4 Křivočaré souřadnice

Báze

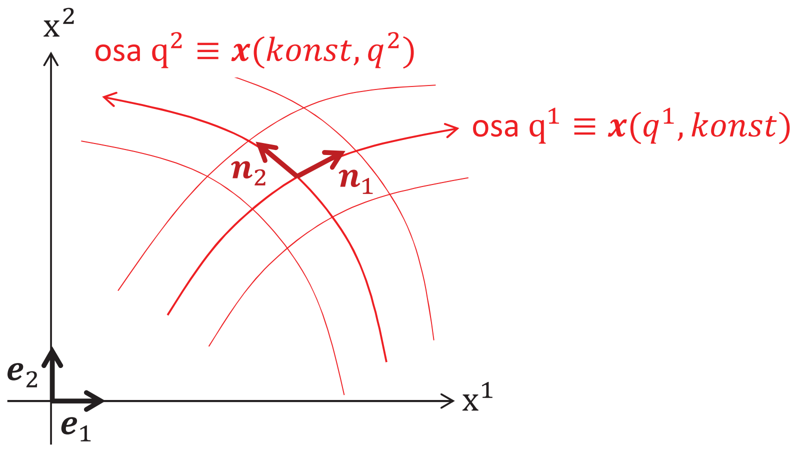
V d-rozměrném prostoru jsou křivočaré souřadnice v bodě $\boldsymbol{x} = (x^1, x^2, \ldots, x^d)$ zadány vztahy

$$q^i = q^i(\boldsymbol{x})\,, \tag{4.0.1}$$

kde $i = 1, \ldots, d$ a $x^1, x^2, \ldots, x^d$ jsou (lokálně definované) kartézské souřadnice. Bázi *(kovariantní)* v kartézském systému označíme $\boldsymbol{e}_i$, takže lze psát[8]

$$\boldsymbol{x} = x^i \boldsymbol{e}_i\,, \tag{4.0.3}$$

kde x^i jsou *kontravariantní* složky vektoru $\boldsymbol{x}$.



Obrázek 1: Ilustrace souřadnicového systému a lokální báze v křivočarých souřadnicích (q^1, q^2).

Předpokládáme, že transformace (4.0.1) je invertibilní, tj. že existuje inverzní transformace

$$x^i = x^i(\boldsymbol{q})\,. \tag{4.0.4}$$

V bodě $\boldsymbol{x}$ zavedeme novou bázi ve směru tečen k jednotlivým souřadnicovým čarám q^i, viz obrázek 1[9]:

$$\boldsymbol{n}_i = \frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial q^i} = \frac{\partial x^j}{\partial q^i}\boldsymbol{e}_j\,; \tag{4.0.5}$$

jednotlivé složky bázových vektorů $\boldsymbol{n}_i$ tedy jsou

$$n_i^j = \frac{\partial x^j}{\partial q^i}\,. \tag{4.0.6}$$

Je třeba mít na paměti, že zatímco bázové vektory $\boldsymbol{e}_i$ jsou konstantní, bázové vektory $\boldsymbol{n}_i$ obecně závisejí na místě v prostoru: $\boldsymbol{n_i} = \boldsymbol{n_i}(\boldsymbol{q})$.

[8] *Einsteinova sčítací konvence:* Pokud se ve vzorci vyskytnou dva stejně označené indexy, z nichž jeden je nahoře a druhý dole, přes indexy se sčítá:

$$x^i \boldsymbol{e}_i \equiv \sum_{i=1}^{d} x^i \boldsymbol{e}_i\,. \tag{4.0.2}$$

[9] Souřadnicová čára q^i procházející bodem $\boldsymbol{Q} = (Q^1, Q^2, \ldots, Q^d)$ je definována jako čára $\mathrm{q}^i \equiv \boldsymbol{x}(q^1 = Q^1, \ldots, q^i, \ldots, q^d = Q^d)$ (mění se pouze souřadnice q^i, ostatní souřadnice jsou konstantní).

Jakobián

Přechod mezi jednotlivými souřadnými systémy $\boldsymbol{x}$ a $\boldsymbol{q}$ je dán *Jacobiho maticí*

$$\mathsf{J} = \left(\frac{\partial \boldsymbol{x}}{\partial \boldsymbol{q}}\right) = \left(\frac{\partial\left(x^1, x^2, \ldots, x^d\right)}{\partial(q^1, q^2, \ldots, q^d)}\right), \tag{4.0.7}$$

či ve složkách

$$J_i^j = \frac{\partial x^j}{\partial q^i} \equiv n_i^j\,. \tag{4.0.8}$$

(Jacobiho matice má tedy v řádcích kovariantní bázové vektory $\boldsymbol{n}_i$.) Podmínka invertovatelnosti (4.0.4) souvisí s nesingularitou Jacobiho matice,

$$\det \mathsf{J} \neq 0 \tag{4.0.9}$$

($\det \mathsf{J}$ se nazývá *Jakobián*).

Duální báze

K bázi $\boldsymbol{e}_i$ se zavádí duální *(kontravariantní)* báze $\boldsymbol{e}^j$ vztahy

$$\boldsymbol{e}_i \cdot \boldsymbol{e}^j = \delta_i^j \tag{4.0.10}$$

a podobně pro bázi v křivočarých souřadnicích

$$\boxed{\boldsymbol{n}_i \cdot \boldsymbol{n}^j = \delta_i^j}\,. \tag{4.0.11}$$

Symbol $\cdot$ udává skalární součin:

$$\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{b} = a^i b_i \left(= \sum_{i=1}^{d} a^i b_i\right). \tag{4.0.12}$$

Pro křivočaré souřadnice je duální báze dána vektory kolmými k plochám $q^i = \text{const}$, tj.

$$\boldsymbol{n}^i = \nabla q^i = \frac{\partial q^i}{\partial x_j}\boldsymbol{e}^j\,. \tag{4.0.13}$$

Je snadné dokázat, že platí (4.0.11):

$$\boldsymbol{n}_i \cdot \boldsymbol{n}^j = \frac{\partial x^k}{\partial q_i}\boldsymbol{e}_k \cdot \frac{\partial q^j}{\partial x^l}\boldsymbol{e}^l = \frac{\partial x^k}{\partial q_i}\frac{\partial q^j}{\partial x^l}\delta_l^k = \frac{\partial q^j}{\partial q^i} = \delta_i^j\,. \tag{4.0.14}$$

Metrický tenzor

Metrický tenzor se nazývá matice g s elementy

$$\boxed{g_{ij} = \boldsymbol{n}_i \cdot \boldsymbol{n}_j = \sum_{k=1}^{n} \frac{\partial x^k}{\partial q^i}\frac{\partial x^k}{\partial q^j}}\,. \tag{4.0.15}$$

Z definice je vidět, že matice g je symetrická:

$$g_{ij} = g_{ji}\,. \tag{4.0.16}$$

Pomocí metrického tenzoru lze spouštět indexy u kontravariantních komponent. Pokud máme libovolný vektor $\boldsymbol{a} = a^j \boldsymbol{n}_j = a_i \boldsymbol{n}^i$, aplikací g na jeho složky dostáváme

$$g_{ij} a^j = \boldsymbol{n}_i \cdot \boldsymbol{n}_j a^j = \boldsymbol{n}_i \cdot \boldsymbol{n}^j a_j = \delta_i^j a_j = a_i \tag{4.0.17}$$

(ve třetí rovnosti jsme využili vztahu (4.0.11)).

K matici g se zavádí inverzní matice g^{-1} se složkami g^{ij}

$$g_{ij} g^{jk} = \delta_i^k \,. \tag{4.0.18}$$

Tato matice slouží naopak ke zvedání indexů kovariantních komponent.

Porovnáním definičního vztahu pro metrický tenzor (4.0.15) a Jacobiho matice (4.0.8) dostáváme

$$\mathsf{g} = \mathsf{J}\mathsf{J}^{\mathrm{T}} \,. \tag{4.0.19}$$

Gradient

Mějme skalární pole v křivočarých souřadnicích $f = f(\boldsymbol{q})$. Jeho gradient je

$$\operatorname{grad} f = \nabla f = \frac{\partial f}{\partial q^i} \boldsymbol{n}^i \,. \tag{4.0.20}$$

Kovariantní derivace

Mějme vektorové pole v křivočarých souřadnicích $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}(\boldsymbol{q}) = F^k \boldsymbol{n}_k$. Derivováním dostaneme

$$\frac{\partial \boldsymbol{F}}{\partial q^i} = \frac{\partial}{\partial q^i} \left(F^k \boldsymbol{n}_k \right) = \frac{\partial F^k}{\partial q^i} \boldsymbol{n}_k + \underbrace{\frac{\partial \boldsymbol{n}_k}{\partial q^i} F^j}_{\frac{\partial \boldsymbol{n}_j}{\partial q^i} F^j} = \frac{\partial F^k}{\partial q^i} \boldsymbol{n}_k + \Gamma_{ij}^k F^j \boldsymbol{n}_k \,, \tag{4.0.21}$$

kde jsme využili toho, že $\partial \boldsymbol{n}_j / \partial q^i$ je vektor, a dá se tudíž vyjádřit v bázi $\boldsymbol{n}_k$ pomocí koeficientů Γ_{ij}^k

$$\frac{\partial \boldsymbol{n}_j}{\partial q^i} = \Gamma_{ij}^k \boldsymbol{n}_k \tag{4.0.22}$$

Koeficienty Γ_{ij}^k se nazývají *Christoffelovy symboly*. Jsou symetrické vůči záměně dolních indexů[10]

$$\Gamma_{ij}^k = \Gamma_{ji}^k \tag{4.0.24}$$

a dají se vyjádřit pomocí derivací metrického tenzoru[11]

$$\boxed{\Gamma_{ij}^k = \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{il}}{\partial q^j} + \frac{\partial g_{jl}}{\partial q^i} - \frac{\partial g_{ij}}{\partial q^l} \right)} \,. \tag{4.0.25}$$

Rovnice (4.0.21) zapsaná ve složkách zní

$$\boxed{F^k{}_{;i} = \frac{\partial F^k}{\partial q^i} + \Gamma_{ij}^k F^j} \tag{4.0.26}$$

---

[10] Je vidět z (4.0.5) a (4.0.22):

$$\frac{\partial \boldsymbol{n}_j}{\partial q^i} = \frac{\partial^2 \boldsymbol{x}}{\partial q_j \partial q^i} = \frac{\partial \boldsymbol{n}_i}{\partial q^j} \tag{4.0.23}$$

[11] Odvození spočívá v derivování (4.0.15) s různě označenými indexy.

a nazývá se *kovariantní derivace*[12].

Divergence

Divergenci odvodíme z kovariantní derivace:

$$\operatorname{div} \boldsymbol{F} = F^k{}_{;k} = \frac{\partial F^k}{\partial q^k} + \Gamma^k_{kj} F^j \,. \tag{4.0.28}$$

Zúžený Christoffelův symbol je

$$\Gamma^k_{kj} = \frac{1}{2} g^{kl} \left(\frac{\partial g_{kl}}{\partial q^j} + \underbrace{\frac{\partial g_{jl}}{\partial q^k} - \frac{\partial g_{kj}}{\partial q^l}}_{0} \right) = \frac{1}{2} g^{kl} \frac{\partial g_{kl}}{\partial q^j} = \frac{1}{2} \operatorname{Tr} \mathsf{g}^{-1} \frac{\partial \mathsf{g}}{\partial q^j} \tag{4.0.29}$$

(druhý a třetí člen závorky jsou antisymetrické vůči záměně $k \leftrightarrow l$, takže při násobení symetrickou maticí g^{kl} dají nulu) a při použití (4.1.2) dostaneme

$$\Gamma^k_{kj} = \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial q^j} \ln \det \mathsf{g} = \frac{1}{2 \det \mathsf{g}} \frac{\partial}{\partial q^j} \det \mathsf{g} \left(= \frac{\partial}{\partial q^j} \ln \sqrt{\det \mathsf{g}} \right) , \tag{4.0.30}$$

takže

$$\operatorname{div} \boldsymbol{F} = \frac{\partial F^k}{\partial q^k} + \left(\frac{1}{2 \det \mathsf{g}} \frac{\partial}{\partial q^j} \det \mathsf{g} \right) F^j = \frac{1}{\sqrt{\det \mathsf{g}}} \frac{\partial}{\partial q^k} \sqrt{\det \mathsf{g}}\, F^k \,, \tag{4.0.31}$$

přičemž poslední rovnost se dokáže rozderivováním součinu (jak $\det \mathsf{g}$, tak F^k závisejí na $\boldsymbol{q}$).

Laplace

Laplaceův operátor $\Delta \equiv \operatorname{div} \operatorname{grad}$ získáme zkombinováním (4.0.20) a (4.0.31):

$$\Delta f = \frac{1}{\sqrt{\det \mathsf{g}}} \frac{\partial}{\partial q^k} \sqrt{\det \mathsf{g}}\, g^{kl} \frac{\partial f}{\partial q^l} \,, \tag{4.0.32}$$

takže samotný diferenciální operátor je

$$\boxed{\Delta = \frac{1}{\sqrt{\det \mathsf{g}}} \frac{\partial}{\partial q^k} \sqrt{\det \mathsf{g}}\, g^{kl} \frac{\partial}{\partial q^l}} \,. \tag{4.0.33}$$

Lagranžián a Hamiltonián

Lagranžián v obecných křivočarých souřadnicích je

$$L(\dot{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{q}) = T(\dot{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{q}) - V(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{2} M g_{kl}(\boldsymbol{q}) \dot{q}^k \dot{q}^l - V(\boldsymbol{q}) \,, \tag{4.0.34}$$

[12] Kovariantní derivace podle i-té složky se značí středníkem následovaným indexem i. Obyčejná derivace se značí čárkou následovanou indexm i. Rovnici (4.0.26) lze tedy zapsat jako

$$F^k{}_{;i} = F^k{}_{,i} + \Gamma^k_{ij} F^j \,. \tag{4.0.27}$$

kde předpokládáme, že kinetický člen systému lze zapsat jako kvadratickou formu v rychlostech $\dot{\boldsymbol{q}}$. K Hamiltoniánu přejdeme zavedením zobecněných hybností

$$p_k = \frac{\partial L}{\partial \dot{q}^k} = M g_{kl} \dot{q}^l \,, \tag{4.0.35}$$

takže

$$H(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) = T(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{q}) + V(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{2M} g^{kl}(\boldsymbol{q}) p_k p_l + V(\boldsymbol{q}) \,. \tag{4.0.36}$$

V kvantovém případě je obecná formulace Hamiltoniánu diskutována v práci [6].

Schrödingerova rovnice v křivočarých souřadnicích

Schrödingerova rovnice zní

$$\hat{\mathsf{H}} \left|\psi\right\rangle = E \left|\psi\right\rangle \tag{4.0.37}$$

$$\left(\frac{1}{2M} \hat{\mathbf{p}}^2 + \hat{\mathsf{V}} \right) = E \left|\psi\right\rangle \,. \tag{4.0.38}$$

V x-reprezentaci a v křivočarých souřadnicích $\boldsymbol{q}$ dostaneme

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2M} \Delta + V(\boldsymbol{q}) \right) \psi(\boldsymbol{q}) = E \psi(\boldsymbol{q}) \,, \tag{4.0.39}$$

přičemž za Laplaceův operátor Δ dosadíme z (4.0.33).

Poznámka:

Hmotnost, či obecněji *tenzor zobecněné hmotnosti*[13] lze zahrnout do metrického tenzoru, potažmo formálně do definice křivočarých souřadnic. Vztahy (4.0.34)—(4.0.39) pak přejdou na

$$\begin{aligned} L(\dot{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{q}) &= \frac{1}{2} g_{kl}(\boldsymbol{q}) \dot{q}^k \dot{q}^l - V(\boldsymbol{q}) \,, \\ p_k &= g_{kl} \dot{q}^l \,, \\ H(\dot{\boldsymbol{q}}, \boldsymbol{q}) &= \frac{1}{2} g^{kl}(\boldsymbol{q}) p_k p_l + V(\boldsymbol{q}) \,, \\ \left(-\frac{\hbar^2}{2} \Delta + V(\boldsymbol{q}) \right) \psi(\boldsymbol{q}) &= E \psi(\boldsymbol{q}) \,. \end{aligned} \tag{4.0.40}$$

V případě sférických souřadnic (r, θ, ϕ) to znamená formálně vycházet ze vztahů

$$\begin{aligned} x &= r\sqrt{M} \sin\theta \cos\phi \\ y &= r\sqrt{M} \sin\theta \sin\phi \\ z &= r\sqrt{M} \cos\theta \,. \end{aligned} \tag{4.0.41}$$

[13] Zobecněné proto, že nemusí mít rozměr hmotnosti, a tenzor proto, že může být v různých směrech různá, např. v případě rotací a tenzoru setrvačnosti, viz příklad 4.3.

4.1 Determinant a stopa

1. Dokažte, že pro nesingulární matici A platí vztah

$$\det e^{\mathsf{A}} = e^{\mathrm{Tr}\,\mathsf{A}} . \tag{4.1.1}$$

2. Na základě předchozího vztahu ukažte, že pokud je matice B funkcí zobecněných souřadnic, $\mathsf{B} = \mathsf{B}(\boldsymbol{q})$, platí

$$\frac{\partial}{\partial q^i} \ln \det \mathsf{B}(\boldsymbol{q}) = \mathrm{Tr}\, \mathsf{B}^{-1}(\boldsymbol{q}) \frac{\partial}{\partial q^i} \mathsf{B}(\boldsymbol{q}) , \tag{4.1.2}$$

kde $\mathsf{B}^{-1}(\boldsymbol{q})$ je matice inverzní k matici $\mathsf{B}(\boldsymbol{q})$.

Řešení:

1. Nesingulární matici A můžeme zdiagonalizovat a vyjádřit ve tvaru

$$\mathsf{A} = \mathsf{C}\mathsf{D}\mathsf{C}^{-1} , \tag{4.1.3}$$

kde D je diagonální matice. Dosadíme-li do (4.1.1), dostaneme na levé a pravé straně

$$\begin{aligned} \det e^{\mathsf{A}} &= \det e^{\mathsf{CDC}^{-1}} = \det \mathsf{C}\, e^{\mathsf{D}}\, \mathsf{C}^{-1} = \det \mathsf{C} \det e^{\mathsf{D}} \frac{1}{\det \mathsf{C}} \\ &= \det \mathsf{D} = \prod_j e^{D_{jj}} , \end{aligned} \tag{4.1.4}$$

$$e^{\mathrm{Tr}\,\mathsf{A}} = e^{\mathrm{Tr}\,\mathsf{CDC}^{-1}} = e^{\mathrm{Tr}\,\mathsf{D}} = e^{\sum_j D_{jj}} = \prod_j e^{D_{jj}} , \tag{4.1.5}$$

čímž je (4.1.1) dokázáno.

2. Označme $\mathsf{B}(\boldsymbol{q}) = e^{\mathsf{A}(\boldsymbol{q})}$, takže $\mathsf{A}(\boldsymbol{q}) = \ln \mathsf{B}(\boldsymbol{q})$. Dosadíme-li do (4.1.1), dostaneme

$$\det \mathsf{B}(\boldsymbol{q}) = e^{\mathrm{Tr}\ln \mathsf{B}(\boldsymbol{q})} , \tag{4.1.6}$$

po zlogaritmování

$$\ln \det \mathsf{B}(\boldsymbol{q}) = \mathrm{Tr} \ln \mathsf{B}(\boldsymbol{q}) \tag{4.1.7}$$

a zderivování

$$\frac{\partial}{\partial q^i} \ln \det \mathsf{B}(\boldsymbol{q}) = \mathrm{Tr}\, \frac{\partial}{\partial q^i} \ln B(\boldsymbol{q}) = \mathrm{Tr}\, \frac{1}{B(\boldsymbol{q})} \frac{\partial}{\partial q^i} B(\boldsymbol{q}) , \tag{4.1.8}$$

což jsme chtěli dokázat.

4.2 Sférické souřadnice

Pro sférické souřadnice (r, θ, ϕ) definované běžným způsobem jako

$$\begin{aligned} x &= r \sin\theta \cos\phi \\ y &= r \sin\theta \sin\phi \\ z &= r \cos\theta \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

vypočítejte:

1. Jacobiho matici $\mathsf{J} \equiv \frac{\partial(x,y,z)}{\partial(r,\theta,\phi)}$.
2. Determinant Jacobiho matice $\det \mathsf{J}$.
3. Metrický tenzor g.
4. Inverzní metrický tenzor g^{-1}.
5. Determinant metrického tenzoru $\det \mathsf{g}$.
6. Lagranžián a Hamiltonián klasického systému bez potenciálu.
7. Laplaceův operátor Δ.

Řešení:

1. Jacobiho matici určíme pomocí definičního vztahu (4.0.8):

$$\mathsf{J} = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\phi & \sin\theta\sin\phi & \cos\theta \\ r\cos\theta\cos\phi & r\cos\theta\sin\phi & -r\sin\theta \\ -r\sin\theta\sin\phi & r\sin\theta\cos\phi & 0 \end{pmatrix} . \tag{4.2.2}$$

2. Jakobián

$$\begin{aligned} \det \mathsf{J} &= r^2\sin\theta\cos^2\theta\cos^2\phi + r^2\sin^3\theta\sin^2\phi \\ &\quad + r^2\sin\theta\cos^2\theta\sin^2\phi + r^2\sin^3\theta\cos^2\phi \\ &= r^2\sin\theta\cos^2\theta + r^2\sin^3\theta \\ &= r^2\sin\theta\,. \end{aligned} \tag{4.2.3}$$

3. Metrický tenzor spočteme pomocí (4.0.19):

$$g_{11} = \sin^2\theta\cos^2\phi + \sin^2\theta\cos^2\phi + \cos^2\theta = \sin^2\theta + \cos^2\theta = 1\,, \tag{4.2.4}$$
$$g_{12} = r\sin\theta\cos\theta\cos^2\phi + r\sin\theta\cos\theta\sin^2\phi - r\sin\theta\cos\theta = 0\,, \tag{4.2.5}$$
$$g_{13} = -r\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi + r\sin^2\theta\sin\phi\cos\phi = 0\,, \tag{4.2.6}$$
$$g_{21} = g_{12} = 0\,, \tag{4.2.7}$$
$$g_{22} = r^2\cos^2\theta\cos^2\phi + r^2\cos^2\theta\sin^2\phi + r^2\sin^2\theta = r^2\,, \tag{4.2.8}$$
$$g_{23} = r^2\sin\theta\cos\theta\sin\phi\cos\phi - r^2\sin\theta\cos\theta\sin\phi\cos\phi = 0\,, \tag{4.2.9}$$
$$g_{31} = g_{13} = 0\,, \tag{4.2.10}$$
$$g_{32} = g_{23} = 0\,, \tag{4.2.11}$$
$$g_{33} = r^2\sin^2\theta\sin^2\phi + r^2\sin^2\theta\cos^2\phi = r^2\sin^2\theta\,. \tag{4.2.12}$$

V maticovém zápisu

$$\mathsf{g} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & r^2 & 0 \\ 0 & 0 & r^2\sin^2\theta \end{pmatrix} . \tag{4.2.13}$$

4. Metrický tenzor je diagonální[14], takže

$$\mathsf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{r^2} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{1}{r^2\sin^2\theta} \end{pmatrix} . \tag{4.2.14}$$

[14] Je-li metrický tenzor diagonální, znamená to, že zobecněné souřadnice jsou v každém místě prostoru ortogonální.

5. Determinant diagonální matice = součin členů na diagonále
$$\det \mathsf{g} = r^4 \sin^2\theta\,. \tag{4.2.15}$$

6. Lagranžián je dán vztahem (4.0.34)
$$L = \frac{1}{2}M\left(\dot r^2 + \dot\theta^2 r^2 + \dot\phi^2 r^2 \sin^2\theta\right) \tag{4.2.16}$$
a Hamiltonián (4.0.36)
$$T = \frac{1}{2M}\left(p_r^2 + \frac{1}{r^2}p_\theta^2 + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}p_\phi^2\right)\,. \tag{4.2.17}$$

7. Pro výpočet Laplaceova operátoru použijeme vztah (4.0.33):
$$\begin{aligned}\Delta &= \frac{1}{r^2\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial r}r^2\sin\theta\frac{\partial}{\partial r} + \frac{\partial}{\partial\theta}r^2\sin\theta\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{\partial}{\partial\phi}r^2\sin\theta\frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\\ &= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial}{\partial r} + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\,.\end{aligned} \tag{4.2.18}$$

4.3 Volná rotace axiálně symetrického tělesa

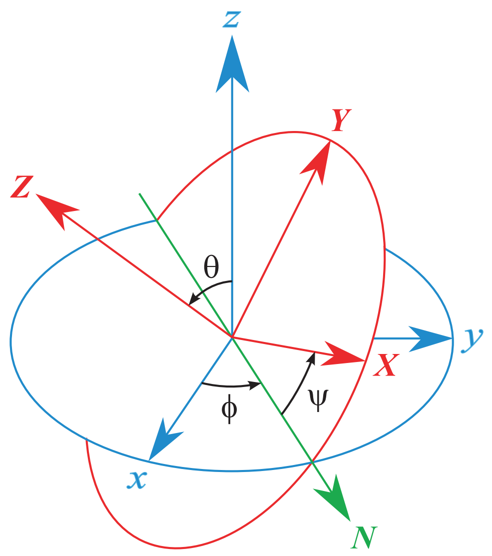
V prostoru volně rotuje axiálně symetrické těleso s momenty setrvačnosti I vůči ose symetrie a J vůči všem ostatním osám kolmým na osu symetrie a procházejícím těžištěm. Natočení tělesa popsáno třemi Eulerovými úhly (ϕ, θ, ψ), přičemž $\phi \in \langle 0; 2\pi)$ se nazývá *precesní úhel* (popisuje otáční osy Z spojené s tělesem vůči ose z pevné v prostoru), $\eta \in \langle 0; \pi)$ je *nutační úhel* (popisuje úhel, který mezi sebou svírají osy Z a z) a $\psi \in \langle 0; 2\pi)$ je *rotační úhel* (popisuje natočení tělesa vůči ose Z), viz obrázek 2[15]. Vektor úhlové rychlosti rotace vzhledem k souřadnému systému spojenému s tělesem je

$$\boldsymbol{\Omega} = \begin{pmatrix}0\\0\\\dot\psi\end{pmatrix} + \underbrace{\mathsf{R}_3(\psi)}_{\begin{pmatrix}\cos\psi & \sin\psi & 0\\ -\sin\psi & \cos\psi & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}\dot\theta\\0\\0\end{pmatrix} + \mathsf{R}_3(\psi)\underbrace{\mathsf{R}_1(\theta)}_{\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & \cos\theta & \sin\theta\\ 0 & -\sin\theta & \cos\theta\end{pmatrix}}\begin{pmatrix}0\\0\\\dot\phi\end{pmatrix}\,, \tag{4.3.1}$$

kde $\mathsf{R}_3(\psi)$ přenese uzlovou přímku, která udává osu otáčení pro úhel θ, na osu X, a $\mathsf{R}_1(\theta)$ natočí osu z podél uzlové přímky do směru osy Z. Rozepsáním dostaneme *Eulerovy kinematické rovnice*
$$\begin{pmatrix}\Omega_1\\\Omega_2\\\Omega_3\end{pmatrix} = \begin{pmatrix}\sin\theta\sin\psi & \cos\psi & 0\\ \sin\theta\cos\psi & -\sin\psi & 0\\ \cos\theta & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\dot\phi\\\dot\theta\\\dot\psi\end{pmatrix}\,. \tag{4.3.2}$$

1. Napište Lagranžián za předpokladu, že osa symetrie tělesa je totožná s osou Z a počátek souřadné soustavy tělesa se nachází v jeho těžišti.

[15] V praxi se souřadné systémy zavádějí tak, že osa Z koinciduje s nějakým směrem významým v tělese, např. s osou symetrie, zatímco osa z koinciduje se směrem významným v prostoru, např. se směrem magnetického pole.



Obrázek 2: Eulerovy úhly. Souřadná soustava (x, y, z) pevná v prostoru (laboratorní soustava) je označena modře, souřadná soustava (X, Y, Z) spojená s tělesem (těžišťová soustava) je označena červeně. Průsečnice rovin (x, y) a (X, Y), tzv. *uzlová přímka*, je označena zeleně.

2. Nalezněte metrický tenzor g, jeho determinant a inverzní metrický tenzor g^{-1}.

3. Určete Laplaceův operátor tohoto systému.

4. Napište Schrödingerovu rovnici pro část závislou na úhlu θ. Využijte toho, že řešení Schrödingerovy rovnice lze separovat užitím substituce

$$u(\phi, \theta, \psi) = f(\theta)\, \mathrm{e}^{i(M\phi + K\psi)}, \tag{4.3.3}$$

kde M, K jsou celá čísla.

Řešení:

1. Pro pohyb volného tělesa je Lagranžián rovný kinetickému členu

$$\begin{aligned} L &= \frac{1}{2} I \Omega_3^2 + \frac{1}{2} J \left(\Omega_1^2 + \Omega_2^2\right) \\ &= \frac{1}{2} I \left(\dot\phi \cos\theta + \dot\psi\right)^2 + \frac{1}{2} J \left[\left(\dot\phi \sin\theta \sin\psi + \dot\theta \cos\psi\right)^2 + \left(\dot\phi \sin\theta \cos\psi + \dot\theta \sin\psi\right)^2\right] \\ &= \frac{1}{2} I \left(\dot\phi \cos\theta + \dot\psi\right)^2 + \frac{1}{2} J \left(\dot\phi^2 \sin^2\theta + \dot\theta^2\right) . \end{aligned} \tag{4.3.4}$$

2. V případě rotace tuhého tělesa, kdy zobecněné hmotnosti (momenty setrvačnosti) mohou být obecně v různých směrech různé, využijeme konvence (4.0.40). V našem případě je $(q^1, q^2, q^3) = (\phi, \theta, \psi)$ a z (4.3.4) vidíme, že

$$\mathsf{g} = \begin{pmatrix} I\cos^2\theta + J\sin^2\theta & 0 & I\cos\theta \\ 0 & J & 0 \\ I\cos\theta & 0 & I \end{pmatrix} , \tag{4.3.5}$$

$$\det g = \left(I\cos^2\theta + J\sin^2\theta\right) JI - JI^2\cos^2\theta = IJ^2\sin^2\theta\,. \tag{4.3.6}$$

K výpočtu inverzního metrického tenzoru využijeme vztahu

$$g^{kl} = (-1)^{k+l} \frac{\det G_{ji}}{\det g}\,, \tag{4.3.7}$$

kde matici $G_{(ji)}$ získáme z matice g vypuštěním j-tého řádku a i-tého sloupce.

$$\mathsf{g}^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{J\sin^2\theta} & 0 & -\frac{\cos\theta}{J\sin^2\theta} \\ 0 & \frac{1}{J} & 0 \\ -\frac{\cos\theta}{J\sin^2\theta} & 0 & \frac{1}{I} + \frac{\cos^2\theta}{J\sin^2\theta} \end{pmatrix}. \tag{4.3.8}$$

3. Laplaceův operátor je podle (4.0.33)

$$\begin{aligned} \Delta = \frac{1}{J\sqrt{I}\sin\theta} \Bigg\{ & \frac{\partial}{\partial\phi} J\sqrt{I}\sin\theta \left(\frac{1}{J\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} - \frac{\cos\theta}{J\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\psi} \right) \\ & + \frac{\partial}{\partial\theta} J\sqrt{I}\sin\theta \frac{1}{J}\frac{\partial}{\partial\theta} \\ & + \frac{\partial}{\partial\psi} J\sqrt{I}\sin\theta \left[-\frac{\cos\theta}{J\sin^2\theta}\frac{\partial}{\partial\phi} + \left(\frac{1}{I} + \frac{\cos^2\theta}{J\sin^2\theta}\right)\frac{\partial}{\partial\psi} \right] \Bigg\} \\ = \frac{1}{J\sin^2\theta} & \left[\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - 2\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\psi} + \left(\frac{J}{I}\sin^2\theta + \cos^2\theta\right)\frac{\partial^2}{\partial\psi^2} \right]. \end{aligned} \tag{4.3.9}$$

4. Schödingerova rovnice pro vlnovou funkci (4.3.3) zní

$$-\frac{\hbar^2}{2}\Delta u(\phi,\theta,\psi) = E u(\phi,\theta,\psi)\,, \tag{4.3.10}$$

$$\begin{aligned} \left[-M^2 + \sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} + 2MK\cos\theta - K^2\left(\frac{J}{I}\sin^2\theta + \cos^2\theta\right) \right] f(\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(M\phi + K\psi)} \\ = -\frac{2J^2\sin^2\theta}{\hbar^2} E f(\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(M\phi+K\psi)} \end{aligned} \tag{4.3.11}$$

Separace na část $f(\theta)$ a exponenciálu v úhlech ϕ a ψ je možná, jelikož Laplaceův operátor závisí na těchto úhlech jen přes derivace. Vlnová funkce musí dávat stejnou hodnotu po zvýšení ϕ a ψ o úhel 2π,

$$\begin{aligned} u(\phi + 2\pi, \theta, \psi) &= u(\phi,\theta,\psi) \\ u(\phi,\theta,\psi + 2\pi) &= u(\phi,\theta,\psi)\,, \end{aligned} \tag{4.3.12}$$

takže $M, K \in$. Dá se nahlédnout, že tato vlastní čísla přísluší operátorům souvisejícím s natočením okolo laboratorní osy z a okolo osy spjaté s tělesem Z:

$$\hat{\mathsf{M}} u(\phi,\theta,\psi) = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\phi} u(\phi,\theta,\psi) = M u(\phi,\theta,\psi)\,, \tag{4.3.13}$$

$$\hat{\mathsf{K}} u(\phi,\theta,\psi) = -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\psi} u(\phi,\theta,\psi) = K u(\phi,\theta,\psi)\,. \tag{4.3.14}$$

Rovnici (4.3.11) převedeme na tvar

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}\theta^2} + \frac{\cos\theta}{\sin\theta}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}\theta} - \frac{(M - K\cos\theta)^2}{\sin^2\theta} f + \sigma f = 0\,, \tag{4.3.15}$$

kde

$$\sigma = \frac{2EJ}{\sin^2\theta} - \frac{J}{I}K^2\,. \tag{4.3.16}$$

V pokračování výpočtu postupujeme podle článku [7]. Zavedeme substituce

$$\begin{aligned}
\lambda_1 &= \frac{1}{2}\,|K+M| & \lambda_2 &= \frac{1}{2}\,|K-M| & \lambda_3 &= \frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4}+\sigma+K^2} \\
\mu_1 &= -\frac{1}{2}\,|K+M| & \mu_2 &= -\frac{1}{2}\,|K-M| & \mu_3 &= \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{1}{4}+\sigma+K^2}
\end{aligned} \tag{4.3.17}$$

$$\begin{aligned}
t &= \frac{1}{2}\,(\cos\theta+1) \\
F(t) &= \frac{f}{t^{\lambda_1}(t-1)^{\lambda_2}}
\end{aligned} \tag{4.3.18}$$

a po dosazení do (4.3.15) dostaneme rovnici pro hypergeometrické funkce

$$t(1-t)\frac{\mathrm{d}^2F}{\mathrm{d}t^2} + [\gamma - (\alpha+\beta+1)t]\,\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} - \alpha\beta F = 0\,, \tag{4.3.19}$$

kde

$$\begin{aligned}
\alpha &= \lambda_1+\lambda_2+\lambda_3 \\
\beta &= \lambda_1+\lambda_2+\mu_3 \\
\gamma &= 2\lambda_1 - 1\,.
\end{aligned} \tag{4.3.20}$$

Řešení s dobrou asymptotikou dostaneme, pokud β je nekladné celé číslo, tj. $j = -\mu_3$ je nezáporné celé číslo. Dostáváme

$$\begin{aligned}
\left(j+\frac{1}{2}\right)^2 &= \frac{1}{4}+\sigma+K^2 \\
j(j+1) &= \sigma + K^2 \\
\sigma &= j(j+1) - K^2\,,
\end{aligned}$$

kde

$$j = (\lambda_1+\lambda_2), (\lambda_1+\lambda_2+1), \ldots\,. \tag{4.3.21}$$

Výsledné řešení včetně podmínek na kvantová čísla j, K, M zní

$$\boxed{E_{jK} = \frac{\hbar^2}{2}\left[\frac{j(j+1)}{J} + K^2\left(\frac{1}{I}-\frac{1}{J}\right)\right]} \qquad j \in {}_0\,, \quad |M| \le j\,, \quad |K| \le j\,. \tag{4.3.22}$$

Poznámka:

Spektrum volného axiálně symetrického tělesa bylo poprvé vyřešeno v práci [7].

Poznámka:

Operátor celkového momentu hybnosti vůči soustavě spojené s tělesem a jeho třetí komponenta jsou dány výrazy

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{P}}^2 &= -\frac{1}{\sin^2\theta}\left[\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - 2\cos\theta\frac{\partial^2}{\partial\phi\partial\psi} + \frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\right] \\
\hat{\mathcal{P}}_3 &= -\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\psi}\,.
\end{aligned} \tag{4.3.23}$$

Srovnáním s (4.3.9) dostaneme

$$\Delta = -\frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{J} - \hat{\mathcal{P}}_3^2\left(\frac{1}{I} - \frac{1}{J}\right) \tag{4.3.24}$$

a Schrödingerova rovnice má tvar

$$\frac{1}{2}\left[\frac{\hat{\mathcal{P}}^2}{J} - \hat{\mathcal{P}}_3^2\left(\frac{1}{I} - \frac{1}{J}\right)\right]u(\phi,\theta,\psi) = Eu(\phi,\theta,\psi)\,. \tag{4.3.25}$$

Vlastní funkce operátoru $\hat{\mathcal{P}}^2$ jsou komplexně sdružené Wignerovy D-funkce[16]

$$\hat{\mathcal{P}}^2 D^{j*}_{MK}(\phi,\theta,\psi) = \hbar^2 j(j+1) D^{j*}_{MK}(\phi,\theta,\psi) \tag{4.3.28}$$

a působení $\hat{\mathcal{P}}_3$ na D-funkce je dáno výrazem

$$\hat{\mathcal{P}}_3 D^{j*}_{MK}(\phi,\theta,\psi) = K D^{j*}_{MK}(\phi,\theta,\psi)\,. \tag{4.3.29}$$

Po dosazení do (4.3.25) dostaneme spektrum (4.3.22) a jako vlastní funkce komplexně sdružené Wignerovy D-funkce

$$u_{jMK}(\phi,\theta,\psi) = D^{j*}_{MK}(\phi,\theta,\psi)\,. \tag{4.3.30}$$

Poznámka:

Spektrum tuhého tělesa lze „uhodnout“ na pár řádcích. Hamiltonián tuhého tělesa se dá napsat jako

$$\begin{aligned}
\hat{\mathsf{H}} &= \frac{1}{2J}\left(\hat{\mathcal{P}}_x^2 + \hat{\mathcal{P}}_y^2\right) + \frac{1}{2I}\hat{\mathcal{P}}_z^2 \\
&= \frac{1}{2J}\left(\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}^2 - \hat{\mathcal{P}}_z^2\right) + \frac{1}{2I}\hat{\mathcal{P}}_z^2 \\
&= \frac{1}{2J}\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}}^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{1}{I} - \frac{1}{J}\right)\hat{\mathcal{P}}_z^2\,,
\end{aligned} \tag{4.3.31}$$

[16] Wignerovy D-funkce (D-matice) jsou maticové elementy operátoru rotace

$$\hat{\mathcal{R}}(\phi,\theta,\psi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\psi\hat{\mathsf{J}}_3}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta\hat{\mathsf{J}}_2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi\hat{\mathsf{J}}_3} \tag{4.3.26}$$

mezi vlastními stavy $|jM\rangle$ operátoru impulsmomentu a jeho třetí komponenty

$$\begin{aligned}
\hat{\mathsf{J}}^2\,|jM\rangle &= j(j+1)\,|jM\rangle \\
\hat{\mathsf{J}}_3\,|jM\rangle &= M\,|jM\rangle
\end{aligned}$$

$$D^j_{MK}(\phi,\theta,\psi) \equiv \left\langle jM\middle|\hat{\mathcal{R}}(\phi,\theta,\psi)\middle|jK\right\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}M\psi}\,d^j_{MK}(\theta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}K\phi}\,. \tag{4.3.27}$$

kde $\hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}} = \left(\hat{\mathcal{P}}_x, \hat{\mathcal{P}}_y, \hat{\mathcal{P}}_z\right)$ je operátor vektoru momentu hybnosti. Pokud předpokládáme, že jeho vlastní vektory jsou

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{\mathcal{P}}} \left| jK \right\rangle &= \hbar^2 j(j+1) \left| jK \right\rangle \ , \\ \hat{\mathcal{P}}_z \left| jK \right\rangle &= \hbar K \left| jK \right\rangle \ , \end{aligned} \tag{4.3.32}$$

dostaneme výraz (4.3.22).