

KT

Martin Tomáš

Západočeská univerzita v Plzni

martin.tomas1221@gmail.com

mtomas@kmt.zcu.cz

2026 – zimní semestr

Obsah přednáškového kurzu

- 1 Úvod do kvantové teorie
- 2 Vlnově-částicový dualismus
- 3 Postuláty kvantové teorie
- 4 Popis stavu systému
- 5 Schrödingerova rovnice
- 6 Pauliho vylučovací princip
- 7 Heisenbergovy relace neurčitosti
- 8 Volná částice
- 9 Záchyt elektronu - jednorozměrné pasti
 - Částice v 3D potenciálové jámě
- 10 Lineární harmonický oscilátor, atom vodíku
- 11 Tunelový jev
- 12 Interpretace kvantové mechaniky
- 13 Kvantová mechanika - aplikace
 - DFT
 - Kvantový počítač
- 14 Kvantová teorie pole - úvod
- 15 FPL - Krystalová struktura
- 16 Experimentální studium krystalické struktury
- 17 Vazby v pevných látkách
 - Van der Waalsova vazba - odvození
- 18 Tepelné vlastnosti pevných látek
 - Odvození teplotní roztažnosti s pomocí Debyeova modelu
- 19 Elektrické vlastnosti a pásová teorie
- 20 Magnetické vlastnosti pevných látek
- 21 Supravodivost

Theoretical physicist Max Planck



Before discovering
Quantum Physics



After discovering
Quantum Physics

Co studuje kvantová teorie?

- Popis mikrosvěta (atomy, elektrony, fotony) a systémů se srovnatelnými měřítky.
- Pravděpodobnostní (nikoli deterministický) charakter předpovědí.
- Stav systému je reprezentován vektorovým prostorem (Hilbertův prostor) a výsledek měření je náhodná veličina s rozdělením daným Bornovým pravidlem.
- Vlnově–částicový dualismus: *interference, difrakce, tunelování*.

Historický vývoj kvantové teorie I

- 1900 – Max Planck: Kvantování energie při řešení spektra záření černého tělesa. Energie oscilátorů je diskrétní: $E_n = n h \nu$. Zavádí Planckovu konstantu h a začíná *kvantová revoluce*.
- 1905 – Albert Einstein: Vysvětlení *fotoelektrického jevu* pomocí fotonů (kvant světla). Energie fotonu $E = h\nu$ a prahové chování $h\nu = \phi + K_{\max}$.
- 1913 – Niels Bohr: Model vodíku s *diskrétními energetickými hladinami*. Kvantové přeskoky mezi stacionárními stavy vysvětlují spektrální čáry: $E_n = -13.6 \text{ eV} \frac{1}{n^2}$.
- 1924 – Louis de Broglie: Vlnová povaha hmoty: částicím lze přiřadit vlnovou délku $\lambda = h/p$. Předpověď později potvrzena difrakcí elektronů na krystalech.

Historický vývoj kvantové teorie II

- 1925 – Werner Heisenberg: *Maticová mechanika*. Dynamika vyjádřena operátory a jejich komutátory, fyzikální veličiny odpovídají maticím.
- 1926 – Erwin Schrödinger: *Vlnová mechanika* a základní rovnice $i\hbar \partial_t \psi = \hat{H} \psi$. Schrödinger ukázal ekvivalenci vlnové a maticové mechaniky; Dirac později formuloval obecný operátorový formalismus.
- 1926 – Max Born: Pravděpodobnostní interpretace: $|\psi|^2$ je hustota pravděpodobnosti nalezení částice.
- 1927 – Heisenberg: *Relace neurčitosti* $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$: fundamentální omezení přesného současného určení nekomutujících pozorovatelných.
- 1935 – Einstein–Podolsky–Rosen (EPR): Myšlenkový experiment zpochybňující „úplnost“ QM; otevírá problematiku provázání (entanglementu) a lokálnosti. Později testováno Bellovými nerovnostmi.

Terminologie: pozorovatelná a související pojmy

- **Pozorovatelná (observable):** fyzikální veličina, kterou lze v principu měřit (např. poloha, hybnost, energie, spin).
- Matematicky: pozorovatelná odpovídá **Hermitovskému operátoru** $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ na Hilbertově prostoru.
- Vlastní hodnoty operátoru $\hat{A}$ představují **možné výsledky měření**.
- Vlastní stavy $|a\rangle$ operátoru $\hat{A}$ jsou stavy, ve kterých má systém přesně definovanou hodnotu a dané pozorovatelné.
- Měření: pokud je systém v obecném stavu $|\psi\rangle$, pak pravděpodobnost výsledku a je dána Bornovým pravidlem:

$$p(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2$$

- Souvislost s klasickou fyzikou: pozorovatelné v QM zobecňují klasické fyzikální veličiny, ale jejich algebra je nekomutativní ($[\hat{x}, \hat{p}] \neq 0$).

Operátory a jejich značení

- V kvantové mechanice každé měřitelné fyzikální veličině odpovídá operátor.

- Operátory se značí pomocí stříšky: $\hat{A}$, $\hat{x}$, $\hat{p}$, $\hat{H}$.

- Příklady:

- Operátor polohy: $\hat{x} \psi(x) = x \psi(x)$,
- Operátor hybnosti: $\hat{p} \psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} \psi(x)$,
- Hamiltonián: $\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x})$.

- Vlastní hodnoty operátoru $\hat{A}$ jsou možné výsledky měření:

$$\hat{A} |a\rangle = a |a\rangle .$$

- Důležité vlastnosti:

- Lineární operátory: $\hat{A}(\alpha |\psi\rangle + \beta |\phi\rangle) = \alpha \hat{A} |\psi\rangle + \beta \hat{A} |\phi\rangle$,
- Hermitovské operátory: $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$, mají reálné vlastní hodnoty,
- Unitární operátory: $\hat{U}^\dagger \hat{U} = \hat{I}$, zachovávají normu (např. časový vývoj).

- Značení pomocí stříšky odlišuje operátor od číselných hodnot veličin (např. $\hat{x}$ vs. x).

Diracova symbolika (bra–ket notace)

- Stav systému: $|\psi\rangle$ (tzv. *ket*) – vektor v Hilbertově prostoru.
- Duální vektor: $\langle\psi|$ (tzv. *bra*) – komplexně sdružený řádkový vektor.

$$\langle\psi| = (|\psi\rangle)^\dagger$$

- Skalární součin (pravděpodobnostní amplituda):

$$\langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$$

- Projektor na stav $|\psi\rangle$:

$$|\psi\rangle \langle\psi|$$

- Pozorovatelné jako operátory: očekávaná hodnota v stavu $|\psi\rangle$ je

$$\langle\hat{A}\rangle_\psi = \langle\psi|\hat{A}|\psi\rangle$$

- Ortonormální báze $\{|n\rangle\}$: libovolný stav lze rozvinout

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad \sum_n |c_n|^2 = 1$$

Vlnová funkce: vlastnosti, použití a interpretace

- Stav částice (nebo systému částic) je popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$.
- Pravděpodobnostní interpretace (Bornovo pravidlo):

$$P(\mathbf{r}, t) d\tau = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau$$

udává pravděpodobnost, že částice je nalezena v objemovém prvku $d\tau$ kolem polohy $\mathbf{r}$.

- Normalizace:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1.$$

- Matematické vlastnosti: fyzikální stav musí být normalizovatelný (kvadraticky integrovatelný); u běžných konečných potenciálů je ψ spojitá a splňuje příslušné okrajové podmínky.
- Použití: řešení Schrödingerovy rovnice $\hat{H}\psi = i\hbar \partial_t \psi$ určuje dynamiku systému.
- Interpretace: vlnová funkce není přímo pozorovatelná; pouze $|\psi|^2$ má fyzikální význam.
- Pro více částic: $\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots, t)$ – obsahuje informaci o korelacích a (anti)symetrii.

Ultrafialová katastrofa

- Klasická teorie (Rayleigh–Jeansův zákon) předpokládá spojitě rozdělení energií elektromagnetického pole.
- Hustota spektrální energie pro frekvenci ν podle klasické fyziky:

$$u(\nu, T) = \frac{8\pi\nu^2}{c^3} k_B T$$

- Pro vysoké frekvence ($\nu \rightarrow \infty$) roste energie $\rightarrow \infty$.
- Tento nesmyslný výsledek se nazývá **ultrafialová katastrofa**.
- Experimentálně je spektrum černého tělesa konečné, s maximem pro určitou ν_{max} a následným poklesem.
- Rozpor mezi teorií a experimentem vedl Plancka k zavedení hypotézy kvantování energie.

Odvození Planckova vztahu pro kvantování energie

- Klasický model: harmonický oscilátor s energií spojitě rozdělenou $\Rightarrow$ nesoulad se spektrem černého tělesa.
- Planck (1900): hypotéza – energie oscilátorů je kvantována:

$$E_n = nh\nu, \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

- Pravděpodobnost obsazení stavu n dána Boltzmannovým faktorem:

$$P_n \propto e^{-\frac{E_n}{k_B T}} = e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}$$

- Střední energie jednoho oscilátoru:

$$\langle E \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} nh\nu e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}}{\sum_{n=0}^{\infty} e^{-\frac{nh\nu}{k_B T}}}$$

- Výsledek po sečtení geometrických řad:

$$\langle E \rangle = \frac{h\nu}{e^{\frac{h\nu}{k_B T}} - 1}$$

- Z toho plyne Planckův zákon pro hustotu spektrální energie záření černého tělesa.

Vlnově–částicový dualismus

- Světlo vykazuje dvojí povahu:
 - jako vlna – interference, difrakce,
 - jako částice – fotoelektrický jev, Comptonův rozptyl.
- Podobně i hmotné částice mohou mít vlnové vlastnosti.
- Dvouštěbinový experiment: i při vysílání jednotlivých elektronů vzniká interferenční obrazec.
- Tento princip je základem kvantové teorie a popisu mikrosvěta.

De Broglieho vlnová délka

- Louis de Broglie (1924): každé částici lze přiřadit vlnovou délku.
- Základní vztah:

$$\lambda = \frac{h}{p} = \frac{h}{mv}$$

- Hypotéza potvrzena experimentálně (Davisson–Germer 1927: difrakce elektronů na krystalu).
- Vlnově–částicový dualismus tedy platí i pro hmotné částice.
- Tento princip je klíčový pro vznik kvantové mechaniky a kvantových technologií (např. elektronové mikroskopy).

Filozofické důsledky vlnově–částicového dualismu

- **Kodaňská interpretace:** kvantový systém je popsán vlnovou funkcí, která se při měření *kolabuje* na konkrétní výsledek. Dualismus odráží hranici mezi kvantovým a klasickým světem.
- **Komplementarita (N. Bohr):** vlna a částice nejsou protikladné, ale komplementární aspekty reality. Volba experimentálního uspořádání určuje, která vlastnost se projeví.
- **Ontologické implikace:** otázka, zda je vlna reálným fyzikálním objektem (pole pravděpodobností) nebo pouze nástrojem k výpočtu předpovědí.
- **Heisenbergova neurčitost:** dualismus je neoddělitelně spjat s nekomutativní strukturou pozorovatelných – nelze současně určit polohu a hybnost s libovolnou přesností.
- **Alternativní interpretace:**
 - Pilotní vlna (Bohm): částice má dráhu řízenou kvantovým potenciálem.
 - Mnohosvětová interpretace (Everett): dualismus je projevem existence paralelních větví reality.
- **Filozofický význam:** dualismus vyzývá klasickou představu reality a nutí redefinovat pojmy „částice“ a „vlna“ v kvantovém kontextu.

Dvojštěrbinový experiment I: úvod

- Poprvé proveden s paprskem světla (Young, 1801) → důkaz vlnové povahy světla.
- Moderní verze: experiment s elektrony, atomy, dokonce molekulami.
- Schéma:
 - zdroj částic,
 - clona se dvěma štěrbinami,
 - detekční obrazovka.
- Výsledek: interferenční obrazec → částice se chovají jako vlny.

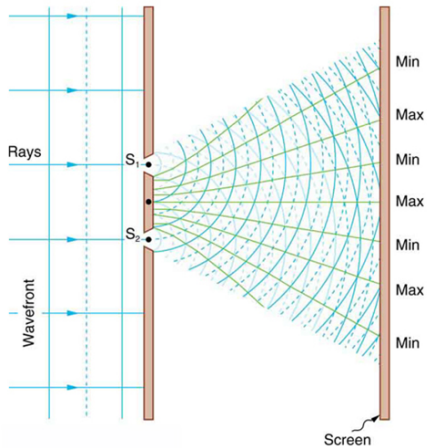
Dvojštěbinový experiment II: interferenční obrazec

- Pravděpodobnost výskytu částice na obrazovce:

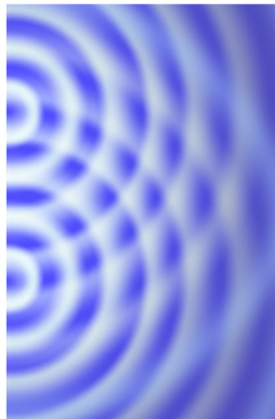
$$P(\theta) \propto \cos^2\left(\frac{\pi d}{\lambda} \sin \theta\right),$$

kde d je vzdálenost štěrbin, λ de Broglieho vlnová délka.

- Pokud jsou otevřeny obě štěrby, pozorujeme interferenci, i když částice přicházejí po jedné.
- Interferují pravděpodobnostní amplitudy obou alternativ; experiment je přímým projevem kvantové superpozice.
- Pokud se otevře jen jedna štěrbina $\rightarrow$ klasický rozptylový obrazec bez interference.



(a)



(b)



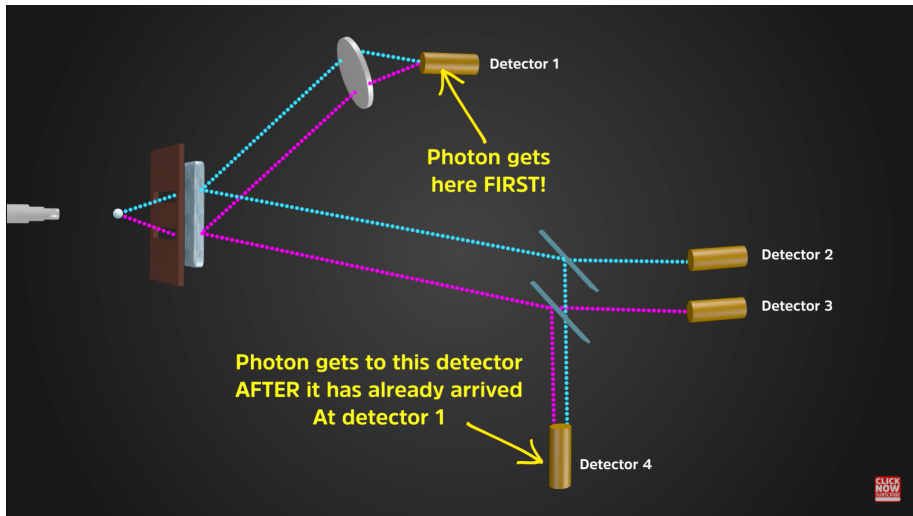
(c)

Dvojštěrbinový experiment III: měření dráhy částice

- Pokud přidáme detektor a zjistíme, kterou štěrbínou částice prošla:
 - interferenční obrazec zmizí,
 - dostáváme součet dvou „jednoštěrbinových“ distribucí.
- Závěr: získání informace o dráze (nebo její fyzikální zaznamenání v okolí) vede k dekoherenci alternativ a potlačení interference.
- Kvantová mechanika: stav za štěrbínami je superpozicí $|\psi\rangle = |\psi_1\rangle + |\psi_2\rangle$.
- V projekčním popisu měření se stav podmní na jednu z alternativ $|\psi_i\rangle$; mikroskopicky lze zánik interference popsat provázáním s detektorem a dekoherencí.

Dvojštěrbinový experiment IV: experiment se zpožděnou volbou

- John Wheeler (1978): „delayed choice experiment“.
- Rozhodnutí, zda měřit dráhu částice, se provede až poté, co částice prošla štěrbinami.
- Výsledky jsou konzistentní s kvantovou teorií bez nutnosti předpokládat předem definovanou trajektorii; pozdější volba nemění již zaznamenanou minulost.
- Důsledek: experiment nepodporuje klasický obraz částice s předem existující jednoznačnou cestou nezávislou na měřicím uspořádání; nejde však o zpětné ovlivnění minulosti.



Dvojštěrbinový experiment V: kvantová provázanost

- Rozšíření: použití provázaných částic.
- U provázaných systémů se interference může objevit v korelacích (např. po třídění koincidencí v kvantovém mazání); lokální statistika vzdálené částice se samotnou volbou měření na druhé straně nemění.
- Experimenty potvrzují: superpozice a provázání nejsou jen teoretické konstrukce, ale reálné jevy.
- Tyto efekty jsou základem pro kvantovou kryptografii a teleportaci.

Dvojštěrbinový experiment VI: fyzikální důsledky

- Potvrzení vlnově–částicového dualismu.
- Kvantová superpozice = fundamentální vlastnost mikrosvěta.
- Interakce s měřicím zařízením a dostupnost informace o dráze ovlivňují koherenci; vědomý pozorovatel není pro tento efekt nutný.
- Experiment demonstruje nutnost pravděpodobnostního popisu reality.
- Praktické využití: ověřování kvantové koherence v experimentálních systémech.

Dvojštěrbinový experiment VII: filozofické důsledky

- Popírá klasickou představu částic s jasně definovanými trajektoriemi.
- Podporuje Kodaňskou interpretaci (vlna ψ a kolaps při měření).
- Alternativní interpretace (Bohm, Many-Worlds) nabízejí odlišné pohledy na „realitu“ experimentu.
- V operacionalistickém (zejména kodaňském) čtení kvantová mechanika primárně předpovídá pravděpodobnosti výsledků měření; jiné interpretace dávají odlišný ontologický obraz.
- Filosofický dopad: hranice mezi „pozorovatelem“ a „systémem“ není triviální.

Bohrův princip komplementarity

- Formulován Nielsem Bohrem (1927) jako filosofický základ kvantové mechaniky.
- **Komplementarita**: některé vlastnosti kvantového systému se vzájemně vylučují, ale dohromady tvoří úplný popis.
- Příklad:
 - **vlnový obraz** – interference, difrakce,
 - **částicový obraz** – lokalizace, detekce jednotlivých částic.
- Volba experimentálního uspořádání rozhoduje, který aspekt se projeví.
- Princip ukazuje, že klasické pojmy (vlna, částice) nelze aplikovat současně, ale musí být chápány jako **komplementární**.
- Význam: filosofický rámec pro interpretaci výsledků kvantové mechaniky (např. dvouštěrbinový experiment).

Postulát I: Stav systému

- Stav kvantového systému je popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$.
- Pravděpodobnost nalezení částice v objemovém prvku $d\tau$ kolem $\mathbf{r}$ v čase t :

$$P(\mathbf{r}, t) = |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau$$

- Normalizace:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1$$

- Podmínky na ψ : spojitá, konečná, jednovýznačná.
- Význam: vlnová funkce obsahuje úplnou informaci o stavu systému.

Postulát II: Pozorovatelné a operátory

- Každé klasické pozorovatelné veličině odpovídá lineární Hermitovský operátor v QM.
- Hermitovskost $\hat{A} = \hat{A}^\dagger$ zajišťuje reálné hodnoty měření.
- Příklady:
 - Poloha: $\hat{r}$ – násobení souřadnicí,
 - Hybnost: $\hat{p} = -i\hbar\nabla$,
 - Energie (Hamiltonián): $\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V(r)$,
 - Moment hybnosti: $\hat{L}_z = -i\hbar\frac{\partial}{\partial\varphi}$, atd.
- Operátorům lze přiřadit očekávanou hodnotu – průměr výsledků měření.

Postulát III: Kvantování výsledků měření

- Měření pozorovatelné $\hat{A}$ vždy dává eigenhodnoty (vlastní hodnoty) a_i operátoru:

$$\hat{A} |a_i\rangle = a_i |a_i\rangle .$$

- Pokud je systém ve vlastním stavu $|a_i\rangle$, měření vždy dá výsledek a_i .
- Obecný stav lze rozvinout do báze $\{|a_i\rangle\}$:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle .$$

- Výsledek měření je náhodný, s pravděpodobností

$$p(a_i) = |c_i|^2 .$$

- Po měření se vlna zkolabuje do příslušného vlastního stavu (nebo degenerovaného podprostoru).

Postulát IV: Očekávaná hodnota

- Pokud je systém ve stavu ψ , pak očekávaná hodnota pozorovatelné $\hat{A}$ je

$$\langle A \rangle = \int \psi^*(\mathbf{r}, t) \hat{A} \psi(\mathbf{r}, t) d\tau.$$

- V Diracově zápisu:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

- Očekávaná hodnota odpovídá střednímu výsledku mnoha měření na systémech připravených ve stejném stavu.
- Tento postulát propojuje formální aparát QM s měřitelnými veličinami.

Postulát V: Časový vývoj

- Vlnová funkce se vyvíjí podle časově závislé Schrödingerovy rovnice:

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

- Pokud je $\hat{H}$ nezávislý na čase:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi_n(\mathbf{r}) e^{-iE_n t/\hbar}.$$

- Časový vývoj je unitární a zachovává normu stavu.
- Schrödingerova rovnice je základní dynamický zákon QM (analogie Newtonových rovnic v klasice).

Postulát VI: Symetrie fermionů (Pauliho princip)

- Celková vlnová funkce systému identických fermionů je antisymetrická při záměně dvou částic.
- To znamená:

$$\psi(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2, \dots) = -\psi(\mathbf{r}_2, \mathbf{r}_1, \dots).$$

- Z antisymetrie plyne Pauliho vylučovací princip: dva fermiony nemohou být ve stejném kvantovém stavu.
- Uplatňuje se na elektrony, protony, neutrony a další částice s polovičním spinem.
- Pro bosony naopak platí symetrická vlnová funkce (Bose–Einsteinova statistika).

Stav kvantového systému I: základní pojmy

- Stav systému v kvantové mechanice je popsán vlnovou funkcí $\psi(\mathbf{r}, t)$.
- Alternativní popis pomocí stavového vektoru $|\psi\rangle$ v Hilbertově prostoru.
- Pravděpodobnostní interpretace: $|\psi(\mathbf{r}, t)|^2$ udává hustotu pravděpodobnosti nalezení částice.
- Normalizace:

$$\int |\psi(\mathbf{r}, t)|^2 d\tau = 1$$

- Stav systému obsahuje veškerou dostupnou informaci o chování částice či vícečásticového systému.

Stav kvantového systému II: Hilbertův prostor

- Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ je úplný komplexní vektorový prostor se skalárním součinem.
- Stav systému = prvek tohoto prostoru, $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.
- Skalární součin: $\langle\phi|\psi\rangle \in \mathbb{C}$.
- Norma stavu: $\langle\psi|\psi\rangle = 1$.
- Bázové stavy $\{|n\rangle\}$ tvoří ortonormální bázi:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad \sum_n |c_n|^2 = 1.$$

- Rozvoj umožňuje interpretaci: $|c_n|^2 =$ pravděpodobnost nalezení systému ve stavu $|n\rangle$.

Stav kvantového systému III: operátory a pozorovatelné

- Každé měřitelné množství (pozorovatelná) odpovídá **Hermitovskému operátoru** $\hat{A}$.
- Vlastní hodnoty $\hat{A}$ jsou možné výsledky měření.
- Vlastní stavy $|a\rangle$ definují situaci, kdy má systém přesně hodnotu a .
- Pravděpodobnost výskytu výsledku a při měření ve stavu $|\psi\rangle$:

$$p(a) = |\langle a|\psi\rangle|^2.$$

- Očekávaná hodnota operátoru $\hat{A}$:

$$\langle A \rangle = \langle \psi | \hat{A} | \psi \rangle.$$

- Stav systému tak slouží jako výchozí bod pro všechny výpočty měřitelných veličin.

Stav kvantového systému IV: principiální úvahy

- Kvantově mechanický stav není „dráha částice“ jako v klasice, ale **distribuce pravděpodobností**.
- Vlnová funkce zakódovává superpozice stavů: systém může být současně v několika stavech.
- Stav je ovlivněn měřením - kolaps vlnové funkce do jednoho z možných výsledků.
- Pro více částic: nutnost respektovat symetrie (fermiony - antisymetrie, bosony - symetrie).
- Stav nese informaci o korelacích a kvantových jevech (entanglement, interference).
- Klasický limit: pro $\hbar \rightarrow 0$ nebo velká kvantová čísla se stav přibližuje klasickému chování.

Stav kvantového systému V: shrnutí a důsledky

- Stav kvantového systému je popsán vlnovou funkcí ψ nebo stavovým vektorem $|\psi\rangle$.
- Pravděpodobnostní charakter je fundamentální – pouze $|\psi|^2$ má přímý fyzikální význam.
- Měřitelné veličiny odpovídají Hermitovským operátorům, jejichž spektrum určuje možné výsledky.
- Stav systému se může vyvíjet unitárně (Schrödingerova rovnice) nebo kolabovat při měření.
- U více částic je nutno respektovat symetrie (Pauliho princip, Bose–Einsteinova kondenzace).
- Důsledky:
 - vysvětlení atomových struktur a spekter,
 - základ pro kvantovou statistiku,
 - klíč k moderním technologiím (kvantová elektronika, kvantové počítání).

Hilbertův prostor v kvantové mechanice

- Hilbertův prostor $\mathcal{H}$ je kompletní komplexní vektorový prostor se skalárním součinem.
- Obsahuje všechny přípustné stavy systému: $|\psi\rangle \in \mathcal{H}$.
- Vlastnosti:
 - lineární struktura: $a|\psi\rangle + b|\phi\rangle \in \mathcal{H}$,
 - existence normy: $\|\psi\| = \sqrt{\langle\psi|\psi\rangle}$,
 - úplnost: každá Cauchyovská posloupnost má limitu v $\mathcal{H}$.
- Hilbertův prostor je matematickým rámcem, kde probíhá celá kvantová teorie.

Báze v Hilbertově prostoru

- Báze $\{|n\rangle\}$ je množina stavů, z nichž lze složit libovolný stav $|\psi\rangle$.

- Rozvoj obecného stavu:

$$|\psi\rangle = \sum_n c_n |n\rangle, \quad c_n = \langle n|\psi\rangle.$$

- Podmínka úplnosti báze:

$$\sum_n |n\rangle \langle n| = \hat{I}.$$

- Pro spojitě proměnné (např. polohu):

$$|\psi\rangle = \int \psi(x) |x\rangle dx, \quad \int |x\rangle \langle x| dx = \hat{I}.$$

- Volba báze závisí na fyzikální situaci (vlastní stavy polohy, hybnosti, energie...).

Ortonormalita a ortogonalita stavů

- Dva stavy $|\phi\rangle, |\psi\rangle$ jsou **ortogonální**, pokud:

$$\langle\phi|\psi\rangle = 0.$$

- Pokud navíc $\langle\psi|\psi\rangle = 1$, mluvíme o **ortonormální bázi**.

- Ortonormální báze $\{|n\rangle\}$ splňuje:

$$\langle m|n\rangle = \delta_{mn}.$$

- Výhody:

- jednoduché vyjádření pravděpodobností: $|c_n|^2 = |\langle n|\psi\rangle|^2$,
- snadné použití při výpočtu očekávaných hodnot.

- Ortogonalita zajišťuje nezávislost stavů – různé vlastní stavy jednoho Hermitovského operátoru jsou vždy ortogonální.

Schrödingerova rovnice I: historický kontext a motivace

- 1926 – Erwin Schrödinger hledá matematický popis vlnově–částicového dualismu.
- Inspirace: de Broglieho hypotéza $\lambda = h/p$, analogie s klasickou vlnovou rovnicí.
- Cíl: vytvořit rovnici, která určuje časový vývoj vlnové funkce $\psi(\mathbf{r}, t)$.
- Schrödinger kombinoval:
 - klasickou energii $E = \frac{p^2}{2m} + V$,
 - kvantové operátory $\hat{E} = i\hbar\partial_t$, $\hat{p} = -i\hbar\nabla$.
- Výsledek: časově závislá **Schrödingerova rovnice**.

Schrödingerova rovnice II: časově závislá forma

- Obecný tvar:

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

- Hamiltonián (operátor energie):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V(\mathbf{r}, t).$$

- Členy rovnice:

- $i\hbar \partial_t \psi$ – popis časového vývoje,
- $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2$ – kinetická energie částice,
- $V(\mathbf{r}, t) \psi$ – potenciální energie.

- Schrödingerova rovnice je nerelativistická, platí pro pomalé částice ($v \ll c$).

Schrödingerova rovnice III: časově nezávislá forma

- Pokud je potenciál nezávislý na čase, lze použít separaci proměnných:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \phi(\mathbf{r}) e^{-iEt/\hbar}.$$

- Dostáváme časově nezávislou Schrödingerovu rovnici:

$$\hat{H}\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}).$$

- Význam:
 - $\phi(\mathbf{r})$ – stacionární prostorová část vlnové funkce,
 - E – energie vlastního stavu (eigenvalue Hamiltoniánu).
- Klíčové pro řešení kvantově mechanických systémů: jáma, oscilátor, atom vodíku.

Schrödingerova rovnice IV: základní příklady

- Částice v nekonečné potenciálové jámě (1D):

$$V(x) = 0 \quad (0 < x < L), \quad V = \infty \text{ jinak.}$$

- Řešení:

$$\phi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

- Harmonický oscilátor:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2, \quad E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2}\right).$$

- Oba příklady ukazují kvantování energie – přímý důsledek Schrödingerovy rovnice.

Schrödingerova rovnice pro vodíkový atom

- Hamiltonián pro elektron v poli jádra (proton, náboj $+e$):

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

- Časově nezávislá Schrödingerova rovnice:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}).$$

- V kulových souřadnicích (r, θ, φ) :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m_e} \left(\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} \right) - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r} \right] \psi = E\psi.$$

- Separací proměnných: $\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$.

- Výsledná energie:

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Význam: přesně vysvětluje spektrální čáry vodíku (Balmerova, Lymanova série).

Vlnové funkce vodíkového atomu

- Řešení v kulových souřadnicích má tvar:

$$\psi_{n\ell m}(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r) Y_{\ell}^m(\theta, \varphi).$$

- Radiální část $R_{n\ell}(r)$:

$$R_{n\ell}(r) \propto \left(\frac{2r}{na_0}\right)^{\ell} e^{-r/(na_0)} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right),$$

kde a_0 je Bohrovův poloměr a L jsou asociované Laguerrovy polynomy.

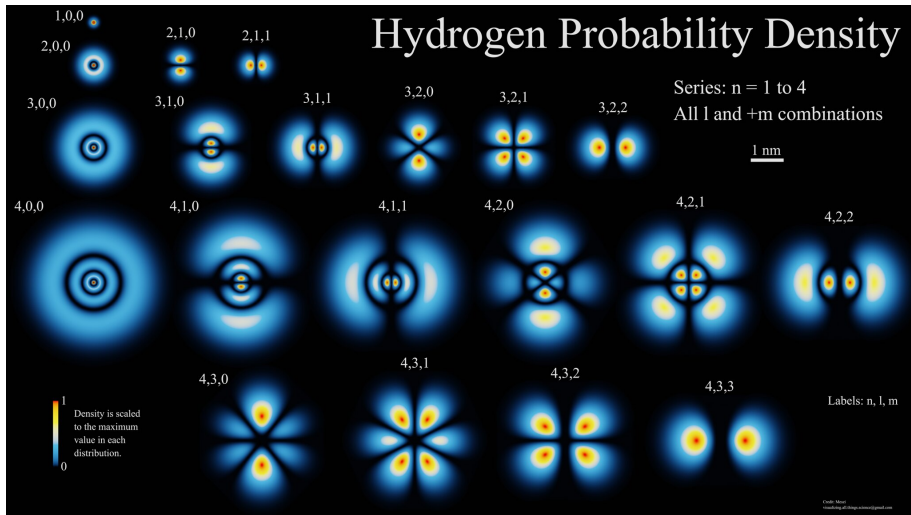
- Úhlová část $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$:

$Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ – sférické harmonické, určují prostorové rozložení pravděpodobnosti.

- Kvantová čísla:

- $n = 1, 2, 3, \dots$ (hlavní kvantové číslo),
- $\ell = 0, 1, \dots, n-1$ (vedlejší kvantové číslo),
- $m = -\ell, \dots, +\ell$ (magnetické kvantové číslo).

- Význam: tvar orbitalů ($s, p, d, \dots$) vychází přímo z $\psi_{n\ell m}$.



Schrödingerova rovnice V: vlastnosti a důsledky

- Rovnice je **lineární** – umožňuje superpozici řešení.
- Rovnice je **unitární** – vývoj zachovává normu $\int |\psi|^2 d\tau = 1$.
- Výsledkem řešení je **pravděpodobnostní rozdělení**, nikoliv deterministická trajektorie.
- Umožňuje vysvětlit:
 - stabilitu atomů (vodík, spektrální čáry),
 - chemické vazby (molekulové orbitaly),
 - kvantové jevy: tunelování, interference, kvantizaci energie.
- Omezení: platí jen v nerelativistickém rámci.

Schrödingerova rovnice VI: problém nerelativistického tvaru

- Rovnice vychází z klasické energie $E = p^2/2m + V$.
- Platí pouze pro $v \ll c$ (pomalé částice).
- Nedokáže zahrnout relativistické efekty ani spin přirozeným způsobem.
- Při vysokých energiích nebo v poli silného potenciálu je nutno použít relativistickou teorii.
- Přechod k relativistickému popisu vede k novým rovnicím: Klein–Gordon a Diracova.

Schrödingerova rovnice VII: Klein–Gordonova rovnice

- Vychází z relativistické energie: $E^2 = p^2 c^2 + m^2 c^4$.
- Kvantizace vede na Klein–Gordonovu rovnici pro skalární částice:

$$\left(\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \nabla^2 + \frac{m^2 c^2}{\hbar^2} \right) \psi = 0.$$

- Je relativistická a popisuje skalární (spin-0) pole; problém jednočásticové interpretace spočívá v tom, že její konzervovaná hustota není pozitivně definitní. V QFT je tato potíž odstraněna interpretací ψ jako pole.
- Použitelná zejména pro spin-0 bosony.

Schrödingerova rovnice VIII: Diracova rovnice

- Dirac (1928) spojil kvantovou teorii se speciální relativitou a zahrnul spin 1/2.
- Rovnice:

$$(i\hbar\gamma^\mu\partial_\mu - mc)\psi = 0.$$

- Zahrnuje čtyřsložkový spinor ψ a maticové operátory γ^μ .
- Přirozeně vysvětluje spin elektronu a předpovídá existenci antičástic.
- Diracova rovnice popisuje relativistické fermiony; po kvantování Diracova a elektromagnetického pole tvoří jejich interakce základ QED.

Kolaps vlnové funkce I: popis jevu

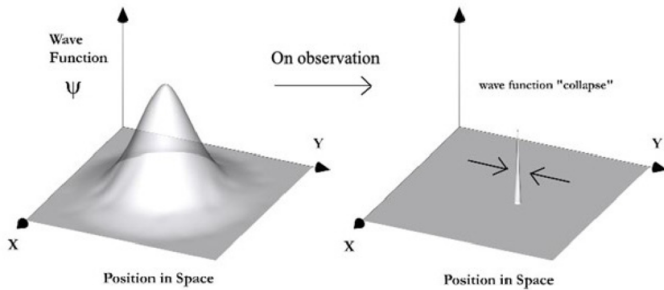
- Kvantový systém je popsán superpozicí stavů:

$$|\psi\rangle = \sum_i c_i |a_i\rangle, \quad \sum_i |c_i|^2 = 1.$$

- Při měření pozorovatelné $\hat{A}$ s vlastními stavy $|a_i\rangle$:
 - výsledek a_i nastane s pravděpodobností $p(a_i) = |c_i|^2$,
 - kolaps vlnové funkce: systém přejde do stavu $|a_i\rangle$.
- Matematicky:

$$|\psi\rangle \longrightarrow \frac{|a_i\rangle \langle a_i|\psi\rangle}{\sqrt{p(a_i)}}.$$

- Proces kolapsu není popsán Schrödingerovou rovnicí $\rightarrow$ vyžaduje samostatný postulat.



Kolaps vlnové funkce II: interpretace a důsledky

- **Kodaňské přístupy:** kolaps se používá jako pravidlo pro aktualizaci stavu při měření; jeho ontologický status není v různých kodaňských formulacích jednotný.
- **Mnohosvětová interpretace:** kolaps neexistuje, systém se větví do paralelních světů.
- **Bohmova mechanika:** částice má trajektorii, vlnová funkce je pilotní vlna, kolaps není potřeba.
- **QBism:** kolaps = aktualizace znalostí pozorovatele, nikoliv objektivní proces.
- **Filosofické důsledky:**
 - problematika „měření“ v kvantové mechanice,
 - role pozorovatele v určování reality,
 - otázka, zda je kolaps fundamentální, nebo emergentní jev.
- **Experimentální testy Bellových nerovností** vylučují širokou třídu lokálních teorií se skrytými proměnnými a potvrzují kvantové korelace; samy nerozhodují mezi standardními interpretacemi QM.

Schrödingerova rovnice IX: shrnutí

- Schrödingerova rovnice je základní dynamický zákon nerelativistické kvantové mechaniky.
- Časově závislá a nezávislá forma slouží k řešení různých problémů (stacionární vs. dynamické).
- Rovnice vysvětluje kvantování energie, stabilitu atomů a mnoho fyzikálních jevů.
- Je omezená nerelativistickým rámcem → nutnost rozšíření (Klein–Gordon, Dirac).
- Schrödingerův formalismus je stále fundamentálním nástrojem pro chemii, fyziku pevných látek a kvantovou technologii.

Pauliho vylučovací princip I

- **Princip antisymetrie:** stav libovolné částice musí respektovat transformace souřadnic (posunutí, rotace, inverze).
- Pro částice s polovičním spinem (fermiony) platí, že celková vlnová funkce mění znaménko při záměně dvou částic:

$$\Psi(\dots, x_i, \dots, x_j, \dots) = -\Psi(\dots, x_j, \dots, x_i, \dots).$$

- Pokud by dva fermiony byly ve stejném kvantovém stavu, antisymetrická vlna by se zrušila $\Rightarrow \Psi = 0$.
- **Výsledek:** dva fermiony (např. elektrony) nemohou obsadit tentýž kvantový stav – to je Pauliho vylučovací princip.

Pauliho vylučovací princip II: dva elektrony

- Uvažujme dva nerozlišitelné elektrony ve stavech $|n_1\rangle$ a $|n_2\rangle$.

- Symetrická kombinace:

$$|n_1, n_2, S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle |n_2\rangle + |n_2\rangle |n_1\rangle).$$

- Antisymetrická kombinace:

$$|n_1, n_2, A\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|n_1\rangle |n_2\rangle - |n_2\rangle |n_1\rangle).$$

- Pokud $n_1 = n_2$, antisymetrická funkce $|n, n, A\rangle$ mizí $\Rightarrow$ nelze obsadit tentýž stav dvěma fermiony.
- Tento princip vysvětluje existenci párování elektronů v orbitalech (s opačným spinem).

Pauliho vylučovací princip III: Slaterův determinant

- Dirac (1929) ukázal, že antisymetrii pro N fermionů lze vyjádřit determinantem:

$$\Psi_A(x_1, \dots, x_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \psi_{n_1}(x_1) & \psi_{n_1}(x_2) & \cdots & \psi_{n_1}(x_N) \\ \psi_{n_2}(x_1) & \psi_{n_2}(x_2) & \cdots & \psi_{n_2}(x_N) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \psi_{n_N}(x_1) & \psi_{n_N}(x_2) & \cdots & \psi_{n_N}(x_N) \end{vmatrix}.$$

- Pokud by dva řádky (dva elektrony ve stejném stavu) byly totožné, determinant = 0.
- Slaterův determinant zaručuje automaticky antisymetrii vůči záměně částic.

Pauliho princip IV: důsledky pro strukturu atomů

- Elektroný obsazují orbitály v pořadí rostoucí energie (Aufbau princip).
- Každý orbital může být obsazen maximálně dvěma elektrony s opačnými spiny.
- Výsledek: elektronové konfigurace prvků (např. H: $1s^1$, He: $1s^2$, Li: $1s^2 2s^1$, ...).
- Pauliho princip vysvětluje periodickou strukturu Mendělejevovy tabulky a chemické vlastnosti prvků.
- V kombinaci s Hundovým pravidlem určuje multiplicitní struktury základních stavů atomů.

Relace neurčitosti I: úvod a význam

- Werner Heisenberg (1927): některé fyzikální veličiny nelze určit současně s libovolnou přesností.
- **Motivace:** experimenty s difrakcí a interferencí elektronů → omezení poznání na kvantové úrovni.
- **Obecná myšlenka:** čím přesněji změříme polohu částice, tím méně přesně známe její hybnost, a naopak.
- Relace neurčitosti není omezením měřicí aparatury, ale fundamentální vlastností přírody.

Relace neurčitosti II: odvození z komutátorů

- Obecná formulace (Robertson–Schrödinger):

$$\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$$

- $\Delta A = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$ – směrodatná odchylka.

- Pro polohu $\hat{x}$ a hybnost $\hat{p}_x$:

$$[\hat{x}, \hat{p}_x] = i\hbar \quad \Rightarrow \quad \Delta x \Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2}.$$

- Odvození využívá Schwarzovy nerovnosti v Hilbertově prostoru.

Relace neurčitosti III: varianty

- Čas–energie:

$$\Delta E \Delta t \gtrsim \hbar.$$

Není přímo odvozena z komutátoru, ale souvisí s dobou života nestabilních stavů.

- Úhlová hybnost–úhel:

$$\Delta L_z \Delta \varphi \geq \frac{\hbar}{2}.$$

- Spinové komponenty (Pauliho matice nekomutují):

$$\Delta S_x \Delta S_y \geq \frac{\hbar}{2} |\langle S_z \rangle|.$$

- Obecně: relace platí pro libovolné dvojice nekomutujících pozorovatelných.

Relace neurčitosti IV: fyzikální důsledky

- Nelze současně přesně určit polohu a hybnost částice $\rightarrow$ zánik pojmu klasické trajektorie.
- Stabilita atomů: elektrony nemohou „spadnout“ na jádro, protože by tím porušily relaci neurčitosti.
- Tunelování: částice má nenulovou pravděpodobnost nacházet se v oblasti zakázané klasicky.
- Kvantové fluktuace: i ve vakuu existují nulové oscilace polí.
- Relace neurčitosti vysvětlují jemnou strukturu atomů a chování elektronů v pevných látkách.

Relace neurčitosti V: experimentální aspekty

- Difrakce elektronů na štěrbině:

$$\Delta x \approx \text{šířka štěrbiny}, \quad \Delta p_x \sim \hbar / \Delta x.$$

- Optické experimenty (Heisenbergův mikroskop) ilustrují limity současného měření.
- Moderní aplikace:
 - spektroskopie nestabilních jader (šířka spektrální čáry souvisí s $\Delta E \Delta t$),
 - kvantová kryptografie (princip neurčitosti chrání přenos informace).
- Relace neurčitosti se staly i praktickým nástrojem k odhadu řádů veličin v mikrosvětě.

Relace neurčitosti VI: filozofické důsledky

- Popírají klasickou představu determinismu (Laplaceův démon není možný).
- Neurčitost není pouze nedokonalost měřicího přístroje; vyplývá ze struktury kvantových stavů a nekomutujících pozorovatelných.
- Spojeno s Kodaňskou interpretací: měření hraje aktivní roli při určení výsledku.
- Alternativní interpretace:
 - Bohmova mechanika – deterministické dráhy, neurčitost jako důsledek skrytých proměnných.
 - Mnohosvětová interpretace – neurčitost jako projev větvení stavů.
- Relace neurčitosti zásadně mění filozofické pojetí kauzality a reality v mikrosvětě.

Relace neurčitosti VII: shrnutí

- Obecná forma: $\Delta A \Delta B \geq \frac{1}{2} |\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle|$.
- Zvláštní případ: $\Delta x \Delta p \geq \hbar/2$.
- Relace neurčitosti jsou jádrem kvantového popisu $\rightarrow$ žádné ostré trajektorie v mikrosvětě.
- Důsledky: stabilita atomů, tunelování, fluktuace, šířka spektrálních čar.
- Významné i v technologii: kvantová kryptografie, laserová fyzika, nanotechnologie.

Volná částice I: úvod a Hamiltonián

- Volná částice = částice bez potenciálu:

$$V(\mathbf{r}) = 0.$$

- Hamiltonián:

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2.$$

- Schrödingerova rovnice:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, t) = -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\mathbf{r}, t).$$

- Fyzikální význam: model pro elektron v kovu (aproximace), šíření neutronů či atomů v prostoru, částice v urychlovači.

Volná částice II: rovinné vlny

- Ansatz: $\psi(\mathbf{r}, t) = Ae^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)}$.
- Dosazením do Schrödingerovy rovnice:

$$E = \hbar\omega = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}.$$

- Vlastní stavy Hamiltoniánu jsou rovinné vlny, charakterizované vlnovým vektorem $\mathbf{k}$.
- Tyto stavy nejsou normalizovatelné v obvyklém smyslu – používá se Diracova delta-normalizace.
- Interpretace: čistý hybnostní stav s přesně určenou hybností $\mathbf{p} = \hbar\mathbf{k}$.

Volná částice III: vlnové balíky

- Rovinná vlna není lokalizovaná → nelze ji přímo interpretovat jako částici.
- Fyzikálně relevantní jsou vlnové balíky:

$$\psi(\mathbf{r}, t) = \int A(\mathbf{k}) e^{i(\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - \omega t)} d^3 k.$$

- $A(\mathbf{k})$ – váhová funkce (Fourierova transformace), určuje rozložení hybností.
- Vlnový balík je lokalizovaný a umožňuje definovat střední polohu a hybnost.
- Časový vývoj balíku ukazuje šíření (disperzi).

Volná částice IV: grupová a fázová rychlost

- Rovinná vlna: fáze se šíří rychlostí

$$v_{\text{fáz}} = \frac{\omega}{k} = \frac{\hbar k}{2m}.$$

- Vlnový balík: obálka se šíří **grupovou** rychlostí:

$$v_{\text{grup}} = \frac{d\omega}{dk} = \frac{\hbar k}{m} = \frac{p}{m}.$$

- Grupová rychlost odpovídá klasické rychlosti částice.
- Fázová rychlost může být větší než c – není fyzikálně významná pro přenos informace.
- Tento rozdíl je zásadní pro interpretaci vlnově-částicového dualismu.

Volná částice V: Heisenbergovy relace a šíření balíku

- Šířka vlnového balíku v prostoru a v hybnostním prostoru splňuje:

$$\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}.$$

- Čím více je balík lokalizován, tím více se rozšiřuje jeho spektrum hybností.
- V čase dochází k disperzi balíku:

$$\sigma_x(t) = \sigma_x(0) \sqrt{1 + \left(\frac{\hbar t}{2m\sigma_x^2(0)} \right)^2}.$$

- Praktický důsledek: volná částice se nikdy nechová jako klasická bodová částice, vždy se „rozmazává“.

Volná částice VI: shrnutí a význam

- Hamiltonián volné částice: $\hat{H} = \hat{p}^2 / 2m$.
- Vlastní stavy: rovinné vlny, vhodné k popisu hybnostních stavů.
- Fyzikální popis vyžaduje vlnové balíky – lokalizované superpozice.
- Grupová rychlost = klasická rychlost částice, fázová rychlost fyzikálně irelevantní.
- Volná částice je ideální model pro ilustraci:
 - Fourierovy analýzy stavů,
 - principu neurčitosti,
 - kvantové dynamiky bez potenciálu.

Částice v potenciálové jámě I: úvod

- Model: částice hmotnosti m uzavřená v jednorozměrné oblasti délky L .
- Potenciál:

$$V(x) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L, \\ \infty, & \text{jinak.} \end{cases}$$

- Fyzikální interpretace: elektron v úzkém nanodrátu, neutron v jádře, obecný model pro kvantové nanostruktury.
- Cíl: vyřešit Schrödingerovu rovnici a zjistit, jaké jsou povolené energetické hladiny a vlnové funkce.

Částice v potenciálové jámě II: Schrödingerova rovnice

- Časově nezávislá Schrödingerova rovnice:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x).$$

- V oblasti $0 < x < L$ je $V(x) = 0$, rovnice se zjednoduší:

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

- Přepíšeme:

$$\frac{d^2 \psi}{dx^2} + k^2 \psi = 0, \quad k = \sqrt{\frac{2mE}{\hbar^2}}.$$

- Obecné řešení: $\psi(x) = A \sin(kx) + B \cos(kx)$.

Částice v potenciálové jámě III: okrajové podmínky

- Vlnová funkce musí být nulová tam, kde potenciál $\rightarrow \infty$:

$$\psi(0) = 0, \quad \psi(L) = 0.$$

- Z podmínky $\psi(0) = 0$ plyne $B = 0$.

- Z podmínky $\psi(L) = 0$:

$$\sin(kL) = 0 \quad \Rightarrow \quad kL = n\pi, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Kvantovaná vlnová čísla:

$$k_n = \frac{n\pi}{L}.$$

- Vlnové funkce:

$$\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right).$$

Částice v potenciálové jámě IV: normalizace

- Normalizační podmínka:

$$\int_0^L |\psi_n(x)|^2 dx = 1.$$

- Dosadíme $\psi_n(x) = A_n \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$:

$$|A_n|^2 \int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = 1.$$

- Integrál:

$$\int_0^L \sin^2\left(\frac{n\pi x}{L}\right) dx = \frac{L}{2}.$$

- Z toho:

$$|A_n|^2 \frac{L}{2} = 1 \quad \Rightarrow \quad A_n = \sqrt{\frac{2}{L}}.$$

- Konečný tvar:

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right).$$

Částice v potenciálové jámě V : energie

- Energie pro vlnové číslo $k_n = \frac{n\pi}{L}$:

$$E_n = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}, \quad n = 1, 2, 3, \dots$$

- Energie je kvantována – pouze diskrétní hodnoty jsou povolené.
- Základní stav ($n = 1$) má nenulovou energii:

$$E_1 = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

- Zero-point energy: částice nikdy nemůže mít nulovou energii $\rightarrow$ důsledek relace neurčitosti.
- Vyšší stavy ($n = 2, 3, \dots$) mají energie n^2 -krát větší.

Částice v potenciálové jámě VI: interpretace

- $|\psi_n(x)|^2$ udává rozdělení pravděpodobnosti nalezení částice.
- V základním stavu ($n = 1$) je maximum uprostřed jámy.
- Vyšší stavy mají více uzlů (místa, kde je pravděpodobnost nulová).
- Počet uzlů $= n - 1$.
- Podobnost s stojatými vlnami na struně – kvantizace podmínek.
- Energie i vlnové funkce jsou důsledkem okrajových podmínek a kvantové povahy částice.

Částice v potenciálové jámě VII: fyzikální aplikace

- Elektronů v kovu: přiblížení Fermiho plynu (volné elektrony v „krabici“).
- Nanostruktury: kvantové jámy, kvantové dráty, kvantové tečky.
- Jádra atomů: model potenciálové jámy pro nukleony.
- Ukazuje fundamentální principy kvantové mechaniky:
 - kvantování energie,
 - nenulová základní energie,
 - význam okrajových podmínek.

Částice v potenciálové jámě VIII: shrnutí

- Model „particle in a box“ je didakticky i fyzikálně klíčový.
- Řešení Schrödingerovy rovnice vede k diskrétním energiím a sinusovým vlnovým funkcím.
- Základní stav má nenulovou energii (zero-point energy).
- Kvantování vyplývá z okrajových podmínek → fundamentální rozdíl od klasické fyziky.
- Model má široké uplatnění od mikroskopických systémů po nanotechnologie.

3D potenciálová jáma I: úvod

- Model: částice hmotnosti m uzavřená v krychlové oblasti o straně L .

- Potenciál:

$$V(x, y, z) = \begin{cases} 0, & 0 < x < L, \ 0 < y < L, \ 0 < z < L, \\ \infty, & \text{jinak.} \end{cases}$$

- Schrödingerova rovnice:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(x, y, z) = E \psi(x, y, z).$$

- Použití: model elektronů v krystalové mřížce, v kovové krychli, kvantové krabice (quantum dots).

3D potenciálová jáma II: separace proměnných

- Rovnice je separovatelná:

$$\psi(x, y, z) = X(x)Y(y)Z(z).$$

- Dostáváme 3 nezávislé rovnice pro X, Y, Z :

$$\frac{d^2 X}{dx^2} + k_x^2 X = 0, \quad \frac{d^2 Y}{dy^2} + k_y^2 Y = 0, \quad \frac{d^2 Z}{dz^2} + k_z^2 Z = 0.$$

- Řešení je analogické 1D jámě:

$$X_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right),$$

a obdobně pro $Y_{n_y}(y), Z_{n_z}(z)$.

3D potenciálová jáma III: vlnové funkce a energie

- Celková vlnová funkce:

$$\psi_{n_x, n_y, n_z}(x, y, z) = \left(\frac{2}{L}\right)^{3/2} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right) \sin\left(\frac{n_z \pi z}{L}\right).$$

- Energetické hladiny:

$$E_{n_x, n_y, n_z} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (n_x^2 + n_y^2 + n_z^2).$$

- Kvantová čísla:

$$n_x, n_y, n_z = 1, 2, 3, \dots$$

- Každý trojrozměrný stav je popsán trojicí celých čísel.

3D potenciálová jáma IV: degenerace hladin

- Energie závisí jen na součtu $n_x^2 + n_y^2 + n_z^2$.
- Různé kombinace kvantových čísel mohou dávat stejnou energii.
- Příklad:
 - $E_{1,1,2} = E_{1,2,1} = E_{2,1,1}$.
 - Tato hladina má degeneraci 3.
- Degenerace roste s energií – vyšší hladiny mají více kombinací (n_x, n_y, n_z) se stejným součtem čtverců.
- Tento jev je důležitý pro statistické vlastnosti elektronových systémů (Fermiho energie).

3D potenciálová jáma V: shrnutí a význam

- 3D jáma je zobecněním 1D modelu na trojrozměrný prostor.
- Řešení se provádí separací proměnných $\rightarrow$ sinusové funkce v každém směru.
- Energetické hladiny jsou určeny trojicí kvantových čísel (n_x, n_y, n_z) .
- Degenerace hladin je důsledek izotropie krychlové jámy.
- Význam: základní model elektronů v kovech, nanostrukturách a kvantových tečkách.

Kvantový harmonický oscilátor I: úvod

- Potenciál:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2.$$

- Modeluje:

- kmity atomů v molekulách,
- vibrace krystalové mřížky (fonony),
- aproximace libovolného minima potenciálu.

- Schrödingerova rovnice:

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

Význam parametru ω v harmonickém oscilátoru

- Potenciál:

$$V(x) = \frac{1}{2} m \omega^2 x^2$$

- ω je kruhová frekvence oscilátoru (úhlová frekvence kmitů).
- Klasická mechanika:

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{m}}, \quad x(t) = A \cos(\omega t + \varphi).$$

- Čím větší ω , tím strmější je potenciál $\rightarrow$ částice kmitá rychleji kolem rovnovážné polohy.
- Kvantová mechanika:
 - Energetické hladiny jsou odstupňované po $\hbar\omega$,
 - Základní energie:

$$E_0 = \frac{1}{2} \hbar\omega.$$

- ω tedy určuje jak časový vývoj oscilátoru, tak kvantový energetický spektrum.

Kvantový harmonický oscilátor II: algebraické řešení

- Zavedení tvořivého a anihilačního operátoru:

$$\hat{a} = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} + \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right), \quad \hat{a}^\dagger = \sqrt{\frac{m\omega}{2\hbar}} \left(\hat{x} - \frac{i}{m\omega} \hat{p} \right).$$

- Komutátor:

$$[\hat{a}, \hat{a}^\dagger] = 1.$$

- Hamiltonián:

$$\hat{H} = \hbar\omega \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right).$$

- Energie:

$$E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right), \quad n = 0, 1, 2, \dots$$

Kvantový harmonický oscilátor III: vlnové funkce

- Vlastní funkce:

$$\psi_n(x) = \left(\frac{m\omega}{\pi\hbar}\right)^{1/4} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n\left(\sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x\right) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

kde H_n jsou Hermitovy polynomy.

- Symetrie: liché funkce pro lichá n , sudé pro sudá n .
- Pravděpodobnostní hustoty $|\psi_n(x)|^2$ vykazují rostoucí počet uzlů s n .
- Limitní chování: pro $n \gg 1$ přechod ke klasickému rozdělení (princip korespondence).

Kvantový harmonický oscilátor IV: význam

- Fundamentální model kvantové mechaniky.
- Ilustruje:
 - kvantování energie,
 - nenulovou základní energii $E_0 = \frac{1}{2} \hbar \omega$,
 - algebraické metody řešení (tvořivé/anihilační operátory).
- Aplikace:
 - fonony v pevných látkách,
 - molekulární vibrace,
 - kvantová optika (kvantování elektromagnetického pole).

Atom vodíku I: Hamiltonián

- Elektron (hmotnost m_e , náboj $-e$) v Coulombově poli protonu:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}.$$

- Schrödingerova rovnice:

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}).$$

- Přirozený popis v kulových souřadnicích (r, θ, φ) .

Atom vodíku II: separace proměnných

- Ansatz:

$$\psi(r, \theta, \varphi) = R_{n\ell}(r)Y_{\ell}^m(\theta, \varphi).$$

- Rovnice se rozdělí na:

- radiální rovnici pro $R_{n\ell}(r)$,
- úhlovou část $Y_{\ell}^m(\theta, \varphi)$ = sférické harmonické.

- Kvantová čísla:

$$n = 1, 2, 3, \dots, \quad \ell = 0, 1, \dots, n-1, \quad m = -\ell, \dots, +\ell.$$

Atom vodíku III: energie a degenerace

- Energie závisí pouze na n :

$$E_n = -\frac{13.6 \text{ eV}}{n^2}.$$

- Každá hladina n má degeneraci n^2 (kombinace ℓ a m).

- Příklad:

- $n = 1$: jen $1s$ stav.
- $n = 2$: $2s$, $2p_x$, $2p_y$, $2p_z$ (celkem 4).

- Degenerace odráží symetrii Coulombova potenciálu.

Atom vodíku IV: radiální funkce a orbitaly

- Radiální část:

$$R_{n\ell}(r) \propto \left(\frac{2r}{na_0}\right)^\ell e^{-r/(na_0)} L_{n-\ell-1}^{2\ell+1}\left(\frac{2r}{na_0}\right),$$

kde a_0 je Bohrov poloměr, L jsou Laguerrovy polynomy.

- Úhlová část: sférické harmonické $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$.
- Orbitaly: s , p , d , $\dots$ tvary vycházejí z $|\psi_{n\ell m}|^2$.
- Význam: kvantová čísla určují strukturu periodické tabulky a chemické vazby.

Atom vodíku V: význam a aplikace

- Atom vodíku = jediný vícečásticový systém řešitelný přesně v QM.
- Základ pro kvantovou teorii atomů, molekul a pevných látek.
- Vysvětluje spektrální čáry (Lymanova, Balmerova, Paschenova série).
- Poskytuje výchozí přiblížení i pro složitější atomy (metody perturbací, Hartree–Fock).
- Ústřední role ve vývoji kvantové teorie i moderních aplikacích (lasery, astrofyzika).

Tunelový jev I: objev a historický kontext

- 1928 – George Gamow použil kvantovou mechaniku k vysvětlení alfa rozpadu.
- Alfa částice nemá dostatek energie, aby klasicky překonala Coulombovu bariéru jádra.
- Přesto se pozoruje její únik → Gamow ukázal, že částice může tunelovat skrz bariéru.
- Tunelový jev se stal prvním důkazem, že kvantová mechanika zásadně mění klasickou představu pohybu částic.

Tunelový jev II: princip

- Schrödingerova rovnice umožňuje řešení i v oblasti, kde $E < V(x)$.
- V klasickém přiblížení: částice se odrazí, v kvantové mechanice vlna postupně exponenciálně klesá uvnitř bariéry.
- Pokud je bariéra konečně široká, vlna za ní znovu nabývá nenulové hodnoty $\rightarrow$ částice může projít.
- Pravděpodobnost průchodu = nenulová, i když klasicky zakázaná.
- Tunelování je čistě kvantový efekt, bez klasické analogie.

Tunelový jev III: model potenciálové bariéry

- Bariéra výšky V_0 a šířky a :

$$V(x) = \begin{cases} 0, & x < 0, \\ V_0, & 0 \leq x \leq a, \\ 0, & x > a. \end{cases}$$

- Částice s energií $E < V_0$:

$$\psi(x) = \begin{cases} Ae^{ikx} + Be^{-ikx}, & x < 0, \\ Ce^{\kappa x} + De^{-\kappa x}, & 0 \leq x \leq a, \\ Fe^{ikx}, & x > a. \end{cases}$$

- Konstanty:

$$k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

Tunelový jev IV: pravděpodobnost průchodu

- Řešením rovnice s okrajovými podmínkami získáme přenosový koeficient (pravděpodobnost tunelování):

$$T = \left(1 + \frac{V_0^2 \sinh^2(\kappa a)}{4E(V_0 - E)} \right)^{-1}.$$

- Pro vysoké bariéry nebo široké bariéry aproximace:

$$T \approx e^{-2\kappa a}, \quad \kappa = \frac{\sqrt{2m(V_0 - E)}}{\hbar}.$$

- Čím vyšší V_0 a čím širší a , tím menší pravděpodobnost tunelování.
- Tunelování není nikdy přesně nulové, pokud bariéra není nekonečná.

Tunelový jev V: fyzikální interpretace

- Tunelování není „přeskočení bariéry“, ale **prostup kvantové vlny skrz zakázanou oblast**.
- Vlna za bariérou je zeslabená, ale stále nenulová → možnost detekce částice.
- Relace neurčitosti: přesné omezení hybnosti a polohy vede k nenulové pravděpodobnosti v zakázaném regionu.
- Tunelování je fundamentální pro stabilitu hvězd, jaderné reakce i technologické aplikace.

Tunelový jev VI: aplikace

- **Jaderná fyzika:** alfa rozpad (Gamowův objev), fúze v jádrech hvězd.
- **Elektronika:** tunelové diody, tunelové tranzistory.
- **Mikroskopie:** rastrovací tunelový mikroskop (STM) – rozlišení na úrovni jednotlivých atomů.
- **Biologie:** tunelování protonů a elektronů v enzymatických reakcích.
- **Astrofyzika:** termonukleární reakce v jádrech hvězd, které by klasicky nebyly možné.

Tunelový jev VII: shrnutí

- Tunelování je jev umožňující částici proniknout přes potenciálovou bariéru i pro $E < V_0$.
- Popsán Gamowem pro alfa rozpad (1928).
- Matematicky: řešení Schrödingerovy rovnice s konečnou bariérou $\rightarrow$ přenosový koeficient T .
- Aproximace: $T \approx e^{-2\kappa a}$, exponenciálně citlivé na výšku a šířku bariéry.
- Aplikace: jaderná fyzika, mikroelektronika, STM, biologie.
- Tunelový jev je jedním z nejčistších důkazů odlišnosti kvantové a klasické fyziky.

Interpretace kvantové mechaniky I: přehled

- Kvantová mechanika je matematicky přesná, ale fyzikální význam vlnové funkce ψ lze chápat různě.
- Hlavní interpretace:
 - Kodaňská interpretace – Niels Bohr, Werner Heisenberg.
 - Mnohosvětová interpretace (Many-Worlds) – Hugh Everett (1957).
 - Bohmova mechanika (pilotní vlna) – David Bohm, Louis de Broglie.
 - Relacionální interpretace – Carlo Rovelli.
 - QBism – Chris Fuchs, Rüdiger Schack.
- Každá interpretace odpovídá na otázku: „Co znamená vlnová funkce a kolaps?“

- Formována Bohr–Heisenberg (20. léta 20. stol.).
- Stav systému je popsán ψ , ale výsledek měření je náhodný.
- Měření způsobí kolaps vlnové funkce do jednoho z vlastních stavů.
- Princip komplementarity: vlna a částice nejsou protiklady, ale různé aspekty reality, závislé na experimentálním uspořádání.
- V matematice: Bornovo pravidlo

$$p(a) = |\langle a | \psi \rangle|^2$$

určuje pravděpodobnost výsledku a při měření operátoru $\hat{A}$.

Interpretace III: Mnohosvětová (Everettova)

- Hugh Everett (1957): žádný kolaps vlnové funkce neexistuje.
- Při měření se vesmír větví na paralelní „světy“, v každém je realizován jeden výsledek.
- Matematicky: celkový stav po měření je superpozice systém+měřicí přístroj:

$$|\psi\rangle |M_0\rangle \rightarrow \sum_i c_i |a_i\rangle |M_i\rangle .$$

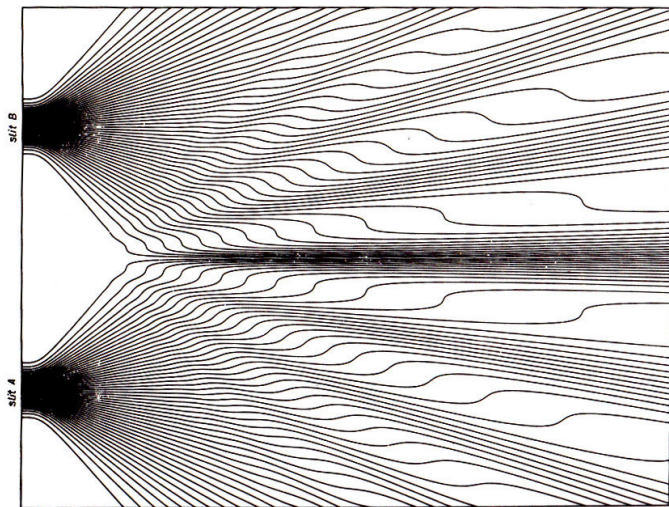
- Každá větev existuje reálně, my vnímáme pouze jednu.
- Výhoda: deterministická evoluce, žádný zvláštní postulat kolapsu.
- Nevýhoda: obtížná fyzikální interpretace „reálnosti“ paralelních světů.

Interpretace IV: Bohmova mechanika (pilotní vlna)

- Louis de Broglie (1927), dále rozvinul David Bohm (1952).
- Částice má vždy dobře definovanou polohu $r(t)$.
- Vlnová funkce $\psi(r, t)$ působí jako **pilotní vlna**, která vede trajektorii částice.
- Rovnice pohybu:

$$\frac{d\mathbf{r}}{dt} = \frac{\hbar}{m} \Im \frac{\nabla \psi}{\psi}.$$

- Výsledky měření jsou deterministické, ale prakticky nerozlišitelné od standardní QM.
- Nevýhoda: netriviální nelokálnost (Bellovy teoremy).



Interpretace V: Relacionální QM

- Carlo Rovelli (90. léta 20. stol.).
- Stav systému nemá absolutní význam, ale existuje pouze ve vztahu k jinému systému.
- Vlnová funkce je nástrojem popisu relace mezi objektem a pozorovatelem.
- Kolaps je relativní – záleží, kdo a co považujeme za měřicí systém.
- Cíl: vyhnout se paradoxům typu Schrödingerovy kočky redefinicí pojmu „realita“.

Interpretace VI: QBism (Quantum Bayesianism)

- Chris Fuchs, Rüdiger Schack (2000+).
- Vlnová funkce ψ nepopisuje objektivní realitu, ale subjektivní vědomosti pozorovatele.
- Bornovo pravidlo není fyzikální zákon, ale rozšíření Bayesovy statistiky.
- Pravděpodobnosti jsou výpovědi o očekávání pozorovatele, nikoli o „skutečném“ stavu světa.
- Kolaps je pouhá aktualizace znalostí, nikoliv fyzikální proces.
- Přístup blízký informatické a epistemologické interpretaci kvantové mechaniky.

Interpretace VII: shrnutí a srovnání

- Kodaňská: standardní, pracuje s kolapsem, probabilistická.
- Mnohosvětová: deterministická, žádný kolaps, paralelní světy.
- Bohmova: realistická trajektorie částice, vlnová funkce jako „pilot“.
- Relacionální: stav existuje jen relativně k pozorovateli.
- QBism: ψ = subjektivní znalosti pozorovatele.
- Společný rys: matematický formalismus je stejný, liší se jen interpretace významu ψ .

Interpretace kvantové mechaniky: filozofické dopady

● Realismus vs. instrumentalismus:

- Realistické interpretace (Bohm, mnohosvětová) tvrdí, že ψ popisuje objektivní realitu.
- Instrumentalistické (Kodaň, QBism) berou ψ jen jako nástroj pro předpovědi.

● Determinismus vs. indeterminismus:

- Bohmova a mnohosvětová interpretace → determinismus.
- Kodaňská interpretace → náhodnost je fundamentální.

● Kauzalita:

- V QM je porušena klasická představa striktní kauzality,
- výsledky měření jsou pouze pravděpodobnostní.

● Lokalita a provázání:

- EPR paradox a Bellovy nerovnosti ukazují, že příroda není lokálně realistická.
- Experimentálně potvrzené → svět je ne-lokální na kvantové úrovni.

● Dopad: kvantová mechanika redefinuje pojetí reality, poznání a hranice deterministického popisu přírody.

Aplikace kvantové mechaniky I: úvod

- Kvantová mechanika není jen abstraktní teorie → stojí za většinou moderní technologie.
- Bez kvantové mechaniky bychom nerozuměli:
 - vlastnostem pevných látek,
 - polovodičům,
 - laserům,
 - supravodivosti,
 - kvantovým počítačům.
- Cílem této části je ukázat propojení teorie a praxe.

Aplikace II: polovodiče a elektronika

- Základní elektronické součástky (diody, tranzistory, integrované obvody) fungují na bázi kvantové fyziky.
- Klíčové principy:
 - Zakázané pásy a povolené energetické pásy (kvantová teorie pevných látek).
 - Řízený tok elektronů mezi pásy → spínání a zesílení signálu.
- Všechny moderní počítače, mobily a internet by bez kvantové mechaniky neexistovaly.

Aplikace III: lasery a kvantová optika

- Laser (Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation):
 - využívá princip **stimulated emission**, popsaný Einsteinem (1917).
 - foton může vyvolat emisi dalšího fotonu se stejnou energií, fází a směrem.
- Aplikace laserů:
 - medicína, optická vlákna, měření vzdáleností, průmyslové řezání.
- Kvantová optika: studium světla na úrovni jednotlivých fotonů → základ kvantové komunikace.

Aplikace IV: supravodivost a supratekutost

- **Supravodivost** (Onnes 1911): nulový odpor při nízkých teplotách.
- Vysvětlení: **Cooperovy páry** a kvantové kolektivní stavy elektronů.
- **Praktické využití:**
 - magnetická levitace (vlaky Maglev),
 - MRI přístroje,
 - kvantové obvody (Josephsonovy přechody).
- **Supratekutost:** kapalný hélium při $T < 2.17 \text{ K}$ → proudění bez viskozity.

- Kvantové počítače:
 - využívají qubity v superpozici a entanglement,
 - slibují revoluci v kryptografii, optimalizaci, simulaci molekul.
- Kvantová kryptografie:
 - bezpečný přenos informací díky principu neurčitosti a nemožnosti kopírovat qubit.
- Kvantové senzory:
 - extrémní citlivost na změny magnetického a gravitačního pole.
- Tyto aplikace spojují nejabstraktnější principy QM s technologickou praxí.

Aplikace VI: shrnutí a motivace

- Kvantová mechanika není jen teorie → je základní infrastrukturou moderní civilizace.
- Hlavní oblasti aplikace:
 - elektronika a polovodiče,
 - lasery a kvantová optika,
 - supravodivost a supratekutost,
 - kvantové technologie budoucnosti.
- Studium QM = vstupenka do oblastí s obrovským vědeckým i praktickým významem.
- Přes svou abstraktnost je kvantová mechanika **nejsilnějším nástrojem moderní fyziky**.

Density Functional Theory (DFT) I: principy

- Úloha: řešení Schrödingerovy rovnice pro mnohoelektronový systém (molekuly, pevné látky).
- Přímé řešení pro N elektronů je neproveditelné (dimenzionalita $\sim 3N$).
- **Density Functional Theory (DFT)**: základní proměnnou je elektronová hustota $\rho(\mathbf{r})$ místo vlnové funkce $\psi(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$.
- **Hohenberg–Kohnovy věty (1964)**:
 - 1 Hustota základního stavu $\rho(\mathbf{r})$ určuje (až na aditivní konstantu) vnější potenciál, a tím Hamiltonián a vlastnosti základního stavu.
 - 2 Energie je funkcionál hustoty $E[\rho]$ a je minimální pro správnou hustotu.
- Přínos: kvantová mechanika redukována na problém jediné funkce $\rho(\mathbf{r})$.

Density Functional Theory (DFT) II: Kohn–Sham a B–O aproximace

- Kohn–Sham rovnici (1965) pro jednoelektronové orbitaly:

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + V_{\text{eff}}[\rho](\mathbf{r}) \right] \phi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i \phi_i(\mathbf{r}),$$

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i f_i |\phi_i(\mathbf{r})|^2,$$

- Efektivní potenciál:

$$V_{\text{eff}} = V_{\text{jader}} + V_H[\rho] + V_{\text{xc}}[\rho],$$

kde V_H = Hartreeho Coulombický potenciál, V_{xc} = výměnný–korelační příspěvek.

- Born–Oppenheimerova aproximace: separace jaderných a elektronových souřadnic v N -částicové Schrödingerově rovnici:

$$\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{R}) \approx \psi_e(\mathbf{r}; \mathbf{R}) \chi(\mathbf{R}),$$

kde $\mathbf{r}$ jsou souřadnice elektronů a $\mathbf{R}$ souřadnice jader.

- Význam: jádra považujeme za stacionární vzhledem k rychlému pohybu elektronů $\rightarrow$ DFT se aplikuje pro fixní konfiguraci jader.

Kvantový počítač I: principy

- Klasický bit: hodnoty 0 nebo 1.
- Qubit: stav v Hilbertově prostoru dvourozměrné báze:

$$|\psi\rangle = \alpha |0\rangle + \beta |1\rangle, \quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1.$$

- Superpozice: obecný čistý stav je lineární kombinací báзовých stavů $|0\rangle$ a $|1\rangle$; při měření v této bázi dostaneme jeden z výsledků s pravděpodobnostmi $|\alpha|^2$ a $|\beta|^2$.
- Provázání (entanglement): korelace mezi qubity přesahují klasické možnosti.
- Kvantové hradlo: unitární operátor působící na qubity, např. Hadamardovo hradlo:

$$H = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 & 1 \\ 1 & -1 \end{pmatrix}.$$

- Kvantový algoritmus = sekvence unitárních operací + měření.

Kvantový počítač II: možnosti a aplikace

- **Shorův algoritmus:** rychlá faktorizace čísel → prolomení RSA kryptografie.
- **Groverův algoritmus:** kvadratické zrychlení při vyhledávání.
- **Simulace kvantových systémů:** molekuly, materiály, vysokoteplotní supravodivost.
- **Optimalizace:** existují kvantové a hybridní algoritmy pro některé optimalizační úlohy, ale obecná praktická výhoda oproti klasickým metodám zatím není prokázána.
- **Fyzické realizace qubitů:**
 - supravodivé obvody (Google, IBM),
 - iontové pasti,
 - fotonické systémy,
 - NV-centra v diamantu.
- **Výzvy:** dekoherence, korekce chyb, škálovatelnost.

Kvantová teorie pole I: úvod

- Kvantová mechanika popisuje částice, speciální teorie relativity nutí respektovat rychlost světla c .
- Kvantová teorie pole (QFT) = sjednocení kvantové mechaniky a speciální relativity.
- Základní myšlenka: částice jsou excitace kvantovaných polí.
- Např. foton je kvantem elektromagnetického pole, elektron je kvantem Diracova pole.
- QFT je základem Standardního modelu částicové fyziky.

Kvantová teorie pole II: kvantování polí

- Pole $\phi(\mathbf{r}, t)$ se stává operátorem působícím v Hilbertově prostoru.
- Pole lze rozvinout na módy (Fourierovy složky):

$$\hat{\phi}(\mathbf{r}, t) = \sum_k \left(a_k u_k(\mathbf{r}, t) + a_k^\dagger u_k^*(\mathbf{r}, t) \right).$$

- $a_k^\dagger$ = operátor kreace částice, a_k = operátor anihilace.
- Vakuum: stav bez částic, $|0\rangle$.
- Částice = excitace pole: $|1_k\rangle = a_k^\dagger |0\rangle$.

Kvantová teorie pole III: interakce a Feynmanovy diagramy

- Interakce mezi částicemi odpovídají členům v lagrangiánu.
- Např. kvantová elektrodynamika (QED):

$$\mathcal{L}_{\text{QED}} = \bar{\psi}(i\gamma^\mu D_\mu - m)\psi - \frac{1}{4}F_{\mu\nu}F^{\mu\nu}.$$

- Interakce popisujeme perturbativně pomocí Feynmanových diagramů.
- Diagramy = vizuální zápis členů vývoje rozptylové matice.
- Umožňují výpočet pravděpodobností procesů: rozptyl elektronů, emise a absorpce fotonů apod.

Teorém Noetherové

- Emmy Noether (1918): každé spojité symetrii lagrangiánu odpovídá zákon zachování.
- Příklady:
 - Translace v čase $\Rightarrow$ zákon zachování energie.
 - Translace v prostoru $\Rightarrow$ zákon zachování hybnosti.
 - Rotace $\Rightarrow$ zákon zachování momentu hybnosti.
 - Globální fázová symetrie $\psi \mapsto e^{i\alpha} \psi \Rightarrow$ zákon zachování náboje.
- Teorém Noetherové je základním nástrojem fyziky polí a fundamentálních interakcí.

Kvantová teorie pole IV: shrnutí a význam

- Částice nejsou fundamentální, ale jsou excitacemi kvantovaných polí.
- V perturbativním popisu lze interakce reprezentovat Feynmanovými diagramy s vnitřními propagátory (často heuristicky popisovanými jako „výměna virtuálních kvant“).
- QFT sjednocuje kvantovou mechaniku a speciální relativitu.
- Poskytuje teoretický základ pro Standardní model (elektroslabá a silná interakce).
- Další směry: kvantová teorie pole na zakřiveném pozadí, pokusy o kvantovou gravitaci.

Elementární částice – základní parametry

Částice	Symbol	Klidová hmotnost	Náboj	Spin
Leptony				
Elektron	e^-	$0.511 \text{ MeV}/c^2$	$-1e$	$1/2$
Mion	μ^-	$105.7 \text{ MeV}/c^2$	$-1e$	$1/2$
Tauon	τ^-	$1776.9 \text{ MeV}/c^2$	$-1e$	$1/2$
Neutrino e	ν_e	$< 2 \text{ eV}/c^2$	0	$1/2$
Neutrino μ	ν_μ	$< 0.19 \text{ MeV}/c^2$	0	$1/2$
Neutrino τ	ν_τ	$< 18.2 \text{ MeV}/c^2$	0	$1/2$
Kvarky				
Up	u	$\sim 2.2 \text{ MeV}/c^2$	$+2/3e$	$1/2$
Down	d	$\sim 4.7 \text{ MeV}/c^2$	$-1/3e$	$1/2$
Strange	s	$\sim 96 \text{ MeV}/c^2$	$-1/3e$	$1/2$
Charm	c	$\sim 1.28 \text{ GeV}/c^2$	$+2/3e$	$1/2$
Bottom	b	$\sim 4.18 \text{ GeV}/c^2$	$-1/3e$	$1/2$
Top	t	$\sim 173 \text{ GeV}/c^2$	$+2/3e$	$1/2$
Bosony sil				
Foton	γ	0	0	1
Gluon	g	0	0	1
W^+ boson	W^+	$80.4 \text{ GeV}/c^2$	$+1e$	1
W^- boson	W^-	$80.4 \text{ GeV}/c^2$	$-1e$	1
Z^0 boson	Z^0	$91.2 \text{ GeV}/c^2$	0	1
Higgs boson	H^0	$125 \text{ GeV}/c^2$	0	0

- Studuje fyzikální vlastnosti kondenzované fáze hmoty: **pevné látky a kapaliny.**
- U pevných látek rozlišujeme:
 - **Krystalické** – periodické uspořádání atomů.
 - **Amorfní** – neuspořádané struktury.
- Základní témata:
 - krystalická struktura, difrakce, fonony, elektronové stavy,
 - magnetismus, supravodivost, polovodiče.
- Metody: rentgenová difrakce, neutronová difrakce, elektronová mikroskopie.

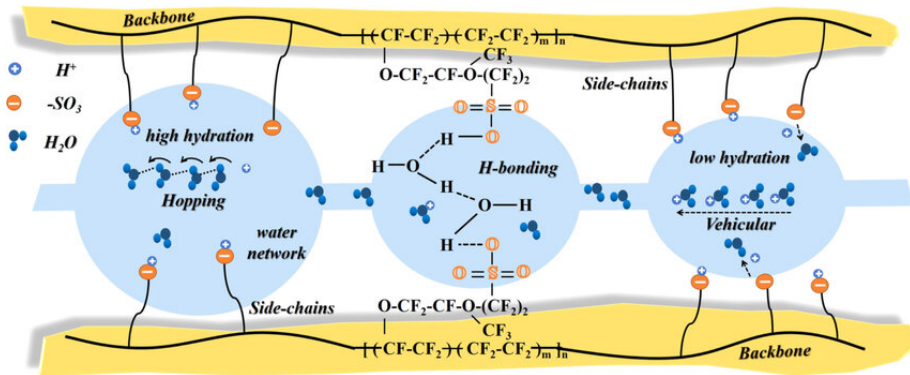
Amorfní látky - polymery

- Polymery vykazují velmi široké spektrum vlastností v závislosti na chemické struktuře, orientaci řetězců a přítomnosti příměsí.
- Rozlišujeme:
 - Izolanty – běžné plasty s nízkou vodivostí a vysokou pružností.
 - Vodivé polymery – s konjugovanými π -vazbami nebo dopované, vykazují kovovou vodivost.

Materiál	Typ polymeru	σ [S/m]	Stabilita [°C]	Využití
Polyethylen (PE)	nevodivý, lineární	$10^{-15} - 10^{-13}$	< 100	izolační fólie, obaly
Polytetrafluorethylen	nevodivý, lineární	$< 10^{-16}$	~ 260	vysoká chemická odolnost
Polykarbonát (PC)	nevodivý, amorfní	10^{-14}	120–140	transparentní, odolný plast
Epoxidová pryskyřice	termoset, síťovaný	10^{-14}	150–200	kompozity, lepidla, izolant
Polyanilin (PANI)	vodivý, konjugovaný	$10^{-2} - 10^3$	~ 100	vodivé povlaky, senzory
Polyacetylen (PA)	vodivý, konjugovaný	10^4 (dopaný)	~ 80	experimentální vodivý polymer
Polypyrrol (PPy)	vodivý, konjugovaný	$10^0 - 10^3$	~ 120	elektrochemické aplikace
Polythiofen	vodivý, konjugovaný	$10^2 - 10^4$	~ 150	transparentní elektrody
Polyimid (Kapton)	nevodivý, aromatický	10^{-14}	400	vysokoteplotní izolant

Poznámka

Elektrická vodivost polymerů se liší o více než 18 řádů. Vodivé polymery vznikají dopováním nebo díky konjugovanému systému π -vazeb, který umožňuje delokalizaci elektronů. Nevodivé polymery zůstávají vynikajícími dielektriky.



Historický vývoj fyziky pevných látek

- 1853 – první pozorování čárového spektra vodíku.
- 1869 – Mendělejevova periodická tabulka prvků.
- 1895 – objev rentgenového záření (W.C. Röntgen).
- 1912 – objev rentgenové difrakce na krystalech (M. von Laue, F. a W. Bragg).
- 1920s – rozvoj kvantové mechaniky (Planck, Einstein, Bohr, Schrödinger, Heisenberg).
- 1930s – první teorie krystalové vazby, fononů a pásové struktury.
- 1950s – rozvoj fyziky polovodičů, supravodivosti, magnetismu.
- Dnes: fyzika pevných látek = jádro fyziky kondenzovaných látek.

Bravaisovy mřížky

- Krystalová mřížka – pravidelný trojrozměrný soubor bodů:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + u_1 \mathbf{a}_1 + u_2 \mathbf{a}_2 + u_3 \mathbf{a}_3,$$

kde $u_i \in \mathbb{Z}$, $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ jsou primitivní translační vektory.

- Podle symetrie existuje pouze 14 typů mřížek (Bravaisovy mřížky).
- Tyto se seskupují do 7 krystalografických soustav.
- Každá mřížka se skládá z mřížky + báze (atomy navázané na mřížkové body).

14 Bravaisových mřížek

- Triklinická: jednoduchá (P).
- Monoklinická: P, C.
- Ortorombická: P, C, I, F.
- Tetragonální: P, I.
- Krychlová: P, I (bcc), F (fcc).
- Hexagonální: P.
- Trigonální (rhomboedrická): P.
- Celkem: 7 soustav, 14 mřížek.
- P = primitivní, I = prostorově centrovaná (body-centered), F = plošně centrovaná (face-centered), C = základna centrovaná (base-centered).

The 7 Crystal Systems

Crystal Structure

Cubic

$$a=b=c$$

$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

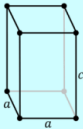


Fluorite

Tetragonal

$$a=b \neq c$$

$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

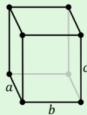


Wulfenite

Orthorhombic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha=\beta=\gamma=90^\circ$$

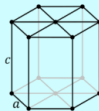


Olivine

Hexagonal

$$a=b \neq c$$

$$\alpha=\beta=90^\circ, \gamma=120^\circ$$

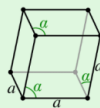


Emerald

Trigonal

$$a=b=c$$

$$\alpha=\beta=\gamma \neq 90^\circ$$

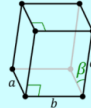


Rhodochrosite

Monoclinic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha=\gamma=90^\circ, \beta \neq 90^\circ$$



Azurite

Triclinic

$$a \neq b \neq c$$

$$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq 90^\circ$$



Amazonite

 sciencenotes.org

Bravaisovy mřížky běžných materiálů

Materiál	Chem. vzorec	Typ mřížky	Krystalová soustava
Železo (α -Fe)	Fe	bcc (I)	kubická prostorově centrovaná
Železo (γ -Fe)	Fe	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Nikl	Ni	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Měď	Cu	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Hliník	Al	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Chrom	Cr	bcc (I)	kubická prostorově centrovaná
Tantal	Ta	bcc (I)	kubická prostorově centrovaná
Wolfram	W	bcc (I)	kubická prostorově centrovaná
Olovo	Pb	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Zlato	Au	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Stříbro	Ag	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Titan (α -Ti)	Ti	hcp (P)	hexagonální primitivní
Zinek	Zn	hcp (P)	hexagonální primitivní
Hořčík	Mg	hcp (P)	hexagonální primitivní
Kobalt (α -Co)	Co	hcp (P)	hexagonální primitivní
Kobalt (β -Co)	Co	fcc (F)	kubická plošně centrovaná
Grafit	C	hexagonální vrstvený	hexagonální
Diamant	C	fcc (F) s bází	kubická plošně centrovaná
Sodík	Na	bcc (I)	kubická prostorově centrovaná
Draslík	K	bcc (I)	kubická prostorově centrovaná
Chlorid sodný	NaCl	fcc (F) s bází	kubická plošně centrovaná
Chlorid cesný	CsCl	sc (P) s bází	kubická jednoduchá
Oxid hořečnatý	MgO	fcc (F) s bází	kubická plošně centrovaná
Křemík	Si	fcc (F) s bází	kubická plošně centrovaná
Germanium	Ge	fcc (F) s bází	kubická plošně centrovaná

Vazby v pevných látkách – přehled a příklady

Typ vazby	Mechanismus	Typické materiály	Přibližná energie [eV/atom]
Iontová (elektrostatická)	Přenos elektronu mezi kationtem a aniontem	NaCl, KBr, MgO, CaF ₂	5–10
Kovalentní (sdílení elektronů)	Sdílení elektronových párů mezi atomy	Diamant (C), Si, Ge, GaAs	2–7
Kovová (delokalizované elektrony)	„Moře elektronů“ mezi kationty kovů	Fe, Cu, Al, Na, Ag	1–5
Van der Waalsova (disperzní)	Interakce indukovaných dipólů	Ar, Ne, grafit	0.01–0.1
Vodíková vazba	Interakce mezi H ⁺ a elektroneg. atomem	H ₂ O, NH ₃ , HF, proteiny	0.1–0.4
Iontově–kovová	Smíšená vazba mezi iont. a kovovým typem	TiC, FeS, NiO	2–6
Kovalentně–iontová	Částečný přenos elektronů + sdílení	SiC, ZnS, GaN	3–7

Poznámka

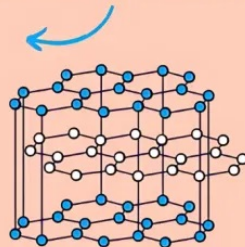
Síla vazby určuje tvrdost, teplotu tání i elektrické vlastnosti. Kovalentní vazby jsou směrové, kovové jsou nesměrové; iontové se vyznačují vysokou kohezní energií a elektrickou izolací. Slabé Van der Waalsovy a vodíkové vazby dominují v molekulových a organických krystalech.

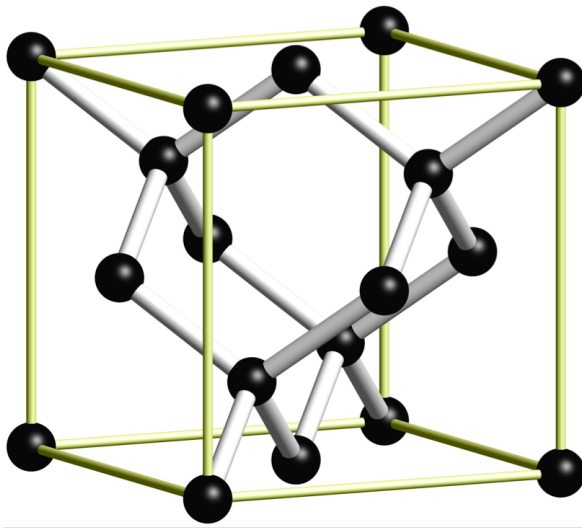
CARBON ATOMS

VAN DER WAAL FORCES

COVALENT BONDS

GRAPHITE STRUCTURE





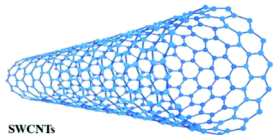
Uhlíkové nanostruktury – nanotrubičky a fullereny

- Uhlík vytváří různé alotropy díky schopnosti tvořit kovalentní vazby typu sp , sp^2 , sp^3 .
- Nanotrubičky (CNT – Carbon Nanotubes):
 - Jednostěnné (SWCNT) – duté válce tvořené jedinou vrstvou grafenu.
 - Vícetěnné (MWCNT) – soustava soustředných válců (několik až desítky vrstev).
 - Vlastnosti: mimořádná pevnost (až $100\times$ ocel), vysoká elektrická i tepelná vodivost, nízká hustota.
 - Elektronické vlastnosti závisí na chirálním vektoru (n, m) – mohou být kovové nebo polovodičové.
- Fullereny (C_{60} , C_{70} , ...):
 - Molekuly tvořené z uzavřených sp^2 sítí uhlíku (připomínající fotbalový míč).
 - C_{60} – 12 pětiúhelníků + 20 šestiúhelníků; průměr ≈ 0.7 nm.
 - Elektronové delokalizace $\rightarrow$ možnost tvořit supravodiče (např. K_3C_{60}) a polovodiče.

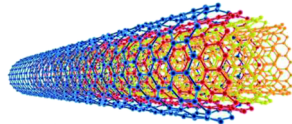
Struktura	Vazby / hybridizace	Typické rozměry	Využití
SWCNT	sp^2 , kovalentní	$d \sim 1\text{--}2$ nm, L až mm	senzory, tranzistory, kompozity
MWCNT	sp^2 , kovalentní (více vrstev)	$d \sim 5\text{--}50$ nm, L až cm	elektrody, výztuhy, vodiče
Fulleren C_{60}	sp^2 , uzavřená sfera	$d \approx 0.7$ nm	fotovoltaika, medicína, supravodiče

Poznámka

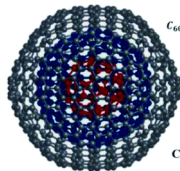
Všechny tyto struktury jsou založeny na sp^2 hybridizaci – podobně jako grafen. Rozdíl spočívá v topologii: grafen (2D), nanotrubičky (1D), fullereny (0D).



SWCNTs



MWCNT



$C_{60}@C_{240}@C_{500}$

CNOs



C_{180}



C_{240}



C_{320}



C_{540}

Krystalické struktury ledu – polymorfie H₂O

- Voda vytváří při různých tlacích a teplotách mnoho krystalických forem (označených Ice I – Ice XV).
- Rozdíly vyplývají z uspořádání molekul H₂O a orientace vodíkových můstků.
- Základní formou je hexagonální led I_h – běžný atmosférický led.

Označení	Soustava	ρ [g/cm ³]	Podmínky vzniku	Poznámka
Ice I _h	hexagonální	0.917	$T < 0^\circ\text{C}$, $p < 0.2$ GPa	běžný led (sníh, ledovce)
Ice I _c	kubická	0.933	$T < -80^\circ\text{C}$, nízký tlak	metastabilní, podobný I _h
Ice II	romboedrická	1.17	$p = 0.2\text{--}0.4$ GPa, $T < 200$ K	uspořádané H-vazby
Ice III	tetragonální	1.16	$p = 0.25\text{--}0.35$ GPa, $T \approx 250$ K	částečně neuspořádané H-vazby
Ice IV	tetragonální	1.27	$p \approx 0.3\text{--}0.5$ GPa	metastabilní, mezi Ice III a V
Ice V	monoklinická	1.23	$p = 0.35\text{--}0.5$ GPa, $T \approx 250$ K	stabilní v daném rozmezí
Ice VI	tetragonální	1.31	$p = 0.6\text{--}2.2$ GPa, $T \approx 270$ K	vzniká ve vodních sloupcích planet
Ice VII	kubická	1.50	$p > 2$ GPa, $T > 300$ K	vysokotlaká fáze
Ice VIII	tetragonální	1.50	$p > 2$ GPa, $T < 270$ K	uspořádaná forma Ice VII
Ice IX	tetragonální	1.16	$p \approx 0.2\text{--}0.3$ GPa, $T < 160$ K	stabilní nízkoteplotní fáze
Ice XI	ortorombická	0.93	$T < 72$ K	feroelektrikum, uspořádaný I _h
Ice XII	tetragonální	1.30	$p = 0.5\text{--}1.5$ GPa, $T < 260$ K	metastabilní fáze
Ice XV	monoklinická	1.34	$p \approx 1$ GPa, $T < 130$ K	protonově uspořádaná fáze Ice VI

Poznámka

Krystalická struktura ledu je řízena konfigurací vodíkových můstků. S rostoucím tlakem se struktura zhušťuje a mění se symetrie. Na některých měsících (např. u Evropy, Ganymedu) se vyskytují fáze Ice VI–VIII.

Protonové struktury ve vodě – ionty Eigen a Zundel

- Proton ve vodě netvoří volný H^+ , ale stabilní hydratační komplexy.
- Dvě základní konfigurace: Eigenův a Zundelův iont.
- Při přenosu protonu se tyto struktury střídají – Grotthussův mechanismus.

Eigenův ion (H_9O_4^+)

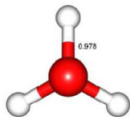
- Struktura: $\text{H}_3\text{O}^+ \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ (centrální hydroniový ion obklopený třemi H_2O).
- Lokalizovaný proton – preferenčně navázaný na H_3O^+ .
- Geometrie: téměř symetrické uspořádání, stabilní minimum energie.
- Spektrum: charakteristické IR pásy hydronia, menší polarizace než u Zundelova iontu.
- Střední doba života: $\tau_{\text{Eigen}} \approx 0.5\text{--}1 \text{ ps}$.

Zundelův ion (H_5O_2^+)

- Struktura: $\text{H}_2\text{O}-\text{H}^+-\text{OH}_2$ – proton sdílený dvěma molekulami vody.
- Geometrie: O–H–O symetrie; vzdálenost O–O $\approx 2.39 \text{ Å}$.
- Delokalizovaný přechodový stav při přeskoku protonu.
- Vysoká polarizace; široké IR pásy (nízkofrekvenční vibrace protonu).
- Střední doba života: $\tau_{\text{Zundel}} \approx 0.1\text{--}0.3 \text{ ps}$.

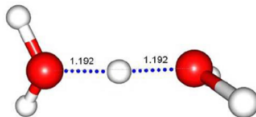
Shrnutí

Protonová vodivost vody vyplývá z rychlého střídání konfigurací Eigen $\leftrightarrow$ Zundel v síti H_2O (Grotthussův mechanismus). Jeden přeskok protonu trvá přibližně 1–2 ps. Eigen = stabilnější, lokalizovaný; Zundel = symetricky sdílený, přechodový stav.



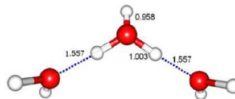
Eigen (H_3O^+)

n=1



Zundel (H_5O_2^+)

n=2



Eigen (H_7O_3^+)

n=3

- Translační symetrie:

$$\mathbf{r}' = \mathbf{r} + u_1 \mathbf{a}_1 + u_2 \mathbf{a}_2 + u_3 \mathbf{a}_3, \quad u_i \in \mathbb{Z}.$$

kde $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ jsou primitivní translační vektory.

- Objem buňky:

$$V_c = |\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)|.$$

- Báze: atomy na pozicích

$$\mathbf{r}_j = x_j \mathbf{a}_1 + y_j \mathbf{a}_2 + z_j \mathbf{a}_3, \quad 0 \leq x_j, y_j, z_j < 1.$$

kde x_j, y_j, z_j jsou bezrozměrné souřadnice v rámci buňky.

- 14 Bravaisových mřížek v 7 soustavách.

- **Definice:** Rotace o úhel $\alpha = \frac{360^\circ}{n}$ kolem osy, která zanechá krystalovou mřížku neměnnou.
- **Početnost osy (n):** Udává, kolikrát se krystalová mřížka překryje s původní pozicí během plné rotace (360°).
- **Možné osy rotace v krystalografii:**
 - $n = 1$: triviální rotace
 - $n = 2$: dvojčetná osa
 - $n = 3$: trojčetná osa
 - $n = 4$: čtyřčetná osa
 - $n = 6$: šestičetná osa
- Osy s $n = 5$ nebo $n > 6$ nejsou v periodické krystalové mřížce možné.

Zrcadlová a inverzní symetrie

- Zrcadlová symetrie (rovina souměrnosti, σ):

- Operace zrcadlení struktury přes rovinu, která nechá krystalovou mřížku neměnnou.
- Matematicky se popisuje jako transformace souřadnic (např. v rovině xy):

$$r' = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} r$$

- Inverzní symetrie (střed souměrnosti, i):

- Operace inverze přes střed, která převádí každý bod r na bod $-r$.
- Matematicky:

$$r' = -r$$

nebo v maticovém zápisu:

$$r' = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} r$$

- Obě symetrie jsou nevlastní, protože mění orientaci.

Šroubová osa a skluzová rovina

- Tyto symetrie kombinují vlastní operaci (rotace nebo zrcadlení) s translací.
- Šroubová osa (n_k):
 - Kombinace rotace o úhel $\frac{360^\circ}{n}$ a translace o k/n podél osy rotace.
 - Označuje se symbolem n_k , kde n je početnost osy a k je posun v násobcích translační vzdálenosti.
- Skluzová rovina (a, b, c, n):
 - Kombinace zrcadlení v rovině a translace rovnoběžně s touto rovinou.
 - Typy:
 - Osová (axiální) (a, b, c): translace o polovinu délky buňky.
 - Diagonální (n): translace o polovinu diagonály stěny buňky.
- Existence šroubových os a skluzových rovin je základem 230 prostorových grup symetrie.

Reálný vs. ideální krystal

- Ideální krystal: periodická mřížka bez defektů.
- Reálné krystaly vždy obsahují **poruchy**.
- Sekvence rovin u těsného uspořádání:

fcc: ABCABC..., hcp: ABABAB...

- Polytypie (např. SiC, ZnS): stovky variant.

- Rovnovážná koncentrace vakancí:

$$\frac{N_v}{N} = \exp\left(-\frac{E_f}{k_B T}\right),$$

kde N_v počet vakancí, N počet mřížkových míst, E_f energie vzniku vakance [J], k_B Boltzmannova konstanta [$1.38 \times 10^{-23} \text{ J K}^{-1}$], T teplota [K].

- Difúze – Fickův zákon:

$$J = -D \nabla c, \quad D = D_0 \exp\left(-\frac{Q}{k_B T}\right),$$

kde J difuzní tok [$\text{m}^{-2}\text{s}^{-1}$], D difuzní koeficient [m^2/s], c koncentrace, Q aktivační energie [J].

- F-centra: elektron zachycený ve vakanci aniontu.

Poruchy – čárové (dislokace)

- Burgersův vektor $\mathbf{b}$ – velikost a směr posunutí mřížky.
- Hustota dislokací:

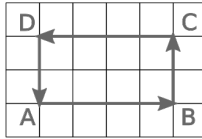
$$\rho_d = \frac{L_{\text{disl}}}{V},$$

kde L_{disl} celková délka dislokací v objemu V .

- Napětové pole hranové dislokace:

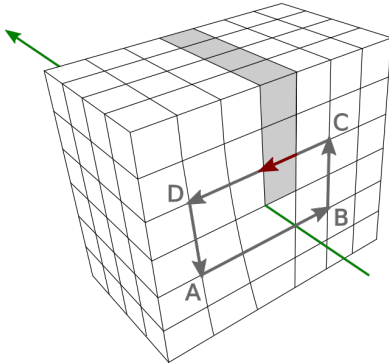
$$\sigma_{xy} = \frac{Gb}{2\pi(1-\nu)} \frac{\sin \theta \cos \theta}{r},$$

kde G modul ve smyku [Pa], $b = |\mathbf{b}|$, ν Poissonovo číslo, r, θ polární souřadnice vzhledem k ose dislokace.



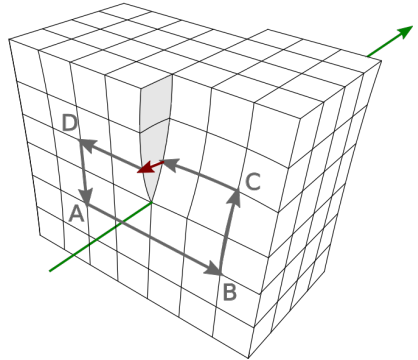
Burgers Vector $\vec{b}$

Dislocation Line Vector $\vec{L}$



$\vec{b}$

$\vec{L}$



- Sekvenční chyby: změna sekvence vrstev ($\dots ABCACB \dots$).
- Dvojčata: symetrie podle roviny, energeticky výhodná při deformaci.
- Hranice zrn: energie $\gamma(\theta)$ roste s úhlem θ mezi krystalitami.
- Objemové poruchy: precipitáty, póry, amorfni oblasti $\rightarrow$ vliv na houževnatost.

- Teoretická smyková pevnost:

$$\tau_{\text{teor}} \approx \frac{G}{2\pi},$$

kde G je modul ve smyku.

- Reálné krystaly: $\tau_{\text{skutečná}} \ll \tau_{\text{teor}}$ (vliv dislokací).
- Schmidovo pravidlo:

$$\tau = \sigma \cos \phi \cos \lambda,$$

kde σ normálové napětí [Pa], ϕ úhel mezi osou zatížení a normálou roviny, λ úhel mezi osou zatížení a směrem skluzu.

- Pravidlo směsí:

$$E = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} E_{\alpha},$$

kde E výsledný Youngův modul, ξ_{α} objemový zlomek složky, E_{α} modul složky.

- Základní Hookův zákon (jednoosé zatížení):

$$\sigma = E \varepsilon,$$

kde σ je normálové napětí [Pa], E Youngův modul [Pa], ε poměrná deformace [-].

- Smykové zatížení:

$$\tau = G \gamma,$$

kde τ je smykové napětí [Pa], G modul ve smyku [Pa], γ smyková deformace [-].

- Vztah mezi elastickými konstantami (pro izotropní materiály):

$$E = 2G(1 + \nu),$$

kde ν je Poissonovo číslo [-].

- Objemová deformace:

$$p = -K \Delta V / V,$$

kde p hydrostatický tlak [Pa], K objemový (bulk) modul [Pa], $\Delta V / V$ relativní změna objemu.

Tenzorový Hookův zákon

- Obecný lineární vztah mezi napětím a deformací:

$$\sigma_{ij} = \sum_{kl} C_{ijkl} \varepsilon_{kl},$$

kde σ_{ij} je tenzor napětí, ε_{kl} tenzor poměrné deformace, C_{ijkl} elastická tuhost (4. řádu).

- Díky symetriím ($\sigma_{ij} = \sigma_{ji}$, $\varepsilon_{kl} = \varepsilon_{lk}$) a vlastnostem $C_{ijkl} \rightarrow \max.$ 21 nezávislých elastických konstant.
- Zkrácený Voigtův zápis:

$$\sigma_{\alpha} = \sum_{\beta=1}^6 C_{\alpha\beta} \varepsilon_{\beta}, \quad \alpha, \beta = 1, \dots, 6.$$

- Příklady:
 - Izotropní materiál: pouze 2 nezávislé konstanty (E , ν nebo G , K).
 - Kubický krystal: 3 nezávislé konstanty (C_{11} , C_{12} , C_{44}).
- Experimentálně se konstanty určují např. ultrazvukovým měřením rychlosti podélných a příčných vln.

- Ideální krystal = matematický model periodické mřížky.
- Ve struktuře krystalu pozorujeme symetrii – centrální pojem
- Reálné krystaly obsahují poruchy: bodové, čárové, plošné, objemové.
- Poruchy určují mechanické vlastnosti (pevnost, plasticitu) i fyzikální (vodivost, optiku).
- Zpevnění materiálů: legování, precipitace, jemnozrnná struktura.

- Definice: vektory reciproké mřížky $\mathbf{G}$ splňují podmínku

$$e^{i\mathbf{G}\cdot\mathbf{R}} = 1 \quad \forall \mathbf{R} \in \text{reálná mřížka}.$$

- Konstrukce z primitivních vektorů $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$:

$$\mathbf{b}_1 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_2 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \quad \mathbf{b}_3 = 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}.$$

- Libovolný vektor reciproké mřížky:

$$\mathbf{G} = h\mathbf{b}_1 + k\mathbf{b}_2 + l\mathbf{b}_3, \quad h, k, l \in \mathbb{Z}.$$

- Reciproká mřížka umožňuje formulovat difrakční podmínku.

Význam reciproké mřížky

- **Fourierova reprezentace:** periodická krystalová struktura se dá vyjádřit jako součet harmonických funkcí s vektory reciproké mřížky.
- **Difrakce:** Braggova podmínka lze psát

$$\Delta \mathbf{k} = \mathbf{k}' - \mathbf{k} = \mathbf{G},$$

kde $\mathbf{G}$ je vektor reciproké mřížky. Difrakční maxima nastávají pouze pro $\mathbf{G}$.

- **Brillouinovy zóny:** Wigner–Seitzova buňka reciproké mřížky = 1. Brillouinova zóna, přirozený prostor pro vlnové vektory $\mathbf{k}$.
- **Elektronové a fononové stavy:** kvazi-hybnost $\mathbf{k}$ je definována modulo $\mathbf{G}$, pásová teorie pracuje v reciprokém prostoru.
- **Experimentální význam:** difrakční metody (XRD, neutronová, elektronová difrakce) přímo zobrazují strukturu reciproké mřížky.

Stručné shrnutí

Reciproká mřížka je matematický i fyzikální nástroj, který převádí periodičnost krystalu v reálném prostoru na jazyk vlnových vektorů – nezbytný pro popis difrakce, fononů a elektronů.

Laueho experiment a význam

- 1912: Max von Laue ukázal, že krystaly mohou difraktovat rentgenové záření.
- Podmínka interference:

$$\Delta k = k' - k = G,$$

kde k a k' jsou vektory původní a difraktované vlny, G vektor reciproké mřížky.

- Experimentálně: vznik difrakčního obrazce (symetrické body na fotografické desce).
- Přínos: důkaz periodické struktury krystalů, měření symetrie a orientace.

Braggův zákon rentgenové difrakce

- Interference na rovinách se vzdáleností d_{hkl} :

$$2d_{hkl} \sin \theta = n\lambda,$$

kde λ je vlnová délka záření, θ Braggův úhel, n řád difrakce.

- Geometrická interpretace: konstruktivní interference odrazů z rovnoběžných rovin.
- Použití:
 - určení mřížkových konstant,
 - identifikace neznámých látek,
 - měření deformací (změny d_{hkl}).

Wigner–Seitzova buňka

- Definice: oblast prostoru nejbližší danému mřížkovému bodu.
- Konstrukce:
 - 1 Spojit daný bod se všemi sousedy.
 - 2 V půlících rovinách mezi body vést kolmice.
 - 3 Uzavřený polyedr = Wigner–Seitzova buňka.
- V reciprokém prostoru = 1. Brillouinova zóna.
- Význam: základní oblast pro popis vlnových vektorů k v krystalu.

Brillouinovy zóny

- Definice: 1. Brillouinova zóna je Wigner–Seitzova buňka v reciproké mřížce.
- Konstrukce:
 - 1 V reciproké mřížce zvolíme bod Γ (počátek).
 - 2 Spojíme Γ se všemi ostatními body mřížky.
 - 3 V půlicích rovinách vztyčíme kolmice $\rightarrow$ výsledný polyedr = 1. Brillouinova zóna.
- Vyšší zóny: oblasti reciprokého prostoru, oddělené rovnicemi Braggovy difrakce.
- Význam:
 - určuje povolené vlnové vektory k pro elektronové a fononové stavy,
 - hranice zóny odpovídají Braggově podmínce rozptylu,
 - klíčový pojem pásové teorie.
- Příklady:
 - 1D mřížka: 1. zóna $-\pi/a < k < \pi/a$,
 - 2D čtvercová mřížka: čtverec o straně $\pm\pi/a$,
 - 3D kubická mřížka: krychle či dodekaedrický tvar podle typu (sc, bcc, fcc).

Brillouinovy zóny – kubické mřížky

● Jednoduchá kubická (sc):

- 1. Brillouinova zóna = krychle,
- hrany v recipročním prostoru: $\pm \pi/a$,
- důležité body: Γ (0,0,0), X (π/a ,0,0), M (π/a , π/a ,0), R (π/a , π/a , π/a).

● Prostorově centrovaná kubická (bcc):

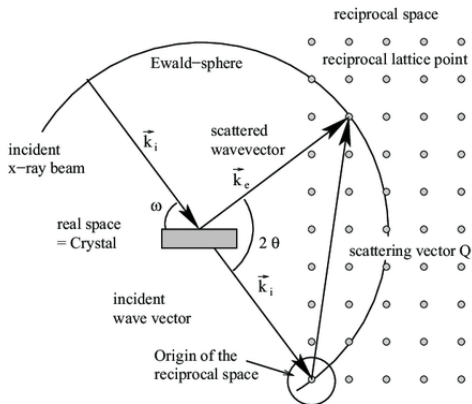
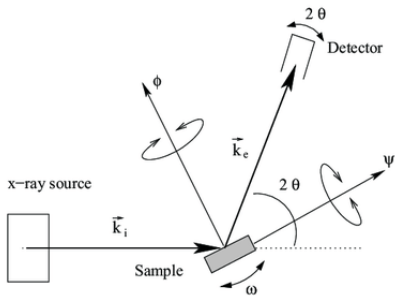
- reciproká mřížka = fcc,
- 1. Brillouinova zóna = dodekaedr o 14 stěnách,
- důležité body: Γ , H ($2\pi/a$,0,0), N (π/a , π/a ,0), P (π/a , π/a , π/a).

● Plošně centrovaná kubická (fcc):

- reciproká mřížka = bcc,
- 1. Brillouinova zóna = dvanáctistěn se šesti čtvercovými a osmi šestiúhelníkovými stěnami,
- důležité body: Γ , X ($2\pi/a$,0,0), L (π/a , π/a , π/a), W , K .

- Význam: poloha a symetrie hraničních bodů určují vlastnosti elektronových pásem a fononových disperzí.

- Geometrická vizualizace difrakční podmínky.
- Postup:
 - 1 Vynést vektor $\mathbf{k}$ (směr a velikost dopadající vlny).
 - 2 Sestrojit sféru o poloměru $|\mathbf{k}| = 2\pi/\lambda$.
 - 3 Difrakce nastane, když konec $\mathbf{k}'$ leží na průsečíku sféry a vektoru reciproké mřížky.
- Význam: praktický nástroj pro interpretaci difrakčních experimentů.



- Rentgenová difrakce (XRD) – prášková difrakce, monokrystaly.
- Neutronová difrakce – citlivá na polohu lehkých atomů, magnetické uspořádání.
- Elektronová difrakce – vysoké rozlišení, tenké vrstvy.
- EXAFS, XANES – lokální struktura a chemické okolí.
- STM/AFM – přímé zobrazení atomárních struktur.
- Kombinace metod → komplexní pohled na krystalovou strukturu a defekty.

Shrnutí – experimentální studium krystalů

- Reciproká mřížka: matematický aparát pro difrakci.
- Laueho experiment: první důkaz krystalické struktury.
- Braggův zákon: základní podmínka interference.
- Wigner–Seitzova buňka = Brillouinova zóna v recipročném prostoru.
- Moderní metody: XRD, neutrony, elektrony, EXAFS, STM.

Typy vazeb v pevných látkách

- **Primární vazby** – silné: iontová, kovalentní, kovová.
- **Sekundární vazby** – slabší: van der Waalsovy, vodíkové můstky.
- **Energetický řád vazeb:** $\sim 0.01\text{--}10\text{ eV}$ na atom.
- **Rozhodují o stabilitě, pevnosti, teplotě tání, elektrických a optických vlastnostech.**

- Přenos elektronů → vznik kladných a záporných iontů.
- Elektrostatická energie (Coulombův příspěvek):

$$U_{\text{coul}} = - \frac{Me^2}{4\pi\epsilon_0 r_0},$$

kde M je Madelungova konstanta (závisí na geometrii mřížky, např. NaCl $M \approx 1.7476$), e elementární náboj, r_0 vzdálenost nejbližších iontů.

- Rovnováha: odpuzivé síly (Pauliho princip, překryv orbitalů) $\Rightarrow$ stabilní mřížková konstanta.
- Příklad: NaCl, MgO.

- Sdílení elektronů mezi atomy → **směrová vazba**.
- Popsáno kvantově-mechanicky – překryv vlnových funkcí.
- Energie vazby řádově $\sim 1\text{--}5$ eV na pár.
- Příklad: diamantová struktura (C, Si, Ge).
- Hybridizace orbitalů – sp^3 u diamantu, sp^2 u grafitu.

- Valenční elektrony jsou delokalizovány – tvoří „elektronový plyn“.
- Model volných elektronů (Drude, Sommerfeld):

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3},$$

kde E_F je Fermiho energie, n hustota elektronů, m hmotnost elektronu.

- Kovová vazba → vysoká elektrická a tepelná vodivost.
- Příklady: Cu, Al, Na.

Van der Waalsova vazba

- Slabá interakce mezi nepolárními molekulami.
- Přitažná složka: Londonovy disperzní síly $\sim -C_6/r^6$.
- Odpuzivá složka: Pauliho princip, exponenciální růst $\sim \exp(-r/\rho)$.
- Celkový potenciál (Lennard-Jones):

$$U(r) = 4\varepsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right],$$

kde ε hloubka potenciálové jámy, σ vzdálenost při nulové interakci.

- Příklady: krystaly vzácných plynů (Ar, Kr).

Vodíkový můstek

- Speciální typ vazby – vodík mezi elektronegativními atomy (O, N, F).
- Typická energie $\sim 0.1\text{--}0.3$ eV.
- Přispívá ke stabilitě molekul a krystalů (led, DNA, bílkoviny).
- Geometrie: $\text{X-H}\cdots\text{Y}$, kde X a Y jsou silně elektronegativní atomy.

Porovnání vazeb a příklady

- Iontová vazba – $\sim 5\text{--}10$ eV, NaCl, MgO.
- Kovalentní vazba – $\sim 1\text{--}5$ eV, diamant, Si, GaAs.
- Kovová vazba – $\sim 1\text{--}3$ eV, Cu, Al, Na.
- Vodíkový můstek – $\sim 0.1\text{--}0.3$ eV, led, organické látky.
- Van der Waalsovy síly – $\sim 0.01\text{--}0.1$ eV, vzácné plyny, molekulární krystaly.

Typy vazeb v pevných látkách – příklady materiálů

Materiál	Chem. vzorec	Typ vazby
Železo, Měď, Al, Ag, Au	Fe, Cu, Al, Ag, Au	kovová
Diamant	C (sp^3)	kovalentní (silně směrová)
Grafit	C (sp^2)	kovalentní vrstvy + van der Waals mezi vrstvami
Křemík	Si	kovalentní (diamantová struktura)
Germanium	Ge	kovalentní
Galium arsenid	GaAs	převážně kovalentní, částečně iontová
Oxid křemičitý (křemen)	SiO ₂	kovalentní (síťová struktura)
Chlorid sodný	NaCl	iontová ($Na^+ - Cl^-$)
Oxid hořečnatý	MgO	iontová
Oxid hlinitý (korund)	Al ₂ O ₃	iontová + kovalentní podíl
Led	H ₂ O (s)	vodíkové můstky
Molekulární krystaly	I ₂ , CO ₂ , Ar	van der Waalsovy síly
Polyethylen	(-CH ₂ -) _n	kovalentní řetězec + van der Waals mezi řetězci
Ferity (např. magnetit)	Fe ₃ O ₄	iontová + kovalentní podíl

Poznámka

Typ převažující vazby určuje klíčové vlastnosti: tvrdost a modul pružnosti (kovalentní sítě), vodivost (kovová vazba), nízká teplota tání (van der Waals), iontová vodivost (iontové vazby), stabilizace biomolekul (vodíkové můstky).

Typy vazeb v organických materiálech a biomolekulách

- Organické látky kombinují různé typy vazeb: silné kovalentní v rámci molekul a slabší vodíkové můstky či van der Waalsovy interakce mezi molekulami.

Materiál / systém	Chem. složení	Typ vazby
Polyethylen (PE)	$(-\text{CH}_2-)_n$	kovalentní v řetězci + van der Waals mezi řetězci
Polypropylen (PP)	$(-\text{CH}(\text{CH}_3)-)_n$	kovalentní v řetězci + van der Waals
Polystyren (PS)	$(-\text{CH}(\text{C}_6\text{H}_5)-)_n$	kovalentní v řetězci + $\pi-\pi$ interakce
Teflon (PTFE)	$(-\text{CF}_2-)_n$	kovalentní v řetězci + van der Waals
DNA	nukleotidy	kovalentní kostra (fosfodiester), vodíkové m. mezi bázemi, $\pi-\pi$
Bílkoviny	aminokyseliny	kovalentní peptidové vazby, vodíkové m., iontové, van der Waals
Celulóza	$(-\text{C}_6\text{H}_{10}\text{O}_5-)_n$	kovalentní polysacharidové řetězce + vodíkové m.
Přírodní kaučuk	$(-\text{C}_5\text{H}_8-)_n$	kovalentní řetězec + van der Waals, zesíťování sírou

Poznámka

V organických materiálech určují slabší vazby (vodíkové můstky, van der Waals, $\pi-\pi$ interakce) fyzikální vlastnosti: pružnost polymerů, stabilitu DNA, sekundární a terciární strukturu bílkovin.

Model dvou harmonických oscilátorů

- Uvažujeme dva atomy (těžká jádra fixována ve vzdálenosti R).
- Elektrony kmitají jako harmonické oscilátory s hmotností m , frekvencí ω_0 , výchylkami x_1, x_2 .
- Hamiltonián:

$$H = H_0 + H_1,$$

kde

$$H_0 = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_1^2 + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x_2^2,$$
$$H_1 = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{1}{R} + \frac{1}{R + x_1 - x_2} - \frac{1}{R + x_1} - \frac{1}{R - x_2} \right).$$

- H_1 představuje coulombovskou poruchu $\rightarrow$ vzájemná interakce oscilátorů.

- Použijeme poruchovou teorii 2. řádu:

$$\Delta E^{(2)} = \sum_{n \neq 0} \frac{|\langle 0 | H_1 | n \rangle|^2}{E_0 - E_n}.$$

- $|0\rangle$ – základní stav obou oscilátorů, $|n\rangle$ – excitované stavy.
- Vzniká efektivní přitažlivý potenciál $\propto -1/R^6$.
- Přesněji:

$$V(R) = -\frac{e^4}{32\pi^2 \epsilon_0^2 m^2 \omega_0^3 R^6}.$$

- Van der Waalsova interakce má tvar:

$$V(R) \propto -\frac{1}{R^6}.$$

- Zdrojem je kvantově-mechanické kmitání polohy elektronů (nulové kmity).
- Vztah ukazuje:
 - krátký dosah (rychle klesá s R),
 - kvantový původ – využití energie základního stavu.
- Typická energie $\sim 0.01\text{--}0.1$ eV na pár atomů.

Význam van der Waalsových sil

- Vyskytují se v krystalech inertních plynů (Ar, Kr, Xe).
- Odpovídají za vlastnosti: nízký bod tání, měkké krystaly, vysoký koeficient teplotní roztažnosti.
- Biologické a technické aplikace:
 - stabilizace biomolekul,
 - přilnavost pavouků a gekonů na hladkých površích,
 - molekulární krystaly, polymery.

Fonony a tepelné vlastnosti

- Kmity atomů v krystalové mřížce → kolektivní excitace = **fonony**.
- Analogicky k fotonům: kvazičástice s energií

$$E = \hbar\omega(\mathbf{q}),$$

kde $\omega(\mathbf{q})$ je disperzní relace, $\mathbf{q}$ vlnový vektor, $\hbar$ redukovaná Planckova konstanta.

- Typy fononů:
 - akustické (nízkofrekvenční, dlouhovlnné),
 - optické (vysokofrekvenční, relativní kmity iontů).
- Fonony dominují tepelným vlastnostem izolantů a polovodičů.

Dulong-Petitův zákon

- Klasické přiblížení: každý stupeň volnosti přispívá $k_B T/2$ kineticky a $k_B T/2$ potenciálně.
- Na atom: 3 stupně volnosti $\Rightarrow 3k_B T$.
- Na N atomů:

$$U = 3Nk_B T, \quad C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 3Nk_B.$$

- Platí dobře pro $T \gtrsim 500$ K.
- Experiment: pro nízké teploty $C_V \rightarrow 0$ (nesoulad s klasickou představou).

Einsteinův model – zavedení

- Einstein (1907): každý atom kmitá nezávisle jako oscilátor s jedinou frekvencí ω_E .
- Vnitřní energie:

$$U = 3N \left(\frac{\hbar\omega_E}{2} + \frac{\hbar\omega_E}{e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1} \right).$$

- Tepelná kapacita:

$$C_V = 3Nk_B \left(\frac{\hbar\omega_E}{k_B T} \right)^2 \frac{e^{\hbar\omega_E/k_B T}}{(e^{\hbar\omega_E/k_B T} - 1)^2}.$$

- Vysoké T : $C_V \rightarrow 3Nk_B$ (souhlas s Dulong–Petitem).
- Nízké T : $C_V \propto e^{-\hbar\omega_E/k_B T}$ (exponenciální pokles).
- Nedostatky:
 - všechny oscilátory (atomy) mají stejnou frekvenci,
 - nereálný průběh pro $T \rightarrow 0$,
 - neodpovídá experimentálním datům.
- Přesto: dobrý popis optických fononů.

Hustota fononových stavů

- Pro výpočet C_V je třeba znát hustotu módů $D(\omega)$.

- Definice:

$$D(\omega)d\omega = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{slupka}} d^3q.$$

- Obecně:

$$D(\omega) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int_{\text{plocha}} \frac{dS_\omega}{v_g},$$

kde $v_g = |\nabla_{\mathbf{q}} \omega|$ je grupová rychlost.

- Speciální body s $v_g = 0 \rightarrow$ van Hoveovy singularity.

Debyeův model – zavedení

- Předpoklad: akustické fonony s lineární disperzí

$$\omega = v_s q,$$

kde v_s je rychlost zvuku, q vlnový vektor.

- Povolené stavy v q -prostoru vyplní kouli do q_D .
- Podmínka normalizace:

$$\frac{V}{(2\pi)^3} \cdot \frac{4\pi}{3} q_D^3 = 3N,$$

$$\Rightarrow q_D = \left(\frac{6\pi^2 N}{V} \right)^{1/3}.$$

- Definice Debyeovy frekvence:

$$\omega_D = v_s q_D, \quad \theta_D = \frac{\hbar \omega_D}{k_B}.$$

Debyeův model – hustota stavů

- Hustota módů:

$$D(\omega) = \frac{9N}{\omega_D^3} \omega^2, \quad 0 \leq \omega \leq \omega_D.$$

- Celkový počet módů = $3N$ (3 stupně volnosti na atom).
- Umožňuje realistický výpočet energie a kapacity.

Debyeův model – vnitřní energie

- Vnitřní energie:

$$U = \int_0^{\omega_D} \hbar \omega n(\omega) D(\omega) d\omega,$$

kde $n(\omega) = \frac{1}{e^{\hbar \omega / k_B T} - 1}$ Bose-Einsteinova funkce.

- Po dosazení:

$$U = 9 N k_B T \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D / T} \frac{x^3}{e^x - 1} dx,$$

kde $x = \hbar \omega / k_B T$.

Debyeův model – tepelná kapacita

- Tepelná kapacita:

$$C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T} \right)_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx.$$

- Limity:

- Vysoké $T \gg \theta_D$: $C_V \rightarrow 3Nk_B$.
- Nízké $T \ll \theta_D$: $C_V \propto T^3$ (souhlas s experimentem).

Srovnání Einsteinova a Debyeova modelu

- Einstein:

- Exponenciální pokles C_V pro nízké T (nesouhlas s experimentem).
- Správný limit pro vysoké T .

- Debye:

- Správný T^3 zákon pro nízké teploty.
- Správný limit $3Nk_B$ pro vysoké T .
- Lépe popisuje reálné látky.

Debyeova teplota

- Debyeova teplota $\theta_D = \hbar\omega_D/k_B$ charakterizuje frekvenční spektrum fononů.
- Vysoká $\theta_D \rightarrow$ tuhé vazby, vysoká rychlost zvuku (např. diamant $\theta_D \approx 2000$ K).
- Nízká $\theta_D \rightarrow$ měkké krystaly, nízké teploty tání (např. Pb $\theta_D \approx 105$ K).

Shrnutí – tepelné vlastnosti

- Fonony: kvazičástice kmitů mřížky, určují tepelné vlastnosti.
- Dulong–Petit: $C_V = 3Nk_B$ pro vysoké T .
- Einsteinův model: dobrý začátek, nevystihuje nízké teploty.
- Debyeův model: korektní T^3 závislost pro $T \rightarrow 0$, obecně platný.
- Klíčový pojem: Debyeova teplota θ_D .

Kvazi-harmonický obraz a Grüneisenův parametr

- V kvazi-harmonickém modelu závisí fononové frekvence na objemu V :

$$\gamma_i \equiv - \frac{\partial \ln \omega_i}{\partial \ln V}, \quad \gamma \equiv \frac{\sum_i \gamma_i C_{V,i}}{\sum_i C_{V,i}},$$

kde ω_i je frekvence i -tého módu, $C_{V,i}$ jeho příspěvek k tepelné kapacitě a γ je střední Grüneisenův parametr vážený $C_{V,i}$.

- Cílem je najít objemový koeficient teplotní roztažnosti

$$\alpha_V \equiv \frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial T} \right)_P,$$

resp. pro izotropní krystaly lineární $\alpha_l = \alpha_V/3$.

Fononový tlak a Mie–Grüneisenův vztah

- Volná energie fononů (na soubor módů):

$$F_{ph}(T, V) = \sum_i \left[\frac{\hbar\omega_i}{2} + k_B T \ln(1 - e^{-\hbar\omega_i/k_B T}) \right].$$

- Fononový tlak je

$$P_{ph} = - \left(\frac{\partial F_{ph}}{\partial V} \right)_T = \frac{\gamma U_{ph}}{V},$$

kde $U_{ph} = \sum_i \hbar\omega_i n_i$ je fononová vnitřní energie a $n_i = (e^{\hbar\omega_i/k_B T} - 1)^{-1}$.

- Celkový tlak: $P(V, T) = P_0(V) + P_{ph}(V, T)$, kde P_0 je „statický“ (0 K) příspěvek mřížky.

Odvození vztahu pro teplotní roztažnost

- Definice izotermického objemového modulu (bulk modulu):

$$B_T \equiv -V \left(\frac{\partial P}{\partial V} \right)_T.$$

- Z Maxwellovy relace (při konstantním P):

$$\alpha_V = \frac{1}{B_T} \left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V.$$

- Protože $(\partial P / \partial T)_V$ pochází z fononů,

$$\left(\frac{\partial P}{\partial T} \right)_V = \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{\gamma U_{ph}}{V} \right)_V = \frac{\gamma}{V} \left(\frac{\partial U_{ph}}{\partial T} \right)_V = \frac{\gamma}{V} C_V,$$

dostáváme Mie–Grüneisenův vztah:

$$\boxed{\alpha_V = \frac{\gamma C_V}{B_T V}}, \quad \alpha_I = \frac{1}{3} \alpha_V \text{ (izotropní krystaly)}.$$

- Zde C_V je mřížková tepelná kapacita (z Debyeova modelu), B_T izotermický bulk modul.

Debyeův model $\Rightarrow$ teplotní závislosti α

- V Debyeově modelu:

$$C_V = 9Nk_B \left(\frac{T}{\theta_D} \right)^3 \int_0^{\theta_D/T} \frac{x^4 e^x}{(e^x - 1)^2} dx.$$

- Nízké teploty ($T \ll \theta_D$): $C_V \propto T^3 \Rightarrow \alpha_V \propto T^3$, pokud γ a B_T jsou zhruba konstantní.
- Vysoké teploty ($T \gg \theta_D$): $C_V \rightarrow 3Nk_B \Rightarrow \alpha_V \rightarrow \frac{\gamma 3Nk_B}{B_T V}$ (téměř konstanta).
- Realisticky může B_T i γ mírně záviset na T a $V \rightarrow$ jemné odchylky.

- Často se používá i lineární koeficient: $\alpha_I \approx \frac{\gamma C_V}{3B_T V}$.
- Pro izotropní nebo kubický krystal je objemový koeficient $\alpha_V = 3\alpha_I$ a platí

$$\alpha_I = \frac{1}{a} \left(\frac{\partial a}{\partial T} \right)_P \approx \frac{\gamma C_V}{3B_T V}.$$

- Pokud známe $C_V(T)$ z Debyeova modelu, γ (z tlakově-závislých frekvencí) a B_T (z elastických měření), lze kvantitativně předpovídat $\alpha(T)$.
- Limitace: kvazi-harmonické přiblížení zanedbává anharmonické procesy vyšších řádů (důležité při velmi vysokých T nebo blízko fázových přechodů).

Elektrické vlastnosti pevných látek – úvod

- Látky dělíme podle elektrické vodivosti σ :
 - Kovy – vysoká vodivost ($\sigma \sim 10^7$ S/m).
 - Polovodiče – střední vodivost, silně závislá na T a příměsích.
 - Izolátory – nízká vodivost ($\sigma < 10^{-8}$ S/m).
- Náš cíl: přechod od klasické teorie k pásovému popisu.
- Dvě základní otázky:
 - 1 Jak nositelé náboje (elektrony) reagují na elektrické pole?
 - 2 Jak souvisí vodivost s vnitřní strukturou krystalu?

Elektrická vodivost běžných materiálů

Materiál	Typ	Vodivost σ [S/m]	Poznámka
Stříbro (Ag)	kov	6.3×10^7	nejvyšší vodivost kovů
Měď (Cu)	kov	5.9×10^7	elektrotechnika
Zlato (Au)	kov	4.1×10^7	odolnost proti korozi
Hliník (Al)	kov	3.5×10^7	vodiče, konstrukce
Železo (Fe)	kov	1.0×10^7	závislost na čistotě
Olovo (Pb)	kov	4.8×10^6	měkký kov
Grafit (C)	vodivý allotrop	$1 \times 10^5 - 1 \times 10^6$	anisotropní vodivost
Křemík (Si)	polovodič	1.5×10^{-3} (čistý)	silná teplotní závislost
Germanium (Ge)	polovodič	2.0×10^{-2} (čistý)	vyšší σ než Si
GaAs	polovodič	$\sim 10^{-6} - 10^{-2}$	aplikace v optoelektronice
Sklo	izolant	$10^{-10} - 10^{-14}$	velmi nízká vodivost
Mika	izolant	$10^{-11} - 10^{-15}$	dielektrikum
Kaučuk	izolant	$10^{-13} - 10^{-16}$	polymer
Destilovaná voda	izolant	$\sim 5.5 \times 10^{-6}$	silně závisí na čistotě

Poznámka

Vodivost kovů klesá s rostoucí teplotou (rozptyl na fononech), zatímco u polovodičů naopak roste (více nositelů náboje). Izolanty mají σ prakticky nulovou, slouží jako dielektrika.

Drudeho model kovů (1900)

- Elektrony = klasický plyn volných částic.
- Vliv elektrického pole E :

$$m \frac{dv}{dt} = -eE - \frac{mv}{\tau},$$

kde m hmotnost elektronu, $-e$ náboj, τ střední doba mezi srážkami.

- Řešení → Ohmův zákon:

$$J = \sigma E, \quad \sigma = \frac{ne^2\tau}{m},$$

kde n hustota elektronů, J proudová hustota.

- Úspěchy: vysvětluje Ohmův zákon, Hallův jev.
- Nedostatky: špatně popisuje tepelnou kapacitu, teplotní závislost σ .

Sommerfeldův model (1928)

- Oprava Drudeho modelu pomocí kvantové mechaniky.
- Elektrony = Fermiho plyn (Pauliho princip, Fermi–Diracovo rozdělení).
- Hustota stavů v 3D:

$$g(E) = \frac{V}{2\pi^2} \left(\frac{2m}{\hbar^2} \right)^{3/2} \sqrt{E}.$$

- Fermiho energie:

$$E_F = \frac{\hbar^2}{2m} (3\pi^2 n)^{2/3}.$$

- Typicky $E_F \sim 5\text{--}10$ eV.
- Výhoda: správně vysvětluje malý elektronový příspěvek k tepelné kapacitě a základní transportní vlastnosti; konkrétní teplotní závislost vodivosti vyžaduje model rozptylu elektronů.

- Maxwelllovo–Boltzmannovo rozdělení je klasickou limitou kvantových statistik pro řídký plyn nebo malé obsazení jednotlivých stavů; kvantové efekty nerozlišitelnosti jsou pak zanedbatelné.
- Rozdělení obsazenosti stavu energie E :

$$f(E) \approx e^{-(E-\mu)/k_B T},$$

kde k_B je Boltzmannova konstanta, T teplota, μ chemický potenciál.

- Platí, když $f(E) \ll 1$ (nízká koncentrace, vysoká T).
- Typické použití:
 - řídké plyny,
 - přibližný popis nosičů náboje v polovodičích při vyšších T .
- Statistika je limitou Fermi–Diracova i Bose–Einsteinova rozdělení pro nízké obsazení stavů.

- Platí pro **bosony** (částice se spinem $0, 1, 2, \dots$), které se mohou hromadit ve stejném stavu.
- Rozdělení:

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} - 1}.$$

- Pro $\mu < E_0$ (základní stav). Pokud $\mu \rightarrow E_0$, vzniká **Bose–Einsteinova kondenzace**.
- Aplikace ve fyzice pevných látek:
 - fonony (kvazičástice kmitů mřížky),
 - magnony (spinové vlny),
 - fotony v černém tělese.
- Při nízkých teplotách – Boseova statistika je klíčová pro jevy jako Bose–Einsteinova kondenzace a superfluidita; v supravodičích se uplatňují páry fermionů (Cooperovy páry), nikoli ideální Boseův plyn.

- Pravděpodobnost obsazení stavu energie E při teplotě T :

$$f(E) = \frac{1}{e^{(E-\mu)/k_B T} + 1},$$

kde μ je chemický potenciál (pro $T = 0$ se $\mu = E_F$).

- Pro $T = 0$: všechny stavy $E < E_F$ obsazeny, $E > E_F$ prázdné.
- Pro $T > 0$: přechodové rozmazání kolem E_F o šířce $\sim k_B T$.
- Klíč k pochopení elektrické a tepelné vodivosti kovů.

Při nízkém obsazení stavů odlišné jmenovatele FD a BE rozdělení nemají významný vliv na výslednou hodnotu, pak se tedy částice přes kvantový charakter chovají klasicky - podle Boltzmannova rozdělení.

- Vodivost:

$$\sigma = \frac{ne^2\tau}{m^*},$$

kde m^* efektivní hmotnost elektronu.

- Mechanismy rozptylu:

- fonony (dominantní při vyšších T),
- nečistoty a defekty (dominantní při nízkých T).

- Teplotní závislost: $\rho(T) = \rho_0 + AT$, kde $\rho = 1/\sigma$.

- Wiedemann–Franzův zákon:

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = L \approx 2.44 \times 10^{-8} \text{ W } \Omega \text{ K}^{-2},$$

kde κ tepelná vodivost.

Matthiessenovo pravidlo – formulace a význam

- Matthiessenovo pravidlo popisuje vliv různých rozptylových mechanismů na elektrický odpor kovů.
- Základní předpoklad: jednotlivé mechanismy rozptylu elektronů jsou nezávislé.

Matematická formulace

Celková měrná elektrická rezistivita ρ je součtem příspěvků:

$$\rho(T) \approx \rho_{\text{res}} + \rho_{\text{ph}}(T),$$

kde:

- ρ_{res} – reziduální rezistivita, zahrnující zejména příměsi a statické poruchy mřížky,
- $\rho_{\text{ph}}(T)$ – teplotně závislý příspěvek rozptylu elektronů na fononech.
- Při podrobnějším rozkladu lze ρ_{res} dále rozdělit na příspěvky příměsí, dislokací a dalších statických vad.

Mikroskopická interpretace

V kvantové teorii transportu:

$$\frac{1}{\tau} = \sum_i \frac{1}{\tau_i},$$

kde:

- τ – celková relaxační doba elektronu,
- τ_i – relaxační doba pro jednotlivý rozptylový mechanismus i .

Rezistivita je úměrná $1/\tau$:

$$\rho = \frac{m}{ne^2\tau},$$

kde m je efektivní hmotnost elektronu, n koncentrace nosičů, e elementární náboj.

Matthiessenovo pravidlo – příklady a omezení

Teplotní závislost

- Při $T \rightarrow 0$ K:

$$\rho(T) \rightarrow \rho_{\text{res}},$$

rezistivita je dána pouze nečistotami a vadami.

- Pro $T \gg \theta_D$ (Debyeova teplota):

$$\rho_{\text{ph}}(T) \propto T,$$

rozptyl na fononech dominuje.

- Pro $T \ll \theta_D$:

$$\rho_{\text{ph}}(T) \propto T^5,$$

(Bloch–Grüneisenův zákon).

Experimentální příklady

- Čistá měď (Cu): velmi nízká ρ_{res} , silná teplotní závislost.
- Slitiny (Cu–Ni): velká ρ_{res} , slabší relativní vliv fononů.
- Deformované kovy: zvýšená ρ_{def} vlivem dislokací.

Omezení platnosti

- Pravidlo je empirické, nikoli přesně fundamentální.
- Neplatí přesně při:
 - silné korelací rozptylových mechanismů,
 - velmi nízkých teplotách,
 - silně neuspořádaných systémech,
 - kvantových transportních režimech (např. lokalizace).

Shrnutí

Matthiessenovo pravidlo umožňuje rozdělit elektrický odpor na jednotlivé fyzikální příčiny, což je klíčové pro interpretaci experimentálních dat a návrh kovových materiálů.

Wiedemann–Franzův zákon – formulace a fyzikální podstata

- Wiedemann–Franzův zákon popisuje vztah mezi elektrickou a tepelnou vodivostí kovů.
- Platí pro kovy, kde jsou hlavními nosiči náboje i tepla volné elektrony.

Matematická formulace

Poměr tepelné a elektrické vodivosti je úměrný teplotě:

$$\frac{\kappa}{\sigma T} = L,$$

kde:

- κ – tepelná vodivost [$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$],
- σ – elektrická vodivost [$\text{S}\cdot\text{m}^{-1}$],
- T – absolutní teplota [K],
- L – Lorenzovo číslo.

Lorenzovo číslo

V modelu volných elektronů (Sommerfeldův model):

$$L_0 = \frac{\pi^2}{3} \left(\frac{k_B}{e} \right)^2 \approx 2.44 \times 10^{-8} \text{ W } \Omega \text{ K}^{-2},$$

kde:

- k_B – Boltzmannova konstanta,
- e – elementární náboj.

Fyzikální interpretace

Stejně elektrony přenášejí:

- náboj $\rightarrow$ elektrická vodivost σ ,
- energii $\rightarrow$ tepelná vodivost κ .

V režimu elastického nebo kvazielastického rozptylu proto elektronový příspěvek vede k téměř univerzálnímu Lorenzovu číslu L_0 .

Wiedemann–Franzův zákon – platnost a omezení

Experimentální platnost

- Dobře platí pro:
 - jednoduché kovy (Cu, Ag, Au, Al),
 - zejména dostatečně nízké teploty v limitě elastického rozptýlu a vysoké teploty, kde je rozptyl přibližně kvazielastický; ve středním teplotním oboru mohou být odchylky výraznější.
- Experimentálně:
$$L \approx L_0 \quad (\text{s přesností jednotek } \%).$$

Teplotní chování

- Při vysokých teplotách:
$$\kappa \propto \sigma T,$$
rozptyl na fononech ovlivňuje obě vodivosti podobně.
- Při nízkých teplotách:
 - σ omezená nečistotami,
 - κ obsahuje významný fononový příspěvek.

Omezení platnosti

- Zákon neplatí nebo je porušen:
 - v polovodičích a izolantech (jiní nosiči tepla a náboje),
 - v silně korelovaných systémech,
 - v supravodičích (nulová ρ , konečná κ),
 - v některých režimech velmi nízkých teplot, pokud se uplatní dodatečně kvantové, korelační nebo neelastické mechanismy; u běžných kovů však $L \rightarrow L_0$ často právě pro $T \rightarrow 0$.

Srovnání s Matthiessenovým pravidlem

- Matthiessenovo pravidlo: rozklad rezistivity na příspěvky.
- Wiedemann–Franzův zákon: vztah mezi dvěma transportními koeficienty.
- Oba zákony vycházejí z Drude–Sommerfeldovy teorie.

Shrnutí

Wiedemann–Franzův zákon potvrzuje, že elektrický a tepelný transport v kovech mají společný mikroskopický původ – pohyb Fermiho elektronů.

Tepelná vodivost běžných materiálů

Materiál	Typ	κ [$\text{W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$]	Poznámka
Diamant	kovalentní síť	2000–2200	nejvyšší známá tepelná vodivost
Stříbro (Ag)	kov	430	nejlépe vedoucí kov
Měď (Cu)	kov	400	standard pro elektrické a tepelné vodiče
Zlato (Au)	kov	320	odolnost vůči oxidaci
Hliník (Al)	kov	235	lehký konstrukční materiál
Železo (Fe)	kov	80	závisí na čistotě a struktuře
Olovo (Pb)	kov	35	nízká tepelná vodivost mezi kovy
Křemík (Si)	čistý polovodič	150	významné pro elektroniku
Germanium (Ge)	čistý polovodič	60	nížší než Si
Sklo	izolant	1–1.5	amorfni struktura
Voda (kapalná)	kapalina	0.6	citlivé na teplotu
Beton	keramika	1.5–2	stavebnictví
Dřevo (suché)	organický materiál	0.1–0.2	závisí na vlhkosti a směru vláken
Polyethylen (PE)	polymer	0.4–0.5	nízká vodivost
Vzduch	plyn	0.026	velmi nízká vodivost
Vakuum	–	≈ 0	žádné vedení tepla, pouze záření

Poznámka

Kovy vedou teplo převážně díky volným elektronům, zatímco izolanty a polovodiče díky fononům. Anizotropní materiály (dřevo, grafit) vykazují silnou směrovou závislost.

- Klasické modely nevysvětlují:
 - proč jsou některé krystaly vodiče a jiné izolátory,
 - existenci polovodičů,
 - optické vlastnosti.
- Řešení: periodický potenciál $\rightarrow$ vlnová funkce elektronů podle Blochova teorému.
- Výsledkem jsou energetické pásy oddělené zakázanými pásy.

Kronig–Penneyův model (1D)

- Potenciál – periodická řada bariér.
- Schrödingerova rovnice → řešení:

$$\psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad u_k(x+a) = u_k(x),$$

(Blochův teorém).

- Výsledná disperzní relace ukazuje pásy a zakázané mezery.
- Zakázaná pásová mezera: oblasti energie, kde nejsou povoleny stavy.

- Kov: pás částečně zaplněn elektronovými stavy (vodivost vysoká).
- Izolátor: pás vyplněn, mezera $\Delta E_g \gtrsim 5$ eV.
- Polovodič: mezera $\Delta E_g \sim 0.1\text{--}3$ eV.
- Koncentrace nositelů v polovodiči:

$$n_i \approx N_c e^{-E_g / 2k_B T},$$

kde N_c efektivní hustota stavů, E_g šířka zakázaného pásu.

Efektivní hmotnost elektronu

- Definice z disperzní relace:

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{d^2 E}{dk^2}.$$

- Blízko minima pásu $\rightarrow$ elektron se chová jako volná částice s hmotností m^* .
- V polovodičích se zavádí díra – chybějící elektron ve valenčním pásu, pohybuje se jako kladný náboj.

Shrnutí – elektrické vlastnosti a pásová teorie

- Kovy: volné elektrony, vysoká vodivost.
- Polovodiče: zakázaný pás $\sim 0.1\text{--}3\text{ eV}$, citlivost na teplotu a příměsi.
- Izolátory: široký pás, prakticky nulová vodivost.
- Drude $\rightarrow$ Sommerfeld $\rightarrow$ pásová teorie
- Klíčové pojmy: Fermiho energie, Fermi–Diracovo rozdělení, efektivní hmotnost, zakázaný pás.

Parametry z pásové teorie pevných látek

- Zakázaný pás E_g [eV] – rozdíl mezi valenčním a vodivostním pásem.
- Fermiho energie E_F [eV] – energie nejvyššího obsazeného stavu při $T = 0$ K.

Materiál	Typ	E_g [eV]	E_F [eV]	Poznámka
Měď (Cu)	kov	–	7.0	vysoká hustota stavů u E_F
Hliník (Al)	kov	–	11.6	model volných elektronů
Železo (Fe)	kov	–	11.1	feromagnetické uspořádání
Olovo (Pb)	kov	–	9.5	typický typ I supravodič
Křemík (Si)	polovodič	1.12 (ind.)	–	vlastní polovodič, základ mikroelektroniky
Germanium (Ge)	polovodič	0.66 (ind.)	–	menší E_g , rychlejší nosiče
GaAs	polovodič	1.42 (dir.)	–	přímý pás, optoelektronika
CdS	polovodič	2.42 (dir.)	–	fotodetektory, solární články
ZnO	polovodič	3.3 (dir.)	–	průhledná elektronika
Diamant (C)	izolant	5.5	–	široký pás, dielektrikum
SiO ₂ (křemen)	izolant	8–9	–	skla, izolanty
AlN	izolant	6.2	–	keramika s vysokým E_g

Poznámka

Kovy nemají zakázaný pás – Fermiho hladina leží uvnitř vodivostního pásu. Polovodiče a izolanty se liší velikostí E_g (polovodiče: $\sim 0.1\text{--}3$ eV, izolanty: > 5 eV). Přímý pás (GaAs, CdS, ZnO) je klíčový pro optoelektroniku.

Magnetické vlastnosti – úvod

- Magnetismus = důsledek magnetických momentů elektronů:
 - orbitální moment hybnosti,
 - spinový moment.
- Interakce s vnějším polem $B \rightarrow$ různé druhy magnetického chování.
- Základní charakteristiky:
 - magnetizace M [A/m],
 - susceptibilita χ (bezrozměrná),
 - permeabilita $\mu = \mu_0(1 + \chi)$.

Magnetické vlastnosti běžných materiálů

- Typ magnetického chování určuje uspořádání a interakce magnetických momentů.
- Tabulka shrnuje příklady látek a jejich charakteristiky.

Materiál	Typ	Charakteristika	Teplota
Bismut (Bi)	diamagnetický	$\chi \approx -1.7 \times 10^{-4}$	nezávislá na T
Měď (Cu), Au, Ag	diamagnetické	$\chi \sim -10^{-5}$	nezávislé na T
Hliník (Al)	paramagnetický	$\chi \sim 2.2 \times 10^{-5}$	převážně Pauliho paramagnetismus
Platina (Pt)	paramagnetický	$\chi \sim 2.9 \times 10^{-4}$	zesílený Pauliho paramagnetismus
Fe (α -Fe)	feromagnetický	$\mu_r \gg 1$	$T_C = 1043$ K
Ni	feromagnetický	$\mu_r \gg 1$	$T_C = 627$ K
Co	feromagnetický	$\mu_r \gg 1$	$T_C = 1394$ K
Gd	feromagnetický	silně teplotně závislý	$T_C = 293$ K
MnO, FeO, NiO	antiferomagnetické	χ roste do T_N	$T_N = 100$ –500 K
Fe ₃ O ₄ (magnetit)	ferimagnetický	$M \neq 0$, nestejně momenty	$T_C = 858$ K
Ferrity (např. MnZn)	ferimagnetické	$\mu_r \sim 10^2$ – 10^4	$T_C \sim 500$ –800 K

Poznámka

Magnetické vlastnosti sahají od slabých efektů (dia-, paramagnetismus) až po kolektivní jevy (fero-, antiferro-, ferimagnetismus). Charakteristické teploty (T_C , T_N) určují, kdy dochází k uspořádání nebo jeho zániku.

Magnetický moment elektronu

- Orbitální moment:

$$\mu_L = -\frac{e}{2m_e} L,$$

kde L je orbitální moment hybnosti, m_e hmotnost elektronu.

- Spinový moment:

$$\mu_S = -g_s \frac{e}{2m_e} S, \quad g_s \approx 2.0023.$$

- Bohrův magneton:

$$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e} \approx 9.27 \times 10^{-24} \text{ J/T}.$$

- Vzniká jako indukovaný moment v uzavřených elektronových orbitalech.
- Susceptibilita:

$$\chi < 0, \quad |\chi| \sim 10^{-6} \text{ až } 10^{-5}.$$

- Nezávisí na teplotě.
- Příklady: Cu, Au, Bi.

- Atomy/ionty s nenulovým spinem nebo orbitálním momentem.
- V nepřítomnosti pole – neuspořádané orientace, $M = 0$.
- V poli B – částečné uspořádání momentů.
- Curieho zákon:

$$\chi = \frac{C}{T}, \quad C = \frac{\mu_0 N \mu_{\text{eff}}^2}{3k_B},$$

kde C je Curieova konstanta charakterizující paramagnetickou odezvu látky, N je hustota iontů, μ_{eff} je efektivní magnetický moment (obvykle vyjádřený v jednotkách Bohrov magneton μ_B).

- Kolektivní jev – spontánní uspořádání magnetických momentů i bez vnějšího pole.
- Weissovo molekulární pole: $B_{\text{ef}} = B + \lambda M$.
- Curie–Weissův zákon:

$$\chi = \frac{C}{T - T_C},$$

kde T_C je Curieho teplota.

- Typické feromagnety: Fe, Co, Ni.

Antiferomagnetismus

- Magnetické momenty sousedních iontů se uspořádají antiparalelně.
- Celková magnetizace $M \approx 0$.
- Susceptibilita:

$$\chi = \frac{C}{T + T_N},$$

kde T_N je Néelova teplota.

- Příklady: MnO, FeO, NiO.

- Podobný antiferomagnetismu, ale momenty mají nestejnou velikost.
- $\Rightarrow$ nedokonalé vyrušení, výsledné $M \neq 0$.
- Typické pro ferity (např. magnetit Fe_3O_4).

Magnetické domény

- Feromagnetické krystaly se dělí na oblasti (domény), kde jsou momenty zarovnány.
- Přejchod mezi domény = Blochova stěna.
- Aplikace pole: růst domén příznivě orientovaných → hystereze.

- Feromagnety vykazují závislost $M(B)$ s pamětí.
- Klíčové veličiny:
 - remanence M_r ,
 - koercitivní pole H_c .
- Rozlišujeme měkké a tvrdé magnetické materiály.

- Pauliho paramagnetismus (volné elektrony):

$$\chi_P = \mu_0 \mu_B^2 g(E_F),$$

kde $g(E_F)$ hustota stavů na Fermiho hladině.

- Landauův diamagnetismus – kvantový efekt cirkulace elektronů ve vnějším poli.
- Výsledek: celková susceptibilita $= \chi_P + \chi_L$.

Spinové vlny a magnony

- Kolektivní excitace magnetického uspořádání.
- Kvazičástice: **magnony**, energie

$$E = \hbar\omega(\mathbf{k}),$$

analogie k fononům.

- Přispívají k tepelné kapacitě a transportu.

Supraparamagnetismus

- U velmi malých částic – jedna doména.
- Tepelné kmity překonávají anisotropní bariéru → momenty se překlápí.
- Makroskopicky se chovají jako paramagnetikum se silným momentem.
- Význam: magnetické nanočástice v medicíně a technologiích.

Charakteristické teploty – příklady materiálů

- Curieho teplota T_C – nad touto teplotou zaniká feromagnetismus.
- Néelova teplota T_N – nad touto teplotou mizí antiiferomagnetické uspořádání.
- Debyeova teplota θ_D – charakteristická pro fononové spektrum, určuje průběh C_V při nízkých T .

Materiál	T_C [K]	T_N [K]	θ_D [K]
Fe (železo)	1043	–	470
Co (kobalt)	1394	–	445
Ni (nikl)	627	–	450
Gd (gadolinium)	293	–	165
MnO	–	118	400
NiO	–	523	390
Pb (olovo)	–	–	105
C (diamant)	–	–	2230

Poznámka

Hodnoty charakteristických teplot odrážejí fyzikální vlastnosti vazeb v materiálu:

- Vysoká θ_D (např. diamant, ~ 2200 K): velmi tuhé kovalentní vazby, vysoká rychlost zvuku $\Rightarrow$ fonony mají vysoké frekvence.
- Nízká θ_D (např. Pb, ~ 100 K): měkké kovové vazby, nízká rychlost zvuku $\Rightarrow$ fonony nízkých frekvencí.
- Curieho a Néelovy teploty: udávají energii interakce mezi magnetickými momenty (výměnná interakce). Vysoké T_C (Co, Fe) znamená silnou výměnnou vazbu, nízké T_N (MnO) slabší interakci.

Shrnutí – magnetické vlastnosti

- Základ: magnetický moment elektronu (μ_B).
- Typy: diamagnetismus, paramagnetismus, feromagnetismus, antiferomagnetismus, ferimagnetismus.
- Klíčové zákony: Curieho, Curie–Weissův, Pauliho paramagnetismus.
- Kolektivní jevy: domény, hystereze, spinové vlny.
- Aplikace: permanentní magnety, ferity, magnetické nanočástice.

- 1911 – H. Kamerlingh Onnes: rtuť při $T \approx 4.2 \text{ K} \rightarrow$ nulový odpor.
- Základní jevy:
 - nulový elektrický odpor ($\rho = 0$),
 - dokonalý diamagnetismus (Meissnerův efekt).
- Vysvětlení vyžadovalo kvantovou teorii (BCS - Bardeen, Cooper, Schrieffer, 1957).

Persistentní proud v supravodiči (Onnes)

- V roce 1920 Kamerlingh-Onnes zformoval supravodivý prstenec z rtuti.
- Pomocí magnetického pole uvedl prstenec do supravodivého stavu a poté odstranil vnější pole.
- Pozorování: proud procházel prstencem *bez úbytku* (persistentní proud).
- Tento prstenec byl později přemístěn i na jiné místo (např. z laboratoře v Leidenu do Kolína), a přesto zůstal elektrický proud měřitelný.
- Důkaz: nulový elektrický odpor v supravodivém stavu - proud teče trvale bez externího zdroje.
- Význam: jeden z prvních zřejmých důkazů kvantové podstaty supravodivosti.

- 1933: Meissner a Ochsenfeld: supravodivý vzorek vytlačí magnetické pole.
- Magnetická indukce uvnitř supravodiče:

$$B(x) = B_0 e^{-x/\lambda_L},$$

kde λ_L je Londonova hloubka vniku ($\sim 10^{-7}$ m).

- $\Rightarrow$ supravodivost není jen nulový odpor, ale nový stav hmoty.

Kritické parametry supravodivosti

- Každý supravodič je charakterizován:
 - kritickou teplotou T_c – nad ní mizí supravodivost,
 - kritickým polem H_c – nad ním mizí Meissnerův stav,
 - kritickou proudovou hustotou J_c – nad ní se stav zničí.
- Závislost kritického pole na teplotě:

$$H_c(T) = H_c(0) \left[1 - \left(\frac{T}{T_c} \right)^2 \right].$$

Kritické teploty supravodičů

Materiál	Typ	T_c [K]
Rtuť (Hg)	prvek, typ I	4.2
Olovo (Pb)	prvek, typ I	7.2
Hliník (Al)	prvek, typ I	1.2
Cín (Sn)	prvek, typ I	3.7
Wolfram (W)	prvek, typ I	0.015
Rhenium (Re)	prvek, typ I	1.7
Niob (Nb)	prvek, typ II	9.3
Niob–Titan (NbTi)	slitina, typ II	10
Niob–cín (Nb ₃ Sn)	intermetalická sloučenina	18
MgB ₂	sloučenina (2001)	39
LaBaCuO	kuprát, HTSC	35
YBa ₂ Cu ₃ O _{7-δ} (YBCO)	kuprát, HTSC	92
Bi ₂ Sr ₂ CaCu ₂ O ₈ (BSCCO)	kuprát, HTSC	110
Tl ₂ Ba ₂ Ca ₂ Cu ₃ O ₁₀ (Tl-2223)	kuprát, HTSC	125
HgBa ₂ Ca ₂ Cu ₃ O _{8+δ} (Hg-1223)	kuprát, HTSC	133
Hybrid síry (H ₃ S, při ~150 GPa)	vysokotlaký supravodič	203
LaH ₁₀ (při ~170 GPa)	vysokotlaký hybrid	250–260

Poznámka

Nízkoteplotní supravodiče (např. Al, W) vyžadují chlazení kapalným He, zatímco kupráty typu YBCO pracují již při teplotě kapalného dusíku (77 K). Rekordní hodnoty přes 200 K jsou zatím dosaženy pouze u hybridů za extrémních tlaků.

Typy supravodičů

- Typ I: úplný Meissnerův efekt do H_c , ostrý přechod. – Pb, Hg, Al.
- Typ II: dva kritické body H_{c1} a H_{c2} .
 - pro $H < H_{c1}$: dokonalý diamagnetismus,
 - $H_{c1} < H < H_{c2}$: smíšený stav (vortexy),
 - $H > H_{c2}$: normální stav.
- Typ II: technologicky významné (NbTi, Nb₃Sn, vysokoteplotní keramické supravodiče).

- Bratři Londonové (Fritz, Heinz) popsali proudy ve supravodiči:

$$\frac{\partial \mathbf{J}_s}{\partial t} = \frac{n_s e^2}{m} \mathbf{E}, \quad \nabla \times \mathbf{J}_s = -\frac{n_s e^2}{m} \mathbf{B},$$

kde $\mathbf{J}_s$ je supravodivá proudová hustota, n_s hustota párových elektronů.

- Z nich plyne Meissnerův efekt a definice λ_L .

- Bardeen, Cooper, Schrieffer (1957).
- Klíč: Cooperovy páry – elektrony se spiny $\uparrow\downarrow$ a opačným k tvoří vázaný stav díky interakci přes fonony.
- Energetická mezera:

$$\Delta(T) \approx 1.76 k_B T_c \quad \text{pro } T = 0.$$

- Δ = mezera v hustotě stavů $\rightarrow$ odpovídá nulovému odporu.

SQUID – supravodivý kvantový interferenční přístroj

- SQUID = Superconducting QUantum Interference Device.
- Princip: využívá kvantovou interferenci proudů přes Josephsonovy přechody.
- Proud závisí na magnetickém toku Φ :

$$I(\Phi) = I_c \sin\left(\frac{2\pi\Phi}{\Phi_0}\right),$$

kde I_c je kritický proud, $\Phi_0 = \frac{h}{2e} \approx 2.07 \times 10^{-15}$ Wb kvantum magnetického toku.

- Extrémní citlivost na změny magnetického pole – detekce až 10^{-15} T.
- Využití:
 - biomagnetismus (magnetoencefalografie – měření mozkové aktivity),
 - geofyzika, detekce slabých signálů (hledání ponorek),
 - standardy magnetického toku.

Shrnutí – supravodivost

- Objev 1911, nulový odpor a Meissnerův efekt.
- Kritické parametry: T_c , H_c , J_c .
- Typ I vs. typ II, význam vortexového stavu.
- Londonovy rovnice – makroskopický popis.
- BCS teorie – mikroskopický mechanismus: Cooperovy páry, energetická mezera.
- Aplikace: magnety, ztrátově nulové přenosy, SQUIDy, vysokoteplotní supravodiče.