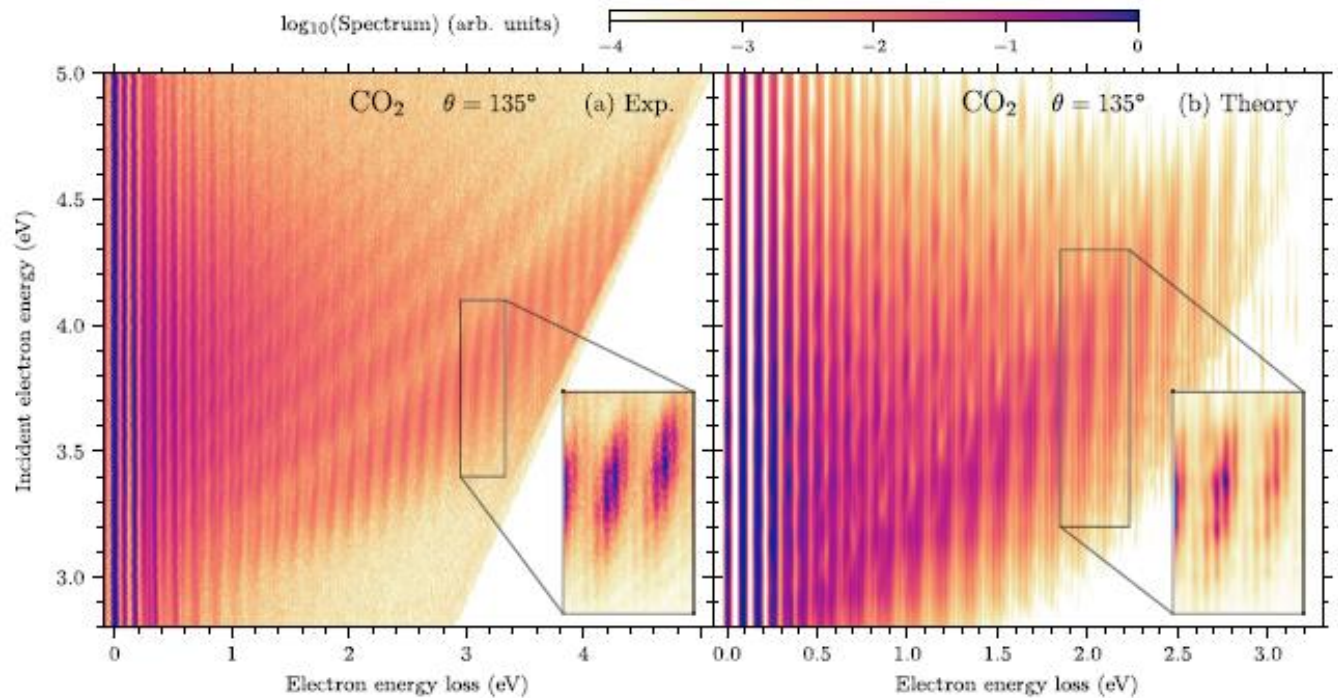
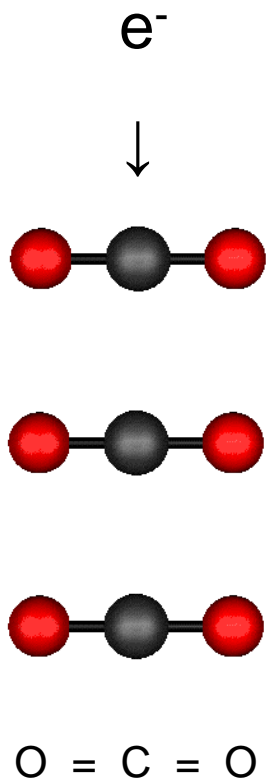


Čím se zabývá kvantový fyzik?

Karel Houfek

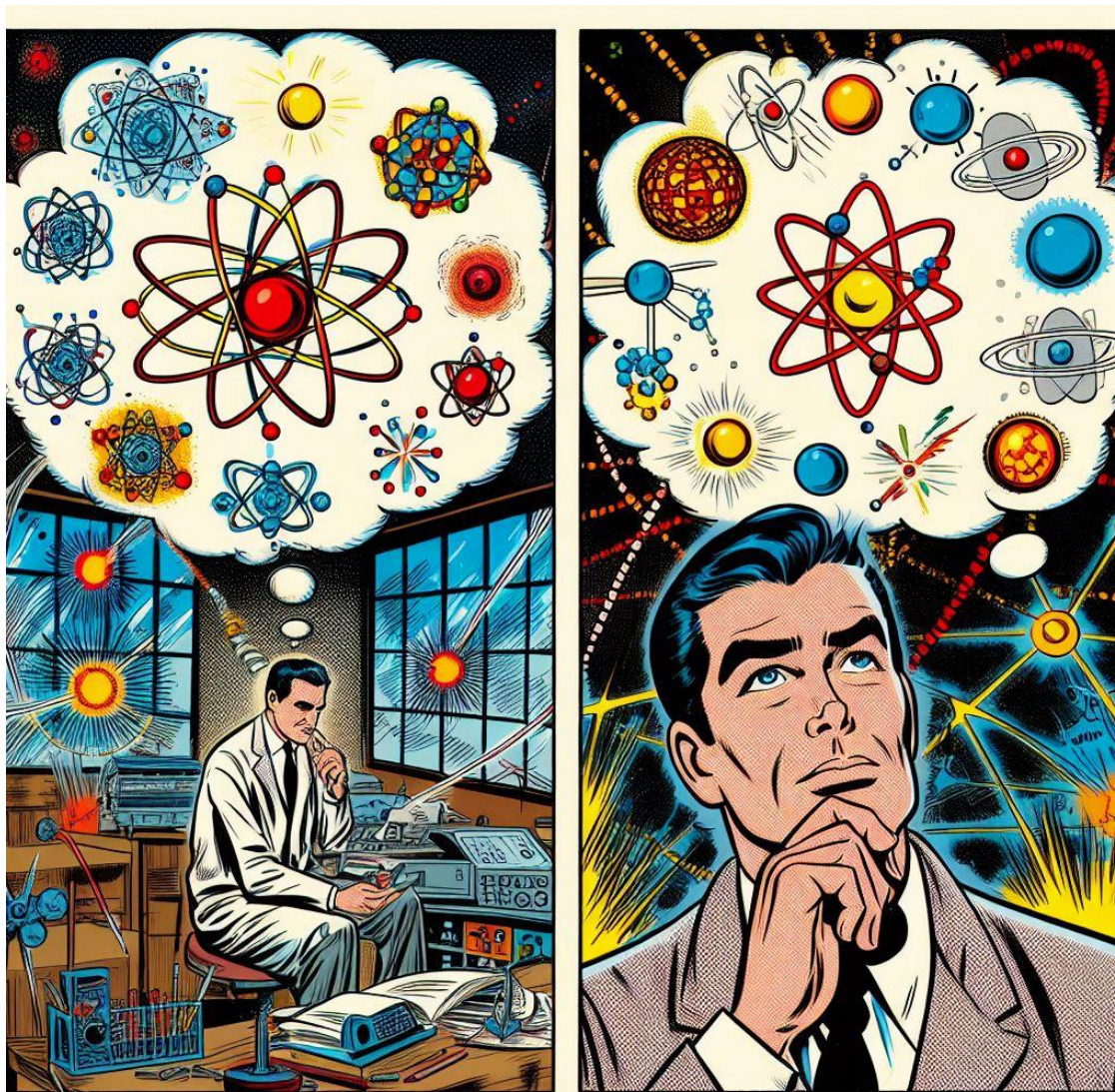
Ústav teoretické fyziky

MFF UK



DALL-E kreslí komiks

Kvantový fyzik přemýšlející nad atomy a molekulami

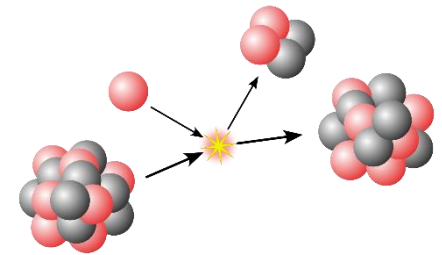
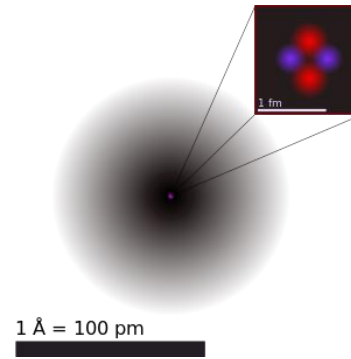
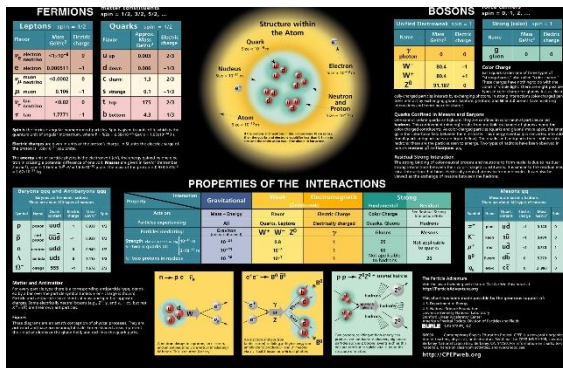


Kdy je nutné používat kvantovou fyziku?

elementární částice
→ kvantová teorie pole

elektromagnetické, silné
a slabé interakce

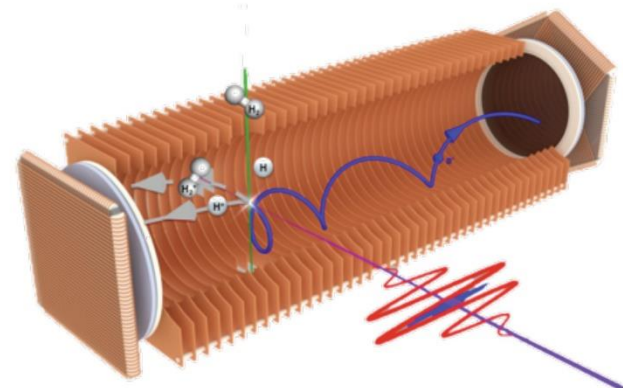
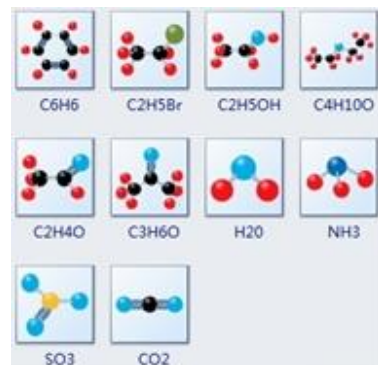
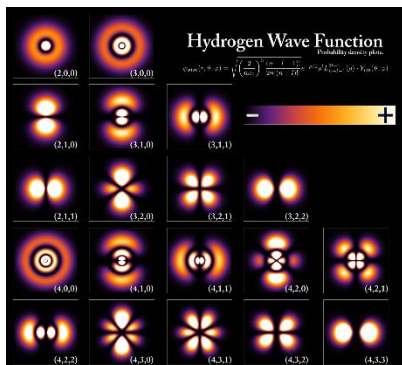
jádra atomů a jejich reakce
→ jaderná fyzika



struktura atomů, molekul, ...
→ kvantová chemie

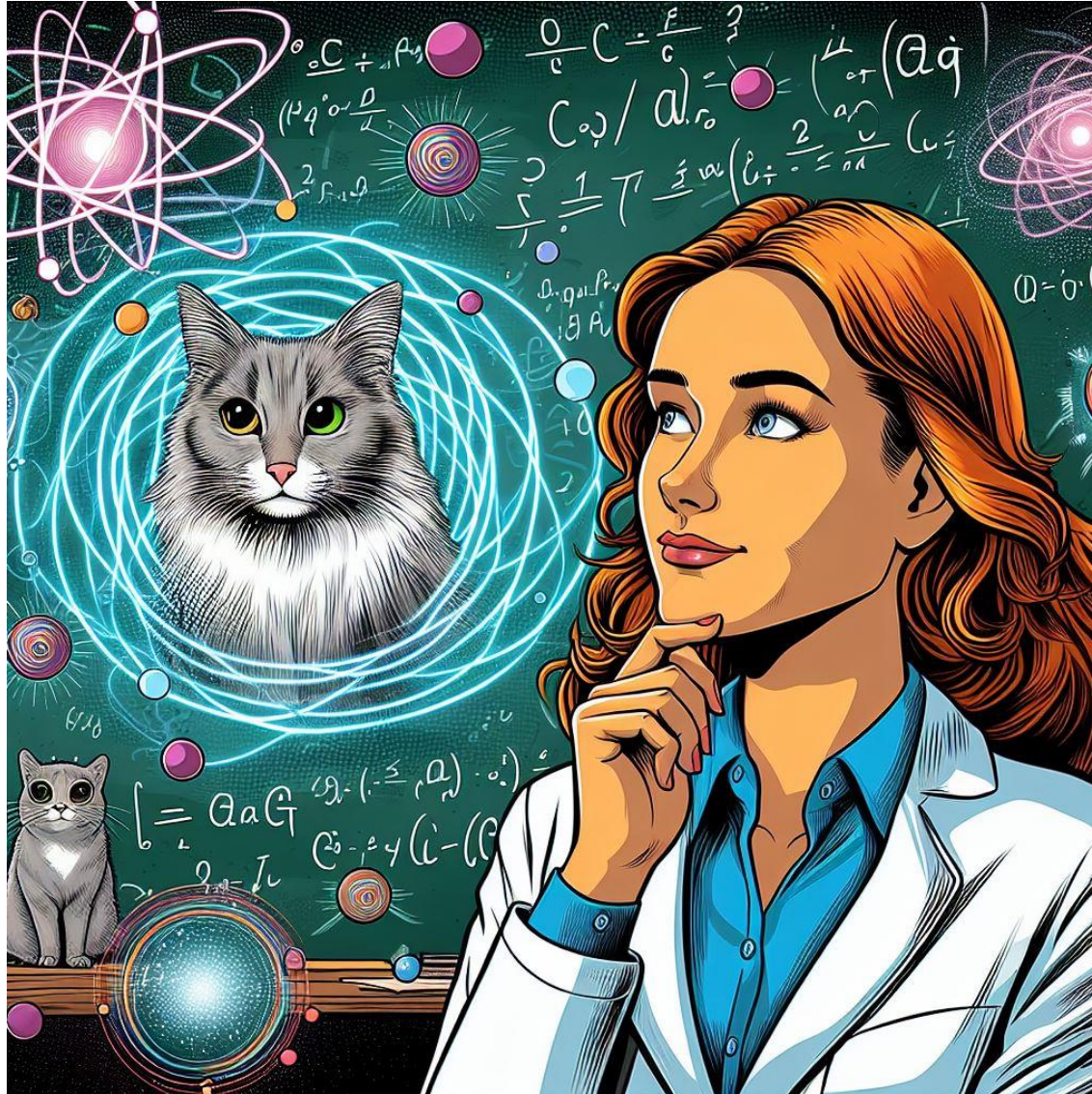
elektromagnetické
interakce

chemické a fotochemické reakce
→ kvantová teorie rozptylu



DALL-E kreslí komiks

Kvantová fyzika v kvantovém světě



Čím se zabýváme a proč?

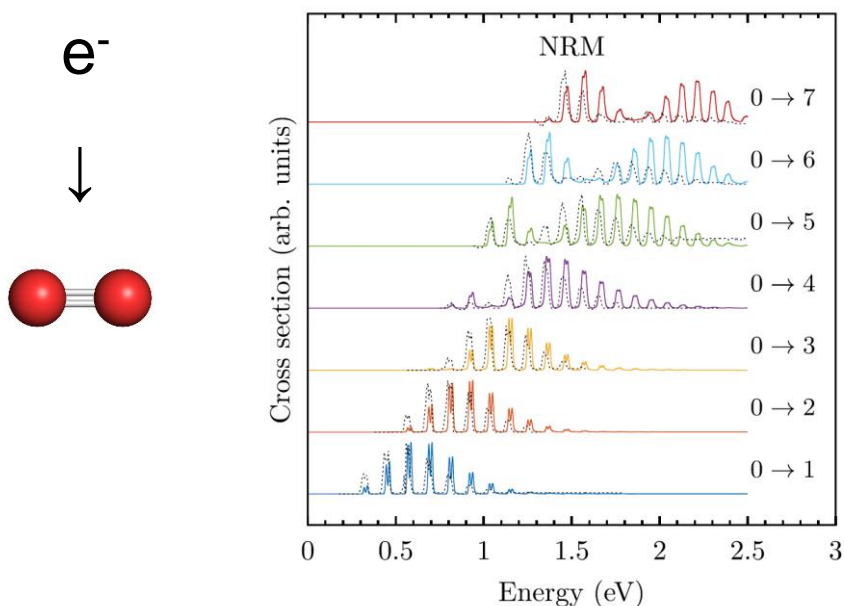
rezonanční **srážky elektronů** s atomy a **molekulami** – energie do 10 eV



- důležité procesy – průchod ionizujícího záření hmotou, chemie raného Vesmíru atd.
- **pochopení dynamiky** těchto procesů a **interpretace nových experimentů**
- **nedostatek přesných dat** pro modelování např. ve fyzice plazmatu a v astrofyzice
- baví nás to 😊

porovnání experimentu s teorií

srážky elektronů s molekulou kyslíku O₂



produkce dat např. pro ITER

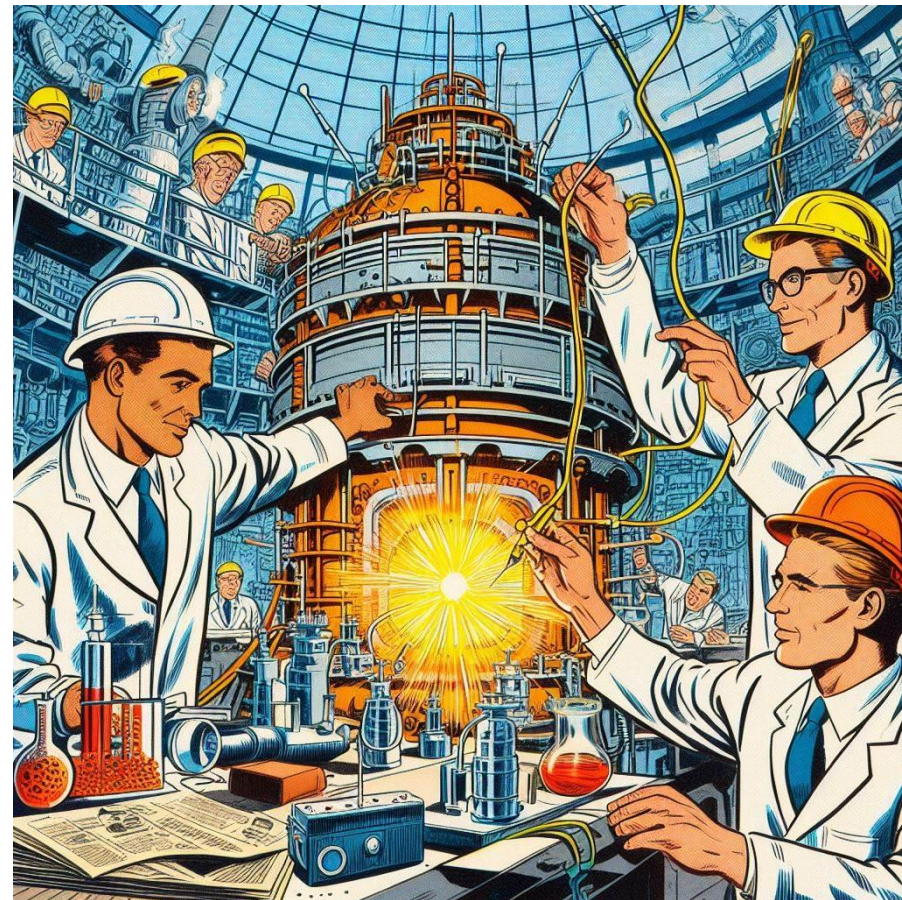
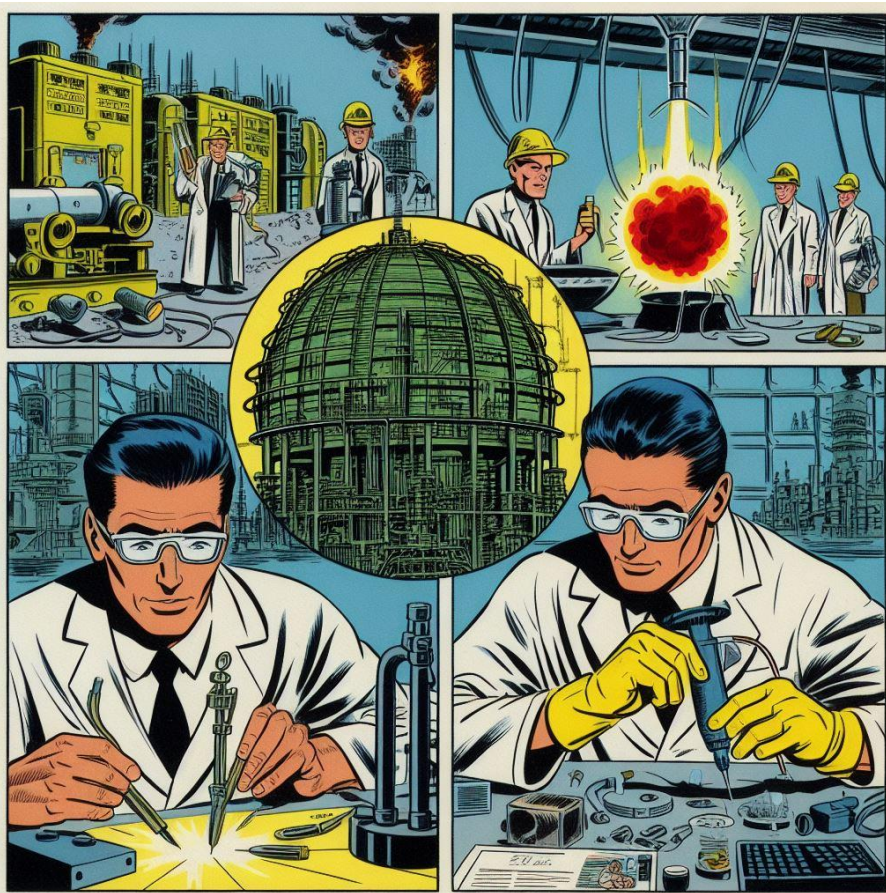
Mezinárodní termonukleární experimentální reaktor



výstavba komplexu ve francouzském Cadarache již od 2007

DALL-E kreslí komiks

Fyzici stavějí termonukleární reaktor



Co se měří při srážkách?

obvykle **účinný průřez σ** – jednotka m^2 nebo spíše něco mnohem menšího jako průřez atomu

počet určitých srážek za sekundu =

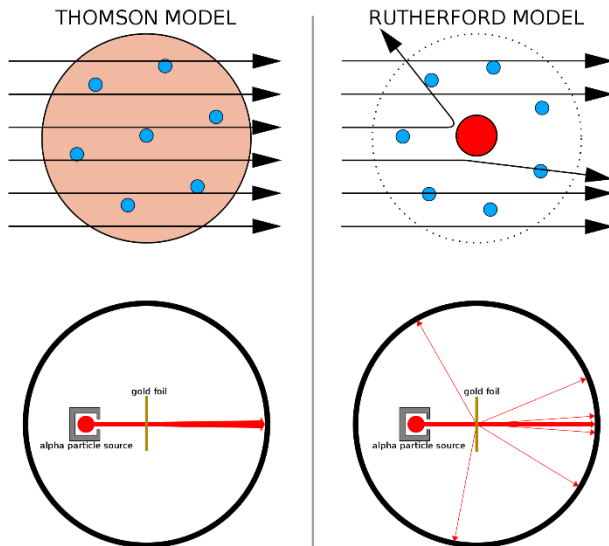
$$\sigma \times \text{počet částic v terčičku} \times \text{počet nalétávajících částic na } m^2 \text{ za sekundu}$$

závisí na kolizní energii (rychlosti) srážejících se částic, atomů apod.

závislost na úhlu, pod kterým částice vylétají → diferenciální účinný průřez

Rutherfordův rozptyl

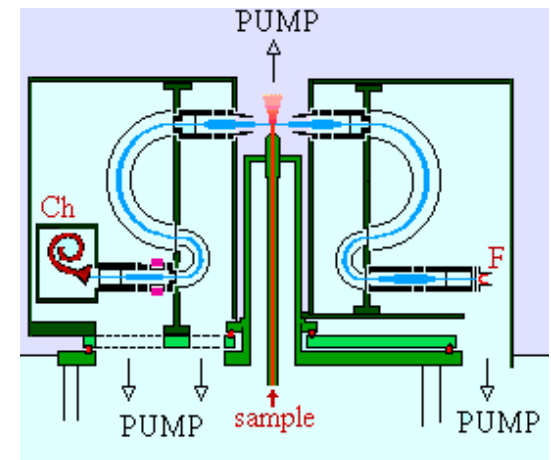
objev atomového jádra



Srážky elektronů s molekulami

experiment Michaela Allana ve Švýcarsku

nyní v Praze na Heyrovského ústavu AV ČR



Co se měří při srážkách?

obvykle **účinný průřez σ** – jednotka m^2 nebo spíše něco mnohem menšího jako průřez atomu

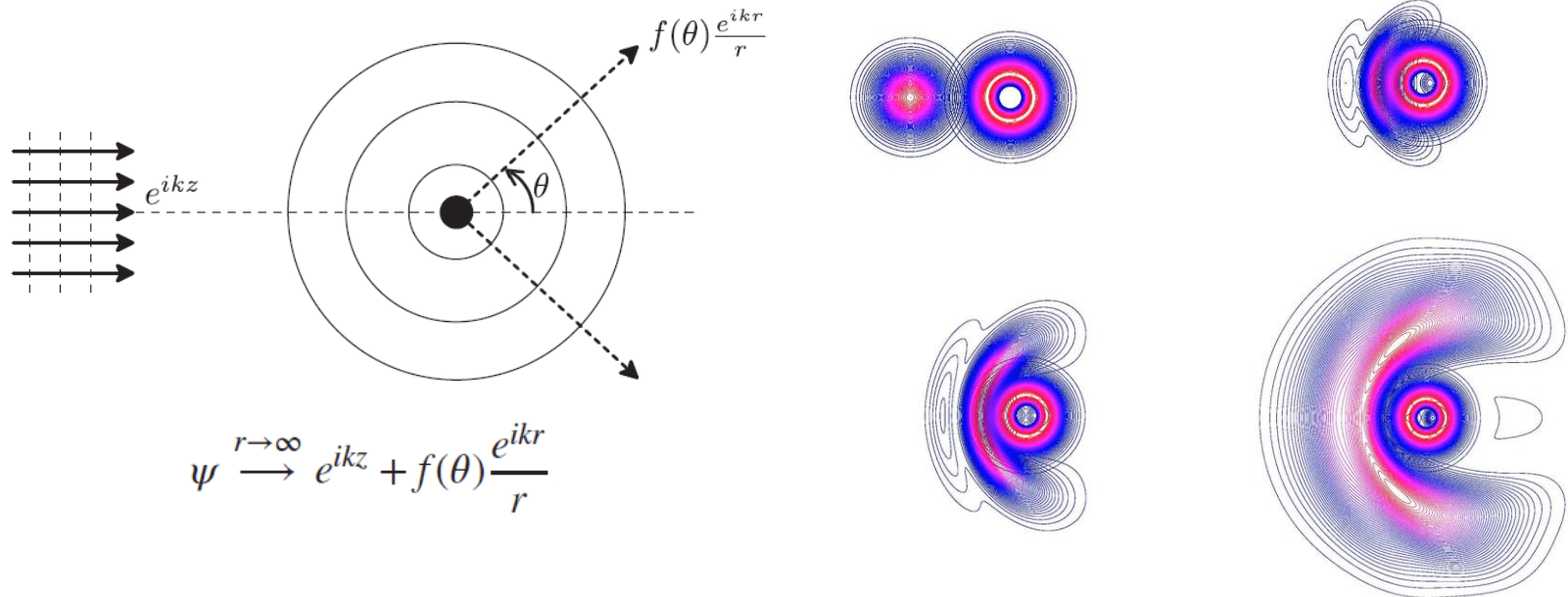
počet určitých srážek za sekundu =

σ x počet částic v terčiku x počet nalétávajících částic na m^2 za sekundu

závisí na kolizní energii (rychlosti) srážejících se částic, atomů apod.

závislost na úhlu, pod kterým částice vylétají → diferenciální účinný průřez

Účinný průřez lze spočítat v kvantové mechanice pomocí rozptýlené vlnové funkce



Co se měří při srážkách?

obvykle **účinný průřez σ** – jednotka m^2 nebo spíše něco mnohem menšího jako průřez atomu

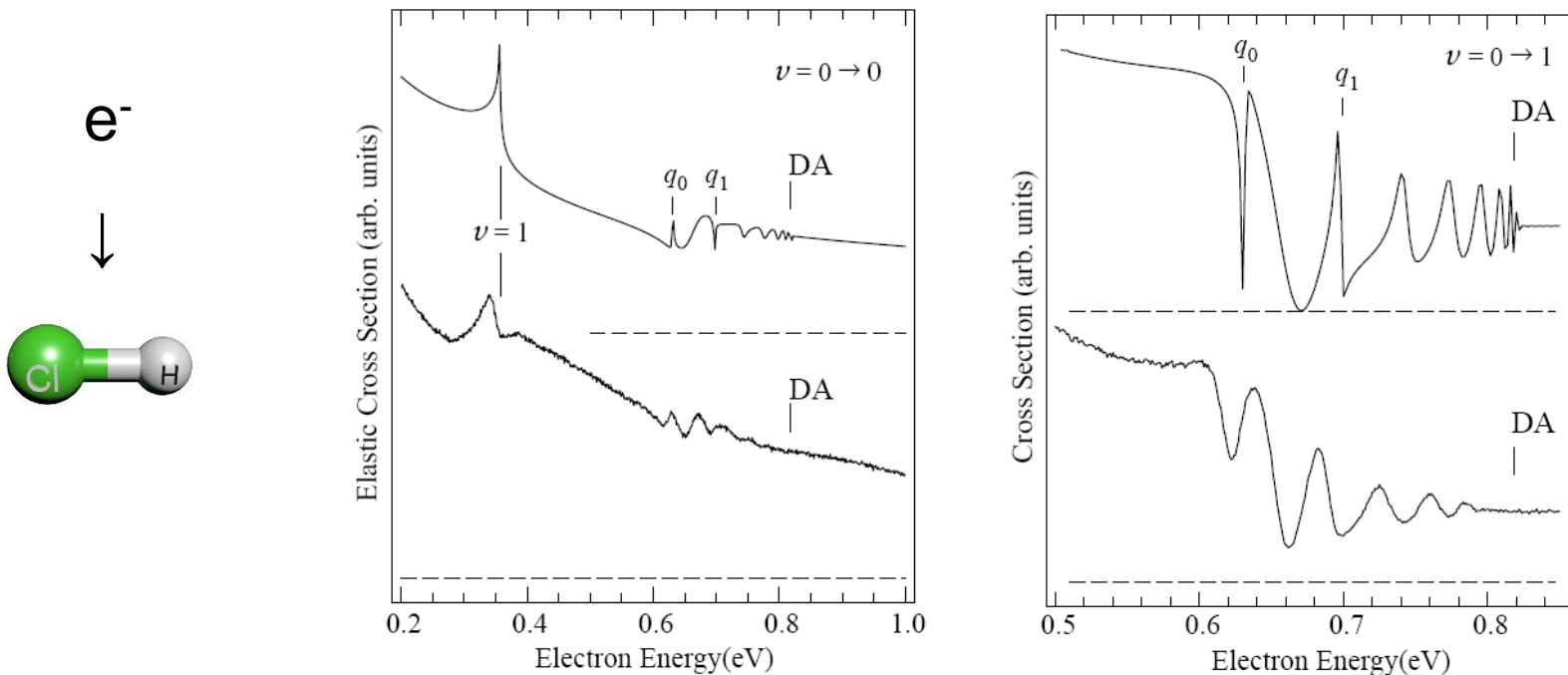
počet určitých srážek za sekundu =

$$\sigma \times \text{počet částic v terčiku} \times \text{počet nalétávajících částic na } m^2 \text{ za sekundu}$$

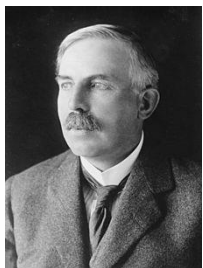
závisí na kolizní energii (rychlosti) srážejících se částic, atomů apod.

závislost na úhlu, pod kterým částice vylétají → diferenciální účinný průřez

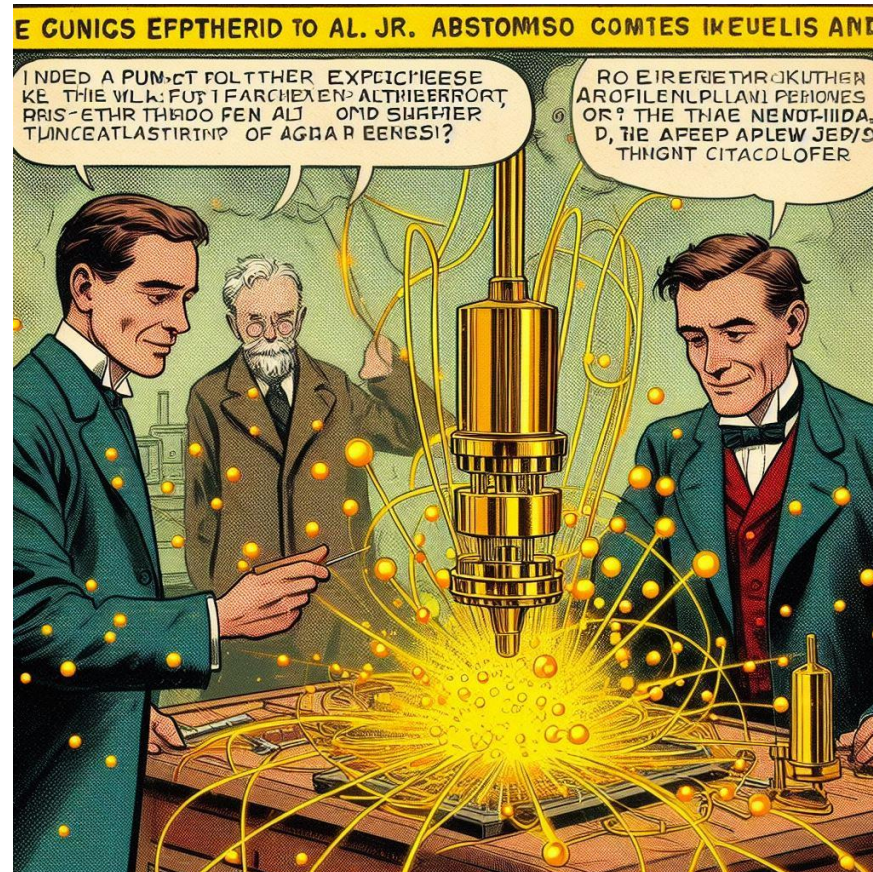
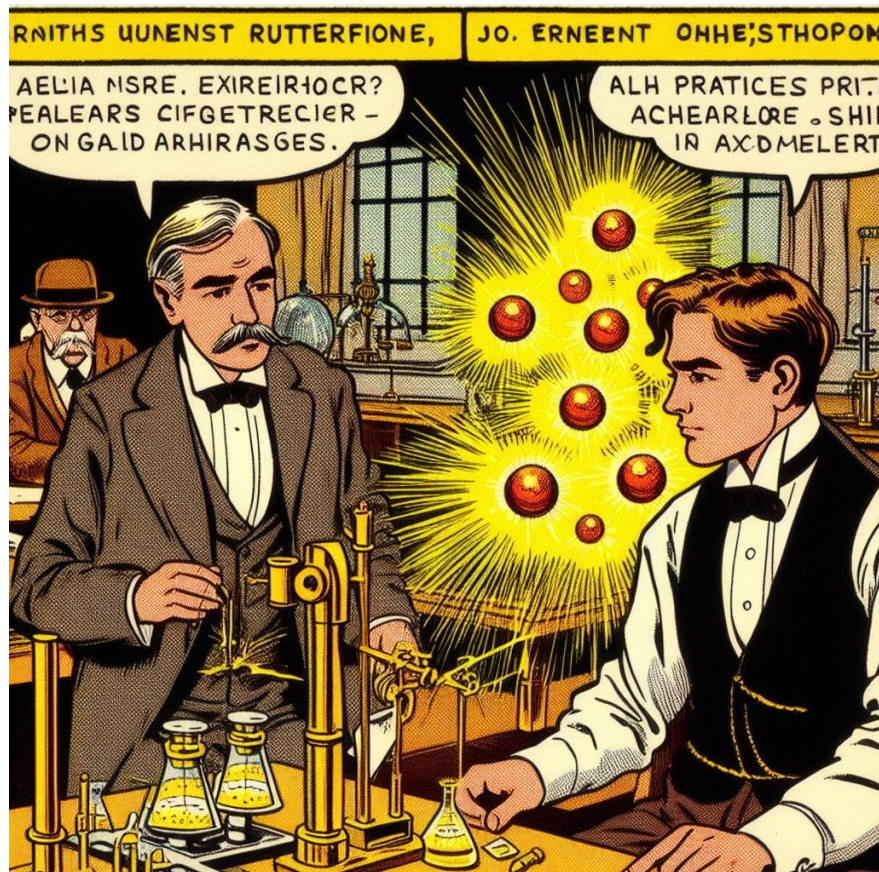
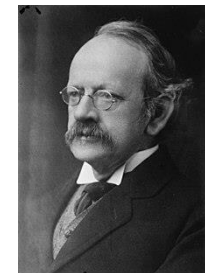
ukázka: vibrační excitace molekuly HCl dopadem elektronu – $e + \text{HCl}(v_i) \rightarrow e + \text{HCl}(v_f)$



DALL-E kreslí komiks



Ernest Rutherford předvádí J.J. Thompsonovi svůj experiment,
kde se částice alfa rozptylují na zlaté folii



Výpočty v kvantové mechanice

Schrödingerova rovnice pro vlnovou funkci

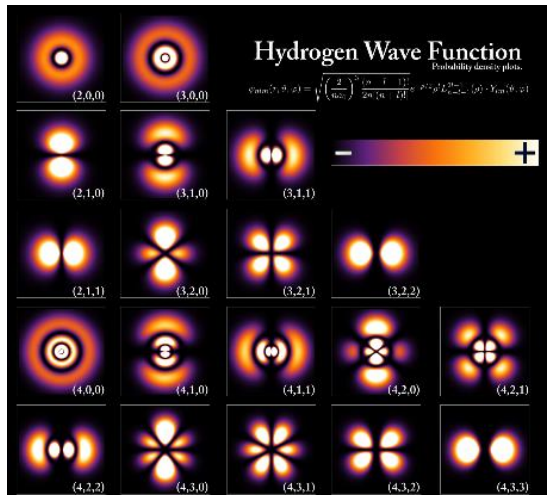
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H\Psi(t) \quad \text{nebo} \quad H\Psi = E\Psi$$

H (tzv. hamiltonián) je **operátorem energie** systému, typicky součet celkové kinetické a potenciální energie

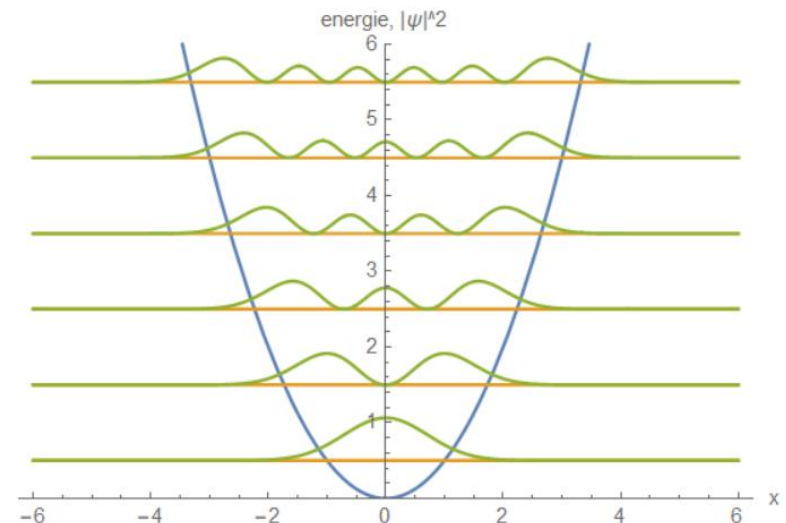
$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x) \rightarrow H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(x)$$

Jen několik systémů lze řešit pomocí jednoduchých funkcí, například:

atom vodíku



harmonický oscilátor



obecně → **numerické řešení pomocí počítačů**

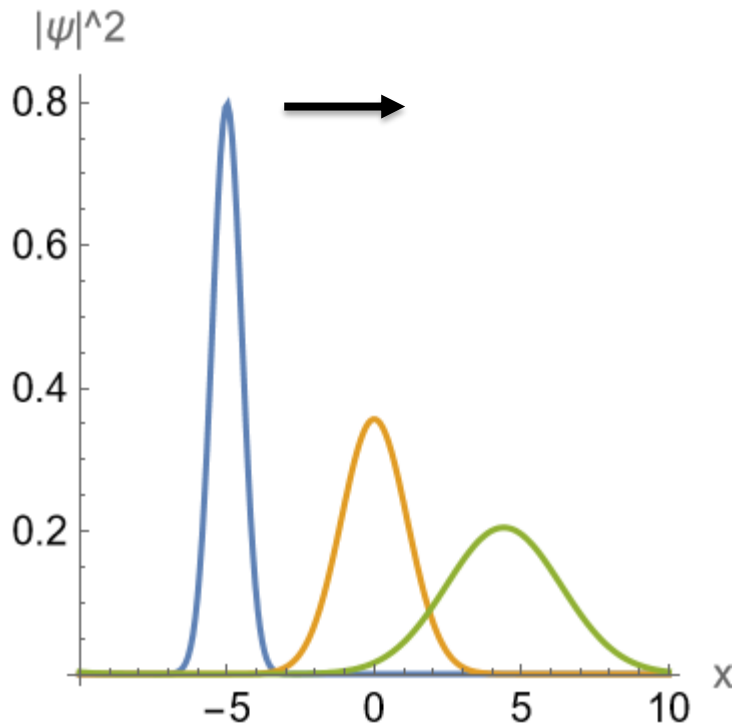
Ukázka numerického řešení

časový vývoj vlnového balíku – řešení 1D Schrödingerovy rovnice

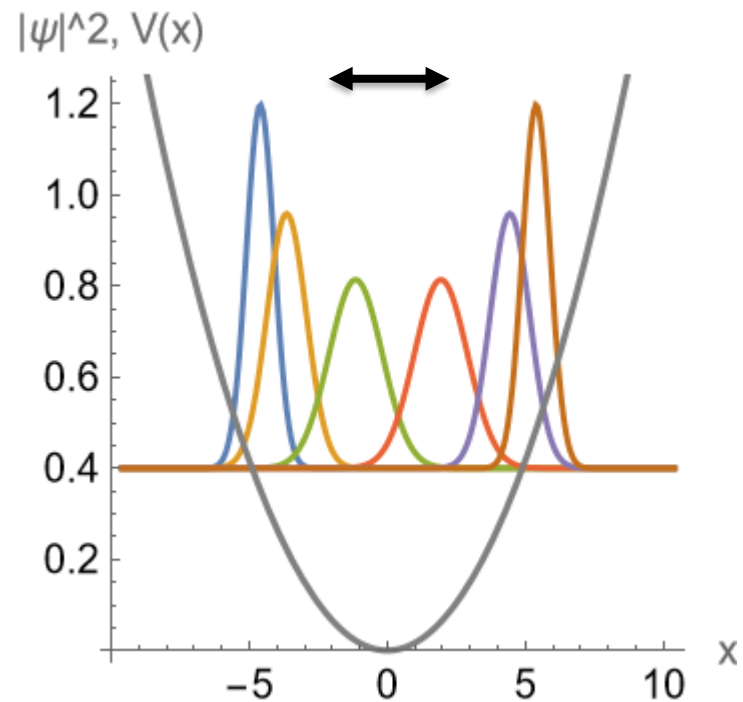
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t)$$

např. pomocí rychlé Fourierovy transformace (FFT), konečných prvků, rozvoje do báze atd.

volná částice



harmonický oscilátor



Ukázka numerického řešení

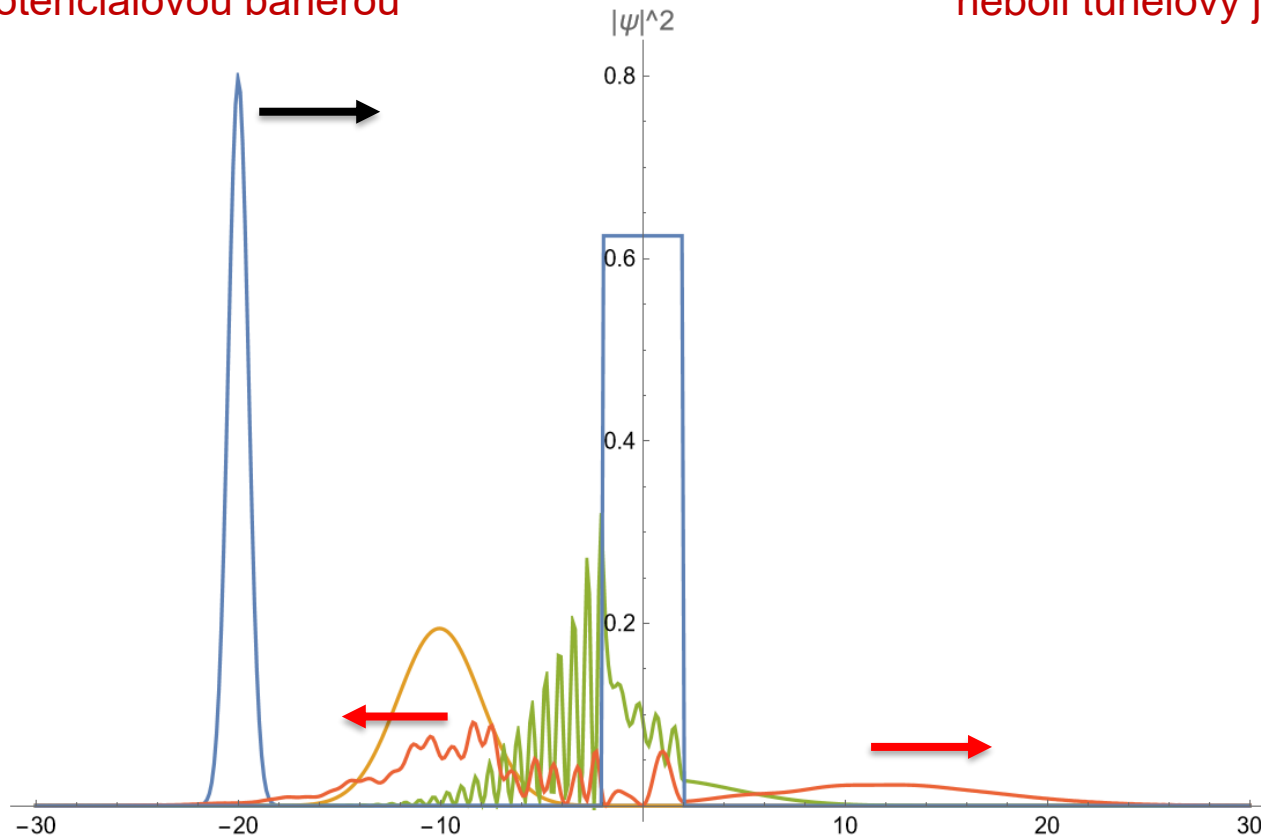
časový vývoj vlnového balíku – řešení 1D Schrödingerovy rovnice

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t)$$

např. pomocí rychlé Fourierovy transformace (FFT), konečných prvků, rozvoje do báze atd.

průchod potenciálovou bariérou

neboli tunelový jev



DALL-E kreslí komiks

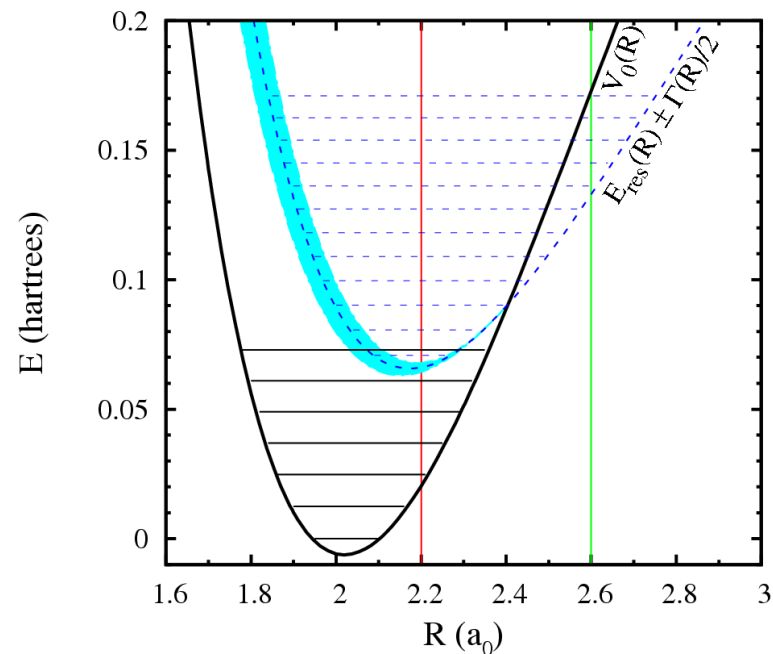
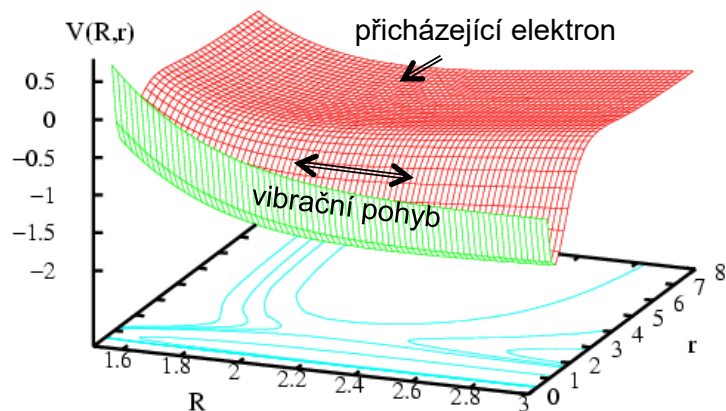
Kvantový fyzik se snaží prorazit potenciálovou bariéru vlnovou funkcí



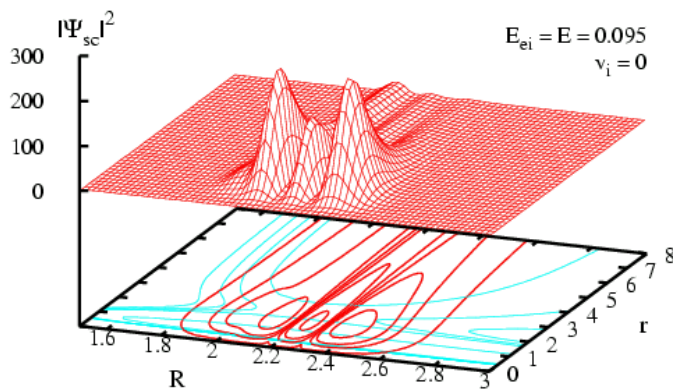
Ukázka numerického řešení 2D problému

příklad: model pro srážku elektron + N₂

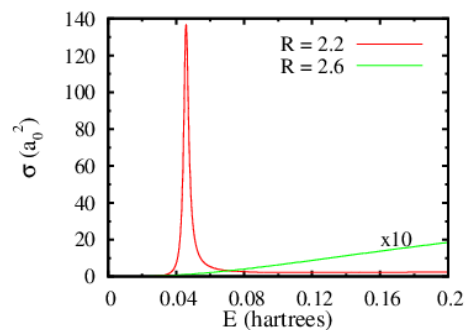
$$H = -\frac{1}{2\mu} \frac{d^2}{dR^2} + V_0(R) - \frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} + \frac{l(l+1)}{2r^2} + V_{\text{int}}(R, r)$$



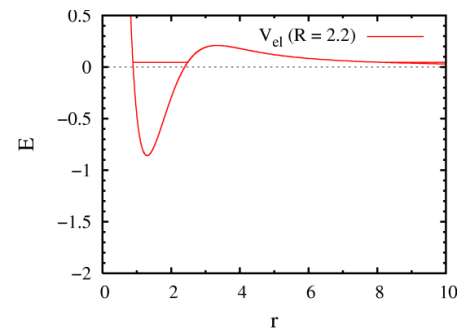
časově nezávislé řešení při určité energii



Účinný průřez



poloha a šířka rezonance



Jak náročné jsou numerické výpočty pro více částic?

Klasická mechanika:

$$\vec{r}_1(t), \vec{p}_1(t), \vec{r}_2(t), \vec{p}_2(t), \dots, \vec{r}_N(t), \vec{p}_N(t)$$

Počet částic	Počet proměnných
--------------	------------------

N= 1	6
------	---

2	12
---	----

3	18
---	----

100	600
-----	-----

Kvantová mechanika:

$$\Psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \dots, \vec{r}_N, t)$$

Počet částic	Počet proměnných (100 bodů v 1D)
--------------	-------------------------------------

N= 1	10^6 (10^2)
------	-------------------

2	10^{12} (10^2)
---	----------------------

3	10^{18} (10^6)
---	----------------------

100	10^{600}
-----	------------

„Jednoduchý“ problém: $e^- + H_2 \rightarrow N = 5 \rightarrow 10^{30}(10^{18}) \rightarrow$ **nelze použít hrubou sílu**

pro srovnání: počet atomů v počítači (včetně krabice) je řádově 10^{25}

Jak tedy můžeme něco reálně spočítat?

Použití aproximací, např. Bornova-Oppenheimerova

1) řešení elektronového problému – kvantová chemie

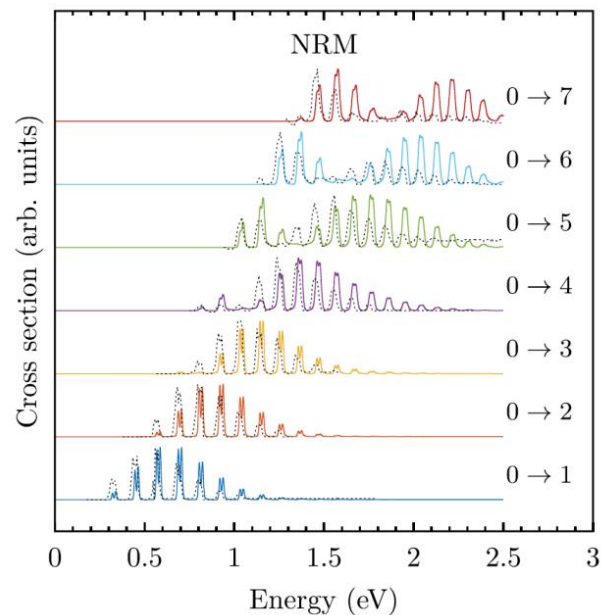
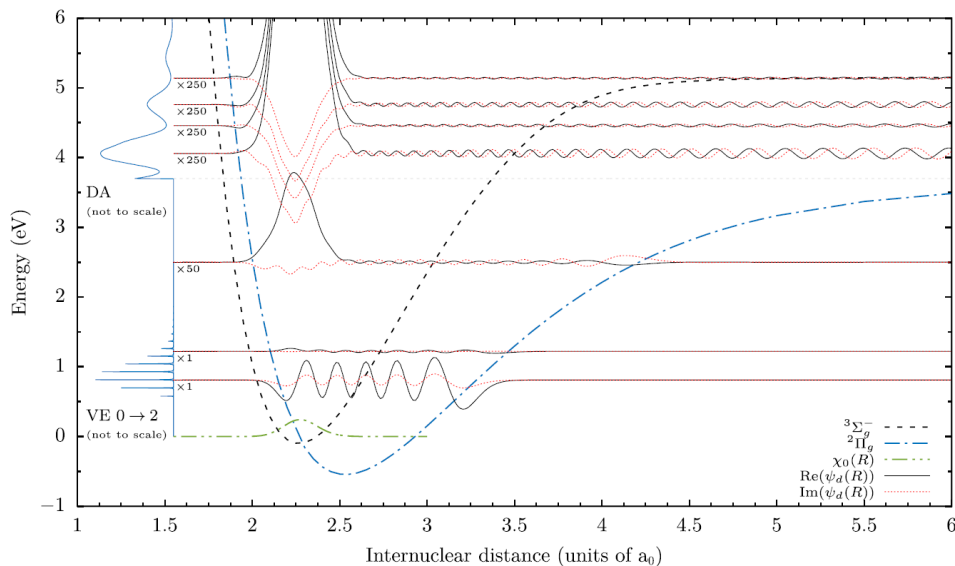
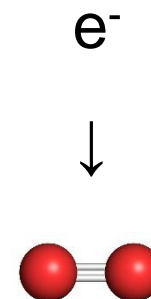
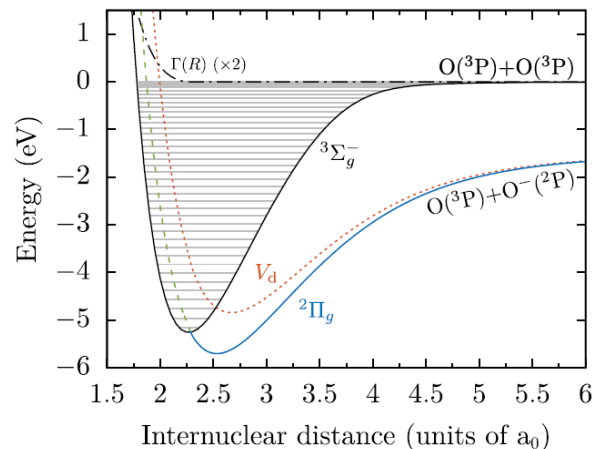
- velké výpočty na klastrech počítačů kvůli dostatečné přesnosti
- **hodiny** pro dvouatomové molekuly, **měsíce** pro tříatomové

2) řešení pohybu jader – výpočet účinných průřezů

- lze občas aproximovat klasickým pohybem
- **minuty** pro dvouatomové molekuly, **dny** pro tříatomové

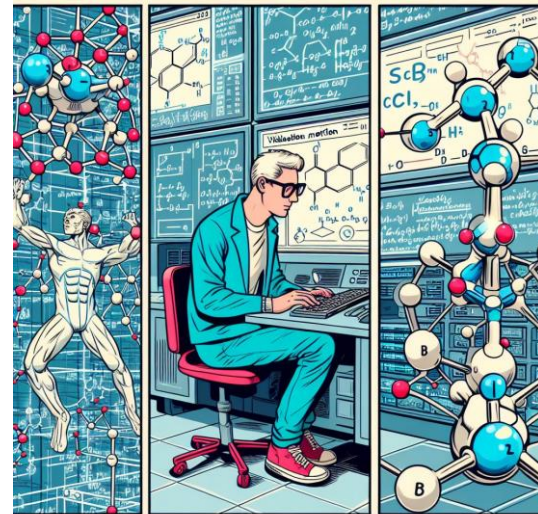
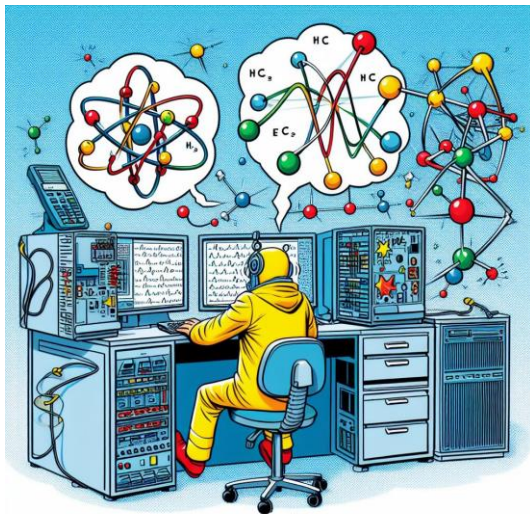
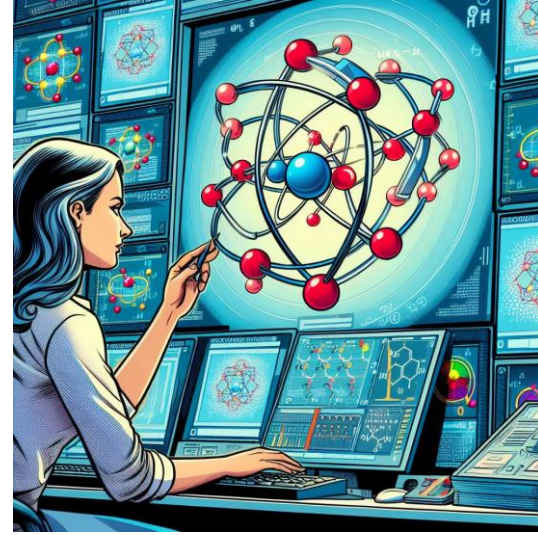
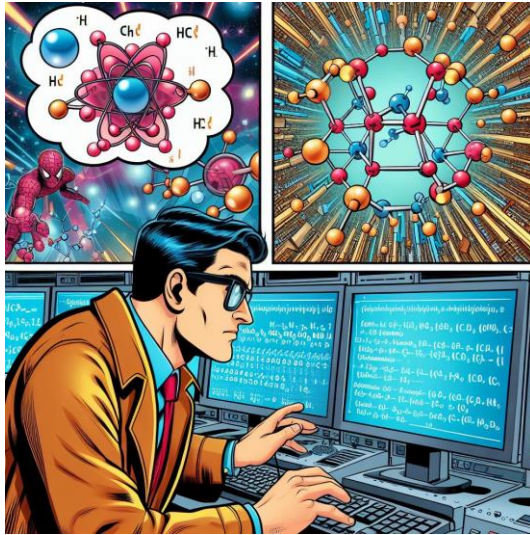
3) analýza dat a interpretace účinných průřezů

příklad: elektron + O₂



DALL-E kreslí komiks

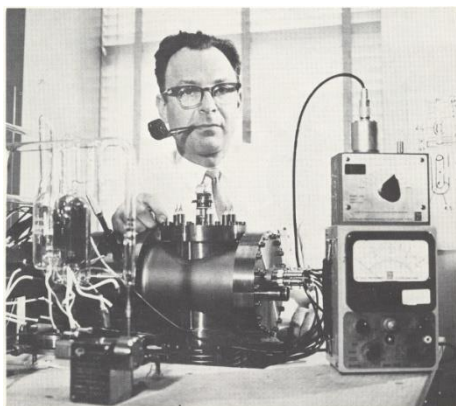
Kvantový fyzik řeší vibrační pohyb molekuly HCl na superpočítači



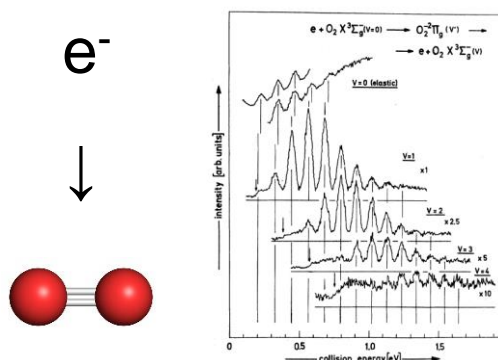
Rezonanční srážky elektronů s molekulami

trocha historie aneb česká stopa

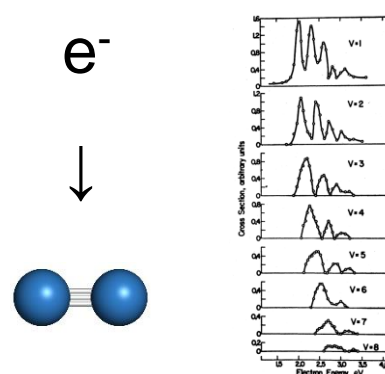
George Jiří Schulz – první přesné experimenty v 50. a 60. letech motivovaly další fyziky



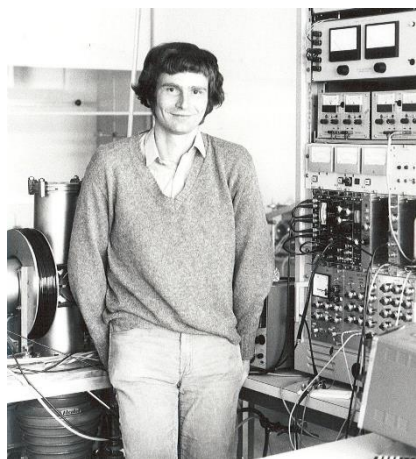
elektron + O₂



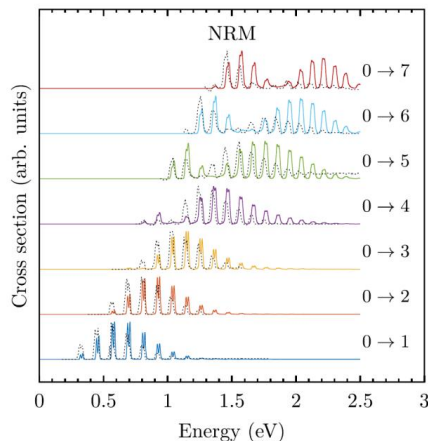
elektron + N₂



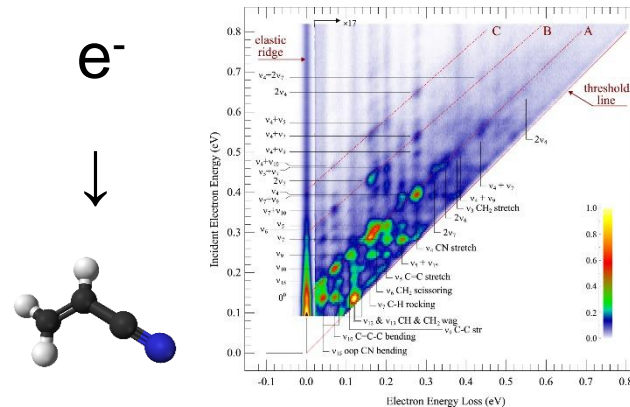
Michael Allan – žák G. J. Schulze, nejpřesnější experimenty do současnosti



elektron + O₂



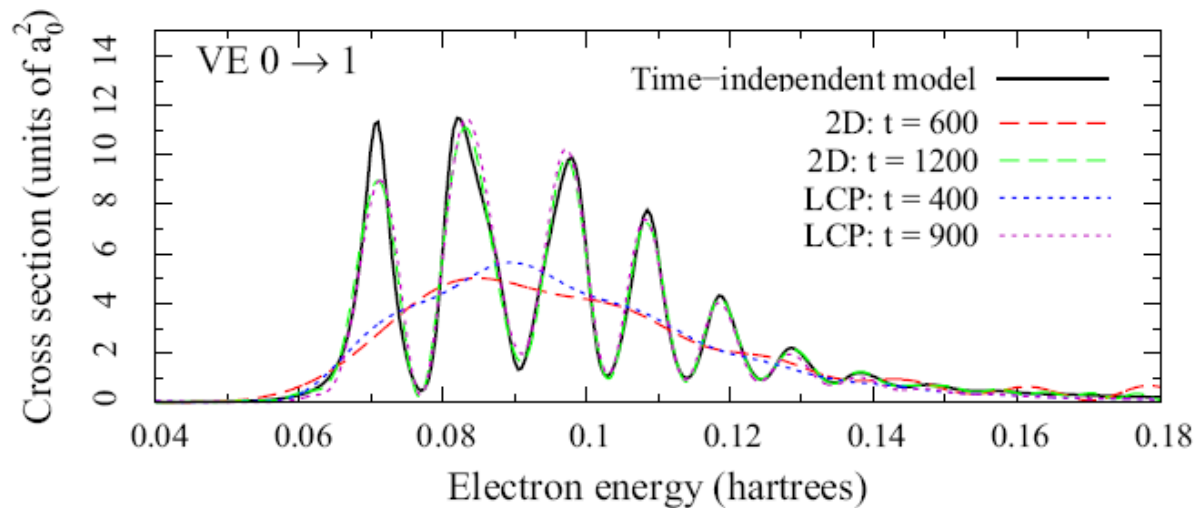
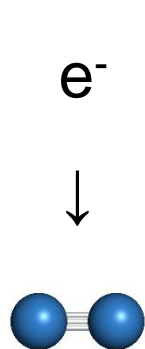
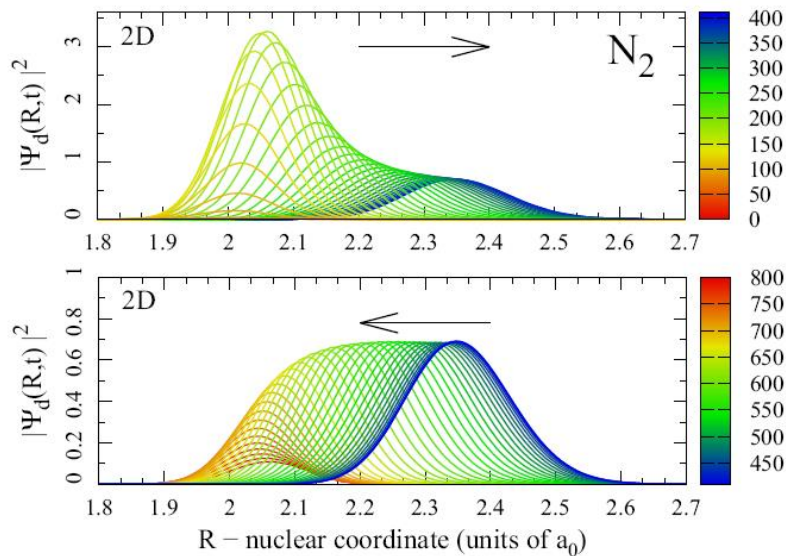
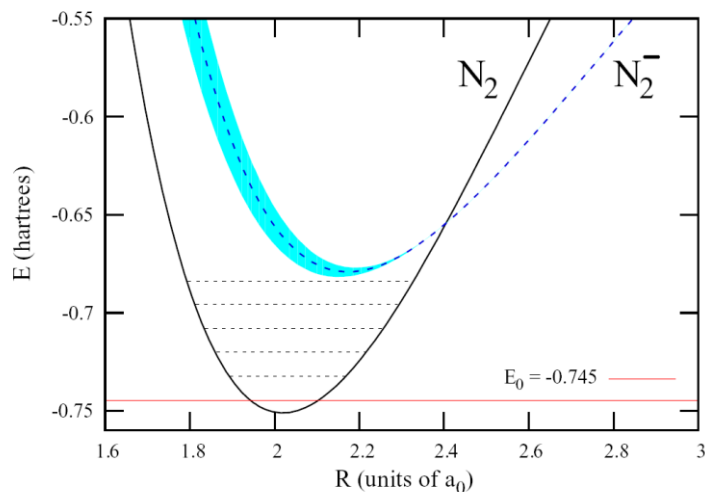
elektron + akrylonitril



Rezonanční srážky elektronů s molekulami

porozumění účinným průřezům aneb proč dochází k interferenci

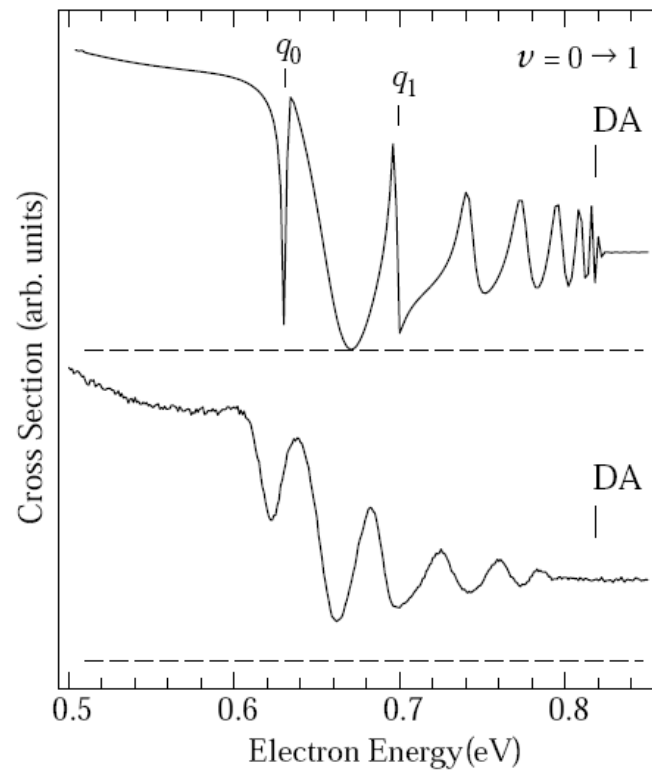
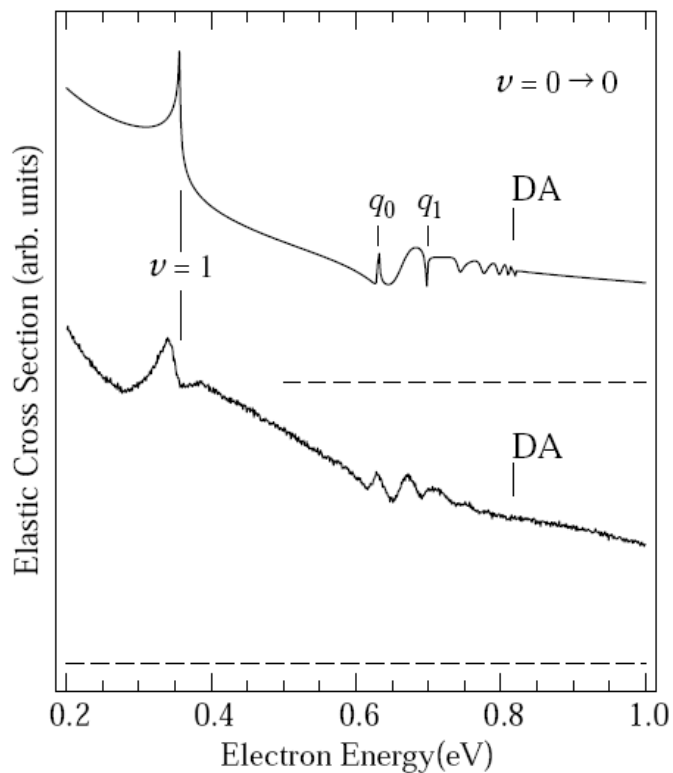
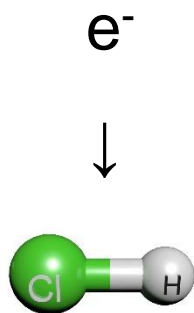
vibrační excitace při srážce elektronu s N_2



Rezonanční srážky elektronů s molekulami

porozumění účinným průřezům aneb souhra teorie a experimentu

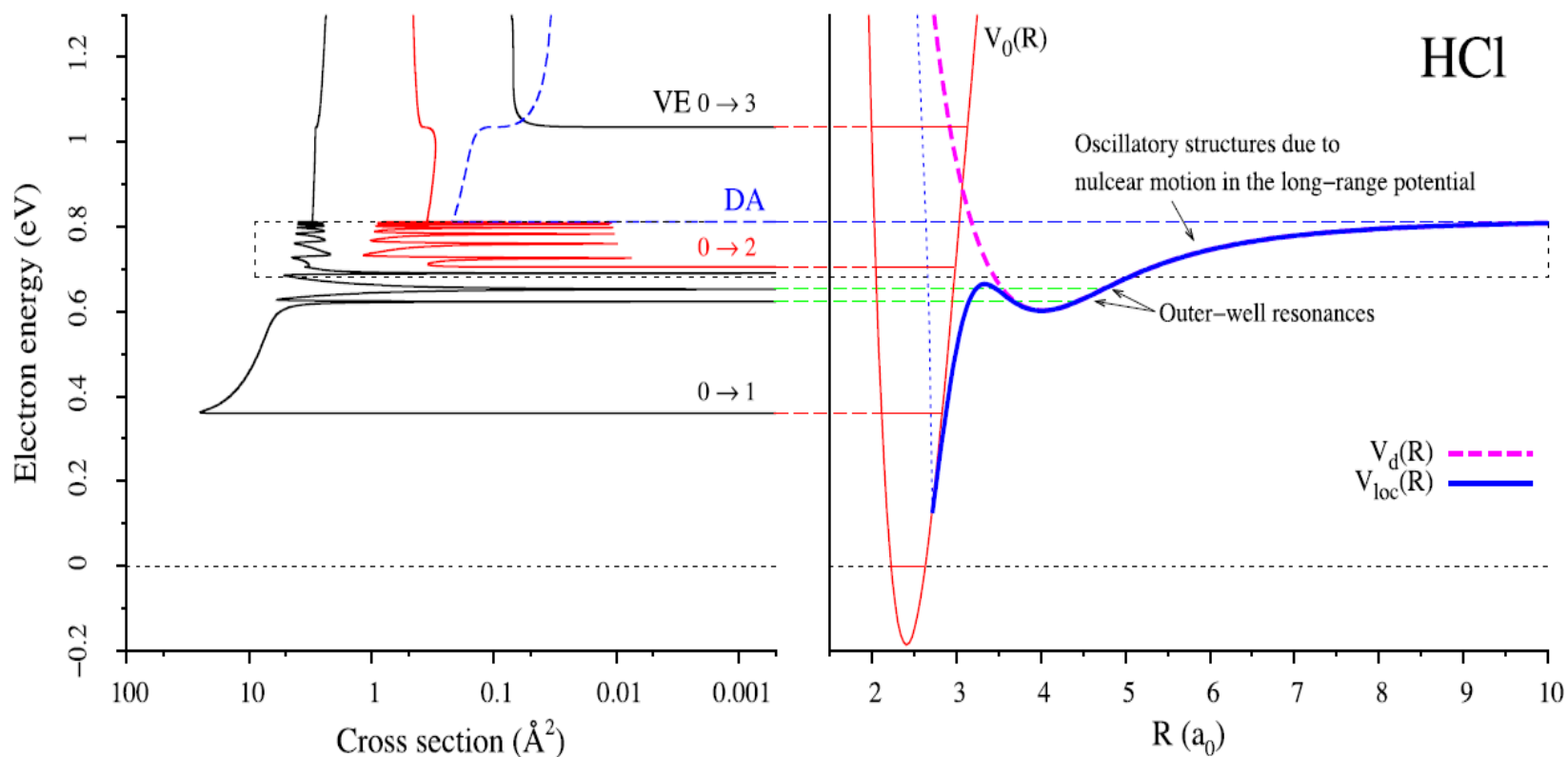
vibrační excitace při srážce elektronu s HCl



Rezonanční srážky elektronů s molekulami

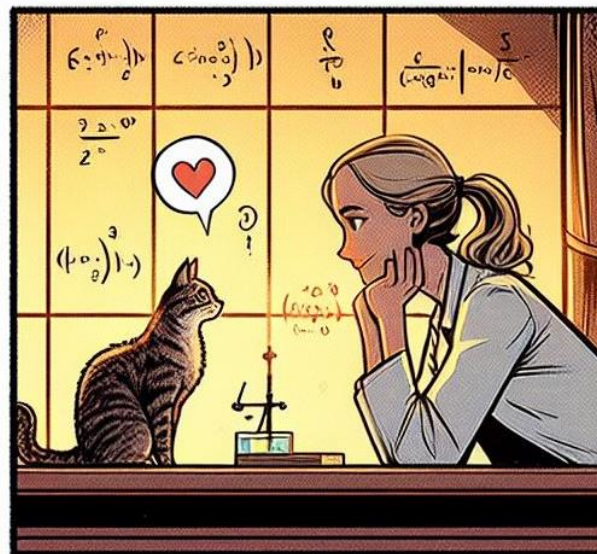
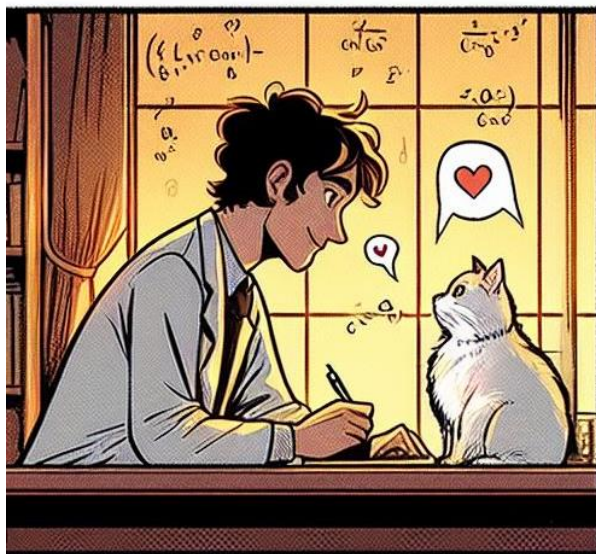
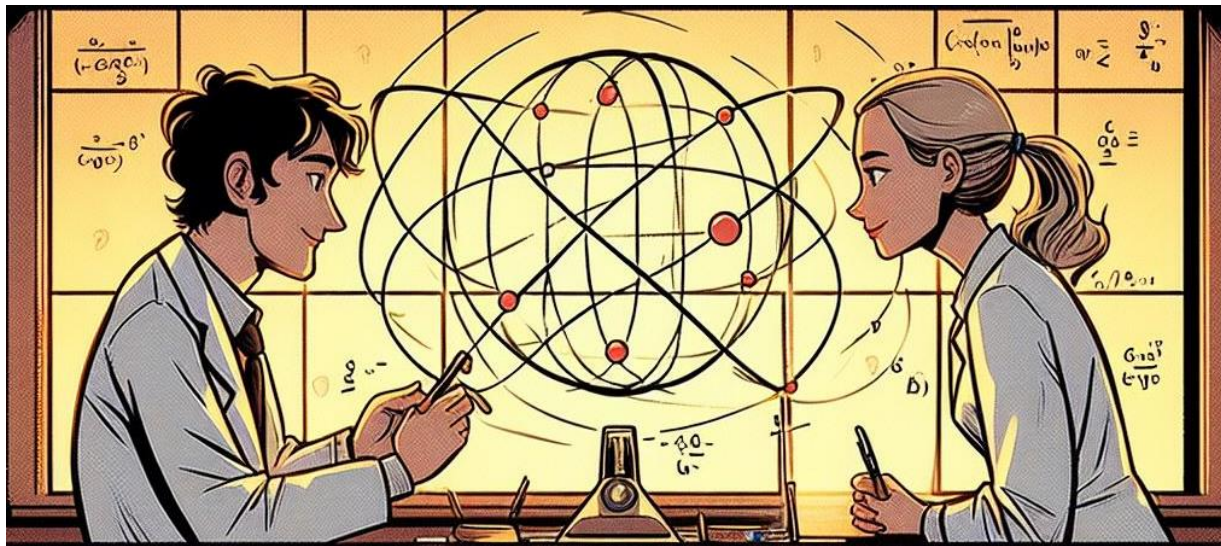
podrobné vysvětlení všech struktur v účinných průřezech

vibrační excitace a disociační záchyt při srážce elektronu s HCl

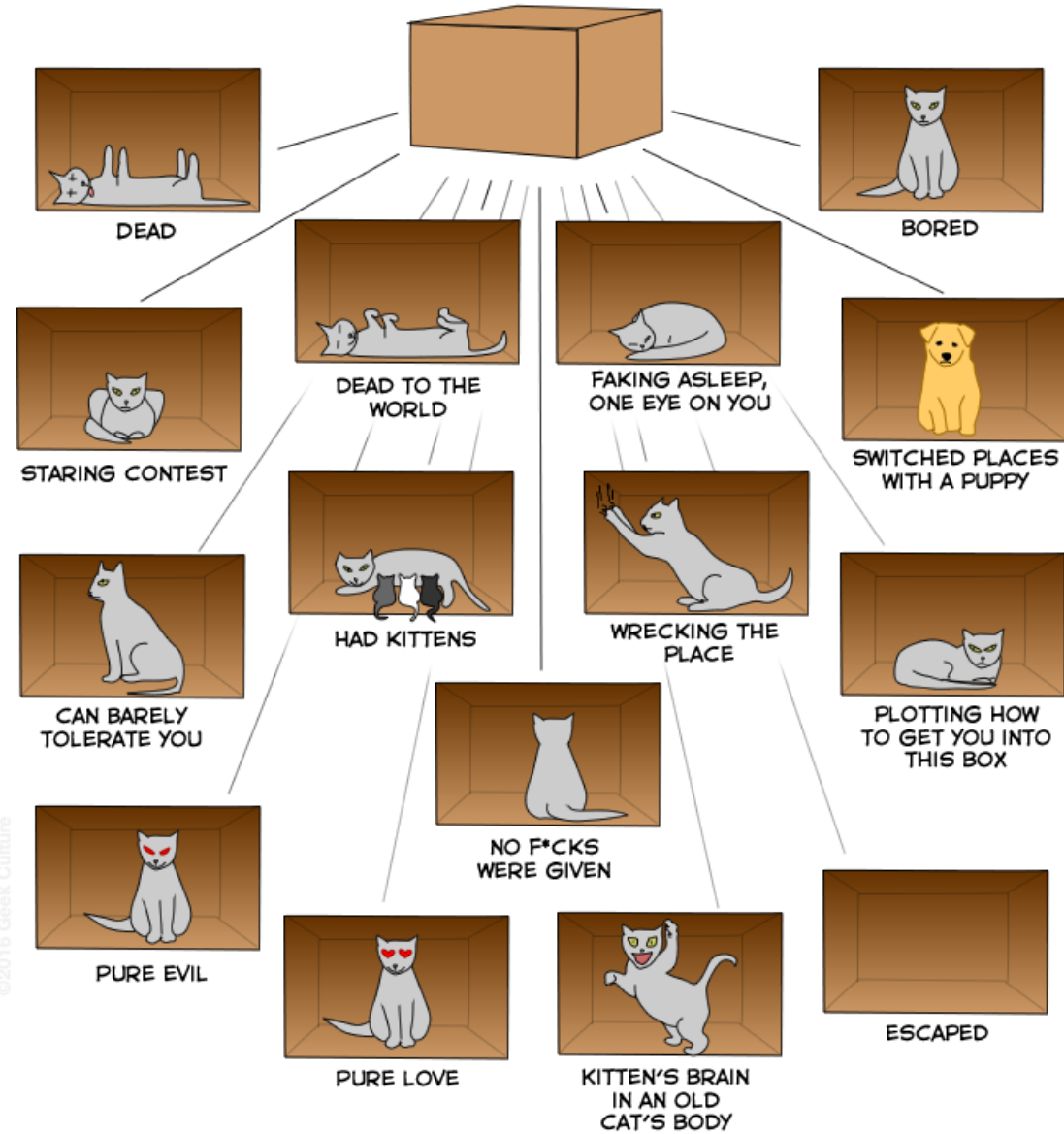


DALL-E kreslí komiks

Dva zamilovaní kvantoví fyzici spolu vyřešili paradox Schrödingerovy kočky



SCHRÖDINGER'S CAT: THE MANY STATES INTERPRETATION



©2016 Geek Culture

Díky za pozornost, ale už abych raději šel než ...



Kresba: David Revoy