

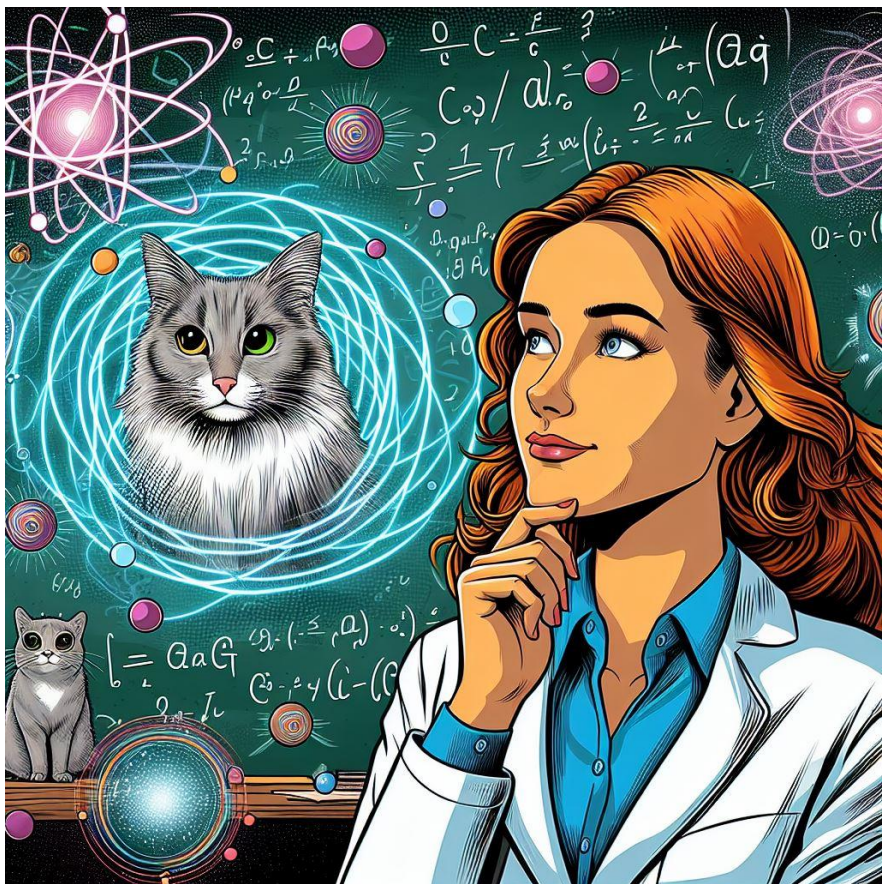


Copilot vs. ChatGPT (11/2025 a 08/2026) – oba používají DALL-E

AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

Kvantová fyzika v kvantovém světě

2024



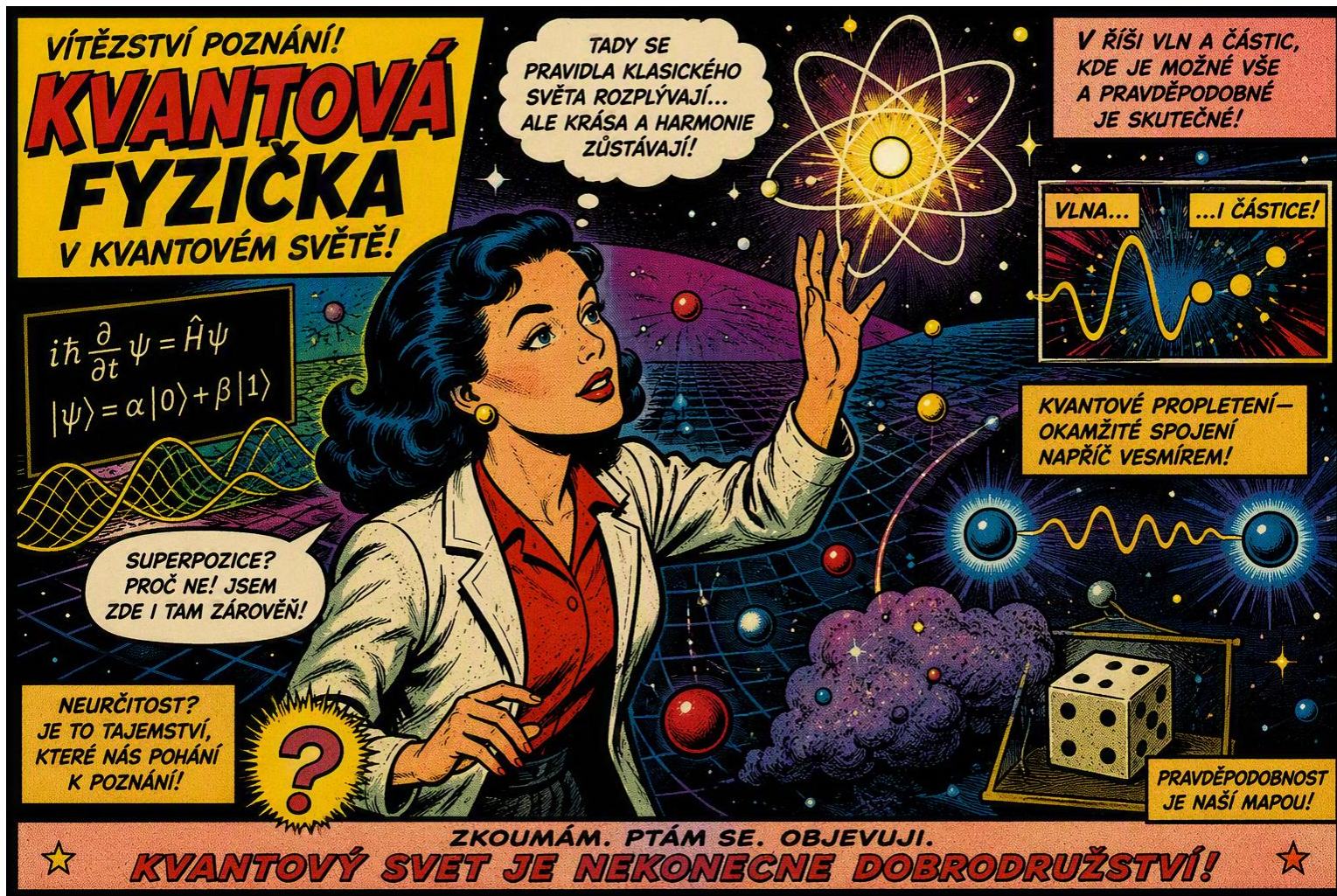
2025



AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

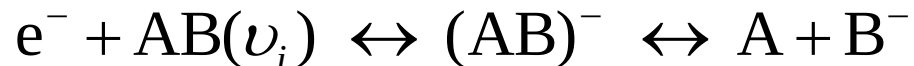
Kvantová fyzika v kvantovém světě

2026



Čím se zabývám(e) a proč?

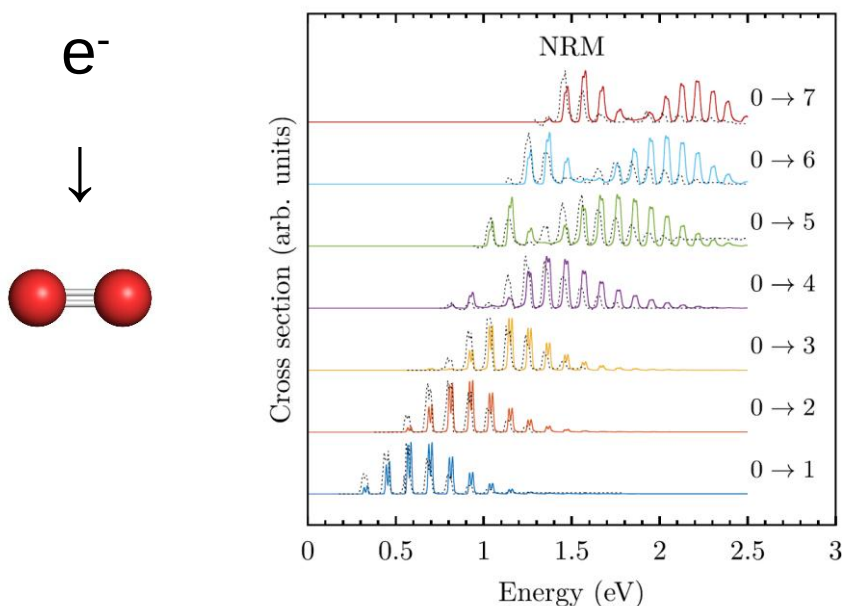
rezonanční srážky elektronů s atomy a molekulami – energie do 10 eV



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

porovnání experimentu s teorií

srážky elektronů s molekulou kyslíku O₂



data potřebná např. pro ITER

Mezinárodní termionukleární experimentální reaktor



výstavba komplexu ve francouzském Cadarache již od 2007

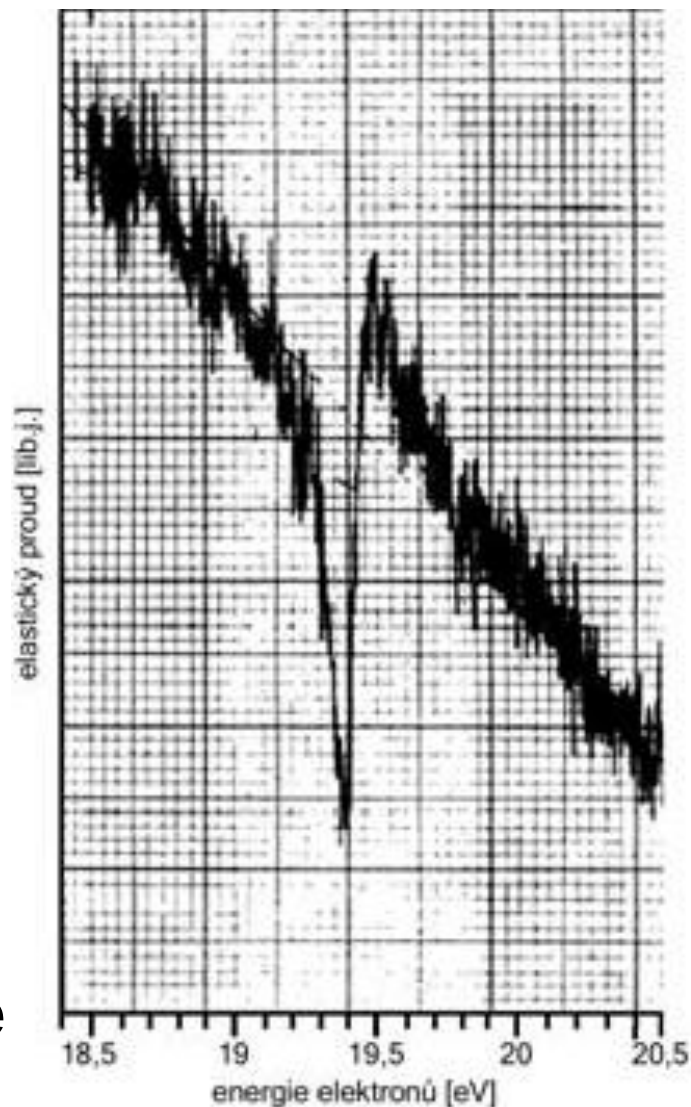
Rezonanční srážky elektronů s molekulami

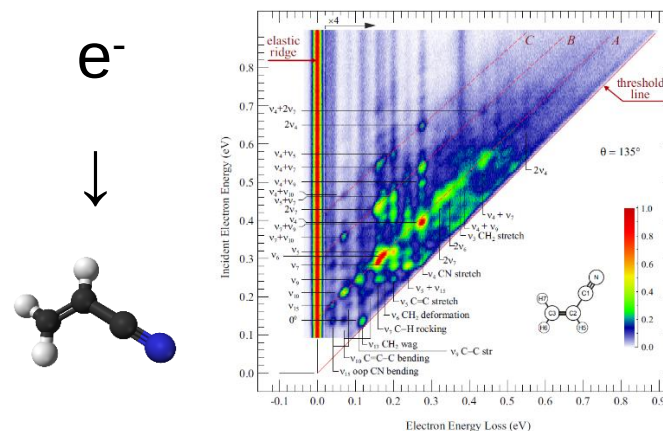
trocha historie aneb česká stopa

- George Jiří Schulz** – narozen 29. 4. 1925 v Brně
- v roce 1947 odešel studovat do USA
 - v roce 1954 získal doktorát na MIT
 - v roce 1962 změřil slavnou rezonanci aniontu helia
 - v roce 1965 dostal Davissonovu-Germerovu cenu APS
 - profesor na Yaleské univerzitě
 - zemřel náhle v roce 1976



$e^- + \text{He}$

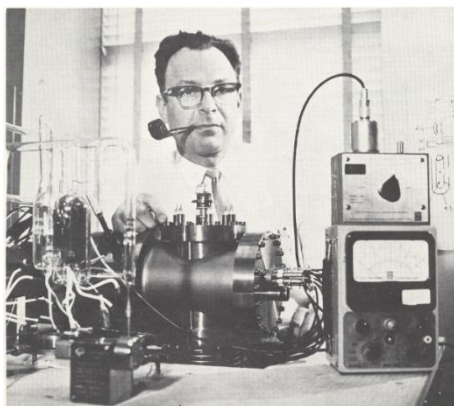




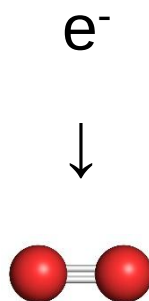
Rezonanční srážky elektronů s molekulami

trocha historie aneb česká stopa

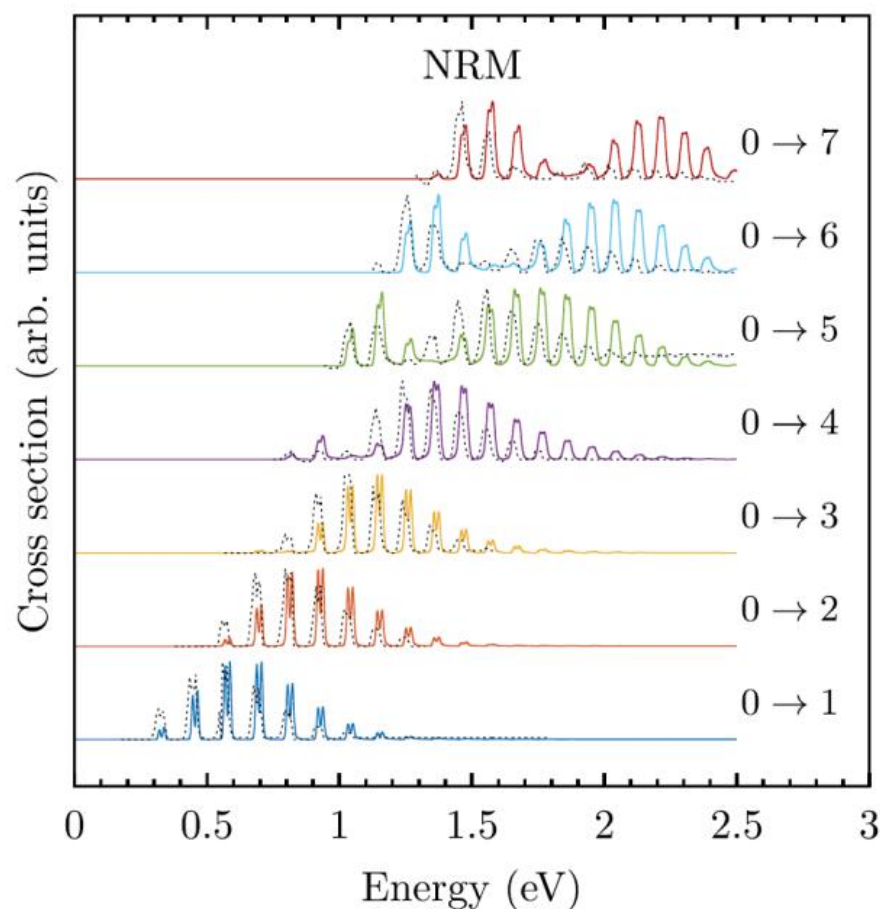
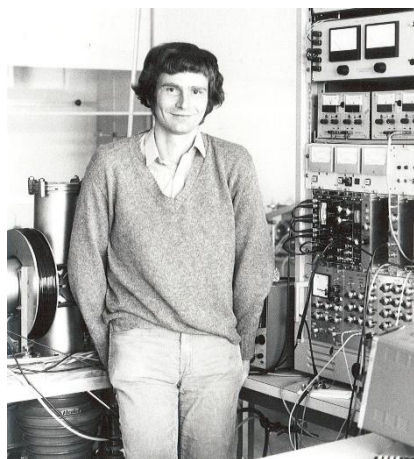
George Jiří Schulz – první přesné experimenty i na molekulách – rozlišení 100 meV



elektron + O₂

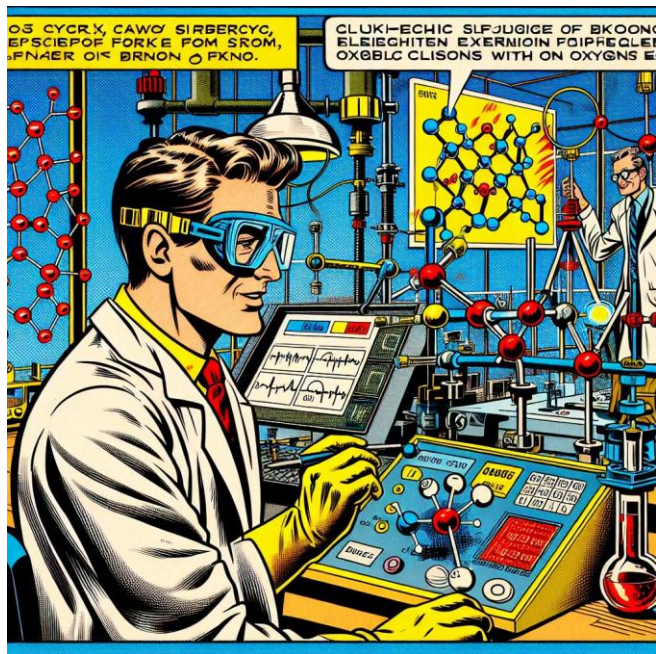


Michael Allan – rozlišení řádu meV



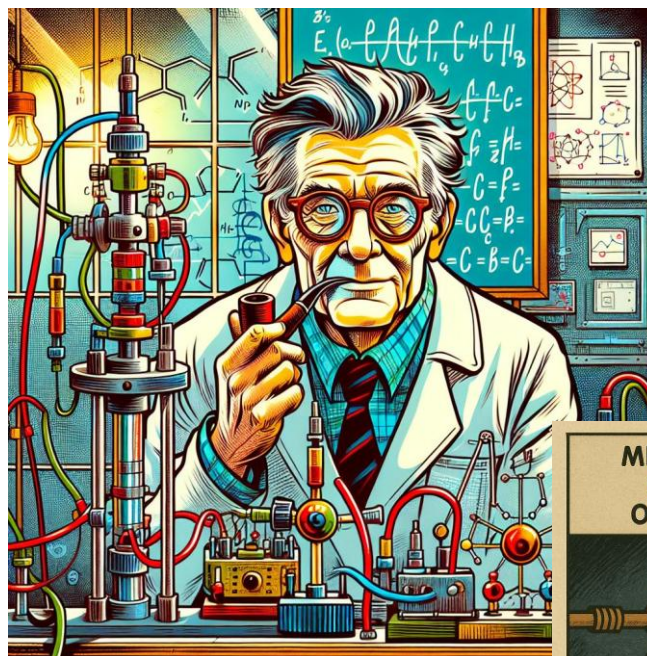
AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

George J. Schulz z Brna měří srážky elektronů s molekulou kyslíku

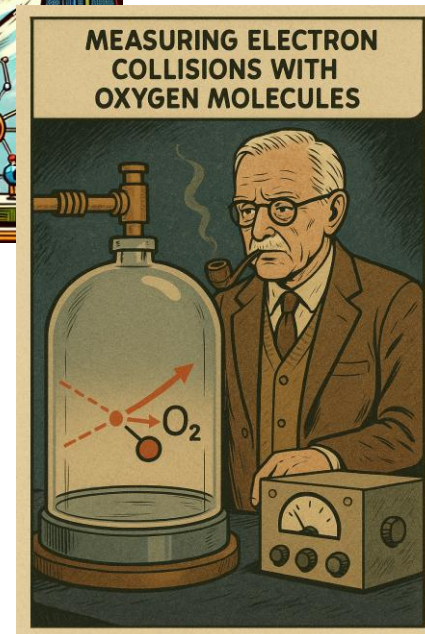
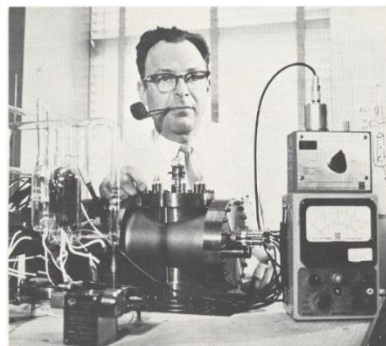


2024

Starší fyzik s dýmkou stojící za laboratorním přístrojem měřícím srážky elektronů s molekulou kyslíku



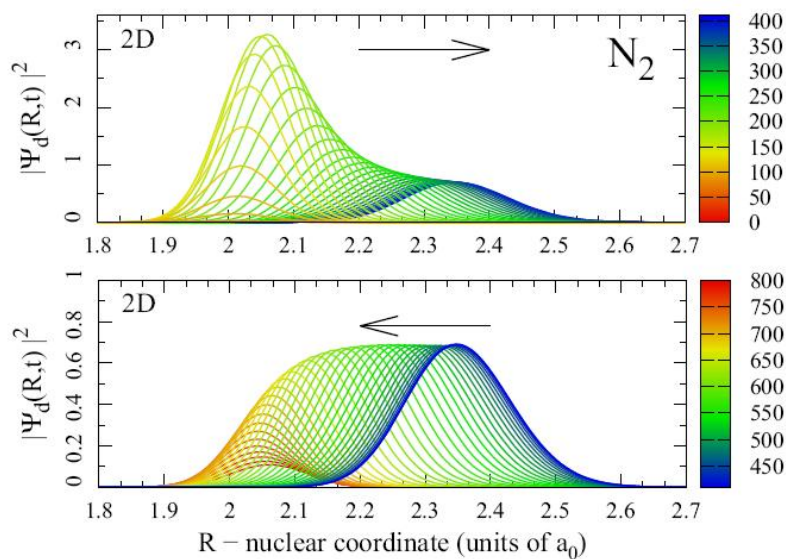
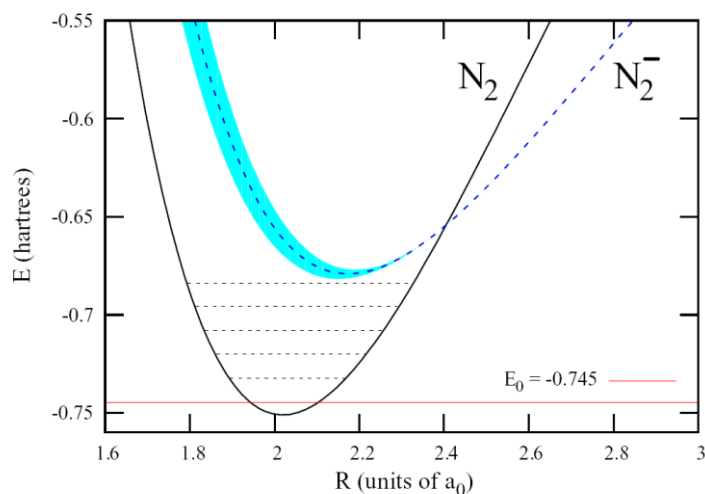
2025



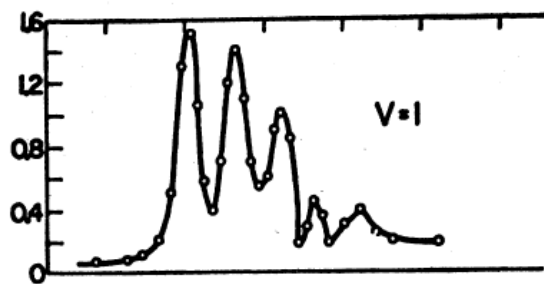
Rezonanční srážky elektronů s molekulami

porozumění účinným průřezům aneb proč dochází k interferenci

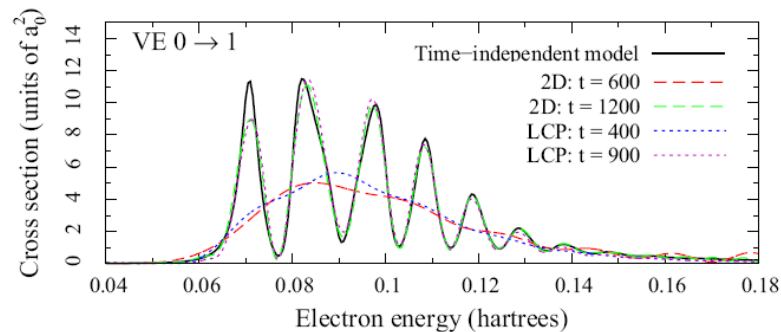
vibrační excitace při srážce elektronu s N_2



experiment

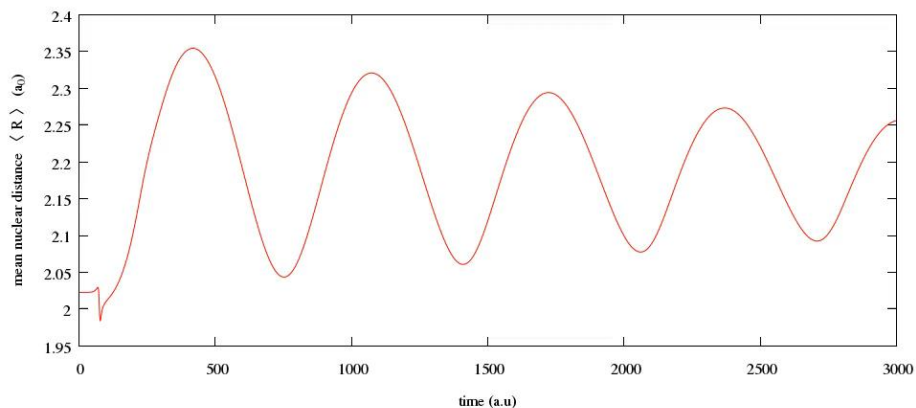


teorie

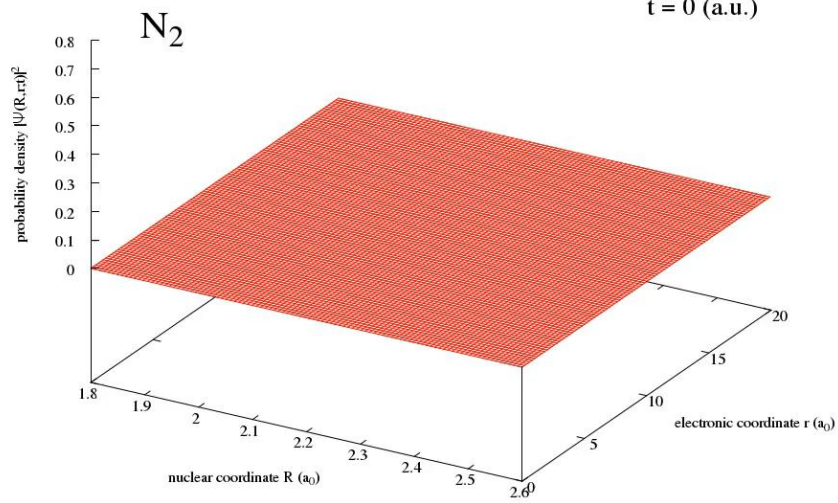


Rezonanční srážky elektronů s molekulami

porozumění účinným průřezům aneb proč dochází k interferenci



$t = 0$ (a.u.)



Jak náročné jsou numerické výpočty

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

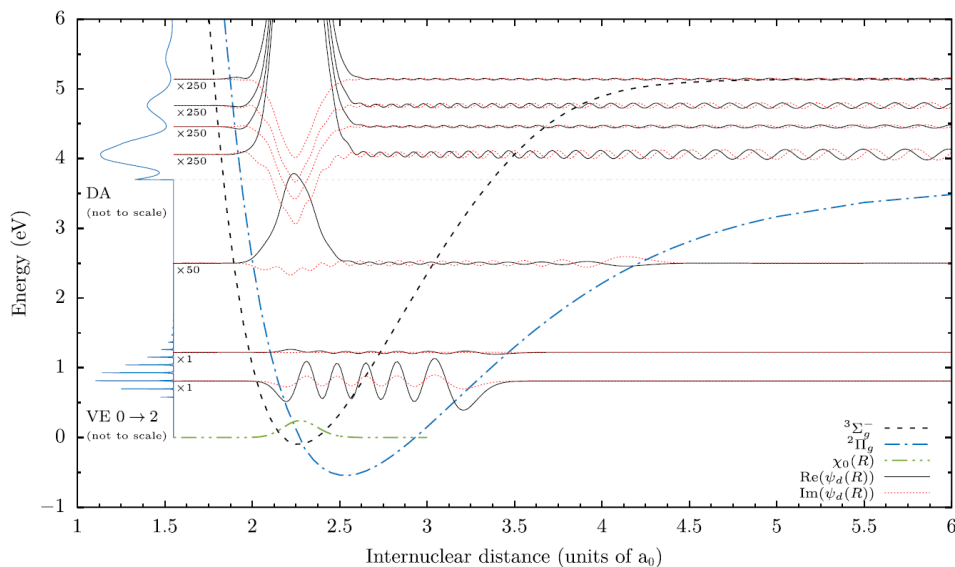
1) řešení elektronového problému – kvantová chemie

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

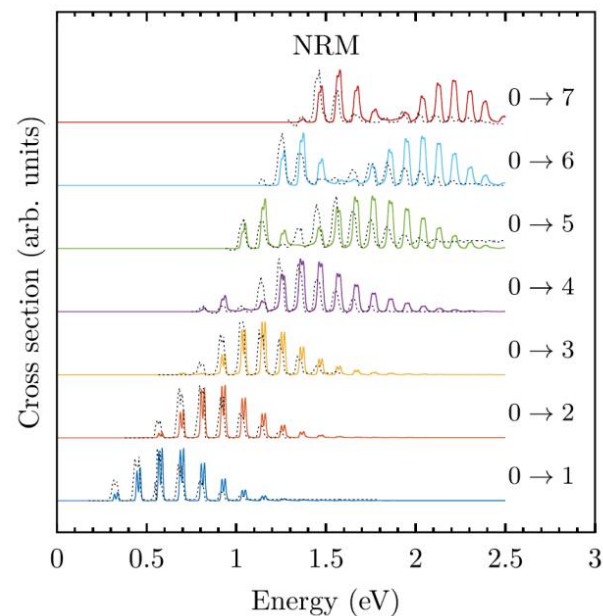
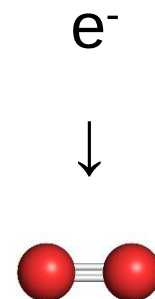
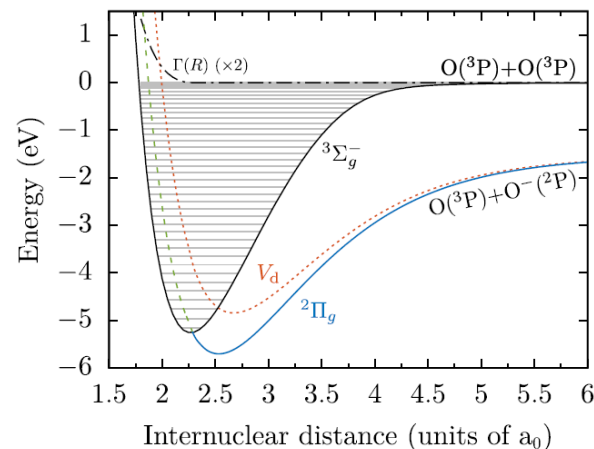
2) řešení pohybu jader – výpočet účinných průřezů

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

3) analýza dat a interpretace účinných průřezů



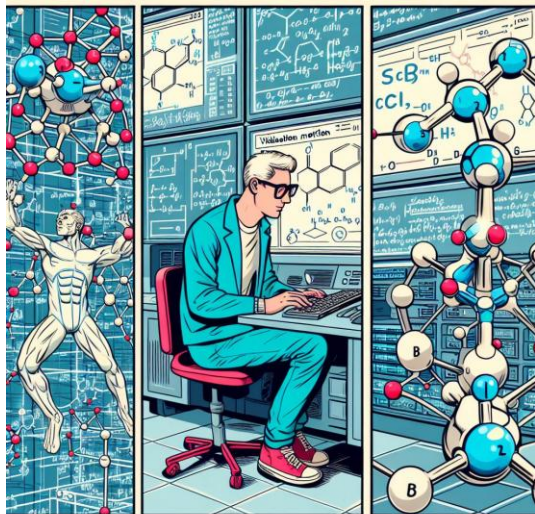
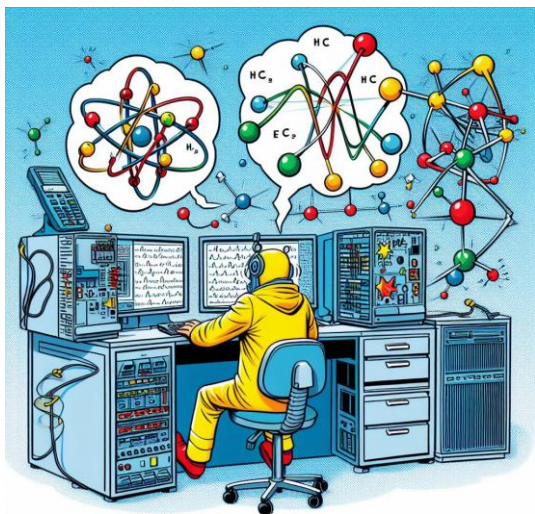
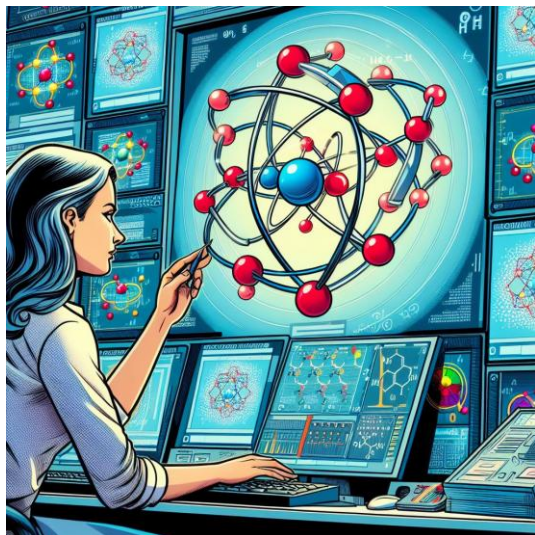
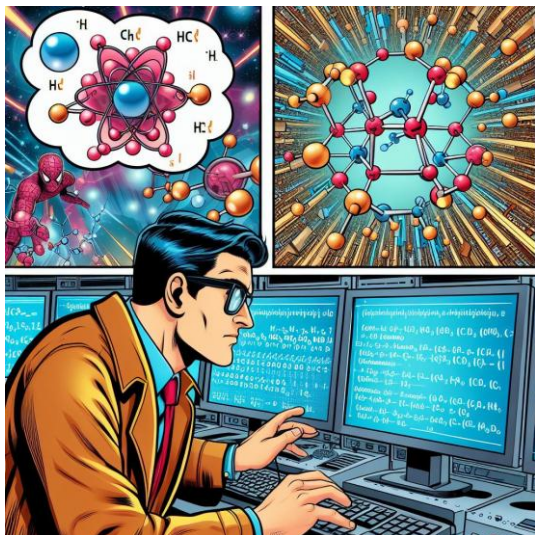
příklad: srážka elektronu s molekulou O_2



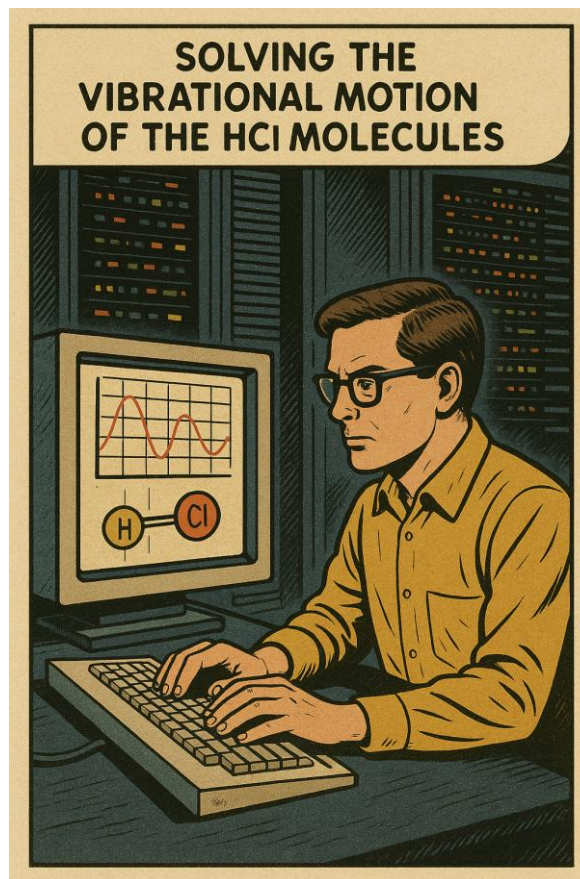
AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

Kvantový fyzik řeší vibrační pohyb molekuly HCl na superpočítači

2024



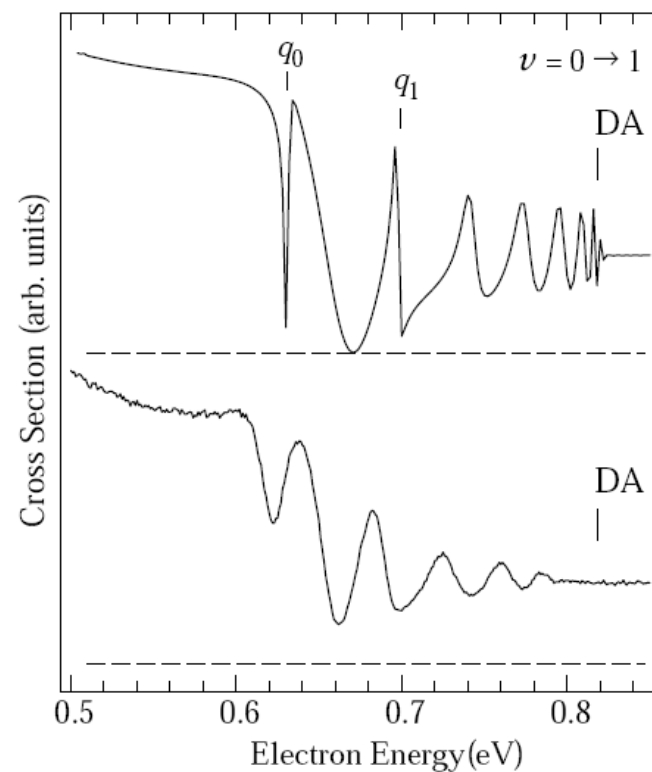
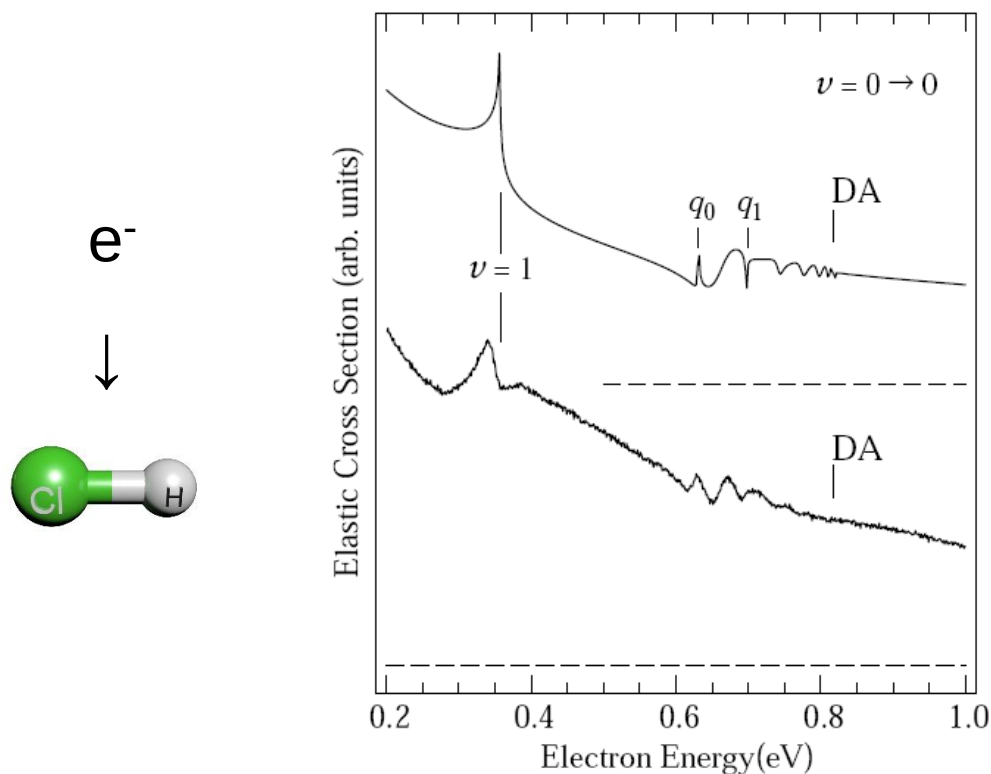
2025



Rezonanční srážky elektronů s molekulami

porozumění účinným průřezům aneb souhra teorie a experimentu

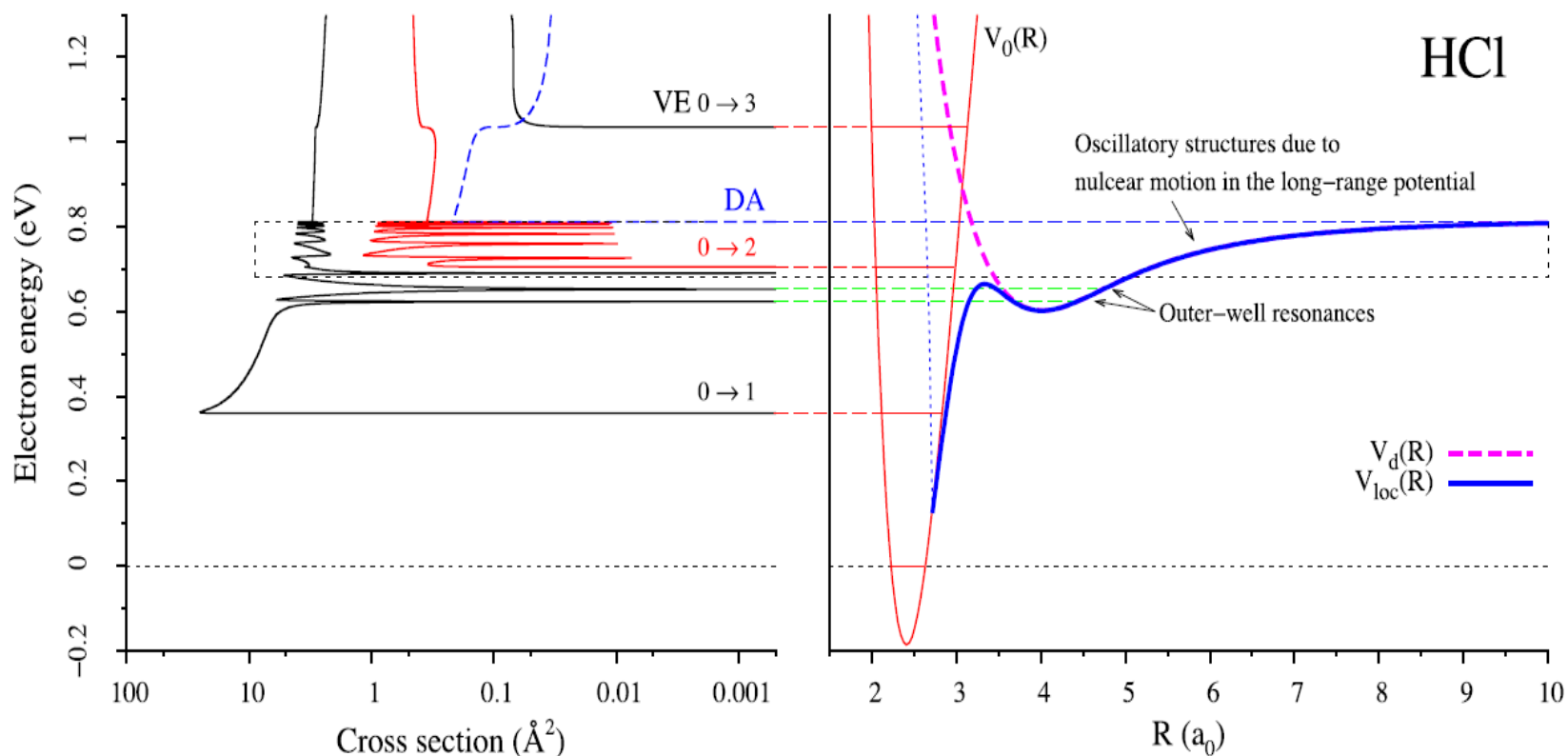
vibrační excitace při srážce elektronu s HCl – teorie vs. experiment Michaela Allana



Rezonanční srážky elektronů s molekulami

podrobné vysvětlení všech struktur v účinných průřezech

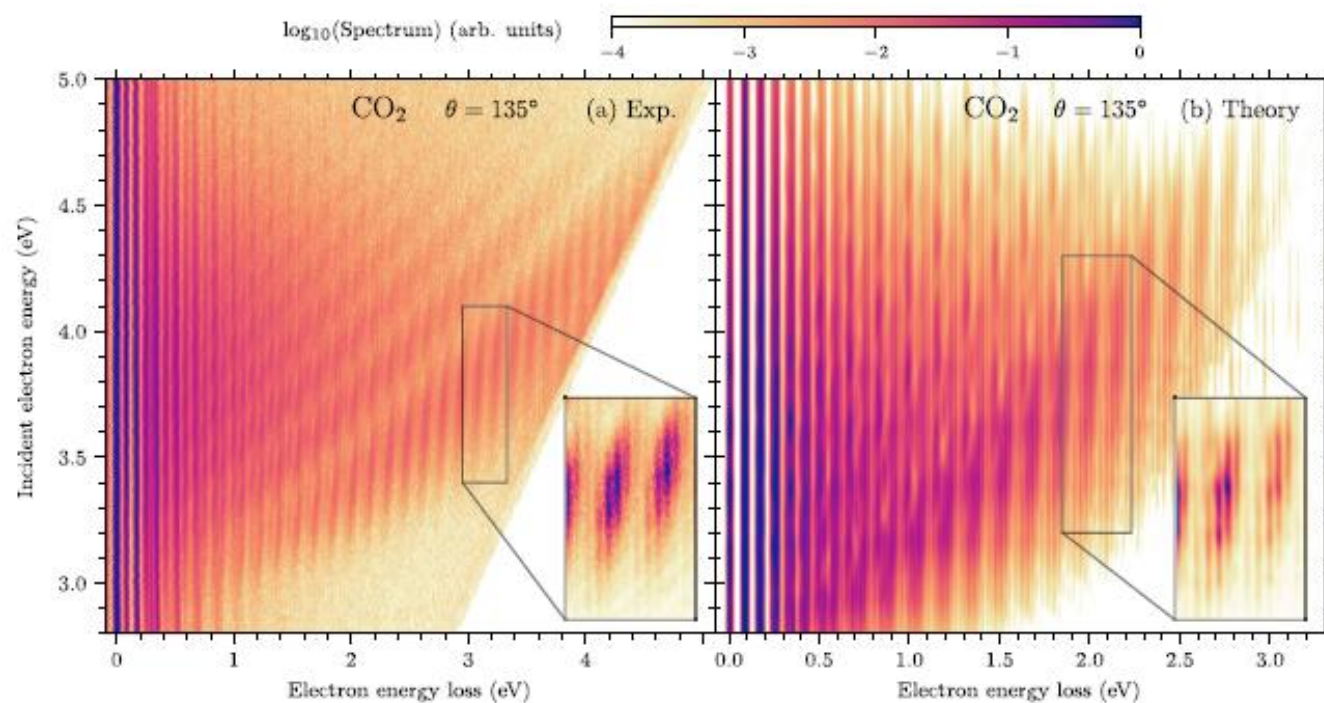
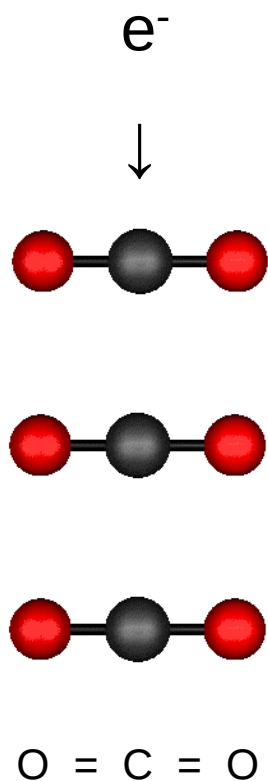
vibrační excitace a disociační záchyt při srážce elektronu s HCl



Rezonanční srážky elektronů s molekulami

ukázka výsledku pro tříatomovou molekulu

vibrační excitace při srážce elektronu s CO_2 – 2D spektrum ztráty energie nalétávajícího elektronu



Jednoduché systémy v kvantové mechanice

Schrödingerova rovnice pro vlnovou funkci

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(t)}{\partial t} = H\Psi(t)$$

nebo

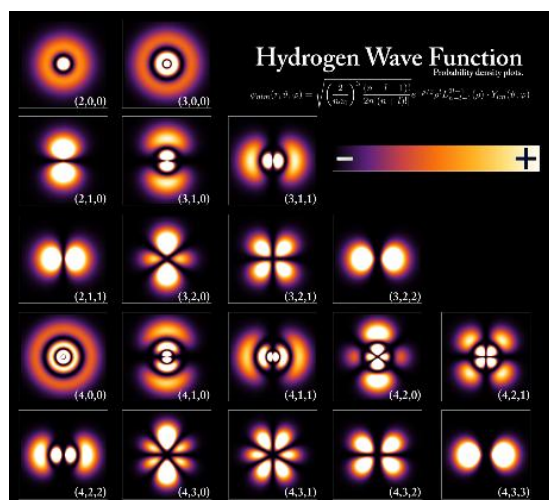
$$H\Psi = E\Psi$$

Hamiltonián H je **operátorem energie** systému, typicky součet celkové kinetické a potenciální energie, např.

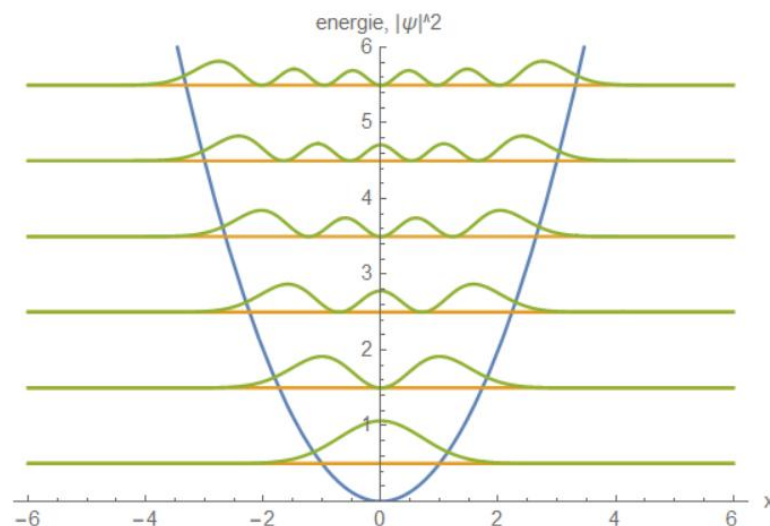
$$H = \frac{p^2}{2m} + V(x), \quad p = -i\hbar \frac{\partial}{\partial x} \quad \rightarrow \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + V(x)$$

Jen několik systémů lze řešit pomocí relativně jednoduchých funkcí, například:

atom vodíku – $V(r) = k \frac{e}{r}$



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



obecně → **numerické řešení pomocí počítačů**

Ukázky numerického řešení

časový vývoj vlnového balíku pro volnou částici – řešení 1D Schrödingerovy rovnice

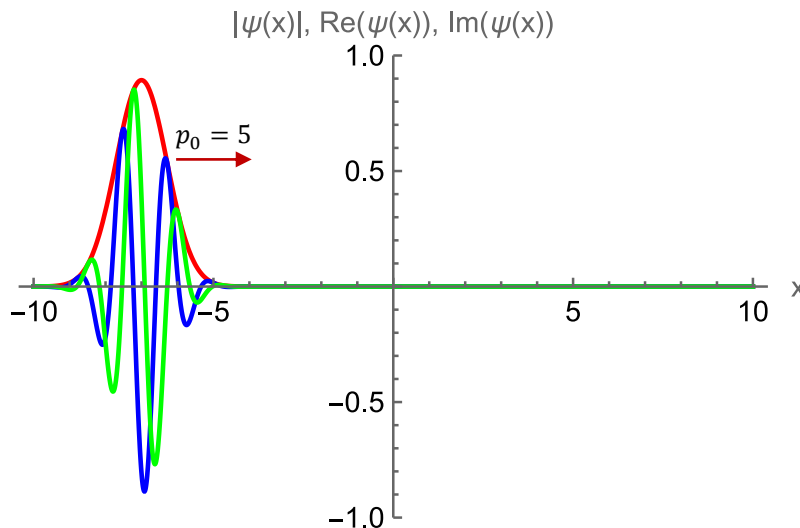
$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2}$$

pomocí evolučního operátoru a přechodem do p-representace (Fourierovou transformací)

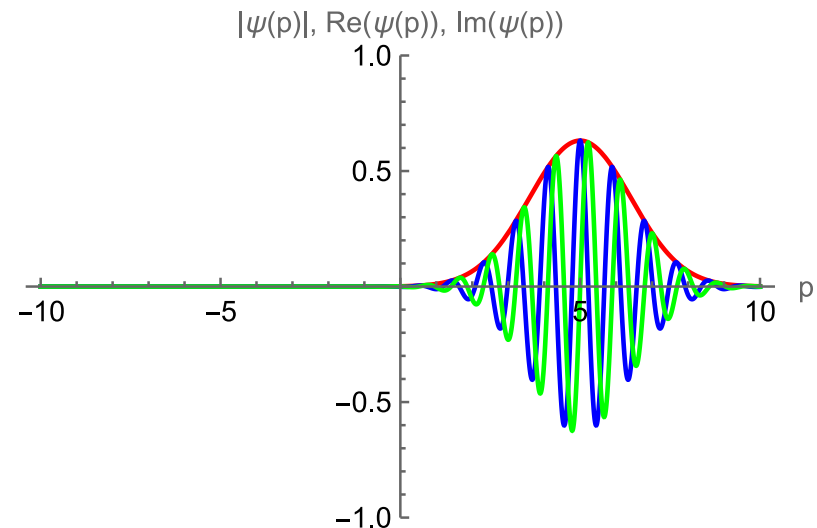
$$\Psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H \Delta t} \Psi(x, t), \quad \text{v p-representaci} \quad \Psi(p, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t} \Psi(p, t)$$

Počáteční Gaussovský vlnový balík splňuje Heisenbergovu relaci neurčitosti $\Delta x \Delta p \geq \frac{\hbar}{2}$

souřadnicová x-representace



hybnostní p-representace



Ukázky numerického řešení

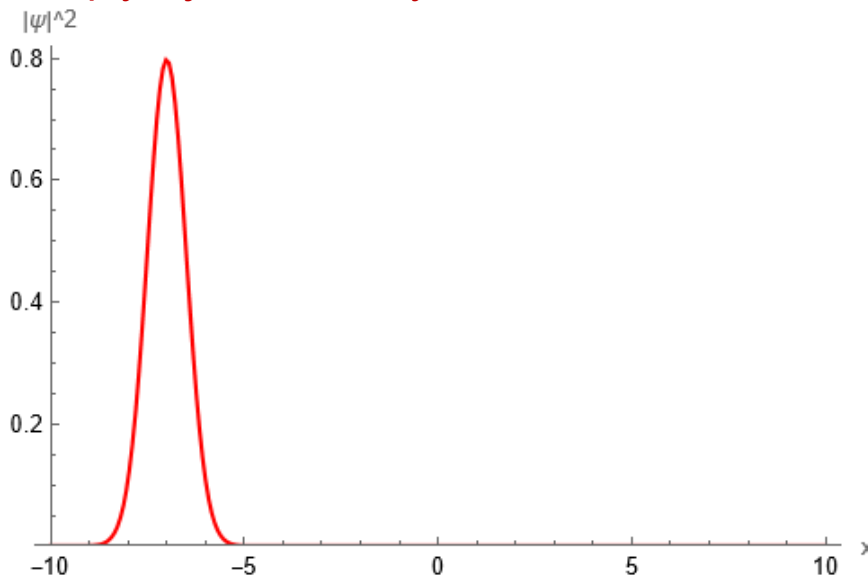
časový vývoj vlnového balíku pro volnou částici – řešení 1D Schrödingerovy rovnice

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

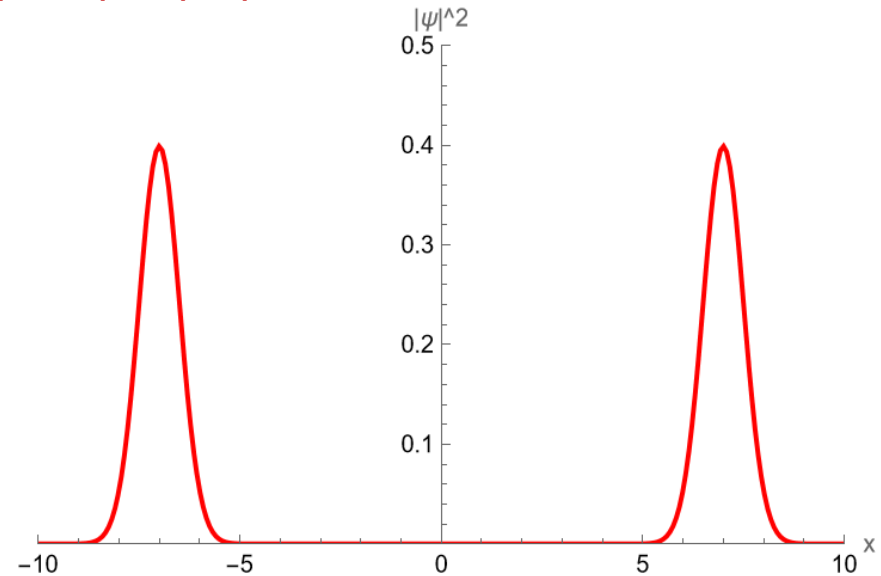
pomocí evolučního operátoru a přechodem do p-reprezentace (Fourierovou transformací)

$$\Psi(x, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} H \Delta t} \Psi(x, t), \quad \text{v p-reprezentaci} \quad \Psi(p, t + \Delta t) = e^{-\frac{i}{\hbar} \frac{p^2}{2m} \Delta t} \Psi(p, t)$$

rozplývající se vlnový balík



princip superpozice - interference



Ukázka numerického řešení

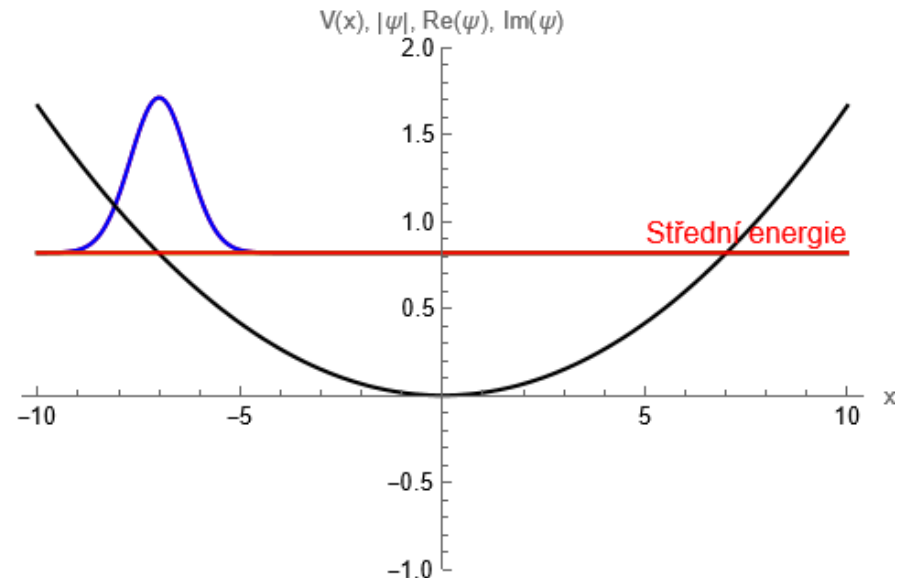
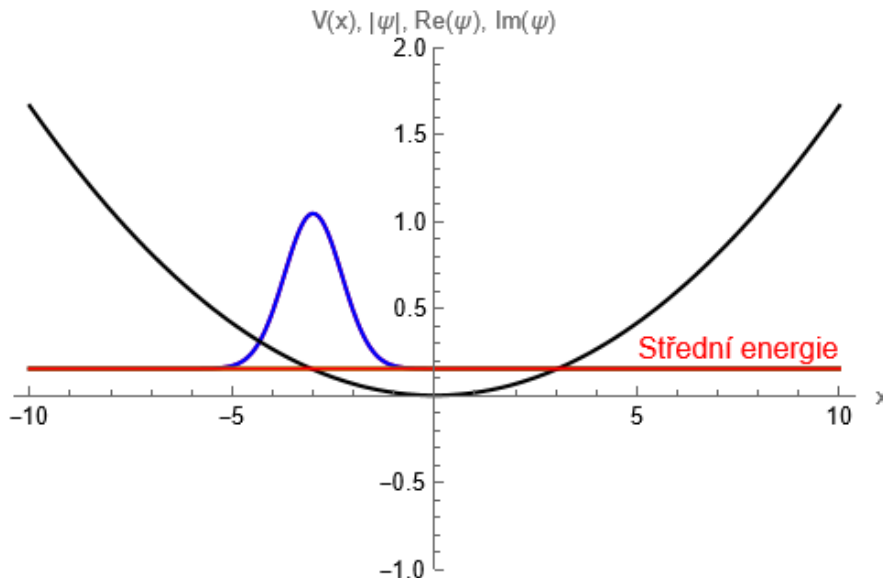
časový vývoj vlnového balíku v lineárním harmonickém oscilátoru

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x,t), \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Ize např. použít metodu rozděleného operátoru (split-operator) využívající rychlou Fourierovu transformaci pro přechod z x-reprezentace do p-reprezentace

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

různé počáteční polohy vlnového balíku odpovídají různým energiím



Ukázka numerického řešení

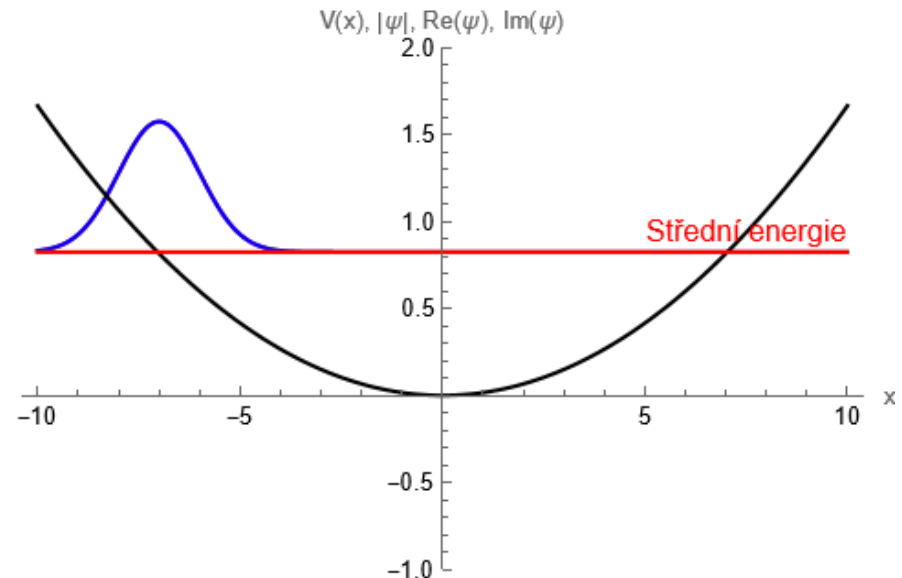
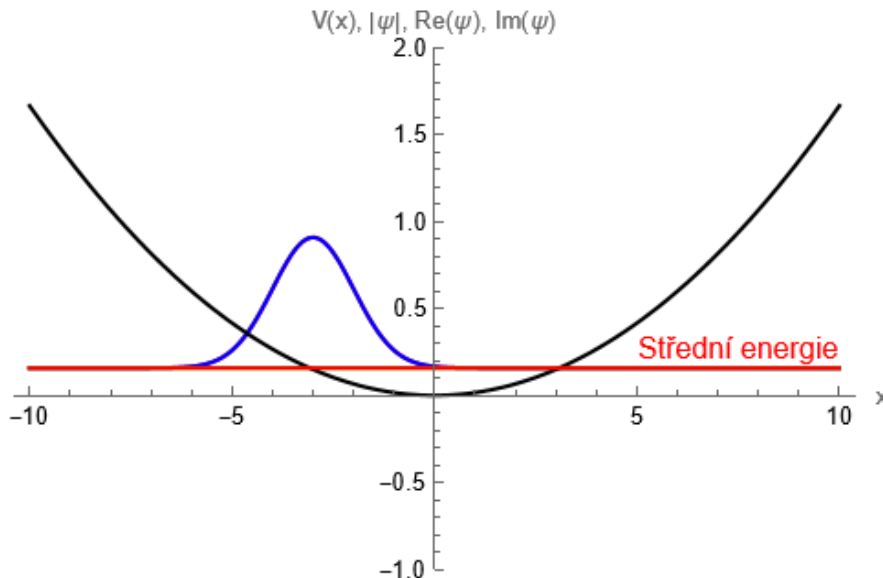
časový vývoj vlnového balíku v lineárním harmonickém oscilátoru

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(x,t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x,t)}{\partial x^2} + V(x)\Psi(x, t), \quad V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$$

Ize např. použít metodu rozděleného operátoru (split-operator) využívající rychlou Fourierovu transformaci pro přechod z x-reprezentace do p-reprezentace

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

koherentní stavy



AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

Fyzik demonstrující klasický harmonický oscilátor
a jeho kolega demonstrující kvantový lineární harmonický oscilátor

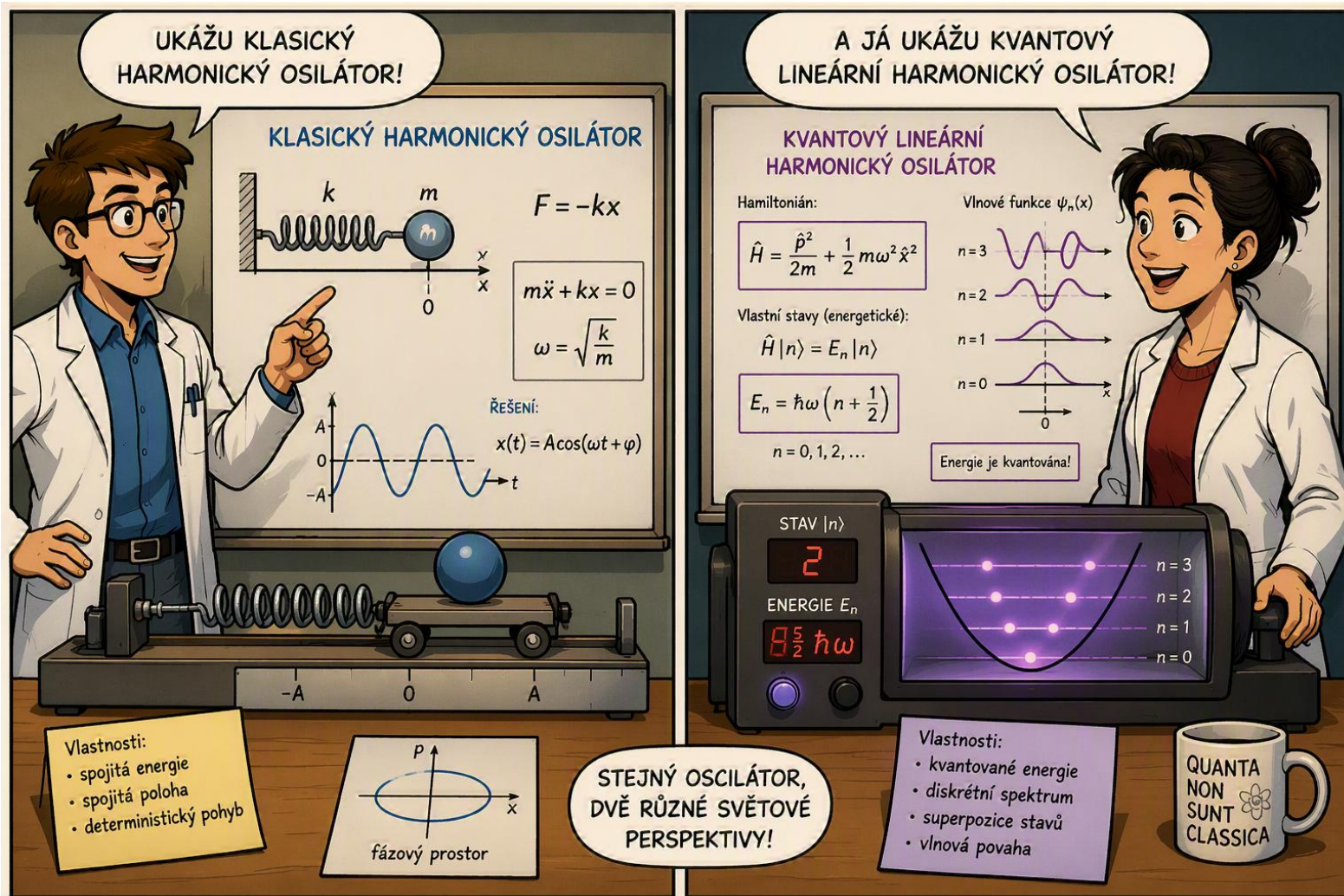
2025



AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

Fyzik demonstrující klasický harmonický oscilátor
a jeho kolega (tedy kolegyně) demonstrující kvantový lineární harmonický oscilátor

2026



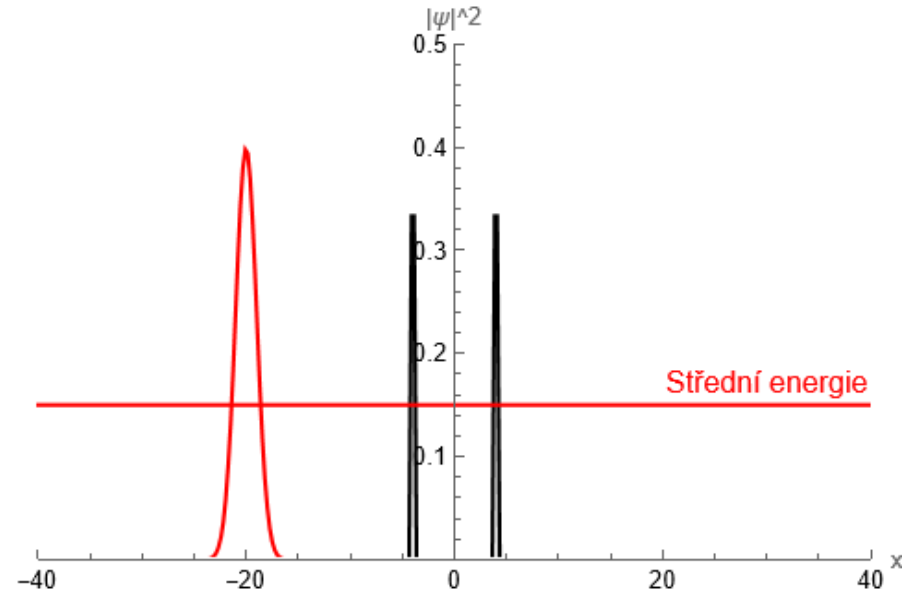
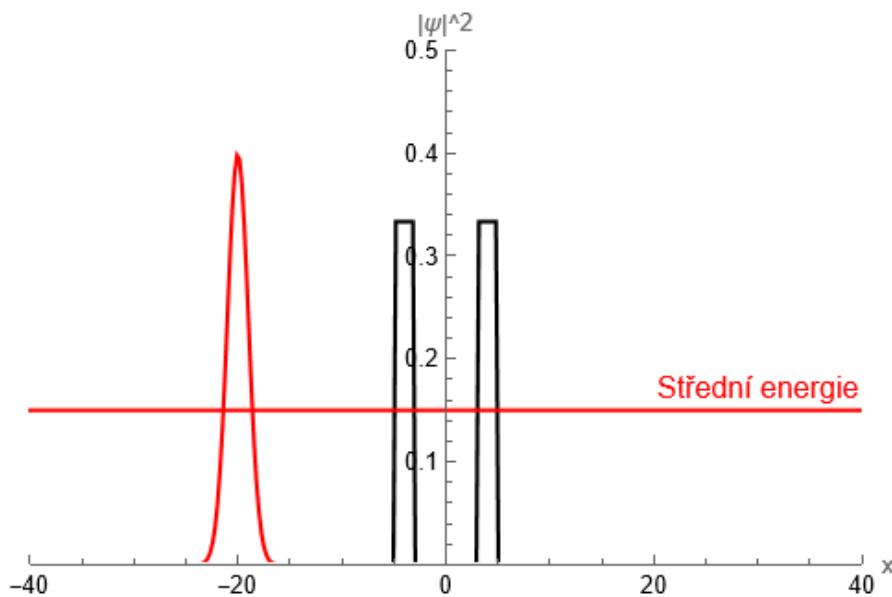
Ukázka numerického řešení

rozptyl vlnového balíku na dvojité potenciálové bariéře – opět řešení 1D Schrödingerovy rovnice

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

s potenciální energií jako na obrázku

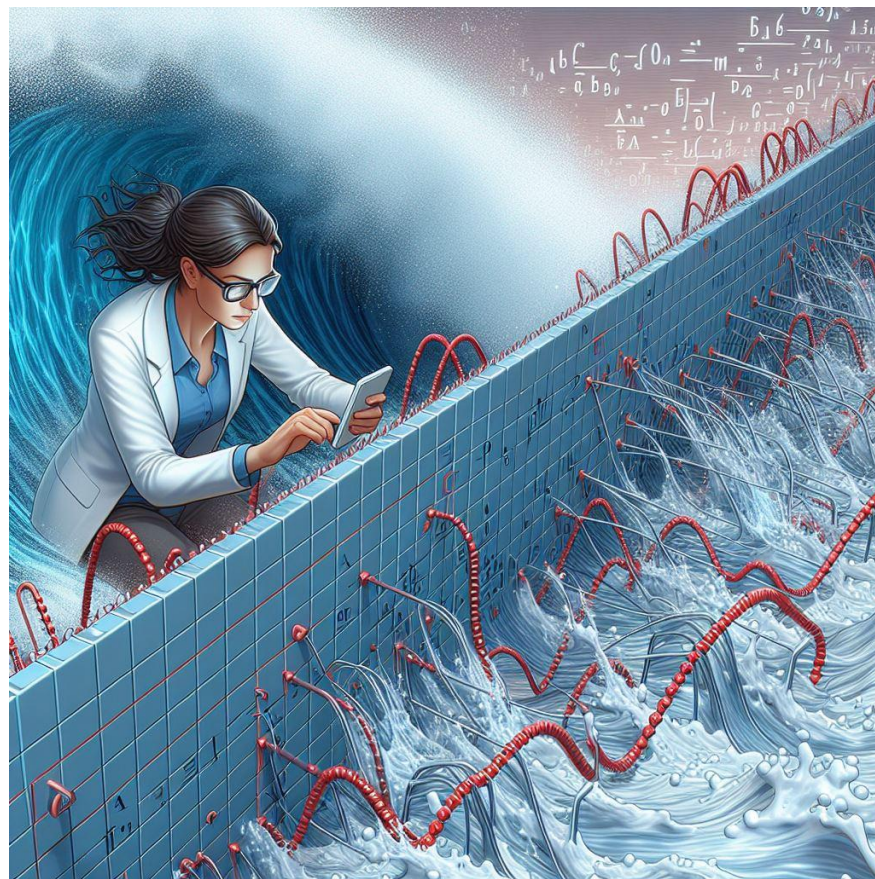
průchod potenciálovou bariérou neboli **tunelový jev a rezonanční záchyt**



AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

Kvantový fyzik se snaží prorazit potenciálovou bariéru vlnovou funkcí

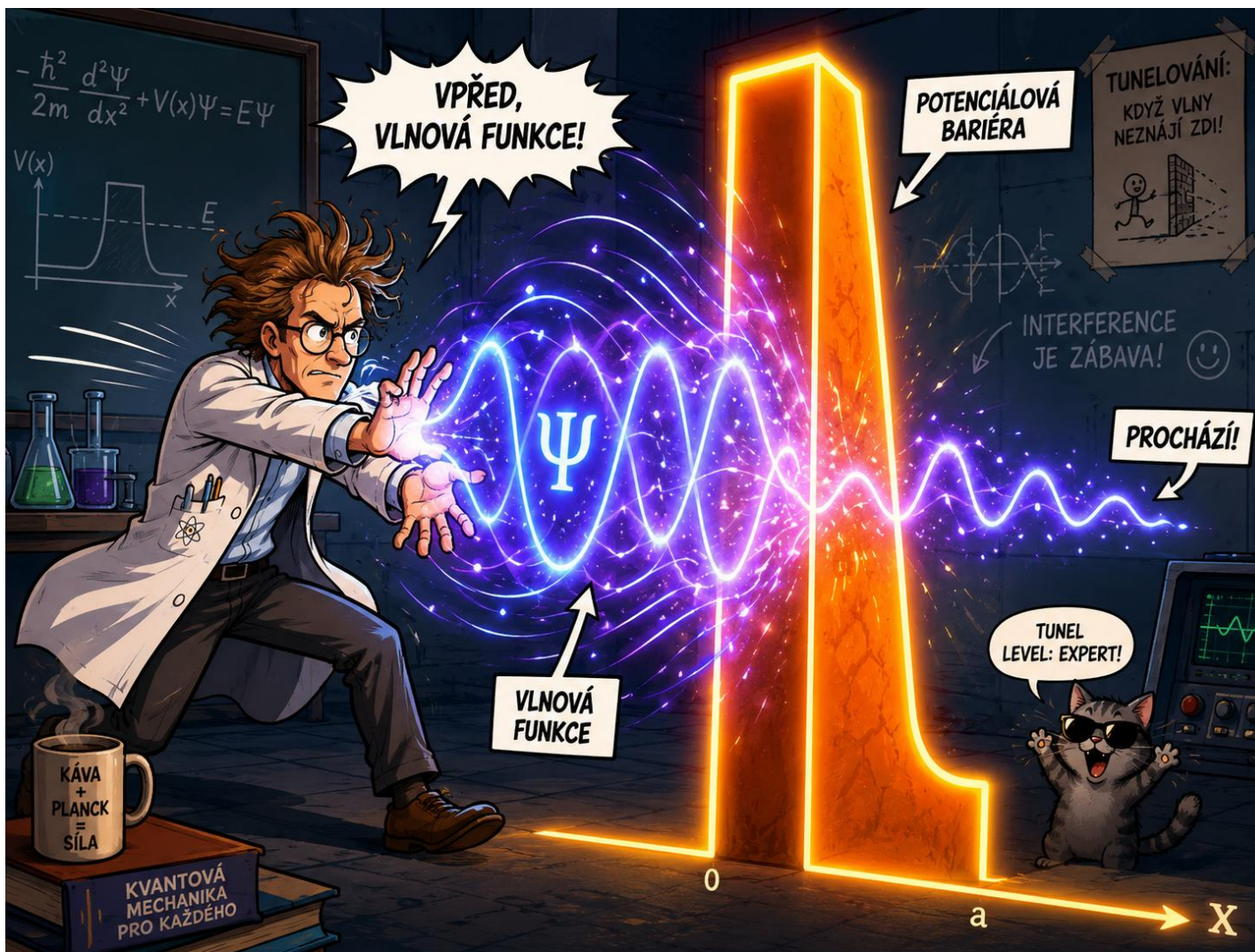
2024



AI kreslí komiks – Copilot (DALL-E)

Kvantový fyzik se snaží prorazit potenciálovou bariéru vlnovou funkcí

2026



Ukázka numerického řešení 2D problému

dvoušterbinový experiment

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

řešení Elišky Korcové pomocí metody alternujících směrů a Crankovy-Nicolsonové metody

