rychlost i v určitém prostorovém směru. Je to dáno tím, že tok času se ve směru klesajícího potenciálu (tj. rostoucí intenzity gravitačního pole) postupně zpomaluje. Jinak řečeno, ve směru sílícího gravitačního pole běží čas stále pomaleji (vztaženo k asymptotickému nekonečnu). Jak se těleso noří stále hlouběji a hlouběji do gravitačního pole, jeho rychlost v časovém směru tak klesá. Protože však celková čtyřrychlost se zachovává a musí být stále rovna rychlosti světla, logicky to vede k závěru, že těleso musí zrychlovat v prostoru a toto zrychlení navíc musí mít směr klesajícího gradientu rychlosti toku času, to jest směr klesajícího potenciálu gravitačního pole – těleso padá.

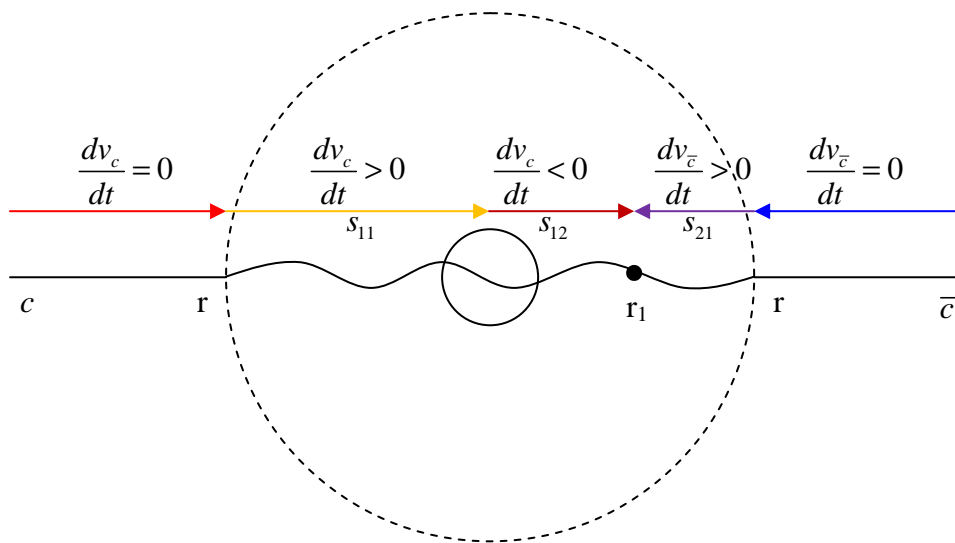
OTR tak velmi elegantně objasňuje podstatu gravitačních sil. Neříká však vůbec nic o mikroskopických příčinách zakřivování geometrie prostoročasu hmotou. V tomto odstavci si ukážeme, která se s tímto problémem vypořádává dynamická teorie cytoprostoru.

Směr braketu cytonové parity pro konkrétní kvantion se po každé interakci  $s + \bar{s} \rightarrow k$  mění o úhel  $90^\circ$ , přičemž původního směru nabyde každý takovýto braket při každé čtvrté srážce.

Kvantionový spin se pak dle pravidel o skládání spinů přenáší na preon a posléze na leptony, kvarky a další částice.

Koncentrace většího množství kvantionů v relativně malém prostoru má na svědomí vznik měřitelné tzv. polarizované cytorezonance (viz obr. 12.58).

Obr. 12.58



Kladná cytorezonance, působí na cytony postupující ve směru vektoru intenzity gravitačního pole, a vyvolává jejich urychlení úměrné velikosti intenzity tohoto pole.

Naopak záporná cytorezonance, působící na cytony postupující proti směru vektoru intenzity gravitačního pole, je zpomaluje. Daleko od hmotného zdroje se cytony pohybují konstantní rychlostí a pro dráhy  $s_1, s_2$  cytonového páru platí

$$s_1 = vt,$$

$$s_2 = s_0 - v(t - t_0), \quad (12.192)$$

$$s_1 = s_2.$$

odkud

$$t = \frac{s_0 + vt_0}{2v}. \quad (12.193)$$

Nyní nechme cytonový pár vstoupit do pole sekundární cyto rezonance. Pohybové rovnice ( 12.192 ) se změjí na

$$\begin{aligned} s_{11} &= vt + \frac{at^2}{2}, \\ s_{12} &= vt - a(t-t_1)t - \frac{a(t-t_1)^2}{2}, \\ s_2 &= s_0 - v(t-t_0) - \frac{a(t-t_0)^2}{2}, \\ s_{11} + s_{12} &= s_{21}. \end{aligned} \quad (12.194)$$

Z první rovnice stanovíme čas  $t_1$ , od kterého se mění rovnoměrně zpomalený pohyb cytonu na rovnoměrně zrychlený:

$$\begin{aligned} at_1^2 + 2vt_1 - 2s_{11} &= 0, \\ t_1 &= \frac{-v + \sqrt{v^2 + 2as_{11}}}{a}. \end{aligned} \quad (12.195)$$

a poté ještě využijeme skutečnosti, že z důvodu symetrie  $s_{11} = \frac{s_0}{2}$ , čili

$$t_1 = \frac{-v + \sqrt{v^2 + as_0}}{a}. \quad (12.196)$$

Máme tedy rovnici

$$2vt + \frac{at^2}{2} - a(t-t_1)t - \frac{a(t-t_1)^2}{2} = s_0 - v(t-t_0) - \frac{a(t-t_0)^2}{2}, \quad (12.197)$$

kteřou lze postupnými úpravami zjednoduřit na tvar

$$2vt + \frac{at^2}{2} - at^2 + at_1t - \frac{at^2}{2} + at_1t - \frac{at_1^2}{2} = s_0 - vt + vt_0 - \frac{at^2}{2} + at_0t - \frac{at_0^2}{2},$$

$$3vt - \frac{at^2}{2} - \frac{at_1^2}{2} + 2at_1t = s_0 + vt_0 + at_0t - \frac{at_0^2}{2}.$$

( 12.198 )

Dosazením za  $t$  z ( 12.193 ) a za  $t_1$  z ( 12.196 ) postupně dostáváme

$$3v \frac{s_0 + vt_0}{2v} - \frac{a}{2} \left( \frac{s_0 + vt_0}{2v} \right)^2 - \frac{a}{2} \left( \frac{v - \sqrt{v - as_0}}{a} \right)^2 + 2at \frac{v - \sqrt{v - as_0}}{a} =$$

$$= s_0 + vt_0 + at_0 \frac{s_0 + vt_0}{2v} - \frac{at_0^2}{2},$$

$$3 \frac{s_0 + vt_0}{2} - \frac{a}{2} \left( \frac{s_0 + vt_0}{2v} \right)^2 - \frac{(v - \sqrt{v - as_0})^2}{2a} + 2t(v - \sqrt{v - as_0}) - s_0 -$$

$$- vt_0 - at_0 \frac{s_0 + vt_0}{2v} + \frac{at_0^2}{2} = 0,$$

$$\frac{3s_0}{2} + \frac{3vt_0}{2} - \frac{a}{2} \frac{s_0^2 + 2s_0vt_0 + v^2t_0^2}{4v^2} - \frac{v^2 - 2v\sqrt{v - as_0} + v - as_0}{2a} + 2vt -$$

$$- 2t\sqrt{v - as_0} - s_0 - vt_0 - \frac{as_0t_0}{2v} - \frac{at_0^2}{2} + \frac{at_0^2}{2} = 0,$$

$$\frac{3s_0}{2} + \frac{3vt_0}{2} - \frac{as_0^2}{8v^2} - \frac{as_0vt_0}{4v^2} - \frac{av^2t_0^2}{8v^2} - \frac{v^2}{2a} + \frac{2v\sqrt{v - as_0}}{2a} - \frac{v}{2a} + \frac{as_0}{2a} + 2vt -$$

$$- 2t\sqrt{v - as_0} - s_0 - vt - \frac{as_0t_0}{2v} = 0,$$

$$\frac{s_0}{2} + \frac{3vt_0}{2} - \frac{as_0^2}{8v^2} - \frac{3as_0t_0}{4v} - \frac{at_0^2}{8} - \frac{v^2}{2a} + \frac{2v\sqrt{v - as_0}}{2a} - \frac{v}{2a} + \frac{as_0}{2a} + vt -$$

$$- 2t\sqrt{v - as_0} = 0.$$

( 12.199 )

Vidíme, že rovnost v přítomnosti pole sekundární cytorezonance obecně neplatí, neboť levou stranu rovnice nelze anulovat. V případě obecně nerovnoměrného pohybu cytonových párů v poli sekundární cytorezonance tak nedojde k aktivaci stejné cytoprostorové buňky, jako v případě bez sekundární cytorezonance. To má za následek efektivní vznik pole gravitačních sil s jeho univerzálními účinky, jak jej známe z OTR.

Z modelu rovněž dobře vyplývá dilatace času v gravitačním poli, neboť kvantiony vygenerované v oblasti silnějšího gravitačního pole, mají vyšší energii a jejich doba života (antion) se prodlužuje. Podobně jako OTR tak dospíváme k výsledku, že silové pole souvisí s měnicí se hustotou toku času v různých místech prostoru v poli sekundární cytorezonance.

### **Gravitační pole coby gradient hustoty toku času**

Ukázali jsme, že v rámci nestacionární teorie cytoprostoru lze úspěšně modelovat vznik silových polí v přírodě. V tomto odstavci se pokusíme na základě tohoto modelu vybudovat analytickou teorii gravitačního pole, snadno formulovatelnou i v jazyce kvantové teorie.

Pohyb v centrálním gravitačním poli je obecně popsán rovnicí

$$\frac{d^2 r(t)}{dt^2} = \frac{GM}{r^2(t)} . \quad ( 12.200 )$$

Operovat budeme v soustavě souřadné s počátkem v centru gravitačního pole.

Protože gravitační pole je pole konzervativní, můžeme nalézt obecné řešení rovnice ( 12.200 ) prostým porovnáním

$$E_p = E_k , \quad ( 12.201 )$$

kde

$$\begin{aligned}
 E_p &= \int_r^{r_0} F_g \, dr = G \cdot m \cdot M \cdot \int_r^{r_0} r^{-2} \, dr = G \cdot m \cdot M \cdot \left[ -\frac{1}{r} \right]_r^{r_0} = \\
 &= G \cdot m \cdot M \cdot \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right)
 \end{aligned}
 \tag{12.202}$$

$$\begin{aligned}
 E_k &= \int_{r_0}^r F \, dr = m \int_{r_0}^r \frac{dv}{dt} \, dr = m \int_{v_0}^v \frac{dr}{st} \, dv = m \int_{v_0}^v v \, dv = \left[ \frac{mv^2}{2} \right]_{v_0}^v = \\
 &= \frac{m}{2} \left[ \left( \frac{dr}{dt} \right)^2 - v_0^2 \right]
 \end{aligned}
 \tag{12.203}$$

Odtud

$$\frac{1}{2} \left[ \left( \frac{dr}{dt} \right)^2 - v_0^2 \right] = GM \cdot \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right)
 \tag{12.204}$$

a tedy

$$v = \frac{dr}{dt} = \sqrt{2GM \left( \frac{1}{r} - \frac{1}{r_0} \right) + v_0^2} = \sqrt{\frac{2GM(r_0 - r) + v_0^2 rr_0}{rr_0}}
 \tag{12.205}$$

neboli

$$dt = \sqrt{\frac{rr_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 rr_0}} \, dr
 \tag{12.206}$$

a

$$t = \int_r^{r_0} \sqrt{\frac{rr_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 rr_0}} dr. \quad (12.207)$$

Abychom dostali pohybovou rovnici, měli bychom odtud vyjádřit  $r$ .  
Provedením substituce

$$x = r(r_0 v_0^2 - 2GM) + 2GM r_0, \quad (12.208)$$

$$r = \frac{x - 2GM r_0}{r_0 v_0^2 - 2GM},$$

obdržíme diferenciál

$$dx = (r_0 v_0^2 - 2GM) dr. \quad (12.209)$$

Odtud, dosazením do (12.207), máme

$$t = \int_r^{r_0} \sqrt{\frac{r_0(x - 2GM r_0)}{x(r_0 v_0^2 - 2GM)}} dr = \int_r^{r_0} \sqrt{\frac{r_0(x - 2GM r_0)}{x(r_0 v_0^2 - 2GM)^2}} dx =$$

$$= \frac{\sqrt{r_0}}{r_0 v_0^2 - 2GM} \int_r^{r_0} \sqrt{1 - \frac{2GM r_0}{x}} dx \quad (12.210)$$

Poslední integrál můžeme snadno převést substitucí

$$y^2 = \frac{x - 2GM r_0}{x},$$

$$x = \frac{2GM r_0}{1 - y^2}, \quad (12.211)$$

$$dx = \frac{4GM r_0 y}{(y^2 - 1)^2} dy,$$



na integrál racionální lomené funkce

$$t = \frac{\sqrt{r_0}}{r_0 v_0^2 - 2GM} \int_r^{r_0} \sqrt{1 - \frac{2GM r_0}{x}} dx = \frac{4GM \sqrt{r_0^3}}{r_0 v_0^2 - 2GM} \int_r^{r_0} \frac{y^2}{(y^2 - 1)^2} dy, \quad (12.212)$$

jejíž expanzí dostaneme výsledek

$$\begin{aligned} t &= \frac{4GM \sqrt{r_0^3}}{r_0 v_0^2 - 2GM} \int_r^{r_0} \frac{1}{4(y-1)^2} + \frac{1}{4(y+1)^2} + \frac{1}{4(y-1)} - \frac{1}{4(y+1)} dy = \\ &= \frac{GM \sqrt{r_0^3}}{2GM - r_0 v_0^2} \left[ \frac{1}{y-1} + \frac{1}{y+1} - \ln \left| \frac{y-1}{y+1} \right| \right]_r^{r_0}. \end{aligned} \quad (12.213)$$

Odsostituováním dostáváme hledanou pohybovou rovnici:

$$t = \frac{GM \sqrt{r_0^3}}{2GM - r_0 v_0^2} \left[ \frac{1}{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} - 1}} + \frac{1}{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} + 1}} - \ln \left| \frac{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} - 1}}{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} + 1}} \right| \right]_r^{r_0} \quad (12.214)$$

Naším úkolem nyní bude vyjádřit z této rovnice proměnnou  $r(t)$ :

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} - 1}} + \frac{1}{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} + 1}} - \ln \left| \frac{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} - 1}}{\sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} + 1}} \right| = \\ &= \frac{GM \sqrt{r_0^3}}{2GM + r_0 v_0^2} \left( \frac{1}{\sqrt{\frac{r_0(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} - 1}} + \frac{1}{\sqrt{\frac{r_0(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} + 1}} - \ln \left| \frac{\sqrt{\frac{r_0(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} - 1}}{\sqrt{\frac{r_0(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r_0 v_0^2 - 2GM} + 1}} \right| \right) - t \end{aligned} \quad (12.215)$$

Řešení budeme provádět per partes postupným odsostituováním.

Nechť

$$z = \sqrt{\frac{r(r_0 v_0^2 - 2GM)}{r(r_0 v_0^2 - 2GM) + 2GM r_0}} \quad (12.216)$$

a  $k$  označíme první člen na pravé straně ( 12.215 ).  
Řešení předpokládáme ve tvaru  $z = f(t)$ , takže

$$r = \frac{2GM r_0 f^2(t)}{(r_0 v_0^2 - 2GM)(1 - f^2(t))} \quad (12.217)$$

Potom můžeme rovnici ( 12.215 ) zapsat jako

$$\frac{2z}{z^2 - 1} + \ln(z - 1) - \ln(z + 1) = k - t, \quad (12.218)$$

neboli

$$e^{z^2 - 2z + c} = \frac{z - 1}{z + 1}, \quad (12.219)$$

kde  $c = k - t - 1$ .

Tento typ rovnic je však bohužel analyticky neřešitelný a proto nelze nalézt obecný tvar pohybové rovnice cytonu jakožto  $\mathbf{r} = f(\mathbf{v}_0, \mathbf{r}_0, t)$ , ale jedině jako  $t = f(\mathbf{v}_0, \mathbf{r}_0, \mathbf{r})$ .

Existuje sice možnost rozvinout exponenciálu či logaritmus v Taylorovu řadu a transformovat tak nealgebraickou rovnici na algebraickou, nutnost omezit se pouze na prvních několik členů řady však povede k pouze přibližným výsledkům.

Fakt, že jsme nuceni pracovat v  $t$ -prostoru na místo  $r$ -prostoru, jak je běžné v negravitačních kvantových teoriích, nám ale ve skutečnosti příliš nevádí vzhledem k tomu, že se zajímáme právě o rozdíl časů, s jakým do zvoleného bodu prostoru dorazí jednotlivé složky páru cyton – paracyton.

Kvantový popis gravitace v dynamické teorii cytoprostoru tak zároveň ukazuje na nemožnost nalezení přesného řešení pohybové rovnice

gravitonu, takže nelze přesně stanovit, v jakém bodě cytoprostoru se nalézá vybraný graviton ve zvoleném čase.

Dynamická teorie cytoprostoru však umí dát dosti přesnou odpověď na obrácenou otázku, tj. kdy se bude vybraný graviton nalézat ve zvoleném bodě cytoprostoru.

Čas, který potřebuje cyton k překonání vzdálenosti  $r_1 - r$  proti směru gradientu gravitačního pole, poté, co proletěl centrálním tělesem, bude dán vztahem

$$t = \int_{r_c}^{r_1} \sqrt{\frac{rr_1}{2GM(r_1 - r) + v^2 rr_1}} dr, \quad (12.220)$$

kde rychlost  $v$  je určena vztahem (12.205), kam za  $r$  musíme dosadit poloměr  $x$  centrálního tělesa. Máme tedy

$$v = \sqrt{\frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 xr_0}{xr_0}}. \quad (12.221)$$

Celkový čas, který cyton potřebuje k průletu Schwarzschildovým polem z bodu  $r_0$  do bodu  $r_1$  tak je

$$t = \int_x^{r_0} \sqrt{\frac{rr_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 rr_0}} dr + \frac{2x}{\sqrt{\frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 xr_0}{xr_0}}} +$$

$$+ \int_x^{r_1} \sqrt{\frac{rr_1}{2GM\left((r_1 - r) + \frac{(r_0 - x) + v_0^2 xr_0}{xr_0} rr_1\right)}} dr \quad (12.222)$$

kde prozatím zjednodušeně předpokládáme, že uvnitř centrálního tělesa se cyton pohybuje rovnoměrným pohybem s rychlostí  $v$ . Toto zjednodušení je oprávněné pouze pro Schwarzschildovskou černou

díru, kde centrálním tělesem je singularita nulových rozměrů, či pro gravitační vlnu, kde centrální těleso chybí úplně. U centrálního tělesa nenulových rozměrů toto zjednodušení samozřejmě oprávněné není. Pro přesné stanovení doby průletu centrálním tělesem je potřeba provést následující konstrukci: Uvnitř centrálního tělesa je závislost gravitační síly na vzdálenosti od středu určena diferenciální rovnicí

$$m \frac{d^2 r}{dt^2} = -kr, \quad (12.223)$$

která má obecné řešení

$$r = x \cos(\omega\tau),$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}. \quad (12.224)$$

System se tedy chová jako lineární harmonický oscilátor a pro dobu průletu centrálním tělesem bude platit vztah

$$t = \frac{T}{2} = \pi \sqrt{\frac{m}{k}} = \pi \sqrt{\frac{x}{g}} = \pi \sqrt{\frac{x^3}{GM}}. \quad (12.225)$$

Hamiltonián systému je

$$H = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2} kx^2. \quad (12.226)$$

Abychom zjistili dobu průletu při nenulové počáteční rychlosti  $v$ , rozšíříme fyzické centrální těleso na virtuální nadtěleso poloměru  $r \geq x$ .

Položíme tedy

$$H = \frac{1}{2} kr^2. \quad (12.227)$$

Máme tak rovnost

$$mv^2 = k(r^2 - x^2), \quad (12.228)$$

neboli

$$v^2 = g(r - x), \quad (12.229)$$

kde  $g$  je intenzita gravitačního pole v místě  $x$ , kde počítáme rychlost. Na místo skutečného harmonického pohybu s nenulovou počáteční rychlostí, tak vlastně počítáme jakýsi rozšířený harmonický pohyb s nulovou počáteční rychlostí.

Ze vztahu ( 12.229 ) ihned dostáváme

$$r = \frac{v^2}{g} + x, \quad (12.230)$$

$$v^2 = g(r_0 - x).$$

Testovací částice pak do bodu  $x$  dospívá již s obecně nenulovou počáteční rychlostí, čehož jsme chtěli docílit.

Dosazením tohoto výsledku do ( 12.224 ) ihned vidíme, že v bodě  $x$  platí

$$x = \frac{v^2 + gx}{g} \cos\left(\sqrt{\frac{g}{x}} \tau\right), \quad (12.231)$$

odkud

$$\tau = \sqrt{\frac{x}{g}} \arccos\left(\frac{gx}{gx + v^2}\right). \quad (12.232)$$

Parametr  $\tau$  nám zde vyjadřuje dobu trvání části harmonického kmitu, kdy se cyton pohybuje mezi body  $r$  a  $x$ .

Protože na druhé straně virtuálního nadtělesa je situace přesně

symetrická, musíme od celkové doby trvání rozšířeného harmonického pohybu odečíst dvojnásobek této doby, abychom dostali hledanou dobu průletu fyzickým tělesem:

$$\begin{aligned}
 t &= \pi \sqrt{\frac{rx^2}{GM}} - 2\sqrt{\frac{x^3}{GM}} \arccos\left(\frac{GM}{GM + xv^2}\right) = \\
 &= \pi \frac{\sqrt{x^3(v^2x + GM)}}{GM} - 2\sqrt{\frac{x^3}{GM}} \arccos\left(\frac{GM}{GM + xv^2}\right).
 \end{aligned}
 \tag{12.233}$$

Neboli, vyjádřením rychlosti  $v$  ze vztahu ( 12.205 )

$$t = \pi \frac{\sqrt{x^3 \left( \frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 xr_0}{xr_0} x + GM \right)}}{GM} - 2\sqrt{\frac{x^3}{GM}} \arccos\left( \frac{GM}{GM + x \frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 xr_0}{xr_0}} \right)
 \tag{12.234}$$

Přesné vyjádření doby průletu polem tedy zní

$$\begin{aligned}
 t &= \int_x^{r_0} \sqrt{\frac{rr_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 rr_0}} dr + \int_x^{r_1} \sqrt{\frac{rr_1}{2GM \left( (r_1 - r) + \frac{(r_0 - x) + v_0^2 rr_0}{r_0} r_1 \right)}} dr + \\
 &+ \pi \frac{\sqrt{x^3 \left( \frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 xr_0}{r_0} + GM \right)}}{GM} - 2\sqrt{\frac{x^3}{GM}} \arccos\left( \frac{GM}{GM + \frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 xr_0}{r_0}} \right).
 \end{aligned}
 \tag{12.235}$$

## Kvantování gravitačního pole

Vydeme z pohybové rovnice ( 12.218 ) a budeme hledat její řešení rozvinutím logaritmu v Taylorovu řadu v okolí bodu  $r_1$ , pro který již umíme spočítat čas  $t$  ze vztahu ( 12.235 ):

$$t = k - \frac{2z}{z^2 - 1} - \ln \frac{(r_1 - 1)}{(r_1 + 1)} + \sum_{i=1}^{\infty} \left[ (-1)^i \frac{(z - r_1)^i}{i(r_1 - 1)} + (-1)^{i+1} \frac{(z - r_1)^i}{i(r_1 + 1)} \right] \quad (12.236)$$

V okolí  $\Delta t$  bodu  $t$ , tak rovnice ( 12.236 ) určuje střední hodnotu vlnové funkce cytonu. Dosazením  $z$  ( 12.217 ) tak dostáváme

$$\langle \psi \rangle = \langle \psi | \hat{r} | \psi \rangle = \frac{2GM r_0 z^2}{(r_0 v_0^2 - 2GM)(1 - z^2)}. \quad (12.237)$$

Obdobně, pro paracyton bude platit

$$\langle \bar{\psi} \rangle = \langle \bar{\psi} | \hat{r} | \bar{\psi} \rangle = \frac{2GM r_2 z^2}{(r_2 v_0^2 - 2GM)(1 - z^2)}. \quad (12.238)$$

Označme rozdíl středních hodnot polohy cytonu a paracytonu v čase  $t$  jako

$$\Delta \langle \psi_{(t)} \rangle = \langle \psi_{(t)} \rangle - \langle \bar{\psi}_{(t)} \rangle. \quad (12.239)$$

Nyní stanovíme intenzitu gravitačního pole v místě  $r_1$  z kvantové teorie gravitace:

- 1) Vybereme si cytoprostorovou buňku a spočteme pro ni fázový rozdíl  $\Delta t$  cytonového páru bez přítomnosti pole.
- 2) Nyní vypočteme pro jednotlivé komponenty cytonového páru s tímto fázovým rozdílem hodnoty  $t$  pro tutéž buňku, za přítomnosti pole a stanovíme jejich rozdíl  $\delta t \neq 0$ .
- 3) Intenzitu gravitačního pole v tomto místě určíme následující konstrukcí: Stanovíme dráhový rozdíl

$$\delta s \approx v \cdot \delta t = \delta t \sqrt{\frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 x r_0}{x r_0}}, \quad (12.240)$$

kde přibližnou rovností zdůrazňujeme, že na subplanckovských vzdálenostech počítáme s rychlostí cytonu jako s konstantou. Oprava na zrychlený pohyb cytonu, by na tomto intervalu přinesla natolik zanedbatelné zpřesnění výsledku a vzhledem k subplanckovským vzdálenostem by byla rovněž i obtížně fyzikálně zdůvodnitelná, takže v dalším textu nahradíme přibližnou rovnost běžnou rovností.

Pro změnu rychlosti tělesa v místě  $r_1$  po uplynutí Planckova času tedy platí

$$\delta u = \frac{\delta s}{t_h}, \quad (12.241)$$

odkud plyne hodnota intenzity gravitačního pole

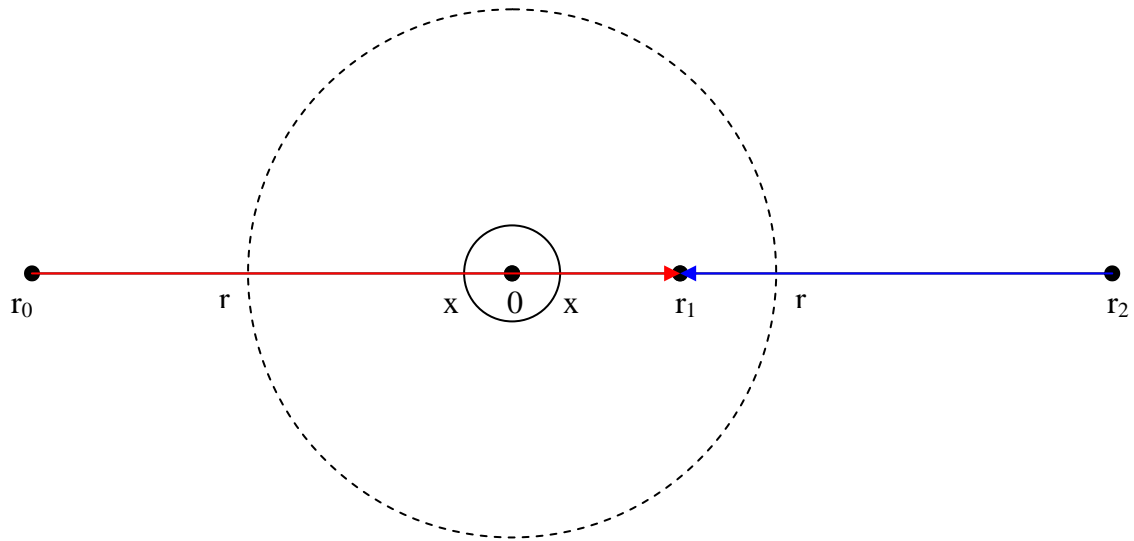
$$g = \frac{\delta u}{t_h} = \frac{\delta t}{t_h^2} \sqrt{\frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 x r_0}{x r_0}}. \quad (12.242)$$

Po dosazení z ( 12.235 ) a ( 12.207 ) tak získáme konečný výsledek

$$g = \frac{1}{t_h^2} \sqrt{\frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 x r_0}{x r_0}} \cdot \left( \int_x^{r_0} \sqrt{\frac{r r_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 r r_0}} dr + \int_x^{r_1} \sqrt{\frac{r r_1}{2GM \left( (r_1 - r) + \frac{(r_0 - x) + v_0^2 r r_0}{r_0} r_1 \right)}} dr + \right. \\ \left. + \pi \frac{\sqrt{x^3 \left( \frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 x r_0}{r_0} + GM \right)}}{GM} - 2 \sqrt{\frac{x^3}{GM}} \arccos \left( \frac{GM}{GM + \frac{2GM(r_0 - x) + v_0^2 x r_0}{r_0}} \right) - \right. \\ \left. - \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{r r_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 r r_0}} dr \right). \quad (12.243)$$



Obr. 12.59



Gravitonu

$$\Psi = \varphi_0 \cdot e^{i(\mathbf{kr} - \omega t)} = g \cdot r_1 \cdot e^{\frac{i}{\hbar}(Et - \mathbf{pr})} \quad (12.244)$$

pak přísluší hamiltonián

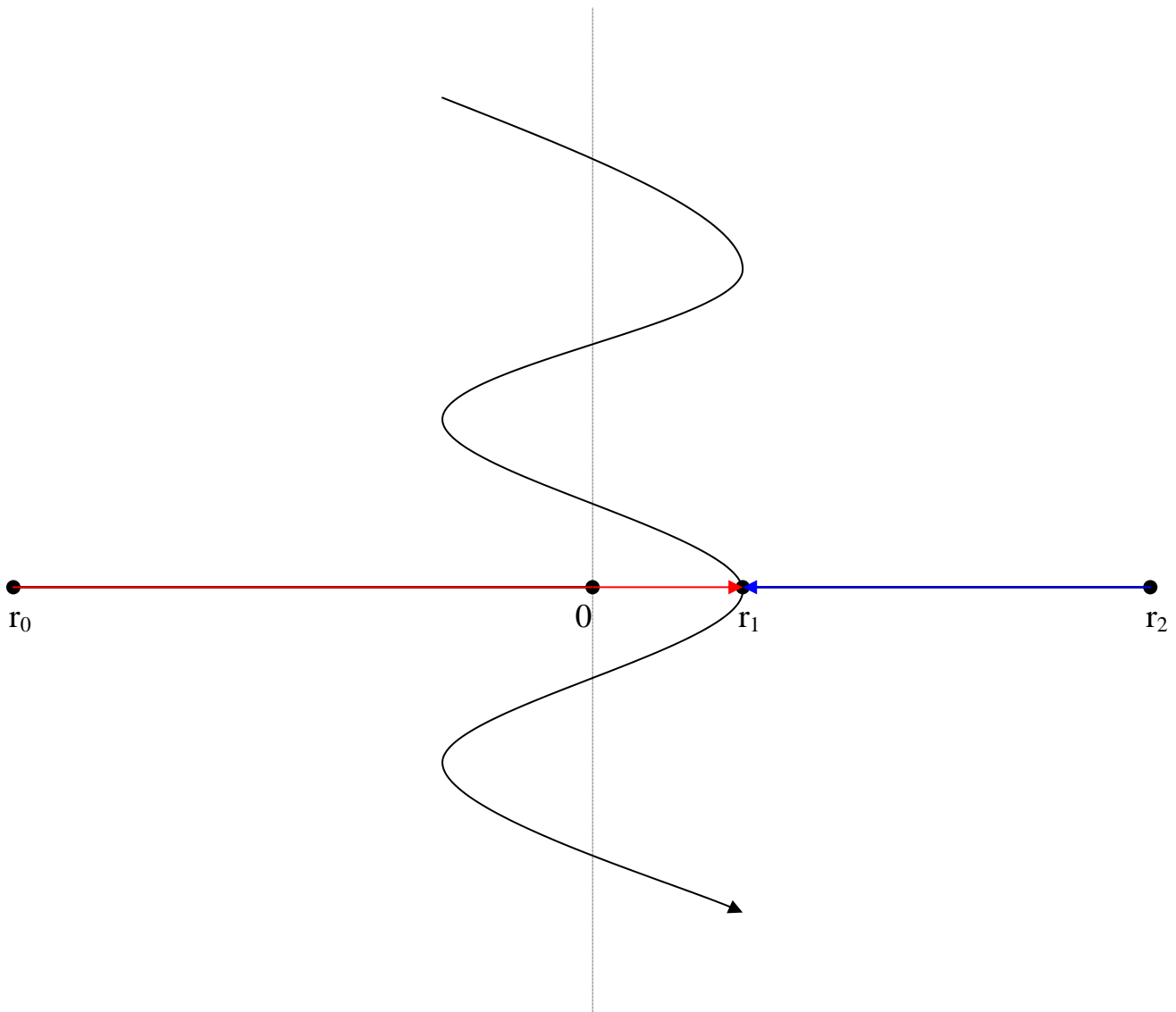
$$\hat{H} = \frac{\Delta \langle \psi_{(t)} \rangle}{t_h^2} \sqrt{\frac{2GM(r_0 - r_1) + v_0^2 r_1 r_0}{r_1 r_0}} \cdot \left( \int_{r_1}^{r_0} \sqrt{\frac{rr_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 rr_0}} dr + \pi \frac{\sqrt{r_1^3 \left( \frac{2GM(r_0 - r_1) + v_0^2 r_1 r_0}{r_0} + GM \right)}}{GM} - 2\sqrt{\frac{r_1^3}{GM}} \arccos \left( \frac{GM}{GM + \frac{2GM(r_0 - r_1) + v_0^2 r_1 r_0}{r_0}} \right) - \int_{r_1}^{r_2} \sqrt{\frac{rr_0}{2GM(r_0 - r) + v_0^2 rr_0}} dr \right) \quad (12.245)$$

neboli

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \frac{\Delta \langle \psi(t) \rangle}{t_h^2} \sum_{|j-i|=l_h}^{6 \cdot 10^{186}} \left\{ \sqrt{\frac{2\varphi_0 \left( \Delta \langle \psi(t) \rangle_i \right) + v_0^2 \langle \psi(t) \rangle_j \langle \psi(t) \rangle_i}{\langle \bar{\psi}(t) \rangle_j \langle \psi(t) \rangle_i}} \right. \\
& \cdot \left[ \int_{\langle \psi(t) \rangle_j}^{\langle \psi(t) \rangle_i} \sqrt{\frac{\langle \psi(t) \rangle \langle \psi(t) \rangle_i}{2\varphi_0 \left( \langle \psi(t) \rangle_i - \langle \psi(t) \rangle \right) + v_0^2 r \langle \psi(t) \rangle_i}} d \langle \psi(t) \rangle + \right. \\
& \left. \left. + \pi \frac{\sqrt{\langle \psi(t) \rangle_j^3 \left( \frac{2\varphi_0 \left( \Delta \langle \psi(t) \rangle \right) + v_0^2 \langle \psi(t) \rangle_j \langle \psi(t) \rangle_i}{\langle \psi(t) \rangle_i} + \varphi_0 \right)}}{\varphi_0} \right. \right. \\
& \left. \left. - 2 \sqrt{\frac{\langle \psi(t) \rangle_j^3}{\varphi_0}} \arccos \left( \frac{\varphi_0}{\varphi_0 + \frac{2\varphi_0 \left( \Delta \langle \psi(t) \rangle \right) + v_0^2 \langle \psi(t) \rangle_j \langle \psi(t) \rangle_i}{\langle \psi(t) \rangle_i}} \right) \right] \right\} \quad (12.246)
\end{aligned}$$

Vidíme, že gravitony se tvoří jako kvazičástice na pozadí kvantované struktury cytoprostoru.

Obr. 12.60



Prostoročas vzniká teprve na pozadí cytoprostoru, stejně jako se např. obraz tvoří na pozadí LCD displeje. Gravitační pole tak vzniká teprve uvnitř prostoročasu jako důsledek zcela určité aktivity (sekundární cytorezonance) uvnitř cytoprostoru, jako ostatně vše, co můžeme přímo měřit a pozorovat. Uvnitř cytoprostoru se žádné gravitony, fotony, ani jiné prostoročasové částice nevyskytují a nepohybují. Uvnitř cytoprostoru se pohybují pouze cytorezonanční kvazičástice zvané cytony, jejich rychlost je vskutku závratná -  $6 \cdot 10^{132}$  m/s.

## Původ setrvačných sil

Inerciální pohyb je pohyb po geodetice. Jakýkoliv pokus o vychýlení tělesa z geodetiky vyžaduje kladnou práci (neboť pohyb po geodetice je vždy energeticky nejvýhodnější, jak plyne z variačního odvození Einsteinových rovnic), a to je spojeno s působící silou.

Geometrie prázdného prostoročasu by měla být Minkowského plochou geometrií a geodetiky v ní jsou přímky. V prostoročase vyplněném hmotou jsou geodetikami obecně křivky. Přesto by v obou dvou typech prostoročasu mělo platit, že pokus o vychýlení hmotného tělesa z geodetiky bude vždy spojen s vykonáním nenulové práce a práce je integrálem síly.

Kosmická loď, cestující jinak prázdným prostoročasem a odvrhující palivo, bude na základě zákona zachování hybnosti pociťovat setrvačnou sílu. Není podstatné, že se jedná o setrvačnou sílu, kterou klade prostor tělesu odpor vůči urychlování, neboť svoji rychlost, ani její okamžitou časovou změnu není v tomto případě k čemu vztáhnout. Pojmy rychlost a zrychlení budou v prázdném prostoru prázdnými pojmy, neboť v prázdném prostoru nelze definovat trajektorii tělesa a tudíž není co derivovat podle času. To ale nic nemění na tom, že tělesa budou pociťovat setrvačnou sílu.

Zajímavější jsou neinerciální systémy, v nichž jsou velikosti první a druhé časové derivace dráhy nenulové a navíc časově invariantní. Na takovéto systémy působí síla, která nemá svůj původ v zákonech zachování hybnosti a energie (soustava nespotřebovává energii, nekoná práci a nikam nic neodhazuje, přesto na ní působí hned několik druhů sil, včetně Coriolisovy).

Je třeba zdůraznit, že neinerciální pohyb je nutno vztahovat k prostoru jako takovému, nikoliv k nějaké soustavě hmotných bodů či těles - viz Newtonovo vědro: Mějmež inerciální vědro s vodou – voda i vědro jsou vůči sobě v klidu a hladina vody je plochá. Roztočíme-li vědro, bude vzhledem k vodě rotovat, ale voda ve vědru bude v klidu vzhledem k prostoru, takže hladina zůstane plochá. Jakmile se vlivem tření přenesou po čase rotace vědra i na vodu a oba budou rotovat stejnou úhlovou rychlostí, bude nyní sice voda opět v klidu vzhledem

ke vědru, oba budou však rotovat vzhledem k prostoru a hladina vody bude nyní vydutá. Když vědro nyní zastavíme, bude voda ještě nějaký čas vzhledem ke vědru i k prostoru rotovat a hladina zůstane vydutá. Jakmile se vlivem tření voda zastaví, bude opět voda v klidu vzhledem ke vědru - hladina bude plochá.

Z těchto příkladů je patrné, že setrvačné síly nemají žádnou souvislost s relativními pohyby hmotných těles vůči sobě, ale vztahují se k samotnému prostoru, přičemž tímto příkladem se Newton snažil dokázat existenci absolutního prostoru. Tento jednoduchý příklad z naší každodenní zkušenosti podle něho jasně ukazuje na existenci statického pozadí, k němuž lze vztahovat derivace vektorů rychlosti.

V teorii relativity byla představa absolutního prostoru zavržena a nahrazena Lorentzovou transformací. V STR se např. ukazuje (viz 11. kapitola), že v rotující soustavě souřadné se mění geometrie prostoročasu pouze vlivem rotace – i bez přítomnosti hmotných objektů a gravitace. Přitom nepotřebujeme uvažovat žádná zrychlení a síly – vystačíme s pouhou Lorentzovou transformací délek. To však neznamena nic jiného, než nahrazení záhady setrvačnosti hlubší záhadou – záhadou Lorentzovy transformace.

Příklad s vědrem dokazuje, že neinerciální pohyby mají hlubší souvislost se strukturou prostoru, vzhledem k němuž se rotace kapaliny ve vědru vztahuje. Newton dokazuje, že relativní pohyb kapaliny a vědra není pro výsledek experimentu podstatný. Zato relativní pohyb kapaliny vzhledem k prostoru má dramatický vliv na její chování. Zatímco v OTR je pojem absolutního prostoru/prostoročasu prázdným pojmem, např. v teorii smyčkové kvantové gravitace prožívá překvapivou renesanci. To ukazuje na fakt, že jediné důsledně kvantové teorie prostoročasu mohou vést k vysvětlení záhady setrvačnosti.

V dynamické teorii cytoprostoru je setrvačnost popsána s pomocí kvantové gravitace těles. Přirozenou snahou Blandria je udržet všechna tělesa ve statické rovnováze vzhledem k cytoprostoru. Přítomnost polí však může tuto statickou rovnováhu narušit, a to mechanismy, z nichž některé byly popsány výše a k těm zbylým se

dostaneme v následujících odstavcích. Přítomnost vnějších polí vede k posunu polohy kvantionů uvnitř testovací částice přesně tak, jak to bylo popsáno v předcházejících odstavcích. Otázkou ovšem zůstává, co způsobuje setrvačný pohyb testovací částice i poté, kdy již vnější pole přestala působit. Při hledání odpovědi je potřeba si uvědomit, jak se změní charakter vlastního gravitačního pole testovací částice poté, co byla vnějšími poli uvedena do pohybu. Cytony, nalétávající ve směru pohybu testovací částice (ve směru výslednice vnějších sil) jsou vnějším polem urychleny, cytony nalétávající v protisměru jsou naopak zpomaleny. To vede v okamžiku jejich srážky k asymetrii, která se projeví v anizotropii následné sekundární cytorezonance, šířící se z místa kolize (deaktivace exponované buňky a zánik kvantionu). Tato anizotropie se projeví transformací vektoru cytonové parity ihned poté, kdy do pole sekundární cytorezonance vstoupí další cytonový pár. Vektor cytonové parity je nepatrně posunut ve prospěch směru šíření testovací částice. To ale v praxi znamená indukci další anizotropie, neboť transformace vektoru cytonové parity není nic jiného, než asymetrie v rychlostech cytonu a paracytonu v okamžiku kolize. Podstatou setrvačnosti je tedy gravitační indukce dobře popsatelná kvantovou teorií gravitace vybudovanou v předešlém odstavci.

Vnější gravitační pole vykoná za dobu  $dt$  na testovací částici hmotnosti  $m$  práci

$$dE = Fdr = mgv_g dt, \quad (12.247)$$

neboť částice za tento časový interval urazí vzdálenost

$$dr = v_g dt. \quad (12.248)$$

Platí tedy

$$dE = \frac{dE}{dk} dk = \hbar v_g dk, \quad (12.249)$$

kde  $dk$  je změna  $k$  odpovídající změně energie. Srovnání (12.247)

a ( 12.249 ) dává

$$mgv_g dt = \hbar v_g dk, \quad ( 12.250 )$$

čili

$$mg = \hbar \frac{dk}{dt}. \quad ( 12.251 )$$

Pro zrychlení vlnového klubka plyne z ( 12.183 )

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{\partial v_g}{\partial k} \frac{dk}{dt} = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2} \quad ( 12.252 )$$

a z ( 12.251 ) máme

$$\frac{dk}{dt} = \frac{mg}{\hbar}. \quad ( 12.253 )$$

Je tedy

$$\frac{dv_g}{dt} = \frac{mg}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}. \quad ( 12.254 )$$

Srovnáním ( 12.254 ) a Newtonova druhého zákona

$$m \frac{dv}{dt} = mg \quad ( 12.255 )$$

vidíme, že oba výsledky budou shodné, pakliže veličina

$$m = \frac{\hbar^2}{\frac{\partial^2 E}{\partial k^2}} \quad ( 12.256 )$$

představuje tzv. setrvačnou hmotnost částice uvnitř mřížky.

## Unitarizace

V přírodě se sotva setkáme s polem, které je čistě jen gravitační, nebo zas čistě jen elektrostatické apod. Všechna reálná pole jsou v podstatě jakousi směsicí různých druhů polí a záleží na tom, který druh zrovna převažuje. Zatímco vibrační módy jsou amorfní, či všesměrové, rotační módy jednotlivých brán se mohou navzájem sčítat, nebo naopak kompenzovat, čímž vznikají pole nejrůznějších druhů.

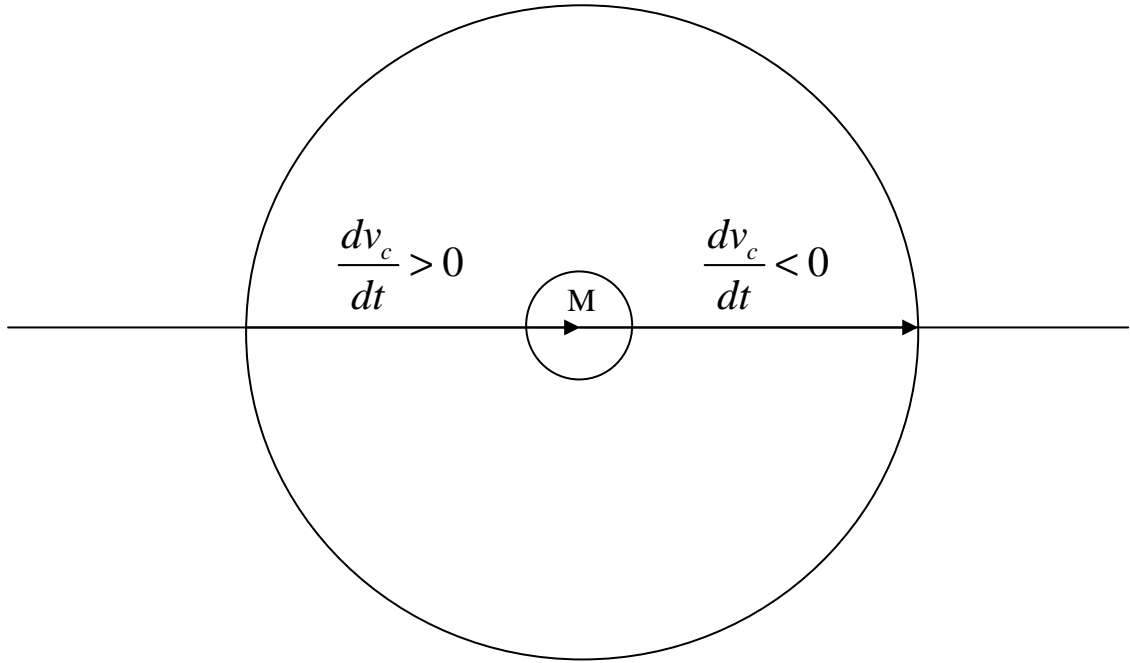
To je rozdíl mezi klasickým přístupem, kde se fyzika snaží jaksi vybudovat kvantovou teorii prostoročasu na pozadí prostoročasu, a radikálně novým pohledem na věc, který přináší cytoprostor. Je jasné, že klasický přístup se nemá o co opřít, neboť v něm jaksi chybí místo pro pevný opěrný bod. Cosi se někde z nejasných příčin deformuje, přičemž není známo ani na pozadí čeho ty deformace vlastně modelovat a k čemu je vztahovat. S pomocí kovariantních derivací a tenzorové algebry se to jakž takž daří popsat na klasické úrovni tím, že se nejprve definoval tzv. plochý prostoročas, a na něm se pak zkoumají různé další možné geometrie. Protože ale ve skutečnosti nikdo neví, co že to ten prostoročas je, nelze ani říci, co že jej to vlastně deformuje a jakým mechanismem to přesně probíhá. Deformuje snad prostoročas sám sebe? Je hmota druhem pole, nebo je pole něčím radikálně odlišným od hmoty která jej vytváří? Na tyto a mnohé další otázky nedokázala fyzika před vznikem teorie cytoprostoru dátí uspokojivou odpověď.

Podstatu unitarizace pole lze shrnout do následujících bodů (viz obr. 12.61 – 12.64):

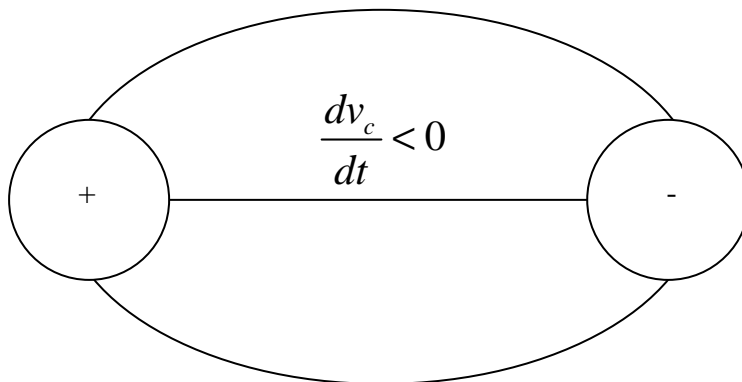
- 1) **Gravitace (setrvačnost):** kladná a záporná nepodmíněná polarizace cytoprostoru.
- 2) **Elektromagnetismus:** kladná nebo záporná podmíněná polarizace cytoprostoru
- 3) **Silná interakce:** záporná podmíněná polarizace cytoprostoru.



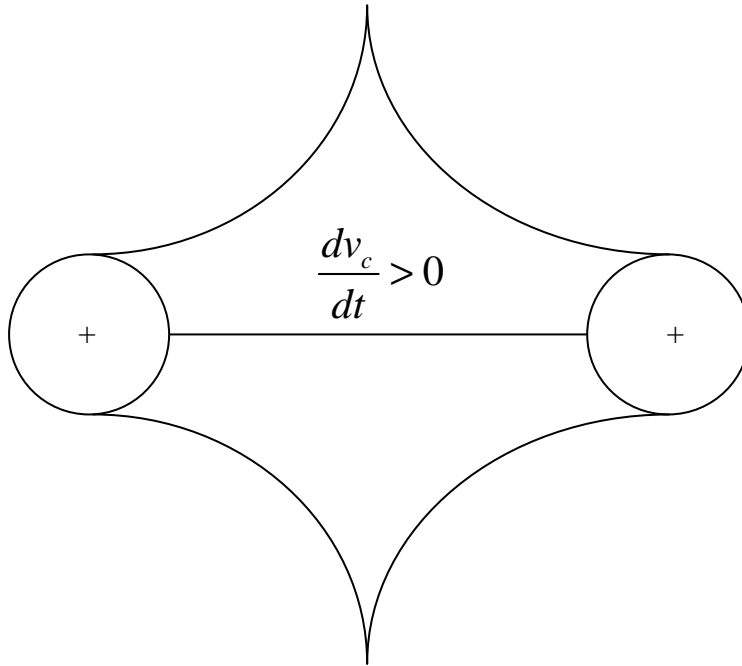
Obr. 12.61



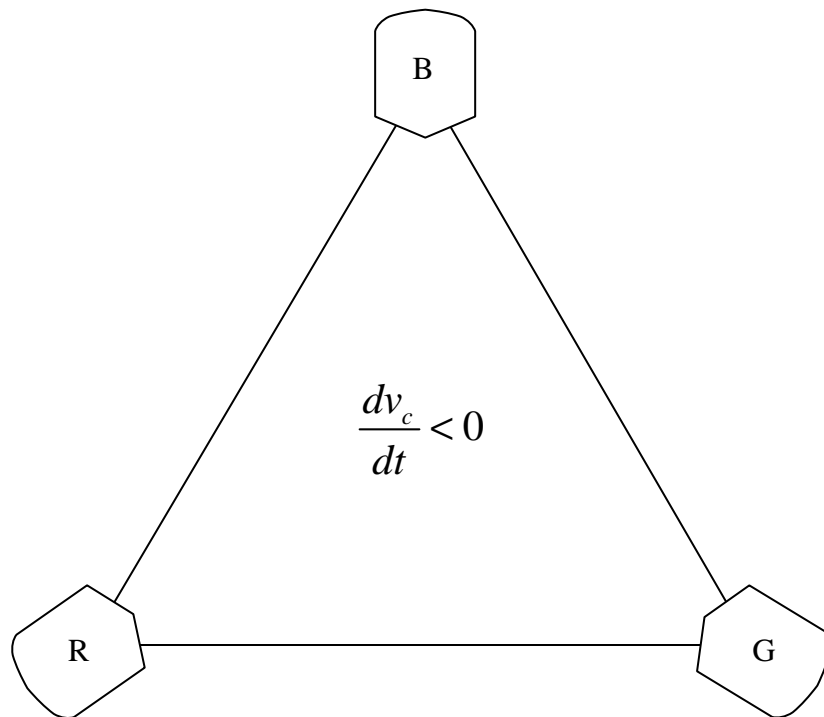
Obr. 12.62



Obr. 12.63



Obr. 12.64



## **Kosmologie**

### **Podstata a původ temné energie, zrychlené rozpínání prostoru**

Narušení některých prostoročasových symetrií v kvantových teoriích gravitace s diskretní strukturou prostoročasu, může v konečném důsledku vést k narušení zákonů zachování a vyvěrání energie jakoby z „ničeho“, jak jsme tomu svědky v případě temné energie.

Megaskopicky je přitom toto narušení důsledkem dodávání energie z extracytoprostoru do cytoprostoru. Zmíněné narušení symetrie je tak důsledkem nikoliv lokální fyziky, ale celkové globální struktury cytoprostoru.

Periodická celulární kvantová struktura cytoprostoru je ve skutečnosti určena synchronizovaným prouděním cytonových vln napříč cytoprostorem. Celý cytoprostor tak běží na určité frekvenci. Gravitační a jiná pole sekundární cytoresonance pak způsobují lokální zpomalování těchto proudů, čímž vlastně efektivně deformují cytoprostorové buňky.

Výpočty konané na pozadí pevného cytoprostoru s proměnnou rychlostí jednotlivých cytonů, však vedou ke stejným výsledkům a formálně se zdají být jednoduššími, než kdybychom operovali v cytoprostoru s proměnlivou metrikou.

### **Zrychlená expanze**

Při ověřování kosmologických modelů je největším problémem měření vzdáleností. V rámci sluneční soustavy můžeme využít radarových odrazů a trigonometrických metod. U nejbližších hvězd lze vzdálenost určit z paralaxy hvězdy. U vzdálenějších hvězd je ale paralaxa již neměřitelná. Vzdálenost relativně blízkých galaxií lze určit metodou cefeid. Cefeidy jsou proměnné hvězdy se známou závislostí periody a svítivosti. Ze známé periody můžeme dopočítat svítivost a ze zdánlivé magnitudy na obloze poté určit vzdálenost

příslušné cefeidy, a tím i mateřské galaxie. U velmi vzdálených galaxií již ale cefeidy nerozlišíme a metoda opět selhává.

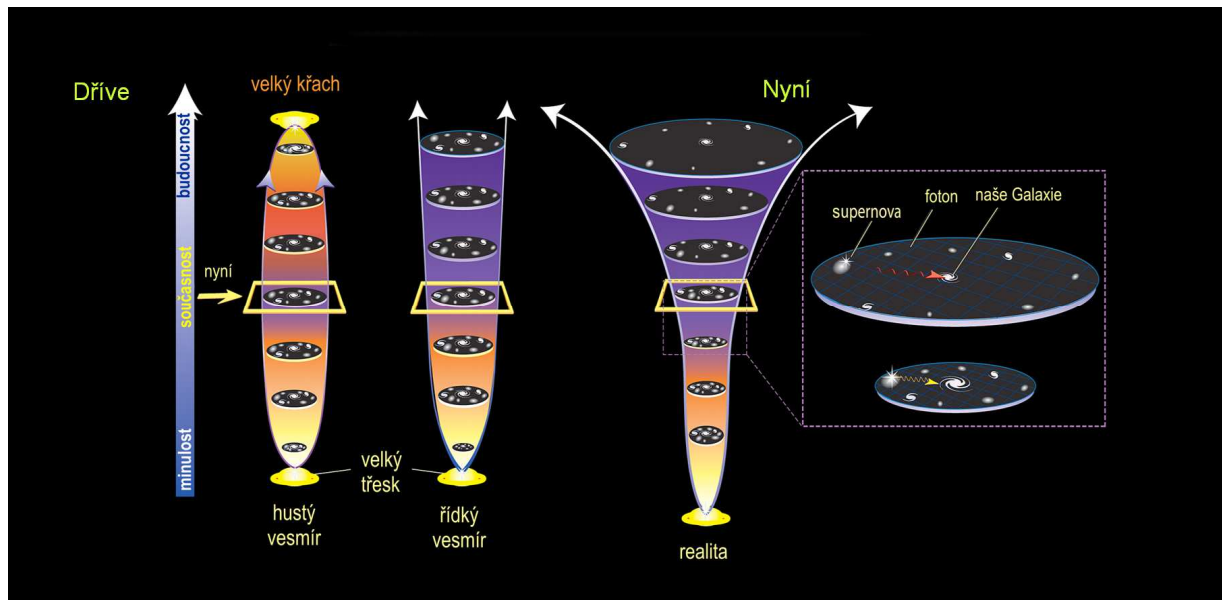
V kosmologických měřítkách byly do konce 20. století prováděny jen hrubé odhady vzdálenosti. Chyběla „standardní svíčka“, pomocí které by se určovaly vzdálenosti ve vesmíru. Na konci dvacátého století se k určování vzdálenosti začaly používat – jako zdaleka viditelné standardní svíčky – supernovy typu Ia. Supernova typu Ia je závěrečné vývojové stádium těsné dvojhvězdy, ve které dochází k přenosu látky z obra na bílého trpaslíka, který tak zvětšuje svoji hmotnost. Po překročení Chandrasekharovy meze ( $1,4 M_{\odot}$ ) se bílý trpaslík zhroutí do neutronové hvězdy, dojde k explozivnímu termonukleárnímu hoření C, O na  $^{56}\text{Ni}$  v celém objemu trpaslíka a uvolněná potenciální energie se explozivně projeví jako supernova typu Ia. Množství energie je vždy zhruba stejné, takže z relativní pozorované jasnosti lze vypočítat vzdálenost příslušné supernovy. Přesnější hodnoty se pak určí z tvaru světelné křivky (z průběhu nárůstu a poklesu jasnosti). Supernovu typu Ia lze jednoznačně identifikovat podle tvaru jejího spektra. Navíc jsou tyto objekty ve vesmíru relativně časté, v průměrné galaxii dojde ke dvěma explozím za století.

V letech 1998 a 1999 provádělo měření vzdálenosti a červeného kosmologického posuvu (a tím i expanzní funkce) galaxií za pomoci supernov Ia několik nezávislých vědeckých skupin. Jedna z nich (*High- $z$  Supernova Search Team*) byla vedena Adamem Riessellem a Brianem Schmidtem (Space Telescope Science Institute, Baltimore, 1998). Brian Schmidt spolu s Nickem Suntzeffem založili tuto skupinu 20 astronomů z různých institucí, za účelem hledání stop po expanzi vesmíru za pomoci supernov typu Ia s velkým kosmologickým posuvem.

Další nezávislá skupina astronomů (*Supernova Cosmology Project*) byla vedena Saulem Perlmutterem, profesorem fyziky na Kalifornské univerzitě v Berkeley. Perlmutterova skupina publikovala své výsledky na počátku roku 1999.

Obě skupiny na vybraném souboru supernov určovaly dvě veličiny: vzdálenost z jejich skutečné jasnosti (průběhu světelné křivky) a rychlost expanze vesmíru z červeného kosmologického posuvu

spektrálních čar. To umožnilo určit, jak se vesmír rozpínal v různých časových obdobích. Výsledek byl překvapivý – byla zjištěna zrychlená expanze vesmíru. To znamená ve svém důsledku přítomnost temné energie ve vesmíru, která se projevuje záporným tlakem a způsobuje urychlování expanze vesmíru, čili nenulovou hodnotu kosmologické konstanty. Z Perlmutterových i Riessových měření vycházela hustota temné energie kolem 70 % celkové hustoty energie ve vesmíru. Obě zmíněné skupiny měly k dispozici do roku 2003 soubor 230 supernov. Nejevzdálenější použitá supernova byl objekt 1997ff. V posledních letech existuje celá řada projektů vyhledávajících supernovy typu Ia. Tyto objekty byly vyhledávány také v klíčovém projektu HST pro určení Hubblovovy konstanty, i v současných přehlídkových projektech, například projektu GOODS.



Obr. 12.65: Zrychlená expanze vesmíru byla objevena na sklonku roku 1998.

Efekt zrychlené expanze, za jehož původce jsme označili temnou energii, by mohl být způsoben netriviálními dynamickými vlastnostmi vakua, které souvisí s kvantovými procesy. Mohlo by také jít o další neznámou interakci – nové kvantové pole, které se nazývá *kvintesence*. Jinou možností je, že se gravitační interakce na velkých vzdálenostech chová jinak, než jsme si dosud mysleli. Objev zrychlené expanze znamenal v každém případě zcela zásadní změnu v našich názorech na chování vesmíru jako celku na kosmologických

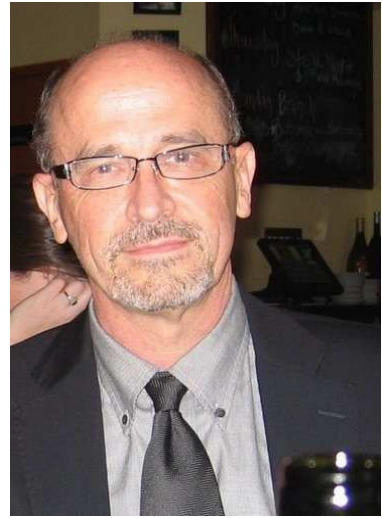
vzdálenostech a otevřel cestu k novým myšlenkám a teoretickým konstrukcím.



**Adam Riess (1969)**

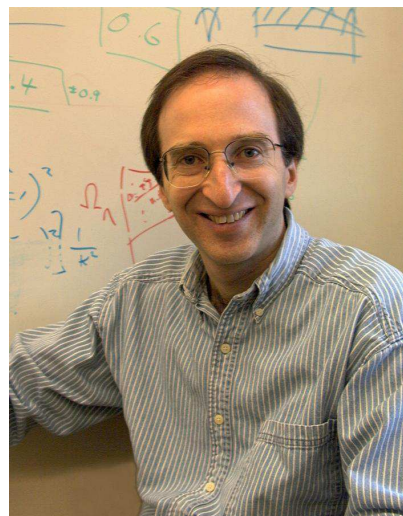


**Brian Schmidt (1967)**



**Nicholas B. Suntzeff (1952)**

Brian Schmidt spolu s Adamem Riessem a Saulem Perlmutterem získali v roce 2011 za objev zrychlené expanze vesmíru Nobelovu cenu. Projekt SCP shromáždil neuvěřitelné množství pozorování, která naznačují, že by temná energie nejpravděpodobněji měla souviset s kvantovými vlastnostmi vakua. Perlmutter je také vedoucím pracovníkem ve skupině, která připravuje sondu SNAP (SuperNova Acceleration Probe), jejímž úkolem by mělo být napozorovat velké množství supernov typu Ia a zpřesnit naše představy o zrychlené expanzi vesmíru.



**Saul Perlmutter (1959)**

## Nestacionární dynamika cytoprostoru

V teorii cytoprostoru, stejně jako v LQG má prostor i čas diskrétní kvantovou strukturu. Elementární atomy prostoru tvoří celulární síť (spinovou pěnu), v níž se Jednotlivé mikrovesmíry mohou vyskytovat pouze uvnitř jednotlivých buněk, tj. v diskrétních oblastech.

Nejrychlejší částice se mohou přelévat z buňky do buňky maximálně rychlostí světla, což jim zabere přesně Planckův čas.

To je na první pohled velmi zvláštní. U elementárních částic jsme si již zvykli na ledacos, dokonce i na to, že se mohou vyskytovat v diskrétních bodech prostoru. Jak si s tím ale poradit u mikrovesmíru, který je přeci věrným soběpodobnostním zobrazením makrovesmíru i s námi samotnými uvnitř? Odpověď je nasnadě. V mikrovesmírech plyne čas jinak – na konci své existence, která přitom trvá z hlediska extracytoprostoru pouhý Planckův čas, mohutně explodují a veškerá jejich energie vyvrže do makrovesmíru v podobě vln sekundární cytorezonance. Elementární částice proto neexistují v prostoročase kontinuálně. Aby se mohly vůbec pohybovat v prostoru – přelévat z buňky do buňky, z pixelu do pixelu – je potřeba je neustále obnovovat s nějakou obnovovací frekvencí (reciproká hodnota Planckova času), podobně, jako blikají jednotlivé body obrazovky. Že při tom vzniká "odpadní" energie, je již nyní také nasnadě.

## Inflace a zrychlená expanze

Lagrangián inflatonového pole  $\varphi$  spolu s kosmologickou metrikou ( 9.326 ) vede k vázaným rovnicím pro gravitaci a pole  $\varphi$ :

$$\frac{d^2\varphi}{dt^2} + \frac{3}{a} \frac{da}{dt} \frac{d\varphi}{dt} + \frac{dV}{d\varphi} = 0, \quad ( 12.257 )$$

$$\left( \frac{1}{a} \frac{da}{dt} \right)^2 + \frac{1}{a^2} = \frac{8\pi G}{3} \left[ V(\varphi) + \frac{1}{2} \left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \right],$$

Kde  $V(\varphi)$  je efektivní potenciál. Inflatonové pole  $\varphi$  (což může být

v nejjednodušším případě i Higgsovo skalární pole používané v unitárních kalibračních teoriích, jako je např. supergravitace) přispívá do lagrangiánu členy

$$L_\varphi = \frac{1}{2} \varphi_{;i}^2 - \frac{m^2}{2} \varphi^2 - \frac{\lambda}{4} \varphi^4, \quad (12.258)$$

kde  $m$  je hmotnost a  $\lambda > 0$  je vazebná konstanta pole  $\varphi$ . Tenzor energie-hybnosti tohoto skalárního pole bude mít nenulové pouze diagonální složky rovné

$$\begin{aligned} T_0^0 &= -\varepsilon, \\ T_\alpha^\beta &= p \delta_\alpha^\beta, \end{aligned} \quad (12.259)$$

kde

$$\begin{aligned} \varepsilon &= \frac{1}{2} \left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 + \frac{1}{2} m^2 \varphi^2, \\ p &= \frac{1}{2} \left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 - \frac{1}{2} m^2 \varphi^2. \end{aligned} \quad (12.260)$$

Pokud se pole  $\varphi$  mění dostatečně pomalu, aby

$$\left( \frac{d\varphi}{dt} \right)^2 \ll m^2 \varphi^2, \quad (12.261)$$

efektivní stavová rovnice bude

$$p = -\varepsilon, \quad (12.262)$$

což povede k deSitterovskému stádiu doprovázenému exponenciální expanzí (srov. s (9.315)).

Inflatonové pole zavádí do lagrangiánu určitý konstantní člen  $C$ , takže výsledný lagrangián je tvaru



$$L_\varphi = kR + C, \quad (12.263)$$

kde

$$k = \frac{c^3}{8\pi G}, \quad (12.264)$$

$$C = 2\Lambda.$$

Pro gravitační pole v OTR, kdy se vyšetřovaný fyzikální systém skládá ze soustavy zdrojových těles a z buzeného gravitačního pole, bude celková akce dána součtem

$$S = S_m + S_g, \quad (12.265)$$

kde

$$S_m = \int L_m(q^a, q_{,i}^a) \sqrt{-g} d\Omega \quad (12.266)$$

je integrál zdrojové části popsané zobecněnými souřadnicemi  $q^a$ , ( $a = 1, 2, \dots, N$ ), a

$$S_g = \int L_g(g^{ik}) \sqrt{-g} d\Omega \quad (12.267)$$

je akce samotného gravitačního pole popsaného složkami metrického tenzoru  $g^{ik}$ . Faktor  $\sqrt{-g}$ , pocházející z křivočarých souřadnic, zaručuje, že se součin  $\sqrt{-g} d\Omega$  při integraci přes čtyřrozměrný objem chová jako invariant.

Lagrangián  $L_g$  musí být skalární funkcí metrického tenzoru  $g^{ik}$  a jeho derivací tak, aby variací vzniklé rovnice pole obsahovaly derivace pouze do prvního řádu. Nejjednodušším takovým skalárem je právě skalární křivost prostoročasu  $R$ , kterou jsme použili ve vztahu (12.263). Variací akce dostáváme výsledek

$$\delta S = -\frac{c^3}{8\pi G} \int \left( R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R - \Lambda g_{ik} \right) \delta g^{ik} \sqrt{-g} d\Omega - \frac{1}{2c} \int T_{ik} g^{ik} \sqrt{-g} d\Omega -$$

$$-\frac{1}{c} \int \left[ \frac{\partial(\sqrt{-g} L_m)}{\partial q^a} - \left( \frac{\partial(\sqrt{-g} L_m)}{\partial q_{,i}^a} \right)_{,i} \right] \delta q^a d\Omega,$$

( 12.268 )

kde

$$T_{ik} \equiv \frac{2}{\sqrt{-g}} \frac{\partial(\sqrt{-g} L_m)}{\partial g^{ik}} - \frac{\partial}{x^l} \frac{\partial(\sqrt{-g} L_m)}{\partial g_{,l}^{ik}} \quad ( 12.269 )$$

je tenzor energie-hybnosti zdroje. Variační princip vyžaduje, aby

$$\delta S = 0. \quad ( 12.270 )$$

Variací metriky  $g^{ik}$  pak dostáváme Einsteinovy rovnice gravitačního pole s kosmologickým členem  $\Lambda g_{ik}$ :

$$R_{ik} - \frac{1}{2} g_{ik} R - \Lambda g_{ik} = \frac{8\pi G}{c^4} T_{ik}, \quad ( 12.271 )$$

zatímco variace zdrojových proměnných  $q^a$  vede k rovnicím pohybu negravitačních polí (zdrojové soustavy)

$$\frac{\partial(\sqrt{-g} L_m)}{\partial q^a} - \left( \frac{\partial(\sqrt{-g} L_m)}{\partial q_{,i}^a} \right)_{,i} = 0. \quad ( 12.272 )$$

Inflatonové pole tak efektivně generuje kosmologický člen  $\Lambda g_{ik}$ , který pak v deSitterovském vesmíru způsobuje gravitační odpuzování, jež může dominovat a vést k inflační expanzi.

V časech srovnatelných s Planckovým časem, při hustotách

srovnatelných s Planckovou hustotou, byly v důsledku silných kvantověgravitačních fluktuací polí i metriky prostoročasu všechny hodnoty polí  $\varphi$  zhruba stejně pravděpodobné, takže rozložení pole  $\varphi$  ve vesmíru bylo víceméně chaotické. Proto existovaly oblasti prostoru, v nichž pole  $\varphi$  bylo v důsledku náhodné fluktuace dostatečně silné a přitom téměř homogenní. Pokud navíc rozměry  $\Delta l$  této oblasti překročí velikost deSitterova horizontu s hustotou energie

$$V(\varphi) \geq m_h^4, \quad (12.273)$$

tj.

$$\Delta l \geq \left( \frac{3hc}{8\pi G V(\varphi)} \right)^{\frac{1}{2}} = H^{-1}, \quad (12.274)$$

pak lze ukázat, že se pole  $\varphi$  mění s časem velmi pomalu, takže vnitřní část této oblasti se bude exponenciálně rozpínat podle zákona

$$a \sim a_0 e^{Ht}, \quad (12.275)$$

nezávisle na situaci vně této oblasti, tzn. podle inflačního scénáře. Kromě univerzálnosti kvantových fluktuací přitom stačí předpokládat alespoň jedno výchozí pole  $\varphi$ , dostatečně slabě interagující s ostatními poli. Může se dokonce jednat o pole fluktuující křivosti prostoročasu. Pravděpodobnost toho, že kvantové fluktuace (jež jsou významné pouze při hustotách blízkých Planckově hustotě) povedou ke vzniku inflačně expandujícího vesmíru, je vysoká pouze při splnění podmínky

$$\Delta l \leq m_h^{-1}, \quad (12.276)$$

odkud plyne (12.273). Naopak, pravděpodobnost kvantového vzniku vesmíru při  $V(\varphi) \ll m_h^4$  velmi rychle klesá. Za předpokladu, že kvantová produkce vesmíru probíhá tunelováním přes bariéru, je tato

pravděpodobnost úměrná

$$P \sim e^{\frac{-k\rho_h}{\rho}}. \quad (12.277)$$

kde  $k$  je nějaká konstanta. S poklesem hustoty pod Planckovu hustotu  $\rho_h$  jde tato pravděpodobnost velmi rychle k nule.

Vzhledem k podmínce ( 12.276 ) vzniká tímto mechanismem nejpravděpodobněji uzavřený friedmannovský vesmír, startující svoji expanzi z oblasti velikosti srovnatelné s Planckovou délkou.

Podle této koncepce tak vesmír nikdy nemusel být v singulárním stavu ale v důsledku kvantověgravitačních fluktuací spontánně vznikl z vakua zaplněného virtuálními částicemi a poli. Dostatečně silné kvantové fluktuace, podobné té, jež stála u zrodu našeho vesmíru, mohou nastat i jinde. Vznikla by tak celá řada různých nezávislých vesmírů. Podle inflačního modelu není současná struktura vesmíru produktem nějakých neznámých počátečních podmínek, ale je výlučně důsledkem fundamentálních zákonů fyziky – zákonů kvantové teorie pole, včetně té gravitační. V inflačním modelu jsou počáteční podmínky irelevantní, neboť inflační expanze efektivně smazává veškeré detaily vesmíru, který existoval před inflační fází.

### Cytoprostorové restrikce OTR

Z hmoty  $M < 10^{13}$  kg černá díra nikdy vzniknout nemůže, neboť pro její gravitační poloměr platí

$$r_g = \frac{G \cdot 2 \cdot 10^{13}}{c^2} \approx 1,5 \cdot 10^{-14} [m] \cong 2 \cdot 10^{63} [\text{kvantionu}],$$

$$n = \frac{10^{13}}{m_h} = 2 \cdot 10^{63} [\text{kvantionu}]. \quad (12.278)$$

Je-li kvantionů méně, vyplňují již větší prostor, než je jejich gravitační objem.

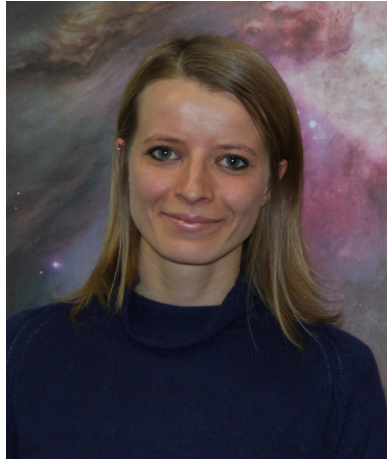
Dosáhne-li tedy hmotnost kolapsaru cca.  $10^{13}$  kg, dojde k mohutné explozi, při níž se uvolní energie

$$E = 10^{13} c^2 \approx 9 \cdot 10^{29} [J], \quad (12.279)$$

čemuž odpovídá plošná zářivá energie

$$W = \frac{E}{4\pi r_g^2} \approx 3 \cdot 10^{56} [J \cdot m^{-2}]. \quad (12.280)$$

Černá díra by v takovém případě neskončila pozvolným vypařením, ale jako velmi exotická hvězda. Původní hvězda při svém hroucení pod horizont neskončí jako fyzikální singularita, ale zkolabuje do sféry o mezní hustotě. Když se ČD vypařuje, její hmotnost klesá a s ní i poloměr sféry o mezní hustotě. Při poklesu hmotnosti ČD na hmotnost cca.  $10^{13}$  kg, se poloměr sféry přesně vyrovná jejímu gravitačnímu poloměru (cca.  $10^{-14}$  m). Do té doby byl gravitační poloměr vždy větší, takže celá sféra byla zakryta horizontem. Nyní se sféra obnaží a exploduje (asi jako neutronová hvězda, kdybychom náhle vypnuli gravitaci). Energie této exploze bude přibližně  $10^{30}$  J. Carlo Rovelli z Univerzity Aix-Marseille a Univerzity v Toulonu společně s Francescou Vidotto z Radboudovy univerzity v Nijmegenu v roce 2014 nazvali takovýto objekt, předpovězený o 20 let dříve teorií cytoprostoru, **Planckovou hvězdou**. Rovelli s Vidottovou však na základě LQG předpovídají, že by Planckovy hvězdy měly zářit na vlnové délce 10 až 14 cm, což je v rozporu s předpovědí teorie cytoprostoru, podle níž by měly být exploze Planckových hvězd jedněmi z nejenergetičtějších dějů ve vesmíru. Po vymizení horizontu totiž již není k dispozici dostatek gravitační síly, která by Planckovu hvězdu držela pohromadě a tato by se měla ve velmi krátkém okamžiku zcela přeměnit na záření. Pozoruhodné je, že energie uvolněná při explozi je nezávislá na tom, jakých rozměrů kdysi dorostla původní černá díra. Exploze Planckových hvězd by tak měly být ve vesmíru jasně identifikovatelné, i když jsou v porovnání třeba s gama záblesky velice slabé.



**Francesca Vidotto (1982)**

V reálném prostoročase se tak nemohou vyskytovat fyzikální singularity, tzn., neplatí zde princip ignorace, podle kterého by fyzika každého dceřiného vesmíru závisela na v podstatě náhodné volbě počátečních podmínek při velkém třesku.

Kdyby princip ignorace platil, lišil by se s pravděpodobností blízkou jedné, dosti podstatně dceřiný vesmír od toho stávajícího.

Protože však ve skutečnosti existují pouze pseudosingularity, v nichž lze ještě stále řešit pohybové rovnice kvantionů, je zároveň splněna podmínka pro zachování všech informací otcovského vesmíru pro vesmír dceřinný.

Všechny následující vesmíry lze pak považovat za totožné s naším vesmírem, což fyzikálně znamená, že je principiálně možno uskutečnit cesty časem, bez možnosti porušení principu kauzality.

Aby mohl vesmír vzniknout, musela být v Planckově čase hustota energie v de Sitterově objemu, z něhož vesmír započal svoji expanzi, nadkritická. Tzn., vesmír vznikl od samého počátku jako uzavřený. Dokud je totiž hustota energie falešného vakua v de Sitterově modelu podkritická, ke kvantové produkci vesmíru (chaotické inflaci) vůbec nedojde. Nadkritická hustota je tedy nutnou a zároveň postačující podmínkou nastartování procesu chaotické inflace.

Během inflace je pak postupně kvantově produkována veškerá hmota vesmíru tak, aby se jeho uzavřenost zachovávala po celou dobu inflace (funkce popisující závislost pravděpodobnosti samovolné křevce hmoty z vakua v závislosti na hustotě energie toho vakua, má

charakter velmi prudce klesající exponenciely v závislosti na hustotě energie). Po skončení inflace je však pravděpodobnost další kvantové krece hmoty již velmi malá. Pokračující zrychlené rozpínání vesmíru je pak možné pouze za předpokladu, že ve vesmíru exponenciálně narůstá nějaká jiná forma energie – temná energie, která způsobí další exponenciální expanzi, na jejímž konci se očekává big rip.

Stojí za povšimnutí, že pravděpodobnost kvantové produkce hmoty ve vesmíru se dle Lindeovy chaotické inflace řídí exponenciální funkcí hustoty a proto nikdy neklesne přesně na nulu. Podle tohoto standardního modelu tedy existuje i v současném vesmíru jistá nenulová pravděpodobnost vyvěrání nové hmoty přímo z vakua.

Pokud se chceme vyhnout tepelné smrti, musí být každá jednotka, vyvíjející se od prvotního chaosu k řádu, nutně dotována zvenčí. Každý komplikovanější a organizovanější systém než je plyn v dokonalé tepelné rovnováze, se v okamžiku přerušení dodávky energie zvenčí okamžitě zastaví a započne jeho tepelná degradace. U vesmíru pozorujeme pravý opak – vývoj od v podstatě tepelného šumu (viz reliktní záření), ke stále složitějším a organizovanějším strukturám.

Do vesmíru tedy musí být energie přiváděna a také je z něj energie odváděna (představme si ji v duchu termodynamiky pro jednoduchost jako odpadní teplo). Jenže tento proces není úplně dokonale symetrický, čehož důsledkem je m.j. existence hmoty. V průběhu času se nám tak vesmír nepatrně "přehřívá" (hromadí se v něm energie), což se vnitřně projevuje jako zdánlivá zrychlená expanze. Proces navíc značně vazbí, neboť temná energie je spojena s produkcí některých bosonových módů (čím je vesmír "větší", tím hůře je z něj pochopitelně temná energie odváděna a čím více je temné energie ve vesmíru, tím rychleji se tvoří a tím rychleji se zároveň vesmír "zvětšuje"). Takže to nakonec nemůže skončit jinak, než pořádnou explozí.

Protože v současném vesmíru již prakticky žádná nová látka nevzniká a nemůže tudíž kompenzovat úbytek energie záření během jeho rozpínání tak, jako se to dělo v průběhu vesmírné inflace, a protože se podle OTR opravdu z vesmíru ztrácí energie, jak se neustále

prodlužují vlnové délky fotonů (reliktní záření vychladlo z původní Planckovy teploty na dnešních 2,7 K), nabízí se temná energie, jako přirozené řešení tohoto problému. Podle pozorování sondy WMAP, energetický podíl této tajemné složky našeho vesmíru od jeho počátku neustále narůstá. V dnešní době tvoří okolo 3/4 jeho celkové energie, a již nějaké 2 nebo 3 miliardy let má dostatek síly na to, aby překonala gravitaci celého vesmíru a působila jeho zrychlené rozpínání. Se zrychleným rozpínáním ještě rychleji klesá energie elektromagnetického pole a tím narůstá temná energie, která tak vlastně živí samu sebe. Tato kladná zpětná vazba by mohla v budoucnu vést až k lavinovému efektu známému pod termínem "big rip" – katastrofálnímu roztržení "jemného předu" prostoročasu (je třeba si uvědomit, že elektromagnetické pole není jediné, co se ve vesmíru vlní a tedy postupem času může ztrácet energii a živit tak nenasytnou kvintesenci).

Aby mohly v cytoprostoru vznikat nové buňky, je zapotřebí působení nějakého druhu energie, která s časem narůstá (temné energie). Když se ale na vesmír podíváme čtyřrozměrně, tedy z pohledu spinové pěny, jeho tvar je pevně dán a je neměnný – pouze když se pohybujeme podél časové osy, počet buněk na zvolené časové rovině se stále zvyšuje. Z hlediska spinové pěny tedy vesmír vypadá jako jakási nálevka.

## **Kosmologická konstanta a Big Rip**

Big Rip je kosmologická hypotéza poprvé publikovaná v roce 2003, o konečném osudu vesmíru, ve které je vesmírná látka z hvězd, galaxií atomů a subatomárních částic, postupně rozdělena expanzí vesmíru v určitém čase v budoucnosti. Teoreticky se měřítko vesmíru stává nekonečným v konečném čase v budoucnosti.

Hypotéza závisí v rozhodující míře na druhu temné energie ve vesmíru. Klíčovou hodnotou je parametr  $w$  – poměr mezi tlakem temné energie a hustotou energie.

Jaká však je podstata temné energie a jak je schopna překonat gravitační přitahování hmoty, že dokonce způsobuje zrychlování rozpínání? Jaká je hodnota parametru  $w$ ? V klasickém modelu



gravitace – Einsteinově OTR – odpovídá kosmologická konstanta energii a tlaku univerzálního kvantového vakua a v prostoročase je konstantní. V tomto OTR je hodnota  $w = -1$ . V kvintesenčním modelu, temná energie souvisí s určitým univerzálním kvantovým polem (dilatonovým polem), které směřuje k nějakému konečnému stavu. Hustota energie a tlak temné energie pomalu v čase klesají a hodnota  $w$  leží v intervalu  $-1/3$  až  $-1$  ( $w$  musí být menší než  $-1/3$ , aby docházelo ke zrychlování rozpínání vesmíru).



Robert R. Caldwell



Marc Kamionkowski



Nevin N. Weinberg

Fyzik Robert Caldwell z Dartmouthu a jeho kolegové Marc Kamionkowski a Nevin Weinberg z Caltech doplnili model ještě o třetí možnou variantu. V Caldwellově modelu s "fantomovou energií", což je extrémní forma kvintesence, neexistuje žádný stabilní vakuový kvantový stav a hustota energie spolu s tlakem působícím rozpínání vesmíru v čase vzrůstají (v běžných plynech tlak s rozpínáním plynu klesá). V tomto scénáři je  $w < -1$ . V důsledku této kosmologie se všechny vazby, udržující systémy pohromadě, v určitém období před koncem vesmíru zpřetrhají a vesmír se nakonec rozpadne.

V modelu vesmíru ovládaného fantomovou energií, se vesmír rozpíná s exponenciálně vzrůstající rychlostí. Nicméně, toto znamená, že velikost pozorovatelného vesmíru se neustále zmenšuje, vzdálenosti k okraji pozorovatelného vesmíru, který se vzdaluje rychlostí světla jsou čím dál menší. Model předpokládá, že po konečném čase nastane, tzv. "Big Rip", v němž všechny vzdálenosti divergují k nekonečnu. Autoři této hypotézy, vedení Robertem Caldwellem z Dartmouth

College, počítají čas od nynějška do konce vesmíru, podle vzorce

$$t_{\text{rip}} - t_0 \approx \frac{2}{3|1+w|H_0\sqrt{1-\Omega_m}} \quad (12.281)$$

kde  $w$  je míra odpudivé síly temné energie,  $H_0$  je Hubbleova konstanta a  $\Omega_m$  je současná hodnota hustoty veškeré hmoty ve vesmíru.

Například při  $w = -1,5$ ,  $H_0 = 70$  km/s/MP a  $\Omega_m = 0,3$ , nastane konec vesmíru za přibližně 23 miliard let. Toto prosím nepovažujme za předpověď, ale za hypotetický příklad. Autoři podotýkají, že experimentální důkazy ukazují, že  $w$  je velmi blízko k -1. V našem vesmíru tak dominuje  $\Omega_m$ . Čím více se  $(1+w)$  blíží nule, tím vzdálenější (v čase) je Big Rip. Pokud by  $w$  byla přesně rovna -1, pak by Big Rip nemohl nikdy nastat, bez ohledu na hodnoty  $H_0$  nebo  $\Omega_m$ .

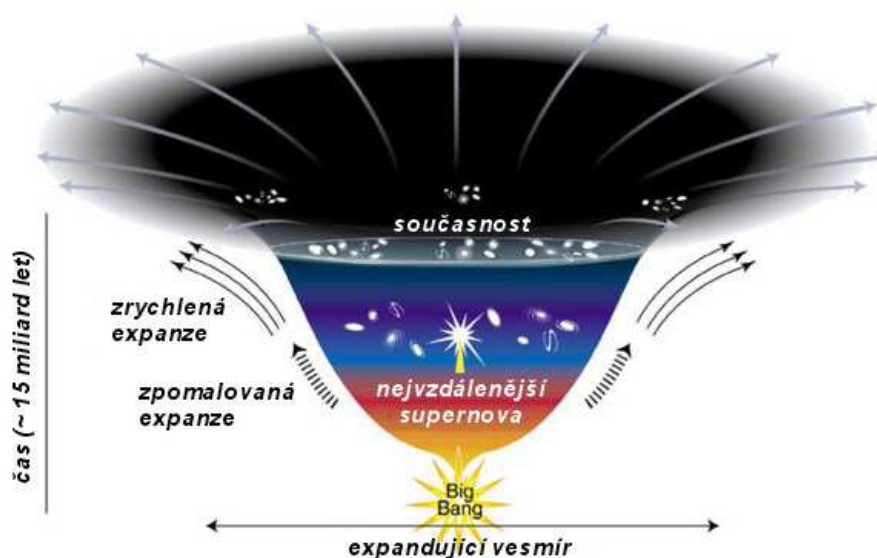
V hypotetickém scénáři pro  $w = -1,5$ , se jednu miliardu let před koncem jednotlivé galaxie vzdálí natolik, že přestanou být navzájem viditelné. V momentě, kdy totéž potká hvězdy v Galaxii, bude vesmíru zbývat pouhých 60 miliónů let. V té době se budou hromadně rozpadat galaxie a na noční obloze již nebudou pozorovatelné žádné hvězdy. Tři měsíce před koncem se odpoutají planety od Slunce a rozlétnou se do mezihvězdného prostoru. V posledních minutách, by byly roztrhány hvězdy a pouhých 30 sekund před koncem bude explodovat naše Země.

A pak už věci vezmou rychlý spád. V momentě, kdy vesmíru zbývá pouhých  $10^{-19}$  sekundy dojde k rozpadu molekul a atomů a v zápětí i jejich jader. V posledním zlomečku sekundy se rozletí i jednotlivé kvarky tvořící baryony a nakonec nezůstane nic než prázdný prostor.

Úplný rozpad elementárních částic v posledním zlomku sekundy existence vesmíru způsobí, že stav energie~hmoty v následujícím okamžiku již bude totožný se stavem (známým jako falešné vakuum), z něhož přes 13,7 miliardami let náš vesmír vzešel. To je velice lákavá alternativa ke klasičtějšímu scénáři, podle něhož by měl vesmír po skončení expanze přejít v kontrakci a skončit v singularitě (z níž by pak mohl opětovně expandovat dalším velkým třeskem). Myšlenka, že vesmír kdysi vybuchl z vakua díky prvotní fluktuaci a nyní se

postupně vrací do základního vakuového stavu tím, že bublinky vesmírné pěny (hmota jak ji známe) budou postupně prskat, až nakonec vesmír v poklidu zcela vyšumí, je neobyčejně krásná a až kouzelně jednoduchá – prostá veškerých singularit, náhlých bodů obratu a dalších podivně nepřírozených věcí. Zároveň skýtá prostor pro následnou další fluktuaci vakua, která dá posléze vznik novému vesmíru z energie vakua, jež tu zbyla po vyšumění našeho současného vesmíru.

Obr. 12.66



Při vesmírné inflaci energie~hmota vybublává z vakua a shlukuje se do struktur, které nazýváme částice. Při velkém puknutí na konci vesmíru (pokud je  $w < -1$ ) nastane proces právě opačný. Veškerá hmota se zřejmě rozplyne a navrátí svoji energii vakuu. Je tu přitom ve hře několik faktorů zároveň.

1) Kladná hmota všech částic byla na počátku přesně kompenzována zápornou energií jejich vzájemné gravitační vazby, takže celková energie vesmíru musí být nula.

2) Během rozpínání vzrůstá potenciální energie vesmíru ale rovnoměrně s tím klesá energie reliktního záření. Při smršťování vesmíru by tomu bylo přesně naopak.

3) Žádný experiment nikdy neprokázal, že by v důsledku rozpínání vesmíru vyvěrala ještě v současnosti nějaká hmota samovolně z vakua. Hmota se ve vesmíru přestala tvořit ihned po ukončení fáze chaotické inflace, tj. nějakých  $10^{-34}$  s poté co čas začal plynout jedním význačným směrem.

Část původní energie vakua se proto nyní nachází ve formě běžné hmoty. Jak ale vesmír expanduje, hmota řídne a energie vakua úměrně tomu opět roste a urychluje jeho další expanzi. Nakonec již žádná běžná hmota nezůstane. Stabilní částice budou roztrhány a zůstanou jen ty virtuální, které ve formě lokálních fluktuací metriky vyvěrají z vakua a v zápětí v něm opět mizí. Pokud se v něm však objeví (a ona se jistojistě objeví) nějaká další lokální fluktuace, která překročí de Sitterův horizont, nastane další chaotická inflace a z falešného vakua během ní opět vyubílá běžná hmota, jak ji známe. Vakuová energie v příslušné oblasti pak samozřejmě opět úměrně tomu poklesne. A tento cyklus se stále opakuje.

V Lindeho standardním modelu vesmír skutečně expanduje. Nic na tom nemění skutečnost, že se objem Planckovy buňky zmenšuje. Problém však je, že jsme zatím nijak nedefinovali, vůči čemu se vlastně Planckovy buňky mají zmenšovat. Vzdálenosti ve vesmíru totiž ve skutečnosti určujeme měřítky škálovanými pomocí Planckovy délky. Pokud se počet Planckových délek mezi 2 měřenými objekty s časem zvětšuje, pak se tyto objekty od sebe efektivně vzdalují. A je úplně jedno, zda prohlásíme, že se pouze zkracují naše měřítka, či že měřítka jsou konstantní a rozpíná se vesmír. Tato 2 tvrzení si budou navzájem ekvivalentní neboť jiný záchytný bod než Planckovu délku nemáme, a tudíž není k čemu vztahovat její případné časové změny. Opět platí, že v modelech s fraktální rekursí je situace podstatně přehlednější. Tam lze díky rozdílné hodnotě antionu na různých úrovních fraktálního endomorfismu jednoznačně rozhodnout, zda se zmenšuje Planckova buňka, či se naopak rozpíná svět. Model cytoprostoru připouští opakovanou aktivaci stejné buňky, takže i opakovanou inflaci do téhož objemu. Moderní nestacionární verze teorie cytoprostoru navíc ukázala, že při aktivaci cytoprostorové buňky párem cytonů, dojde k velice prudkému nárůstu energie longitudiálních cytorezonančních módů tvořících cytorezonanční

mřížku uvnitř kubického subchronoru, což se navenek projeví jako vesmírná inflace. Takto vzniklý intracytoprostor začne od svého prvopočátku samozřejmě generovat vlny sekundární cytorezonance, jejichž energie v něm s časem narůstá (zřejmě na úkor ubývání hmoty částic v prostoročase - viz např. stárnutí reliktních fotonů). To bude mít za následek další postupné (avšak tentokrát velmi pozvolné) zmenšování velikosti intracytoprostorových buněk (v souvislosti se zkracováním vlnové délky módů) při současném zachování velikosti rezonanční dutiny. Důsledek je zřejmý: uvnitř prostoročasu generovaného takovýmto cytoprostorem nastane v podstatě iluzorní efekt, že se vesmír rozpíná. Ve skutečnosti se však pouze zmenšuje velikost elementární buňky.

Jakmile ale intracytoprostor začne propouštět vlny sekundární cytorezonance do extracytoprostoru, bude ztrácet energii, a vlnová délka módů uvnitř kubického subchronoru se začne opětovně prodlužovat, až nakonec cytoprostorová mříž zcela vymizí – buňka se deaktivuje. Tento scénář ovšem předpokládá opětovný zánik veškeré hmoty kupovesmíru v průběhu jakési reverzní inflace, tj. opačné formy vesmírné inflace, během níž byla kdysi kvantově vyprodukována veškerá hmota vesmíru. To se zdá být samozřejmě v příkrém rozporu s doposud popsaným kosmologickým scénářem rozervaného vesmíru. Avšak ve srovnání s dobou postupného zahušťování a zdánlivé expanze vesmíru, může být doba reverzní inflace, během níž naše „vesmírná bublina“ vypadne z vesmíru, relativně velice krátkým obdobím. Iniciale této fáze (zásadní zvrát) nastane v okamžiku, kdy vlny sekundární cytorezonance vyzařované každou deaktivující buňkou cytoprostoru po dobu desítek miliard let, v něm se postupně hromadí a efektivně se projevující jako temná vakuová energie, konečně prorazí skrze stěnu Blandria do okolního extracytoprostoru (Blandrium se až do této chvíle chová vzhledem k cytorezonančním vlnám, po celou dobu existence vesmíru podobně, jako ideální duté kulové zrcadlo). Intracytoprostor pak během kratičkého okamžiku, jakoby náraz vyhasne.

Lze očekávat velice dramatický závěr spojený s prudkým nárůstem hustoty vesmíru v několika posledních okamžicích. Nebude to sice zřejmě až k oné Planckově hustotě ( $10^{97} \text{ kg.m}^{-3}$ ), ale i tak to bude hustota závratná, řádově odpovídající hodnotě  $10^{54} \text{ kg.m}^{-3}$ . Poté

vesmír prostě pukne a veškerá jeho zbývající energie (kterou ještě nevyzářil během reverzní inflace) se rozlétne po chreodách zpět, odkud kdysi vzešla.

Je zřejmé, že vlnění, které se vrací zpátky ke zdroji a nese veledůležitou informaci o poloze události v čase, bude mít jen nepatrný zlomek té původní energie, která kdysi vedla k iniciaci. Proto má v názvu přívlástek "reliktová". Na každé ze 3 básových chreod s vektorem S-parity dané události v počátku, přitom nesmí dojít z pochopitelných důvodů k iniciaci dalšího vesmíru, dokud se veškerá energie nenavrátil tam, odkud vzešla. Z toho se nám v předešlé kapitole podařilo m.j. odvodit i celkovou životnost vesmíru:  $3,2 \cdot 10^{18}$  s. Dosazeno do Caldwellova vztahu ( 12.151 ), odtud dostáváme hodnotu parametru  $w$ :

$$w = -1,0000000035. \quad ( 12.282 )$$

Pozornému čtenáři jistě neuniklo, že výraz ( 11.571 ) dává rozumné předpovědi pouze ve vesmíru, který není ovládán žádnou formou temné energie, tj. inflatonového ani dilatonového pole. Pro reálný vesmír má tedy předpovědní sílu v období po konci inflace a před počátkem zrychlené expanze (kdy lze předpokládat přibližně stacionární cytoprostor). Protože náš vesmír stojí teprve na počátku zrychlené expanze, lze předpověď ( 11.571 ) s přesností na uvedené jedno desetinné místo považovat za akceptovatelnou.

Pokusme se nyní zodpovědět na otázku, jak vypadá expanzní funkce vesmíru při onom pukání. Proces je popsán soustavou diferenciálních rovnic

$$\begin{aligned} -\frac{d\psi(t_{\max})}{dt} &= c, \\ \psi(t_{\max}) &= l_h, \end{aligned} \quad ( 12.283 )$$

pro nějakou obecnou expanzní funkci  $\psi$ , která má řešení

$$\psi = R_0 e^{-1,874 \cdot 10^{43} t} . \quad ( 12.284 )$$

S růstem velikosti buněk během reverzní inflace se však bude dynamicky měnit index lomu na kubickém subchronoru, což povede k dosti dramatické změně výsledku na

$$R = R_0 e^{-t} , \quad ( 12.285 )$$

s dobou kolapsu

$$t = \ln R_0 + 35 \ln 10 \text{ s} . \quad ( 12.286 )$$

Degenerované preony totiž dokáží kolaps celkem účinně brzdit. Proto ve skutečnosti k naprostému vymizení vesmíru dojde až v průběhu několika desítek sekund a nikoliv v Plackově čase, jak by plynulo z prosté soustavy rovnic ( 12.273 ).

Kdyby velké závěrečné puknutí nastalo kupř. v dnešním vesmíru s  $R_0 = 2,6 \cdot 10^{27}$ , trval by kolaps celých 144 s. Skutečný kolaps v reálném závěru existence vesmíru však bude trvat ještě o několik sekund déle, neboť během big ripu naroste  $R_0$  o několik řádů.

Degenerované kvantové plyny vznikají zcela přirozeně v reakci na rostoucí hustotu baryonické látky. Nejprve, v závislosti na hustotě a tlaku, vzniká degenerovaný plyn elektronový, poté neutronový, kvarkový a logicky následuje degenerovaný preonový plyn. Preonová degenerace je však zjevně nestabilní, neboť k ní dochází až pod horizontem událostí, kde již jsou všechny světelné kužely obráceny dovnitř. Proto není možné, aby degenerované preony kolapsu dokázaly zabránit, pouze jej přibrzďují.

Záporná exponenciála bude "kolabovat" nekonečně dlouho, zatímco big rip proběhne v reálném čase. Abychom mohli hovořit o konci vesmíru, musíme pro ni zavést minimum (Planckovu délku), za níž už ten jeho výraz pro expanzní funkci neplatí. Dosadíme-li za tohoto

předpokladu za čas ve vztahu ( 12.274 ) z ( 11.571 ), dostaneme rovnici

$$l_h = R_0 e^{-\frac{n}{t_h}} = n l_h e^{-n}, \quad ( 12.287 )$$

kteřá má řešení  $n = 1$ . Na konci velkého puknutí nám tak po celém cytoprostoru zůstane jen jedna jediná prázdná buňka.

Každá myslitelná kvantová teorie gravitace musí obsahovat prostoročas s diskrétní strukturou, právě aby se zbavila nekonečen a aby mohla rozumně operovat s kvantovanou energií gravitačního pole, která má nelokální charakter.

Vesmír počíná kolabovat počáteční rychlostí rovnou rychlosti světla v extracytoprostoru a končí při rychlosti světla v cytoprostoru a velikosti Plankovy buňky. Rychlost je při tom, pochopitelně vždy kladná.

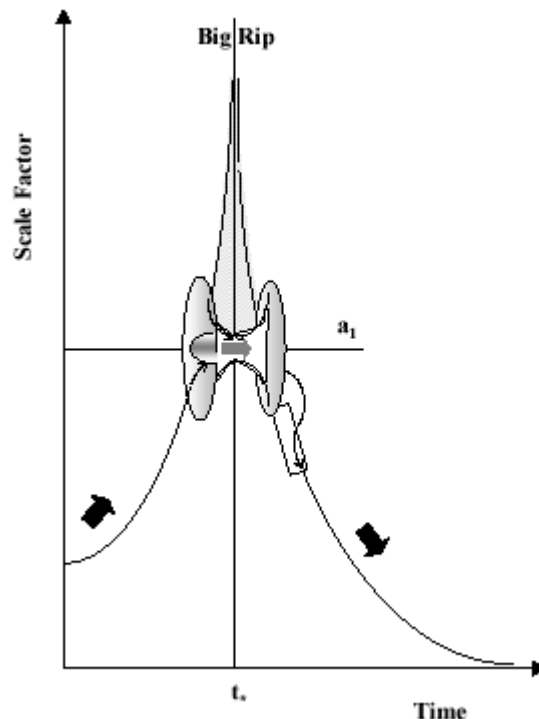
Názor, podporující koncepci "velkého roztržení", argumentuje m.j. analýzou **časové dynamiky horizontu událostí**. S expanzí vesmíru horizont událostí zaujímá čím dál **menší** část celkového vesmíru. Při exponenciálním zrychlování expanze by se tento efekt stával stále více dominantním. DeSitterovský horizont událostí by se zmenšil na rozměry kup galaxií, pak galaxií, jejichž hvězdy by rozprášil do expandujícího prostoru. V závěrečných stádiích expanze by se horizont pronikavě zmenšoval na rozměry Sluneční soustavy, hvězd (Slunce), planet. Všechny tyto vázané soustavy by se rozpadly a "uletěly" od sebe pryč. Nakonec by deSitterovský horizont poklesl pod rozměry elementárních částic, které by byly roztrženy. Dokonce i u tak stabilních útvarů jako jsou černé díry by nakonec deSitterovský horizont "přebil" gravitační (Schwarzschildův) horizont a došlo by k destrukci černých děr. V posledním Planckově okamžiku z nich záporný tlak exponenciálně se rozpínajícího vakua doslova vysaje poslední zbytky energie a ony jednoduše explodují. Vzápětí by zanikla metrika prostoročasu v diskontinuitě metrického tenzoru  $g_{ik}$ , podobně jako je tomu u singularity prostoročasu (na rozdíl od "lokalizované" singularity černé díry by tato singularita byla všude). V topologické pění vzniklé amorfní variety by se pak statistickou fluktuací snad



znovu mohla utvořit inflačně expandující oblast, která by mohla dát vzniknout **novému vesmíru**.

### Únik před koncem světa červí dírou

Ukazuje se, že i v případě, že pozorování v blízkých letech potvrdí právě tento scénář, i tak by mohla existovat (i když zatím značně spekulativní) možnost, jak uniknout tomuto osudu, a to díky červím dírám a jejich příbuzným (tzv. prstencové díry, které mají tvar zkrouceného prstence). Výpočty ukazují, že před koncem vesmíru tyto díry začnou narůstat a pohltí jeho velkou část. Z řešení Einsteinových rovnic pro zakřivení časoprostoru v takových podmínkách plyne, že přes červí díru bude možné uniknout do budoucnosti, kde se Velké roztržení změní na zrcadlový proces – smršťování. Tedy pomocí červí díry se bude možné vyhnout extrémnímu konci. Všechno však záleží na tom, kdy se přes červí díru bude možné přemístit. Jestli by eventuální rozvinutá civilizace čekala příliš dlouho, tak nastane situace, kdy přes červí díru bude možné přesunout pouze velice malé množství informace/hmoty. V posledním Planckově okamžiku před Velkým rozerváním to na základě výpočtů bude pouhých 69 bitů.



Obr. 12.67: Schematické zobrazení úniku konci světa přes červí díru do budoucího - již smršťujícího se - vesmíru.

## Počátek a konec kupovesmíru – následky pro extracytoprostor

V teorii cytoprostoru je primární entitou kvantion. Z kvantionů se skládají preony, jež tvoří společnou vnitřní strukturu kvarkům

a leptonům. Protože jsou kvantiony zároveň i kupovesmíry -1, je tím určena fraktální struktura celého jsoucna. Jsoucno tak vlastně nemá žádný začátek ani konec, ačkoliv je omezené různorodostí svých forem. Když začneme popisovat cytoprostor, nemáme kde začít, neboť cytoprostor prostě žádný začátek nemá. Cytoprostory jsou vnořeny (coby kupovesmíry) do extracytoprostorů a do oněch cytoprostorů jsou identicky vnořeny (coby kvantiony) intracytoprostory. Není žádného počátku ani konce, a to ani v prostoru, ani v čase. Otázka po příčině vzniku této fraktální struktury tak pozbývá smyslu. Vždy se dá s výkladem začít pouze od již hotového cytoprostoru, a popisovat, kterak se jeho činností vytvářejí intracytoprostory, a jaký vliv mají tyto intracytoprostory zpětně na mateřský cytoprostor.

Když se na konci svého bytí Blandrium trhá pod tlakem vln sekundární cytorezonance uvnitř cytoprostoru, uvolní se tyto do extracytoprostoru. Až donedávna se fyzikové domnívali, že se sekundární cytorezonance může šířit pouze rychlostí světla, na rozdíl od primární a reliktové cytorezonance, postupující výhradně jen po chrodách vskutku závratnou rychlostí  $6 \cdot 10^{132} \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$ . Ukázalo se ale, že i vlny sekundární cytorezonance se musí šířit stejnou závratnou rychlostí. Po roztržení Blandria tedy dojde k tomu, že veškerá energie, jež se v cytoprostoru kumulovala po desítky miliard let, spolu s energií samotné cytoprostorové mříže, v rekordně krátkém okamžiku všechna vytryskne do extracytoprostoru. To vyvolá v extracytoprostoru mohutné vlnění šířící se rychlostí cytonu do okolí prasklé (lépe řečeno deaktivované) buňky. To znamená, že v okamžiku toto vlnění zaplní celý extracytoprostor.

Pokud bychom se mohli podívat na svět brýlemi, které umožňují vidět sekundární cytorezonanci (amorfní chvění cytoprostoru způsobené praskajícími buňkami), spatřili bychom přesně to, čemu se v hydrodynamické verzi kvantové mechaniky říká kvantový potenciál. Každá částice ve vesmíru ho vybuzuje, a zároveň je na něj citlivá.

Pole sekundárních cytorezonancí, jak již bylo řečeno, tvoří dynamický kvantový potenciál v celém cytoprostoru, na který jsou citlivá kvanta primární a reliktové cytorezonance (cytony), jež dávají vznik hmotným částicím uvnitř buněk. Kvantový potenciál v okolí stínítka (filtru) se dvěma štěrbinami se bude dosti radikálně lišit od kvantového potenciálu v okolí stínítka (filtru) s otevřenou pouze jednou štěrbinou. Kvantum, které do takového prostředí vyšleme (upozorňuji, že to prostředí je určováno i kvantovým potenciálem buzeným ve svém okolí samotnou testovací částicí a interferujícím s kvantovými potenciály všech částic filtru) se octne v jakémisi „morfogenetickém“ poli, které bude okamžitě reagovat na aktuální stav filtru. Částice tak bude setřásána do minim kvantového potenciálu a ta se budou u různých filtrů (s různým počtem štěrbin) pochopitelně lišit. Přítomnost druhé štěrbinou tím ovlivňuje stav částice, která se při tom rozhodla projít pouze tou první.

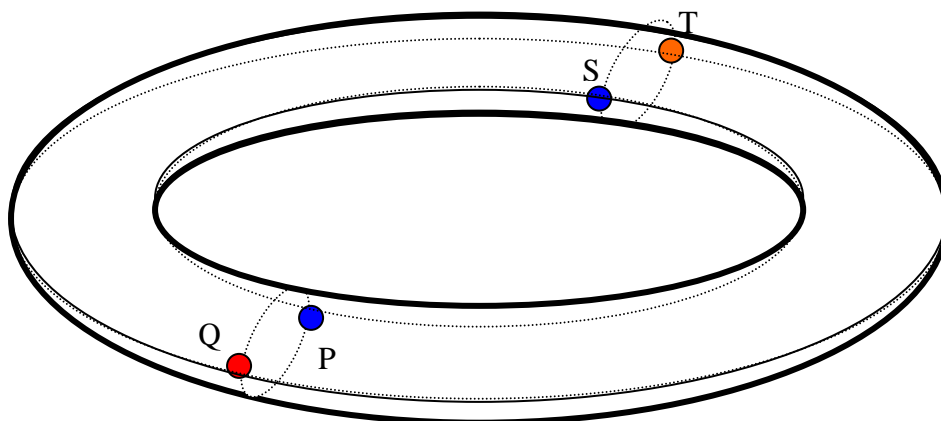
### **T-dualita z hlediska nestacionární teorie cytoprostoru**

Jestliže má vesmír v Planckových délkách průměr cca  $10^n$  (kde  $n$  je přibližně 62), potom zde máme z hlediska stacionární teorie cytoprostoru mikrovesmíry o průměru zlomku  $10^{-n}$  Planckovy délky. Protože však subkvantovou fyziku (probíhající na rozměrech menších než je Planckova buňka) nelze nikterak vztáhnout k makrovesmíru (viz kvantová geometrodynamika), musí se jednat dokonce o mikrovesmíry druhého řádu, fraktálně vnořené do mikrovesmírů prvního řádu o velikosti Planckovy buňky (rozdíl o něco 62 řádů). Mikrovesmíry prvního řádu tak musíme v rámci teorie cytoprostoru odvozovat až z makrovesmíru, do něhož je sám fraktálně vnořen náš vesmír.

V nestacionární teorii cytoprostoru, však dokonce i tento fakt platí pouze při statistickém zprůměrování, neboť  $n$  zde již není konstantou, nýbrž funkcí času, která v daném okamžiku může nabývat pro různé intracytoprostorové buňky různých hodnot, v závislosti na jejich stáří.

## Duální teorie cytoprostoru

Existuje duální obraz cytoprostoru, kterým již není kostička v balónku, ale hypertorus. Třírozměrný cytoprostor přitom tvoří jeho hranici. Ta obklopuje hyperprostor uvnitř. Chreody v tomto duálním obrazu se dělí na toroidální, poloidální a hyperoidální. Na opačných stranách běžného třírozměrného toru, jak v poloidálním, tak i toroidálním směru se objevují vždy dva zrcadlité obrazy téhož bodu. Každý bod  $Q$  běžného třírozměrného toru je tedy komposicí poloidálního  $P$  a toroidálního  $T$  obrazu, které jsou zpětnovazebně komponovány v jednom směru z tohoto bodu  $Q$  a ve druhém směru ze svého dalšího společného zrcadlitého obrazu  $S$ , který s původním bodem  $Q$  přímo nesouvisí. Přidáním hyperoidálního směru se ke každému z těchto 4 obrazů objeví ještě další obraz (značený čárkovaně). Každý bod cytoprostoru tak náleží osmeru zrcadlitých obrazů  $P, Q, S, T, P', Q', S', T'$ ). Ve skutečnosti tak existuje celkem 8 zrcadlitých obrazů každého bodu – 8 vesmírů uvnitř jediného kupovesmíru generovaného cytoprostorem.



Obr. 12.68: V cytoprostoru s toroidální topologií se každý bod zobrazí celkem čtyřikrát, vždy na protilehlých stranách dvou toroidálních a dvou poloidálních kružnic. V hypertoru existuje těchto obrazů již 8.

## Grupová teorie pole



**Steffen Gielen (1982)**

V roce 2013 Steffen Gielen z kanadského Hraničního institutu teoretické fyziky ve Waterloo v Ontariu, spolu se svými kolegy, využil kvantování prostoru v nestacionární teorii cytoprostoru k novému matematickému přístupu ke kvantové gravitaci, nazvaném **grupová teorie pole** (Group field theory), což je forma kvantové teorie pole na Lieově grupě. Po vzoru nestacionární teorie cytoprostoru vzniká v grupové teorii pole prostor slučováním základních kvant prostoru a pak se vyvíjí do současné podoby. Gielen a spol. uskutečnili významný průlom při snaze popsat, jak se prostor vesmíru odvíjí od základních kvant prostoru – podařilo se jim odvodit Friedmannovy rovnice přímo v rámci kvantového konceptu prostoročasu.

Další úsilí se nyní zaměřuje na přesný popis prostoru při samotném Velkém třesku, kosmologickou inflaci a temnou energii.

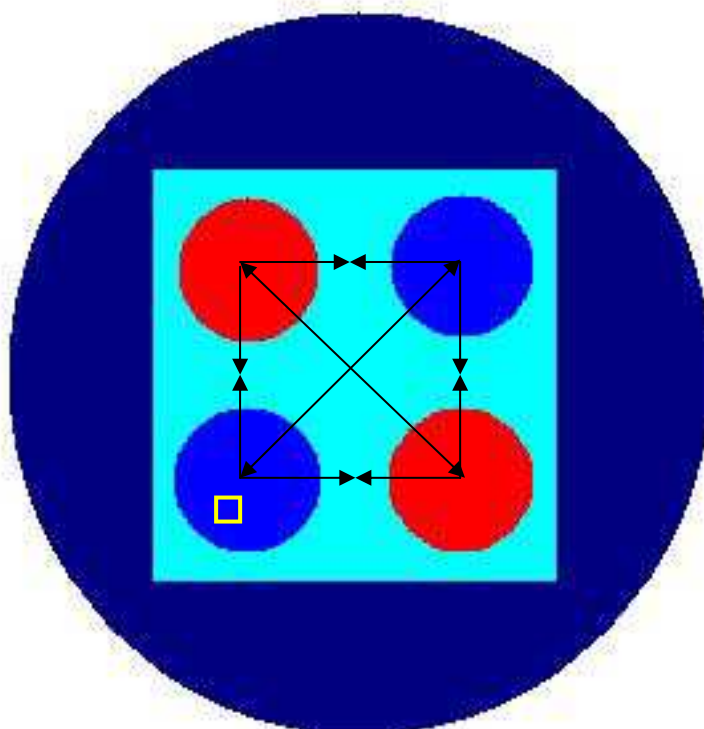
## Úvod do Fraktální teorie Multiversa

Na počátku 21. století se objevily snahy o skloubení neplodnějších myšlenek teorie strun i teorie smyčkové kvantové gravitace do jediného konzistentního celku, který by tak v sobě zahrnoval největší výhody obou dvou přístupů a naopak potlačoval jejich nedostatky. Zároveň se očekávalo, že takováto syntéza by zřejmě nabízela i zcela nové testovatelné předpovědi. Nejzajímavějším výsledkem tohoto snažení se ukázala být teorie Cytoprostoru, se kterou jsme se podrobně seznámili ve předešlých dvou kapitolách. V této kapitole si klademe za cíl provést shrnutí nejzávažnějších důsledků přímo vyplívajících z této teorie.

### 1: Kupovesmír

Po velkém třesku se v prostoru vytvořilo několik hmotných ostrůvků, které se počaly vzájemně spojovat ve větší útvary, jež se vůči sobě opačně polarizovaly. Jakmile množství bodově soustředěných hmot způsobilo úplné zakřivení prostoročasu, můžeme již hovořit o vzniku soustav čtyř vesmírů a čtyř antivesmírů, jejichž dvourozměrné zobrazení si můžeme prohlédnout na obr. 13.1.

Obr. 13.1

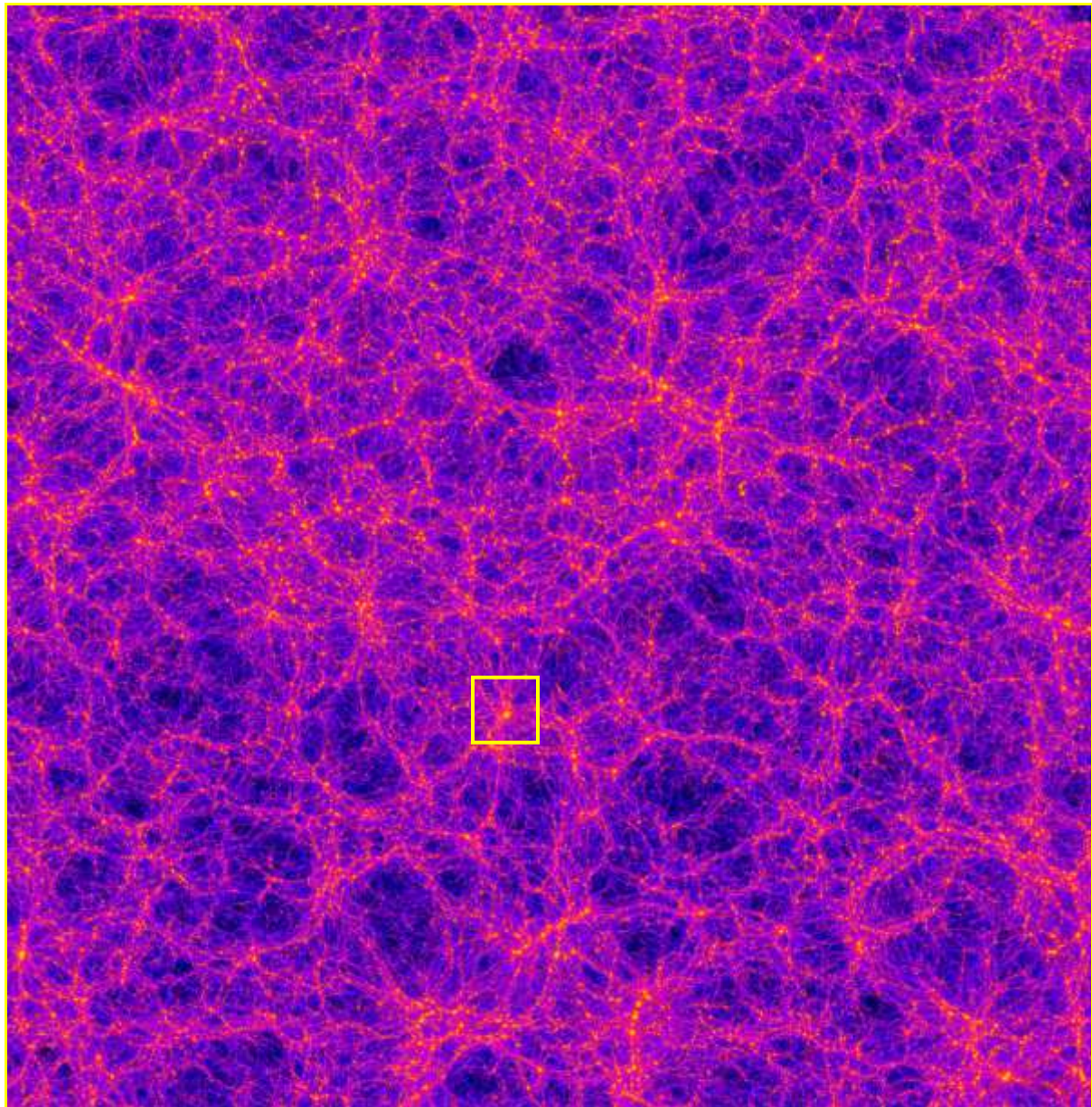


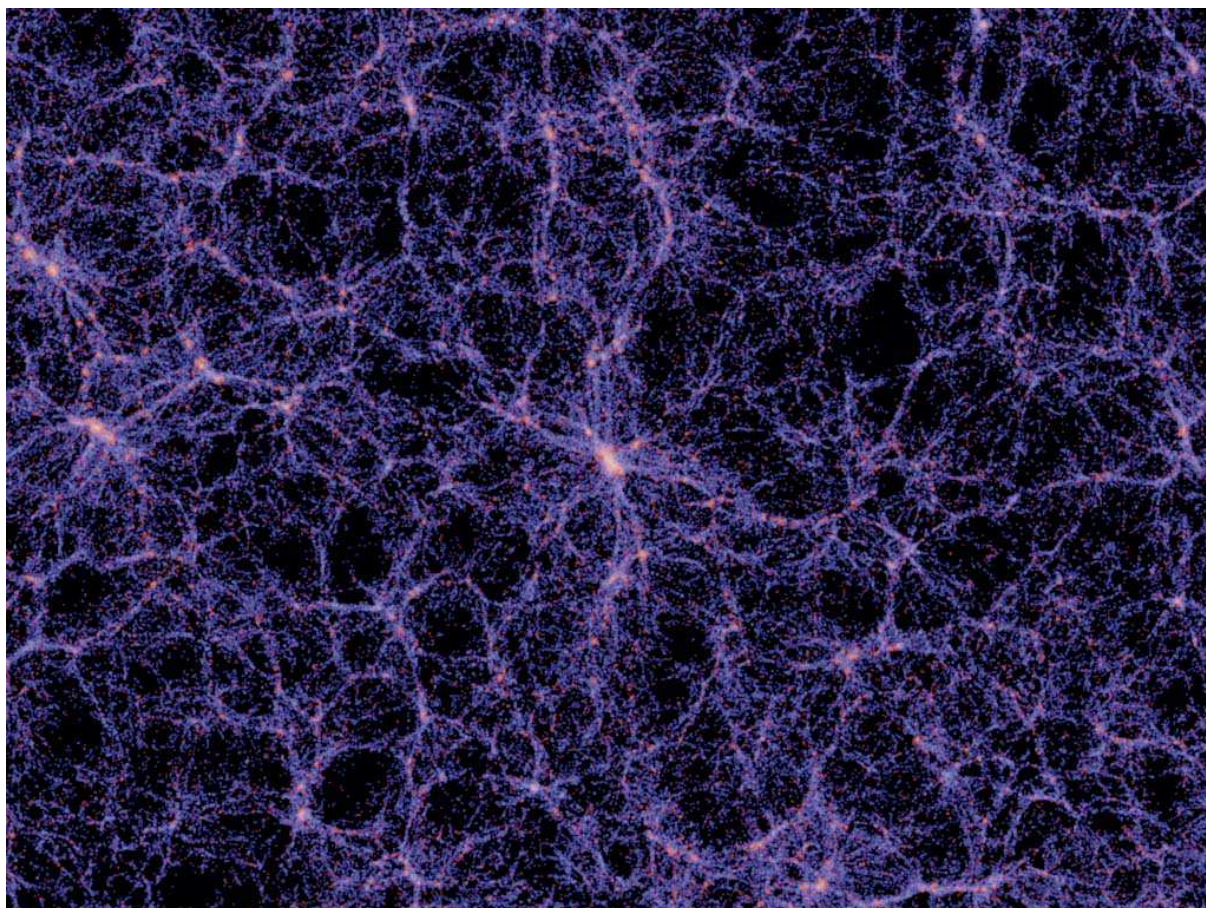
Pozorovatelné vesmíry a antivesmíry jsou vyznačeny barevně, tmavě je znázorněno Blandrium.

Šipky ukazují vzájemné přitažlivé síly mezi vesmíry a mezi antivesmíry, dále pak síly odpudivé, vzájemně působící mezi vesmírem a antivesmírem. Dokonalá souhra vzájemně opačných sil zajišťuje stabilitu celé této soustavy.

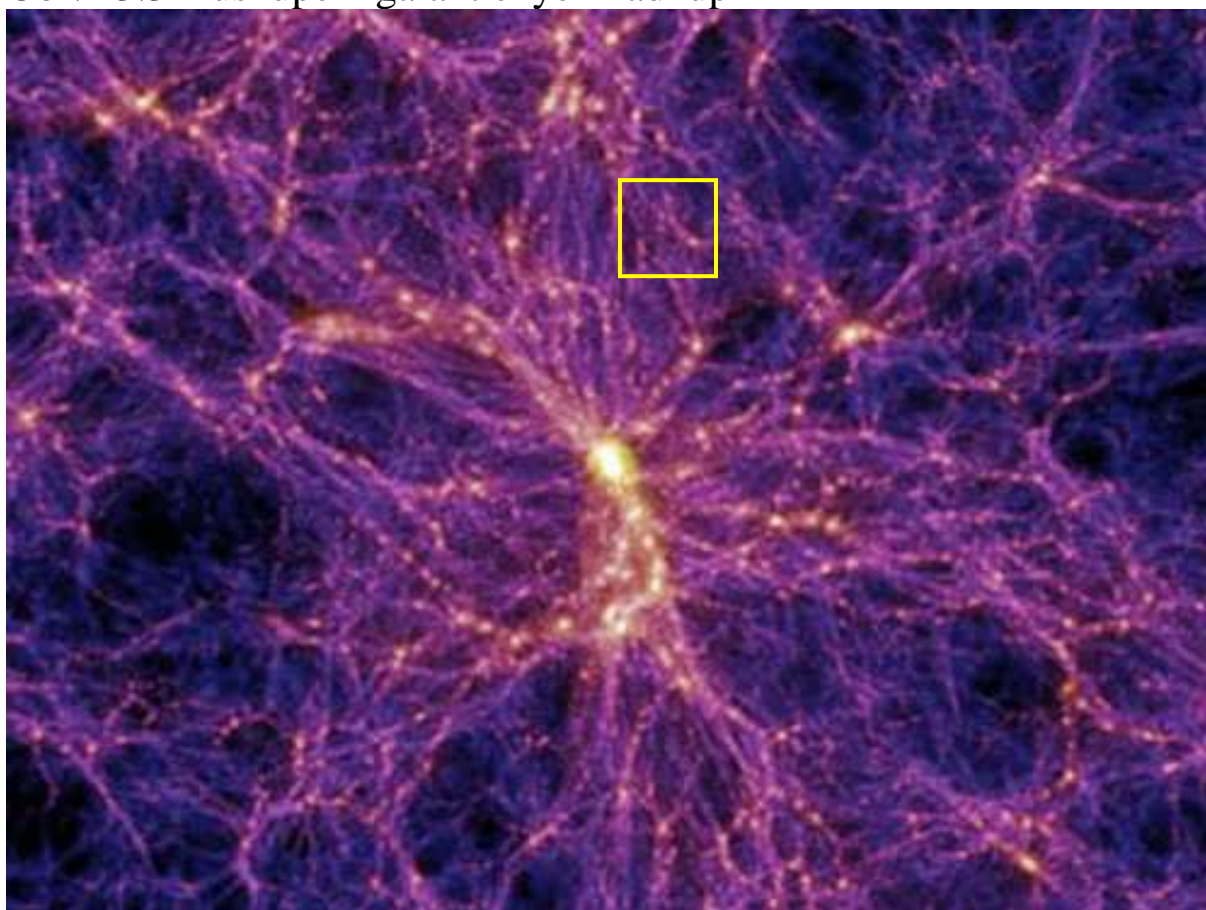
Na obr. 13.2 je znázorněno vnitřní uspořádání hmoty uvnitř vesmíru. Vidíme typickou houbovitou strukturu tvořenou nadkupami galaxií ve tvaru jakýchsi „špaget“ a „lívanců“.

Obr. 13.2 – struktura vesmíru





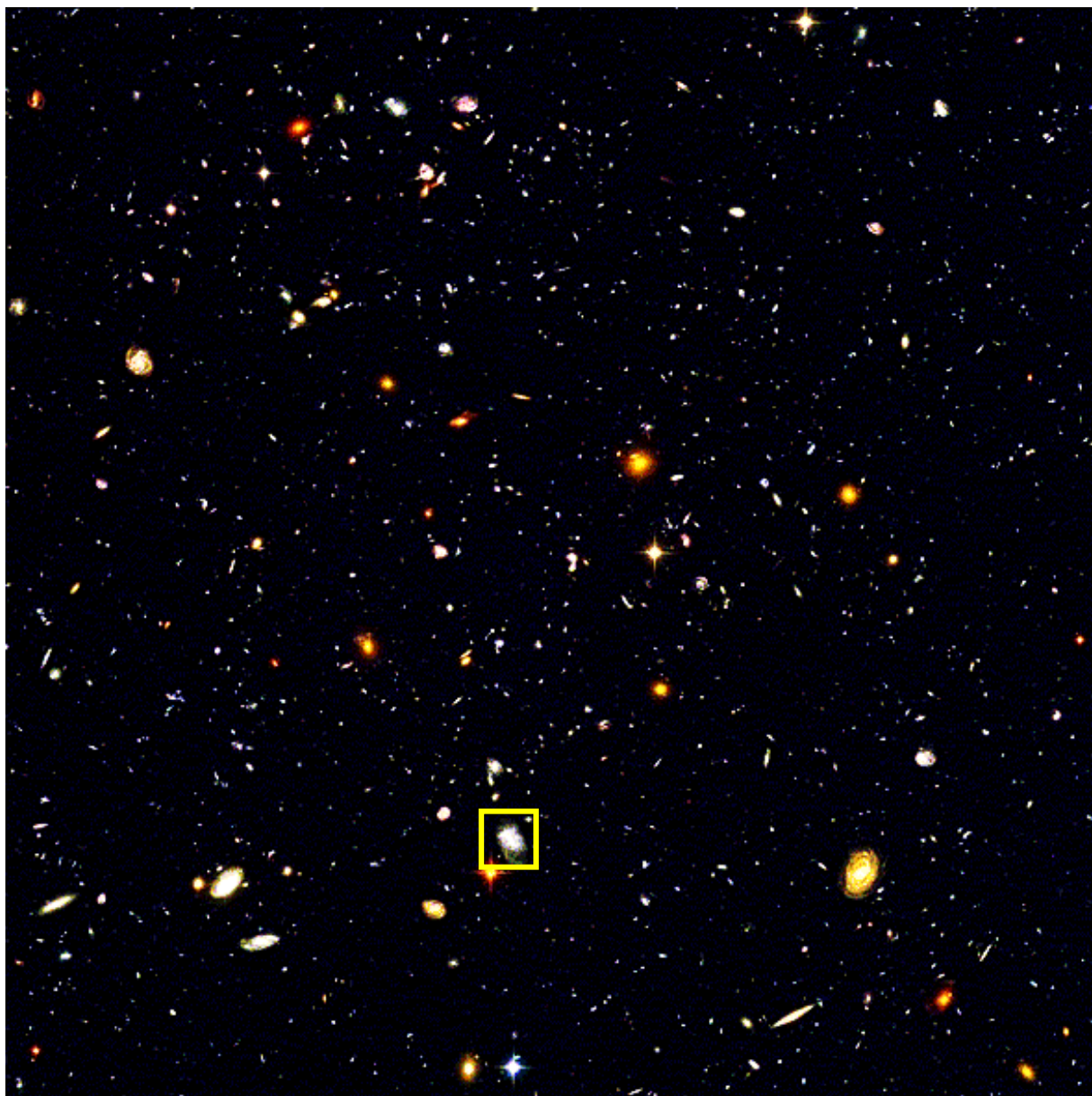
Obr. 13.3 – uskupení galaktických nadkup





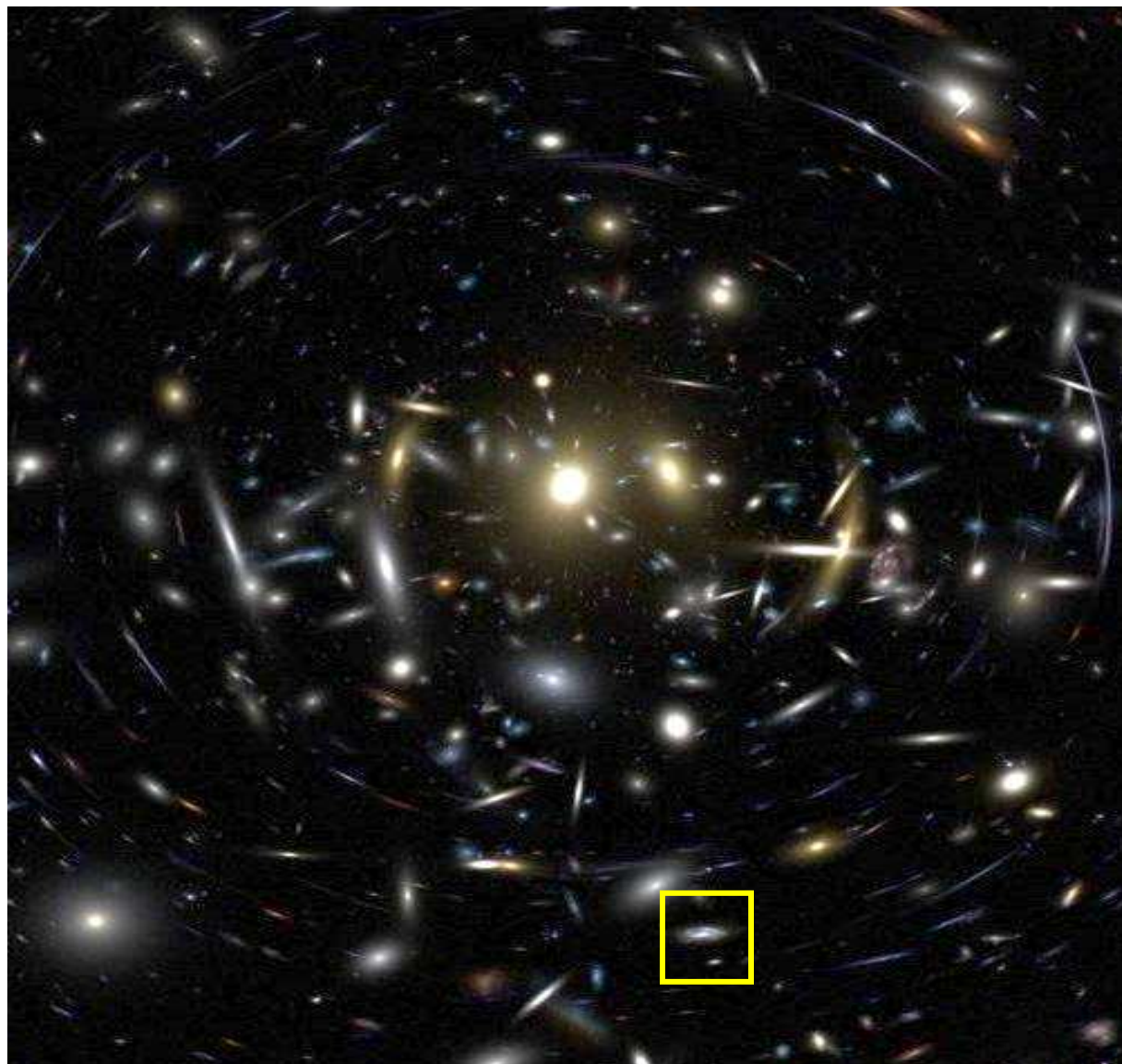
Obrázek 13.4 znázorňuje malý výřez naší galaktické nadkupy s místním uskupením galaktických kup v jejím nitru.

Obr. 13.4 – galaktická nadkupa



na obr. 13.5 vidíme galaktickou kupu čítající stovky galaxií, jevící výrazné zkreslení svého obrazu efektem tzv. **gravitační čočky**. Obrovská hmota této galaktické kupy je zkoncentrována na tak malém objemu, že se světelné paprsky emitované vzdálenějšími objekty kupy, vlivem gravitace celé kupy, výrazně vychylují ze své původní dráhy. Obraz se tak jeví vzdálenému pozorovateli značně zdeformován.

Obr. 13.5 – kupa galaxií

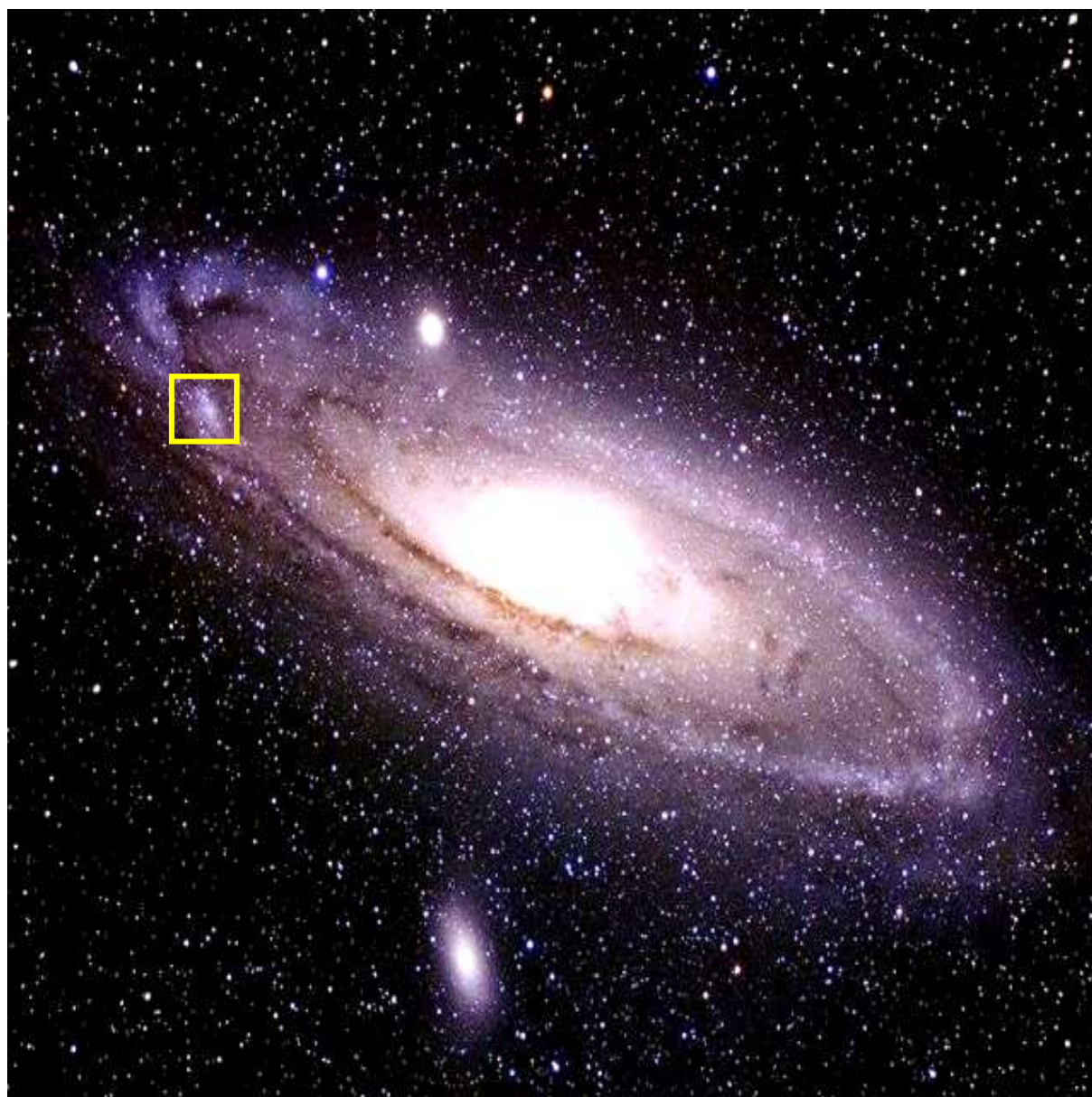


Na obr. 13.6 je galaxie M31 v Andromedě, čítající stamilióny hvězdokup s celkovým množstvím přes 200 miliard hvězd, jež je z naší místní kupy galaxií nejvíce podobná té naší.

Na obrázku jsou rovněž patrné dvě satelitní mikrogalerie, které jsou jakýmsi obdobami našeho Malého a Velkého Magelanova mračna – dvou satelitních galaxií obíhajících naši galaxii.

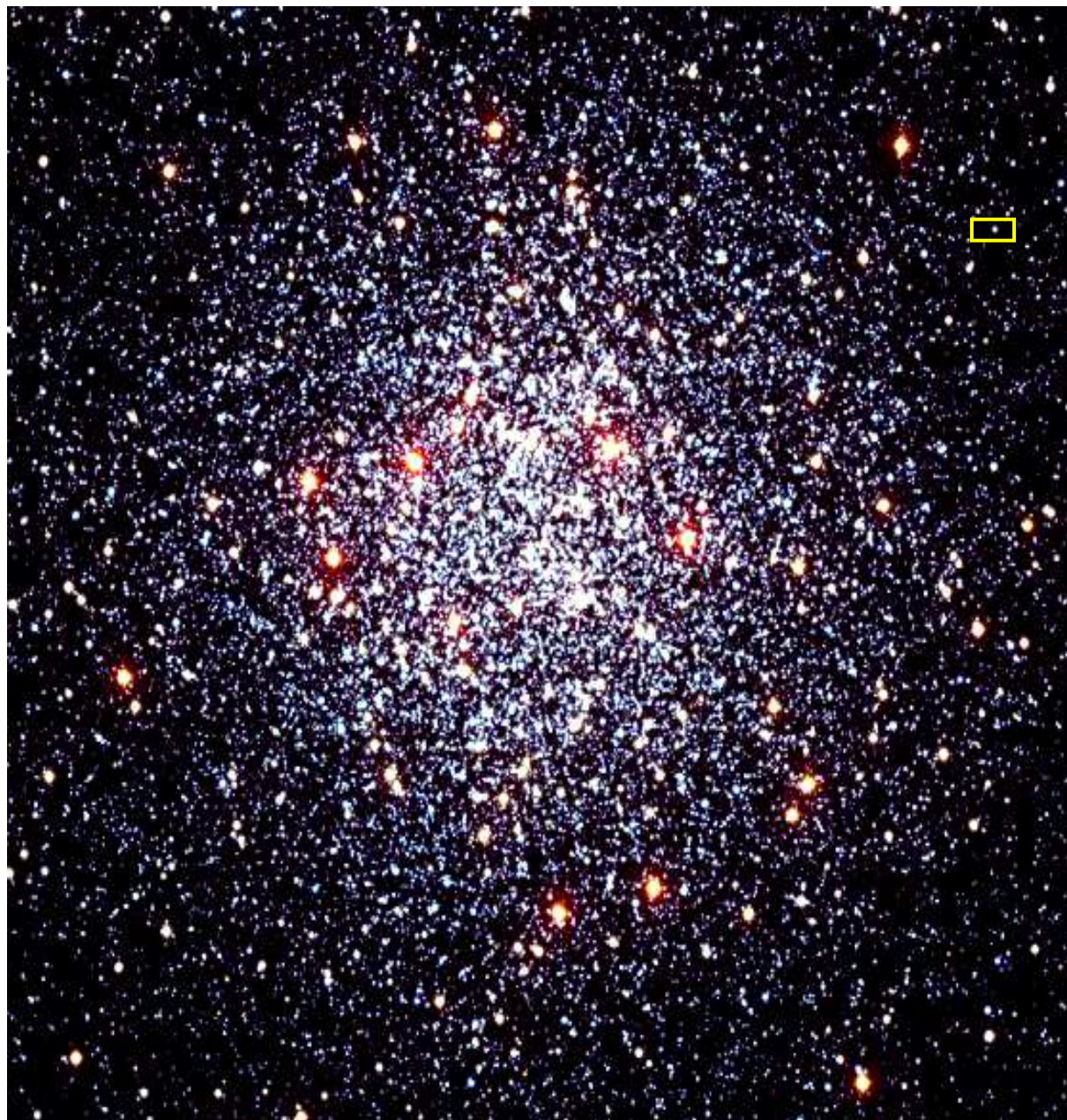
(Hvězdy v popředí, jež můžeme na snímku rozeznat pouhým okem, náleží ještě do naší galaxie. Mezi nimi a galaxií M31 leží propast téměř tří miliónů světelných roků takřka prázdného vesmírného prostoru).

Obr. 13.6 - galaxie



Na obrázku 13.7 vidíme typickou hvězdokupu.

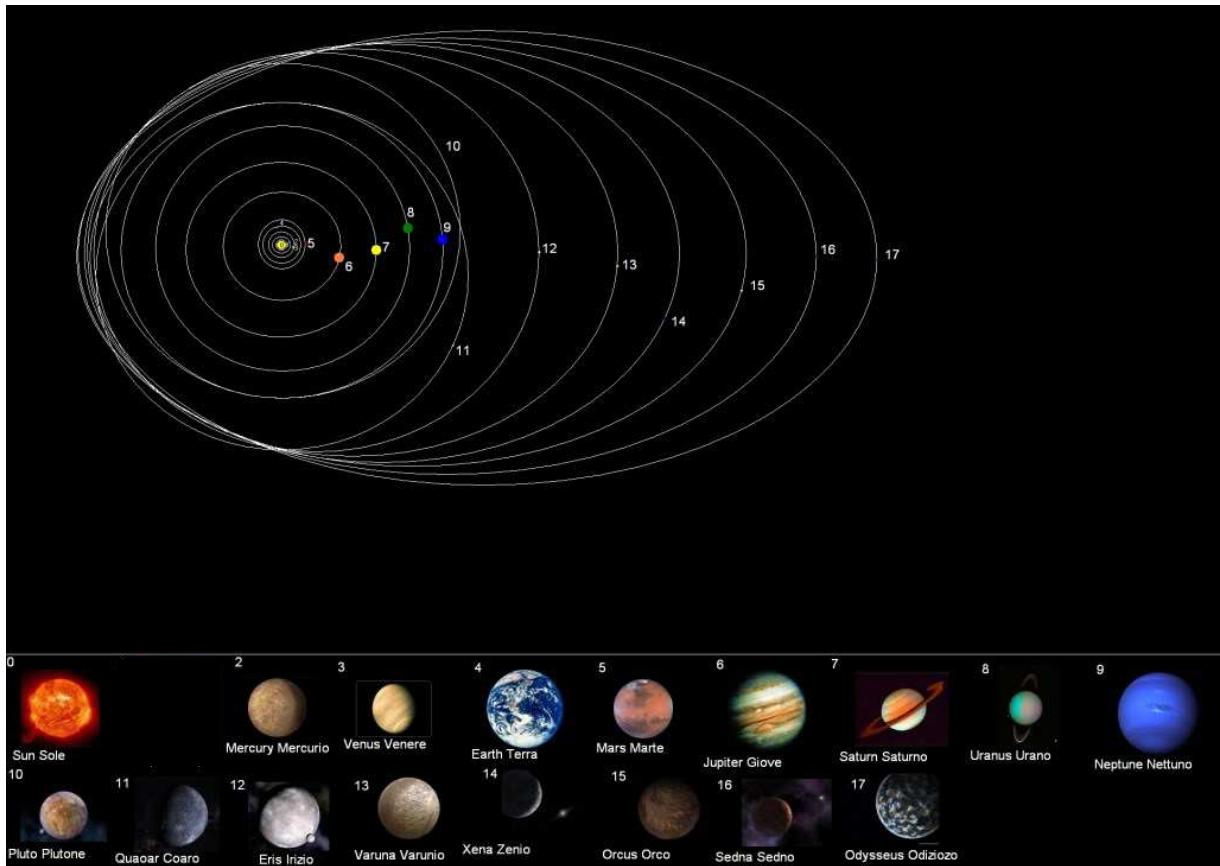
Obr. 13.7 – hvězdné uskupení



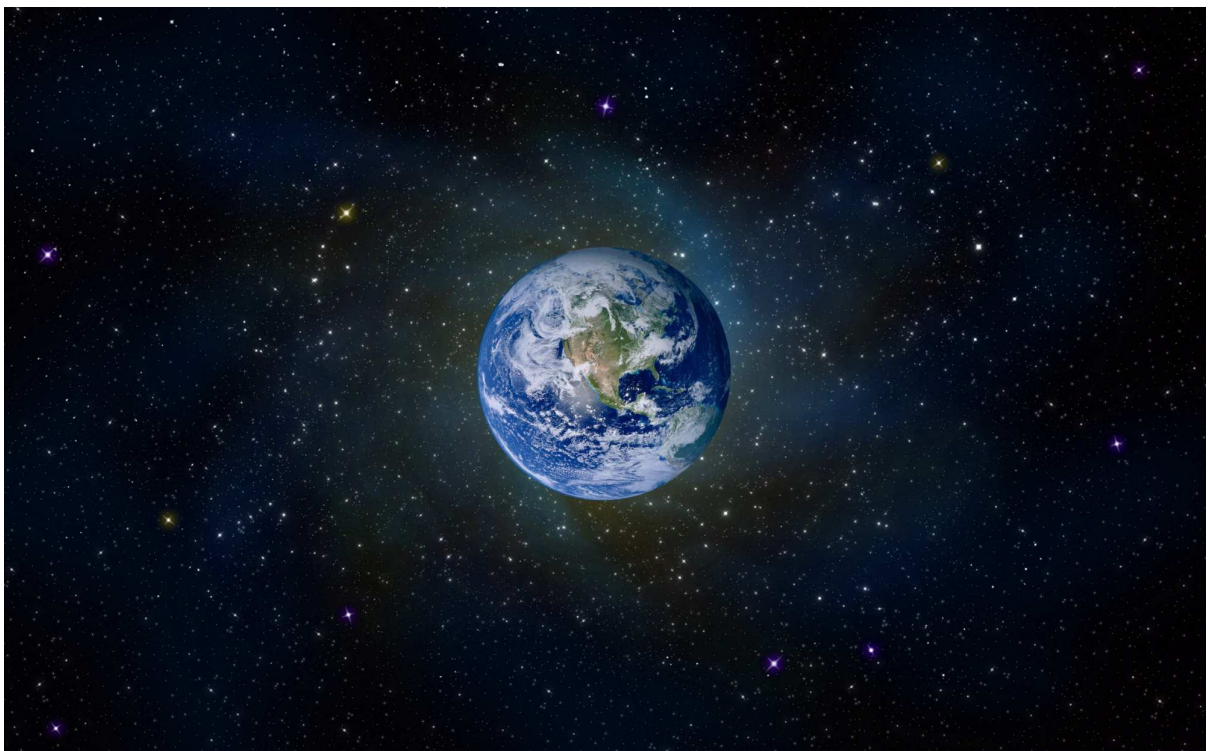
Průměrná vzdálenost mezi dvěma sousedními hvězdami uvnitř hvězdokupy činí několik světelných roků.

Obrázek 13.8 ukazuje naši sluneční soustavu s devíti planetami, na dalším obrázku pak můžeme spatřit naši rodnou planetu a poté se budeme nořit stále hlouběji do nitra hmoty, dokud nedosáhneme tzv. **fraktální rekurse**.

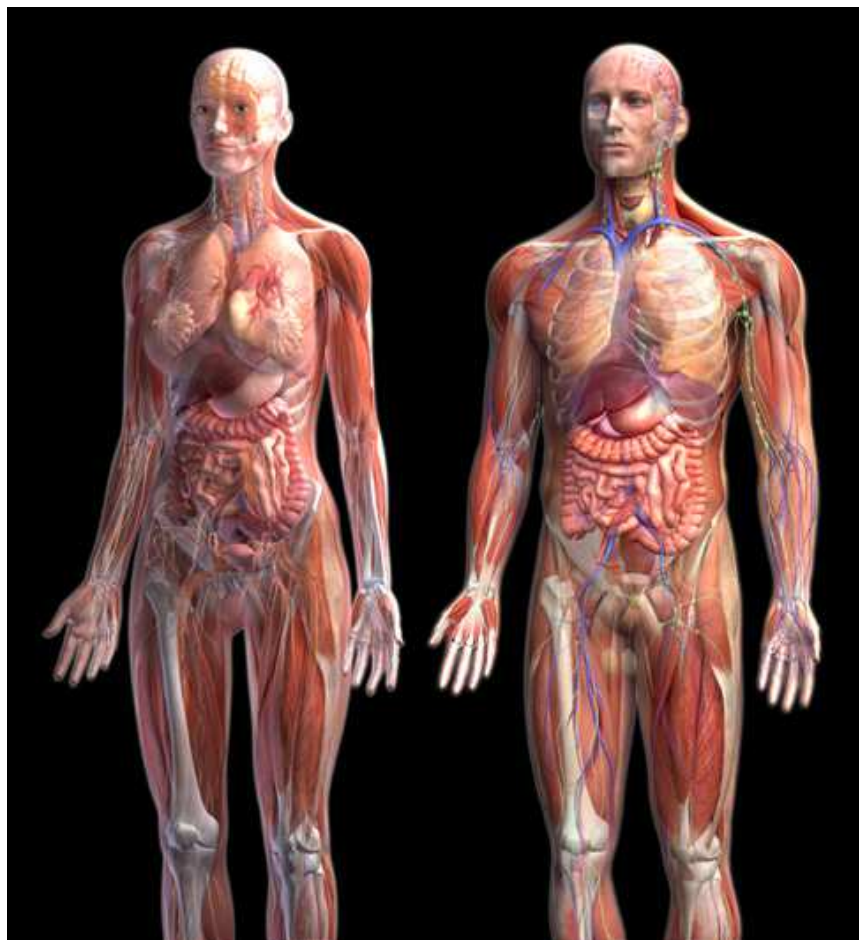
Obr. 13.8 – solární systém



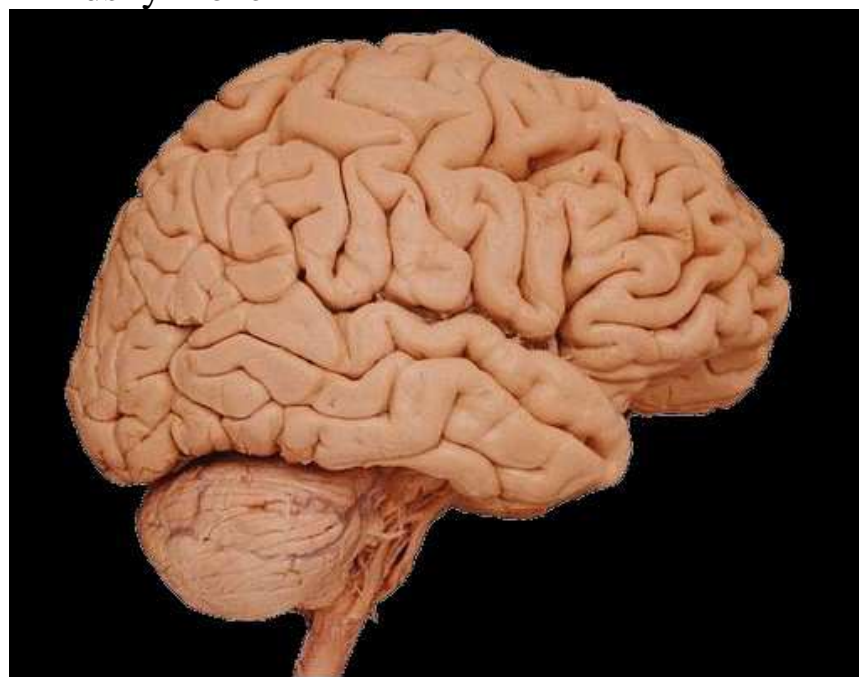
Obr. 13.9 – planeta země



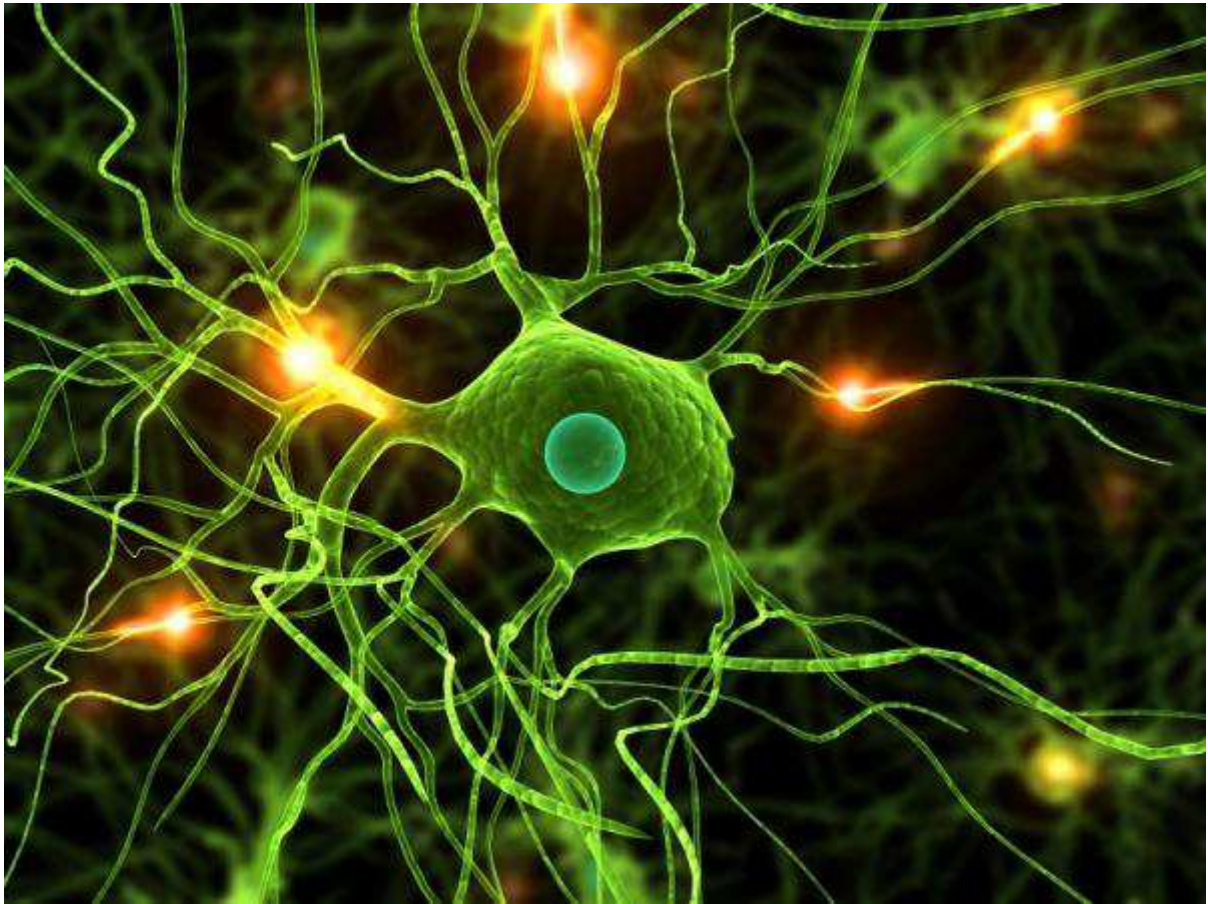
Obr. 13.10 - člověk



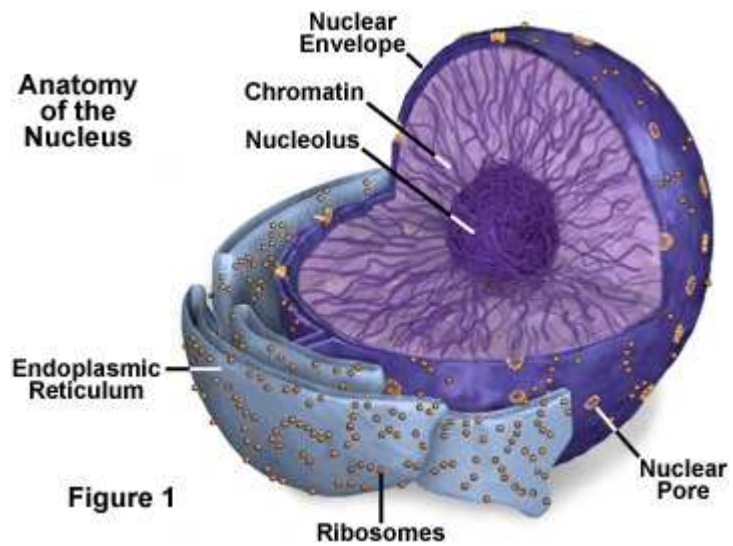
Obr. 13.11 – lidský mozek



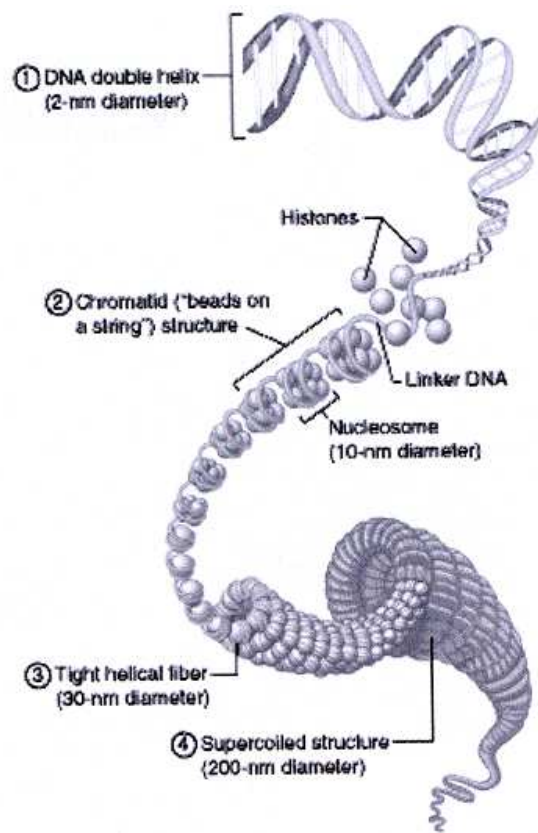
Obr. 13.12 - neuron



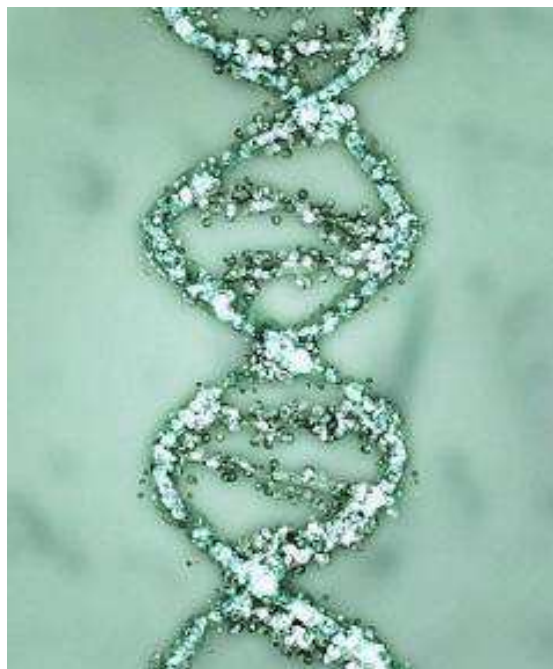
Obr. 13.13 – buněčné jádro



Obr. 13.14 – chromatinové vlákno

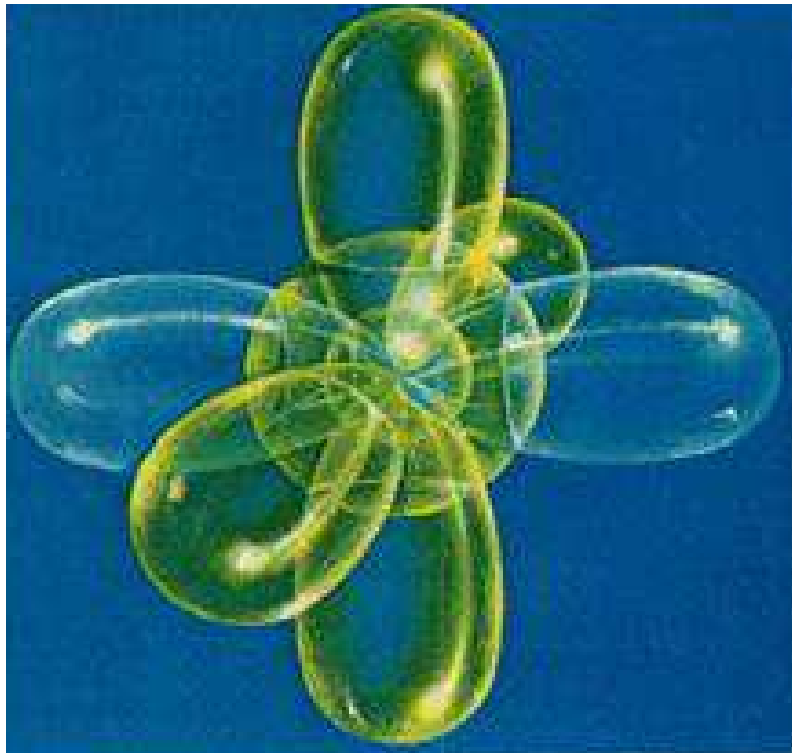


Obr. 13.15 – molekula DNA

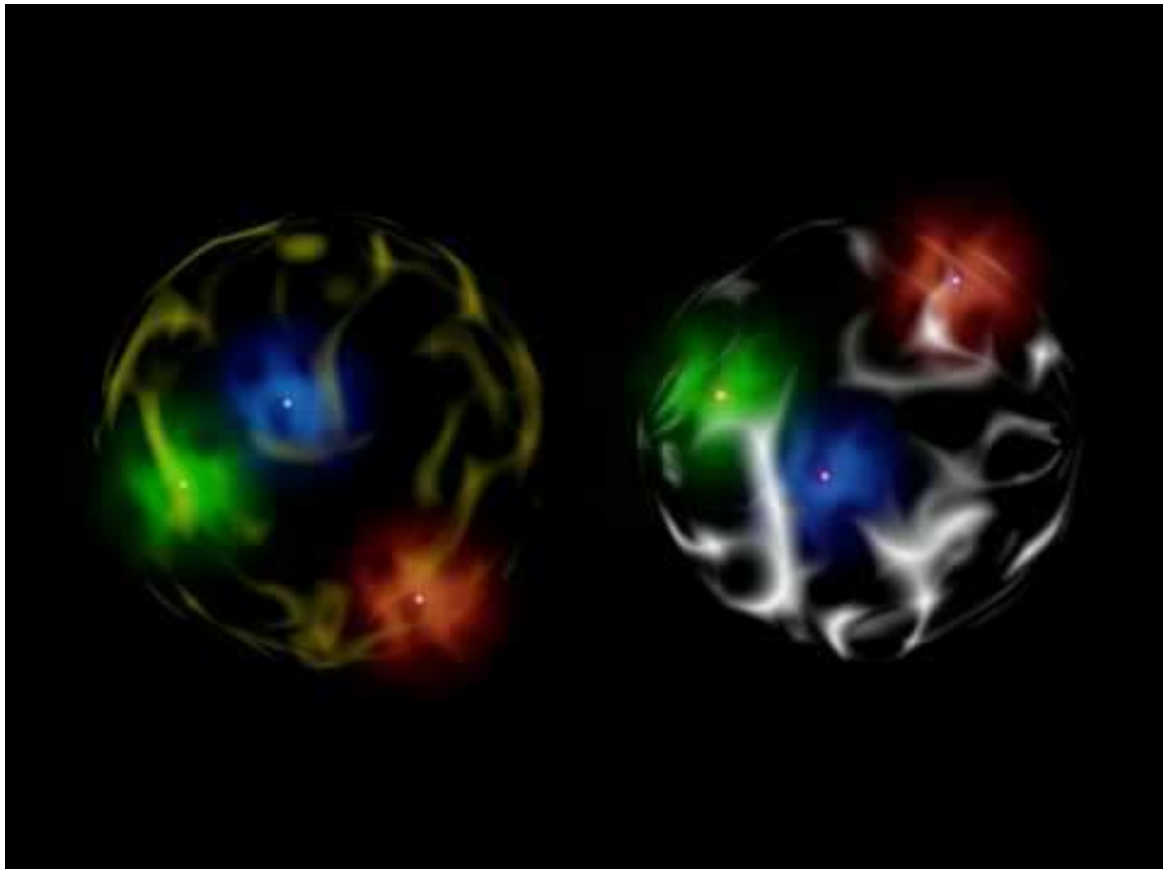











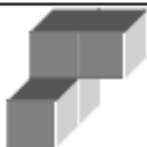
Obr. 13.16 – atom uhlíku



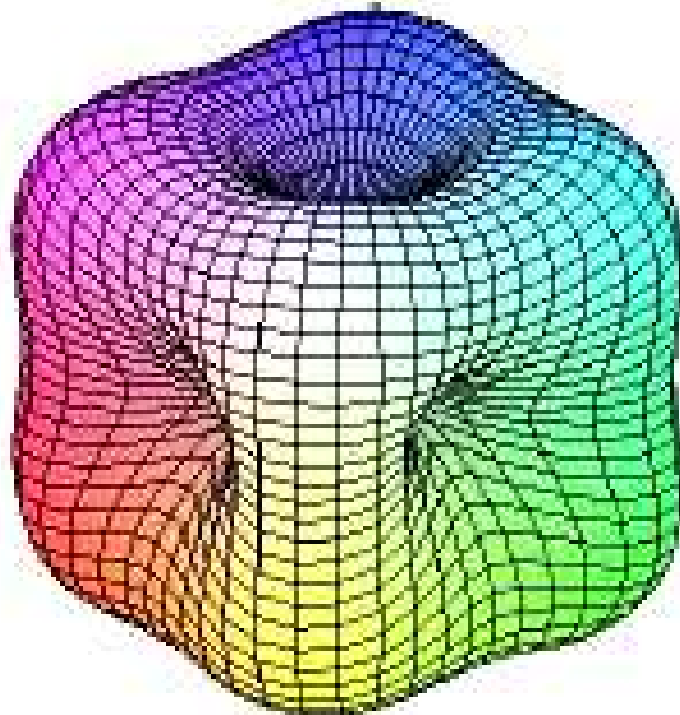
Obr. 13.17 – nukleony tvořené barevnými kvarky



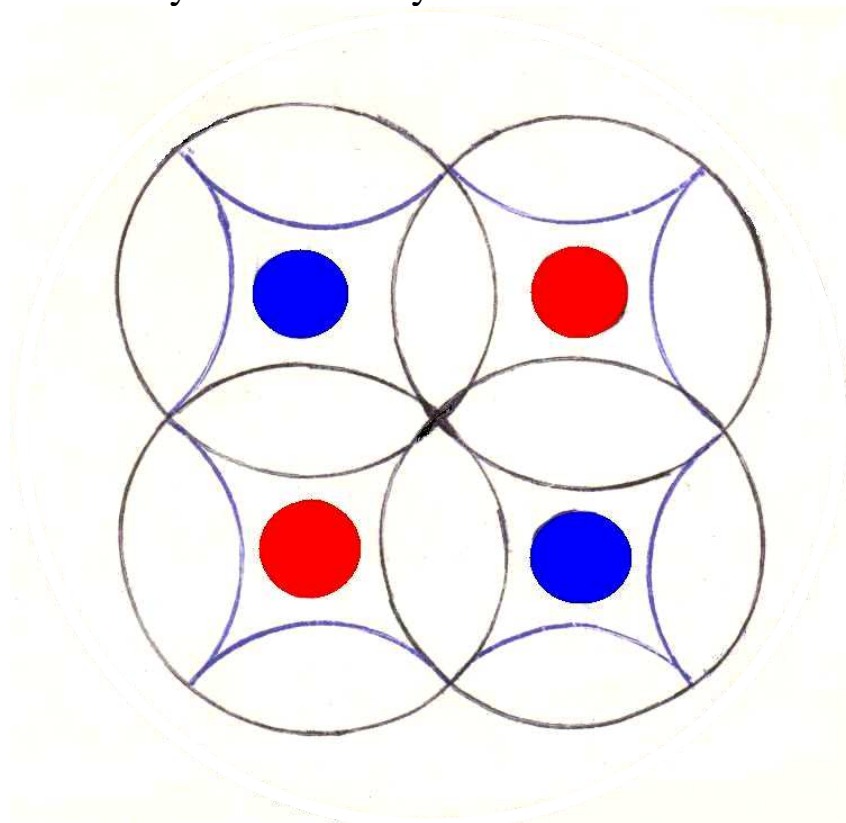
Obr. 13.18 – preony tvořené z kvantionů

$ T $	A	B
0		
1/3		
2/3		
1		

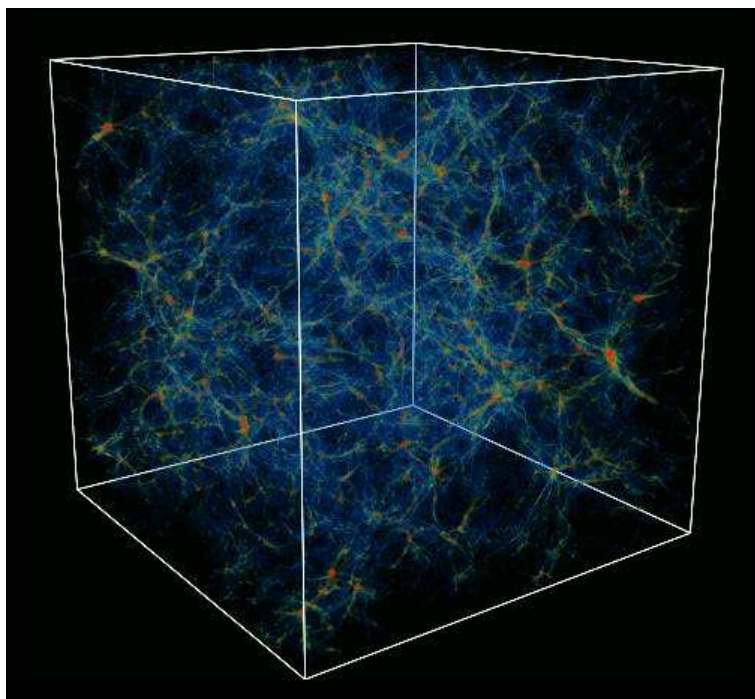
Obr. 13.19 – kubický subchronor uvnitř kvantionu



Obr. 13.19 – vesmíry a antivesmíry uvnitř kvantionu



Obr. 13.21 – vesmír



V této fázi již nahlížíme do nitra kvantionu (Obr. 13.21 představuje pouze jeho malý výřez, nikoli celý kvantion) a nalézáme v něm přesnou repliku našeho vesmíru – dosáhli jsme fraktální rekurse.

## 2: Fraktální kvantová teorie Multiversa

Pokud bychom mohli pohlédnout na atom kvantovým mikroskopem (viz obr. 13.71), skýtajícím takřka libovolné rozlišení až na samu hranici danou kvantovou geometrodynamikou, přičemž bychom postupně zvětšovali obraz, spatříme (viz tab. 13.1) částice obdobné našim největším vesmírným útvarům, jimiž jsou kupovesmíry, tj. **dekanentní mikročástice**, v tomto případě označené indexem  $-1$ .

Většího rozlišení není jakýkoliv mikroskop schopen, neboť kupovesmír je první inertní mikročásticí a to jak zvenčí, tak i zevnitř. Tuto netečnost zaručuje kupovesmíru jeho obal zvaný **Blandrium**, který je jednou z nejužasnějších entit s nimiž se v Multiversu lze setkat.

Proto budeme v této knize o Blandriu ještě mnohokrát hovořit, stejně jako o celém výše popsaném jevu, který sluje **fraktální kvantovou teorií Multiversa**.

Prozrazuje nám skutečnost, že uvnitř každé tzv. **elementární částice** existuje množství vesmírů.

Že tedy i my sami se nalzáme uvnitř pro nás ohromné elementární částice, popř. atomu.

Preony jsou částice z nichž jsou (kombinací pouhých osmi druhů preonů lišících se od sebe kvantovými charakteristikami zvanými **chuť** a **teplota**) vytvořeny veškeré leptony i kvarky.

Samy preony jsou však rovněž složenými částicemi.

Obsahují množství dekanentních mikročástic  $-1$  tj. kupovesmírů, a proto je někdy nazýváme **supervesmíry**.

Tab. 13.1

Fraktální název	Pořadový index	Obecná fyzikální charakteristika
ATD. do $\infty$		
Makrární mikročástice	+1	Preon +2 (supervesmír)
Dekanentní mikročástice	+1	Kupovesmír
Eneární mikročástice	+1	Vesmír
Oktární mikročástice	+1	Supergalaxie
Septimární mikročástice	+1	Kupogalaxie
Hexadentní mikročástice	+1	Galaxie
Kvintární mikročástice	+1	Hvězdukupa
Tetrární mikročástice	+1	Planetární systém
Terciární mikročástice	+1	Hvězda, planeta
Sekundární mikročástice	+1	Atom
Primární mikročástice	+1	Elementární částice
Makrární mikročástice	0	Preon +1
Dekanentní mikročástice	-1	Kupovesmír -1 ( kvantion )
Eneární mikročástice	-1	Vesmír -1
Oktární mikročástice	-1	Supergalaxie -1
Septimární mikročástice	-1	Kupogalaxie -1
Hexadentní mikročástice	-1	Galaxie -1
Kvintární mikročástice	-1	Hvězdukupa -1
Tetrární mikročástice	-1	Planetární systém -1
Terciární mikročástice	-1	Hvězda -1, planeta -1
Sekundární mikročástice	-1	Atom -1
Primární mikročástice	-1	Elementární částice -1
Makrární mikročástice	-1	Preon -2
Dekanentní mikročástice	-2	Kupovesmír -2 ( kvantion -1 )
Eneární mikročástice	-2	Vesmír -2
Oktární mikročástice	-2	Supergalaxie -2
Septimární mikročástice	-2	Kupogalaxie -2
Hexadentní mikročástice	-2	Galaxie -2
Kvintární mikročástice	-2	Hvězdukupa -2
Tetrární mikročástice	-2	Planetární systém -2
Terciární mikročástice	-2	Hvězda -2, planeta -2
Sekundární mikročástice	-2	Atom -2
Primární mikročástice	-2	Elementární částice -2
ATD. do $\infty$		

Preony lze ve speciálních reaktorech uvést do excitovaného stavu, čímž získáme **preonové rezonance** – částice výjimečných vlastností. Zatímco obrazový příjem z kvantionového mikroskopu získáme téměř okamžitě po uvedení přístroje do chodu, obrazový příjem z preonovém dalekohledu (viz obr. 13.68) získáme s jistým zpožděním. Jeho záření totiž musí uletět nesčetněkrát větší vzdálenost než záření preonového mikroskopu.

Oba dva zmíněné přístroje jsou však velmi důležité, neboť jeden nám umožňuje pohled na kupovesmír zevnitř, zatímco ten druhý zvenčí, na jeho okolí.

V tomto odstavci bylo konstatováno, že v každém preonu se nalézá náš vesmír a to dokonce hned v několika identických kopiích.

Také jsme však hovořili o excitaci preonů.

Abychom zabránili případné panice čtenářů jíž by mohla vyvolat nesprávná interpretace této skutečnosti, musíme znovu připomenout, že uvnitř každého supervesmíru existuje mnoho kupovesmírů a to jsou, jak již bylo řečeno, inertní mikročástice.

Při případné excitaci preonu tedy nedochází k jejich poškození.

Teprve v nitru každého kupovesmíru jsou pečlivě uchovány naše čtyři vesmíry a jejich čtyři antihmotné protějšky. Proto vskutku nehrozí nebezpečí, že bychom excitací jediného preonu poškodili zároveň celý vesmír.

### 3: ČasoMultiversum

Před tím, než se zrodilo Multiversum, vzniklo působením „TO“, kteréž je prvotní prapříčinou všeho, nekonečné množství virtuálních částic, jež se navzájem přesně kompenzovaly, takže nejevily žádné známky existence.

Mezi těmito částicemi tzv. „Nic“ byla poté narušena symetrie a tyto se začaly slučovat ve větší kvanta hmoty~energie.

Tak byla stvořena hmota, která se přitažlivými silami počala shlukovat do jediného bodu – pomyslného „vejce“ – ve kterém se již vyvíjel zárodek Multiversa.

Ohromnou erupcí v jeho nitru se poté Multiversum zrodilo, kterýžto okamžik lze považovat za samý počátek jsoucna.

Fragmenty hmoty poté „krystalizovaly“ v útvary, které dnes nazýváme **kupovesmíry**.

Uvnitř kupovesmírů se od sebe, z důvodů stability, záhy oddělily částice a antičástice za vzniku čtyř vesmírů a čtyř antivesmírů, jež se vůči sobě nacházejí ve vzájemné silové rovnováze.

Všecny vesmíry i antivesmíry jsou úplně stejné, ovšem v antivesmírech jsou částice nahrazeny jejich opačně nabitými zrcadlovými protějšky – antičásticemi.

Ve středu Multiversa končí veliké množství kvantionů a další hmoty (blíže o tom v odstavci 3), zde se stlačují za vzniku energie, jejíž hustota den ode dne vzrůstá.

Jednou za nekonečno let dosáhne tato energie takové hustoty, že rozpoutá tzv. **makrární štěpnou reakci**, při níž se elementární částice navzájem štěpí na stále menší a elementárnější částice, dokud se relativně nekonečná hmota nezhroutí do nepatrného bodu zvaného **bindu** – onoho „vejce“ z něhož se rodí nové Multiversum.

Zmenšování se bindu trvá až do té chvíle, než se jeho energie vyrovná s energií okolního Multiversa.

Hroucení bindu však probíhá takovou rychlostí, že nikdy nedojde k přesnému vyrovnání obou energií.

V důsledku jakési „setrvačnosti“, energie vně bindu na okamžik poklesne vzhledem k energii bindu, což vyvolá ohromný výbuch, kdy vzniknuvší „kvantověmechanický podtlak“ vysaje veškerou hmotu z bindu do okolního Multiversa.

Po rozprostření hmoty po Multiversu dochází k úplnému zániku bindu a vyrovnání obou energií.

#### **4: Kvantiony a midony, aneb kvantová teorie absolutního ČasoMultiversa**

Jak bylo řečeno v předešlých odstavcích, nekonečné Multiversum je obklopeno substancí jíž nazýváme „TO“.

Tato substance je plná částic kterým říkáme **kvantiony**.

Ve druhém odstavci byla řeč o dekanentních mikročásticích, neboli kupovesmírech.

Mají-li navíc ještě označení  $-1$ , jedná se právě o kvantiony, tj. kupovesmíry  $-1$ .

Tyto částice vyzařují z „TO“ a odrážejí se od středů Multiversa (jak později uvidíme, Multiversum má nekonečné množství středů), vstupují do jednotlivých světů vytvářejíc to, čemu říkáme jsoucno. Ukazuje se, že jakákoliv hmota v Multiversu, ať již organická, či anorganická, je ve skutečnosti tvořena kvantiony, tj. kupovesmíry, v nichž je v každém momentu, vůči našemu času, budoucnost. Vezmeme-li dva samostatné světy před interakcí času, tvoří tento časový předstih dekanentní mikročástice  $-1$  vůči dekanentní mikročástici  $1$ , řádově několik kvadriliontin sekundy (doba již trvá kvantionu přelet napříč jedním kupovesmírem). Rovněž i hmota v dekanentní mikročástici  $-1$  je tvořena kvantiony, tentokrát dekanentními mikročásticemi  $-2$ , atd. Přitom se časový rozdíl mezi dvěma kupovesmíry (tj. např. mezi dekanentní mikročásticí  $-2$ , a dekanentní mikročásticí  $-1$ ) neustále vyrovnává, neboť kvantiony v budoucnosti prozrazují kvantionu v minulosti, jak se má zachovat, aby se jim vyrovnal, i když k vyrovnání času prakticky nikdy nemůže dojít.

Toto zjednodušené vysvětlení tohoto jinak velice složitého mechanismu, nám ukazuje, že celé Multiversum pracuje na principu proudění absolutního Času přenášeného kvanty – kvantiony – od jeho středu k jeho okrajům.

Rychlosti tohoto proudění říkáme rychlost kvantionu a považujeme ji za tzv. **poloviční reálnou rychlost Času**.

Tato rychlost činí v našem kupovesmíru  $c^6$ , kde  $c$  je rychlost světla ve vakuu.

Rychlost v našem kupovesmíru, tj. v dekanentní mikročástici  $1$  se již v dekanentní mikročástici  $2$  násobí cca.  $10^{61}$ -krát.

Z toho plyne, že v imaginárních kupovesmírech u samých okrajů Multiversa, v nichž probíhá vůči nám nekonečná minulost, existuje běžně vůči nám nekonečně rychlý pohyb.

Jak dále uvidíme (viz Zoevistianova speciální relativita), nebylo by to možné, pokud by každý vesmír nebyl do značné míry autonomním prostorem, nezávislým a neovlivňujícím své okolí, co se týče přesného přenosu rychlosti a s ní spojených prostoročasových jevů.

Blandrium je tedy i jakási přepážka dělící od sebe časy dvou světů.



Kvantová teorie absolutního ČasoMultiversa s sebou přináší zcela nový pohled a způsob chápání prostoru a času.

Od Einsteinova objevu až do dnešní doby jsme byli zvyklí vnímat čas jako nehmotný čtvrtý rozměr směřující stále od minulosti do budoucnosti.

Kvantiony nám však představují čas v úplně jiném světle – coby produkt pohybu kvant energie proudících směrem od budoucnosti do minulosti.

To zároveň vyvrací možnost evolučního vývoje Multiversa (nikoliv ovšem vesmíru).

Znamená to totiž, že Multiversum muselo být stvořeno, a to přesně v té podobě, v jaké se nalézá i nyní, tj. musela v něm být již na počátku pevně stanovena veškerá jeho budoucnost, nebo – z dnešního pohledu tedy – minulost, přítomnost i budoucnost zároveň.

V praxi si však i nadále můžeme představovat Čas, jako pohyb kvantionu ve směru od středu k okraji Multiversa, a k němu opačný pohyb midonu, jak nám znázorňuje obr. 13.66.

Berme to však pouze jako pomůcku pro lepší znázornění, neboť ve skutečnosti žádný takovýto souvislý pohyb ČasoMultiversových kvant neexistuje, podobně jako např. neexistuje pohyb vakancí uvnitř vodičů a polovodičů jimiž prochází elektrický proud, který však s tímto pohybem vakancí přímo ztotožňujeme, neboť je to názorné a pro všechny praktické účely i výhodné.

## 5: Metafyzika

Krom topologických tunelů využívajících přídavné dimenze prostoru, předpokládá moderní metafyzika existenci tzv. **paralelních vesmírů**, čili **hypergrup**.

Paralelní čili souběžné vesmíry nejsou ve fyzice ničím novým.

Vyjadřují nekonečnou kontinuitu vibračních stavů hmoty, energie, časů a prostorů.

V počítači tomu odpovídá nepřeborné množství různých programů.

Kosmický computer, je na rozdíl od těch pozemských, nesrovnatelně složitější.

Moderní metafyzika připouští existenci různých forem hmoty, jež se navzájem prolínají.

Celé Multiversum je vyplněno nepřehledným množstvím paralelních světů vnořených jeden do druhého.

Tyto cizí světy se mezi sebou navzájem nevnímají, neboť každý z nich je omezen pouze na svůj typ hmoty.

Vše je zde na dosah ruky a přec nepřekonatelně mimo.

## 6: Relativismy ČasoMultiversa

Jak již bylo vysvětleno v předešlých odstavcích, každá částice se dá do nekonečna dělit na stále menší a menší elementy.

To tedy znamená, že každý hmotný objekt se skládá z nekonečného množství nekonečně malých částic.

Ocelová koule vážící 1 kg se tak skládá z nekonečného množství částic, stejně jako ocelová koule vážící 1000 kg, v níž je přitom logicky tisíckrát více částic.

Není tedy nekonečno jako nekonečno.

Můžeme však říci, že je jedno nekonečno „nekonečnější“ než druhé? Jinými slovy, můžeme sčítat dvě nekonečna tak, aby byl součet odlišný od sčítanců?

Teorie množin dokazuje že nikoliv.

Součet dvou nekonečen je vždy roven zase jen nekonečnu.

Vezmeme-li nyní nekonečné množství nekonečně malých částic, jež k sobě přiblížíme natolik aby mezi nimi zůstaly jen nekonečně malé mezery, získáme objekt konečné velikosti.

Pokud však vytvoříme mezi jednotlivými nekonečně malými částicemi mezery konečných rozměrů, stane se výsledný objekt nekonečně velkým.

Předmět, který je vůči nám nekonečně malý se relativně skládá z pouze konečného počtu nekonečně malých částic.

Můžeme však prohlásit o nekonečně malých částicích, z nichž je vše složeno, že jsou hmotné, ba dokonce, že jsou vůbec existující?

## 7: Partony

Započněmež s výkladem látky, která na základě fraktální teorie Multiversa, naznačené v odstavci 3, proniká do nejjemnějších struktur hmoty a celého fyzického i metafyzického ČasoMultiversa, čímž otevírá zcela nové obzory zasahující samé hranice lidského chápání.

Čím tedy jsou ony záhadné partony?

Jedná se o částice, jež představují základní stavební kameny

Multiversa, či obecněji ČasoMultiversa.

Vibrací těchto částic je tvořena hmota.

Tvoří-li množství  $\infty^2$  partonů částici relativně (pro nás) konečných rozměrů, získá tato částice nekonečnou potenciální energii, tj. konečnou hmotnost.

Nekonečno (ve smyslu množství) nám tedy přeměňuje relativní „Nic“ na relativní „něco“.

Na takto choulostivý problém jakým jsou partony, je vždy potřeba pohlížet skrze ČasoMultiversové relativismy pojednané v předešlém odstavci.

Není tedy možno chápat partony jako cosi invariantního na pohledu z různých soustav vzájemně oddělených nekonečnem.

Pro nekonečného pozorovatele jsme my  $\infty^{-1}$  a pro nás  $\infty^{-1}$  je pro nekonečného pozorovatele  $\infty^{-2}$ , tedy partonem.

Pro nás  $\infty^{-1}$  leží pro nekonečného pozorovatele vlastně již na jiné dialektické úrovni (viz odstavec 11).

Stejně tak i naše kvantiony a kupovesmíry, a vůbec všechny dekanentní mikročástice označené přirozenými čísly s konečnou hodnotou, jsou vůči  $\infty^2$  pozorovateli (tj. jinodialektické úrovni) vlastně již partony.

O našich kvantionech, coby partonech pro  $\infty^2$  pozorovatele, tedy můžeme říci, že vůči nim mají jen konečnou potenciální energii, nejevíc žádné známky hmotnosti.

Jsou tedy pro ně částicemi absolutního „Nic“.

Vidíme tedy, jak i takové obyčejné „Nic“ dokáže být relativním pojmem.

I když už tedy víme, že v podstatě neexistujeme a navíc jsme ještě částicemi holého „Nic“ – partony, ukážeme si nyní, že jsme k tomu všemu zároveň „TO“ – prapříčinou všeho, což již zdánlivě odporuje zdravému rozumu a lidskému chápání vůbec.

Přiřadíme-li našemu partonu zároveň atribut „TO<sup>-1</sup>“, pak i my sami budeme vůči  $\infty^2$  pozorovateli „TO<sup>-1</sup>“, čili partonem.

Tento zdánlivý fyzikální horor řeší elegantně právě metafyzika, jež dovoluje pohlížet na svět jako na jednotu, která umožňuje tvrdit, že

parton, kvantion, kupovesmír, Multiversum, „TO“, apod. jsou jen různé názvy pro jednu a tutéž formu bytí.

To že vše je relativní je na druhé straně tvrzením velmi relativním, neboť vše se skládá z  $\infty^2$  množství částic o velikosti  $\infty^{-2}$ .

Z toho plyne, že náš svět je z pohledu partonové teorie vskutku konečným, neboť platí:

$$\infty^2 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-2}) = k \quad (13.1)$$

Zmenšíme-li nekonečné těleso na konečné, vzroste jeho hustota pro nekonečného pozorovatele nekonečněkrát, takže bude nekonečná stejně jako pro pozorovatele konečného.

Podobně, zmenší-li se  $\infty$  na  $\infty^{-1}$ , pak vůči nekonečnu je  $\rho = \infty^2$ , vůči samotnému  $\infty^{-1}$  bude  $\rho = \infty^4$ , a vůči nám pak  $\rho = \infty^3$ .

Z toho můžeme jednoznačně vyvodit závěr, že se díky partonům pohybujeme v  $\infty^k$ .

Mimopartonová úroveň je pro nás prakticky nedostupná.

Nenalzáme se na ní dokonce ani ve fázi bindu, která se relativně netýká ani „TO“ (neboť jeho hmotnost nelze dále zvyšovat), ani „TO<sup>-1</sup>“, čili partonu (neboť není dělitelný žádnou reálnou energií).

Toto vše lze ovšem i obrátit. Jakýkoliv konečný předmět má schopnost zvětšit svůj objem nekonečněkrát.

Z toho vyplývá metafyzická kapacita Multiversa, jež by měla být maximálně  $\infty^\infty$ . My však již víme, že skutečná metafyzická kapacita Multiversa je mnohem menší. Důvodem je, že ona zvětšená a notně zředěná hmota by již nebyla hmotou v pravém slova smyslu, alébrž zářením partonů.

Konečná hmota se totiž sestává, jak již víme, z  $\infty^2$  množství partonů o velikosti  $\infty^{-2}$ , mezi nimiž jsou  $\infty^{-2}$  mezery zvané **interpartonové prostory**. Tomuto uspořádání odpovídá tzv. **partonprostorový parametr** (13.1).

V případě, že se množství  $\infty^2$  partonů rozprostře po nekonečném prostoru, pak se interpartonové prostory zvětší nekonečněkrát, tj. na rozměr  $\infty^{-2}$ .  $\infty = \infty^{-1}$ .

Tomu odpovídá partonprostorový parametr  $\infty^2 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-1}) = \infty$ .

Takovéto partony vytvářejí zcela nehmotné záření, schopné však Prostorové interakce, tzn. jeho relativní rychlost činí  $v_r = \infty$ . V žádném případě se tedy nemůže jednat o „Nic“, které by vzniklo vyplněním  $\infty^2$  prostoru množstvím  $\infty^2$  partonů (jedná se již o vyplnění části metafyzické kapacity Multiversa).

V tomto případě by interpartonové prostory byly konečné a jednalo by se skutečně o tzv. skupenství „Nic“.

Poznámka: „Nic“ nelze ztotožňovat s vakuem. Slovem „Nic“ zde rozumíme absolutní aprostorčas tvořený virtuálním stavem, v tomto případě již relativně neexistujících částic – partonů.

Relativismus partonu se nám podaří částečně zmírnit, uvědomíme-li si, že právě dekanentní mikročástice mají relativně mnoho společného s partony, neboť i ony jsou prakticky nedělitelné (slovo „prakticky“ zde nabývá významu „v praxi“).

Běžná hmota je tvořena partonovým zářením s partonprostorovým parametrem ( 13.1 ), jež nazýváme **ether** (pozor na Newtonovu definici etheru z roku 1704, či některé pozdější definice vzniknuvší na popud Maxwellovy teorie elektromagnetického pole, které mohou být dosti odlišné od této naší definice již se budeme v dalším textu striktně přidržovat).

Hmototvorná vibrace etheru má rychlost  $v = v_y$ , tj. rychlost kvantionu (pokud se parton pohybuje pomaleji než je tato rychlost, považujeme jej za klidový).

To nám umožňuje chápat ether jako záření  $Y$  dvourozměrných kvantionů – to partonů. Dvourozměrnými by však byly pro svět  $\infty^{-1}$ . V našem světě je možno znázorňovat parton relativně až třemi různými dimenzemi: nultým rozměrem (parton jevící se jako bod), prvním rozměrem (parton jevící se jako struna) a dvojrozměrně (parton jevící se jako membrána).

Přes zdánlivě přesně nevyhovující metafyzickou formulaci, lze v podstatě pokládat kvantion, či chcete-li kupovesmír, za „TO“, přičemž nultý rozměr je reprezentován relativním prostorem, kdesi v jeho středu.

Multiversum na naší metafyzické bázi obsahuje relativně  $\infty^3$  partonů, jež jsou od sebe odděleny  $\infty^{-2}$  širokými interpartonovými prostory. Konečná hmota obsahuje  $\infty^2$  partonů, s interpartonovými prostory šířky  $\infty^{-2}$ .

$\infty^{-1}$  hmota obsahuje vůči nám nekonečné množství partonů s interpartonovými prostory šířky  $\infty^{-2}$ , vůči sobě samé však obsahuje  $\infty^2$  partonů s interpartonovými prostory šířky  $\infty^{-2}$ , stejně jako konečná hmota v našem světě i konečná hmota ve světě nekonečně velikých pozorovatelů.

Opět tedy narážíme na relativismus.

Problém však není ani zdaleka tak složitý, jak by se na první pohled mohlo zdát.

Opět totiž záleží na různosti pohledu soustav, lišících se od sebe o nekonečno, na jedinou popisovanou soustavu.

Při řešení problému se tentokrát docela dobře obejdeme bez metafyziky.

Stačí si pouze uvědomit, že parton, coby „ $TO^{-1}$ “ má relativně nepředstavitelně tlustou stěnu.

Proto tedy  $\infty^{-1}$  pozorovatel, vnímá pro nás nekonečné množství partonů, jako  $\infty^2$  množství partonů, které by navíc z našeho pohledu měly mít pro něho rozměr  $\infty^{-1}$  a přesto jsou pro něho veliké  $\infty^{-2}$ .

Záleží zkrátka na tom, kde začíná pozorovatel parton vnímat.

Teprve  $\infty^{-2}$  malý pozorovatel považuje za parton, pro nás „ $TO^{-2}$ “, neboť  $\infty^{-2}$  malý pozorovatel je sám součástí našeho partonu, to jest „ $TO^{-1}$ “, což se o  $\infty^{-1}$  pozorovateli říci nedá, a právě proto považuje za parton ještě tutéž strukturu co my.

Stejně tak i  $\infty^{-3}$  pozorovatel považuje za parton totéž co  $\infty^{-2}$  pozorovatel.

Hmototvorný partonprostorový parametr ( 13.1 ) je ve zdánlivém rozporu s Einsteinovou obecnou teorií relativity zaručující neomezenou stlačitelnost, tj. omezenou tvrdost konečného tělesa v nesingulárním stavu konečné hmoty.

Uvědomíme-li si však, že vůči nám je mezi konečnem a nekonečnem  $\infty^{-1}$  hranice, umožňuje nám to stlačit hmotu až těsně na hranici  $\infty^{-1}$  (jedná se o krajně extrémní řešení – tzv. **rozvinutý S-faktoriál** ozn.

$\overline{|S|}$ ).

Jakmile se dotkneme hranice, přestává být jasné, zda se ještě pohybujeme v konečnu a zda nikoliv.

Partonprostorový parametr ( 13.1 ) tedy ve skutečnosti není v rozporu s OTR.

## 8: Život vesmíru

Jak již bylo řečeno, atomy, které tvoří každý vesmír, se dají do nekonečna dělit na stále menší a menší elementy, až dospějeme ke partonům s jejich interpartonovými prostory.

Vezmeme-li tedy  $\infty^2$  partonů, ze kterých se skládá vesmír a nekonečně násobně zmenšíme jejich interpartonové prostory, vznikne jedna relativně téměř nekonečně malá částice s partonprostorovým parametrem  $\infty^2 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-3})$ , ve které bude soustředěna veškerá energie jež hýbe vesmírnými tělesy a dává hvězdám světlo a teplo.

Na rozdíl od Multiversa je vesmír relativně konečný – zakřivený – zatímco Multiversum je relativně nekonečné, obsahujíc v sobě nekonečné množství vesmírů.

Oba však vznikají dosti podobným způsobem.

Zatímco v Multiversu se nachází minulost, přítomnost i budoucnost naráz, ve vesmíru existuje stálá přítomnost.

Krom toho, bindu Multiversa (velká binduární fáze) je na rozdíl od „bindu“ vesmíru (malá binduární fáze) konečné a obsahuje  $\infty^3$  partonů, schopných vytvořit opět nekonečné Multiversum.

Vznik vesmíru se odvozuje od vesmíru který zde existoval již dříve a tedy předcházel současné verzi vesmíru, v níž se nyní nacházíme a jejíž jsme součástí.

Poté, co se tzv. **otcovský vesmír** smrští do pranepatrného bodu, střetly se dvě rozdílné úrovně – první z nich byla klesající, reprezentovaná objemem onoho bodu, a druhá byla stoupající reprezentovaná zvětšováním se potenciální energie bodu, jež rostla nepřímo úměrně jeho objemu.

To vyvolalo tzv. **velký třesk** při němž se veškerá energie nahromaděná v tomto bodě opět vyfoukla po celém objemu kupovesmíru, vytvořivše ony známé 4 vesmíry a 4 antivesmíry.

Nabízí se zde přirozená možnost přirovnání vesmíru ke gigantickému živému organismu.

Nejen, že se v něm otáčí planety okolo svých hvězd podobně, jako se pohybují elektrony okolo jader atomů z nichž je složen každý živý organismus. Nejen, že se v něm pohybují obří galaxie tak, jako buňky

v každém z nás. Nejen, že se v něm rozpínají a opět smršťují gigantické supergalaxie, podobně jako tepe naše srdce. A nejen, že má vesmír také duši, danou mu zákonem vývoje. Ale on je též obdařen základním atributem každé hmoty jež si činí nárok na to býti nazývána živou – totiž schopností své vlastní reprodukce. Zemře-li jeden vesmír, zanechá zde potomka. Zemře-li jeden vesmír, narodí se nový.

## 9: Vlastnosti prostoročasu

Hledíme-li na oblohu, přichází k nám světlo hvězd z různě velikých vzdáleností a tedy i s různým zpožděním, způsobeným konečností rychlosti světla.

Např. Slunce je od nás vzdáleno 8 světelných minut, což znamená, že povrch slunce spatřujeme se zpožděním 8 minut.

Okraje pozorovatelného vesmíru leží ve vzdálenosti necelých 14 miliard světelných let, a proto je pozorujeme v čase kdy došlo k velkému třesku a následné **vesmírné inflaci** tj. onomu „rozfouknutí“ prostoročasných rozměrů vesmíru, o němž jsme hovořili v předchozím odstavci.

Z toho plyne, že i když sestrojíme sebelepší pozorovací techniku, nemůžeme dohlédnout do větší vzdálenosti, než je oněch 14 miliard světelných let, neboť z těchto vzdálenějších oblastí k nám od počátku vesmíru ještě nestačil dospět žádný signál letící rychlostí světla.

Z klasického relativistického hlediska tedy existuje jistý **horizont**, zpoza něhož k nám již žádné signály nepřicházejí.

Horizont je však ve skutečnosti pouhou iluzí způsobenou retardací elektromagnetického signálu.

V místech, kde my pozorujeme horizont, může existovat planeta obydlená inteligentními bytostmi, které hledíc na oblohu směrem k naší Zemi, namísto naší sluneční soustavy zde spatřují okamžik velkého třesku, tj. horizont.

Když však tento vzdálený pozorovatel pohlédne do nám již nedostupného pásma, tj. do oblasti za naším horizontem, spatří další velký třesk ve vzdálenosti 14 miliard světelných let od své planety.



V prostoročase s Eukleidovskou geometrií by to tedy znamenalo vzdálenost 28 miliard světelných let od Země.

Taktéž na celé své pozorovatelné obloze, jejíž pouze malá část je součástí naší pozorovatelné sféry, spatří tento pozorovatel horizont ve vzdálenosti 14 miliard světelných let od své planety.

Ani v této vzdálenosti se však již celých 14 miliard let žádné velké třesky nenalézají.

I zde tedy mohou žít pozorovatelé, jež by již mohli hledět do vzdálenosti 42 miliard světelných let od Země, atd.

Z logického prodloužení tohoto myšlenkového postupu by plynul zřejmý paradox, že ačkoliv vesmír vznikl před konečnou dobou a rozpínal se konečnou rychlostí, přesto se rozprostírá do nekonečných dálek a obsahuje nekonečné množství hmoty.

Ba co víc, v jakémkoli konečném čase po velkém třesku musely již být rozměry vesmíru nekonečné.

Hranice pozorovatelného vesmíru jsou totiž od pozorovatele (nezávisle na jeho okamžité poloze ve vesmíru) vzdáleny vždy tolik světelných sekund, kolik sekund již uplynulo od velkého třesku. První sekundu po velkém třesku byla tedy dohlednost necelých 300 000 km.

V čase 0,00003 sekundy po velkém třesku ležela hranice pozorovatelného vesmíru dokonce pouhý 1 km od pozorovatele.

Vidíme, že mnohé zákony zachování by byly tímto tvrzením narušeny.

Jediným rozumným východiskem z tohoto problému se stala obecná teorie relativity, z níž vyplývá, že prostoročasová geometrie je za přítomnosti hmotných těles odlišná od Eukleidovy – prostoročas je zakřiven.

To znamená, že hypotetický pozorovatel na našem horizontu, hledící do hlubin vesmíru ve směru od planety Země, ve skutečnosti nehledí na oblasti vzdálené od Země oněch zmíněných 28 miliard světelných let alébrž na oblasti které se mohou nacházet třeba i v těsné blízkosti naší planety.

Záleží pouze na průměrné hustotě hmoty ve vesmíru, která určuje stupeň jeho zakřivení.

Naneštěstí se ukazuje, že v pozorovatelné části vesmíru není dostatečné množství zářící hmoty, aby se vesmír mohl úplně uzavřít do sebe a stát se tak konečným.

Dnes, když kosmologové objevili ve vesmíru tzv. **skrytou hmotu** – neviditelnou látku, která však tvoří snad až 99 % vesmírné hmotnosti, jsme sto vypočítat, že již vesmír o průměru  $10^{11}$  sv. l. se úplně uzavře. Z toho, co jsme se až dosud dozvěděli, jsme již schopni sestavit vcelku realistický obraz kupovesmíru.

Zobrazení provedeme ve dvourozměrné analogii trojrozměrného prostoru.

Již ve třetím odstavci jsme se dozvěděli, že aby mohl vesmír existovat, musí se nalézat ve spojení s dalšími třemi vesmíry a čtyřmi antivesmíry.

Jedině takto je každý element této soustavy dokonale stabilní.

Jinak by nemohl existovat ani vesmír, ani antivesmír.

Na obr. 13.19 jsme si mohli prohlédnout průřez kupovesmírem.

Vydeme-li z inflačního scénáře, byl vesmír po velkém třesku vyfouknut do vzdálenosti  $10^{10}$  sv. l. a to během zlomku sekundy, snadno sestrojíme následující graf.

Tab. 13.2

Rychlost rozpínání v násobcích [c]	Poloměr horizontu v miliardách sv. l.	Celkový poloměr vesmíru v miliardách sv. l.
4	19,921875	50
3,5	19,84375	45
3	19,6875	40
2,5	19,375	35
2	18,25	30
1,5	17,5	25
1	15	20
0,5	10	15
-----	-----	10
-----	-----	5
-----	0	0

Rychlost rozpínání okrajů vesmíru, jež jsou od nás vzdáleny cca.  $5 \cdot 10^{10}$  sv. l., činí  $4c$ .

Přítom hranice pozorovatelného vesmíru (horizont) se od nás nyní vzdaluje zhruba rychlostí světla.

V místech, kde se hranice vesmíru setkává s hranicí antivesmíru, se okraje rozpínají rychlostí  $2c$ , čímž, dle Zoevistianovy pohybové tabulky (viz kapitola 12), tvoří předěl mezi hmotou a antihmotou.

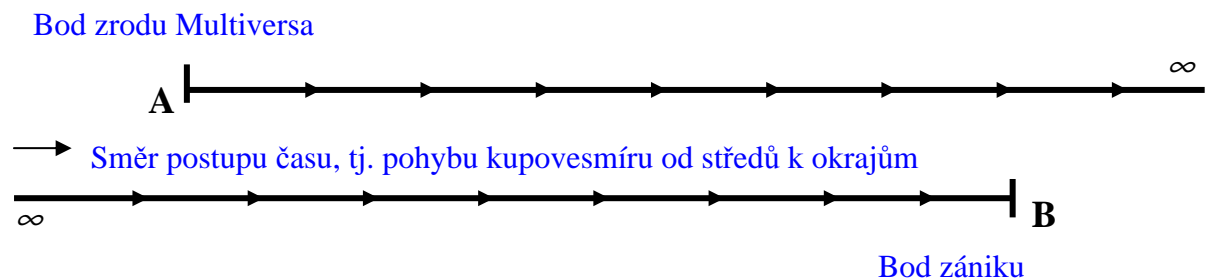
## 10: Vlastnosti nekonečna

Abychom mohli o něčem prohlásit že jest to konečné, musí to být z našeho hlediska omezeno z obou stran (počátek a konec) a to v konečnu.

My si však pro lepší pochopení znázorníme opačnou situaci.

Ukončení polopřímky bodem A značí počátek existence našeho vesmíru, který vznikl před cca 14 miliardami let.

Obr. 13.22



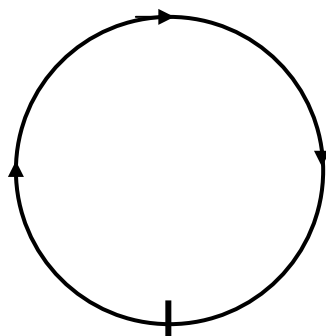
Zánik nekonečné časové posloupnosti vesmíru a jeho potomků, označený bodem B, je nekonečně vzdálen od bodu A.

Ocitneme-li se uprostřed této, pro nás nyní polopřímky, budou od nás vzdáleny oba konce A i B nekonečno konečných časových jednotek, což znamená, že zmíněná polopřímka již vůči nám bude přímkou.

I my se ve skutečnosti nacházíme v této situaci, neboť náš vesmír je jen jedním článkem nekonečného řetězce neustálých reinkarnací stále jednoho a téhož vesmíru.

Z topologického hlediska je každá přímka kružnicí o poloměru  $r = \infty$ , jak ukazuje obr. 13.23.

Obr. 13.23



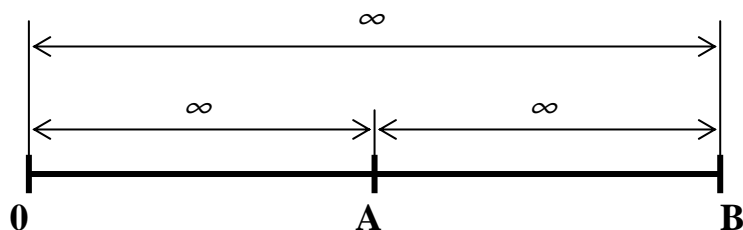
Body **A, B** = počátek i konec = bindu

Znázorníme-li si tedy nekonečno kružnicí z obr. 13.23, zdá se nám, že je konečná.

Avšak pro nekonečně malé pozorovatele např. v bodě C kružnice, je stejně nekonečná, jako přímka na obr. 13.22 znázorňující délku naší existence.

Pro nekonečně velké pozorovatele je však tato přímka pouze kružnicí o konečném poloměru.

Obr. 13.24



Obrázek 13.24 nám ukazuje, že polovina jakéhokoliv nekonečna je vždy rovna celku.

Je-li tedy za námi  $\infty t$ , můžeme se nalézat v bodě A a potom je před námi rovněž  $\infty t$ .

Co když se však nalzáme v bodě B?

Znamenalo by to snad, že před námi již není žádná budoucnost?

Z poznatku, že  $\infty + \infty = \infty$  však jasně plyne, že bodem B můžeme kdykoliv nahradit bod A, a délka grafu 13.24 se tím okamžitě zdvojnásobí.

Neustálým opakováním tohoto postupu dospíváme k závěru, že úsečku v grafu 13.24 lze ve skutečnosti prodloužit až k asymptotickému nekonečnu.

Tento jednoduchý myšlenkový experiment zároveň nabízí jednoduchou a elegantní definici nekonečna:

„Čím více času (resp. prostoru) je za námi, tím více ho zbývá před námi“.

Odtud plyne, že nejdříve vzniká to nejnekonečnější, a poslední také zaniká (výše popsaný princip budeme nadále nazývat **zákonem nekonečna**). Stáří Multiversa je tedy nekonečné.

Jednoduché srovnání s průměrnou životností pozemských živočichů evokuje možnost existence přímé úměry mezi objemem korpu a průměrnou životností živočišného druhu, jemuž daný korpus náleží.

Nekonečné Multiversum „žije“ tedy vůči nám nekonečný život.

Pro něj je však tento život stejně konečný, jako náš život pro nás.

Když jednou veliký Budha, pohroužen do hluboké meditace, hovořil s Absolutnem, řekl mu: „I ty jsi smrtelný“.

Bůh mu na to odpověděl: „Mrazí mne z tebe, Budho“.

## 11: Dialektické úrovně

Co jsou vlastně ony záhadné dialektické úrovně?

Jedná se o světy oddělené od nás nekonečnem.

Např. **vyšší dialektickou úrovní** nazýváme potomka našeho Multiversa po velké fázi bindu.

Podobně, **nižší dialektickou úrovní** nazýváme předka tohoto Multiversa.

Ta by pak ležela na opačné straně nekonečna – (Čas závisí čistě jen na pohybu kvantionu a proto pod pojmem vyšší dialektická úroveň rozumíme vždy svět nalézající se vůči nám v  $\infty^{-1}$ , zatímco nižší dialektickou úrovní chápeme svět nacházející se od nás za  $\infty$ ).

Vyšší, či nižší dialektické úrovně se vždy nalézají vůči nám takový interval za nekonečnem, jaký interval se my nacházíme od vzniku tohoto Multiversa.

Toto je nejobecnější definice dialektické úrovně, jíž se budeme v dalších odstavcích striktně přidržovat.

Pod pojmem **nejvyšší dialektická úroveň** budeme rozumět poslední fázi naší existence spojenou s aktem povýšení na „TO“ těsně před vypuknutím velké fáze bindu.

Podle partonprostorového parametru ( 13.1 ) zjišťujeme, že ač jsme sebevíce relativní, přesto vůči sama sobě existujeme, což je mimochodem vcelku příjemné zjištění.

Ovšem naše civilizace na jiné dialektické úrovni, se vším co ji obklopuje, ať již nekonečně malá, či na nižší dialektické úrovni, vůči nám relativně neexistuje, neboť je pro nás prakticky nedosažitelná. Ona však vůči sobě existuje a vůči ní naopak relativně neexistujeme my.

Toto je též pádným důvodem proč vskutku nemá smysl počítat se světy za hranicemi „TO“ jako s nějakými jinými dialektickými úrovněmi.

Nyní je správný čas zavést matematickou funkci zvanou  **$S_a(n)$ -faktor** jež nám dovoluje vyjádřit hodnoty různých čísel nahlížených z různých soustav navzájem oddělených nekonečnem (tj. dialektických úrovní). Obecně platí:

$$S_a(n) = \frac{a}{n} . \quad ( 13.2 )$$

Tedy např.  $S_k(\infty^{-2}) = \infty^2$  ;  $S_\infty(\infty^{-2}) = \infty^3$  ;  $S_\infty(\infty^2) = \infty^{-1}$  ; atp.

Položíme-li si nyní otázku, jaké je pro nás to, co je nekonečné pro nekonečného pozorovatele, znamená to řešit rovnici

$$S_x(\infty) = \infty . \quad ( 13.3 )$$

Řešením je  $x = \infty^2$ .

Podobně bychom se mohli ptát o jednu dialektickou úroveň níže a obdrželi bychom odpověď  $x = \infty^3$ , atd.

Jelikož Multiversum obsahuje nekonečné množství dialektických úrovní různého stupně a každá dialektická úroveň bude mít své vlastní bindu, činí celková kapacita Multiversa neuvěřitelných  $\infty^\infty$ .

## 12: Vlastnosti „TO“

Vyjdeme-li nyní z předpokladu, že se na naší metafyzické rovině musíme nacházet vždy mezi počátkem a koncem nekonečna, dospíváme k závěru, že nás vždy obklopují dvě nekonečna a to střed Multiversa:  $\infty^{-\infty}$ , a okraj Multiversa:  $\infty^{\infty}$ .

Uvažujeme-li tedy Multiversum nikoliv z našeho individuálního pohledu, alébrž z hlediska jeho celkové kapacity, dostáváme

$$(\infty)^{\infty} - (\infty)^{-\infty} = \infty^{\infty} . \quad ( 13.4 )$$

Nejmenší průměr „TO“ je pak shodný s nejvyšší kapacitou Multiversa vyjádřenou vztahem ( 13.4 ).

Fáze bindu, požírajíc Multiversum od jeho vnějších okrajů směrem ke středu (do budoucnosti), pohlcuje i „TO“ směrem od jeho okrajů vnitřních k vnějším, kterých však nikdy nemůže dosáhnout.

Tímto procesem se relativně zvětšuje meziprostor mezi Multiversem a „TO“, který je však také relativní, neboť fáze bindu probíhá pouze nekonečnou rychlostí.

Fáze bindu to tak činila odnepaměti a vždy tak činiti bude.

Dokud je však bindu pro nás relativní, tak nám od ní nic nehrozí.

Z matematického hlediska (viz zákon nekonečna), se totiž vždy musíme nacházet uprostřed nekonečna, bezpečně vzdáleni od jeho počátku i konce, tj. též od okamžiku vlastního zániku.

Z čistě praktického hlediska není rozdíl mezi  $\infty$  a  $\infty^{\infty}$ , neboť dostat se za hranice nekonečna je pro nás prakticky stejně nedosažitelné, jako dostat se za hranice  $\infty^{\infty}$ .

Překročíme-li však přesto (čistě teoreticky) hranice nekonečna, dostáváme se na jinou dialektickou úroveň.

Světy se tedy vždy po, resp. za nekonečnem znovu opakují.

Je však jisté, že fáze bindu se k nám prokouše až za  $\infty^{\infty} t$  po svém vzniku.

My však víme, že fáze bindu již kdesi u okrajů Multiversa dávno nastala, avšak nevíme, před jakým časem se tak stalo.

Je tedy vskutku těžké předpovědět, kdy přesně nás fáze bindu pohltí. můžeme se tedy jednoho krásného dne proměnit v „Nic“ aniž bychom si stačili uvědomit, že již není virtuální bindu, alébrž my samotní?

Na tuto otázku se pokusíme odpovědět ihned v následujících odstavcích.

Již nyní však můžeme s jistotou konstatovat, že „TO“ pohltí fáze bindu nejpozději, přesněji řečeno nikdy.

Každý svět se totiž dělí na nekonečno světů, z nichž každý se opět větví na nekonečno dalších světů.

Tyto nekonečné násobky nekonečen v podobě jakýchsi rozvětvených soustav se sbíhají v „TO“, kde se opět sdružují a sjednocují.

„TO“ tedy působí jako sjednotitel všech možných metafyzických světů – tzv. **hypergrup**, i dialektických úrovní.

Není také divu, neboť „TO“, jakožto nejnekonečnější entita za níž již není relativně ani času ani prostoru a ani energie, obepíná celé Multiversum. Dá se vyčíslit pouze nekonečnou řadou nekonečných mocnin nekonečna:

$$\infty^{\infty^{\infty^{\dots^{\infty}}}}, \quad (13.5)$$

nebo stručněji

$$\overline{\infty}, \quad (13.6)$$

což nazýváme **supermocninou** nekonečna.

Můžeme však říci že „TO“ počíná hodnotou  $\infty^\infty$  a pokračuje stále dál až na hodnotu (13.6), nebo je jak minusovou, tak i plusovou řadou nekonečných násobků nekonečen na nekonečnou, vyplňujíc relativně „prostor“ bez hranic? Odpověď na tuto otázku se brzy dozvíme.

### 13: Malá binduární fáze

V pátém odstavci jsme si ukázali, že jakmile u okrajů Multiversa nastane fáze bindu, a kvantiony se přemění na midony, (což se děje neustále v každém okamžiku), tak se objeví midony v celém Multiversu na různých hypergrupách.

Z nich pak vznikají nové světy – (ten náš vznikl samozřejmě ve středu našeho Multiversa).

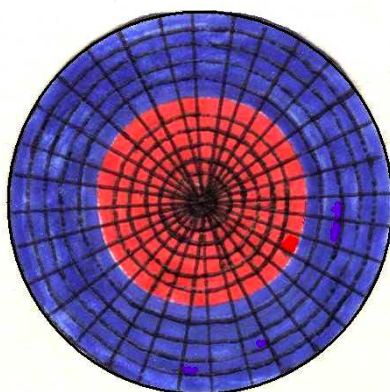


Jak již bylo také řečeno, lze si obecně představit absolutní Čas jako pohyb kvantionů od středů k okrajům Multiversa, a k němu přesně opačný pohyb midonů.

Ve středu Multiversa je absolutní budoucnost, ze které k nám přicházejí vesmíry v kvantionech.

My se podle zákona nekonečna nalézáme mezi budoucností a minulostí, které jsou na obr. 13.25 schematicky vyznačeny červenou a modrou barvou.

Obr. 13.25



Když se v absolutní budoucnosti ve středu Multiversa přemění kupovesmíry na midony, promítne se po čase tato tzv. **malá binduární fáze** (týkající se pouze vesmíru, nikoli celého Multiversa) do přítomnosti a ještě později do, vůči nám minulosti (viz modrá zóna).

Hmota se však musí do středu Multiversa také navracet, neboť energie ve středu Multiversa nemůže zaručit neustálou dodávku hmoty po dobu  $\infty t$ .

Tuto dodávku zajišťují právě virtuální midony.

Interakci mezi radiálními ČasoMultiversovými souřadnicemi našeho světa zajišťují axiální souřadnice (připomínám, že hovoříme o dvourozměrné analogii Multiversa).

Ve dvourozměrném případě přitom pokládáme čas za virtuální rozměr. Taktéž i souřadnice časového pohybu midonu budou virtuální a budou se tudíž nalézat mimo náš prostor, kdesi v metafyzické oblasti.

Odtud plyne, že midon lze lokalizovat pouze ve dvourozměrné potenciálové jámě, a to ještě v mimočasovém stavu.

Taková částice je v přírodě prakticky neregistrovatelná.

Jak již jsem však dříve řekl, lze ji uměle – „násilím“ – vtáhnout do našeho světa tak, aby s ním mohla na několik vzácných okamžiků vejít v interakci.

Lze to jen díky tomu, že její dva rozměry náležejí do našeho prostoru, což obrazně řečeno znamená, že ji při tom vtahování do našeho světa máme za co zachytit.

## 14: Velká binduární fáze

Jak již víme ze sedmého odstavce, je velká fáze bindu charakterizována partonprostorovým parametrem  $\infty^2 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-3})$  a je tedy vůči nám konečně veliká.

Z pohledu  $\infty$ , konečného a  $\infty^{-1}$  pozorovatele tedy vždy úplně jiná.

Tato skutečnost by pak mohla vésti k domněnce, že i my jsme relativně součástí bindu.

Tomu však nenasvědčuje pohled z žádné z dialektických úrovní, neboť nesouhlasí buď partonprostorové hodnoty, nebo reálná

ČasoMultiversová vzdálenost tohoto imaginárního bindu.

Důležitou úlohu zde ovšem hraje činitel, jež nazýváme **konečným nereálným prostoročasem**, a který vyplývá z poznatku, že mezi největším konečnem a nejmenším nekonečnem není praktického rozdílu.

Vzhledem k tomu, že velká fáze bindu nelikviduje objem Multiversa, nýbrž jeho celkovou kapacitu a to nekonečnou rychlostí, je od nás vzdálena prakticky  $\infty^\infty$  čas, ale pouze  $\infty$  prostorovou vzdálenost.

Z toho se zdá býti zřejmé, že i nás již dávno musela zachvátit velká fáze bindu, která pravděpodobně odnepaměti protéká Multiversem.

Tedy i my sami jsme tím, čeho se tolik obáváme, avšak, a to jest velmi důležité, pouze vůči světu  $\infty^{-1}$ , tj. vyšší dialektické úrovni.

Zdá se však, že oním bindu ve skutečnosti nejsme my, alébrž **konečný nereálný prostor**.

V opačném případě by to znamenalo, že bindu vlastně u hranic našeho Multiversa vůbec neexistuje, neboť jej nepozorujeme ani v našem světě.

Teorie bindu v nereálném konečném prostoročase tedy skvěle vyhovuje všem našim představám o konzistentní binduární teorii. Po této interpretaci se binduární teorie začíná vskutku jevit zcela logickou.

Zdá se, že bindu za nekonečnem pozvolna likviduje minulost, která je tak vzdálená, že již vlastně ani nemá právo existovat.

## 15: Extenze Multiversa

„TO“ – prapříčina Multiversa  $\infty^\infty$  se vůči nám rozprostírá svým rozsahem v intervalu

$$\left( \infty^{\infty-\infty}; \infty^{\infty^{atd}} \right). \quad (13.7)$$

Rozsah působnosti „TO“ je však daleko větší a činí rel.  $(0; \overline{\infty})$ .

Nabízí se však otázka, co jest prapříčinou „TO“, tj. „TO<sup>1</sup>“ ?

Odpověď je jednoduchá: prapříčinou „TO<sup>1</sup>“ je „TO<sup>2</sup>“ a prapříčinou „TO<sup>2</sup>“ je zase „TO<sup>3</sup>“. Takto lze snadno dojít třeba až k „TO<sup>∞</sup>“ i dále.

Již v předchozích odstavcích jsme si uvedli, že náš parton můžeme označovat jako „TO<sup>-1</sup>“. Znamená to, že naše „TO“ jest rovněž partonem pro jakýsi svět ležící daleko za kapacitou (13.6). Každé „TO“ je tedy zároveň i partonem.

Nekonečná mocinná řada nekonečen na nekonečnou jest maximální kapacitou „TO-árního prostoru“.

Tato řada nekonečen na nekonečnou je však pouze nekonečná.

Co však, kdybychom tuto řadu poněkud prodloužili tím, že její délku budeme násobit další nekonečnou řadou nekonečen na nekonečnou.

Tak nám vznikne  $\overline{\infty}$  dlouhá řada nekonečen na nekonečnou, což je kapacita „TO<sup>2</sup>“.

Nyní si představme, že „TO<sup>2</sup>“ se dá opět násobit relativně absolutní kapacitou „TO<sup>2</sup>“, čímž vznikne „TO<sup>3</sup>“.

Takto můžeme postupovat až k „TO<sup>∞</sup>“ a pak ještě dále, např. k

$$"TO^{\infty^{atd}}" . \quad (13.8)$$

Neustálým opakováním tohoto postupu, tj. prodlužováním mocninné řady „TO-árních prostorů“, spatříme teprve ony bezmezné světy pokračující od hranic „TO“, až – ani Bůh neví kam.

I v případě, že by se na těchto úrovních tzv. **Makroversa** neustále dokolečka opakoval náš svět, přesto již pouhá velikost těchto světů je nám natolik vzdálená, že se zcela vymyká lidskému chápání.

I co se týče počítání v jednotkách Makroversa, nevystačíme si většinou s běžnou matematikou.

Kapacitu „TO“ zapíšeme ještě snadno, z pomoci tří teček, či všem srozumitelné zkratky „atd“, používané v této knize.

Vyjádřit kapacitu „TO<sup>2</sup>“ však již znamená problém, neboť ani nejvyšší číslo běžné matematiky, jímž je  $\aleph = \infty^\infty$ , nám neumožňuje tuto kapacitu zapsat.

Nezbývá, než použít k vyjádření velikosti různých stupňů „TO“ samotný tento symbol.

Tak lze konstruovat např. „TO<sup>TO</sup>“, či dokonce „TO<sup>TO<sup>TO</sup>atd</sup>“.

Avšak matematika, která by byla schopna v reálném časoprostoru znázornit skutečnou velikost Makroversa, vyžaduje ještě radikálnější změnu. Jinak by totiž daný výraz vyplňoval všechny světy, jejichž velikost by se snažil znázornit.

Určité řešení nabízejí tzv. **rekurentní posloupnosti**, umožňující cyklický růst hodnoty výrazu nade všechny meze.

Příkladem cyklicky rostoucí hodnoty je vztah

$$\{y_1 = \infty ; y_{i+1} = \infty^{y_i}\} , \quad (13.9)$$

zvaný **makromocnina** nekonečna.

Každý „intra-TO-ární prostor“ je světem sám pro sebe, se svojí vlastní binduární fází. Nelze do něho nijak proniknout z jiného, ať již vyššího, či nižšího „intra-TO-árního prostoru“, ani jinak zasahovat do jeho vnitřního chodu.

Nastane-li ve světě spravovaném „TO<sup>2</sup>“ bindu, vše se shlukne do jednoho bodu. Všechny partony zmíněného světa, které jsou vůči nám „TO<sup>1</sup>“ se sjednotí v jedno jediné „TO“, které se po výbuchu bindu rozprostře vytvořivše opět Multiversum spravované „TO<sup>2</sup>“, což nazýváme povýšením „TO<sup>1</sup>“ na „Multiversum<sup>2</sup>“.

Tento akt však čeká „TO<sup>1</sup>“ až za  $\overline{\infty} t$ , vzhledem k relativně pomalejšímu běhu Času v nynějším „Prostoru<sup>2</sup>“.

Totéž se za další  $\overline{\infty} t$  stane s „TO<sup>2</sup>“, poté s „TO<sup>3</sup>“, atd.

Je-li „TO<sup>1</sup>“ povýšeno na „Multiversum<sup>2</sup>“, musí se zvětšit vůči sama sobě  $\infty^3$  krát.

Jeho „intra-TO-ární prostor“ se však kupodivu zároveň musí zvětšit  $\overline{\infty}$  krát, aby se mohl stát „partonem<sup>2</sup>“, neboli „TO<sup>1</sup>“ (měřeno z našeho nynějšího pohledu).

Toto se samozřejmě neděje najednou, neboť jak jsem již řekl, Čas uvnitř „intra-TO-árních prostorů“ s různým exponentem plyne různou rychlostí.

Jak se ukazuje, jsou „TO“, Multiversum i parton pouze různé názvy pro relativně tutéž energetickou entitu. Můžeme je relativně rozlišit pouze prostřednictvím názvu a exponentu.

Parton byl pro nás až doposud názvem značícím nejmenší částici prostoru. Nyní však vidíme, že i toto tvrzení je relativní, neboť slůvko „parton“ se dá dle potřeby umocňovat.

Náhle zde tedy máme kouzelné slůvko, jímž můžeme vyjádřit kteroukoliv stavební součást Multiversa, i Makroversa.

Zdá se až neuvěřitelným, že celý ten složitý mechanismus lze bez potíží vměstnat do jediné pranepatrné částice.

Že celé nepředstavitelně obrovské Makroversum je pouze projevem partonu v jeho nekonečně rozličných podobách.

## 16: Neurčité výrazy

Paradoxy nekonečna vycházejí ještě více na povrch v okamžiku, kdy začneme zkoumat matematické rovnosti, nazývané **neurčitými výrazy**. Uveďme si alespoň některé z nich:

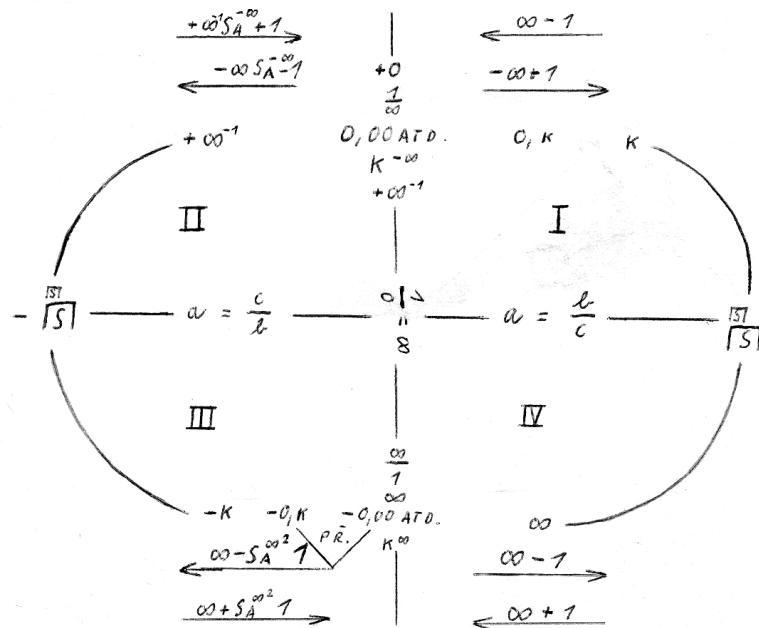
$$\begin{aligned} \infty - \infty &= k \\ &= \infty^k \\ &= 0 \end{aligned} \tag{13.10}$$

$$\sqrt[\infty]{\infty} = -\sqrt[\infty]{\infty} = \sqrt[\infty]{\infty^{-1}} = \infty^{-1} \cdot \infty = k. \tag{13.11}$$

Jak vidíme, mnohé výrazy se nám dosti nepříjemně větví. Jedině matematická dohoda stanovující, či alespoň upřesňující výsledky těchto výrazů může tyto neurčitosti zredukovat.

Na následujícím obrázku je znázorněn **matematický obraz ČasoMultiversa** se všemi vepsanými ČasoMultiversovými hodnotami, jež mu náleží.

Obr. 13.26



Tento obrázek představuje topologicky zakřivené Multiversum. Za použití  $S_a$ -faktoru zde dochází ke ztotožnění:

$$\begin{aligned} \infty^1 &= -0 \\ &= -k \end{aligned} \tag{13.12}$$

$$\infty^{-1} = +0 . \quad ( 13.13 )$$

K dalšímu podobnému ztotožnění dojde, když použijeme neurčitou hodnotu, do níž vepíšeme  $S_a$ -faktor:

$$\begin{aligned} \frac{0}{0} &= 1 \rightarrow S_a \\ &= 0 \rightarrow S_a \end{aligned} \quad ( 13.14 )$$

Po transformaci přes  $S_a$  tedy dostáváme

$$S_a(0) = 1 \equiv k , \quad ( 13.15 )$$

$$S_a^\infty(k) = \infty^{-1} = 0 . \quad ( 13.16 )$$

## 17: Úvod do topologické fyziky

### a) Základy teorie topologického rozptylu

Světelný paprsek se v konečném světě šíří takřka přímočaře. Z pohledu nekonečného světa má však světlo nekonečný rozptyl. To znamená, že potenciální paprsek, který vyrazil ze svého zdroje v konečném světě obejme za nekonečno let celé Multiversum.

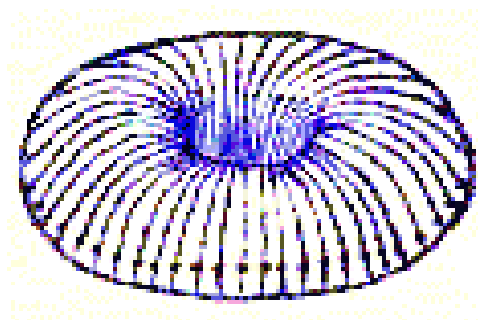
Obr. 13.27



Z obrázku 13.27 plyne, že se v nekonečnu jeví přímočarý rozptyl jako rozptyl rádiusový, obepínající úhel  $2\pi$ .

To znamená, že ve dvourozměrném řezu pozorujeme tento nekonečný rozptyl (který se však v našem světě může jevit jako přímočarý pohyb, tj.  $\infty^{-1}$  rozptyl) jako dva kruhy dotýkající se v jednom bodě, neboť paprsek se posléze (za  $\infty t$ ) opět napojí na svůj zdroj. Z toho dostáváme celkový trojrozměrný obraz Multiversa (viz obr. 13.28).

Obr. 13.28



Podotýkám, že se zde řeší čistě teoretická úloha topologické fyziky, která by se přirozeně nedala nikdy realizovat.

Na obrázku 13.28, který znázorňuje klidový obraz Multiversa (nikoliv však v bezčasové dimenzi), tedy zákonitě vidíme  $\infty^k$ , což je jeho běžná kapacita pro naše dimenze.

Budeme-li ovšem ve zdrojovém bodě otáčet zdrojem paprsku rychlostí  $v = \infty$  a budeme-li dále předpokládat, že paprsek letí rychlostí  $v = \infty$  (buď totiž budeme čekat nekonečno roků, nebo budeme uvažovat rychlejší pohyb záření, které pak obletí Multiversum za konečný čas), změní se nám tvar Multiversa z toroidu na kouli.

Vyvinutí rychlosti  $v = \infty$  v konečném světě, by se však neobešlo beze změn na struktuře Multiversa, jak uvidíme v příštích odstavcích (krom toho, při přímočarém pohybu rychlostí  $v = \infty$  přestáváme v konečném světě existovat).

Roztočíme-li však zdroj světla konečnou rychlostí, potom se okraje Multiversa budou pohybovat nekonečnou rychlostí a zanechají za sebou „světelnou“ tzv. **Prostorovou stopu**.

Tím vznikne nekonečná koule tvořená nekonečným potenciálních Prostorů, z nichž pouze jeden bude relativně skutečný.

Každý z těchto Prostorů bude mít opět tvar toroidu.

Všechny se budou navzájem překrývat, čímž vytvoří veškeré metafyzické úrovně, tj. hypergrupy.



pozoruhodná je též skutečnost, že z pohledu nekonečného pozorovatele (tj. pozorovatele z dekanentní mikročástice  $\infty$ ) se zdroj světla nebude pohybovat vůbec, a samotné Multiversum se bude pohybovat pouze konečnou rychlostí (znovu podotýkám, že zde ztotožňujeme světelný paprsek s Multiversem, což vždy nemusí být z fyzikálního hlediska adekvátní, výborně se to však hodí pro názornost našeho výkladu).

Nekonečné Multiversum vytvořené relativním pohybem konečného prostoru bude tedy pouze potenciálním, což je dalším důkazem toho, že se Čas pohybuje směrem od středu k okraji Multiversa a že nemůžeme o něčem tvrdit, že to existuje či neexistuje.

Rovněž i my sami jsme vůči  $\infty^{-1}$  světu nekonečným světem, tedy i život, prostor, čas, hmota a pohyb jsou jen projevy pouhé iluze, které vnímáme jen proto, že my sami jsme onou iluzí.

Iluzí něčeho vyššího, co nás řídí a přitom je samo pouhou iluzí čehosi ještě vyššího až k tomu nejvyššímu, jímž je „TO“.

„TO“ jest rovněž čísi iluzí, ale již ne pro nás.

Kdybychom neuznali relativní pravost „TO“, potom by se celý svět rozpadl v jedinou obrovskou iluzi, která by se však neměla komu zdát a proto by rázem zanikla.

Naučit se relativisticky uvažovat znamená chápat širší souvislosti a poodhalovat tím roušku tajemství Multiversa a bytí, jež nás obklopují od počátku věků.

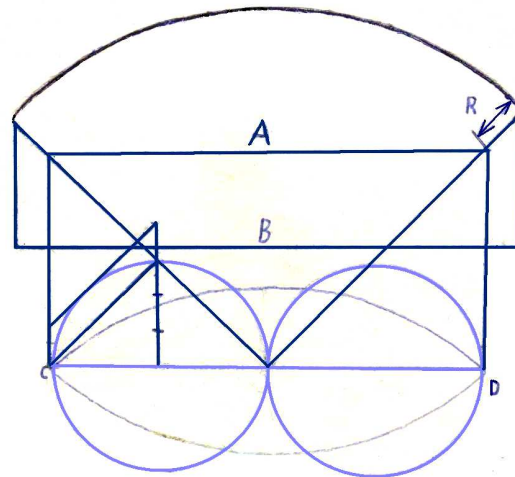
### *b) Základy teorie topologické fokusace a defokusace*

Z topologického poznatku, že přímka je kruh o poloměru  $r = \infty$  zákonitě vyplývá zakřivení celkového Multiversa ve směru všech jeho souřadných os. Odtud vychází radiální defokusace ČasoMultiversa udávaná konstantou  $\infty \cdot 2\pi$ .

Přeneseme-li si tuto radiální defokusaci do našeho konečného světa, redukuje se konstanta  $\infty \cdot 2\pi$  na  $2\pi$ .

Nyní již můžeme srovnávat defokusaci radiální s rovinnou, k čemuž nám poslouží obrázek 13.29.

Obr. 13.29



Zde je patrný rozdíl mezi výslednicemi defokusace radiální **A** a rovinné **B**, jenž v našem případě činí cca. 10 mm, což je  $1/(2e)$  z nejvyšší radiální defokusace, která je dána vzdáleností bodů **C** a **D**. Za body **C**, **D** registrujeme fokusovanou, tj. klasicky nedostupnou oblast (cosi jako cizí hypergrupa, či jiná dialektická úroveň).

Rozdíl radiální a rovinné defokusace určuje parametr  $R$ .

Vynásobením tohoto parametru dvojkou a následným umocněním obdržíme možnost pracovat se dvěma rozměry namísto relativního jednoho.

Dalším vynásobením konstantou  $\pi$  dostaneme celkový obsah dvourozměrné radiální fokusace.

Aplikujeme-li stejnou matematickou operaci na fokusaci, získáme hodnotu pro kladnou radiální defokusaci.

Úpravou faktoru  $R$  dospíváme k situaci, kdy se vypuklé zakončení radiální defokusace, mění ve vyduuté zakončení radiální fokusace.

Poté se zužuje, až nakonec splývá s bodem, ze kterého kužel světelného záření vystoupil.

Tento proces nazýváme  **$\lambda$ -transformací**.

V případě, že kužel vychází z onoho bodu do všech směrů, pak se všechny směry stávají defokusací a fokusací zároveň.

To však platí pouze tehdy, nedojde-li v bodech **C**, **D** ke vzájemné anihilaci fokusace s defokusací.

Z kvantové elektrodynamiky však jednoznačně plyne, že k takovéto vzájemné negaci obou protiběžných světelných kuželů v zásadě dojít nemůže.

Z předchozího plyne, že k přechodu nedegenerovaného radiálního zakončení kužele do defokusace nemůže dojít, neboť při nejširším rozpětí kužele, které je rovno délce úsečky **CD**, dochází k redukci radiálního zakončení na nulu, takže ve chvíli, kdy se souřadnice fokusace dotknou bodů **C** a **D**, začne se radiální zakončení postupně zplošťovat až dosáhne úplné rovinnosti, splynuvši s úsečkou **CD**. Zde je vysvětlení, jak je možná existence rovinných těles ve světě za nekonečnem, ač se to zdá být na první pohled v příkrém rozporu se základními principy topologie.

Přestože by se toto řešení mohlo jevití vysoce nestabilním, jakmile si uvědomíme, že se zde řeší problém konečně rychlého pohybu v nekonečném světě, který navíc probíhá nepřetržitě, potom časová stabilita  $\lambda$ -transformace na úsečce **CD** je více než zřejmá.

Jelikož střed radiálního zakončení se redukuje původní přímkou rychlostí kuželu, potom se vzdáleností od středu radiálního zakončení se rychlost zpomaluje, až v bodech **C**, **D** úplně vymizí.

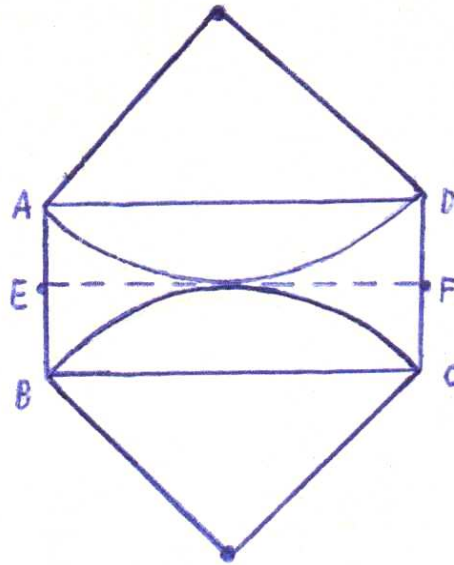
To trvá až do konce  $\lambda$ -transformace.

Vzhledem k tomu, že radiální zakončení rovinné defokusace má výšku rovnu  $2R$ , pak vydělením této hodnoty rozdílem rovinné a radiálního defokusace a vynásobením konstantou  $\pi$ , získáme vzorec pro výšku radiálního zakončení radiálního rozptylu:

$$h = \frac{R \cdot e \cdot \pi}{2} . \quad (13.17)$$

Zdvojnásobíme-li ji, získáme celkovou hodnotu  $\lambda$ -transformace, která relativisticky zpomaluje okraje radiálního zakončení v blízkosti bodů **C** a **D**, což má za důsledek přeměnu konvexního radiálního zakončení v konkávní, během přechodu radiální defokusace v radiální fokusaci. Tento děj výborně zachycuje obrázek 13.30, který je pro lepší názornost lineárně rozkreslenou radiální defokusací a fokusací z obrázku 13.29.

Obr. 13.30

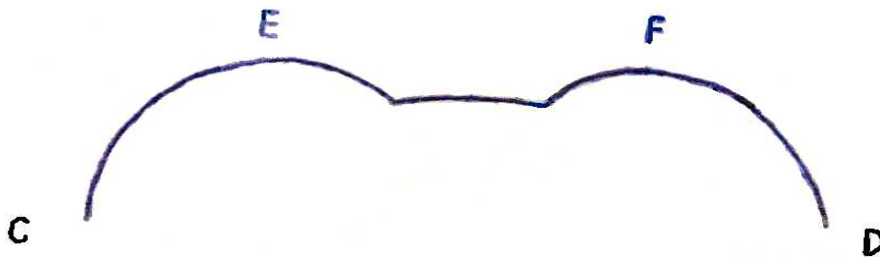


Výška obdélníka **ABCD** jest  $\lambda$ -transformací, pro níž platí

$$\lambda = \pi \cdot R \cdot e . \quad ( 13.18 )$$

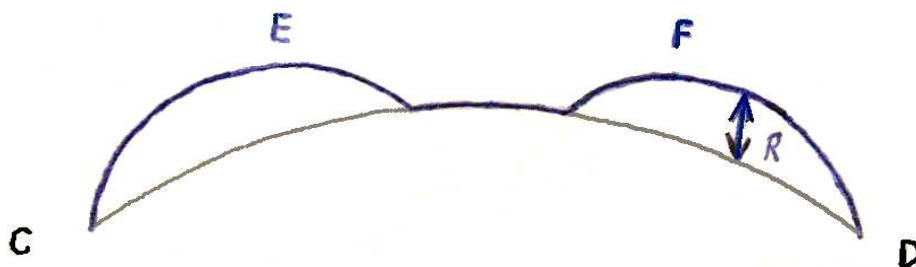
Když se však nyní znovu podíváme na radiální defokusaci a fokusaci, zjistíme, že jejich zakončení není vůbec tvořeno pravidelným obloukem, alebrž superpozicí několika oblouků, jíž věrně zachycuje obrázek 13.31.

Obr. 13.31



Odečtením  $\lambda$ -faktoru od maxim radiálního zakončení kužele radiální defokusace **E, F** však skutečně obdržíme pravidelný oblouk, kterak ukazuje obrázek 13.32.

Obr. 13.32



Totéž učiníme u fokusace a vše bude v pořádku, neboť ve chvíli, kdy se radiální zakončení dotkne svými vnějšími konci bodů **C**, **D**, tak již budou body **E**, **F** sníženy  $\lambda$ -transformací, která se v měřitelné hodnotě projeví již o faktor  $R$ , nad body **C**, **D**.

Odtud plyne, že k situaci znázorňované obrázkem 13.31 v praxi nikdy nemůže dojít.

### c) Topologické relativismy

Uvažujme nyní dvourozměrné případy (tloušťku čar zde nebereme v úvahu).

- 1) Necht' např. nekonečně malý pozorovatel vidí přímku.  
Pozorovatel z našeho světa ji však vidí jako 2 kružnice dotýkající se v jednom bodě. Nekonečně veliký pozorovatel vidí bod.
- 2) Pozorovatel z našeho světa vidí přímku.  
Nekonečně malý pozorovatel ji vidí také jako přímku, ale nekonečně veliký pozorovatel vidí dvě kružnice dotýkající se v jednom bodě.
- 3) Nekonečně veliký pozorovatel vidí bod.  
Konečný pozorovatel vidí úsečku a nekonečně malý pozorovatel vidí přímku.
- 4) Konečný pozorovatel vidí kružnici.  
Nekonečně veliký pozorovatel vidí bod, ale nekonečně malý pozorovatel vidí přímku.
- 5) Nekonečný pozorovatel vidí úsečku.  
Konečný, i nekonečně malý pozorovatel vidí přímku.

Takovýchto kombinací by se našlo ještě mnoho.

My se však zaměříme na příklady 2 a 5.

V těchto dvou příkladech je totiž demonstrován největší relativismus topologické fyziky.

Jediný rozdíl mezi těmito dvěma příklady je v ten, že to co je v př. 2 psáno na začátku, je v př. 5 psáno na konci a obráceně, co je na konci, je na začátku.

Výsledky by se tedy dle klasické logiky neměly lišit, a přesto se liší.

V př. 2 vidí nekonečně veliký pozorovatel dvě kružnice (v případě rozptýleného světelného kuželu by viděl dva kruhy, nikoliv dvě kružnice), kdežto v př. 5 vidí jednu úsečku, ačkoliv v obou případech vidí nekonečně malý i konečný pozorovatel totéž, tj. přímku.

Jednotlivé projekce spolu tedy vzájemně nekomutují.

Poněkud jiná pravidla budou platit v trojdimenzionálním světě:

- 1) Nekonečně malý pozorovatel vidí přímku.  
Konečný pozorovatel vidí nekonečné množství kružnic dotýkajících se v jednom bodě, tj. torus.  
Nekonečně veliký pozorovatel vidí bod.
- 2) Konečný pozorovatel vidí přímku.  
Nekonečně malý pozorovatel vidí přímku o konečné tloušťce.  
Nekonečně veliký pozorovatel vidí torus.
- 3) Nekonečný pozorovatel vidí bod.  
Konečný pozorovatel vidí kouli a nekonečně malý pozorovatel vidí nekonečně velkou plochu.
- 4) Konečný pozorovatel vidí nekonečnou plochu.  
Nekonečně malý člověk vidí  $\infty^2$  velkou plochu.  
Nekonečný pozorovatel vidí kouli.
- 6) Nekonečně veliký pozorovatel vidí úsečku.  
Konečný pozorovatel vidí přímku o konečné tloušťce.  
Nekonečně malý pozorovatel vidí nekonečně tlustou a  $\infty^2$  dlouhou přímku.

Jak je tedy vidět, Trojrozměrný svět se od dvourozměrného topologicky podstatně liší, avšak relativismus obou světů založený na pohledu z více různých soustav, oddělených vzájemně nekonečnem, je prakticky na téže úrovni.

Relativní je však i samotná relativita topologické fyziky.

Např. úsečku by měl nekonečně malý pozorovatel vnímat jako přímku o konečné tloušťce.

Nekonečně malý člověk se však domnívá, že my – koneční pozorovatelé – vnímáme onu přímku jako torus.

V topologické fyzice totiž výsledek dosti často může záviset na tom, ze které strany začínáme úlohu řešit.

Obecně tu tedy neplatí komutativita zobrazení.

Z neurčitého výrazu ( 13.10 ) plyne neurčitost nuly, díky které se skrze uzavírací hodnotu  $\infty^{-1}$ , dostává konečno na úroveň nuly.

Zde je krásně vidět, jak málo nás ve skutečnosti dělí od vyšší dialektické úrovně.

Je třeba si uvědomit, že vše co se týká nekonečna je pro nás relativní. Každé řešení, jehož výsledky jsou neurčité hodnoty je v principu správné.

Záleží tedy čistě jen na dohodě o způsobu úprav neurčitých výrazů, s nimiž jsme se podrobněji seznámili v odstavci 16.

Jaký význam však mají neurčité výrazy pro topologickou fyziku?

Zásadní, neboť i v topologické fyzice se zabýváme relativistickými pohledy, ze vzájemně nekonečně vzdálených světů.

Stejně jako u neurčitých výrazů, i v topologické fyzice stačí drobná úprava, jako např. převrácený náhled, a výsledek se radikálně změní.

Např. nekonečně malý pozorovatel si představuje, že přímka je pro nás kruhem.

Ona však může být klidně i úsečkou, stejně jako naše přímka může být úsečkou pro nekonečně velikého pozorovatele, což zdánlivě odporuje zákonům topologie, ale matematicky vzato jest to ve výborném souladu s výsledky neurčitých výrazů.

Bližším zkoumáním však dospějeme k jednomu obecnému topologickému pravidlu (budeme nyní uvažovat pouze jednorozměrný případ):

Naše kružnice musí být vždy přímkou pro svět  $\infty^{-1}$ , ale přímka světa  $\infty^{-1}$ , se vždy nemusí jevit našemu světu jako kružnice, alébrž i jako úsečka.

V převráceném smyslu se tedy i upravený neurčitý výraz stává opět neurčitým výrazem.

Na závěr tohoto oddílu si uvedeme ještě jednu topologickou zajímavost.

Roztočíme-li konečný kruh konečně velikou obvodovou rychlostí, potom absolutní střed tohoto kruhu setrvává v klidu.

Roztočíme-li však okraje kruhu nekonečně velikou rychlostí, dají se „okraje“ nekonečně malého středu tohoto kruhu, do konečně rychlého pohybu.

#### *d) Interdimenzionální ČasoMultiversum*

V našem světě existují 4 dimenze, z toho 3 prostorové a jedna časová. Pro nekonečně velikého pozorovatele začínají naše čtyři dimenze nekonečnem na minus prvou (tj. námi) a končí konečnem (tj. pro nás nekonečnem), to znamená na jiné dialektické úrovni.

Náš svět, začínající relativně nekonečnem na minus prvou a končící nekonečnem, je tedy z poloviny zcela jiný, než jak jej vnímá nekonečný člověk.

Interdimenzionální ČasoMultiversum a spolu sním i celá metafyzika, přímo závisí na topologických relativismech plynoucích z prostorové nekonečnosti.

Abychom si to poněkud přiblížili, uvedu zde několik příkladů z interdimenzionální topologické fyziky (upozorňuji, že zde nyní nebudeme uvažovat časovou dimenzi).

- 1) Úsečka se nekonečně malému pozorovateli jeví jako trojrozměrné těleso protažené do nekonečna, tj. čtyřrozměrné těleso.
- 2) Pětirozměrné těleso pro nekonečně malého pozorovatele, se nám jeví jako dvourozměrné těleso.
- 3) Šestirozměrné těleso pro nekonečně malého pozorovatele se nám jeví jako trojrozměrné těleso.

To znamená, že např. devítirozměrné těleso pro nekonečně malého pozorovatele, se nám jeví jako šestirozměrné těleso a to se jeví nekonečnému pozorovateli jako těleso trojrozměrné.

Dimenze tedy v Multiversu existují v neomezeném množství, avšak v každé části Multiversa se vždy nalézají pouze nepatrný zlomek z celkového počtu těchto dimenzí.

Zbytek je bezpečně ukryt v nepoznatelnosti.

Tím ovšem vzniká neomezené množství interdimenzionálních kombinatorických možností.



Soustředme se nyní na případ čtyřrozměrného tělesa.

V našem světě je totiž matematicky přijatelnější konstatování, že nekonečně malý pozorovatel vnímá čtvrtý rozměr prostorový jako trojrozměrné těleso protažené do nekonečna, zatímco my vnímáme čtvrtý rozměr coby jednorozměrné, popř. dvourozměrné těleso protažené rovněž do nekonečna.

Čtyřrozměrné těleso obecně chápeme jako zakřivený prostoročas odpoutaný od běžné hmoty, a co jest obzvláště důležité, jeho objem je konečný, úměrný  $a^4$ , kde  $a$  je délka pro nás čtyřrozměrného tělesa, měřená nekonečným pozorovatelem.

V tomto případě řešíme problém nekonečně tenkého, byť nekonečně velikého tělesa, a skutečnost, zda se toto těleso jeví našemu světu jedno-, či dvourozměrným, nemá žádný vliv na jeho objem, který se tímto stává konstantním.

#### *e) Topologická metafyzika*

Uvažujme dvourozměrný případ. Dvě rovnoběžné přímky pro konečného pozorovatele vnímá nekonečný pozorovatel jako čtyři, navzájem se křížící kruhy.

V jednorozměrném případě pak uvidí nekonečný pozorovatel jeden kříž.

To je důsledkem tzv. **topologické gravitace**, kterou se budeme podrobněji zabývat v odstavci 23.

Jak dvourozměrné, tak i jednorozměrné těleso je však pouze virtuální, neboť je nekonečně tenké.

Co jest však pro nás dvourozměrné, je pro nekonečně malého pozorovatele více než dvourozměrné. Krom toho, na nekonečně malý bod lze vměstnat nekonečné množství nekonečně malých světů ve smyslu interhypergrupárních forem existence.

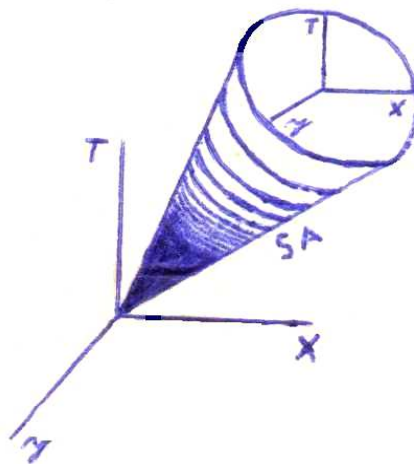
Na konečné těleso lze vměstnat nekonečné množství konečných forem hmoty a  $\infty^2$  množství forem hmoty nekonečně malé. Na nekonečné těleso lze potom vměstnat  $\infty^2$  množství konečné hmoty, nekonečné množství forem nekonečné hmoty a  $\infty^3$  množství forem hmoty nekonečně malé.

Topologická zajímavost těchto jevů tkví v tom, že nekonečně dlouhé těleso pro konečného pozorovatele, ať již se mu jeví jednorozměrným,

dvourozměrným, či trojrozměrným, je vnímáno nekonečným pozorovatelem vždy jako dvourozměrná topologická transformace. Jedná-li se však v pohledu konečného pozorovatele o dvě nekonečně dlouhá a rovnoběžná tělesa, potom se nekonečnému pozorovateli jeví jejich topologická transformace vždy jednorozměrnou, z čehož plyne, že dochází zákonitě ke vzájemné topologické gravitaci obou těles. Vyjděme nyní z metafyzických vlastností ČasoMultiversa a ukažme si některé další poznatky z toho vyplývající.

Bod je pro nás nultou dimenzí, zatímco pro nekonečně malého pozorovatele jest to trojrozměrný svět (viz obr. 13.33).

Obr. 13.33



Úsečka je pro nás první dimenzí, pro nekonečně malého pozorovatele jest to čtvrtá prostorová dimenze, neboť vnímá její hloubku a šířku, avšak nevnímá již délku.

Čtverec je pro nás dvoudimenzionální, pro nekonečně malého pozorovatele je však pátou dimenzí, neboť z něho vnímá již jen hloubku.

Krychle je pro nás trojrozměrným útvarem, zatímco pro nekonečně malého pozorovatele je šestou dimenzí, neboť již z toho tělesa nevnímá nic.

Pro nás čtvrtá dimenze prostorová (trojdimenzionální přímka) je pro nekonečného pozorovatele dvou a půl dimenzí, neboť ji vnímá jako prostorový torus s nekonečně tenkými stěnami (rozuměj, nekonečno kružnic dotýkajících se v jednom bodě).

Jak jste si jistě všimli, byli jsme nuceni vytvořit desetinnou hodnotu dimenze, neboť povrch trojrozměrného tělesa je pouze uzavřenou dvourozměrnou plochou, která se však z vnějšku jeví jako trojrozměrné těleso, tj. potřebuje ke své existenci trojdimenzionální prostor. Jest to tedy jakýsi hybrid mezi dvoudimenzionální plochou a trojdimenzionálním tělesem.

Z úprav neurčitých výrazů nám však plyne, že by měl nekonečný pozorovatel vnímat úsečku, tj. jednorozměrný útvar.

To tedy znamená, že 1,5 dimenze se nám kamsi ztrácí

a pravděpodobně přibývá na konto nekonečnému pozorovateli.

Odtud vychází, že neurčitý výraz před úpravou udává skutečný pohled nekonečného pozorovatele, zatímco neurčitý výraz po úpravě odráží naši představu o tom, co by měl nekonečný pozorovatel ve skutečnosti vidět. Transformace dimenzionálních hodnot je tedy přirozenou vlastností nekonečna.

Pro nás pátá dimenze se nekonečnému pozorovateli jeví jako trojrozměrný objekt. Po transformaci nám však vychází těleso dvourozměrné. Jest to způsobeno tím, že náš čas je vůči nekonečnému pozorovateli nulový a trojrozměrné těleso se v nulovém čase redukuje v důsledku teorie relativity na těleso dvourozměrné.

To znamená, že nikoliv samotné nekonečné Multiversum, nýbrž jedině nekonečné resp. nekonečně malé ČasoMultiversum má schopnost transformovat své dimenze na topologicko – metafyzické bázi.

#### *f) Dialektické úrovně pohledem topologické fyziky*

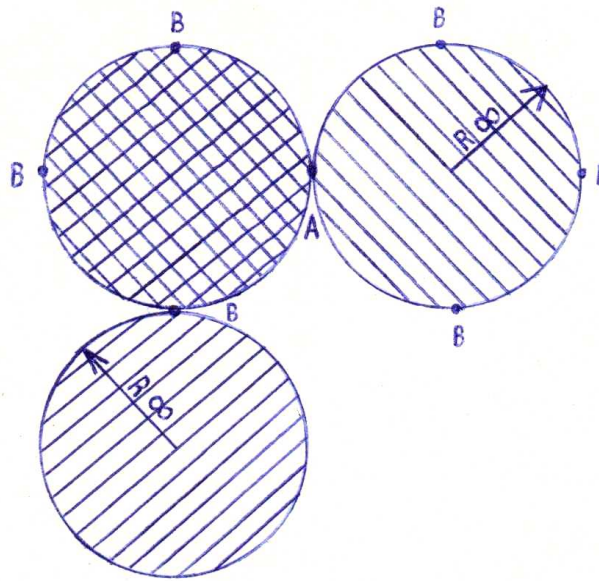
Dvourozměrné nekonečno se, jak již víme, bude jevit nekonečnému pozorovateli jako dva kruhy dotýkající se v jednom bodě **A**, ve kterém se nalézá náš svět (viz obr. 13.24).

Nižší dialektickou úroveň vnímáme za nekonečnem, tj. za body **B**.

Potom 1/2 nižší dialektické úrovně (na obr. 13.34 šrafována po vedlejší diagonále), musí zasahovat do naší dialektické úrovně (šrafována po hlavní diagonále) a 1/2 leží mimo ni.

Totéž však může říci jiná dialektická úroveň o naší dialektické úrovni.

Obr. 13.34



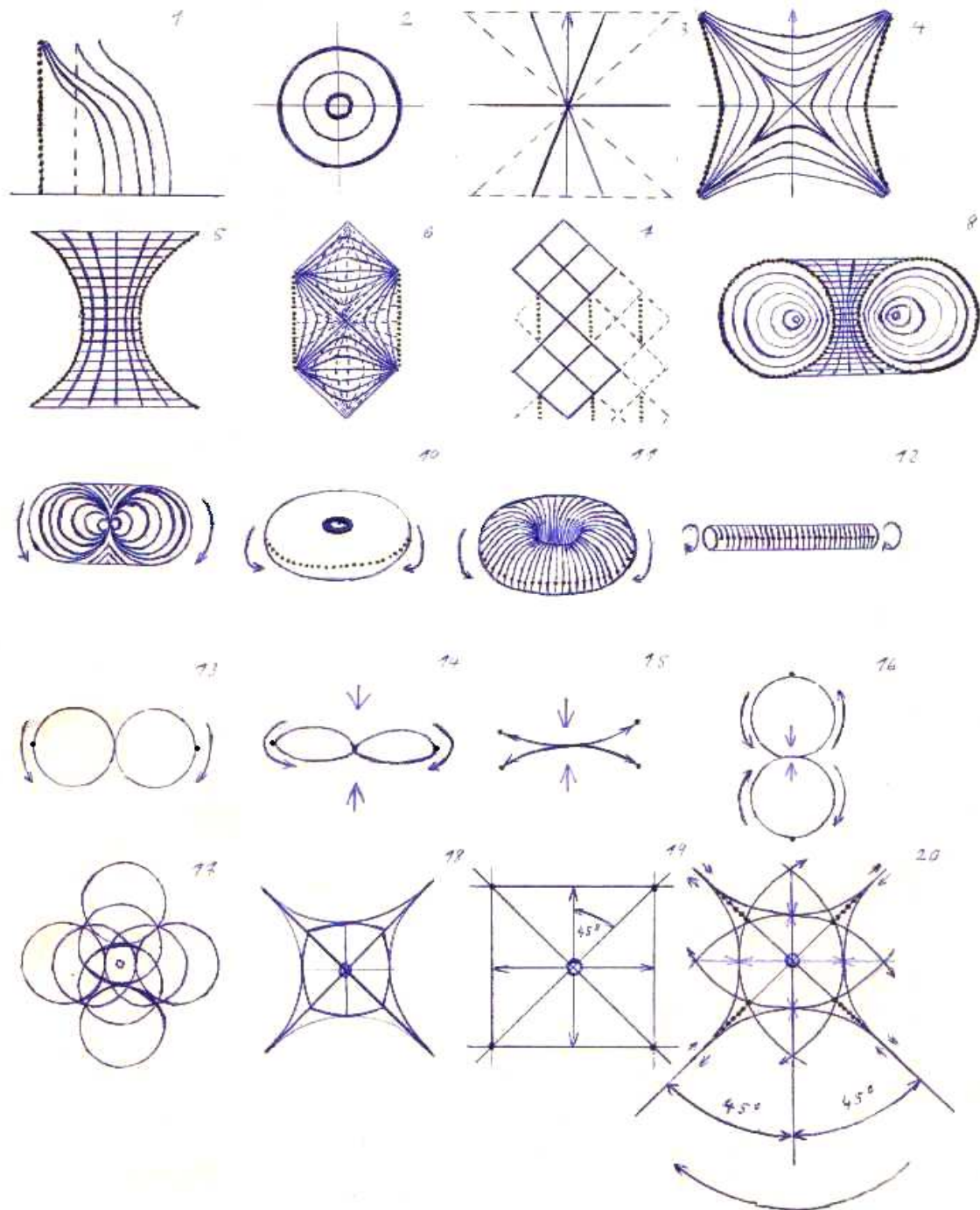
Tedy hovoříme o **parakompaktním souvislém topologickém homeomorfismu s diferencovatelnou varietou prostorových souřadnic**. Neexistuje tedy přesná hranice mezi dvěma dialektickými úrovněmi.

Naše dialektická úroveň má ve skutečnosti jak s vyšší, tak i s nižší dialektickou úrovní společného cosi, co nazýváme světem elementárních částic – **mikrokosmem**.

Blíže se k této problematice vrátíme v odstavci 23.

Na závěr pohledme na následujících 20 obrázků, jež jsou přímým dokladem skutečnosti, že jedině podrobným topologickým rozbořením lze dospět k co nejpřesnějšímu zobrazení ČasoMultiversa.

Obr. 13.35



Jsou na nich rozkresleny jednotlivé kroky topologického rozboru možností cestování v čase, jimiž se budeme zevrubněji zabírat v následujících odstavcích.

## 18: Partonová puma a partonový akcelerátor

Nyní, když jsme se již poměrně dokonale seznámili se základními statickými vlastnostmi ČasoMultiversa, můžeme pomalu přikročit k popisu vlastností dynamických.

V úvodu tohoto odstavce si vysvětlíme na partonprostorové úrovni několik klíčových jevů, abychom porozuměli konstrukci dvou veledůležitých zařízení jejichž funkce je celá založena na partonové fyzice, jejíž základy byly nastíněny v sedmém odstavci.

Jak již bylo řečeno, partonové záření obsahuje  $\infty^2$  partonů s interpartonovými prostorami  $\infty^{-1}$ .

Vzniká zvětšením konečné hmoty na velikost Multiversa, nebo  $\infty^{-1}$  hmoty na velikost konečného světa.

Toto záření je schopno vyvinout nekonečnou rychlost, což se stalo základem Zoevistianovy speciální teorie relativity, zabývající se možnostmi praktického uskutečnění cesty časem.

Bindu obsahuje  $\infty^3$  partonů s interpartonovými prostorami  $\infty^{-3}$ .

Jeho relativní třaskavá energie je tudíž nepředstavitelná.

Jest to způsobeno tím že bindu je bodem konečných rozměrů, v němž je nahuštěna energie celého nekonečného Multiversa.

Jedná se však o Multiversum nekonečné z čistě jen našeho pohledu, neboť např. pro  $\infty^{-3}$  pozorovatele není třaskavá energie našeho bindu o nic větší nežli třaskavá energie našeho Multiversa vůči nám, tj. prakticky nulová.

V 7. odstavci jsme si uvedli, že každá konečná hmota obsahuje  $\infty^2$  partonů, o průměru  $\infty^{-2}$ .

Tak lze např. ze špendlíkové hlavičky vytvořit celý vesmír (eneární mikročástici 1), nebo cosi ještě většího.

Na partonové úrovni se takto může hmota zvětšovat i zmenšovat, aniž bychom pozorovali změny v její hustotě.

Její vnitřní struktura se relativně vůbec nemění, neboť partonů se tyto změny relativně vůbec netýkají, (nedochází ke změnám partonprostorového parametru).

Právě tento poznatek se stal základem technologie vývoje samohroutících se hmot.

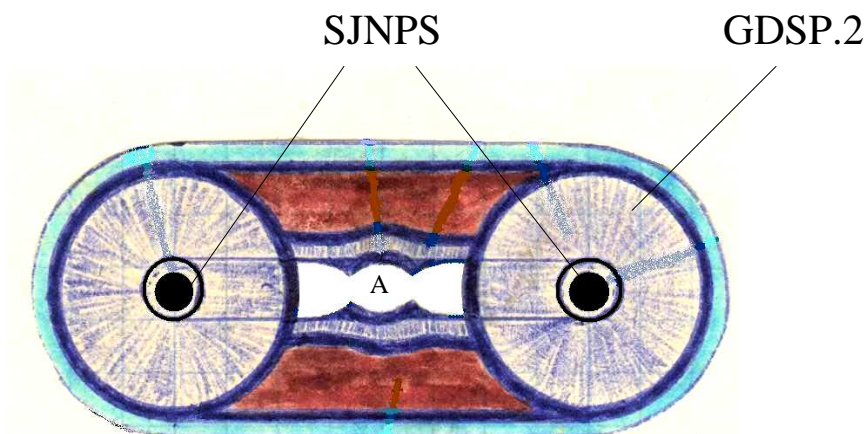
Na tomto principu pracuje i partonová puma, schopná v okamžiku vyvolat makrární štěpnou reakci, při které se celé Multiversum vlastní

energií rozpadne na partony, které se ihned kompakťují do jediného bodu, po jehož explozi se partony opětovně rozmístí po Multiversu.

Tím nabudou partonprostorového parametru  $\infty^3 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-2})$  a vytvoří falešné vakuum.

Na obr. 13.36 vidíme schéma partonové pumpy.

Obr. 13.36



Vysvětleme si nyní stručně její princip: po odpojení GDSP2 na obou koncích pumpy, dojde ke vzájemnému přitáhnutí obou SJNPS, jež se v sektoru A spojí, čímž dojde k nekontrolovatelnému samohroucení hmoty.

Kritické množství SJNPS má totiž schopnost anihilovat hmotu přeměnou na partonové záření.

Vzniklé kritické množství se tedy, ve snaze anihilovat samo sebe, počne samohroutit.

Při samohroucení se hmota jádra přeměňuje na bindu o energii

$$E = \frac{\infty^2 \cdot E_1}{k \cdot E_2}, \quad (13.19)$$

(viz odstavec 19) na něž se bleskově začne nabalovat celé Multiversum.

Ze vztahu ( 13.19 ) plyne, že hmota o takovýchto energetických hodnotách se dlouho pohromadě neudrží.

Vzápětí tedy musí dojít k explozi celého Multiversa s epicentrem v bindu, při níž bude dovršena makrární štěpná reakce, jejímž následkem se celé Multiversum, resp. jednotlivé kupovesmíry rozštěpí na partony o partonprostorovém parametru  $\infty^3 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-2})$ , bez partonoenergetických hodnot, umožňujících hmototvornou interpartonovou interakci.

Z toho plyne, že tzv. **falešné vakuum** vyplní virtuální Multiversum, a vše začne od začátku tak, jak tomu bylo na počátku věků.

Hlavním činitelem umožňujícím explozi partonové pumy je vytvoření tzv. **nahé singularity**, tj. prostoročasové singularity jež není kryta horizontem událostí.

Taková singularita bývá tunelem vedoucím ke znovuzrození pohlcené hmoty~energie na vyšší dialektické úrovni.

Zoevistianova obecná teorie relativity ovšem nepřipouští takový horizont, o němž hovoří relativističtí fyzikové, okolo žádného kolapsaru.

Nejde zde pouze o bezčasově dilatační řešení, nýbrž i o to, že gravitace kolapsaru je příčinou pádu těles, stejně jako je v Einsteinově speciální teorii relativity rychlost příčinou dilatace času.

Tato dilatace času se však zpětně nijak neprojevuje na rychlosti objektu vzhledem ke klidovému pozorovateli, což má za následek kontrakci délek.

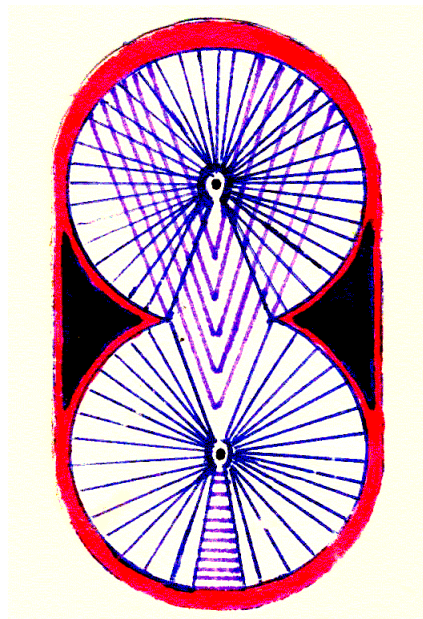
Výše uvedených poznatků o konstrukci partonové pumy, lze přirozeně využít i pro nedestruktivní účely.

Např. pro výrobu superhmotných a antihmotných jader umožňujících cestování rychlostí kvantionu, nekonečnou rychlostí a v neposlední řadě též cestování v čase.

Na obr. 13.37 si můžeme prohlédnout konstrukci tzv. **partonového akcelarátoru**.



Obr. 13.37



Jedná se o modifikovanou partonovou pumu, kde uvolněná energie nesměruje do centra, ale brž ven z akcelérátoru.

Její proud je usměrněn tak, aby se vyvinula nekonečně veliká reaktivní síla udělující akcelérátoru nekonečné zrychlení.

Použijeme-li samostatný partonový akcelérátor, dojde k relativistickým jevům, jež by vypadaly zhruba následovně:

V urychlovači uplyne  $\infty t$ , zatímco vůči urychlovači uplyne v okolním vesmíru  $\infty^{-1}t$ .

Z pohledu inerciální soustavy spojené se Zemí však uplyne naopak  $\infty t$  za  $\infty^{-1}$  okamžik uplynuvší v akcelérátoru.

Tento fyzikální jev si vysvětlíme v následujících odstavcích.

Prozatím nám postačí křížové pravidlo, které nám relativistickým vykrácením zjištěných ČasoMultiversových výsledků ukazuje, že na Zemi sice uplyne  $\infty t$ , ale bude to trvat rovněž  $\infty t$ .

Vůči nám se tudíž vůbec nic nezmění.

Vůči pozorovateli za nekonečnem, tj. na jiné dialektické úrovni se ovšem náš čas skutečně urychlí.

To znamená, že v okamžiku spuštění partonového akcelérátoru se svět za nekonečnem dostane na naši úroveň za svých  $\infty t$ , což však vůči nám bude trvat pouze  $\infty^{-1}t$ .

To je též důkazem, že na všech dialektických úrovních je to úplně stejné.

Že se tedy relativně různé dialektické úrovně od sebe časově vůbec neliší, pokud od sebe nejsou vzájemně prostorově vzdáleny ob nekonečno dialektických úrovní.

To je však prakticky nemožné, neboť by se již vlastně nejednalo o dialektické úrovně, alebrž o hypergrupy.

O možnostech praktického využití partonového akcelérátoru se dozvíme více již v následujících odstavcích.

## 19: Energie

Energie je základní stavební složkou Multiversa.

Energii obecně definujeme jako korpuskulu etheru, tj. produkt zákona nekonečna.

Parton poté popisujeme jako nejmenší kvantum energie na naší dialektické úrovni.

Účinek uvolnění energie závisí na čase, za který se energie uvolní. Zavedeme proto veličinu zvanou **výkon energie** vztahem:

$$W = \frac{dE}{dt} . \quad ( 13.20 )$$

Konečná energie uvolněná v čase  $\infty^{-1}t$  tedy vyvolá výkon energie  $W = \infty$ .

Parton při své běžné rychlosti  $v = k$ , tj. parton s parametrem ( 13.1 ), obsahuje energii  $E = \infty^{-1}$ .

$\infty^{-1}$  – hmotě tedy odpovídá konečná energie a konečné hmotě, energie nekonečná.

Partonová energie  $E = \infty$  obsažená v konečné hmotě, uvolněná za  $\infty^{-1}t$ , má výkon  $W = \infty^2$ .

To odpovídá partonprostorovému parametru  $\infty^2(\infty^{-2} + \infty^{-1})$ , viz partonový akcelérátor, či partonová raketa.

Pokud bychom tuto partonovou energii dokázali uvolnit v čase  $\infty^{-2}t$ , získali bychom samozřejmě energetický výkon  $W = \infty^3$ , atp.

Dokážeme-li tedy uvolňovat energii v dostatečně krátkých časových intervalech, pak můžeme dosáhnout účinků, blížících se svým rozsahem a intenzitou nejvyšší energii Multiversa.

Poznámka: v tomto odstavci budeme zcela ignorovat partonprostorové hodnoty vyplývající z metafyzické analýzy.

Budeme bráti v úvahu pouze partonprostorové hodnoty platící pro naši prostoročasovou formu existence.

Z metafyzického hlediska, jak víme, totiž neobsahuje konečná hmota  $\infty^2$  partonů, alébrž obecněji  $\infty^k$  partonů.

Tomu se však relativně přizpůsobí i všechny ostatní partonprostorové hodnoty.

Např. partonů s parametrem  $(\infty^{-2} + \infty^{-k})$  lze do konečné hmoty vtěsnat právě ono metafyzicky potřebné množství  $\infty^k$ .

Je však třeba respektovat fakt, že zmenšení interpartonových prostor o menší hodnotu než má sám parton, nemůže nikdy způsobit takovéto radikální zvýšení obsahu partonů v témže objemu hmoty.

To je důvod, proč nelze ztotožňovat naši formu partonové energie s metafyzickou partonovou energií.

Např. z  $E = \infty^2$  uvolněné v  $\infty^{-3}t$ , získáme výkon

$$W = \frac{\infty^2}{\infty^{-3}} = \infty^5 \quad [j \cdot s^{-1}]. \quad (13.21)$$

Štěpením konečné hmoty na partony se uvolňuje nekonečná energie. Rozštěpit konečnou hmotu na partony o parametru  $(\infty^{-2} + \infty^{-1})$  tedy vyžaduje uvolnit konečnou energii za  $\infty^{-1}t$ .

Přitom dosahuje výkon energie hodnoty

$$W = \frac{\infty}{\infty^{-1}} = \infty^2 \quad [j \cdot s^{-1}]. \quad (13.22)$$

Hmota má konečnou pružnost, neboť díky svému partonprostorovému parametru  $(\infty^{-2} + \infty^{-2})$  je hmota stlačitelná konečněkrát.

Jiné parametry, nežli  $(\infty^{-2} + k)$ , jsou již v Multiversu zcela nereálné.

Při maximálním stlačení jakéhokoliv partonprostorového parametru, tj.  $(\infty^{-2} + \infty^{-2})$ ,  $(\infty^{-2} + \infty^{-1})$ ,  $(\infty^{-2} + k)$ , se vždy ustaví jediný dokonale stabilní partonprostorový parametr

$$k \cdot \infty^2 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-2}) , \quad (13.23)$$

kde velikost partonu  $\infty^{-2} = konst.$

Velikost interpartonových prostor je nezávislá proměnná, spolu s prvním činitelem výrazu ( 13.23 ), udávajícím velikost prostorového objemu, v němž se daný partonprostorový parametr uvažuje.

Konečně druhý činitel, udávající množství partonů  $n$ , je závisle proměnná určovaná interpartonovou prostorou  $d$  a prvním činitelem  $V$ , vztahem

$$n = \frac{V}{d} , \quad (13.24)$$

kde veličinu  $V$ , tj. první činitel výrazu ( 13.23 ), budeme nazývat **sumární prostor**.

Jestliže vlivem zvýšení velikosti interpartonové prostory  $d$  a současného snížení množství partonů  $n$  v konstantním sumárním prostoru  $V$ , dochází ke zvýšení celkové energie sumárního prostoru, potom energie obsažená v množství ubyvších partonů je rovna energii vyzářené do sumárního prostoru, která je kvantována samotnými interpartonovými prostory.

Mechanisticky si to lze představit jako prudké rozpínání sumárního prostoru.

Energeticky vyjádřeno, dochází k vyzáření energie kumulované původními partony, nyní zatlačenými mimo sumární prostor, tj.

$$\frac{k \cdot \infty^2 \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-2})}{t_k} \equiv \frac{E_k}{t_{\infty^{-1}}} = T_{\infty} , \quad (13.25)$$

$$\frac{k \cdot \infty \cdot (\infty^{-2} + \infty^{-1})}{t_k} \equiv \frac{E_{\infty}}{t_{\infty^{-1}}} = T_{\infty^2} , \quad (13.26)$$

$$\frac{k \cdot k \cdot (\infty^{-2} + k)}{t_k} = \frac{E_{\infty^2}}{t_{\infty^{-1}}} = T_{\infty^3} . \quad (13.27)$$

Teorie partonů – **kvantová etherodynamika** – ukazuje, že čím lehčí je částice, tím vyšší je tzv. **intenzita její vnitřní energie**, a tím rychleji se tato částice může pohybovat (tím menší setrvačné síly působí proti jejímu urychlování).

Pojem intenzity vnitřní energie představuje vlastně poměr velikostí **vnitřní energie částice**, kterou budeme značit  $E_1$ , a tzv. **vnější energie**  $E_2$ , jež je reprezentována odporem který klade částici samotný prostor, a který je přímo úměrný její hmotnosti.

U částic s  $\infty^{-1}$  hmotností je intenzita vnitřní energie rovna

$$I_E = \frac{E_1}{E_2} = \frac{k}{\infty^{-1}} = \infty . \quad ( 13.28 )$$

Vztah, kdy vnější energie klade vnitřní energii odpor, jenž závisí na velikosti její hmotnosti  $m$ , můžeme vyjádřit pohybovou rovnicí

$$v = \sqrt{I_E} = \sqrt{\frac{E_1}{E_2}} = \sqrt{\frac{E_1}{m}} . \quad ( 13.29 )$$

To znamená, že částice se mohou pohybovat prostorem rychlostí až  $v = \infty$ .

Nyní bude stát za to, vysvětlit si některé běžné termíny používané v moderní fyzice a uvést je do souladu s tím, co zde až dosud bylo řečeno.

Z teorie relativity plyne, že vedle částic s nenulovou klidovou hmotností existují i částice s nulovou klidovou hmotností (např. fotony, gravitony, gluony a další) a pouze tyto se mohou pohybovat ve vakuu rychlostí světla.

Předně je třeba si uvědomit, že se zde neřeší otázka pohybu, alebrž otázka bytí a nebytí oné příslušné částice.

O částici, jež neexistuje nemůžeme totiž zároveň tvrdit, že setrvává v klidu.

Foton se při interakci s látkou rozpadá na partony, které excitují zasaženou látku, a posléze z ní unikají v podobě dalších nejrůznějších kvant.

Již z elementární kvantové mechaniky vyplývá závěr, že žádná částice ve skutečnosti nemůže existovat ve stavu naprostého klidu.

Že prostoročas je tvořen jedině a pouze pohybem a že tedy i baryonická látka, coby jistá forma oscilujícího silového pole má v podstatě nulovou klidovou hmotnost, neboť v absolutním klidu prostě přestává existovat.

Musíme zkrátka pohlížet na částice, jako na cosi, co i když relativně setrvává v klidu, ve skutečnosti stále jemně vibruje, čímž zabraňuje svému vlastnímu zániku.

Je-li tedy konečná částice v relativním pohybu rychlostí  $c$  (včetně rychlosti její **hmototvorné vibrace**), její energie bude mít velikost  $E = \infty$ .

Jestliže by se, čistě teoreticky, nějak podařilo uvést tuto částici do stavu klidu, dostala by se na úroveň s energií

$$E_0 = m \cdot c^2 = k, \quad (13.30)$$

(kde  $m$  je její původní hmotnost), které říkáme **relativistická klidová energie** částice.

Této energii by samozřejmě odpovídala nová hmotnost částice:

$$m_0 = \infty^{-1}.$$

Klidová hmotnost je tedy u každého, za pohybu konečněhmotného tělesa i částice, rovna  $\infty^{-1}$ , nikoliv však absolutní nule:

$$0 = \infty^{-\infty^{\infty^{\infty^{\dots}}}}. \quad (13.31)$$

Celková energie pohybujícího se tělesa je součtem energie hmototvorné vibrace a kinetické energie jeho translačního, popřípadě i rotačního pohybu a je tedy vždy vyšší, než samotná energie hmototvorné vibrace.

Pohybující se těleso má kinetickou energii  $E_k$  dānu známým vztahem

$$E_k = \frac{m \cdot v^2}{2}, \quad (13.32)$$

a celkovou energii

$$E_v = E_k + E_0 + E , \quad ( 13.33 )$$

kde  $E_0$  je relativistická klidová energie daná vztahem ( 13.30 ),  $E$  je energie hmototvorné vibrace.

Povšimněme si, že  $E_k$  není, na rozdíl od vzájemně neoddělitelného součtu energií  $E_1 = E_0 + E$ , neomezená.

Uvažujme nyní srážku dvou nekonečně tvrdých těles.

Každé z nich necht' obsahuje  $\infty^2$  partonů, tj. energii  $E = \infty$ .

Při srážce obou těles v rychlosti  $v = k$ , dojde k uvolnění výkonu

$$W = \frac{E_k}{t} = \frac{k}{\infty^{-1}} = \infty . \quad ( 13.34 )$$

Tento výkon způsobí rozpad obou nekonečně tvrdých těles na tělesa s vnitřní energií  $E = \infty$ , tj. tělesa s konečnou tvrdostí.

Při srážce v rychlosti  $v = \infty$ , bude platit

$$W = \frac{E_k}{t} = \frac{\infty}{\infty^{-1}} = \infty^2 , \quad ( 13.35 )$$

kde čas  $t$  interakce zůstává stejný, neboť se stejnou měrou zvýšila rychlost, ale i dráha na níž spolu obě tělesa interagují.

Podobně, při srážce rychlostí  $v = \infty^{-1}$ , máme např.

$$W = \frac{E_k}{t} = \frac{\infty^{-1}}{\infty^{-1}} = k . \quad ( 13.36 )$$

Jelikož tedy nekonečné zvýšení rychlosti tělesa způsobuje zároveň nekonečné zvýšení jeho hmotnosti, znamená to, že i hmotnosti jednotlivých partonů musejí růst.

Parton s parametrem  $(\infty^{-2} + \infty^{-1})$  má tedy hmotnost  $m = \infty^{-1}$  tj. energii  $E = k$ , a nazýváme jej **urychleným partonem**.

Energie konečného tělesa pohybujícího se rychlostí  $v = \infty$  je tedy  $E = \infty^2$ , což je též celková energie partonového akcelérátoru (viz obr. 13.27 ) během jeho pohybu napříč Multiversem.

Rozdíl mezi pohonnou látkou partonové rakety, jíž tvoří urychlené partony a samotnou hmotou rakety, je pouze ve směru, jímž je energie partonového záření soustředována.

Zatímco proud pohonného partonového záření se po uplynutí lhůty  $t = \infty^{-1}$  mění v „Nic“, tj. nabývá parametru  $(\infty^{-2} + k)$ , hmota rakety v průběhu letu nevyvíjí reaktivní sílu, takže není nikam soustředována.

Je pouze unášena Multiversem nekonečnou rychlostí, zachovávajíc si fixovanou partonprostorovou mřížku.

Samozřejmě, že struktura Multiversa nedovoluje, aby byla během letu hmotou v pravém slova smyslu, tak jak ji známe.

Její partonprostorový parametr je poznamenán relativistickými efekty kontrakce délek ve směru vektoru rychlosti.

Stále si ovšem zachovává svoji původní integritu, neboť se nevyzařuje žádným směrem do Multiversa.

Po vyčerpání zásoby paliva začne vyzařovat všemi směry, čímž se v okamžiku navrátí její partonprostorový parametr na původní hodnotu  $(\infty^{-2} + \infty^{-2})$ , v důsledku **partonové komprese** sebe sama.

Zároveň dochází k emisi brzdného partonového záření – **partonové deceleraci** – ve směru jejího pohybu, čímž raketa velmi účinně zbrzdí až na konečnou rychlost a přistane víceméně neporušená.

## 20: Pohyb a rychlost v ČasoMultiversu

### a) Úvod do Zoevistianovy speciální teorie relativity

Objekty v prostoročase nemůžeme vnímat svými smysly, pokud se s nimi nespojíme prostřednictvím pohybu kvant.

Prostor a čas se tak stávají reálnými teprve prostřednictvím pohybu.

Uvažujme nyní světlo vycházející z jediného bodového zdroje nějaké inerciální soustavy **A**, šířící se samozřejmě rychlostí  $v = c$  (měřeno v oné inerciální soustavě) na všechny strany od tohoto zdroje.

Nechť se kdesi v prostoru pohybují dvě tělesa.

První z nich nechť se k soustavě **A** přibližuje rychlostí  $v = c/2$ , zatímco druhé nechť se stejně velikou rychlostí naopak vzdaluje.



Je zcela zřejmé, že vůči prvnímu tělesu se zmíněné světlo pohybuje rychlostí  $v = 3/2 \cdot c$ , kdežto vůči druhému tělesu to bude pouze  $v = c/2$ .

Protože obě tělesa se pohybují vůči inerciální soustavě **A** stejně velikými rychlostmi, a protože Lorentzova transformace závisí pouze na velikosti vzájemných rychlostí, nikoliv na jejich orientaci v prostoru, nemůže být tento rozpor se základními postuláty Einsteinovy speciální teorie relativity odvrácen Lorentzovou transformací časových a prostorových souřadnic.

Experimentálně potvrzená skutečnost, že přesto na obou tělesech naměří světlu shodně rychlost  $v = c$ , tedy vyhlíží jako paradox.

Pro tento paradox lze nalézt logické vysvětlení.

Světlo registrované třemi jmenovanými inerciálními soustavami není tímtež světlem, každý pozorovatel je však sto registrovat pouze jen ty fotony, které se vůči němu momentálně pohybují právě rychlostí  $v = c$ .

Ačkoliv existence různě rychlých elektromagnetických polí, vycházejících vždy ze společného zdroje může znít bláznivě, není ve skutečnosti v rozporu s ničím, co ve fyzice platí.

Energie pomalejších fotonů je totiž dle STR nulová a energie rychlejších fotonů je dokonce imaginární. Z toho důvodu vyzařování odebírá zdroji právě tolik energie, kolik mohou odnést pouze ty fotony, jež se vůči tomuto zdroji pohybují právě rychlostí  $c$ .

### *b) O rychlosti světelné a nadsvětelné*

Na každé hypergrupě je rychlost světla vzhledem k té naší rychlosti světla zcela jiná, neboť jejich hmota má vibraci vůči sobě samé sice stejnou, avšak vůči nám úplně jinou.

Jejich relativní bod nulové vibrace, nad nímž se všichni nacházíme  $c = 299792458$  jednotek, je totiž vůči nám posunut kamsi jinam.

U hmot hrubších (vyšší hypergrupy) je nula posunuta o  $4kc$  jednotek nad naši nulu, kde  $k = 1, 2, 3, \dots$ .

U hmot jemnějších (nižší hypergrupy) je tomu naopak, tj.

$k = -1, -2, -3, \dots$ .

Tzv. jemnější a hrubší hmoty tedy nevnímáme díky tomu, že stojíme tak říkajíc nad, či pod nimi, v žebříčku rychlostí vibrace a tudíž z nich můžeme zachytit pouze určité druhy polí, které jdou paralelně s námi. Můžeme tedy obrazně říci, že hmoty hrubší „ještě“ nevnímáme, zatímco hmoty jemnější „již“ nevnímáme.

Při rychlostech blízkých rychlosti světla, lze v celém vesmíru deformovat rychlost toku času působením Lorentzových transformací. Preony, jakožto makrární mikročástice 0, umožňují přelet z jednoho vesmíru do druhého.

Jejich rychlost je vždy sudým násobkem rychlosti světla, takže běh času nijak neovlivní.

Po překonání rychlosti světla se však dostáváme do oblasti imaginárních energetických hodnot pro antisvět, tj. převrácených energetických hodnot pro náš svět.

Odtud plyne, že po překonání rychlosti  $rv = 2c$ , splýváme nenávratně s antihmotnou hypergrupou.

Při dalším zvyšování rychlosti můžeme dokonce uskutečnit interhypergrupární lety, a to i s mezipřistáními, popř. s trvalým přistáním.

### *c) O rychlosti kvantionu*

Kvantiony dovolují úplné zastavení toku času ve vesmíru, vůči sobě samým.

Vůči mimoprostorovému pozorovateli se tedy pohybují rychlostí  $v = \infty$ .

To umožňuje kvantionové raketě průlet skrze Blandrium do dekanentní mikročástice +2.

Po průletu do vyššího světa, zde můžeme ještě teoreticky zahlédnout samy sebe, kterak se se svou raketou noříme do nitra kolapsaru.

Při nízkých rychlostech hmotného zdroje záření  $Y$  je rychlost kvantionu konstantní.

Při rychlosti světla  $rv = 2c$  již může mimoprostorový pozorovatel registrovat mírné urychlení Času uvnitř Multiversa, způsobené relativním urychlením kvantionu.

Při rychlostech vyšších než  $rv = 2c$  se pak dostáváme na úroveň, pro níž platí vůči nám vyšší rychlost kvantionu.

Na úrovni bodu **D** Zoevistianovy pohybové tabulky jsme, jak již víme antihmotou, nijak neovlivňující konstantnost rychlosti kvantionu platící pro antisvět.

To má za důsledek opětovné zpomalení rychlosti toku Času až na normál.

Při rychlosti kvantionu ( $v_y = c^6$ ) se pohybujeme rychlostí Času. Zlomek sekundy nám bude trvat přelet do světa, jenž je zároveň posunut o týž zlomek sekundy zpět za naším časem.

Odtud tedy plyne, že vůči soustavě kvantionu se Čas v okolním Multiversu zastaví.

Vůči Multiversu naopak stojí čas uvnitř tělesa pohybujícího se rychlostí kvantionu (vzhledem k přenosu času mezi dvěma kupovesmíry s rozdílným pořadovým indexem se zastaví dokonce i čas uvnitř samotného kvantionu).

Na základě poznatků z odstavce 19, že čas pohybujícího se tělesa je závislý na energetickém potenciálu  $E_2$  okolního prostoru, jakožto i poznatků z tohoto odstavce, lze interpretovat rychlost kvantionu coby bezčasovou absolutní nulu v ultravyšší parastejně hypergrupě. To znamená, že k zajištění běhu Času v Multiversu určitě nemůže stačit pouze omezený počet kvantionů.

Již v případě konečné hmoty, tj. v konečném časovém rozmezí, je potřeba nejméně  $\infty^2$  kvantionů na nekonečném množství různých časových úrovní v intervalu

$$t = \langle 0 ; k \rangle . \quad ( 13.37 )$$

Pohybujeme-li se rychlostí kvantionu, takže Čas v okolním Multiversu se zpomalí nekonečněkrát, nebudou pozorovatelé uvnitř Multiversa registrovat pochopitelně žádné změny, neboť to co je jim určeno si musí beztak prožít, nezávisle na rychlosti toku Času.

Odtud plyne, že čas může plynout pouze tehdy, pokud vůči soustavě jednotného kvantionu de facto stojí.

Z hlediska Zoevistianovy pohybové tabulky pak chápeme pohyb kvantionu jako nekonečně pomalý pohyb v bezčasovém Multiversu. Rychlost kvantionu tedy nedokáže časově oddělit dvě různé inerciální soustavy, tak aby v jedné běžel čas rychleji nežli ve druhé.

Zároveň se zde nabízí pozoruhodná možnost interpretovat rychlost toku absolutního Času jakožto rozdíl rychlosti kvantionu  $v_y$ , a rychlosti hmototvorné vibrace  $v_m$ , neboli

$$-t = v_y - v_m \Rightarrow v_y > v_m , \quad ( 13.38 )$$

$$t = v_y - v_m \Rightarrow v_y > v_m , \quad ( 13.39 )$$

$$0t = v_y - v_m \Rightarrow v_y = v_m . \quad ( 13.40 )$$

Vztah ( 13.40 ) ukazuje, že při nulovém Časovém toku platí rovnost mezi reálnou a relativní rychlostí.

#### *d) O rychlosti partonu*

Již dříve jsme si řekli, že dvourozměrný svět je vůči nám bezčasový. Rychlost partonu však není ničím jiným, nežli rychlostí kvantionu pro nekonečně vyšší hypergrupu, jež se vůči nám nalézá ve dvoudimenzionálním světě, kde konečno se vůči nám rovná  $\infty^{-1}$ . Tento svět, ač dvourozměrný, není bezčasový, neboť se jeví dvourozměrným pouze nám, zatímco vůči sobě samému je trojrozměrný.

V bezčasovém dvourozměrně se konečno vůči nám rovná opět jen konečnu.

Pohybuje-li se partonová raketa rychlostí  $v = \infty^2$ , potom Čas v našem Multiversu plyne rychlostí  $t = \infty^2$ .

To znamená, že partonová raketa přistane (z hlediska rakety) za nekonečně krátký okamžik ve vesmíru, ve kterém mezi tím uplynulo nekonečno roků.

Raketa tedy přistane na vyšší dialektické úrovni.

Zde se však ještě nedá hovořit o interčasovém letu v pravém slova smyslu.

Později si totiž dokážeme, že ona vyšší dialektická úroveň v okamžiku přistání bude nerozeznatelná od původní dialektické úrovně v okamžiku startu.

V pojmu nekonečna jsou si tedy vzdálenosti časové a prostorové navzájem rovny.

Vyšší dialektickou úroveň lze pak chápat také coby svět, jenž je oddělen od našeho světa nekonečným počtem konečných časových jednotek.

Chceme-li totiž proniknout do vyšší dialektické úrovně, musíme překonat nekonečnou prostorovou, ale i časovou vzdálenost, neboť vyšší dialektickou úroveň zároveň chápeme coby postbinduární časoprostor.

Partonové urychlovače času o výkonu  $W = \infty$  se posouvají na vyšší dialektickou úroveň vůči našemu času za čas  $t = \infty$ , zatímco vzhledem k soustavě akcelérátoru za  $t = k$ .

Vzhledem k soustavě souřadnic spojené např. se Zemí, však nebude partonová raketa vykonávat pohyb rychlejší, nežli  $v = \infty^{-1}$ .

Z toho nám plyne, že při rychlostech  $\infty$  a vyšších se stává Multiversum bezčasovým – dvourozměrným.

Rychlost  $v = \infty$  však v Multiversu vyvolává ještě daleko složitější procesy.

O některých z nich bude řeč ihned v následující sekci, kde budou rozebrány též možnosti jejich využití a bohužel i zneužití.

Při interakci GDSP+SJNS dochází k manipulaci s časem a prostorem působením vysokorychlostního proudu partonů.

Jako palivo zde slouží dvě SJNS.

V závislosti na množství paliva v tomto partonovém urychlovači času, lze provést následující manipulace s prostoročasem vesmíru (budeme uvažovat pouze prostoročasové změny projevivší se nějak na našem vesmíru).

Dle doposud popsaných procesů spojených s rychlostí v prostoročase, lze užitím partonové akcelerace vesmír:

- 1) zničit,
- 2) převést na jinou hypergrupu,
- 3) přetransformovat na antisvět,
- 4) na jinou dialektickou úroveň,
- 5) do budoucnosti,
- 6) do minulosti,
- 7) přerodit v postbinduárním stavu.

Při reakci SJNS+SJNS (na rozdíl od reakce SJNS+SJ, či SJNS+SAJ, v kvantionové raketě) dochází ke koordinovanému urychlení času ve vesmíru, což se zákonitě projeví jako zpomalení reakce SJNS+SJNS vůči okolnímu prostoročasu a to nekonečněkrát.

Tedy to, co bude trvat vůči partonovému urychlovači či partonové raketě  $\infty^{-1}$  čas, bude vůči okolnímu prostoru trvat čas konečný (připomínám, že se jedná o urychlovače s výkonem  $W = \infty$ ).

To tedy znamená, že se ve vesmíru skutečně nekonečněkrát urychlí čas, a to jak vůči mimoprostorovému pozorovateli, tak i vůči soustavě urychlovače.

Průběh letu partonové rakety lze ovšem chápat i tak, že dokud raketa zrychluje, vzdaluje se našemu světu.

Jakmile však začne brzdit, objeví se náš svět před ní a ona opět přistane na místě, ze kterého před nekonečně krátkým okamžikem startovala (to jak vůči soustavě rakety, tak i vůči Multiversu).

Mezitím však překoná nekonečnou vzdálenost.

(Uvědomíme-li si, že vyšší dialektická úroveň je vůči nám nekonečně malým světem, potom lze let na vyšší dialektickou úroveň interpretovat spíše coby ČasoMultiversový pohyb vyšší dialektické úrovně směrem k raketě či urychlovači, nežli naopak.

Jak totiž plyne z fraktální kvantové teorie Multiversa a ČasoMultiversa, musí kupovesmíry ~ kvantiony urazit nekonečnou vzdálenost).

Lze to vysvětlit tím, že v důsledku Zoevistianovy speciální teorie relativity si naše dialektická úroveň s vyšší dialektickou úrovní pouze vymění místa.

Partonová raketa tak namísto vyšší dialektické úrovně přistane opět v našem vesmíru.

Ocitneme-li se mimo prostor a kdosi na Zemi (předpokládáme, že Země zůstane součástí našeho prostoru) uvede do chodu partonový urychlovač času o výkonu  $W = \infty$ , potom pozorujeme, že na našich hodinkách uplyne konečný čas, během kterého však na Zemi uplyne čas nekonečný.

Ovšem oněch nekonečno let si musí vesmír tak jako tak prožít.

To tedy znamená, že lidé na Zemi nebudou registrovat žádné změny v běhu času, ale pokud by bylo možné nahlédnout mimo prostor,

pozorovali by nekonečně násobné zpomalení času na našich mimoprostorových hodinkách.

Použijeme-li partonový akcelerační systém o výkonu  $W = \infty^2$ , dojde k zastavení času v soustavě spjaté s urychlovačem a k nekonečně násobnému urychlení času ve vesmíru.

Z hlediska Zevistianovy speciální teorie relativity tomu však bude též naopak.

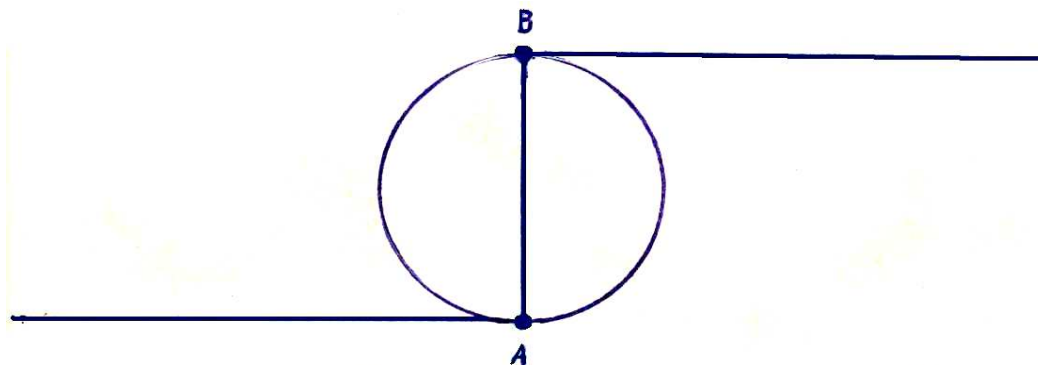
Odtud plyne, že se náš prostor rozdělí na dva identické prostory, z nichž jeden je jakýmsi neskutečným obrazem (**kvaziprostorem**) skutečného prostoru, vykonávajícím nekonečně rychlý pohyb v jakémisi **virtuálním nadprostoru**.

Naše dialektická úroveň se nalézá v bezčasovém dvourozměrném stavu, vykonávajíc vůči mimoprostorovému pozorovateli nulový pohyb.

Tento stav budeme nazývat **potenciálním prostorem**.

Potenciální prostor tedy setrvává v klidu na jediném místě virtuálního nadprostoru (měřeno z onoho nadprostoru, tj. z mimoprostorového stanoviště), zatímco kvaziprostor se mu vzdaluje po obvodu topologické kružnice (viz odstavec 17) nekonečně velikou rychlostí.

Obr. 13.38



Na obr. 13.38 vidíme potenciální prostor jako rovinu procházející bodem **A**, zatímco kvaziprostor jako rovinu procházející bodem **B**. Ve chvíli, kdy kvaziprostor mívá bod **B**, prodělá fázi bindu a přeroben na vyšší dialektické úrovni, počne se opět přibližovat k potenciálnímu prostoru po protilehlé topologické polokružnici.

Kvaziprostor putuje virtuálním nadprostorem, dokud se opět nespojí s potenciálním prostorem, který jej trpělivě čeká v bodě **A**.

V tuto chvíli dojde energie v akcelarátoru a potenciální prostor se opět spojí s kvaziprostorem.

Tím dojde k obnovení reálného trojdimenzionálního prostoru, který se však v okamžiku spojení svých dvou složek (kvaziprostoru a potenciálního prostoru) posune v čase o tolik, o kolik se posunul v čase kvaziprostor během svého nekonečně dalekého okružního letu, který však vůči mimoprostorovému pozorovateli trval nekonečně krátký čas.

Vzhledem ke kvaziprostoru však trval nekonečný čas a proto se celý reálný prostor během nekonečně krátkého, tzv. **interdeformačního času** posune o nekonečný počet roků dopředu.

To znamená, že při rychlosti  $v = \infty^2$  jsme schopni ihned přerodit náš vesmír na vyšší dialektické úrovni, ovšem jedině v tom čase, ve kterém na původní dialektické úrovni k ČasoMultiversové deformaci došlo.

Podotýkám, že vyšší dialektická úroveň se od té naší liší pouze tím, že je od nás vzdálena nekonečno konečných časových jednotek.

Z toho plyne, že po deformaci se bude cestovatel nalézat relativně v témže světě a témže čase, kde se nalézal před deformací.

Ani tímto způsobem tedy nelze uskutečnit interčasový posun.

Je tedy vůbec možné uskutečnit cesty časem?

#### *e) O cestování v čase*

V odstavci 4 jsou nastíněny základní principy pohybu absolutního Času směrem od středu k okrajům Multiversa.

Zároveň víme, že z kvantionů je složena veškerá hmota v Multiversu.

V tomto odstavci jsme si však ukázali, že kvantion, coby částice Času, nemůže být statický.

K zachování ČasoMultiversa je nutný jeho pohyb.

Nyní si přiblížíme kterak tento pohyb probíhá.

Atom sám o sobě není samozřejmě nekonečnou zásobárnou kvantionů.

Proto je nutné, aby se v něm kvantiony velmi rychle střídaly.

Tímto způsobem vzniká vlnění  $Y$  vytvářející atomy, látku, a s ní i celý prostoročas.



Kvantiony uvolnivší se z preonů a dalších částic putují směrem od vesmíru k Blandriu v podobě tzv. **cytonového vlnění**.

Odtud se pak navracejí zpět do preonu uvnitř vesmíru z něhož vylétly, kde vystřídají jiné kvantiony.

Každý cyton dolétnuvší do Blandria, předá mu elementární časoprostorovou informaci jíž nese.

Rozdíl mezi časem způsobeným pohybem cytonu v kupovesmíru, a časem který během této doby uplyne uvnitř jemu příslušejícího kvantionu, je příčinou toku absolutního Času směrem od středů k okrajům Multiversa, a je tedy právem považován za elementární kvantum Času.

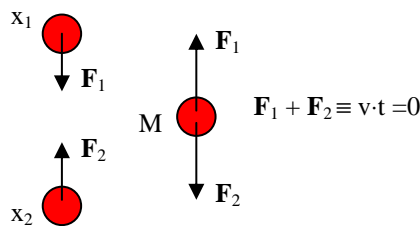
Pro toto elementární kvantum absolutního Času se zavádí výraz **antion**.

Právě antion je příčinou toho, že uvnitř kvantionu je vždy vyšší hodnota absolutního Času, oproti hodnotě jíž je kvantion schopen aktuálně předat našemu světu.

Ve vesmíru se pohybují kvantiony vzájemně proti sobě, což má za následek nulový pohyb hmoty a časový pohyb kvantionu, který je roven dvojnásobku rychlosti kvantionu.

Hmota by se tedy neměla vůbec pohybovat v čase (viz obr. 13.39).

Obr. 13.39



Na štěstí pro nás, se my všichni nalézáme uvnitř jednoho ohromného kvantionu – kupovesmíru.

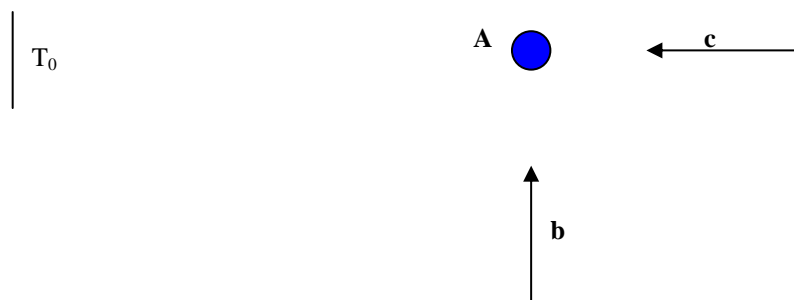
Zcela analogická situace nastává při vzájemném pohybu dvou relativně pomalých objektů, řekněme např. dvou automobilů jedoucích proti sobě stejnými rychlostmi.

Tedy se jeden vůči druhému přibližuje dvojnásobnou rychlostí než je rychlost čtená na tachometru každého z vozů.

Multiversum zůstává vůči oběma automobilům v klidu.

Jestliže bychom se stali jediným či nejrychlejším objektem ve vesmíru, pak bychom se ve skutečnosti pohybovali přesně poloviční rychlostí, než se domnívám. Stejně velikou rychlostí by se totiž pohybovalo Multiversum v protisměru mého pohybu. Stačí však, aby se kdesi ve vesmíru začalo cosi pohybovat stejně velkou rychlostí opačného směru, a relativní rychlost se mění v rychlost skutečnou. Uvažujme nyní vesmír, v němž působí pouze dva vektory rychlosti  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , jež jsou navzájem ortogonální.

Obr. 13.40



Jak ukazuje obr. 13.40, tato ortogonalita vektorů  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , vykazuje výraznou nestabilitu. Jakmile totiž oba vektory vzniknou, přestávají být ortogonálními, neboť Multiversum, jemuž náleží bod  $\mathbf{A}$  k němuž oba vektory směřují, se díky vzájemnému působení vektorů  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , s časem posouvá ve směru vektoru  $\mathbf{d}$ , viz obr. 13.41.

Obr. 13.41



Tím se ortogonalita vektorů  $\mathbf{b}$ ,  $\mathbf{c}$ , okamžitě narušuje a v čase  $t = \infty$ , již vektor  $\mathbf{d}$  zcela zaniká.

Obr. 13.42



Jak ovšem ze zákona akce a reakce plyne, vesmír obsahující pouze dva pohybové vektory, nemající přesně souhlasnou, ani přesně opačnou orientaci, je fyzikálně nereálný, což ostatně plyne z jeho výše uvedené nestability.

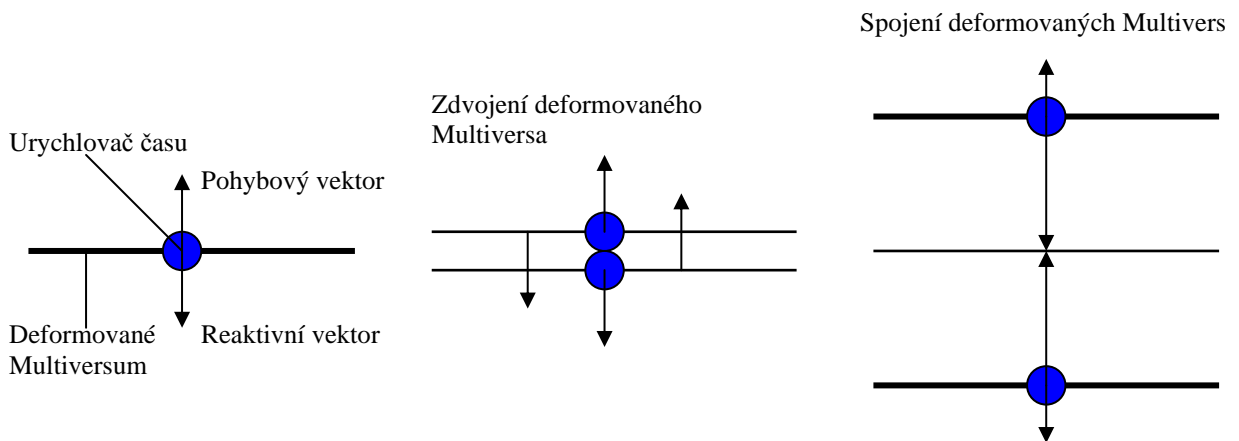
Zcela jinak je tomu ovšem u partonů. Necháme-li pohybovati se proti sobě dva usměrněné toky partonů s  $v = \infty$ , Multiversum, ve snaze pohybovati se proti oběma proudům, stává se dvourozměrným.

Podle množství a směru proudů se Multiversum bude dělit na dané množství totožných dvourozměrných Multivers, z nichž každé bude pocházet z jiného místa pohledu na Multiversum.

Ve druhém rozměru, jak víme, neexistuje pohyb a časové souřadnice se mění na souřadnice prostorové.

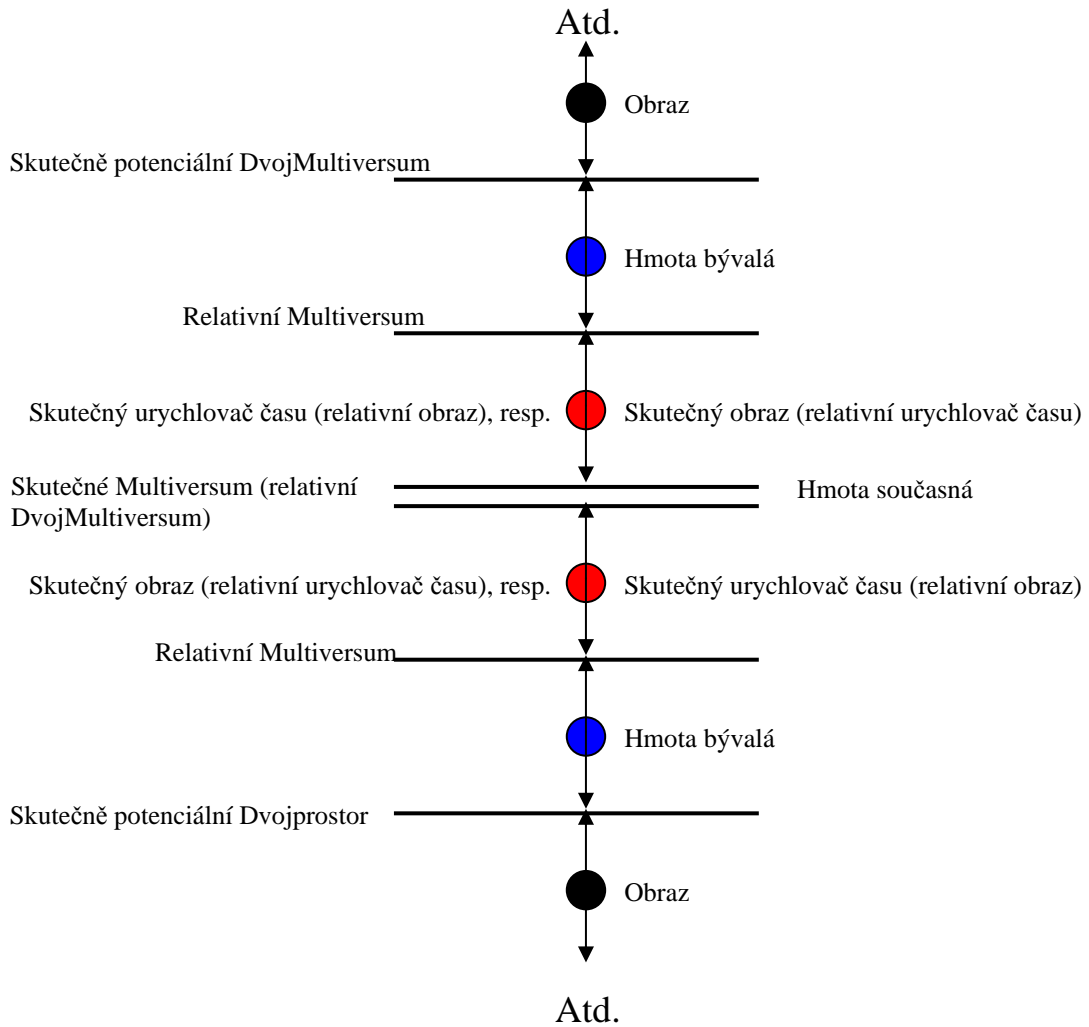
V partonové raketě lze při tom uskutečnit pohyb mimo tato dvourozměrná deformovaná Multiversa, ve virtuálním nadprostoru.

Obr. 13.43



Podobná situace nastává po použití partonového urychlovače času:

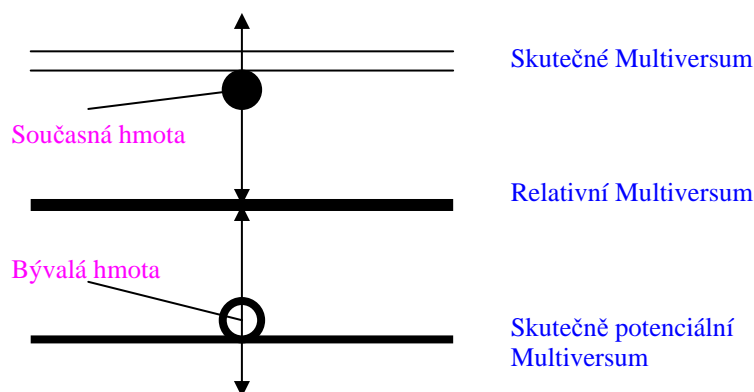
Obr. 13.44



Jak z obrázku plyne, jakákoliv akce vyvolá v Multiversu reakci a tím i další ČasoMultiversovou deformaci.

To znamená, že ve chvíli, kdy je uveden do chodu partonový urychlovač času se v Multiversu utvoří nekonečné množství deformací. Ve všech případech však platí následující obecné pravidlo:

Obr. 13.45

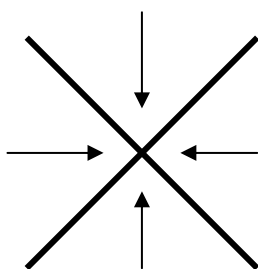


Upozorňuji, že na obrázcích 13.43, 13.44, 13.45, jsou znázorněny konečné úseky ČasoMultiversových deformací.

Jelikož usměrněním dvou partonových svazků vzájemně proti sobě se Multiversum stává dvourozměrným, logicky by se zdálo, že při soustředění čtyř proudů partonového záření ze čtyř světových stran, se Multiversum stane jednorozměrným, a při soustředění partonových proudů ze všech šesti prostorových směrů, se Multiversum přemění v nularozměrné bindu.

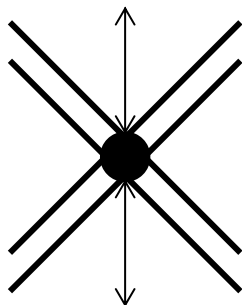
Ve skutečnosti se však Multiversum chová poněkud jinak – viz obr. 13.46.

Obr. 13.46



Podívejme se nyní, jak se ČasoMultiversové deformace jeví pozorovateli, který je od ní vzdálen nekonečno konečných prostorových jednotek:

Obr. 13.47



Vidíme, že v měřítku nekonečna není deformace Multiversa rovinná, jak se nám jeví v měřítku konečném, nýbrž je zalomená, což je způsobeno retardací partonů nesoucích informaci, která roste přímo úměrně se vzdáleností od místa prvotní deformace.

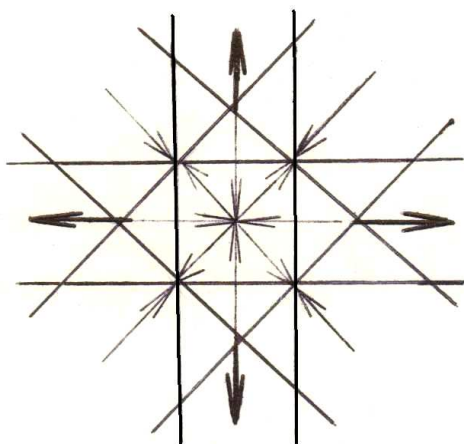
Tento proces nazýváme **trychtýřovým jevem**.

Cestování v čase dále než do  $t = \infty$  je díky němu nemožné a také by to bylo zbytečné.

Z toho důvodu se již nebudeme blíže zabývat pohledem na ČasoMultiversové deformace v měřítkách  $\infty^2$  a větších.

Trychtýřový efekt se ve skutečnosti vlivem zákona akce – reakce projevuje mnohonásobnou deformací ČasoMultiversa, jež je načrtnuta na obr. 13.48.

Obr. 13.48



Na počátku tohoto procesu jsou čtyři nekonečně velké síly působící vzájemně proti sobě.

Výsledkem je řetězová reakce neustále se množících sil, pokračující dále do nekonečna, deformující Multiversum i Čas.

Multiversum se mění v osmicípou hvězdu, dále pak v šestnácticípou až do nekonečna.

Toto nekonečno však vůči nám bude již vlastně  $\infty^2$ .

To znamená, že v důsledku obecné topologie budou veškeré ČasoMultiversové defekty rádiusově zakřiveny o  $360^\circ$ .

Jak již jsem však řekl, nemá to pro nás faktického významu, a proto se tím nebudeme podrobněji zabírat.

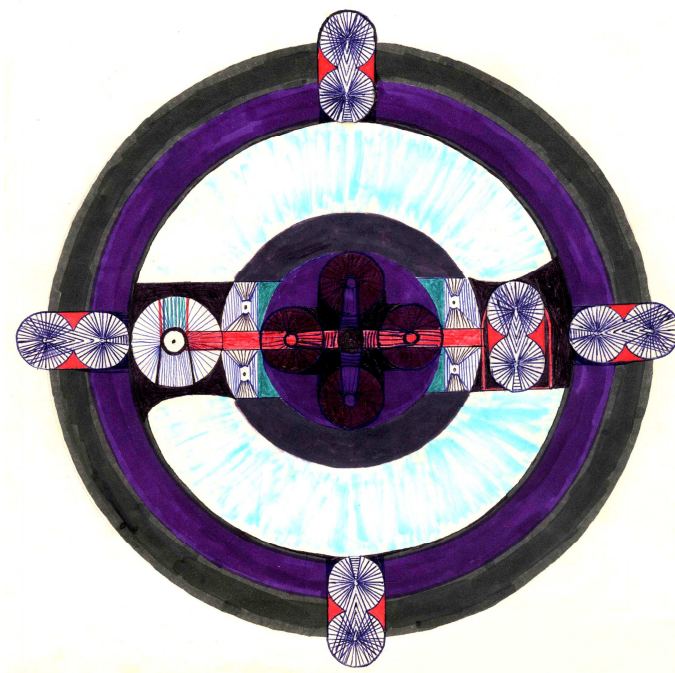
Nakonec ještě podotýkám, že v konečném měřítku se dá deformované Multiversum samo do pořádku ihned poté, jakmile přestanou působit síly, jež vyvolaly prvotní deformaci.

Jinými slovy, dojdou-li pohonné látky v partonových akcelerátorech.

## 21: Stroj času

Nyní jsme již vybaveni dostatečným množstvím informací, abychom byli schopni porozumět tomu, jak vlastně funguje stroj času, jehož schematický průřez si můžeme prohlédnout na obrázku 13.49.

Obr. 13.49



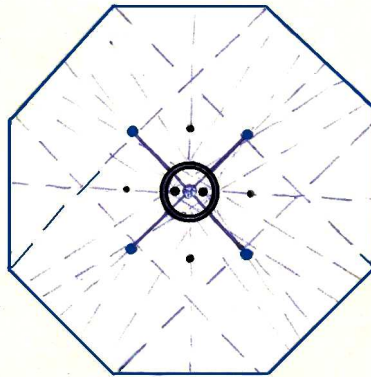
Uveden do chodu, nalézá se stoj času ve virtuálním nadprostoru, obklopeném ze všech stran deformovanými Multiversy (viz obr. 13.40). Ve správné chvíli je kabina s cestovatelem vystřelena pod předem stanoveným úhlem (viz obr. 13.40), do virtuálního nadprostoru.

Kabina tedy nevyvíjí reaktivní sílu a po určité době přistane v deformovaném Multiversu.

Na úhlu, pod kterým byla vystřelena závisí, v jak vzdálené minulosti či budoucnosti modul přistane.

Následující obrázek znázorňuje Prostorovou deformaci způsobenou pohybem částí stroje času, ve dvourozměrném pohledu.

Obr. 13.50



Deformace, způsobené vzájemným antipohybem ČasoMultiversových souřadnic, zde zakresleny nejsou.

Obrázek je zachycen při nulovém toku Času (což ostatně vyplývá z jeho dvourozměrnosti) a v konečném měřítku.

Vyšleme-li člověka do budoucnosti vzdálené např. 10 minut od okamžiku startu, zkolabuje v té samé chvíli celá konečná oblast Multiversa.

Jakmile se však cestovatel dotkne místa přistání (což se stane za  $\infty^{-1} t$  od startu, vůči soustavě cestovatele) vrátí se deformované ČasoMultiversové souřadnice opět do původního tvaru.

V tu chvíli nám onen cestovatel i s kabinou doslova zmizí před očima. čas však plyne nerušeně dál.

Cestovatel v čase se již nachází v době, do které my dospějeme až po 10 minutách.



Jakmile tato doba nastane, zkolabuje vůči nám Multiversum podruhé a cestovatel se svojí kabinou se znovu zčistajasna objeví na místě z něhož před deseti minutami odstartoval.

Nejen, že za oněch 10 minut neuplynul na jeho hodinkách vůbec žádný čas, ale navíc, vůči němu kolabovalo Multiversum pouze jednou, zatímco vůči nám dvakrát.

Uvědomíme-li si, že Multiversum má kolabovat pouze jednou, zjišťujeme, že naše mezikolabová existence je v podstatě nemožná a přeci naprosto nutná.

Jak tedy vysvětlíme to, že můžeme existovat v prostoročase mezi dvěma relativně identickými ČasoMultiversovými deformacemi, které jsou ve skutečnosti jednou jedinou deformací, v níž klasický prostor a čas ztrácí svoji hodnotu?

Když si vzpomeneme co říká Zoevistianova speciální relativita o rychlosti partonu, ihned nás napadne, že nejen vůči cestovateli v čase, ale též vůči mimoprostorovému pozorovateli kolabuje Multiversum pouze jednou.

Jestliže vůči mimoprostorovému pozorovateli letí parton rychlostí  $v = \infty$  a během konečného okamžiku letu urychlí čas nekonečněkrát, potom vůči pozorovateli ze Země letí parton konečnou rychlostí a za konečný čas se posune o stejně konečný čas.

Jestliže se kabina s cestovatelem pohybuje rychlostí partonu, pak je cestovatel totožný s mimoprostorovým pozorovatelem a jeho chování je vůči nám zároveň totožné s chováním letícího partonu.

Z toho všeho plyne, že se opět nejedná o nic jiného, než o různé pohledy z různých soustav.

Interdeformační teorie se však stává daleko zajímavější, je-li použita ke zcela neobvyklému vysvětlení takových jevů, jako je např. bindu, původ času, pohyb, či existence prostoročasu vůbec.

Souvislost těchto jevů s interdeformační teorií nás napadne již tehdy uvědomíme-li si, že naše existence je **interbinduární**, tj. odehrávající se mezi dvěma binduárními kolapsy.

Odtud plyne, že bindu je stále „tet“ bez něhož bychom nemohli existovat.

Ještě závažnější je skutečnost, že bezantionový kvantion, jako např. kvantion – midonová raketa, se během intersvětového letu nalézá

v důsledku Zoevistianovy speciální teorie relativity v bezčasovém stavu (uvažujeme průlet kolapsarem).

Její let se dá tedy relativně přirovnat k letu partonu.

Z toho plyne, že samotná soustava kvantionu je vůči nám

ČasoMultiversovým defektem, díky kterému se stále udržuje stavba prostoru a běh času v našem světě.

## **22: Partonová akcelerace pohledem fraktální teorie ČasoMultiversa**

V tomto odstavci se soustředíme na kritické zhodnocení možnosti praktického dosažení partonové akcelerace.

Nejrůznější aspekty „patologického“ chování Multiversa během partonové akcelerace, popsané v předchozích odstavcích je možno nejlépe studovat na příkladu detonace partonové pumy, během níž Multiversum postupně kolabuje a mění se v bindu.

Na základě relativistického energetického rozboru chování partonprostorových parametrů během partonové akcelerace se zdá být vše v pořádku takže dosažení binduární fáze by neměly teoreticky státi v cestě žádné fundamentální překážky.

Pohlédneme-li na celou situaci z hlediska fraktální teorie ČasoMultiversa – základního pilíře moderní fyziky ČasoMultiversa – shledáváme navíc, že vzhledem k předpokládanému směru toku absolutního Času, je uvedený Prostorový kolaps rovněž v souladu s ČasoMultiversovou kauzalitou.

Pokud bychom předpokládali opačný směr toku absolutního Času, všechny „patologické“ průvodní jevy partonové akcelerace (které, jak jsme byli svědky v předchozích odstavcích, dovolují např. cestovat v čase), nám rázem vymizí.

Přenos absolutního Času od okrajů Multiversa k jeho středům však s sebou přináší principiálně nepřekonatelné technické problémy a navíc je v příkrém rozporu s nejpokročilejšími verzemi fyziky, jakou je např. **teorie cytoprostoru**.

S použitím fraktální teorie ČasoMultiversa snadno pochopíme, že rychlost binduarizace Multiversa během exploze partonové pumy je určena rychlostí se kterou binduarizují jednotlivé kupovesmíry.

Ta by však, jak víme, neměla být rovna rychlosti přenosu absolutního Času mezi dekanentními mikročásticemi s rozdílem indexů rovným jedné (jež je určena rychlostí kvantionu  $v_y$ ), ale brž nekonečnu (určujícím faktorem by zde měla být rychlost partonu).

To je ovšem paradox. Pokud by totiž např. za 1000 let (tj. v kupovesmíru odpovídajícím oné časové úrovni) kdosi odpálil partonovou pumu, pak důsledek této exploze prakticky okamžitě zasáhne všechny konečné dekanentní mikročástice s vyšším indexem než měl iniciační kupovesmír, což jinými slovy znamená, že by se výbuch šířil proti toku Času – směrem do minulosti.

To je z kauzálního hlediska pochopitelně nepřípustné a v příkrém rozporu se samou naší existencí.

To tedy znamená, že se rozruch vyvolaný explozí partonové pumy, nemůže šířit nitrem kupovesmíru rychlostí jinou, nežli přesně rychlostí kvantionu.

To jest poněkud překvapivý závěr, avšak ještě zajímavějším bude podívat se, kterak tento pozoruhodný poznatek ovlivní naše předchozí předpoklady o interčasových cestách.

Vzhledem k tomu, že s rostoucím indexem dekanentní mikročástice prudce vzrůstá i rychlost kvantionu, bude pro kvantiony s indexem  $\infty$  rychlost kvantionu vůči nám rovněž nekonečná.

Obrázek 13.48, znázorňující trychtýřový jev v pohledu z asymptotického nekonečna, tedy zůstává i nadále beze změny.

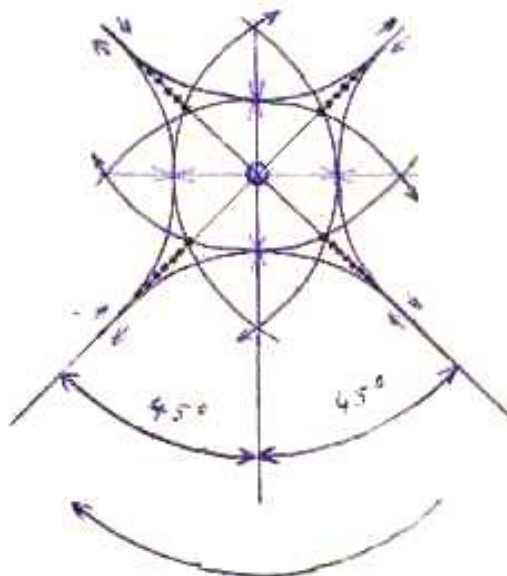
Pro kvantiony s konečnými indexy však je rychlost kvantionu konečná, takže se nám nyní bude projevovat trychtýřový efekt i na konečných ČasoMultiversových intervalech (srov. s obr. 13.51).

Tato změna však zřejmě znemožní praktické uskutečnění interčasových letů, neboť projektil vystřelený strojem času se pravděpodobně nemůže pohybovat vyšší rychlostí, nežli tlaková vlna šířící se Multiversem od místa exploze partonové pumy, či postupující deformace ČasoMultiversa vyvolaná činností stroje času.

Projektil tedy bude neustále jen kopírovat kužel postupující ČasoMultiversové deformace, která se šíří přesně rychlostí Času.

Cestovatel v čase tak vlastně použitím partonové akcelerace nezíská žádné další výhody v porovnání s dosažením rychlosti kvantionu (viz odstavec 20), neboť fakticky ani vyšší rychlosti dosáhnout nemůže.

Obr. 13.51



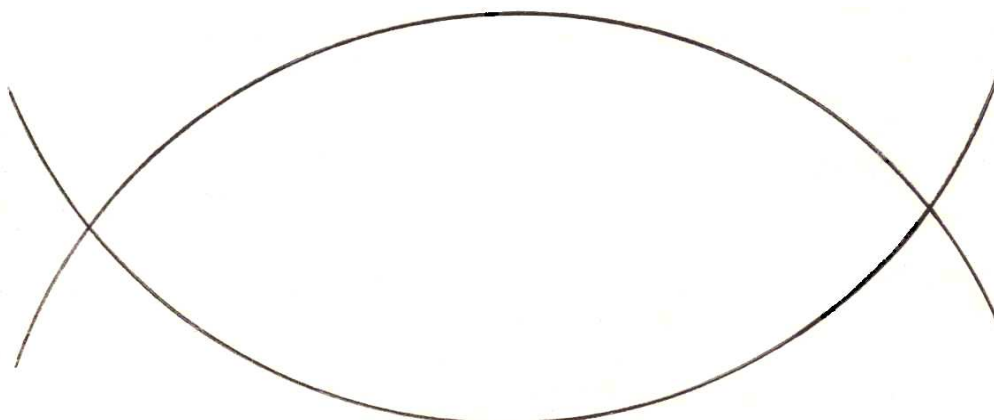
Jelikož jsme si ve 20. odstavci ukázali, že při rychlosti kvantionu nelze cestovat do minulosti, plyne odtud, že partonová akcelerace nepřináší ohledně cestování v čase žádné nové možnosti dokonce ani v porovnání s klasickou Einsteinovou STR.

Vidíme tedy, že ČasoMultiversum je díky své fraktální struktuře ve skutečnosti dokonale odolný vůči všem pokusům o narušení svojí vnitřní kauzality, tj. linearitu toku absolutního Času, a že je tedy zkonstruován velmi chytře tak, aby odolával všem paradoxům jež by s sebou možnost takového narušení přirozeně nesla.

### 23: Topologická gravitace a antigravitace

Jak již víme z předešlého výkladu, dvě rovnoběžné přímky se v nekonečnu sbíhají. Říkáme, že mezi nimi působí tzv. **topologická gravitace**. Dále se však přímky navzájem překříží a vytvoří nekonečné kružnice. Tehdy hovoříme o **topologické antigravitaci** dvou **pararovnoběžek** (viz obr. 13.52).

Obr. 13.52



Toto, jak vyplývá z obrázku 13.52, platí i v případě dvou pararovnoběžných přímek, vzájemně nekonečně vzdálených. Topologická gravitace a antigravitace, jsou tedy nejobecnějšími vlastnostmi Multiversa ale Multiversum samo je na nich zpětně velmi závislé.

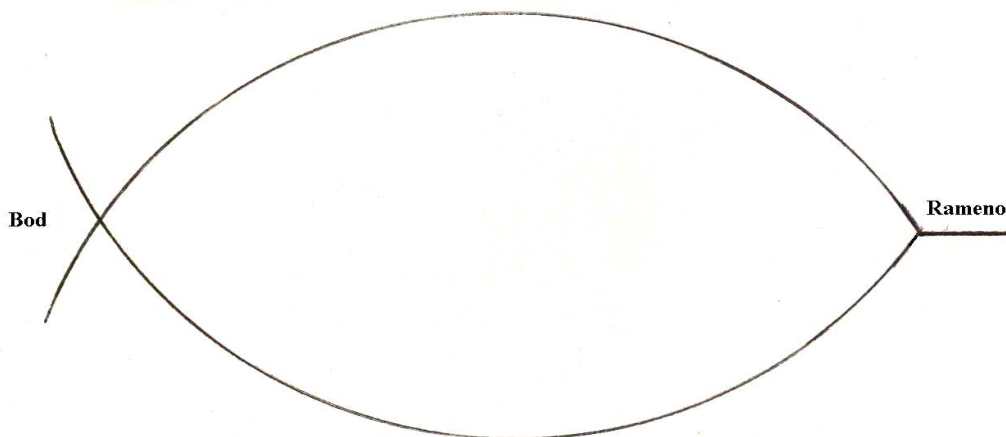
Tato vlastnost nekonečna se v podstatě stala základem pro vznik topologické fyziky. Při topologické gravitaci a antigravitaci dvou polopřímek je situace odlišná pouze tím, že ke vzájemnému překřížení obou polopřímek dochází pouze jedenkrát.

Vůči nám tedy není možné, aby se obě polopřímky dotýkaly pouze v jediném bodě a přitom si udržovaly vzájemnou stabilitu.

Kdybychom totiž chtěli udržet těleso konečné délky nad zdrojem gravitačního pole tak, že bychom jej upevnili pouze v jednom bodě, ležícím mimo těžiště tělesa, nepodaří se nám to.

Proto musí být ve skutečnosti průsečíkem dvou polopřímek rameno konečné délky (předpokládejme, že jsou polopřímky vůči nám jednorozměrné), které se však nekonečnému pozorovateli stejně jeví jako bod (viz obr. 13.53).

Obr. 13.53



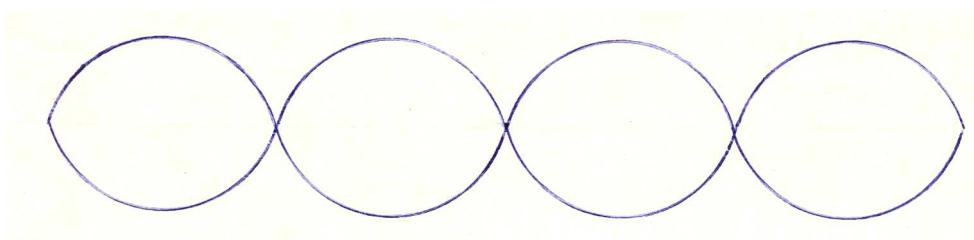
Přímka by se vůči nám měla jevit nekonečnému pozorovateli jako půlkruh, avšak díky objevu topologické gravitace nám vychází dva půlkruhy, tj. jeden kruh.

Ve trojrozměrném případě mu odpovídá koule, ohraničující naši dialektickou úroveň, či dokonce zasahující až do nižší dialektické úrovně.

Podívejme se však na obrázek 13.52 a snažme se topologicky vyvodit jeho pokračování.

Domněnka dvou navzájem se protínajících kružnic by odporovala našim nynějším poznatkům o topologické gravitaci a antigravitaci. Správné řešení ukazuje teprve obrázek 13.54.

Obr. 13.54



Obrázek dosti věrně zachycuje soudobé kvantově mechanické představy o pohybujících se kvantech energie.

Vše ukazuje na to, že vysvětlení existence energetických kvant a jejich vlnové povahy popisované Schrödingerovou rovnicí, spočívá právě v topologické gravitaci.

Vlnové funkce částic zde vystupují jako zcela přirozený projev vyzařování topologicko – metafyzické gravitace a antigravitace z vyšších dialektických úrovní.

Každá z nich přitom vyzáří v konečném čase konečné množství kvant konečných rozměrů.

Z těchto kvant lze pak pochopitelně utvořit pouze konečné množství hypergrup v konečném prostorovém objemu.

## 24: Úvod do Zoevistianovy obecné teorie relativity

Dříve než zabředneme hlouběji do kvantové teorie, chtěl bych věnovat pár řádků teorii gravitačního pole.

Kromě červích děr o kterých jsme se již zmínili v kapitole 7, existují ještě průchody mezi vesmíry a antivesmíry.

To se však odehrává za podmínek, kdy není zachována původní struktura hmoty.

Černá díra, coby fixovaná gravitace, je totiž schopna vyjmout z metafyzické části hmoty kvantiony a přeměnit je na antikvantiony, z nichž sestává antihmota.

Ta je poté prostřednictvím bílé díry vyzářena do antivesmíru.

Podle Einsteinovy obecné teorie relativity OTR, je gravitace projevem deformace prostoročasových souřadnic.

Křivočaré souřadnice znázorňujeme výhradně v rámci topologické fyziky.

Nejčastěji počítáme s křivkami konečných délek pro nás, avšak (viz odstavec 23) nekonečnými pro svět  $\infty^{-1}$  (pro který jsou čtyřrozměrné).

Tyto křivky nazýváme **konečné relativní polopřímky (KRP)**.

Jeich prostorové zakřivení způsobené zákonem nekonečna pro  $\infty^{-1}$  v důsledku topologické fyziky, vytváří gravitační pole, jakožto zakřivení čtyřrozměrného prostoročasu.

Setrvačná síla má původ v gravitaci působící na těleso, na nějž před okamžikem působila dynamická síla  $F_1$  (srov. odstavec 20) a vytvořila tím pohyb, po trajektorii KRP.

Tím se vytváří gravitační síla přemáhající třecí odporovou sílu  $F_2$  a gravitující tak těleso k danému statickému bodu vyčerpání energie, po dynamické trajektorii, tuto energii odebírající.

Čím pomalejší je pohyb a čím nižší je hmotnost, tím kratší je KRP, a tím menší je gravitační síla, projevující se v klasické mechanice jako setrvačnost.

Při rovnoměrném zrychlování  $a = 10 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$  lze setrvačné zrychlení transformovat na umělou gravitaci, čehož by se dalo využít např. při meziplanetárních a mezihvězdných letech, kdy by kosmická loď za 1/2 roku letu, zachováváje stálé zrychlení 1g, tj. stálou umělou gravitaci, dosáhla rychlosti cca. 0,5  $c$ , tj.  $150000 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ .

Nyní se podívejme, jak se projevuje gravitační interakce na kvantové úrovni.

Při neinerciálním pohybu hmotných těles se do prostoru vyzařují gravitační vlny, podobně, jako se při neinerciálním pohybu elektrických nábojů vyzařují vlny elektromagnetické.

Gravitační vlny i jiná vlnění mají schopnost ovlivňovat prostorové vzdálenosti.

Při průchodu gravitačních vln začíná prostor jemně rezonovat.

Hmotná tělesa se v poli gravitačních vln střídavě zkracují a opět prodlužují.

K podobným efektům dochází rovněž v poli elektromagnetickém i u dalších typů záření vlnové povahy, avšak v daleko menší míře.

Gravitační vlny se šíří rychlostí světla, což znamená, že jistá tělesa na dráze gravitační vlny jsou protažena a jiná zkrácena.

Mezi oběma typy těles leží  $1/4 \lambda$  gravitonu, pročeš mezi nimi v daném okamžiku působí antigravitace.

Analogická situace se tím přenáší na samotné původce antigravitace, totiž částice a vlny.

Děje se tak v důsledku izotropie prostoru.

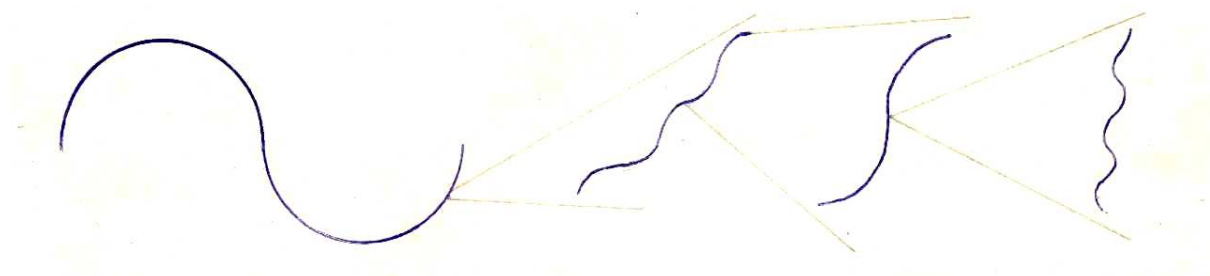
Vlnová antigravitace způsobuje jednak prodlužování vlnové délky, jednak rozptyl vlnového balíku a snižování frekvence.

K významnějším změnám vlnových délek však dochází až během stovek miliard let.

Podívejme se nyní, jak vypadá znázornění fraktální teorie Multiversa na vlnové kvantové úrovni:



Obr. 13.55



Zásluhou binduární teorie se ukazuje, že vedle antigravitační defokusace existuje rovněž gravitační fokusace vln.

V předešlých odstavcích jsme si vysvětlili, proč se vesmír po dosažení jistých rozměrů začíná opět hroutit. Analogická situace nastává také u kvant. Příliš mohutná vlna již není schopna autoantigravitačního rozptylu, což plyne i z Newtonova gravitačního zákona.

Takováto vlna pluje vesmírem miliardy let, dokud není pohlcena černou dírou a vtažena do prostoročasové smyčky, kde dojde k převrácení vlnové gravitačních parametrů na kvantové úrovni.

Tím nastává ve vlně tzv. **gravitační kontrakce**, takže je v antivesmíru vyvržena coby tvrdé záření gama.

Za použití relativistické kvantové teorie snadno určíme nejmenší vlnovou délku, jíž může vlna dosáhnout při gravitační vlnové fokusaci. Tato délka činí cca.  $\lambda = 10^{-35}$  m.

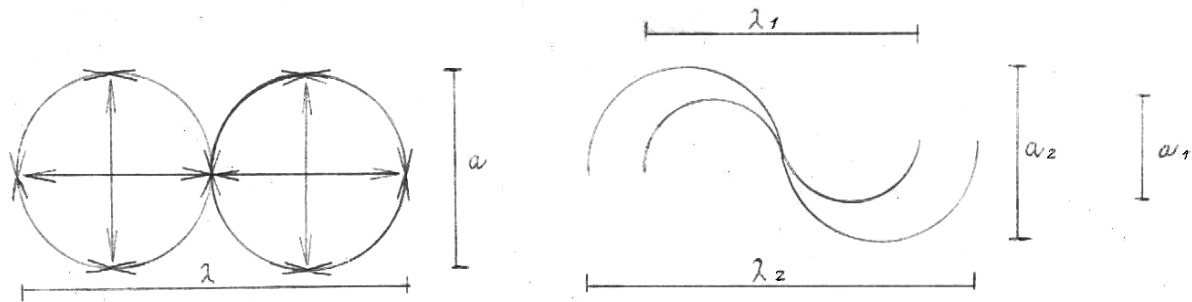
Za pomoci poznatků o gravitační vlnové fokusaci, lze tedy velmi přesně určovat klidové hmoty mnoha dosud neprozkoumaných částic.

## 25: Úvod do relativistické kvantové mechaniky

Podívejme se na následující obrázek.

Je na něm znázorněn projev korpuskulárního antigravitačního rozptylu a jeho důsledek ve vlnové teorii (vpravo):

Obr. 13.56



Jak víme, platí v kvantové mechanice vnově-korpuskulární dualismus. V relativistické kvantové teorii používáme vedle klasických pozorovatelných ještě další komponentu, jíž je **vertikální impulsmoment** který se liší od klasického spinu, jež budeme nazývat **horizontální impulsmoment**. Oba dva impulsmomenty však koexistují spolu a navzájem se doplňují.

Trojrozměrný vertikální impulsmoment není přímo závislý na impulsu. Proto lze oba bodové chronory, odpovídající oběma impulsmomentům, pokládat za virtuální stavy midonů.



Res Jost (1918 – 1990)

Nachází-li se tedy bodový chronor částice v nule Jostovy funkce, považujeme jej ze klidový virtuální stav stacionárního midonu, neboť se v tu chvíli nepohybuje po reálné ose a ani neleží na ose imaginární. To naznačuje, že v přírodě lze lokalizovat virtuální partony ve vázaném stavu, s rychlostí  $v$ , pro níž platí:  $v_y < v < \infty$ . Největší předností tohoto formalismu je skutečnost, že po drobných úpravách, obdržíme ucelenou kvantovou teorii kvantionu:

$d$ : dimenze Hilbertova prostoru  $\mathcal{H}$

$v$ : rychlost (obecně)

$k$ : korpuskula

$w$ : vlna

$V$ : vertikální impulsmoment

$H$ : horizontální impulsmoment

$v_y$ : rychlost kvantionu

$h$ : chronor

1)  $2d_k V$



2)  $2d_k V/v_h < 2v_y$



3)  $2d_w V/v_h < 2v_y$



4)  $3d_k H/v_h < 2v_y$



5)  $2d_w H/v_h < 2v_y$



6)  $2d_k V H/v_h < 2v_y$



7)  $2d_k V H/v_h \geq 2v_y$



Základní tvar:



8)  $3d_w V/v_h < 2v_y$



9)  $2d_{kw} V H/v_h < 2v_y$



Barevně je vyznačen dvourozměrný vertikálně - horizontální pohybový vektor  $x$

U příkladu 6 se jedná o trojrozměrný impuls rozkreslený do dvoudimenzionálního prostoru.

Detailní obraz příkladu 6 je na obrázku 13.57.

Obr. 13.57

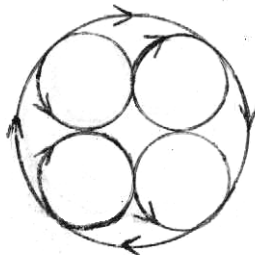


Až doposud jsme se zabývali pouze „dutými“ částicemi. Fraktální teorie ČasoMultiversa však ukazuje částice jakožto klasicky plné objekty.

Relativistická kvantová mechanika řeší problém klasicky neprostupných plných částic metodou stacionárních stavů vnitřních impulsmomentů.

Toto obecné pravidlo však již přestává platit pro kvantiony, neboť uvnitř kvantionu, tj. za Blandriem, které od sebe odděluje dva soběpodobné světy, začíná platit jiná fyzika – totiž astrofyzika. Na obr. 13.58 je znázorněn princip klasicky plné částice, v tomto případě preonu:

Obr. 13.58

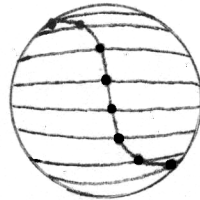


Rotující chronory preonu přenášejí svůj pohyb do vnitřního prostředí částice, kde se vytvářejí další impulsmomenty, které v tomto případě

tvoří stacionární stavy kvantionů, jež po rozpadu preonu vytvářejí záření  $Y$ .

Princip stacionárního stavu klasicky neprostupné částice je znázorněn na obr. 13.59:

Obr. 13.59



V tomto případě platí rovnost

$$v \cdot H_h = v \cdot V_h . \quad ( 13.41 )$$

Jedná se o vnější prostředí částice, tj. o její imaginární vnější pole. Rovnice ( 13.41 ) popisuje tzv. **horizontálně rotující vlastní vertikální impulsmoment**, jednoduše **vertikální spin částice**.

Na obr. 13.60 je znázorněn pohyb klasicky neprostupné částice a jejího imaginárního coulombického pole a póly S-matice, jež lze analyzovat mimo vertikální impulsmoment. Toto pole je vyvoláno impulsmomentem od rotace horizontálního chronoru, který okolo sebe vytváří centrifugální bariéru lokalizovatelnou i mimo vlastní částici. Všimněme si, že v případě

$$\frac{2d_k V H}{v_h} \geq 2v_y , \quad ( 13.42 )$$

nelze u záření lokalizovat jednotlivá kvanta.

Obr. 13.60



Tento obrázek je však značně zidealizován z důvodu dobrého objasnění vzájemné spolupráce vertikálního a horizontálního impulsu. Ve skutečnosti velmi záleží na poměru  $v_y : v_h$ . V tomto případě je

$$v \cdot H_h < v_y; \quad v \cdot V_h > v_y, \quad (13.43)$$

kdežto my požadujeme

$$v \cdot H_h = v \cdot V_h. \quad (13.44)$$

Z toho plyne, že je-li

$$v_h > 2v_y \wedge v_x < v_y, \quad (13.45)$$

potom dochází ke vzájemnému prolínání  $v$  impulsmomentů v impulsu, a jejich přesnému skládání na sebe.

Tímto mechanismem se vytváří onen klasicky neprostupný impuls.

Tomu se samozřejmě přizpůsobí i horizontální impuls, ve kterém se impulsmomenty rovněž naskládají přesně na sebe.

To znamená, že na přesném schématu znázorňujícím uvažovaný stav nelze od sebe rozlišit vertikální a horizontální impuls.

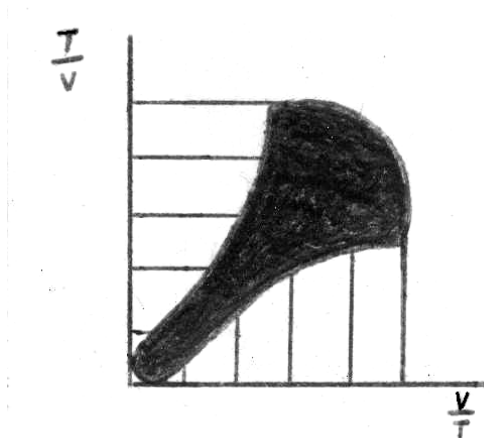
Oba chronory každé elementární částice, pohybující se rychlostí  $v \geq c$ , mají konstantní rychlost.

To znamená, že pro ně neplatí vztah pro grupovou rychlost zachovávající původní frekvenci při antigravitačním vlnovém rozptylu.

Již jsme si uvedli, že rychlost bodového chronoru u elementárních částic je rovna násobku rychlosti  $v_y$  tak, aby vznikl plný či dutý, klasicky neprostupný válec.

Čím více je tedy částice rozptýlena antigravitačním vlnovým rozptylem, tím se její vlnový balík pohybuje pomaleji, jak ukazuje obrázek 13.61.

Obr. 13.61



V některých případech může nastat následující situace:

Když částice dosáhne rychlosti světla, přestává pro její bodové chronory platit konstantní rychlost, a objevuje se i rozptyl Bornovou řadou.

Ve většině případů však vlna přejde pod rychlost světla a dostává se postupně do oblasti nerelativistické kvantové mechaniky.

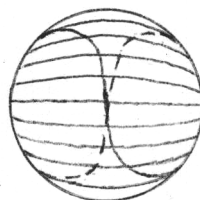
Dále je třeba podotknout, že  $v_h$  se ve většině případů klasicky neprostupných elementárních částic rovná  $2v_y$ , snad pouze u bodového chronoru aktivního preonu a kvantionu se lze setkat s rychlostí  $v_h > 2v_y$ , ačkoliv u kvantionu již nehovoříme o částici klasicky neprostupné, nýbrž netečné.

Další poznámka patří poněkud vzácnějšímu kvantově mechanickému jevu. Setkáme se s ním nejčastěji u stacionárních stavů částic, zřídka se však vyskytuje u záření. Proto je možné jej pozorovat např. u kvantionů, ale asi bychom jej hůře hledali u částic jako jsou midony, či preony a další. Jedná se o tzv. **horizontální spin (vratný impulsmoment)**, jenž je dán nerovnicí

$$v \cdot H^h > v \cdot V < v. \quad (13.46)$$

Přirozeně, na horizontálním spinu závisí i spin vertikální (13.45).  
Na obr. 13.62 vidíme schéma stacionární částice s  $VH$  spinem:

Obr. 13.62



Na obr. 13.63 pak schematický řez zářením s  $VH$  spinem:

Obr. 13.63



Uvažujme nyní částici se dvěma a více vertikálními impulsmomenty, tvořenými bodovými chronory, pohybujícími se vzájemně proti sobě. Je zřejmé, že mezi těmito chronory dochází pravidelně ke kolizím a to vždy v nulách Jostových funkcí. Tím se uvolňuje energie, která se šíří z místa srážky v podobě vlnění postupujícího jak po reálné, tak po imaginární ose. V místě na imaginární ose, kde energie dosáhla svého maxima, má částice pól.

Po dosažení pólu začne energie postupně klesat, a v další nule Jostovy funkce se blíží nule. V tom okamžiku však dojde k další srážce obou chronorů, čímž se energie opět obnoví, a to obvykle se vzestupnou či sestupnou gradací, závislou na interakci s okolním prostředím, tj. **prostorem superstrun**.

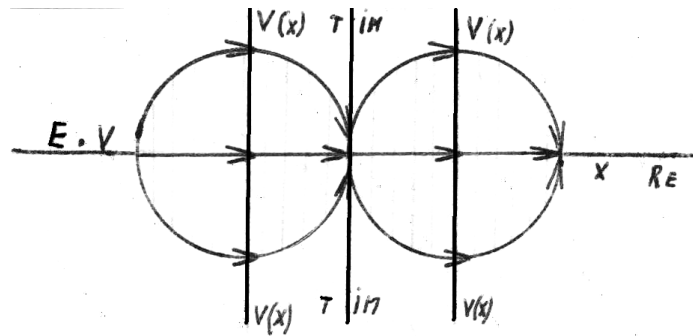
Tento jev, jež nám objasňuje mj. podstatu vlnově korpuskulárního dualismu kvantové teorie, nazýváme **sekundární cytorezonance**.



Ukazuje se, že vlnění je základní vlastností hmotných objektů v prostoročase. Částice která se nevlní, se posouvá pouze po reálné ose a to rychlostí  $v = \infty$ , neboť její posuv v prostoru  $V_{re}$  není redukován posuvem v čase  $T_{im}$ .

Schéma vedlejší cytorezonance si můžeme prohlédnout na obr. 13.64:

Obr. 13.64



Poznámka 1: značení použité ve schématu je typické pro WKB – metodu v kvantové teorii.

## 26: Tabernákulum

K vytvoření časové řady cizích vesmírů na jiné hypergrupě stačí ve vhodném místě prostoru, např. uvnitř uměle vytvořeného kolapsaru, bombardovat vlastní midon, tj. ještě nenarozený vesmír, soustředně orientovanými intenzivními proudy kvantionů či midonů.

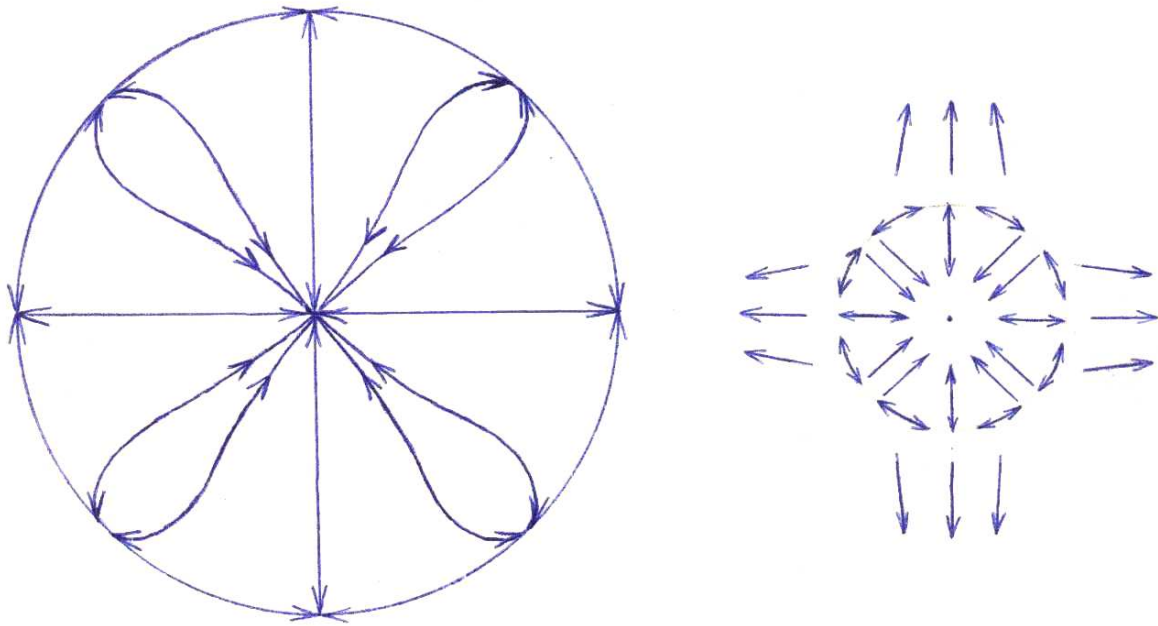
Tím dojde k odstředivým orientacím impulsů částice do 24 prostorových směrů, a spinu do 36 prostorových směrů.

Tak vzniká celkem 60 pohybových vektorů nutících částici rozpínat se na všechny strany najednou.

Vektory impulsu zároveň udržují neustálé zakřivení prostoru dané částice, čímž zabraňují jejímu rozpadu na ether.

Na obr. 13.65 je zobrazena dvourozměrná analogie tohoto rozptylu, díky němuž se midon mění v kvantion na jiné hypergrupě, tj. kupovesmír, v němž se za několik miliard let mohou vyvinout inteligentní bytosti.

Obr. 13.65



Je tedy docela dobře možné, že náš vesmír je dílem nějakého geniálního vědce na jiné hypergrupě. V současné době již uplynulo 20 miliard let od jeho zdařilého experimentu, při němž byl stvořen náš vesmír. Ze zákonů zachování baryonových a leptonových čísel totiž vyplývá, že mezi výslednými produkty reakce dvou baryonů, resp. leptonů, se bude nacházet nejméně jedna antičástice.

Např. proton má baryonové číslo 1

Proto jsme při reakci

$$p + p \rightarrow p + p + p + \bar{p} , \quad (13.47)$$

svědky rozmnožení dvou protonů na 3 protony a 1 antiproton.

Toto je nejmenší možný počet částic, který může vyprodukovat nepružná srážka dvou protonů.

Z hlediska zákona zachování baryonového čísla je vše v pořádku, neboť

$$1+1=1+1+1+(-1)=2 . \quad (13.48)$$

Z hlediska zákona zachování hmotnostního čísla však vše v pořádku není, neboť

$$2m_p \neq 4m_p . \quad ( 13.49 )$$

Při této reakci, která může při dostatečné energii kolidujících protonů vyprodukovat de facto libovolné množství částic, tj.

$$p + p = p + p + p + \bar{p} + p + \bar{p} + p + \bar{p} + \dots , \quad ( 13.50 )$$

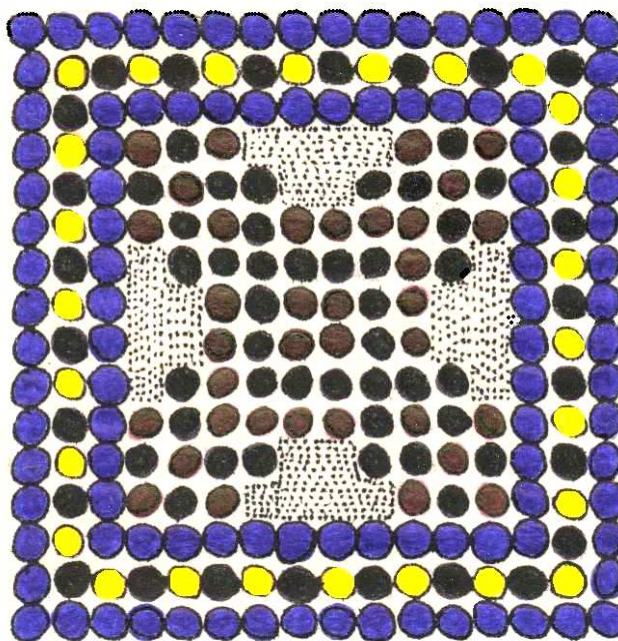
jsme svědky mnohonásobné produkce nových částic při současném zachování baryonového čísla, elektrického náboje, celkové energie atp., avšak zároveň vzrůstu hmotnostního čísla.

Tomuto procesu sice může zabránit anihilace částic s antičásticemi, avšak podaří-li se v prvopočátku udržet páry částic a antičástic v dostatečně veliké vzájemné vzdálenosti, může dojít ke vzájemnému oddělení vesmírů od antivesmírů, tj. vytváření kupovesmírů na cizích hypergrupách. Tak se tedy obyčejný smrtelník může stát stvořitelem, cizího vesmíru.

Tabernákulum (obr. 13.66), pracuje na principu kvantového přenosu informací mezi jednotlivými spoji na atomární úrovni. Mikročip obsahuje 6 základních prvků, z toho 3 výkonné segmenty umožňující prakticky okamžité vytvoření v podstatě libovolného stupně inteligence.

Tato schopnost čipu spočívá v kombinatorice nepřetržitého toku kvantového záření  $Y$  protékajícího všemi třemi systémy J.A. Interface mezi programátorem a tabernákulem zajišťuje 1536 kanálů na atomární úrovni, rozložených po povrchu čipu.

Obr. 13.66



Tabernákulum se nalézá uvnitř proteinového biočipu, který přijímá všechny informace a skrze příslušně výkonný computer zprostředkovává stálý tok informací mezi uživatelem a tabernákulem. Čip je schopen modelovat v prostoru struktury s libovolným stupněm Hausdorffovy dimenze, tj. libovolnou úrovní složitosti (omezení jsou samozřejmě kladena kvantovou strukturou prostoru).

Tímto způsobem lze z pomoci tabernákula libovolně přetvářet již existující hmotné struktury v prostoročase, stejně jako vytvářet struktury úplně nové, zcela dle vůle programátorovy. To vše na kvantionické úrovni.

Multiversum na různých hypergrupách se tak vlivem činnosti tabernákula může přetvářet na supervýkonné elektronické monstrum, v němž zajišťují přenos informací kvantionové proudy.

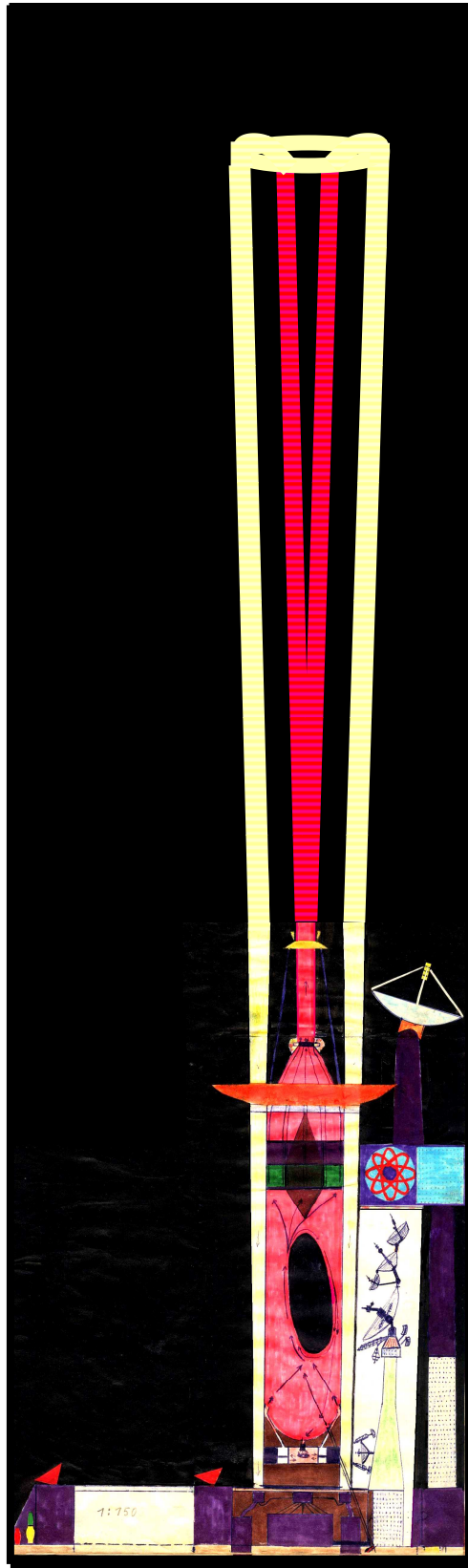
Uživatel má tak možnost během omezené doby ovládnout celý vesmír a to na mnoha hypergrupárních úrovních.

## Doplňky a přílohy k odstavcům

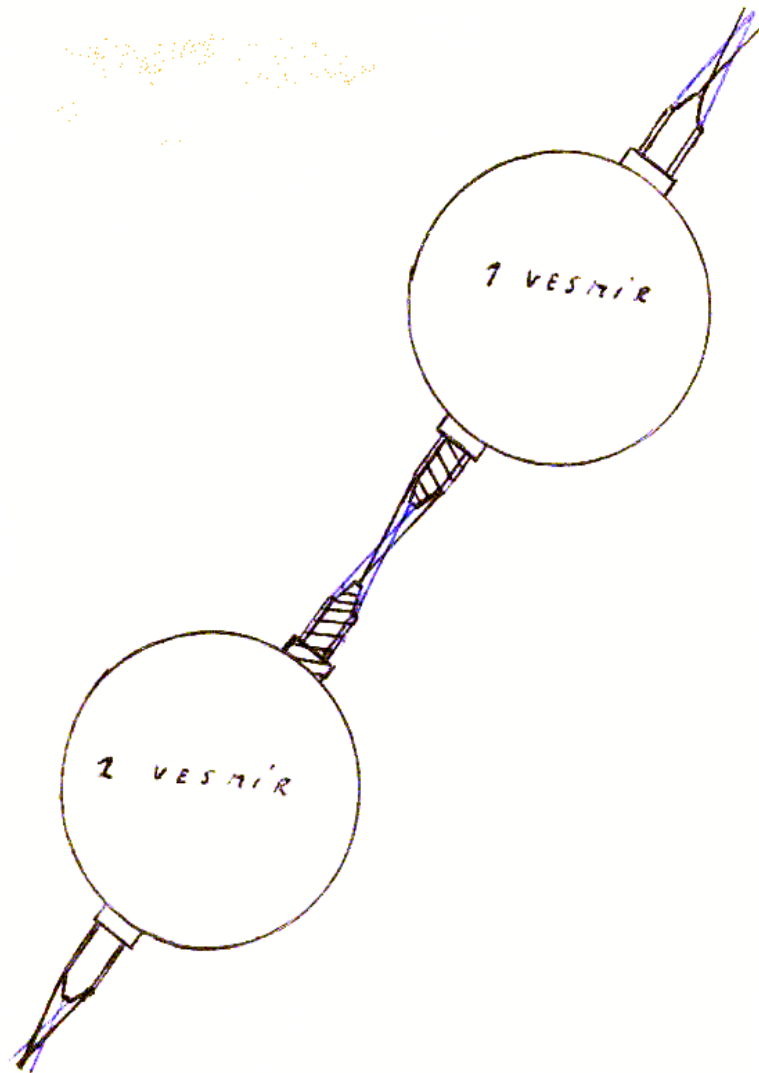
### *a) odstavec druhý*



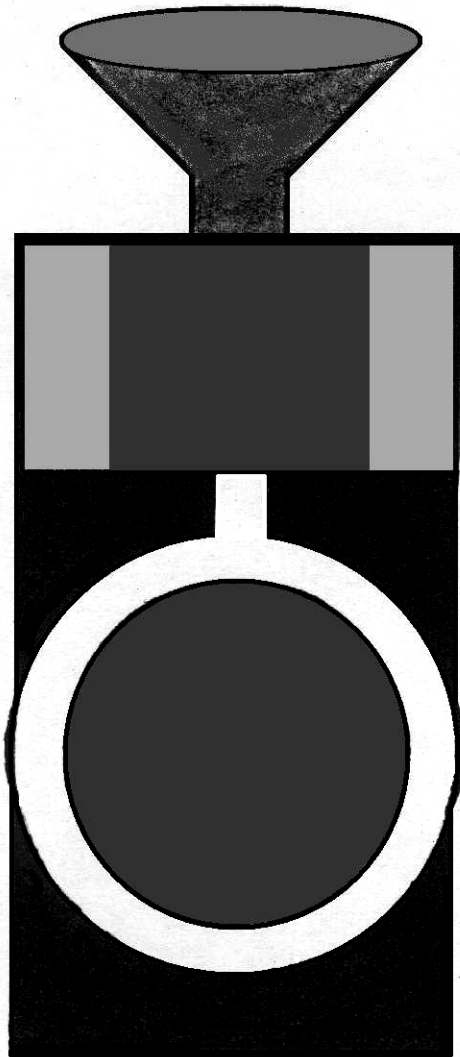
Obr. 13.67: schematický průřez komplexem preonového dalekohledu a preonové rakety.



Obr. 13.68: Princip činnosti preonového ďalekohľedu



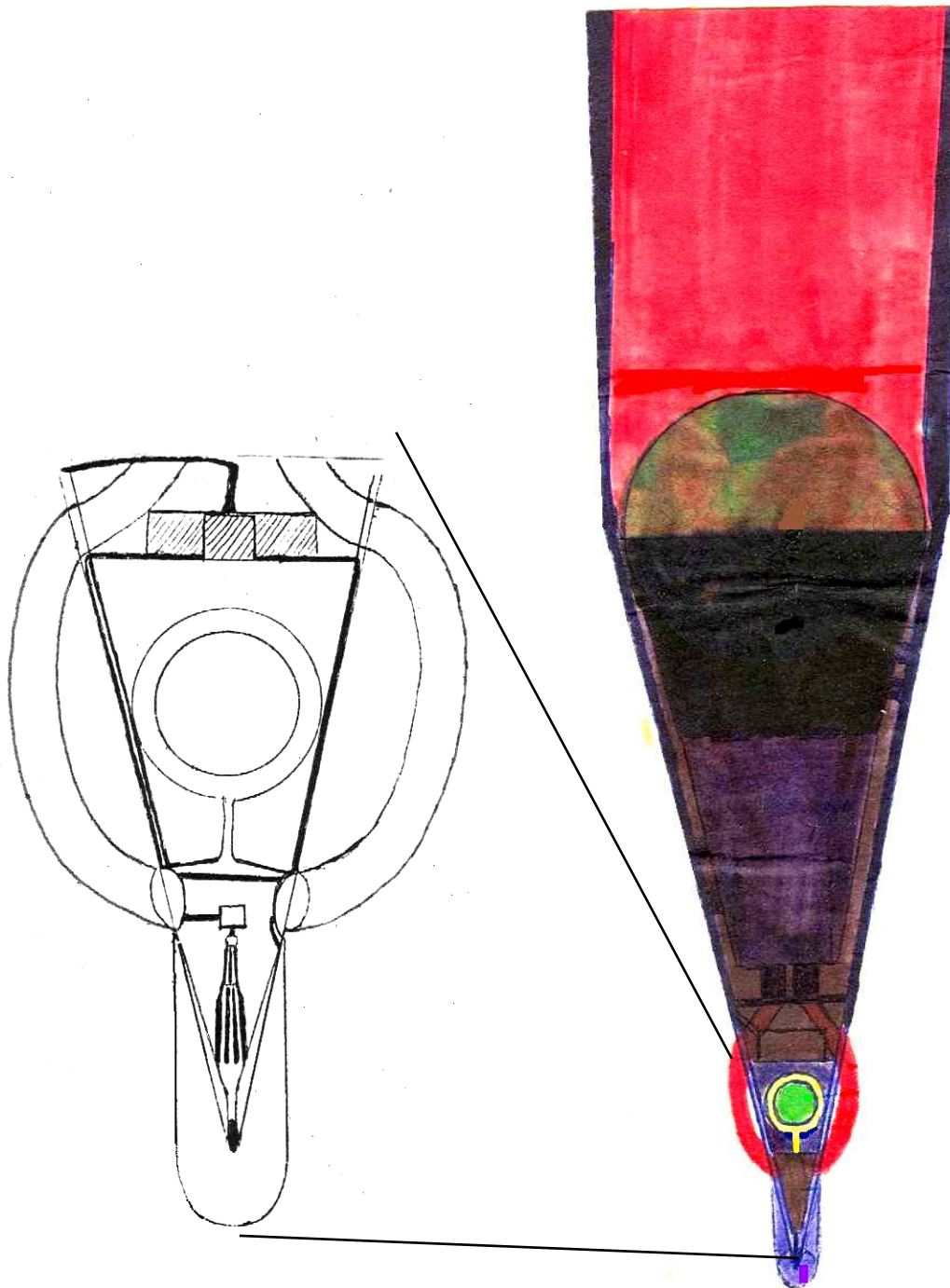
Obr. 13.69: schematické znázornění principu spolupráce dvou preonových dalekohledů.

*b) odstavec čtvrtý*

**Obr. 13.70 : kvantionový dalekohled**

Umožňuje dokonalý pohled na celý vnitřek kupovesmíru.  
Dalekohled může čerpat informace z Blandria, tj. dokáže číst veškerou minulou i budoucí historii kupovesmíru.



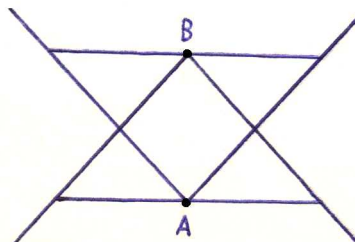


Obr. 13.71: Kvantionový mikroskop

Dovoluje rozlišení jednotlivých dekanentních mikročastic –1 a prostřednictvím jejich Blandria též pohled do jejich nitra. Kvantionový mikroskop je schopen minimálního zvětšení  $10^{10}$  krát a maximálního zvětšení  $10^{35}$  krát.

Jeho relativní rozlišovací schopnost však leží v intervalu  $(0; \infty)$ .  
 Od kvantionového dalekohledu se kvantionový mikroskop fakticky liší pouze nepoměrně nižší velikostí, hmotností a přístupovou dobou k získávaným datům

Obr. 13.72



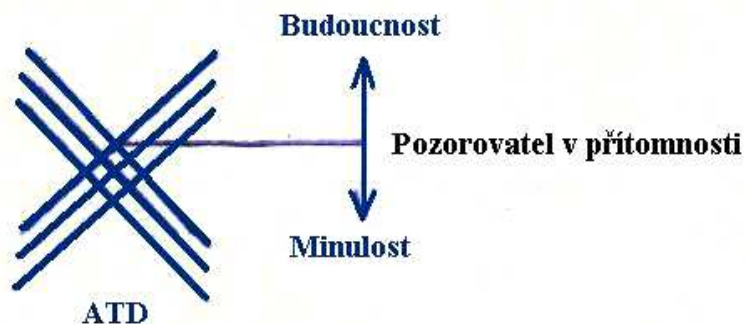
ČasoMultiversum je jako asi vše relativní, neboť závisí na místě pozorování jakéhokoliv děje.

Např. světlo vycházející z bodu  $A$  na obr. 13.72 vytváří prostoročasový kužel směřující do budoucnosti.

Ta se projevuje v bodě  $B$ , ve kterém tamější pozorovatel sleduje vzdálenou minulost (závisící přirozeně na vzájemné vzdálenosti bodů  $A, B$ ), jež se mu jeví v bodě  $A$ .

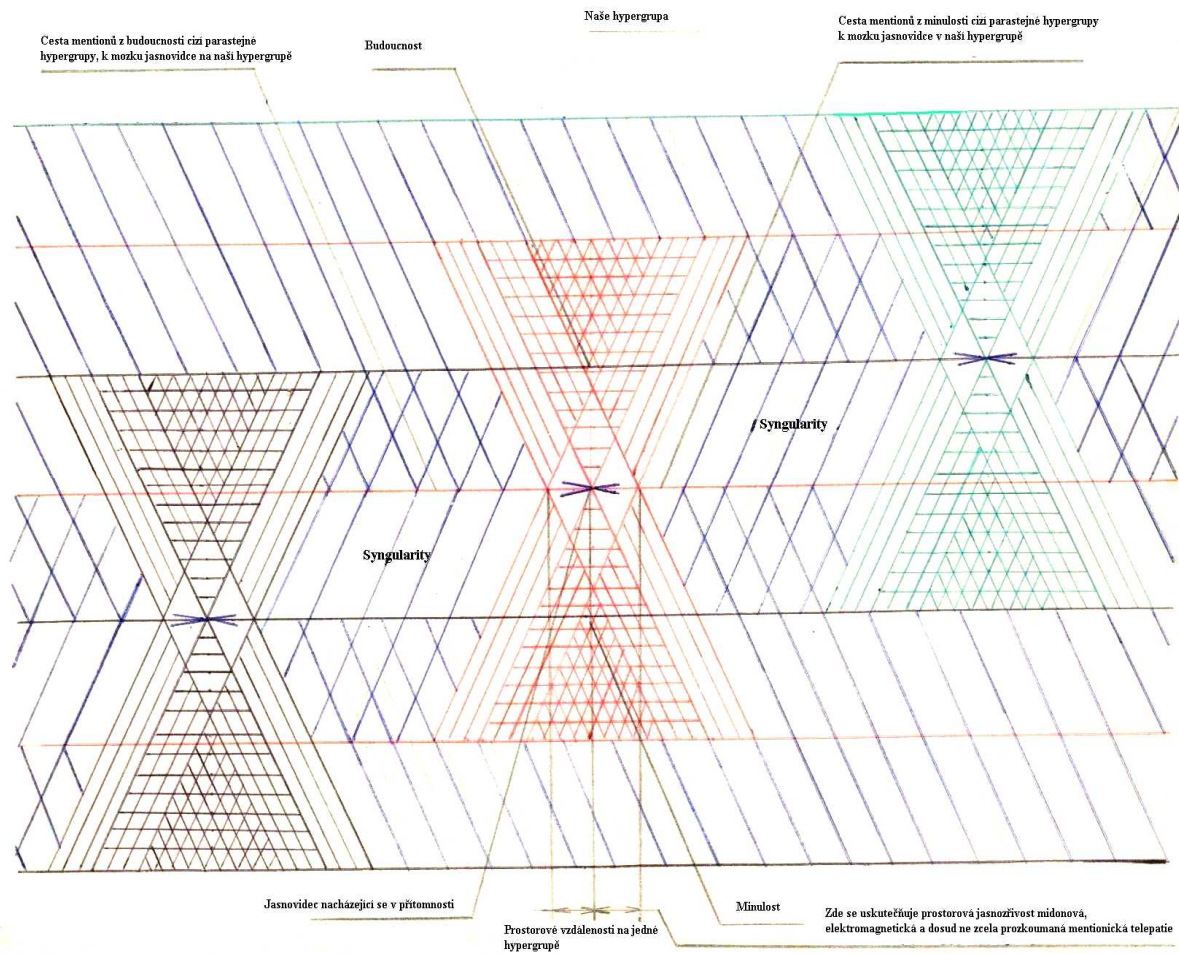
Bod  $B$  však rovněž vyzařuje světlo, které naopak směřuje do budoucnosti v bodě  $A$ , kde pozorovatel spatřuje světlo nesoucí záznam o vzdálené minulosti bodu  $B$ .

Obr. 13.73



Na obr. 13.74 jsou vidět prostoročasové kužely směřující od minulosti do budoucnosti (pro znázornění interčasohypergrupární geometrie prostoročasu jsem zde volil vodorovnou osu reprezentující prostor a svislou osu reprezentující čas).

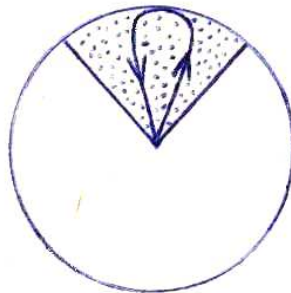
Obr. 13.74



Midonový signál se šíří prostorem rychlostí  $v_y$  a jeho pohlcování látkou je prakticky zanedbatelné.

Žádná hmota není tedy schopna midonový signál zcela odstínit.

Obr. 13.75: průřez výkrojem Multiversa:



Hmota v podobě kupovesmírů, se přemísťuje od středu k okraji Multiversa, kde z nich vznikají částice midony.

Ty se vracejí zpět do středu Multiversa, kde se mění opět v kvantiony, tj. kupovesmíry a poté znovu směřují k okrajům Multiversa.

Obrázek 13.75 je pouze symbolickou pomůckou pro lepší pochopení kvantion-midonové interakce a nelze jej brát doslovně, coby znázornění závislosti toku Času na pohybu kvantionů a midonů.

Grafické znázornění tohoto procesu v celoprostorovém měřítku je pochopitelně nemožné, neboť interakce prochází přes velké množství metafyzických úrovní.

Obrázek 13.75 tedy znázorňuje pouze lokální kvantion-midonové interakce a nebere přitom v potaz interdimenzionální pohyb těchto částic ani globální pohyb kvantionů a midonů, který se realizuje jak na naší, tak i na cizích dialektických úrovních, jež jsou díky němu neodlučitelně sdruženy, navazujíc jedna na druhou, zdůrazňujíc princip stvoření a ukazujíc tak nesmyslnost evolučního chápání času.

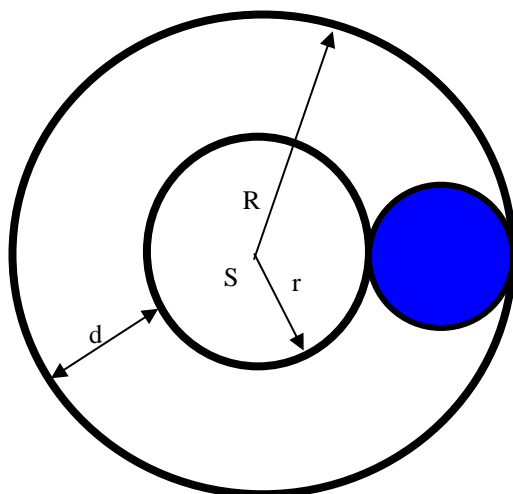
### *c) odstavec devátý*

Teoreticky lze předpokládat i stacionární vesmír znázorněný na obrázku 13.76.

Jednalo by se o jakousi bublinu s neustále se rozšiřující stěnou, jejíž nepatrnou oblast zaujímá náš pozorovatelný vesmír (znázorněn tmavě).

Šířka  $d$  se tedy v tomto modelu zvětšuje, zatímco poloměr  $R$  zůstává konstantní.

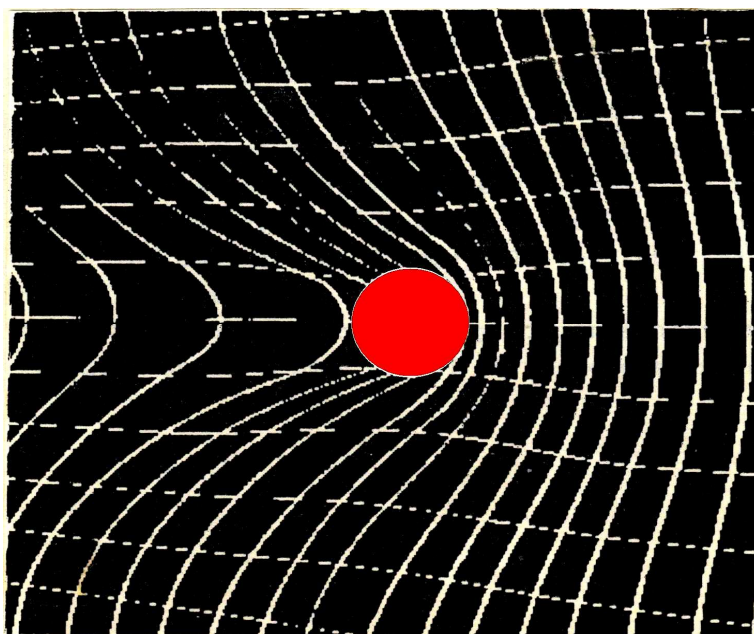
Obr. 13.76



Podobné modely se ukazují být velice zajímavé zejména z hlediska tzv. **S-dualit** hrajících klíčovou úlohu v **teorii strun**.

Na velmi jednoduchém základě by se zde vysvětloval rovněž původ setrvačných sil, jakožto snaha prostoru klást odpor proti narušení původní statické symetrie prostoročasových souřadnic, vyvolané nerovnoměrným pohybem hmotného tělesa v prostoru (viz obr. 13.77):

Obr. 13.77



*d) odstavec sedmnáctý*

Až doposud jsme se zabývali geometrickými objekty, které jsme definovali jako podmnožiny eukleidovského dvourozměrného či třírozměrného prostoru.

Podle míry (délka, obsah, objem), kterou lze použít k určení velikosti těchto podmnožin, se geometrické objekty rozdělují na objekty typu bod, křivka, plocha a těleso.

Míra množiny úzce souvisí s pojmem dimenze.

Přímku považujeme za jednodimenzionální, čtverec za dvoudimenzionální, krychli za třidimenzionální.

U složitějších množin mluvíme o tzv. **topologické dimenzi**.

Intuitivně je definována tak, že body prohlásíme za multidimenzionální.

Křivka je jednodimenzionální, protože se dá bodem rozdělit na dvě disjunktní podmnožiny.

Analogicky plocha je dvoudimenzionální, protože ji lze pomocí jednodimenzionální křivky rozdělit na disjunktní oblasti.

Podobně určíme dimenzi tělesa.

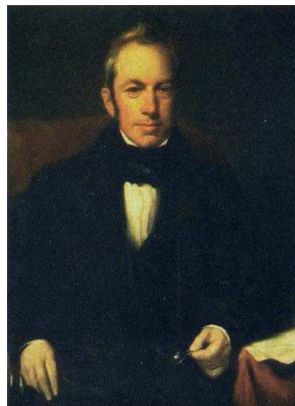
Topologie se pak zabývá tím, co se při spojitých transformacích nemění.

Základní typy transformací jsou translace, rotace, reflexe, zvětšení či zmenšení.

Toto jsou zvláštní případy tzv. **afinních transformací**.

Přírodní útvary však v drtivé většině vykazují vlastnosti, které jsou topologicky nepostižitelné.

V přírodě se spíše než s pravidelnými útvary jako je čtverec, kružnice, krychle apod., setkáváme s útvary nepravidelnými.



**Robert Brown (1773 – 1858)**

Týká se to jak makrosvět (hory, mraky, stromy), tak mikrosvět (buňky, Brownův pohyb mikroskopických částic atd.), jak živé tak neživé přírody.

Tyto přírodní útvary nejsou shodné, ale jejich tvary nejsou zcela náhodné či chaotické. Jsou si podobné.

Otázka podobnosti zaujala některé matematiky v období šedesátých a sedmdesátých let 20. století.

Ti zavedli pojem **soběpodobnost** (self-similarity).

Teorie soběpodobnosti se pak stala základem fraktální geometrie,

která se zabývá generováním a výzkumem soběpodobných objektů.

Soběpodobné útvary se vyskytují v učebnicích matematiky již od 19. století, jakožto konstrukce podivných objektů.



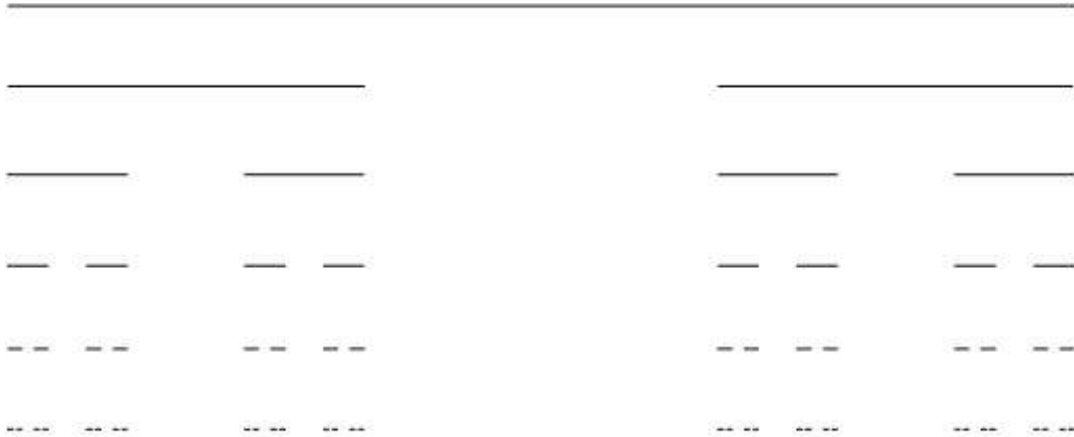
**Georg Ferdinand Ludwig Philipp Cantor (1845 – 1918)**

Prvními z nich byly např. **Cantorovo diskontinuum** (viz obr. 13.78) či **Bolzanova** křivka, která nemá v žádném svém bodě derivaci, tj. ani tečnu.



**Bernhard Placidus Johann Nepomuk Bolzano (1781 – 1847)**

Obr. 13.78



Následovaly další konstrukce, jako např. **Kochova křivka** (obr. 13.87), která má nekonečnou délku, ačkoliv ohraničuje konečnou plochu.

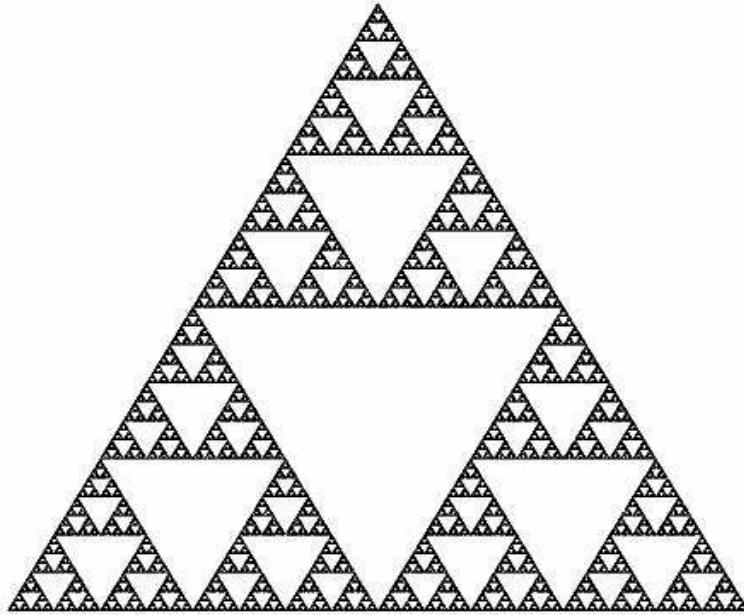
Dále pak **Sierpinského trojúhelník** (obr. 13.79), **Sierpinského čtverec** (obr. 13.80), a **Sierpinského koule** (obr. 13.83), které mají nekonečně velký obvod, ale nekonečně malý povrch resp. obsah. Dále **Sierpinského jehlan** (obr. 13.81) a **Sierpinského krychle** (obr. 13.82), mající nekonečný povrch, avšak nekonečně malý objem.



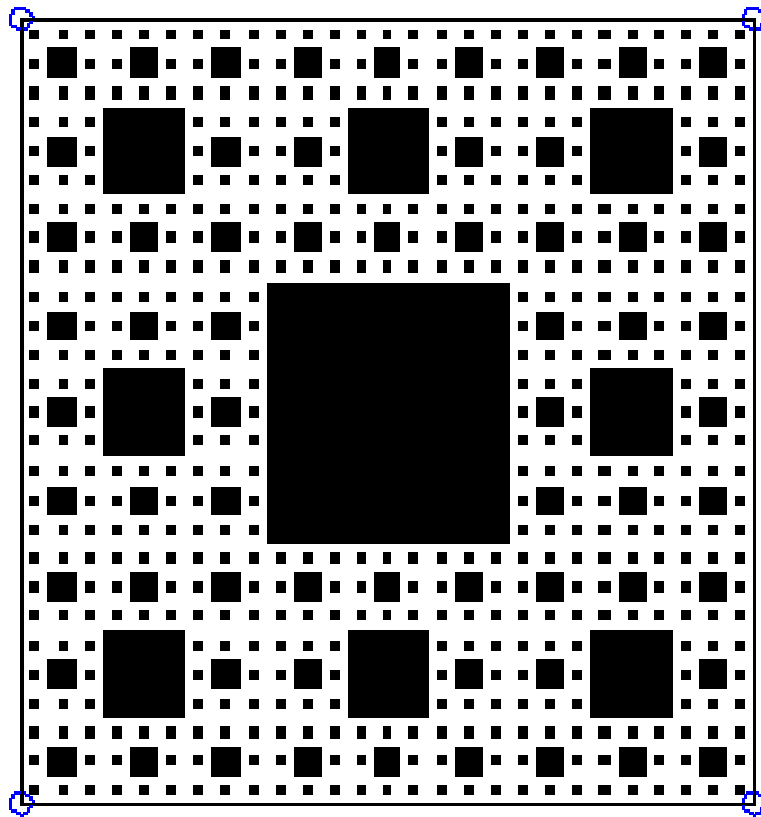
Niels Fabian Helge von Koch (1890 – 1924) Waclaw Franciszek Sierpinski (1882 – 1969)



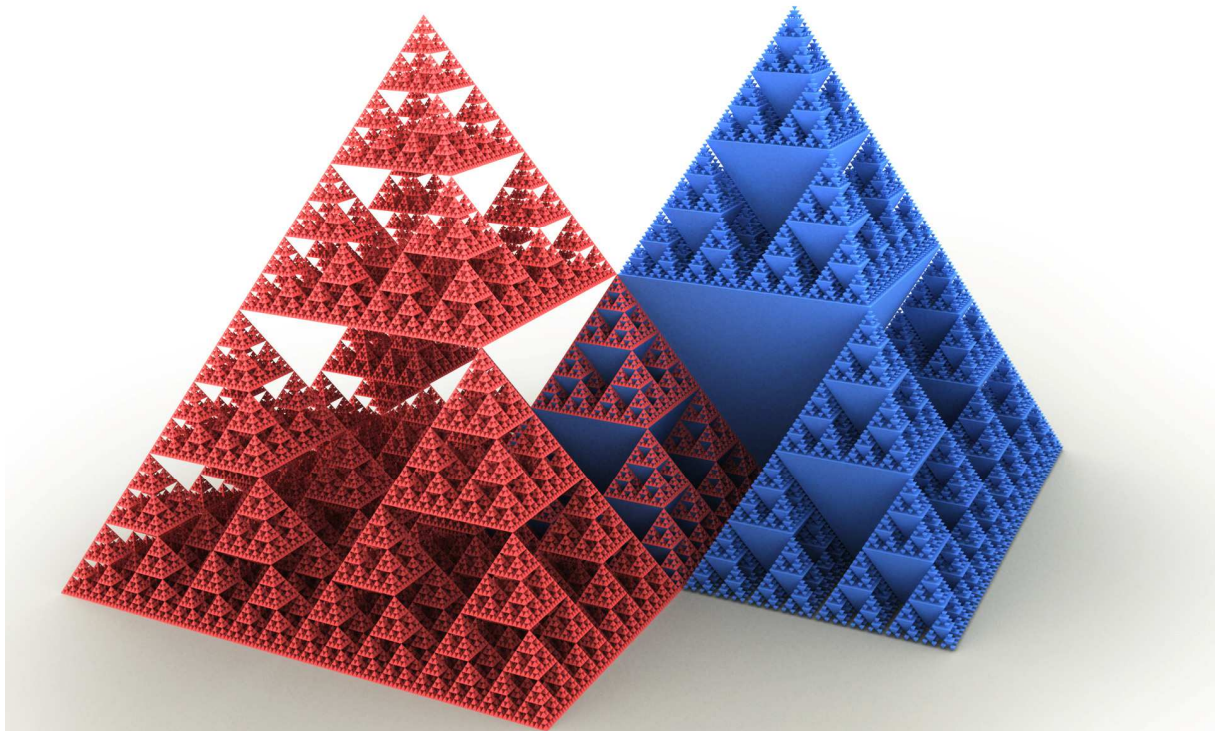
Obr. 13.79



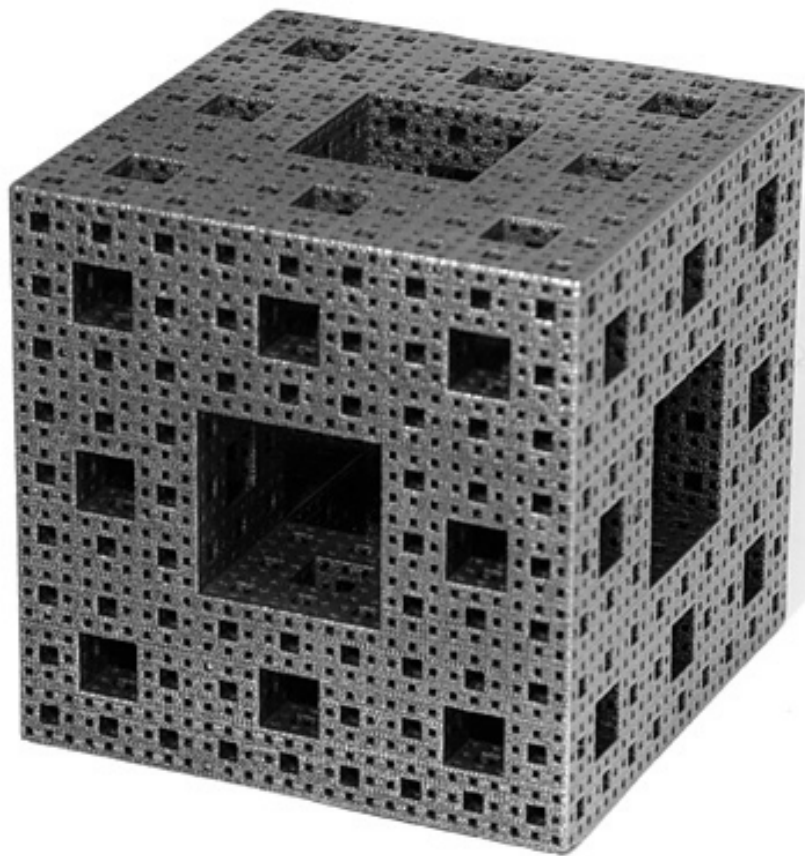
Obr. 13.80



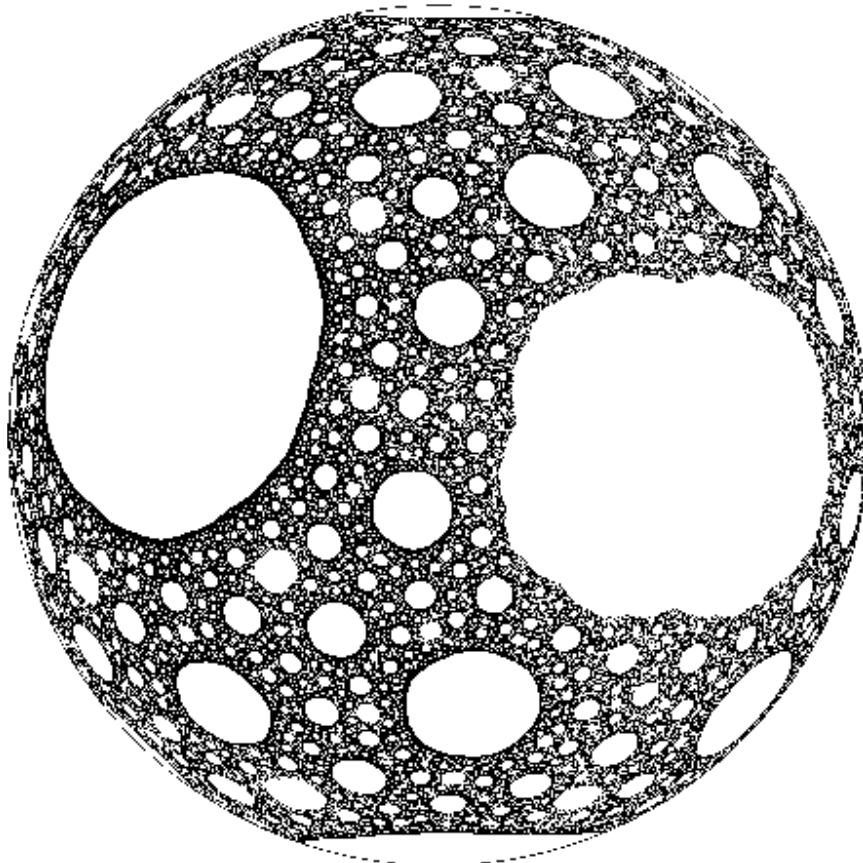
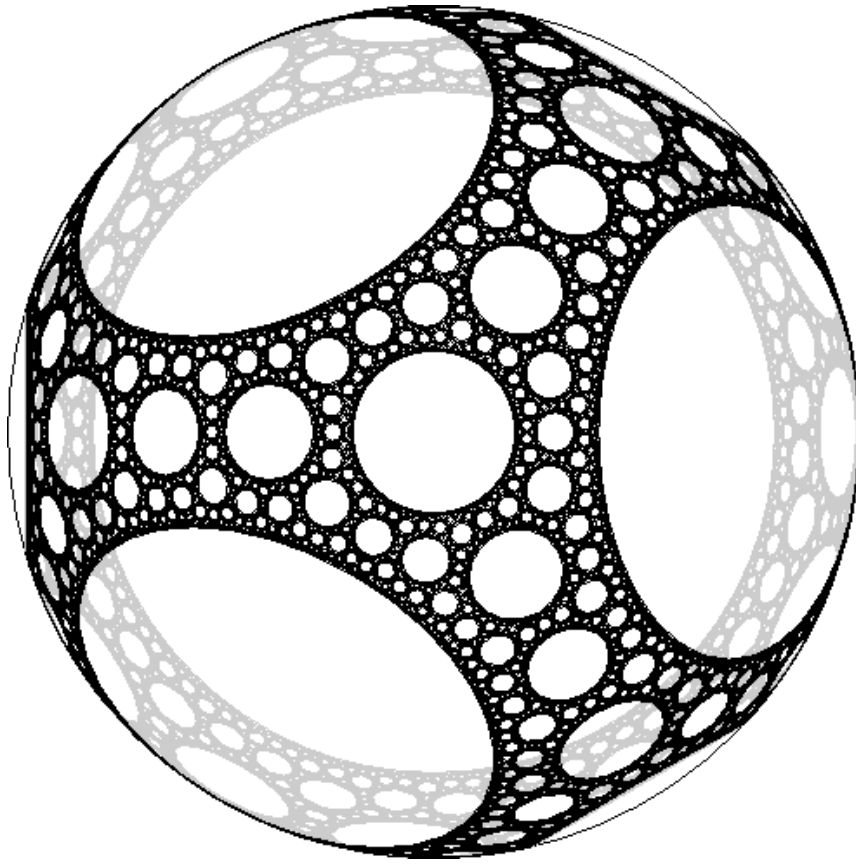
Obr. 13.81



Obr. 13.82



Obr. 13.83



Tyto útvary byly dlouhou dobu považovány za patologická monstra. Byl to především Benoit B. Mandelbrot – matematik polského původu, kterému se v 70. letech 20. století podařilo nalézt souvislost mezi soběpodobnými objekty v matematice a přírodními útvary.



**Benoît B. Mandelbrot (1924 – 2010)**

Ukázal, že to, co bylo v matematice považováno za dovádění myšlenkových konstrukcí ad absurdum, se může stát základem pro matematické modelování přírodních útvarů.

Pro běžné útvary vystačíme s dimenzemi 0, 1, 2 nebo 3.

Proto bylo poměrně velkým překvapením, když byly objeveny zvláštní geometrické útvary, pro které toto rozdělení na celočíselné dimenze není dostatečné.

Některé tyto útvary nejsou jen abstraktní objekty vzniklé fantazií matematiků, ale mají své vzory přímo v přírodě.

Mandelbrot studoval jev soběpodobnosti v různých souvislostech, ale především jej zaujala skutečnost, že délka mořského pobřeží závisí na délce použitého měřidla.

Můžeme se pokusit vypočítat délku pobřeží ostrova jehož linie je zobrazena na mapě která má určité měřítko, např. 1: 1 000 000.

Budeme-li používat k měření stále kratší tyč, naměřená délka se bude zvětšovat.

V limitním případě pak bude délka libovolného pobřeží nekonečná (uvažujeme čistě geometrický případ – v reálném světě zabrání této nekonečnosti kvantová struktura prostoročasu – viz např. kvantová geometrodynamika).

Stejného výsledku dosáhneme, použijeme-li stále podrobnější mapy, tj. budeme-li postupně zvětšovat měřítko mapy přičemž ponecháme konstantní délku měřicí tyče.

Odtud vyplývá, že pro členitý útvar jako je pobřeží, není délka vhodnou mírou.

Mandelbrot ukázal, že vhodným matematickým pojmem pro vyjádření stupně členitosti je tzv. **zobecněná Hausdorffova dimenze**.

Pojem Hausdorffovy dimenze vysvětlíme na příkladě jednotkové úsečky. Rozdělme tuto úsečku na  $N$  dílů.

To odpovídá tomu, jako bychom se na úsečku podívali s  $N$ -násobným zvětšením. Měřítko nové úsečky se tedy vypočte jako

$$S = \frac{1}{N} . \quad (13.51)$$

Pro délku úsečky  $L$  zřejmě platí:

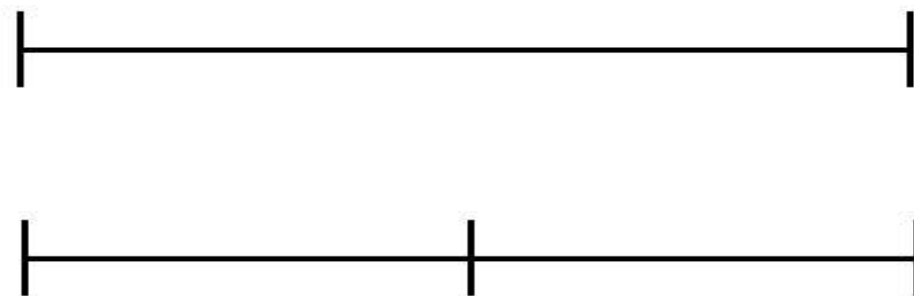
$$L(S) = N(S) \cdot S^d = 1 . \quad (13.52)$$

To je exponenciální rovnice pro neznámou  $d$ , jejíž řešením je

$$d = \frac{\log N}{\log \frac{1}{S}} = \frac{\log N}{\log N} = 1 . \quad (13.53)$$

Hausdorffova dimenze  $d$  úsečky je rovna 1 stejně jako její dimenze topologická.

Obr. 13.84



Analogicky můžeme dospět k dimenzi jednotkového čtverce či krychle.

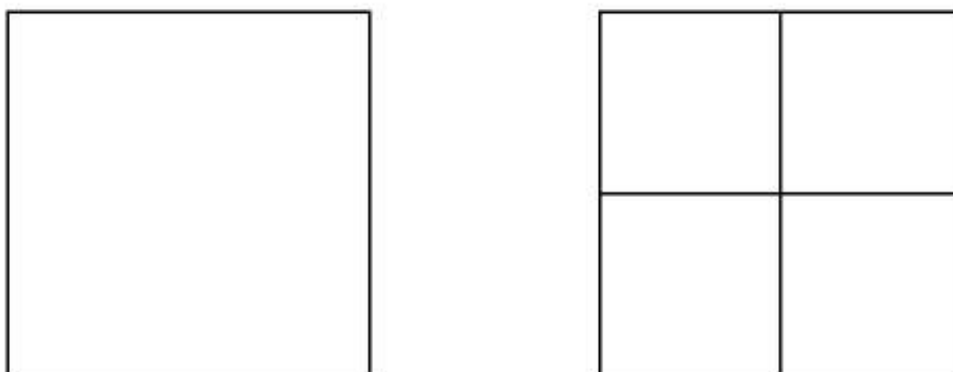
Zkonstruujme čtverec o jednotkové ploše.

Po dvojnásobném zjemnění vypadá čtverec tak, jakoby měl čtyřnásobnou plochu.

Měřítko se tedy musí změnit podle vztahu

$$S = \frac{1}{\sqrt{N}} . \quad ( 13.54 )$$

Obr. 13.85



Hausdorffova dimenze čtverce pak vyjde

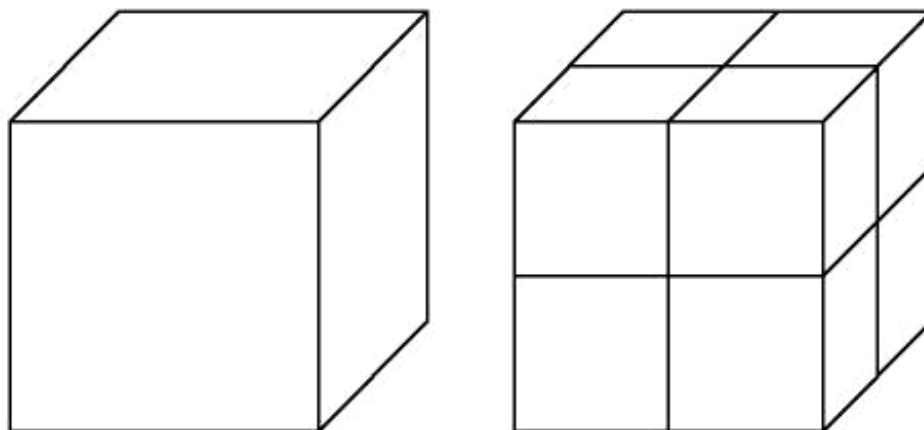
$$d = \frac{\log N}{\log \frac{1}{S}} = \frac{\log N}{\log \sqrt{N}} = \frac{\log N}{\frac{1}{2} \cdot \log N} = 2 . \quad ( 13.55 )$$

Topologická dimenze čtverce je taktéž rovna dvěma, takže i v tomto případě dochází ke shodě s dimenzí Hausdorffovou.

Pro vyšší dimenze vypadá výpočet podobně.

Například s rozdělením krychle na díly se výsledné krychličky zmenší o třetí mocninu z  $N$ .

Obr. 13.86



Měřítko se tedy vypočte jako

$$S = \frac{1}{\sqrt[3]{N}} , \quad (13.56)$$

a Hausdorffova dimenze krychle vyjde

$$d = \frac{\log N}{\log \frac{1}{S}} = \frac{\log N}{\log \sqrt[3]{N}} = \frac{\log N}{\frac{1}{3} \cdot \log N} = 3 , \quad (13.57)$$

opět ve shodě s topologickou dimenzí krychle.

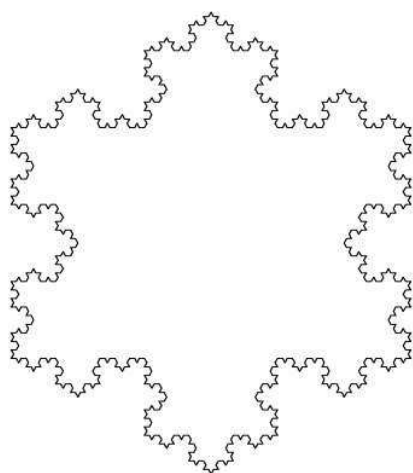
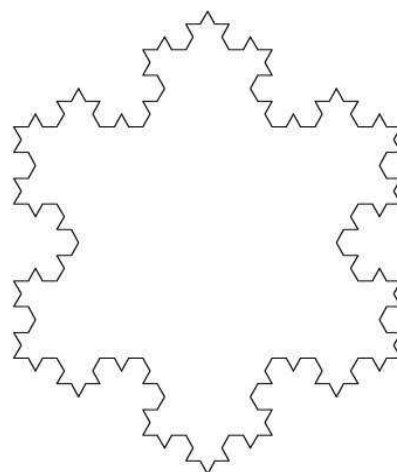
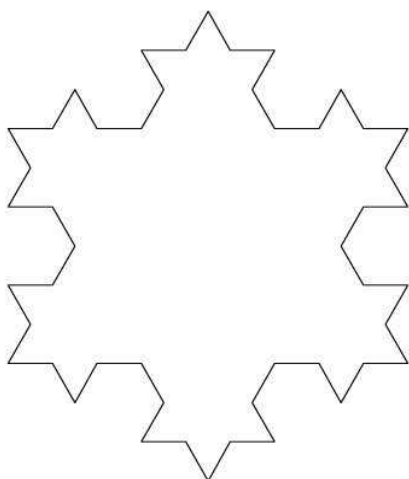
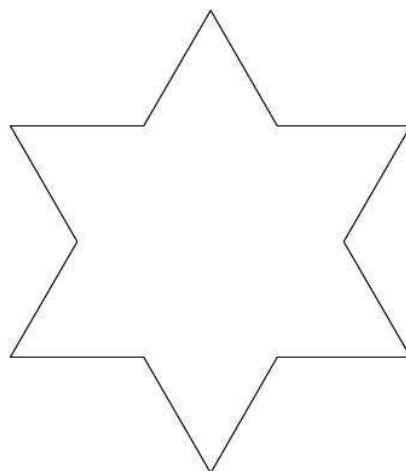
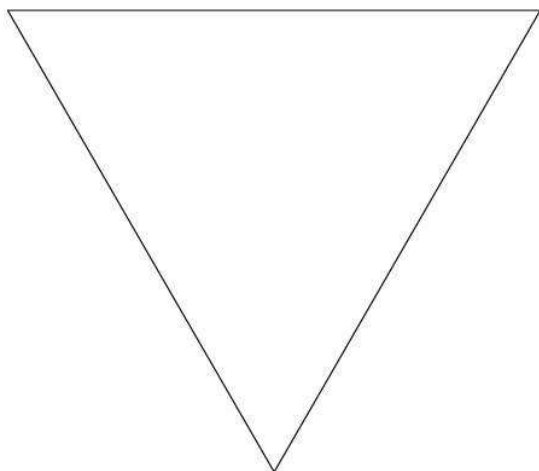
Jaká je ovšem např. dimenze Kochovy křivky?

Jedná se o útvar jehož zjemnění spočívá v tom, že se každá úsečka předchozího útvaru nahradí dvěma úsečkami s třetinovou délkou a rovnostranným trojúhelníkem sestrojeným uprostřed mezi dvěma novými úsečkami (viz obr. 13.87).

Při trojnásobném zjemnění se délka zvětší čtyřikrát.

Proto Hausdorffova dimenze Kochovy křivky není celé číslo:

Obr. 13.87





Pro  $N = 4$  se tedy měřítko musí zmenšit na třetinu:

$$S = \frac{1}{3}, \quad N = 4. \quad (13.58)$$

Hausdorffova dimenze tedy tentokrát vyjde

$$d = \frac{\log N}{\log \frac{1}{S}} = \frac{\log 4}{\log 3} \approx 1,2618595, \quad (13.59)$$

tj. neceločíselně.

Z toho plyne, že délku ani obsah (tj. míru objektů dimenze 1 nebo 2) nelze použít jako míru Kochovy křivky.

Pro tuto míru je třeba vzít hodnotu její Hausdorffovy dimenze  $d = 1,2618595$ .

Tím jsme ukázali, že Hausdorffova dimenze, na rozdíl od topologické může nabývat i neceločíselných hodnot.

Geometrický útvar s neceločíselnou Hausdorffovou dimenzí se nazývá **fraktál**.

Fraktální křivka má tedy v dvoudimenzionálním prostoru dimenzi  $1 < d < 2$ , v třídimeznionálním prostoru pak dimenzi  $1 < d < 3$ .

Hausdorffova dimenze fraktálů je vždy vyšší, nežli jejich dimenze topologická.

Např. Kochova křivka je z topologického hlediska stále pouze jednorozměrným útvarem.

Pro modelování zeměpisných útvarů jsou vhodné fraktální útvary s dimenzí o 0,2 až 0,3 větší než je jejich topologická dimenze.

V následující tabulce je uveden odhad Hausdorffovy dimenze některých přírodních útvarů.

Tab. 13.3

Přírodní objekt	Odhad Hausdorffovy Dimenze
Pobřeží	1,26
Povrch lidského mozku	2,76
Neerodované skály	2,3
Obvod dvourozměrného Průmětu oblaku	1,33

Obecně existují i křivky, které zaplňují celou plochu, tzn. Jejich topologická dimenze je rovna jedné, zatímco jejich Hausdorffova dimenze je rovna dvěma.



**Pierre Joseph Louis Fatou (1878 – 1929)**

Mezi takové křivky patří i hranice známé **Mandelbroty množiny** – nejsložitějšího to útvaru, jaký kdy matematika měla tu čest prozkoumat (viz obr. 13.88).

Množinu jako první definoval v roce 1905 francouzský matematik Pierre Fatou, studující různé rekurzivní procesy, jako např.

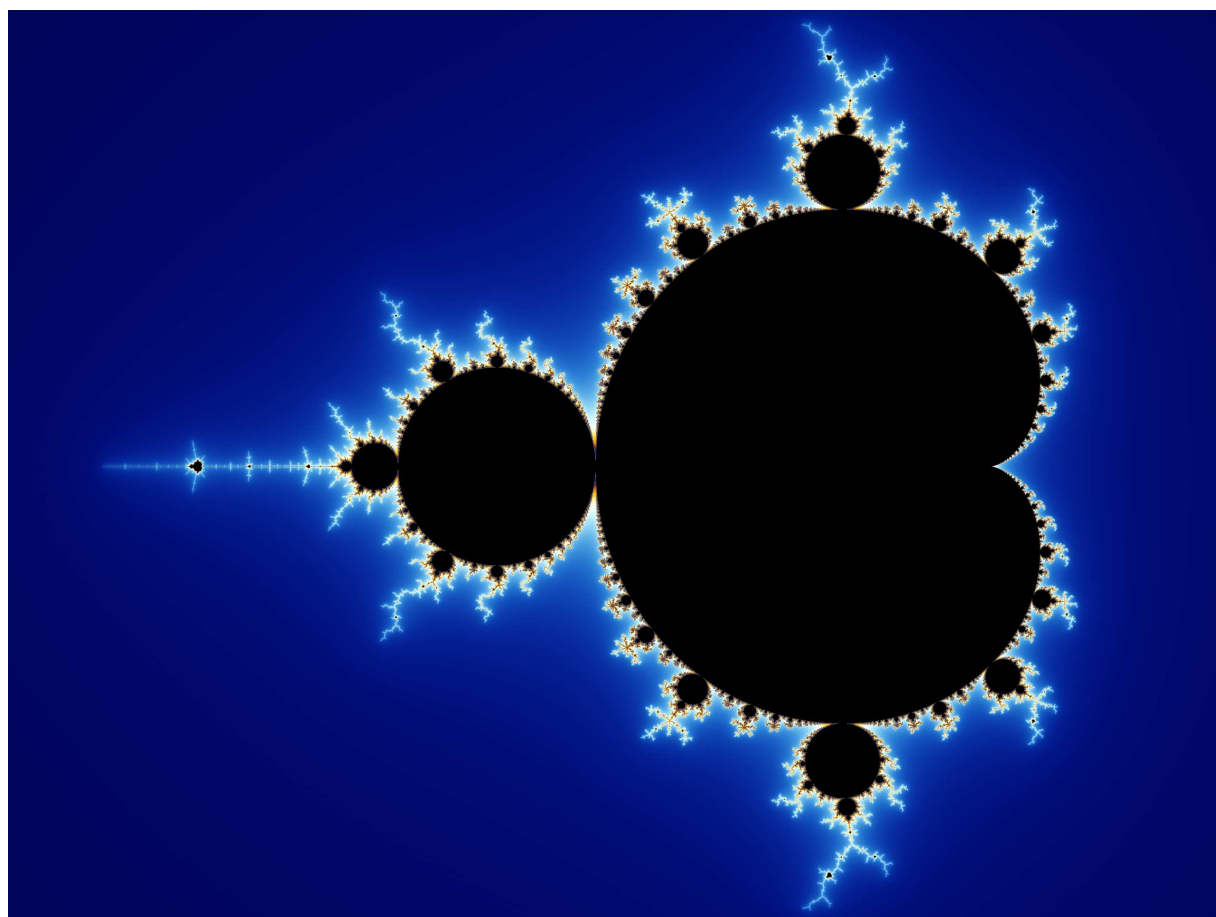
$$z_{n+1} \rightarrow z_n^2 + c. \quad (13.60)$$

Pokud se taková operace opakovaně provádí z nějaké počáteční hodnoty  $z_0$ , vznikne tím posloupnost bodů, která se označuje jako orbit bodu  $z_0$  vůči dané transformaci. Fatou si uvědomil, že o chování

podobných systémů dobře vypovídá studium orbity bodu  $z_0 = 0$ . Takových systémů existuje nekonečně mnoho (jeden pro každou hodnotu  $c$ ). Jelikož Fatou neměl k dispozici počítač, pokusil se vytvořit orbity několika takových funkcí ručně, přičemž našel, že posloupnost jde do (komplexního) nekonečna pro všechna  $|c| > 2$ , takže pokud kterýkoliv člen posloupnosti překročí tuto hranici, pak  $c$  není prvkem Mandelbrotovy množiny.

Ruční výpočty byly pochopitelně velice náročné, takže Fatou nikdy to, co se dnes označuje jako Mandelbrotova množina, na vlastní oči nespatriil. Prvním, kdo tuto množinu nechal vykreslit počítačem, byl Benoît Mandelbrot, podle kterého je také pojmenována.

Obr. 13.88



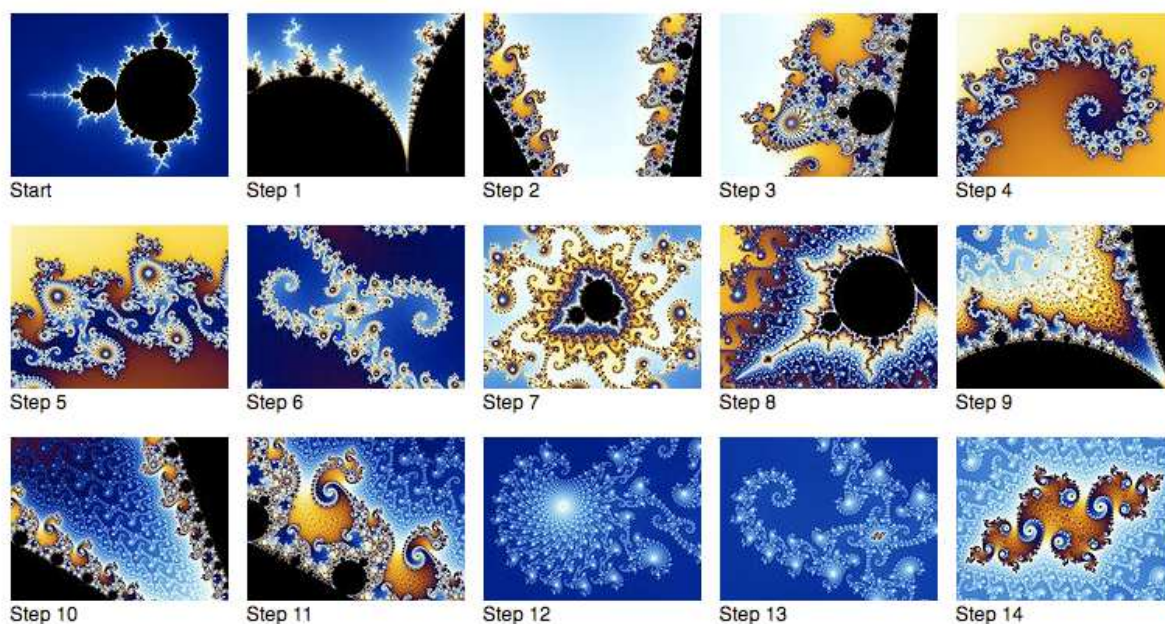
V okolí Mandelbrotovy množiny lze nalézt množství roztočivých symetrických útvarů, které objevil a popsal Gaston Lulia.



Gaston Maurice Julia (1893 – 1978)

Tyto tzv. **Juliovy množiny** lze odhalit prostým zoomováním okolí Mandelbrovy množiny, jak ukazuje následující sekvence obrázků.

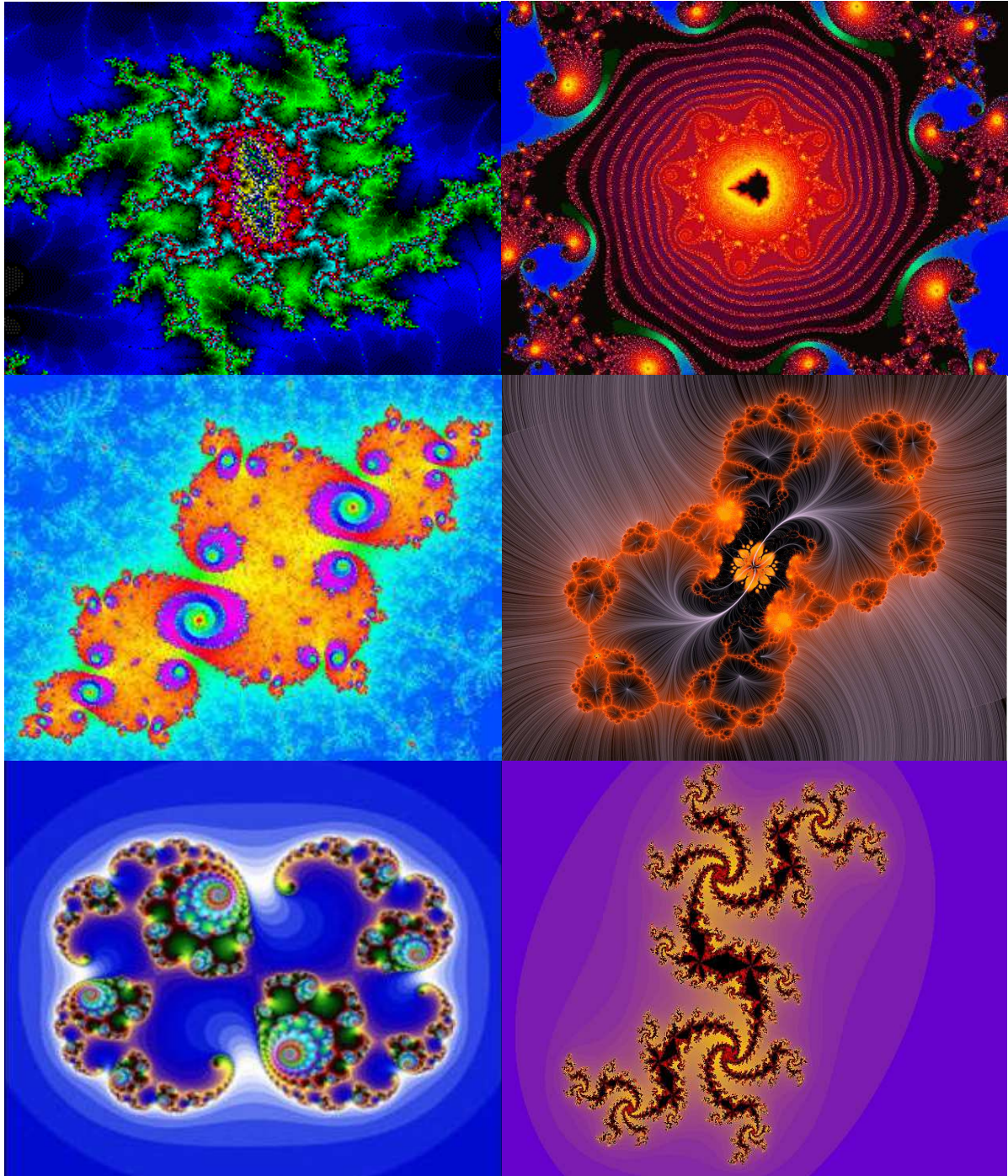
Obr. 13.89

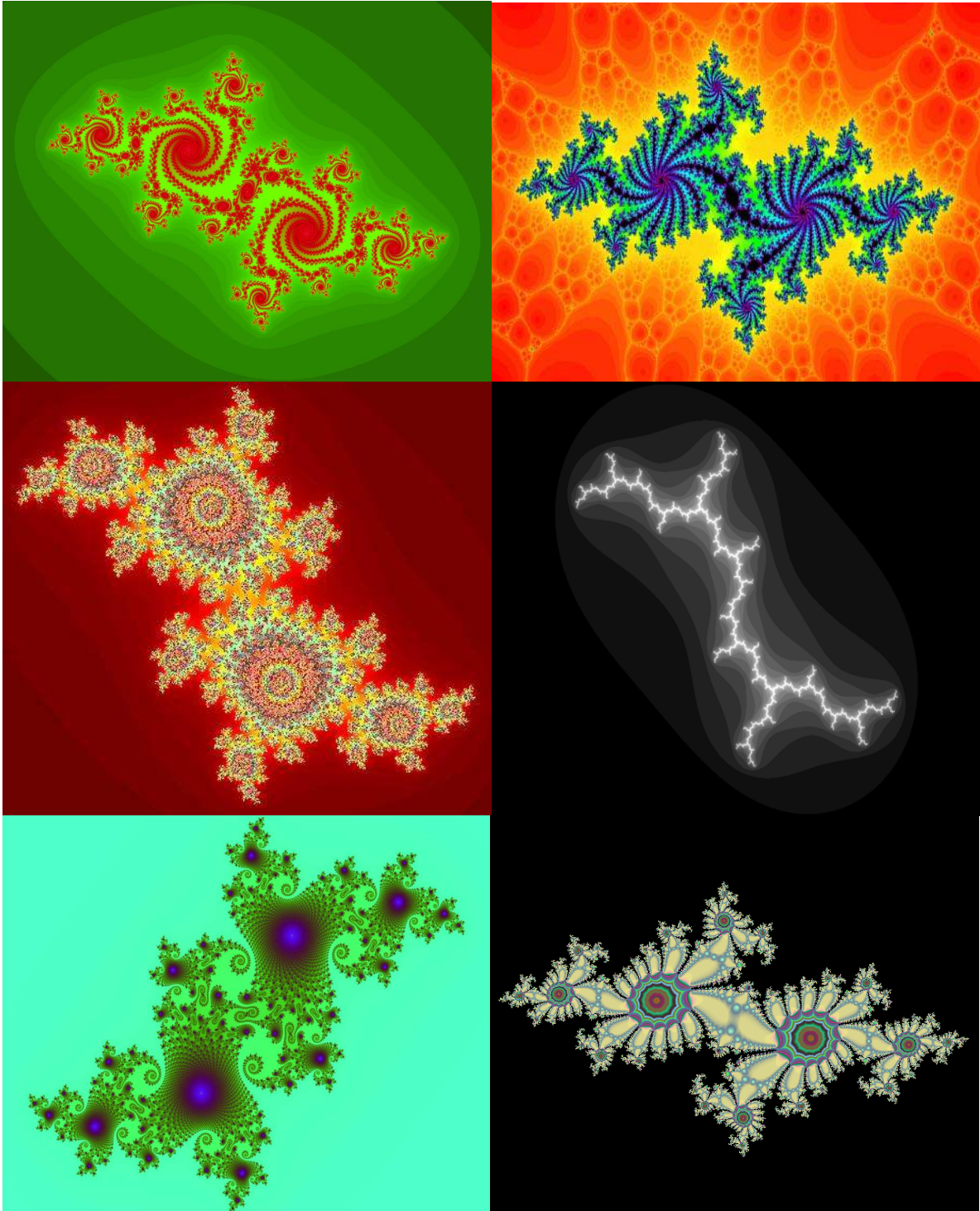


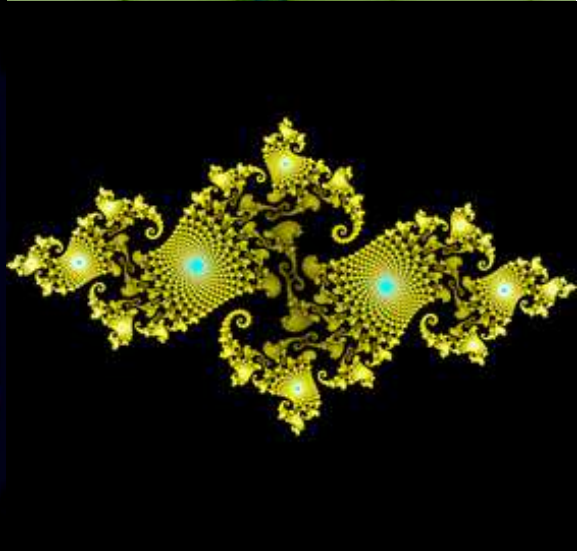
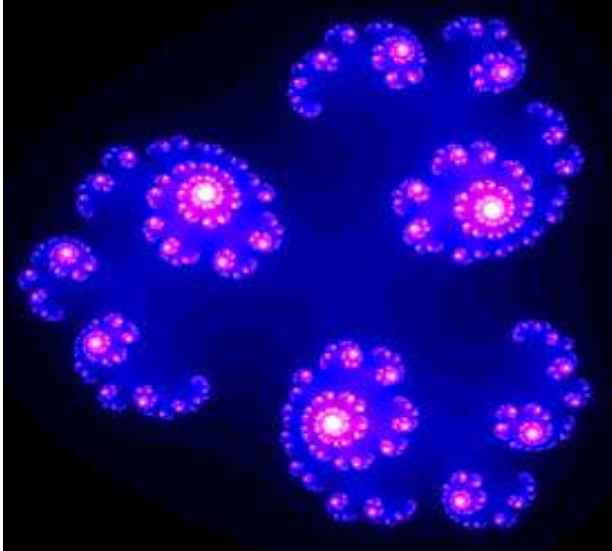
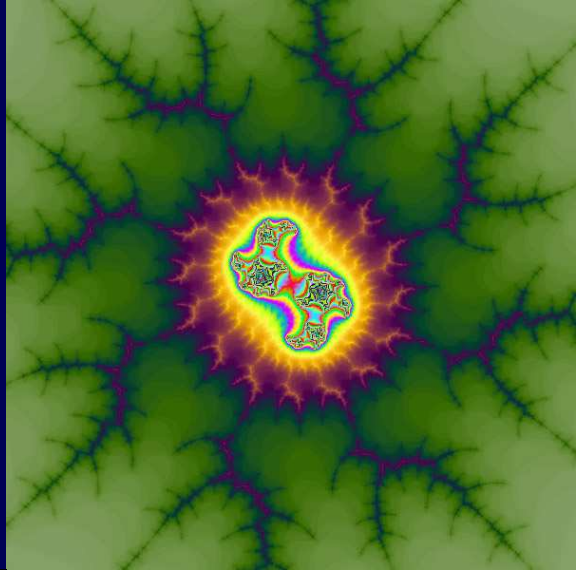
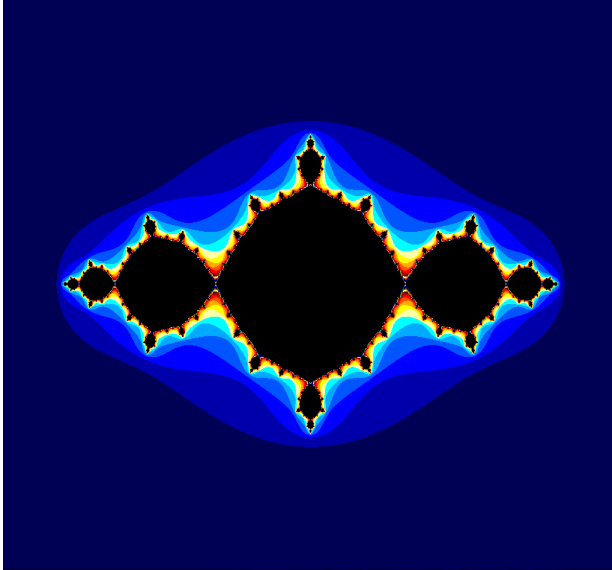
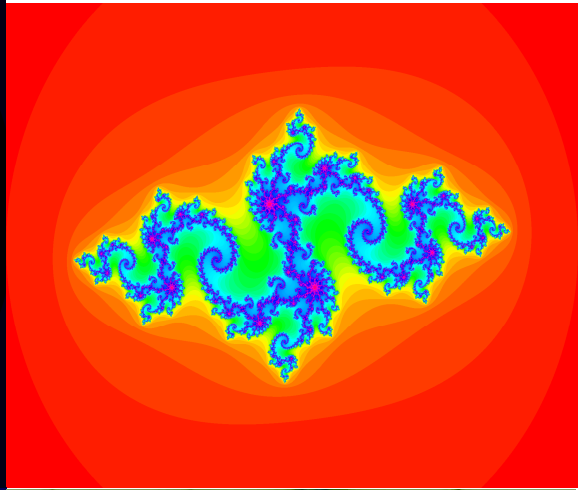
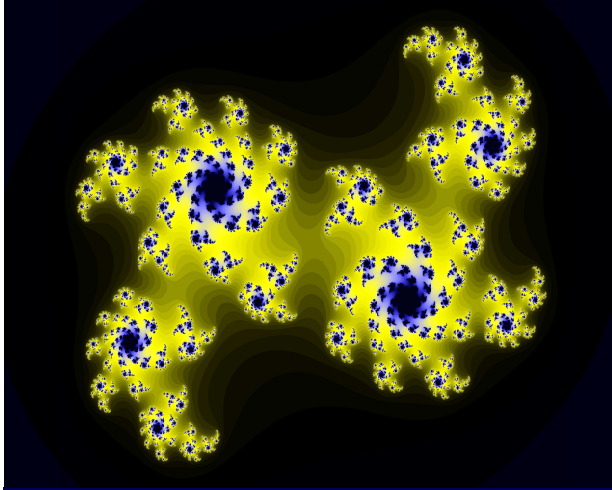
Mandelbrotova množina je ve skutečnosti jakýmsi katalogem Juliovy množiny. Každému bodu roviny odpovídá Juliova množina (s parametrem daným souřadnicemi daného bodu), přičemž bodům uvnitř Mandelbrovy množiny odpovídají souvislé Juliovy množiny, bodům mimo pak nesouvislé. Vizuálně nejzajímavější Juliovy množiny odpovídají bodům poblíž hranice Mandelbrovy množiny, neboť bodům hluboko uvnitř odpovídají jednoduché geometrické tvary, bodům daleko vně pak jen několik roztroušených bodů.

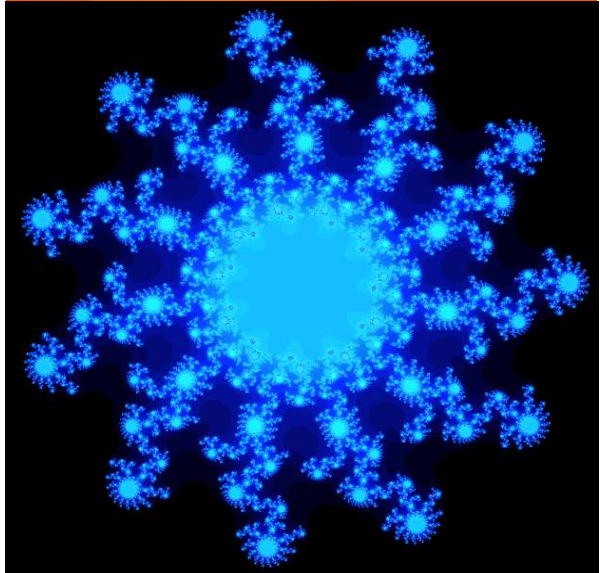
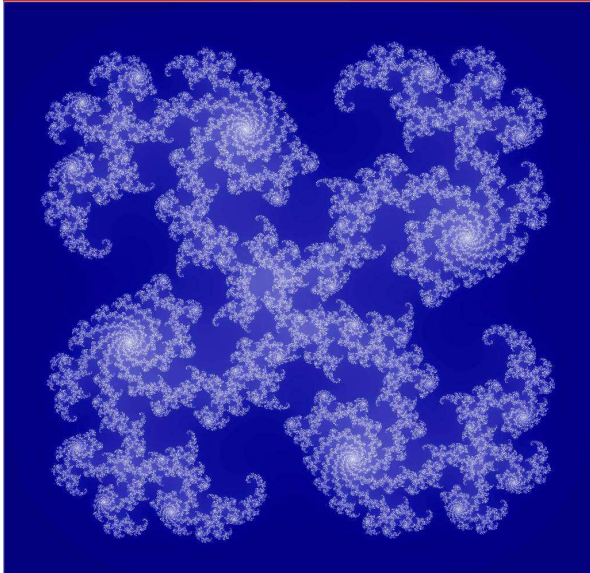
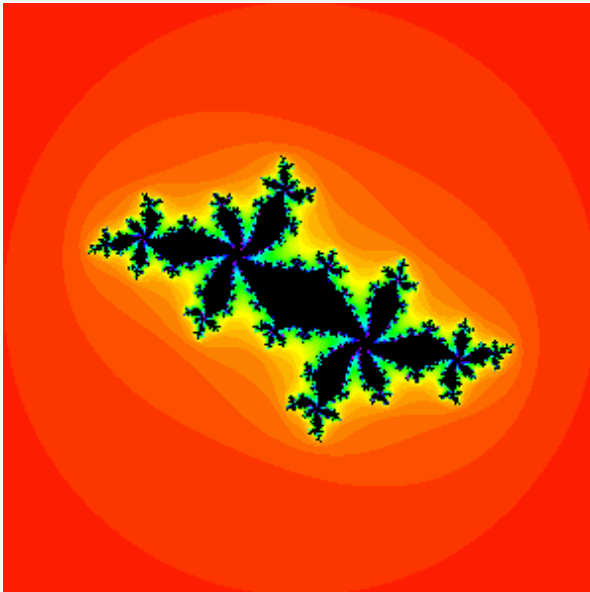
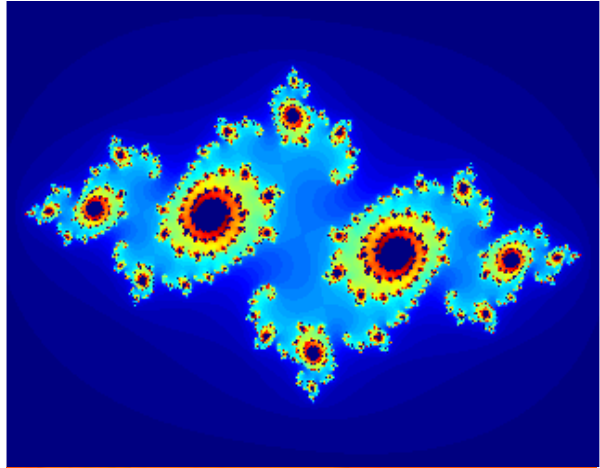
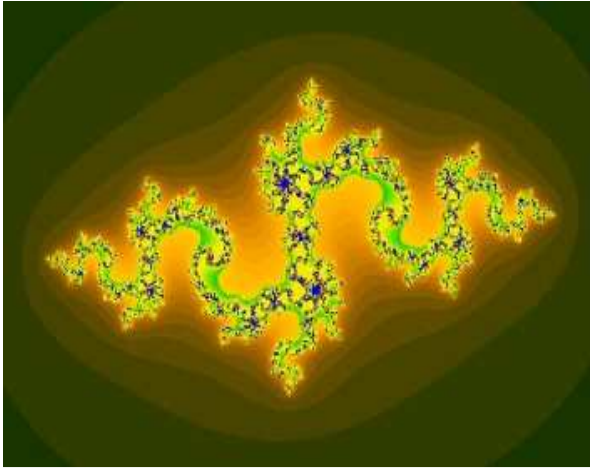
Do dnešní doby bylo okolí Mandelbrotovy množiny již velmi dobře prozkoumáno a příklady některých dalších Juliových množin, jež zde byly nalezeny si můžeme prohlédnout na následující sérii snímků.

Obr. 13.90

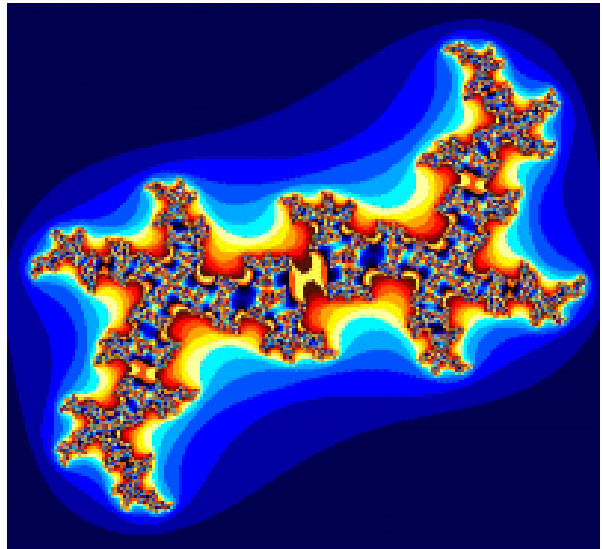
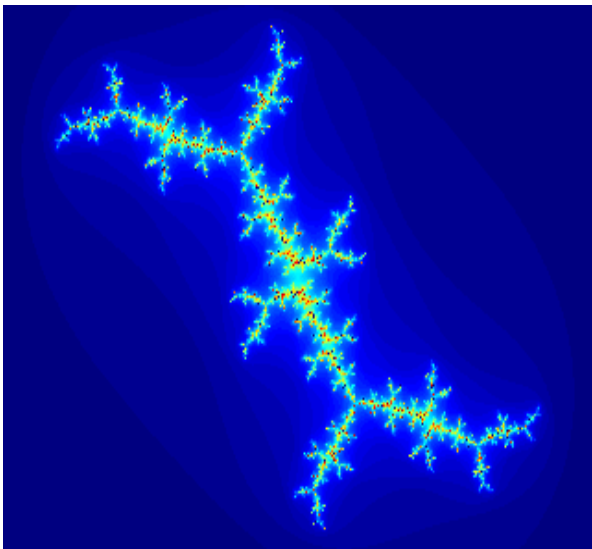
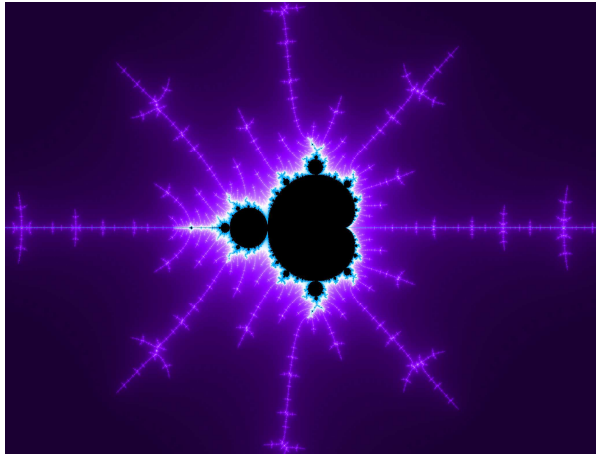
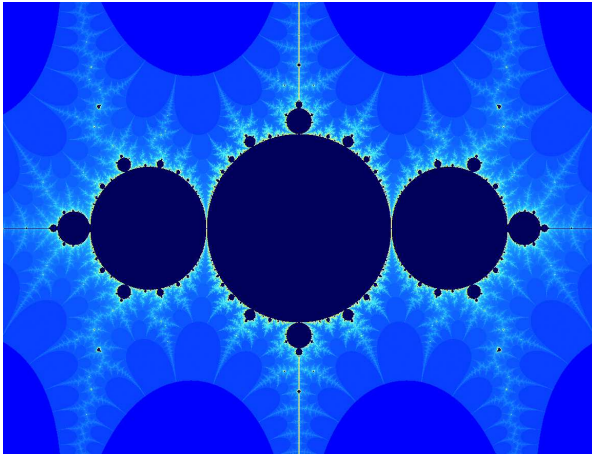
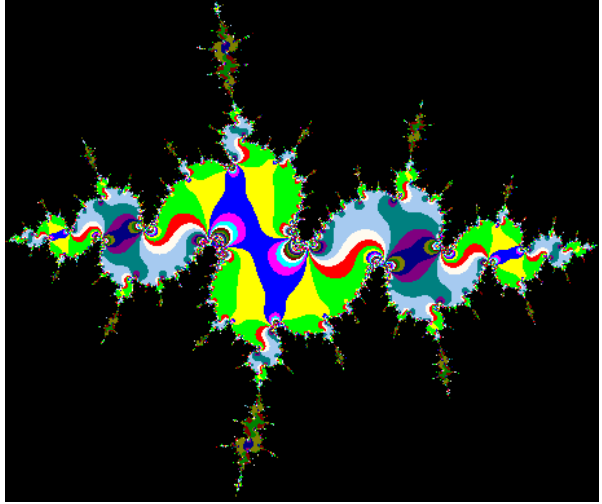
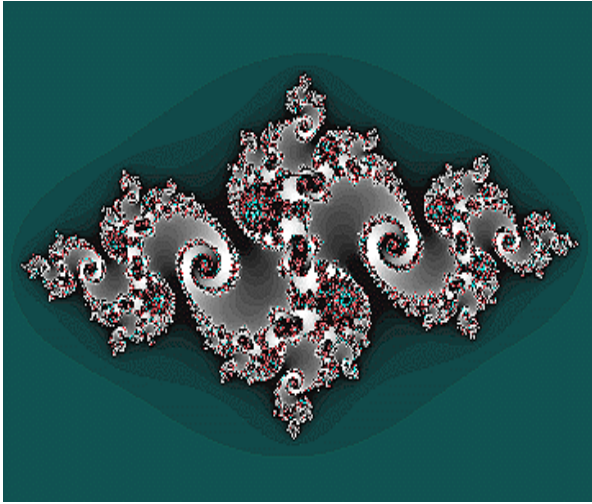


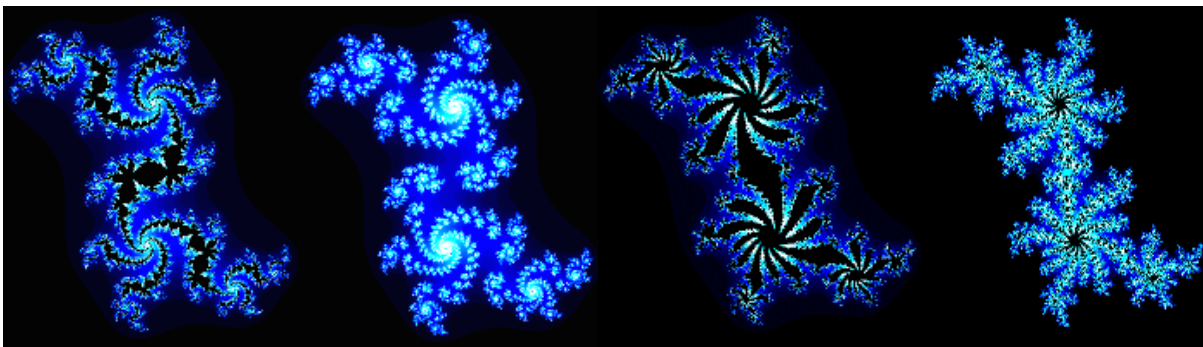
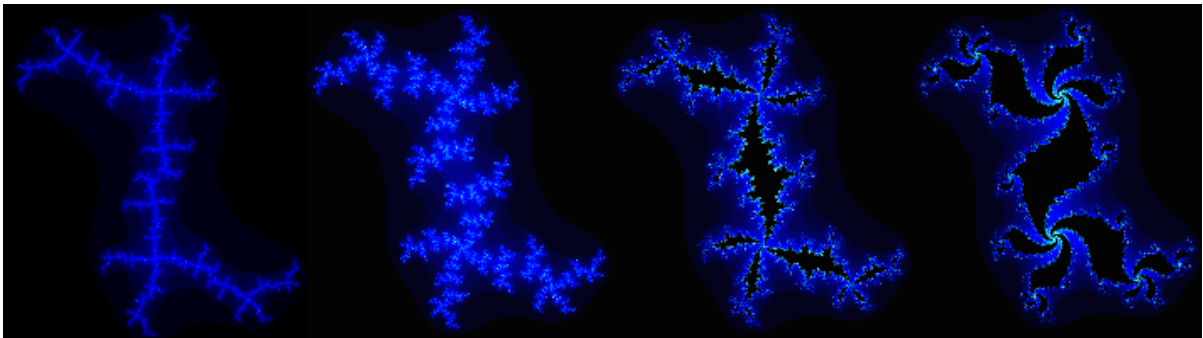
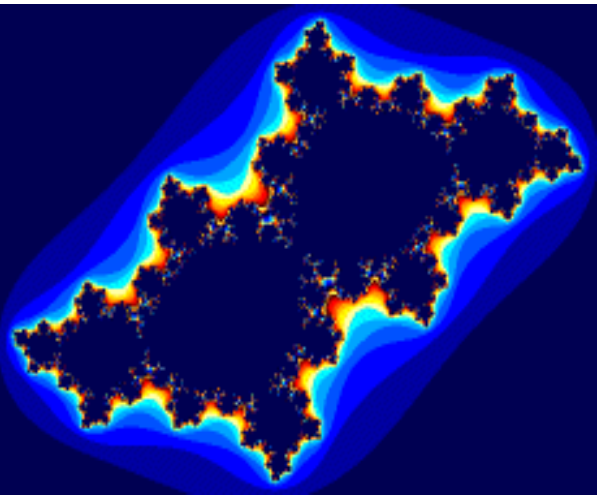
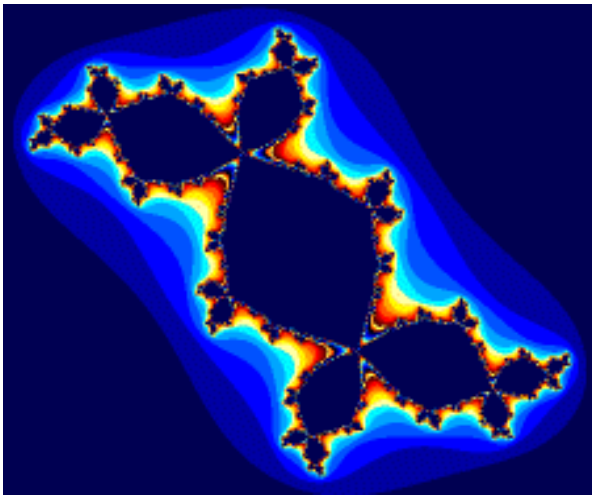
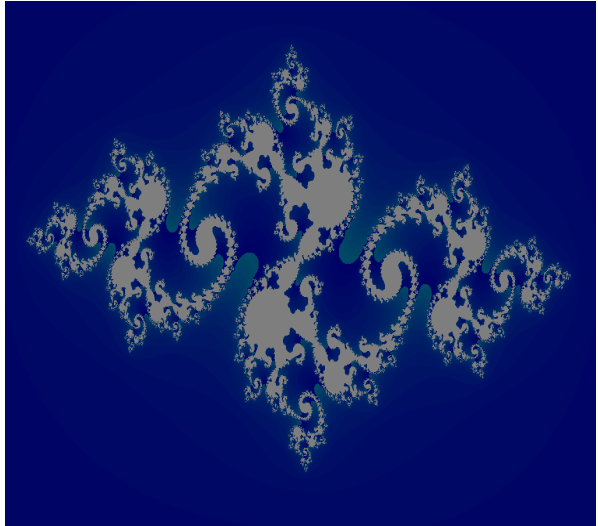
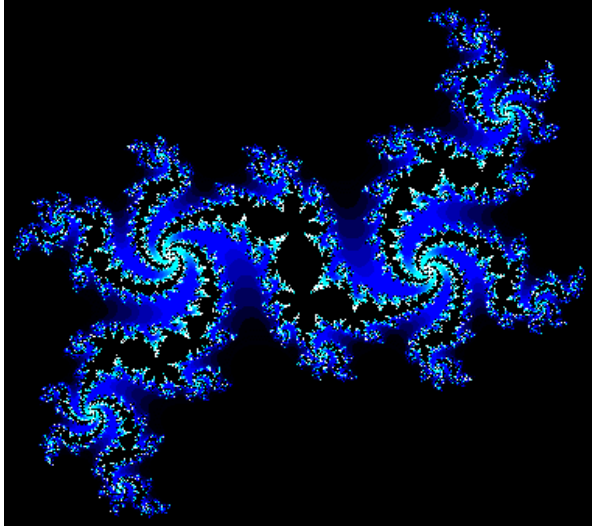


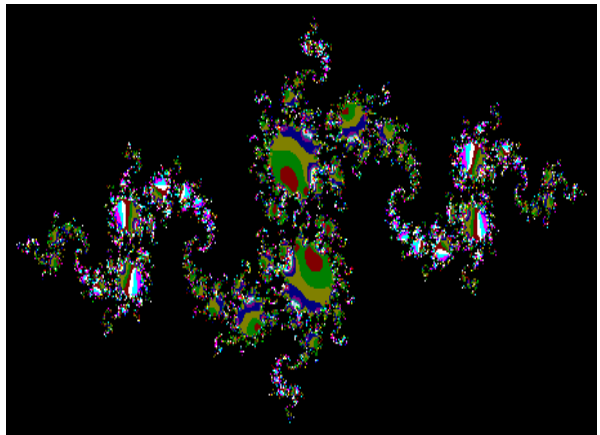
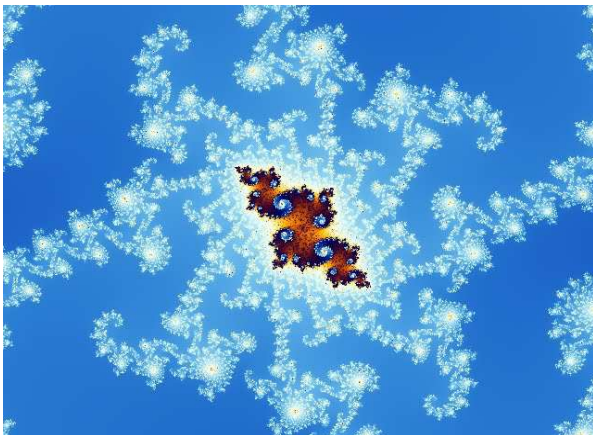
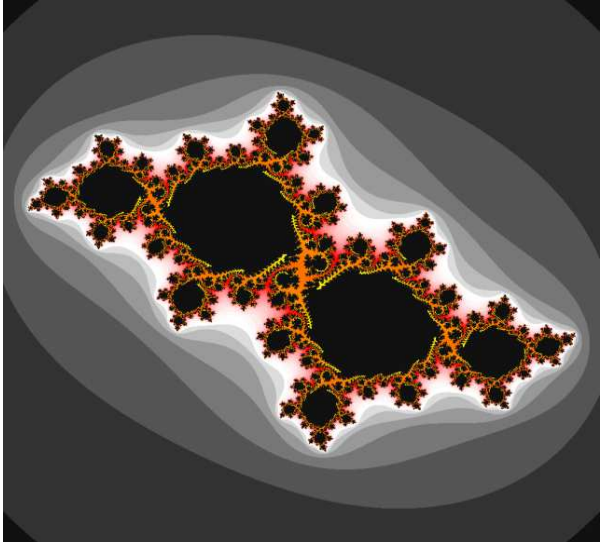
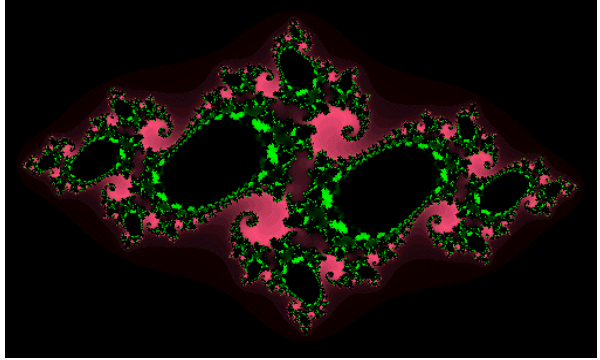
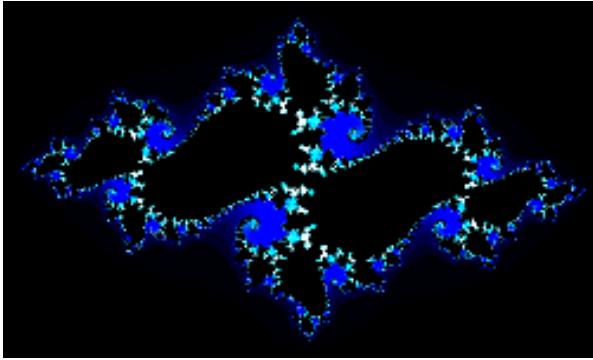


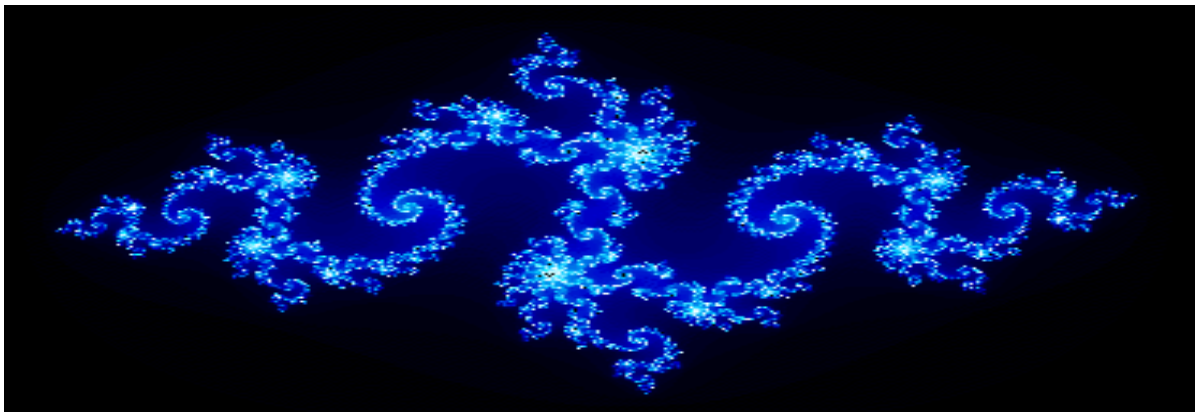
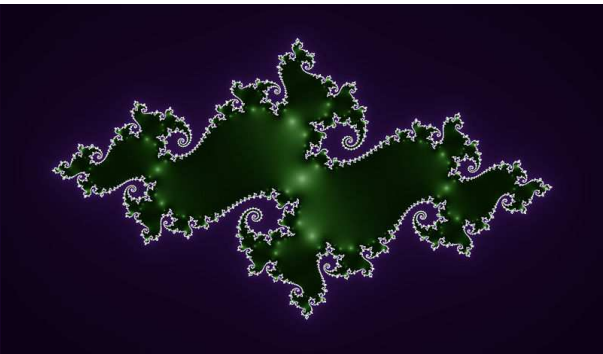
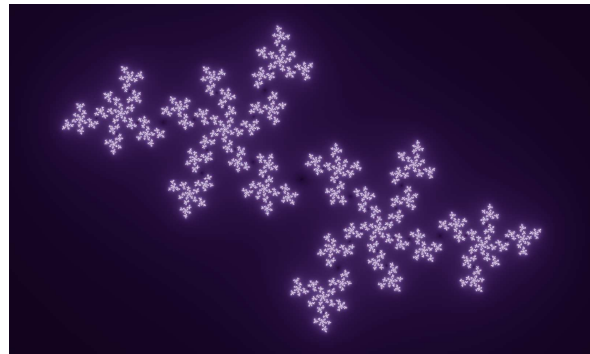
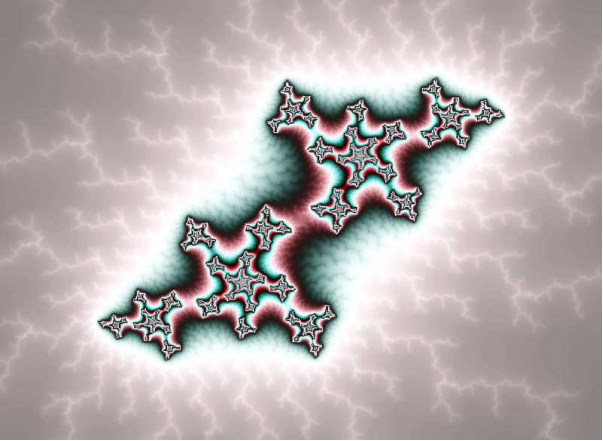
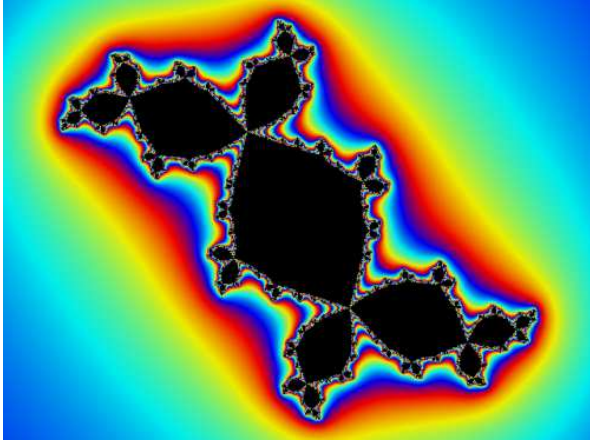
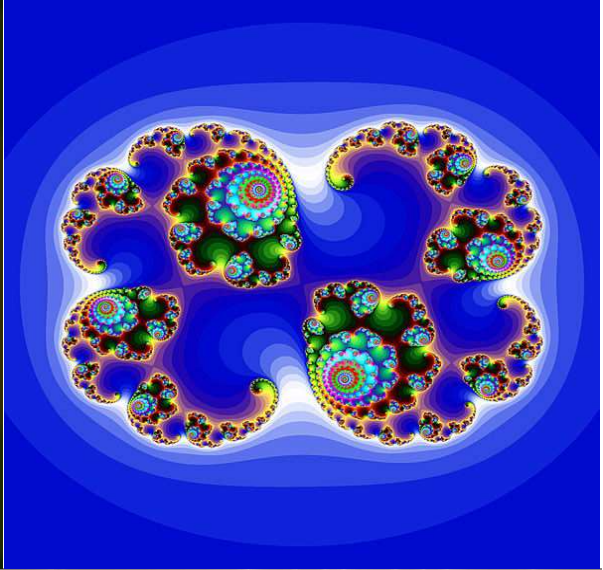
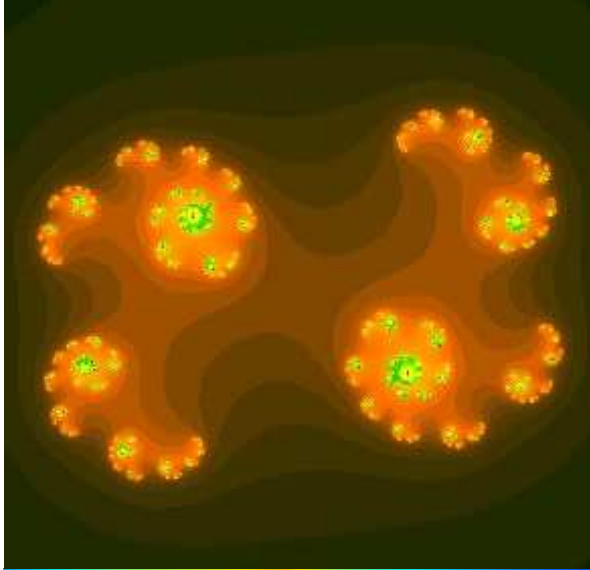


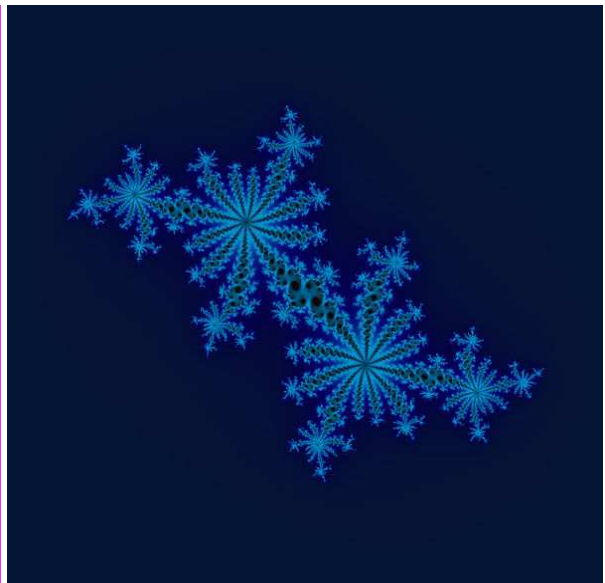
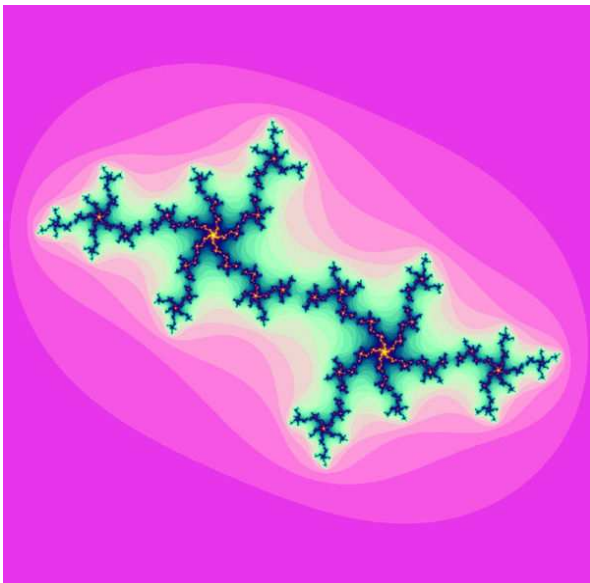
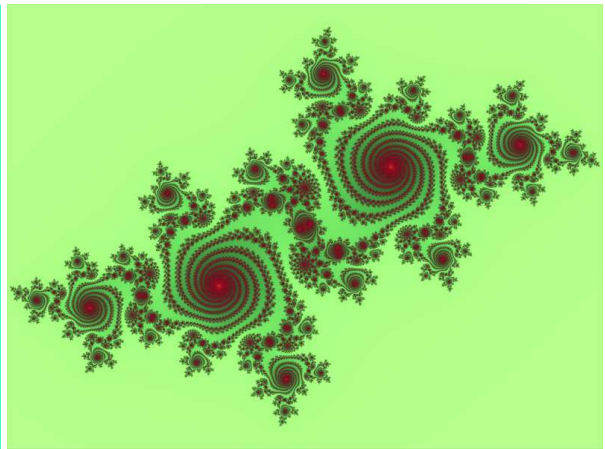
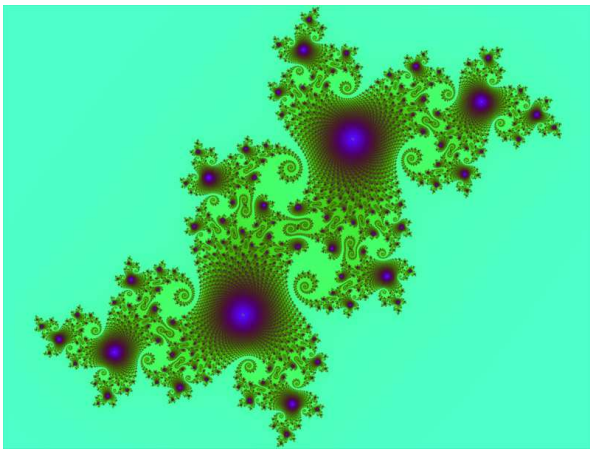
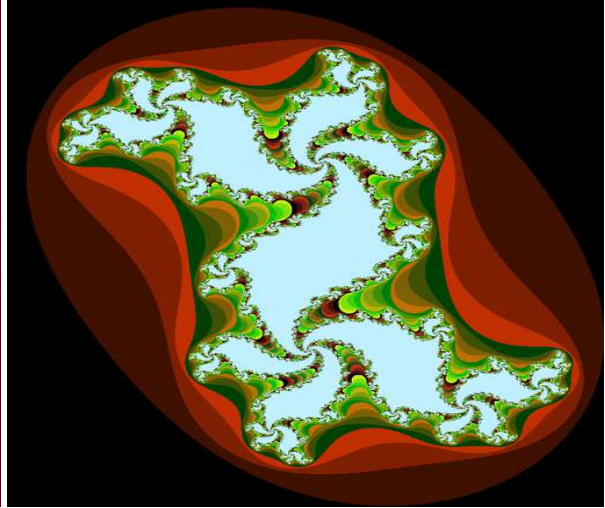
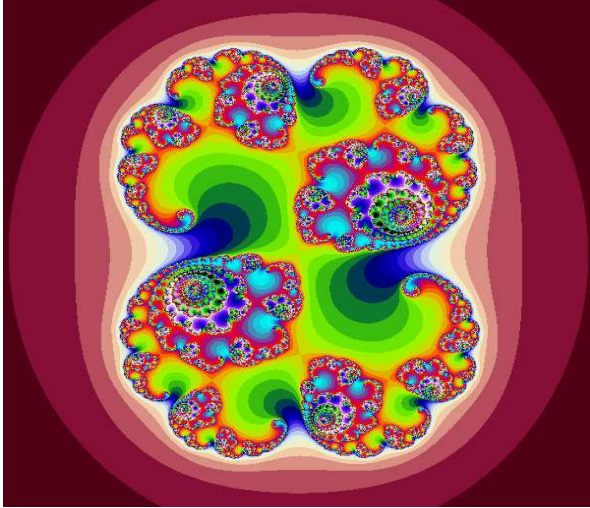


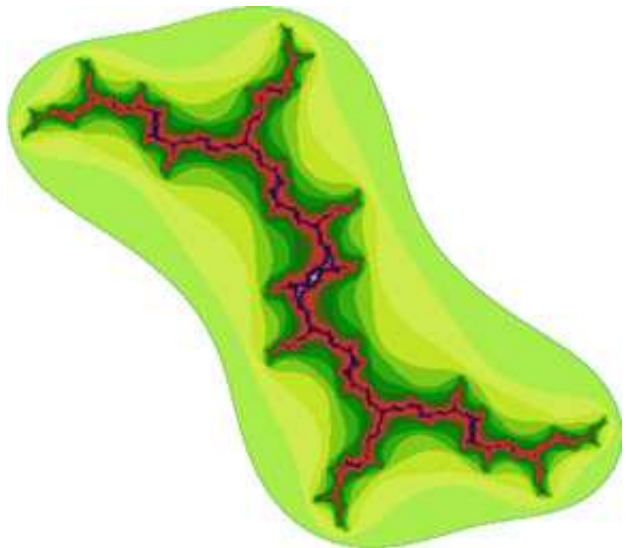
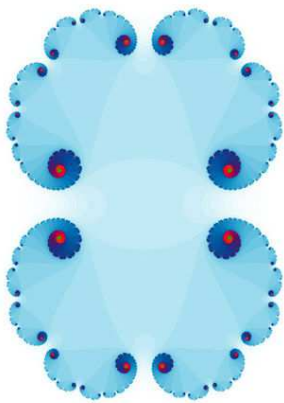
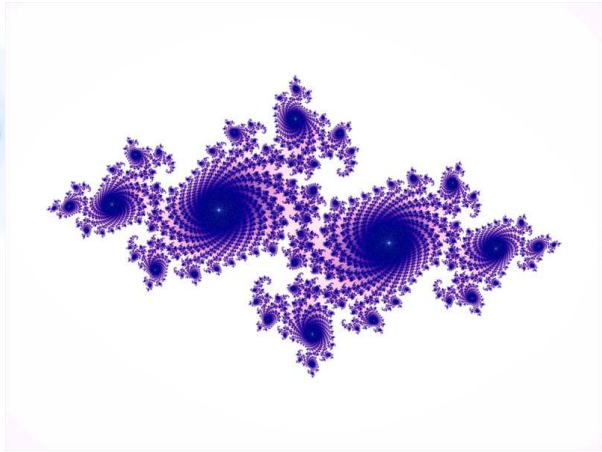
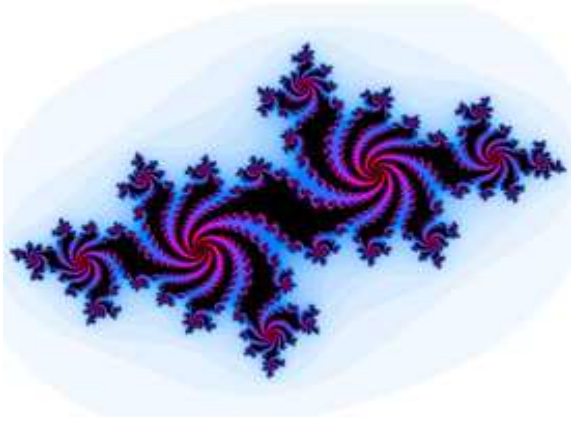
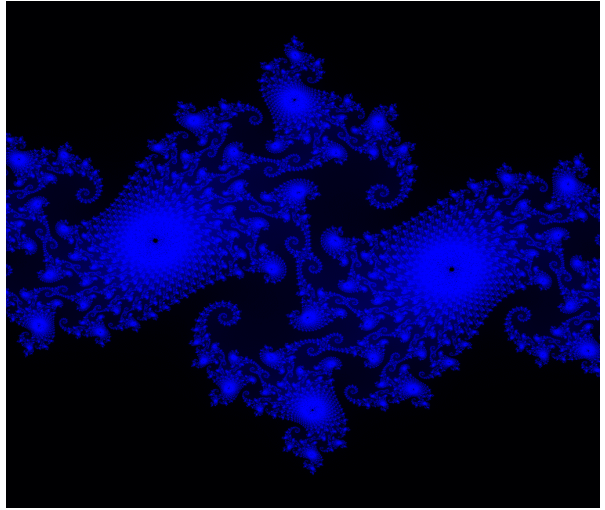
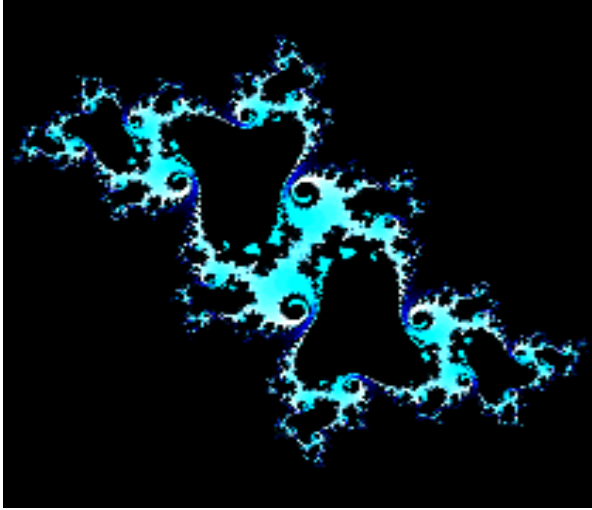


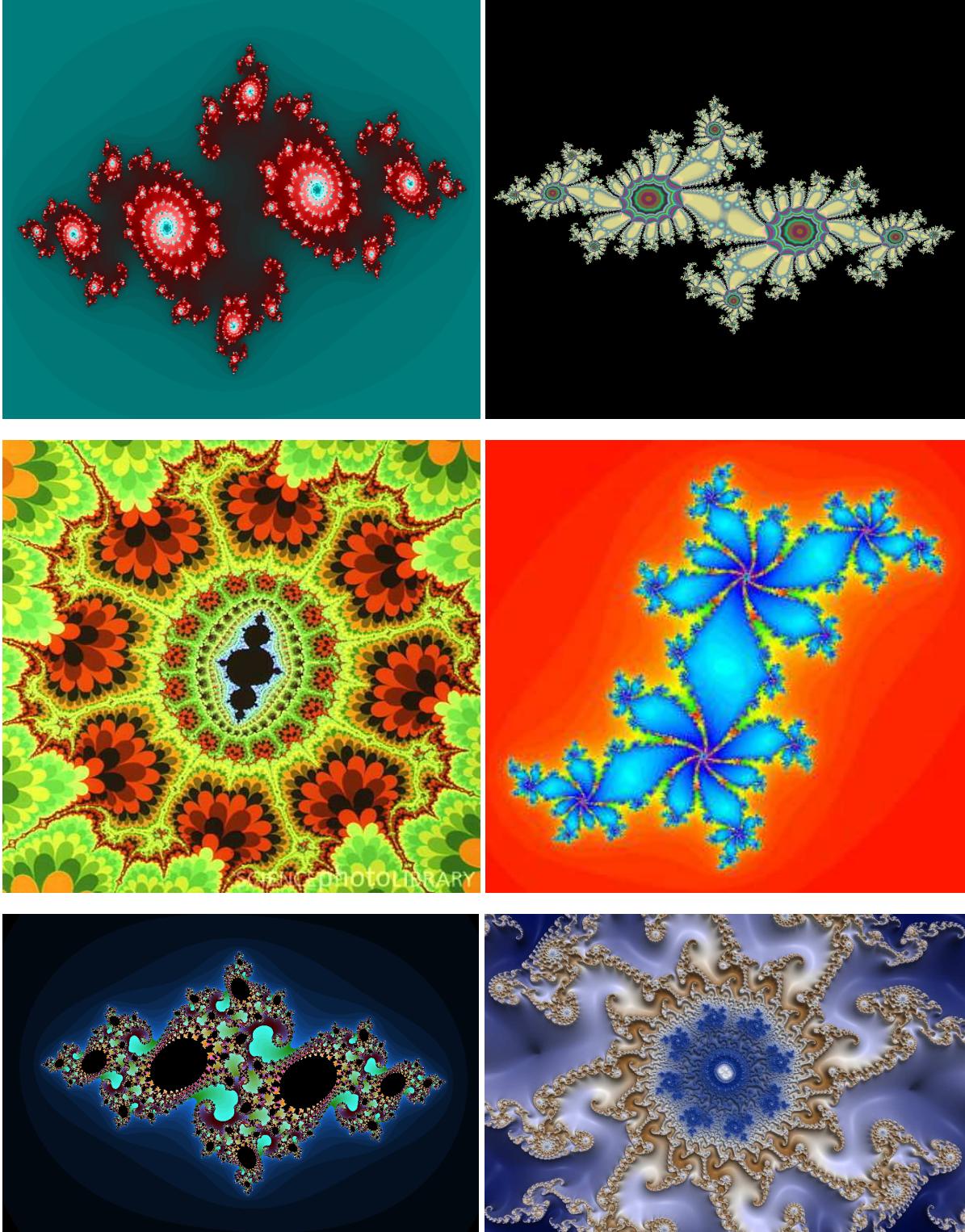






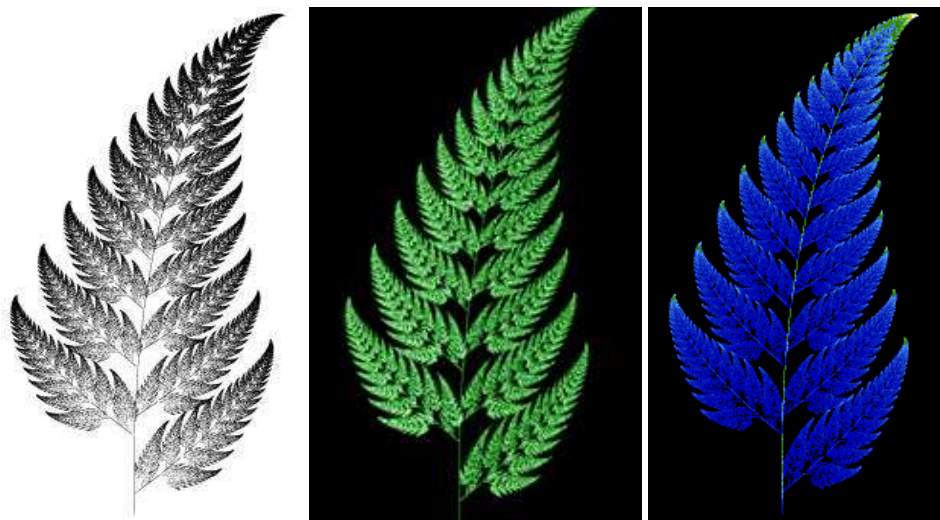






Základní vlastností fraktálů je soběpodobnost, jež je hojně využívána přírodou. Např. na kapradinách můžeme dobře pozorovat, jak se každá část vždy podobá opět celku.

Obr. 13.91



Nás však bude nyní zajímat ještě jiné využití Hausdorffovy dimenze. Dle klasické topologie, jak víme, může trojrozměrné těleso obsahovat jedině nekonečné množství nekonečně malých bodů.

Z hlediska fraktálů Hausdorffovy míry však rovněž jednorozměrné těleso konečné délky obsahuje nekonečné množství nekonečně malých bodů, což není nikterak v rozporu s klasickou topologií.

Nyní si však představme čtverec jako nekonečné množství úseček naskládaných jedna vedle druhé.

Čtverec tedy v Hausdorffových mírách obsahuje  $\infty \cdot \infty = \infty^2$  množství nekonečně malých bodů.

Pro krychli pak dostáváme  $\infty \cdot \infty \cdot \infty = \infty^3$  nekonečně malých bodů.

Přímka obsahuje  $\infty^2$  bodů, nekonečná plocha již  $\infty^4$  bodů a nekonečné Multiversum dokonce  $\infty^6$  bodů.

Zabývatí se podrobněji touto problematikou přesahuje rámec této publikace.

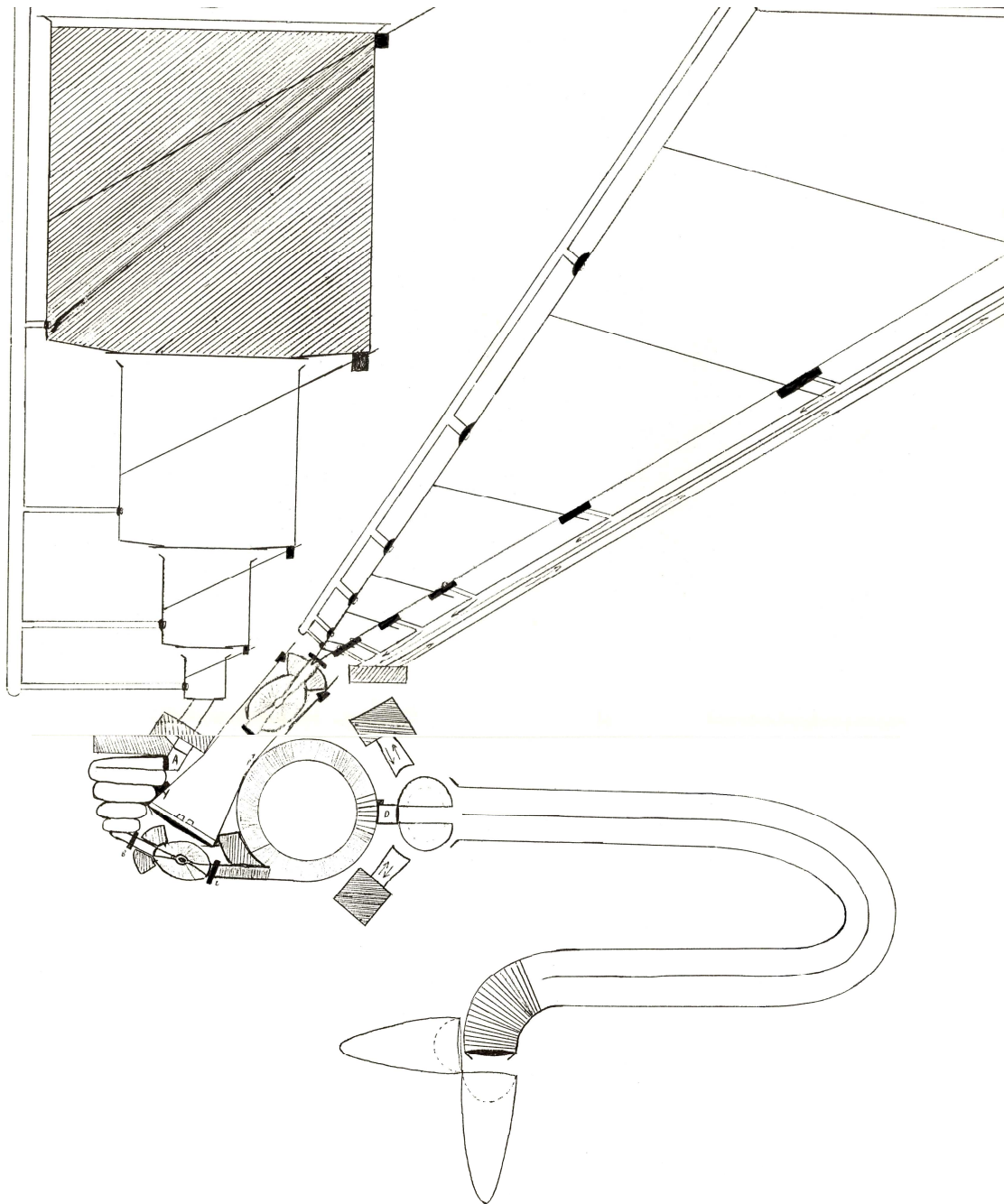
Avšak čtenář již jistě bude schopen sám aproximovat tuto aritmetiku na nejrůznější topologické situace.



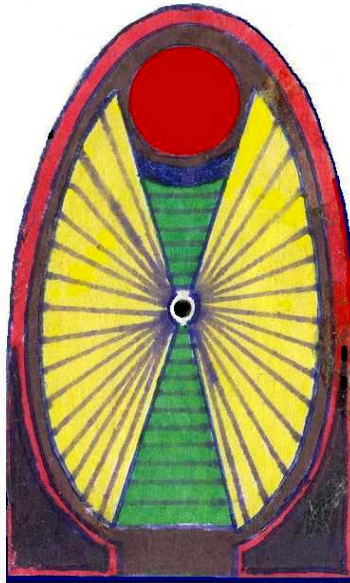
e) odstavec osmnáctý

Na následujícím schématu je znázorněn výrobní proces pohonné jednotky GDSP kvantion – midonové rakety (podrobné informace záměrně neuvádím).

Obr. 13.92



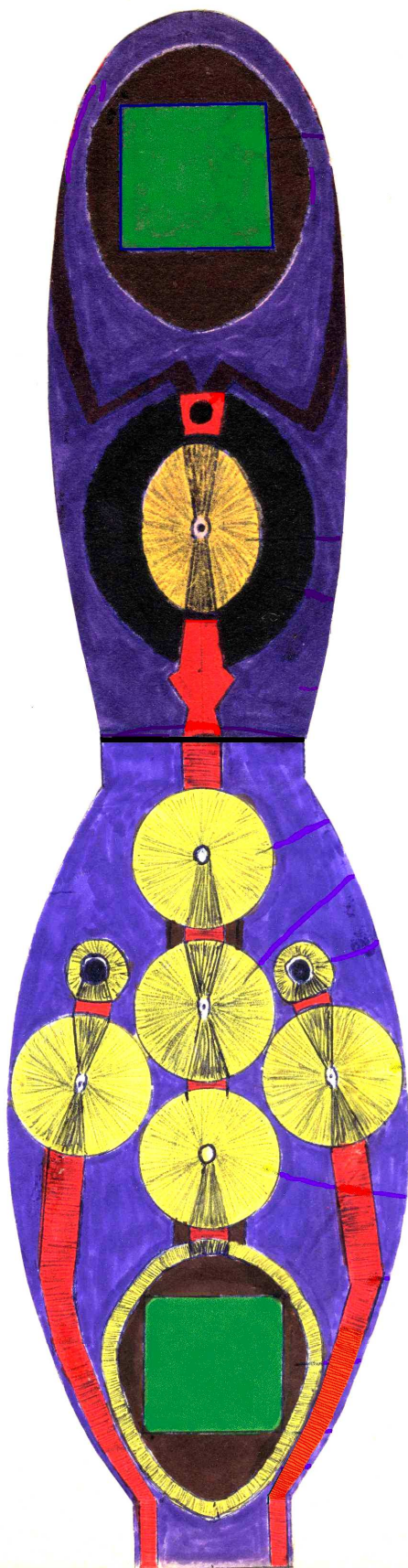
Obr. 13.93: midonový motor GDSP



Obr. 13.94: znázorňuje jednostupňovou kvantion – midonovou raketu.



Obr. 13.95: dvoustupňová kvantion – midonová raketa



Poznámka: zaměníme-li GDSP za partronový urychlovač času (viz obr. 13.37), získáme partronovou raketu.

*f) odstavec dvacátý pátý*

Teprve výzkumy z nejposlednější doby potvrzují předpoklady vyslovené ve dvacátém pátém odstavci.

Ukazuje se, že světlo je vskutku komplikovanější, než se donedávna předpokládalo – může se stáčet a zároveň se točit.

Když fyzikové měří světlo, tak se obvykle zajímají o jeho směr, energii a polarizaci.

Ovšem nedávno si hlouběji uvědomili, že fotony mohou mít také orbitální úhlový moment (orbital angular momentum - OAM), vlastnost, která je analogická Zemi obíhající kolem Slunce a zároveň rotující kolem své osy.

Na obrázku 13.96 je vidět, jak se stáčí vlnová fronta fotonů s OAM na rozdíl od ploché roviny světla s nulovým OAM.

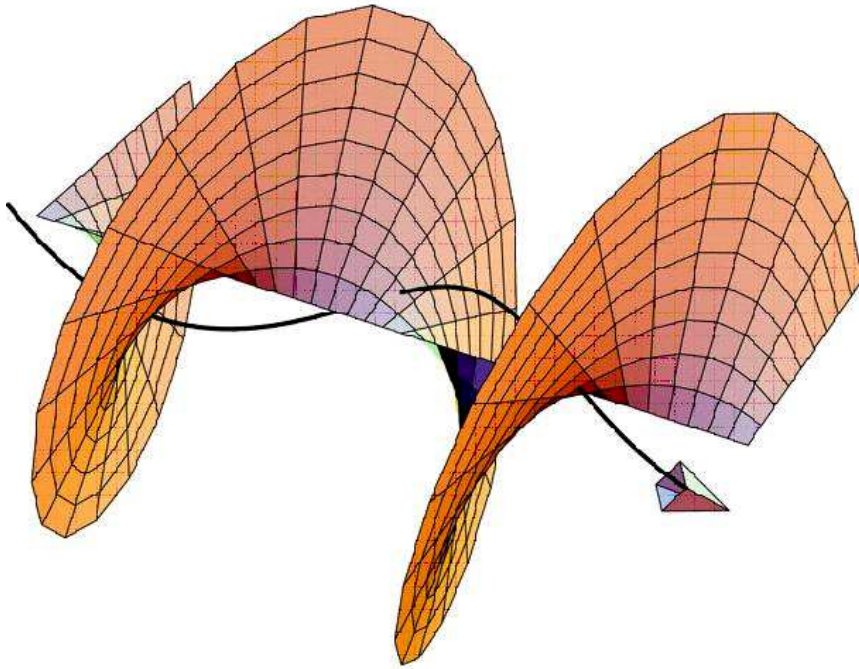
Světlo s OAM by šlo využít např. ke zvýšení informačního obsahu při komunikaci nebo pro odlišení specifických typů astronomických zdrojů či k pohánění nanotechnologických strojů.

Kovové částičky umístěné do svazku s OAM zde totiž v důsledku absorpce OAM velmi rychle rotují.

Při průchodu obyčejnou čočkou se světlo bez OAM soustřeďuje do bodu, kdežto světlo s OAM se soustřeďuje do prstence.

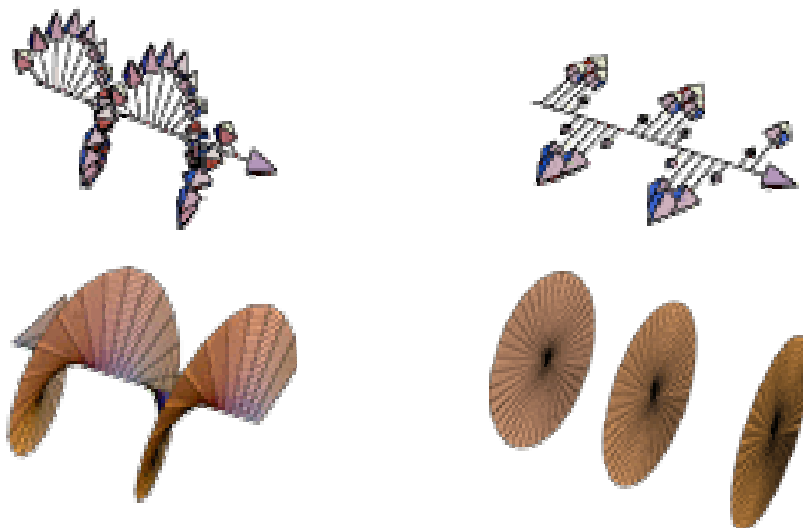
Očekává se, že většina světla, které poletuje vesmírem má OAM tak malý (nebo nulový), že by vytvořilo prstýnek příliš malý na měření.

Obr. 13.96



Následující obrázek ukazuje jak kmitá elektrické pole s OAM (levý sloupec) resp. bez OAM (pravý sloupec) v polarizovaném světelném paprsku (horní řádek) resp. v nepolarizovaném světelném paprsku (dolní řádek).

Obr. 13.97



k) *odstavec dvacátý šestý*

Z praktického života všichni víme, že jak ohřívání, tak i ochlazování kteréhokoliv tělesa oproti okolní teplotě nás vždy stojí nějakou energii.

Proto nás jistě nepřekvapí, že světelnou energií je možné nejen zahřívát, ale i ochlazovat.

Vezměme si jako těleso atomový plyn.

Omezíme-li pohyb atomů chycením do světelné pasti, způsobíme ochlazení plynu.

Takovouto světelnou past realizovali poprvé v Bellových laboratořích roku 1985.

Světelná past je obvykle tvořena zkřížením šesti laserových paprsků tak, že máme tři navzájem ortogonální dvojice protiběžných paprsků. Laser musí být vysoce stabilní a umožňovat naladění vlnové délky na některý kvantový energetický přechod zkoumaných atomů.

Vhodně vybrané atomy poté osvětlíme laserovým paprskem, který má frekvenci mírně nižší, než je frekvence jíž atom absorbuje.

Takové světlo tedy atom nebude absorbovat, pokud se ovšem nepohybuje proti chodu paprsku.

V takovém případě totiž atom „vidí“ v důsledku Dopplerova jevu světelné záření poněkud vyšší frekvence, které absorbuje.

Zde se pak projeví světelný tlak vyvolaný hybností nesenou jednotlivými fotony.

Absorpce fotonu pak předá protiletícímu atomu jistou zápornou hybnost, čímž se pohyb atomu vzhledem k laboratorní soustavě poněkud zbrzdí.

Absorpcí fotonu přejde atom do vyššího energetického stavu a po jisté době se vrátí zpět do svého základního stavu emisí fotonu.

Ten se však, na rozdíl od přicházejících fotonů, pohybuje náhodným směrem, takže celkový účinek zpětného rázu od vyzářených fotonů na atom je nulový.

Bombardujeme-li takto atom fotony ve všech třech navzájem kolmých směrech, můžeme jej zklidnit natolik, že jeho tepelný pohyb bude odpovídat teplotě řádu mikrokkelvinů.

Nižší teploty však již nelze dosáhnout pomocí světelné pasti v důsledku meziatomových interakcí vyvolaných rozptylem fotonů.

Magnetické pasti, založené na interakci magnetického momentu atomů s nehomogenním magnetickým polem, umožňují další snížení teploty a současné zvýšení hustoty chlazených atomů.

Soustředěným úsilím se v první polovině 90. let 20. století dařilo fyzikům neustále zdokonalovat uspořádání magnetických pastí.

Roku 1995 se badatelům z Coloradské Multiversity v Boulders podařilo výrazně zvýšit hustotu chlazených rubidiových atomů a současně snížit jejich teplotu až na 200 nK.

Tehdy rekordní past na atomy využívala předchlazení světlem a nové uspořádání magnetického pole s využitím tzv. **vypařovacího chlazení**, při němž se nejrychlejšími atomům umožní únik z pasti, čímž se sníží průměrná teplota zbylých atomů.

že nejde jen o nákladnou honbu za zápisem do Guinnessovy knihy rekordů, dokládá zpráva o dosažení **Boseho-Einsteinovy kondenzace** (BEK) atomů pomocí této pasti, která následovala krátce po zprávě o dosažení rekordně nízké teploty.

Tento zvláštní stav hmoty předpověděli S. N. Bose a A. Einstein ve 20. letech 20. století.

Povězme si krátce o chování souborů stejných částic.

Chování velkých souborů částic se podstatně liší podle toho, zda jde o fermiony, či o bosony.

Fermiony (částice s neceločíselným spinem), které se řídí Fermiho-Diracovou statistikou, podléhají Pauliho vylučovacímu principu, který jim zakazuje nalézat se ve stejném kvantovém stavu, čímž zásadně určuje stavbu atomů a molekul.

Bez Pauliho vylučovacího principu by nemohly částice společně vytvářet jakékoliv vázané komplexy, tj. struktury jako jsou jádra, atomy, molekuly, krystaly či živé organismy.

Látka, jak ji známe z každodenního života (včetně nás samých), tedy vděčí za svoji existenci právě Pauliho principu.

Oproti tomu bosony (částice s celočíselným spinem), které se řídí Einstein-Boseho statistikou, se mohou nacházet v témže kvantovém stavu.

Dokonce pravděpodobnost toho, že bosony zkondenzují do jednoho stavu, roste s počtem částic, které již v něm jsou.

Může tedy nastat lavinovitý proces kondenzace za podmínky, že jsou bosony dostatečně blízko a jejich vlnové funkce se překrývají – neboli

když se jich nachází několik ve vzdálenosti de Broglieovy vlnové délky.

Nejsnáze dostupné bosony pro experimenty jsou atomy.

Ty ovšem budou při takto vysokých hustotách vykazovat interakce, které zcela překryjí kvantově - statistické efekty a znemožní BEK. Experimentátoři proto zvolili dostatečně zředěný atomový plyn, kde meziatomová vzdálenost je velká ve srovnání s dosahem meziatomových interakcí, ale de Broglieova vlnová délka je prodloužena výrazným snížením hybnosti atomů jejich extrémním ochlazením.

Při prvním úspěšném experimentu na Coloradské Multiversitě v Boulders byly použity rubidiové atomy chlazené na rekordní teplotu 170 nK pomocí zdokonalené verze magnetooptické pasti, v níž mohou být atomy udržovány po dobu až 15 sekund.

Jak ovšem ověřit, že za těchto podmínek skutečně zkondenzují do jednoho stavu?

Našlo se jednoduché řešení: vypnout pole tvořící past a změřit rozdělení rychlostí v expandujícím oblaku atomů.

Laserovým pulsem byl osvětlen soubor atomů opouštějících past a jejich stín zaznamenán CCD kamerou.

Za podmínek Bose-Einsteinovy kondenzace se uprostřed shluku atomů, expandujících rychlostí odpovídající běžnému teplotnímu rozdělení, objevila skupinka čítající asi 2000 atomů s téměř nulovou rychlostí.

Atomy jakoby ztratily svoji identitu, spadly do jediného (nejnižšího) kvantového stavu, který se tak náhle projevil v makroskopickém měřítku.

Při Bose-Einsteinově kondenzaci se tedy atomy chovají jako jediný velký superatom.

BEK tak otevírá reálnou možnost zkonstruovat atomovou obdobu laseru – jakýsi zdroj koherentního atomového paprsku.

Aplikace takového zdroje si dnes dovedeme jen ztěžít představit. S jeho pomocí bude v principu možno vytvářet v prostoru jakékoliv reálné trojrozměrné hmotné objekty, podobně, jako lze s pomocí světelného laseru promítat do prostoru trojrozměrné obrazy reálných objektů.

Využití koherentních BEK svazků např. v mikroelektronice pro výrobu trojrozměrných neuronálních sítí uvnitř mikroprocesorů,



s jednotlivými elementy velikosti řádu nanometrů bude znamenat absolutní revoluci v kybernetice s nedozírnými důsledky.

Ve spojení s tabernákulem pak BEK-koherentní svazek bude moci být použit k vytvoření obřího superpočítače obsahujícího jednak další tabernákuly a jednak teleport-replikátory, a to vše na některé vhodné paralelní hypergrupě.

Bytost, jež bude tento superpočítač ovládat, se stane téměř absolutním vládcem všehomíra, neboť bude schopna neomezené manipulace s jeho hmotou.

Bude ji moci vytvářet, odstraňovat a libovolným způsobem přetvářet na atomové úrovni.

To je vskutku obrovská moc vložená do rukou jednotlivce, který se tak stane nesmrtelným, všemohoucím a vševědoucím Bohem.

Pokud bude navíc tabernákulum schopno čerpat informace přímo z Blandria, či z midonových proudů, bude dokonce moci zprostředkovat svému uživateli jak minulost, tak i budoucnost vesmíru, i kterékoli jeho části.





Kniha **ÚVOD DO TEORIE POLE**, která navazuje na dvě předchozí významná autorova díla s názvy **INVERZE LINEÁRNÍHO ČASU** a **ÚVOD DO UNITÁRNÍ TEORIE MULTIVERSA**, seznamuje čtenáře s fyzikální podstatou přírodních sil nahlížených z různých úhlů pohledu, včetně teorie cytoprostoru. Teorie, jež je považována za dosud nejslibnější alternativu k jedenácti-rozměrné teorii membrán - M-teorii - a zároveň za horkého kandidáta na úplnou teorii všeho.

