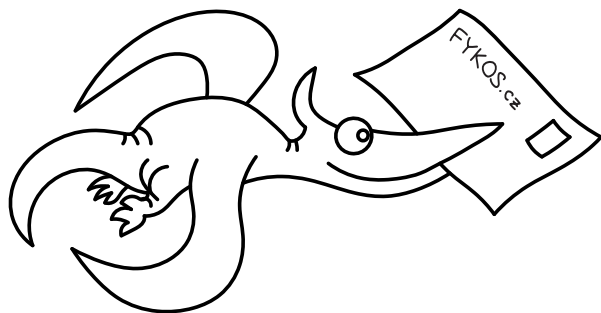


MARTIN VANĚK A KOLEKTIV

# Fyzikální korespondenční seminář

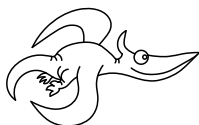
XXXVI. ročník – 2022/23



Copyright © Martin Vaněk, 2023  
Copyright © MatfyzPress, nakladatelství Matematicko-fyzikální fakulty  
Univerzity Karlovy, 2023

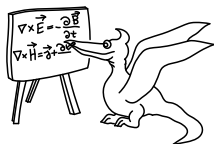
ISBN 978-80-7378-493-5





# Obsah

<b>Předmluva</b>	<b>4</b>
<b>Zadání teoretických úloh</b>	<b>7</b>
<b>Řešení teoretických úloh</b>	<b>15</b>
<b>Zadání experimentálních úloh</b>	<b>106</b>
<b>Řešení experimentálních úloh</b>	<b>107</b>
<b>O kvantové chemii</b>	<b>143</b>
Kapitola 1: Hledáme kvanta . . . . .	143
Kapitola 2: Počítáme kvanta . . . . .	149
Kapitola 3: Kvant orbitalů . . . . .	158
Kapitola 4: Kvant molekul . . . . .	167
Kapitola 5: Vibrující kvanta . . . . .	173
Kapitola 6: Excitující kvanta . . . . .	180
<b>Řešení úloh ze seriálu</b>	<b>193</b>
<b>Akce FYKOSu</b>	<b>217</b>
Podzimní soustředění v Kořenově . . . . .	217
Jarní soustředění ve Frýdštejně . . . . .	218
Stáže . . . . .	220
Fyziklání 2023 . . . . .	220
Fyziklání Online . . . . .	224
Fyzikální Náboj . . . . .	226
Den s experimentální fyzikou . . . . .	226
<b>Pořadí řešitelů</b>	<b>228</b>



## Předmluva

Milá čtenářko, milý čtenáři,

do rukou se Ti dostala publikace, která shrnuje veškerou činnost skupiny FYKOS působící pod záštitou Matematicko-fyzikální fakulty Univerzity Karlovy (MFF UK) již více než 36 let, jejíž hlavním cílem je inspirovat a vzdělávat středoškolské žáky ve fyzice a příbuzných vědách a oborech. Skupinu tvoří především studenti MFF UK, ale i jiných škol v České republice i zahraničí, a její aktivity podporují a zastřešují i zaměstnanci fakulty, např. z Ústavu teoretické fyziky či Katedry didaktiky fyziky.

FYKOS začínal jako korespondenční soutěž ve fyzice (podle které také nese své jméno – FYzikální KOrespondenční Seminář), ke které se postupně přidalo mnoho dalších vzdělávacích aktivit, jako je například Fyziklání, největší prezenční týmová soutěž ve střední Evropě, či její online verze – Fyziklání Online, které se každoročně účastní tisíce lidí z desítek zemí světa.

**Fyzikální korespondenční seminář** je nejstarší a také největší fyzikálně zaměřenou korespondenční soutěží pro žáky středních škol v České republice. Seminář je zaměřený z velké části na poskytování hodnotné zpětné vazby, která účastníkům pomáhá se ve fyzice dále zlepšovat.

Během školního roku publikujeme na webu <https://fykos.cz> zadání šesti sérií po osmi úlohách. Dvě z nich jsou „jednoduché“ (zaměřené především na první dva ročníky středních škol), tři „těžké“ úlohy (kde účastníci počítají zajímavé příklady z mnoha různých oblastí fyziky), jedna „problémová“ (vyžadující hlubší zamýšlení či rešerši fyzikálního fenoménu) jedna „experimentální“ (kde se účastníci naučí sestavit a provést vlastní fyzikální experiment a zpracovat data pro ověření fyzikálního jevu) a jedna „seriálová“ (která buduje na textu „seriálu“, který s každou sérií postupně buduje zajímavé fyzikální téma, které se zpravidla na středních školách neučí).

Úlohy jsou vybírané tak, aby se mohli zúčastnit žáci ze všech tříd střední školy (prváci by vždy měli být schopní vyřešit aspoň některé úlohy a zároveň i čtvrtáci se zkušenostmi z olympiád se na těžších úlohách zapotí nebo se dozví něco nového z experimentálních, problémových či seriálových úloh). Zároveň se snažíme vybírat úlohy tak, aby byly co nejzajímavější (a nejen „učebnicové“) a pokrývaly co nejvíce z témat fyziky.

Účastníci si mohou vybrat, které úlohy nakonec vypracují a pošlou nám k opravení (přes internet) – pro účast tedy není potřeba vyřešit vše, každá úloha se počítá. My pak jejich řešení okomentujeme, obodujeme a pošleme jim se zpětnou vazbou vysvětlující případné chyby nebo to, jak se nad problémy mohli dále zamyslet. Ke každé úloze také zveřejňujeme vzorové řešení, díky kterému se mohou účastníci dále přiučit i pokud se nějakou úlohu vůbec nepokusí vyřešit. Na webu zveřejňujeme

výsledkové listiny, kde se každý účastník může podívat, jak obstál v konkurenci svých vrstevníků, a na konci ročníku jsou nejlepší řešitelé náležitě odměněni.

A jak vypadal 36. ročník očima statistiků? Seminář řešilo 276 studentů ze 167 středních škol z různých koutů světa, a tento ročník byl tedy druhým nejuspěšnějším v historii FYKOSu. Organizátoři opravili celkem 3720 došlých řešení a udělili 18120 bodů.

Pro nejlepší řešitele FYKOSu připravujeme každoročně dvě devítidenní **soustředění** v některém z malebných koutů Česka. Jejich účastníci si užijí bohatý program plný odborných přednášek z oblasti matematiky, fyziky nebo jiných přírodních věd, ale i her a dalších aktivit v přírodě. Nechybí ani prostor pro fyzikální experimenty a výlety na zajímavá místa. Tento akademický rok se podzimní soustředění konalo v Kořenově a jarní soustředění ve Frýdštejně.

Letos poprvé také mají nejlepší řešitele experimentálních úloh možnost strávit dva týdny na **vědecké stáži** na některém z pracovišť MFF UK, a vyzkoušet si tak reálnou vědeckou praxi na vlastní kůži.

FYKOS dále organizuje největší týmovou fyzikální soutěž v ČR a střední Evropě, **Fyziklání**, ve které až pětičlenné týmy středoškoláků soutěží tři hodiny v řešení fyzikálních úloh. Letošní 17. ročník měl rekordní účast 1167 účastníků z 21 zemí od Brazílie, přes Česko a další země Evropy až po Filipíny a byl spojen s cca týdenním bohatým doprovodným programem, od přednášek či exkurzí, až po národní večer, kde se účastníci mohli seznámit s vrstevníky z dalších koutů světa a trochu poznat jejich kultury.

Fyzikláním je inspirovaná internetová soutěž **Fyziklání Online** (v anglické verzi Physics Brawl Online). V listopadu 2022 proběhl její dvanáctý ročník, který opět zaznamenal velký úspěch s rekordní účastí 3 766 účastníků z 59 zemí světa tvořících 904 týmů. Kromě tří kategorií pro středoškoláky, kterým je soutěž určena především, je ve Fyziklání Online také kategorie Open, kde může soutěžit úplně každý.

Další FYKOSí akcí je **Den s experimentální fyzikou**, na kterém se spolupodílejí nejen jednotlivé katedry MFF, ale i další vědecká pracoviště, např. na Akademii věd ČR. Účastníkům tak umožňujeme navštívit špičkové vědecké laboratoře v Praze a okolí, kde probíhá aktuální fyzikální výzkum.

Další informace o FYKOSích akcích lze nelézt dále v této publikaci nebo na našich webových stránkách.

Tato ročenka obsahuje kompletní zadání i řešení jednotlivých úloh 36. ročníku FYKOSu. Zadání jsou záměrně oddělena od řešení, abychom podnítili čtenáře k samostatnému zamýšlení nad možným řešením problému. Příklady jsou navíc pro snazší orientaci rozděleny na teoretické a experimentální. Další částí knihy je seriál o kvantové chemii, který je rovněž doplněn úlohami. Na konci publikace se nachází krátké ohlédnutí za letošními soustředěními a jinými akcemi a seznam nejlepších řešitelů tohoto ročníku semináře.

Pokud Tě FYKOS zaujal natolik, že by ses chtěl stát řešitelem či organizátorem, případně nás jinak podpořit nebo se pouze na něco zeptat, ať už se to týká fyziky či studia na MFF, neváhej a napiš nám.



**FYKOS**  
**UK, Matematicko-fyzikální fakulta**  
**Ústav teoretické fyziky**  
**V Holešovičkách 2**  
**180 00 Praha 8**

www: <https://fykos.cz>  
e-mail: [fykos@fykos.cz](mailto:fykos@fykos.cz)

FYKOS a jeho aktivity jsou financovány Oddělením propagace a mediální komunikace MFF UK a Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy.



## Zadání teoretických úloh

### Úloha I.1 ... užitečné máslo

3 body

Jarda se rozhodl upéct koláč, ale zjistil, že se v jeho kuchyňské váze vybila baterka a nemá jak odvážit 300 g mouky. Napadlo ho však, že může použít kostku másla, na které je napsáno, že má hmotnost  $m = 250$  g. Naštěstí našel ještě vhodnou pružinu a stopky. Na velmi lehkou místičku nasypal hromádku mouky, připevnil na pružinu, rozkmital a změřil periodu  $T_1 = 2,8$  s. To stejné udělal s kostkou másla a naměřil  $T_2 = 2,3$  s. Poradte Jardovi, kolik mouky má přidat nebo odebrat.

(řešení str. 15)

### Úloha I.2 ... vážíme neznámý předmět

3 body

Mějme ideální váhu, kterou zkalibrujeme státním etalonem o hmotnosti  $m_e = 1,000\,000\,165$  kg a hustotě  $\rho_e = 21\,535,40$  kg·m<sup>-3</sup>. Kalibrační myslíme to, že po položení etalonu na váhu přiřadíme naměřené hodnotě právě hmotnost  $m_e$ . Vážení neznámého předmětu pak provedeme za stejných podmínek, při kterých má objem  $V_0 = 3,242\,27$  dl. Jestliže jsme navázili váhu  $G = 1,420\,12$  N, jakou hmotnost jsme naměřili? Jaká je skutečná hmotnost předmětu? Experiment provádíme v místě s normálním tíhovým zrychlením  $g = 9,806\,65$  m·s<sup>-2</sup> a hustotou vzduchu  $\rho_v = 1,292\,23$  kg·m<sup>-3</sup>. Uvažujte, že kalibrace je lineární a že nezatížená váha ukazuje nulu.

(řešení str. 15)

### Úloha I.3 ... zavařujeme

6 bodů

Do válcové sklenice o výšce  $h = 7,0$  cm a vnitřním poloměru  $r = 2,5$  cm nalijeme horkou meruňkovou marmeládu o teplotě  $T_0 = 80$  °C, zavřeme ji víčkem a necháme chladnout, přičemž mezi marmeládou a víčkem je ve sklenici trochu vzduchu. Víčko se může lehce promáčknout dovnitř, když na něj působí alespoň síla  $F = 4$  N. Při promáčknutí se ozve zvuk, který jsme slyšeli po čase  $t_p = 30$  min od zavření skleničky. Jestliže marmeláda tuhne při teplotě  $T_t = 60$  °C, bude již při promáčknutí víčka ztuhlá?

*Bonus* Jak dlouho po začátku chladnutí marmeláda ztuhne? Předpokládejme, že teplota je v celé sklenici všude stejná a rychlost chladnutí závisí pouze na rozdílu teplot ve sklenici a okolní teploty  $T_{ok} = 25$  °C.

(řešení str. 18)

### Úloha I.4 ... doprava na horách

8 bodů

Na úpatí hory tvaru dokonalého kužele s vrcholovým úhlem  $\alpha = 90$  ° stojí město. Přesně na opačné straně hory ve stejné nadmořské výšce je železniční stanice, proto se radní z města rozhodli pro stavbu silnice ke stanici. Můžou postavit buď tunel, nebo cestu vést po povrchu hory. Jaký může být maximální poměr ceny za kilometr

tunelu ku ceně za kilometr silnice, aby byla stavba tunelu levnější? Silnici lze vést libovolnou trasou po povrchu hory. *(řešení str. 19)*

### Úloha I.5 ... a zase ta U-trubice

8 bodů

Do U-trubice s celkovou délkou  $l$  a průřezem o obsahu  $S$  nalijeme  $V$  vody (tak, aby byl celý ohyb pod vodou a současně platilo  $Sl > V$ ) a necháme ustálit hladinu. Jeden konec U-trubice uzavřeme a vodní hladinu rozkmitáme. Jaká bude perioda malých kmitů vodního sloupce? *(řešení str. 21)*

### Úloha I.P ... vlaková

9 bodů

Odhadněte spotřebu elektrické energie na jednu jízdu vlaku IC Opavan. Souprava se sedmi vozy má lokomotivu řady 151 a je schopná dosáhnout rychlosti  $v_{\max} = 160 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ . Pro jednoduchost uvažujte, že všichni cestující jedou z Prahy do Opavy. *(řešení str. 23)*

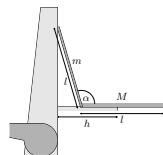
### Úloha II.1 ... žlab na vodu

3 body

Žlabem na vodu obdélníkového průřezu o šířce  $d = 10 \text{ cm}$  teče voda. Na její hladinu spadne malý list, který se začne pohybovat rychlostí  $60 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ . Výška vody ve žlabu je  $h = 1,3 \text{ cm}$ . Odhadněte, jak dlouho bude trvat nabrat 50 l vody do připraveného vědra. Komentujte použité předpoklady proudění v porovnání s reálnou situací. *(řešení str. 28)*

### Úloha II.2 ... nepohodlný autobus

3 body



Jarda chtěl v autobuse sledovat na svém notebooku přednášku, a proto ho položil na výklopnou poličku sedadla před ním. Ta má hloubku  $h = 18 \text{ cm}$  a je kolmá ke svislému sedadlu. Jardův notebook, široký  $l = 25 \text{ cm}$ , se skládá ze spodní části o hmotnosti  $M = 1200 \text{ g}$  a z obrazovky o hmotnosti  $m = 650 \text{ g}$ . Obě části považujeme za homogenní. Na jaký největší úhel může notebook rozevřít, aby nespadl z poličky? *(řešení str. 29)*

### Úloha II.3 ... jeřáb na voru

6 bodů

Uprostřed řeky stojí na voru o zanedbatelné hmotnosti jeřáb a přemísťuje krabice stavebního materiálu o hmotnosti  $m$  z jednoho břehu na druhý. V jednom kroku jeřáb naloží materiál na jedné straně řeky, otočí se na druhou stranu, tam materiál vyloží a otočí se zpět. Určete nejmenší hodnotu úhlu, o který se může během jednoho kroku vor vychýlit oproti původní pozici. Jeřáb aproximujme homogenním válcem o hmotnosti  $M$ , a poloměru  $r$  a otáčecím ramenem tvaru tenké tyče o délce  $kr$ . Rychlost řeky i „tření“ mezi vorem a vodou zanedbejte. *(řešení str. 30)*

**Úloha II.4 ... rovnoběžná srážka**

6 bodů

Pták Fykosák sleduje, jak se kolem něj v jeho inerciální vztažné soustavě po rovnoběžných trajektoriích pohybují konstantními nerelativistickými rychlostmi dva hmotné body. Stejně jako on najdete odpověď na otázku, jestli se pro nějakého jiného inerciálního pozorovatele mohou tyto trajektorie protnout. Pokud ano, je možné, aby se dané hmotné body při správných počátečních podmínkách srazily v tomto průsečíku? Je to konzistentní s tím, že podle Fykosáka se pohybují paralelně? *(řešení str. 31)*

**Úloha II.5 ... kouzelná magnetická tyčka**

10 bodů

Mějme tenký magnet uzavřený uprostřed tenké duté tyče o délce  $l$ . Materiál tyče je schopný magnetické pole odstiňovat. Těsně za konci tyče je tok magnetického pole roven  $\Phi$ . Vypočítejte velikost a směr magnetické indukce v rovině kolmé na tyč procházející jejím středem v závislosti na vzdálenosti  $r$  od tyče. *(řešení str. 32)*

**Úloha II.P ... planetární atmosféra**

10 bodů

Jaké parametry musí mít planeta, aby si udržela atmosféru srovnatelnou se Zemí? Jaké podmínky jsou nutné, aby takovou atmosféru získala? *(řešení str. 34)*

**Úloha III.1 ... kreativní řešení problémů**

3 body

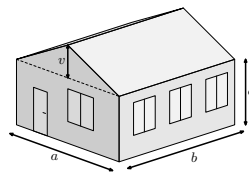
Danka připojila zahradní hadici s vnitřním průměrem 1,5 cm na vodovodní kohoutek na koleji a druhý konec položila na okraj okna na 8. poschodí ve výšce 23 m nad zemí. Jaký objemový průtok vody by musel kohoutek mít, aby se Dance podařilo postříkat proudem vody lidi stojící pod kolejí ve vodorovné vzdálenosti 9 m od budovy, kteří ruší noční klid? Může se to Dance podařit, pokud voda stříká vodorovně a nefouká vítr?

*Bonus* Kde nejdále mohou stát tito lidé, aby na ně Danka hadicí dostříkla, pokud je objemový průtok kohoutku  $0,41 \cdot \text{s}^{-1}$ ? Danka teď může konec hadice natočit tak, aby voda stříkala pod libovolným úhlem vůči vodorovné rovině. *(řešení str. 39)*

**Úloha III.2 ... topení na chalupě**

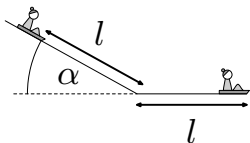
3 body

Danka přišla uprostřed zimy na svou chalupu, kde bylo uvnitř jen  $T_1 = 12^\circ\text{C}$ . Zapálila proto v krbu oheň, kde topila dřevem s výhřevností  $H = 14,23 \text{ MJ} \cdot \text{kg}^{-1}$ . Kolik ho musí spálit, aby ohřála vzduch vevnitř na  $T_2 = 20^\circ\text{C}$ ? Chalupa má tvar kvádr s rozměry  $a = 6 \text{ m}$ ,  $b = 8 \text{ m}$  a  $c = 3 \text{ m}$ , kde  $c$  je výška stěn, a střechou ve tvaru nepravidelného ležatého trojbokého hranolu s výškou  $v = 1,5 \text{ m}$ , jehož horní hrana je osou půdorysu chalupy. Vzduch zabírá 87 % objemu chalupy, jeho hustota je  $\rho_v = 1,29 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$  a měrná tepelná kapacita je  $c_v = 1007 \text{ J} \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{K}^{-1}$ . Odpovídá výsledek očekávání? Diskutujte nad použitým jednoduchým modelem. *(řešení str. 42)*



### Úloha III.3 ... bobování

5 bodů



Matěj s Davidem se kloužou na bobech z kopce se sklonem  $\alpha = 29^\circ$ , který v jeho patě přechází ve vodorovnou zem. Oba vyrazili z klidu ze stejné výšky. Matějovy boby ujedou vždy stejnou vzdálenost  $l$  po nakloněné rovině i ve vodorovné části. Protože se při vyšší zátěži boby proboří hlouběji do sněhu, uvažujte, že třecí koeficient

je úměrný normálové síle jako  $f(F) = kF$ , kde  $k$  je kladná konstanta. Určete, kolikrát dále dojede Matěj od paty kopce než David, je-li Davidova hmotnost (i s boby) o 12 % vyšší než Matějova. V patě kopce bobaři neztrácí žádnou energii.

(řešení str. 43)

### Úloha III.4 ... útěk na Tau Ceti

7 bodů

Protože naše Slunce jednou exploduje, bude potřeba zorganizovat stavbu evakuační lodí, v níž alespoň 0,000 001 % lidstva získá možnost uniknout. Pro únik si vyberou hvězdu Tau Ceti vzdálenou 12 ly. Podaří se jim sestrojít motory, které za velmi krátký čas zrychlí loď na cestovní rychlost  $v = 0,75c$ . Bohužel, právě v polovině vzdálenosti k cíli upozorují jak explozi Slunce, tak explozi Tau Ceti. Jak dlouho před touto strašlivou scénou exploze nastaly v soustavě spojené s lodí? A kdy v soustavě, ve které jsou Slunce i Tau Ceti nehybné? Předpokládejte, že se vzdálenost mezi oběma hvězdami nemění.

(řešení str. 45)

### Úloha III.5 ... kytarová

10 bodů

Mějme kytaru naladěnou při pokojové teplotě. O kolik pultónů (při temperovaném ladění) se přeladí jednotlivé struny, pokud se přesuneme k táboráku, kde bude o  $10^\circ\text{C}$  chladněji? Bude kytara stále znít naladěně? Vzdálenost mezi body upevnění strun je  $d = 65\text{ cm}$ . Struny mají hustotu  $\rho = 8900\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ , Youngův modul pružnosti  $E = 210\text{ GPa}$  a teplotní roztažnost  $\alpha = 17\cdot 10^{-6}\text{ K}^{-1}$ .

(řešení str. 47)

### Úloha III.P ... absurdní kyvadlo

9 bodů

Jaké jevy mohou ovlivnit měření tíhového zrychlení pomocí kyvadla? Odhadněte, kolik platných cifer by musel obsahovat váš výsledek, abyste je naměřili. Uvažujte i jevy, které běžně zanedbáváte.

(řešení str. 50)

### Úloha IV.1 ... vybíjení baterie

3 body

Robert zjistil, že do své nové čelovky musí dát 3 baterie o kapacitě  $1000\text{ mAh}$  a napětí  $U = 1,5\text{ V}$ . V čelovce jsou baterie zapojeny sériově. Za jak dlouho se baterie vybíjí, pokud napájí čelovku o výkonu  $P = 5\text{ W}$  a účinnosti  $\eta = 90\%$ ?

(řešení str. 57)



**Úloha IV.2 ... zmražený balónek**

3 body

Balónek o hmotnosti  $m_b = 2,7\text{ g}$  a objemu  $V_0 = 41$  byl napuštěn heliem o stejné teplotě, jakou má okolní vzduch, tedy  $T_0 = 20\text{ °C}$ . Uvnitř balónku je tlak o  $\Delta p = 2\text{ kPa}$  vyšší než v okolí. Na jakou teplotu musíme balónek a plyn v něm zchladit, aby se přestal vznášet? Předpokládejte, že po zchlazení bude v balónku atmosférický tlak. (řešení str. 57)

**Úloha IV.3 ... uzavírka na silnici**

6 bodů

Všichni to známe – uzavírky na silnicích a nekonečné stání na semaforech. Zelená svítí po dobu 60 s, ale než se stačí všichni rozjet, už je zase červená. Uvažujme 0,5 s reakční dobu řidiče, než se rozjede poté, co se dalo do pohybu auto před ním. O kolik procent by se zvýšil počet aut, která projedou uzavírkou, kdyby se všichni ve frontě rozjeli současně? První auto stojí na úrovni semaforu, vzdálenost předních nárazníků všech aut odhadněme na 5 m a všechna se rozjíždí rovnoměrně zrychleně po dobu 5 s na rychlost  $30\text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ , kterou pak pokračují dále do uzavírky. (řešení str. 58)

**Úloha IV.4 ... vystřelený dalekohled**

7 bodů

Máme hvězdářský (Keplerův) dalekohled, který chceme vyslat do vesmíru. Nejdřív si ho však vyzkoušíme na Zemi, kde naměříme zvětšení  $Z$ . Jak se musí změnit vzájemná vzdálenost čoček, aby měl stejné zvětšení i ve vesmíru? Čočky mají index lomu  $n$ . (řešení str. 59)

**Úloha IV.5 ... vesmírná návštěva**

9 bodů

Dva mimozemšťané bydlí každý na své kosmické stanici. Stanice se nacházejí ve volném prostoru a vzdálenost mezi nimi je  $L$ . Když chce jeden mimozemšťan navštívit druhého, musí nasednout do své nerelativistické rakety a doletět k sousedovi. Jaký nejkratší čas může mimozemšťan strávit na cestě tam i zpět? Hmotnost rakety s palivem je  $m$ , bez paliva  $m_0$ . Výtoková rychlost spalin je  $u$ , tok paliva je libovolný. Jeho soused mu žádné palivo načerpat nedovolí (sám má málo). (řešení str. 60)

**Úloha IV.P ... lodička si pluje**

10 bodů

Diskutujte, jaké fyzikální jevy ovlivňují rychlost plavby lodi a ponorky. Jaké odporové síly na ně působí? Jakou nejvyšší rychlostí loď nebo ponorka může plout? (řešení str. 61)

**Úloha V.1 ... zamáčkly flażolet**

3 body

Vojta hraje na violoncello. Na strunu naladěnou na frekvenci  $f$  zlehka přiloží prst do vzdálenosti  $1/n$  její délky od hlavy nástroje a rozezní ji, přičemž slyší tón o základní frekvenci  $f_1$ . Následně strunu na stejném místě úplně přimáčkne ke hmatní-

ku a rozezná ji znovu. Tentokrát nástroj vydává tón o základní frekvenci  $f_2$ . Určete poměr frekvencí  $f_1/f_2$  v závislosti na přirozeném čísle  $n$ . (řešení str. 67)

### Úloha V.2 ... dopravní pás

3 body

Na pohybující se vodorovný dopravní pás každou sekundu svisele dopadá materiál o hmotnosti  $\mu$ , který na jeho konci padá pryč. Na pás působí odporová síla  $F_{\text{odp}} = kv$ , která je přímo úměrná rychlosti pásu  $v$  přes konstantu  $k$ . Jak velkou rychlostí se bude pás pohybovat, pokud

- na něj působí konstantní pohonná síla  $F$ ?
- je poháněn motorem s konstantním výkonem  $P$ ?

(řešení str. 68)

### Úloha V.3 ... čekáme na výtah

6 bodů

Karel jezdí výtahem v budově, která má přízemí a nad ním dalších 12 pater, přičemž výška jednoho patra je  $h = 3,0$  m. Uvažujte, že výtah během své jízdy polovinu doby zrychluje a druhou polovinu doby zpomaluje konstantním zrychlením  $a = 1,0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ . S 50% pravděpodobností výtah stojí v přízemí a zbytek pravděpodobností je rovnoměrně rozdělený mezi ostatní patra. Jaká je očekávaná doba čekání na výtah v jednotlivých patrech budovy? Zanedbejte čas otevírání dveří.

*Bonus* Mějme 2 výtahy opět v dvanáctipatrové budově. Jeden výtah bude odvolávaný do přízemí. Do jakého patra bychom měli posílat druhý, abychom minimalizovali průměrnou dobu čekání? Předpokládejte analogicky, že polovina jízdy bude začínat v přízemí a druhá polovina s rovnoměrnou pravděpodobností v libovolném z dalších pater. (řešení str. 69)

### Úloha V.4 ... Dark Side Time

8 bodů

FYKOS plánuje vyslat do vesmíru vlastní družici. Ta bude poháněna solárními články, potřebujeme proto, aby se ve stínu Země nenacházela příliš dlouho. V jaké výšce nad povrchem bude doba průletu stínem Země nejmenší? Při svých výpočtech uvažujte (stejně jako organizátoři), že Země je dokonale kulatá, sluneční paprsky jsou v jejím okolí paralelní a Slunce, Země a trajektorie družice se nachází v jedné rovině.

*Bonus* Během řešení narazíte na analyticky neřešitelnou rovnici. Nepoužívejte online řešiče, ale naprogramujte vlastní řešení. (řešení str. 72)

### Úloha V.5 ... xenon šel na vandr

8 bodů

Jednou kladně ionizovaný atom xenonu vyletěl rychlostí  $v = 7 \text{ m} \cdot \text{s}^{-1}$  ze středu velké válcové cívky a začal se pohybovat homogenním magnetickým polem v rovině kolmé na magnetické siločáry. V tu chvíli cívku odpojíme od zdroje, takže její indukce začne exponenciálně klesat podle vztahu  $B(t) = B_0 e^{-\Omega t}$ , kde  $B_0 = 1,1 \cdot 10^{-4} \text{ T}$

a  $\Omega = 600 \text{ s}^{-1}$ . S jakou odchylkou od původního směru se atom bude pohybovat po ustálení?

*Nápověda:* V úloze se nebojte použít vhodnou aproximaci, nebo ji zkuste řešit numericky. (řešení str. 76)

### Úloha V.P ... napjatý strom

10 bodů

Popište co nejvíc přírodních vlivů, které způsobí vyvrácení/silné poškození osamocené stromu na louce. Jeden z nich zkuste co nejlépe kvalitativně rozebrat. Jaký je rozdíl mezi listnatým stromem a jehličnanem?

*Bonus* Některý z vlivů rozeberte i kvantitativně. (řešení str. 79)

### Úloha VI.1 ... vodácká záhada

3 body

Za slunečného letního počasí pozorujeme na řece během dne zajímavý průběh chování větru. Ráno při východu slunce je zima a někdy i ranní mlha. Ta se následně rychle rozplyne a teplota vzduchu roste. Poté se rozfouká slabý vítr proti proudu řeky. Večer se situace uklidní a po sklonění slunce k obzoru se směr větru obrátí po proudu řeky. Čím je tento úkaz způsobený? Vysvětli proces, který v těchto dvou případech probíhá. (řešení str. 82)

### Úloha VI.2 ... shnilé jablko

3 body

Jarda našel po FYKOSím soustředění ve svém batohu jablko, které už nebylo v dobrém stavu. Hodil ho do nízkého koše na kuchyňský odpad vzdáleného 1,0 m a samozřejmě se trefil. Jablko házel vodorovně z výšky 0,5 m, dopadlo na rozmezí stěny a dna koše, kde se rozpláclo. Koš o hmotnosti 910 g se po dopadu jablka posunul o vzdálenost 5 cm. Jaký je koeficient tření mezi podlahou a košem? Jablko má hmotnost 230 g. (řešení str. 83)

### Úloha VI.3 ... odporné bipyramidky

5 bodů

V drátěném modelu pravidelného  $2N$ -stěnného dvojjechlanu jsou vodivá spojení v rovině symetrie tvořena odpory  $R_2$ , zatímco spojení jdoucí z jednoho z vrcholů do bodu v pravidelném  $N$ -úhelníku mají odpor  $R_1$ . Určete odpor mezi

- hlavními vrcholy (nad a pod rovinou základny),
- sousedními vrcholy v rovině základny,
- protějšími vrcholy v rovině základny (ty nejvzdálenější) pro  $N$  sudé.

(řešení str. 84)

### Úloha VI.4 ... světlo rychlejší než světlo

7 bodů

Ve vzdálenosti  $L$  od rozlehlého stínítka se nachází laser. Ten až do času  $t = 0$  s svítí na stínítko tak, že vzdálenost skvrny od laseru je  $R > L$ . Náhle začneme laserem otáčet rovnoměrnou úhlovou rychlostí  $\omega$ , přičemž vzdálenost skvrny na stínítku od laseru se zmenšuje na  $L$  a následně zpět na  $R$ . Vyjádřete rychlost této skvrny vzhledem na stínítko. Může překročit rychlost světla ve vakuu  $c$  nebo být dokonce

nekonečná? Jak (kvalitativně) tato rychlost závisí na poloze skvrny na stínítku?  
Celá aparatura se nachází ve vakuu. (řešení str. 90)

### Úloha VI.5 ... gadoliniová koule

9 bodů

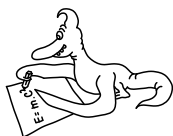
Jaké nejmenší množství gadolinia 148 je nutné dát k sobě dohromady, aby se svým jaderným rozpadem zahřívalo tak, že by došlo k lokálnímu tavení? Uvažujte, že probíhají pouze rozpady  $\alpha$  a že materiál je ve vzduchu pokojové teploty.

(řešení str. 93)

### Úloha VI.P ... zem na plné obrátky

10 bodů

Odhadněte horní limit práce za čas, kterou je možné na Zemi dlouhodobě vykonávat. Planeta musí zůstat obyvatelná a pokud možno se stejným klimatem i pro další generace. (řešení str. 100)



## Řešení teoretických úloh

### Úloha I.1 ... užitečné máslo

Jarda se rozhodl upéct koláč, ale zjistil, že se v jeho kuchyňské váze vybila baterka a nemá jak odvážit 300 g mouky. Napadlo ho však, že může použít kostku másla, na které je napsáno, že má hmotnost  $m = 250$  g. Naštěstí našel ještě vhodnou pružinu a stopky. Na velmi lehkou místičku nasypal hromádku mouky, připevnil na pružinu, rozkmital a změřil periodu  $T_1 = 2,8$  s. To stejné udělal s kostkou másla a naměřil  $T_2 = 2,3$  s. Poradte Jardovi, kolik mouky má přidat nebo odebrat.

*Když Jardu vyhodí z Matfyzu, otevře si pekárnu.*

Pro periodu kmitu mouky zavěšené na pružině platí známý vztah

$$T_1 = 2\pi\sqrt{\frac{m_m}{k}},$$

kde  $k$  je tuhost pružiny a  $m_m$  je hmotnost mouky. Analogicky lze periodu kmitu másla vyjádřit jako

$$T_2 = 2\pi\sqrt{\frac{m}{k}}.$$

Rovnice podělíme, upravíme a dostaneme

$$m_m = m \frac{T_1^2}{T_2^2} \doteq 0,37 \text{ kg}.$$

Jarda tak musí 70 gramů mouky odsypat, než začne zpracovávat těsto.

### Úloha I.2 ... vážíme neznámý předmět

Mějme ideální váhu, kterou zkalibrujeme státním etalonem o hmotnosti  $m_e = 1,000\,000\,165$  kg a hustotě  $\rho_e = 21\,535,40$  kg·m<sup>-3</sup>. Kalibrační myslíme to, že po položení etalonu na váhu přiřadíme naměřené hodnotě právě hmotnost  $m_e$ . Vážení neznámého předmětu pak provedeme za stejných podmínek, při kterých má objem  $V_0 = 3,242\,27$  dl. Jestliže jsme navázili váhu  $G = 1,420\,12$  N, jakou hmotnost jsme naměřili? Jaká je skutečná hmotnost předmětu? Experiment provádíme v místě s normálním tíhovým zrychlením  $g = 9,806\,65$  m·s<sup>-2</sup> a hustotou vzduchu  $\rho_v = 1,292\,23$  kg·m<sup>-3</sup>. Uvažujte, že kalibrace je lineární a že nezatížená váha ukazuje nulu.  
*Karel chtěl použít etalon.*

Ještě než se pustíme do samotného řešení, zavedme následující značení veličin. Vždy bude existovat nějaká přesná síla, která působí na váhu, tu označíme  $F$ . Jako  $G$  potom označíme sílu, kterou v procesu vážení naměříme, jako  $M$  hmotnost,

kteřou naměříme, a nakonec  $m$  bude značit skutečnou hmotnost váženého předmětu. Při kalibraci váhy pak v podstatě stanovujeme závislost veličin  $G$  a  $M$  na síle  $F$ . Dále si uvědomme, že pro nezatíženou váhu i pro vážený etalon musí platit  $M(F) = m(F)$ . Z toho budeme vycházet při kalibraci.

Při řešení příkladu bude nyní naším úkolem najít vztahy mezi zmíněnými veličinami. Začneme konstatováním, že mezi skutečnou silou  $F$  a hmotností  $m$  vždy platí z Archimédova zákona následující vztah

$$\begin{aligned} F &= F_G - F_{vz}, \\ F &= (m - V\rho_v)g, \end{aligned} \quad (1)$$

kde  $V$  je objem váženého předmětu a  $\rho_v$  hustota vzduchu. Zbývá nám tedy najít vztahy mezi veličinami  $F$  a  $G$  a následně mezi  $G$  a  $M$ . Protože ale známe ze zadání pouze vztah mezi  $M_e$  a  $F_e$  (hodnotu  $G_e$  neznáme), musíme něco předpokládat.

Uvědomme si, co v našem případě znamená kalibrace. Měřicí přístroj velmi často funguje tak, že při měření nějaké veličiny přímo změří veličinu jinou a v závislosti na nějakých referenčních hodnotách určí vztah mezi těmito veličinami. Právě stanovení tohoto vztahu se nazývá kalibrace.

Máme dvě možnosti, jak příklad chápat. První možností je, že váha změří sílu přesně. Bude tedy v našem zavedeném značení platit  $F = G$  a při kalibraci budeme hledat, jak na této síle závisí hmotnost. Váha v tomto případě uvnitř funguje jako dokonalý siloměr.

Druhou možností je, že váhu přímo ztotožníme se siloměrem, který teprve kalibrujeme. Budeme tedy při kalibraci hledat, jak závisí naměřená síla  $G$  na skutečné síle  $F$  a pro naměřenou hmotnost položíme  $G = Mg$ .

Tyto dvě možnosti si jsou na první pohled velmi blízké, ale ve skutečnosti se při procesu kalibrace jedná o velmi zásadní rozdíl a v obou případech budeme mít úplně jiné výsledky.

Obě možnosti při opravování považujeme za správné. Myslíme si ovšem, že první řešení má trochu blíže formulaci ze zadání, protože při druhém řešení je kalibrovaný přístroj přísně vzato siloměrem a při prvním řešení je kalibrovaný přístroj váhou.

*Měřenou veličinou je hmotnost a přímo naměřenou veličinou je síla (kalibrace vah)*

Máme přesně naměřenou sílu, která působí na váhu a podle informace ze zadání hledáme funkci  $m(F) = kF + c$ . Do této síly se promítá nejen hmotnost měřeného tělesa (zmenšená o určitý faktor, který je způsobený vztlakovou silou), ale navíc i sloupec vzduchu nad ní. Protože v nezatíženém stavu máme ovšem nulovou sílu, pak hledaný koeficient  $c$  musí být nutně nulový a silové působení sloupce vzduchu na váhu již nemusíme uvažovat.

V tomto případě je velmi jednoduché dopočítat skutečnou hmotnost předmětu – můžeme totiž rovnou vyjít z rovnice (1) a dostaneme

$$m = \frac{G}{g} + V_0\rho_v \doteq 145,231 \text{ g}.$$

Jaký bude rozdíl mezi touto skutečnou hmotností předmětu a hmotností, kterou navážíme pomocí nakalibrovaných vah? Bude dán tím, že váhy neumějí pracovat s objemem tělesa.

Označme  $G_e$  naměřenou váhu etalonu. Hledáme koeficient  $k$  z kalibrační rovnice. Potom budeme již schopni najít naměřenou hmotnost neznámého předmětu pomocí vztahu  $M = \frac{G}{k}$ .

Rovnici pro  $G_e$  sestavíme analogicky jako v předchozím případě a vyjde nám

$$G_e = V_e(\rho_e - \rho_v)g \quad \Rightarrow \quad G_e = m_e g \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_e}\right).$$

Vidíme tedy, že  $k = g(1 - \rho_v/\rho_e)$ . Kalibrované váhy tedy budou ukazovat

$$M = \frac{G}{g\left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_e}\right)} \doteq 144,821 \text{ g}.$$

*Měřenou veličinou je síla, ze které dopočítáme hmotnost (kalibrace siloměru)*

V tomto případě můžeme přímočaře ze zadání určit, jakou hmotnost jsme naměřili. Váhu totiž považujeme za (nepřesně) zkalibrovaný siloměr, proto máme pro naměřenou tíhu  $G$  naměřenou hmotnost

$$M = \frac{G}{g} \doteq 144,812 \text{ g}.$$

Nyní budeme chtít najít funkci  $G(F) = k'F + c'$ . Užitím stejných argumentů jako výše můžeme prohlásit, že  $c' = 0$ , a hledat dále pouze  $k'$ .

Při kalibraci etalonem položíme  $G_e = m_e g$ , což se ale liší od síly  $F_e$ , kterou znovu určíme z rovnice (1). Koeficient  $k'$  tedy určíme jako

$$k' = \frac{G_e}{F_e} = \frac{m_e g}{(m_e - V_e \rho_v)g} = \frac{1}{1 - \frac{\rho_v}{\rho_e}}.$$

Ještě jednou tedy vyjdeme z (1) a dostaneme

$$m = \frac{F}{g} + V_0 \rho_v = \frac{G}{gk'} + V_0 \rho_v = \frac{G}{g} \left(1 - \frac{\rho_v}{\rho_e}\right) + V_0 \rho_v \doteq 145,222 \text{ g}.$$

*Závěr a několik poznámek*

Všimněme si, že obě řešení pro stejnou sílu  $F$  dají úplně stejnou hmotnost  $M$  – výsledek úlohy je jiný jen proto, že se v obou přístupech liší naměřená síla  $G$ .

Uvědomme si také, že váhy mohou měřit přesně pouze pro tělesa, jejichž hustota je rovna hustotě etalonu. Je také nutné podotknout, že veškeré hodnoty byly uvedeny se zbytečně velkou přesností. Jednak je to kvůli efektu vztlačkové síly, jednak bychom u takto přesného měření již pocítili dokonce i vliv proudů vzduchu v laboratoři a spoustu dalších efektů.

### Úloha I.3 ... zavařujeme

Do válcové sklenice o výšce  $h = 7,0$  cm a vnitřním poloměru  $r = 2,5$  cm nalijeme horkou meruňkovou marmeládu o teplotě  $T_0 = 80$  °C, zavřeme ji víčkem a necháme chladnout, přičemž mezi marmeládou a víčkem je ve sklenici trochu vzduchu. Víčko se může lehce promáčknout dovnitř, když na něj působí alespoň síla  $F = 4$  N. Při promáčknutí se ozve zvuk, který jsme slyšeli po čase  $t_p = 30$  min od zavření skleničky. Jestliže marmeláda tuhne při teplotě  $T_t = 60$  °C, bude již při promáčknutí víčka ztuhlá?

*Bonus* Jak dlouho po začátku chladnutí marmeláda ztuhne? Předpokládejme, že teplota je v celé sklenici všude stejná a rychlost chladnutí závisí pouze na rozdílu teplot ve sklenici a okolní teploty  $T_{ok} = 25$  °C.

*Jardovi letos pomrzly meruňky, tak vzpomíná na jiné roky.*

Nejprve si rozeberme, co se vlastně děje. Při nalití do sklenice má marmeláda teplotu  $T_0$ . Trocha vzduchu nad ní se ohřeje na stejnou teplotu – tu si uchová i bezprostředně po uzavření víčkem. Ve sklenici je tedy na počátku vzduch o teplotě  $T_0$  a atmosférickém tlaku  $p_0$ . Sklenice (a vzduch v ní) začne chladnout. Před promáčknutím se objem vzduchu nemění, dochází k izochorickému ochlazování.

K promáčknutí víčka dojde v okamžiku, kdy na něj působí síla  $F$ , která je daná rozdílem tlaků vzduchu uvnitř a vně sklenice

$$F = (p_0 - p_p) S \quad \Rightarrow \quad p_p = p_0 - \frac{F}{S},$$

kde plocha víčka je  $S = \pi r^2$  a  $p_p$  je tlak uvnitř sklenice, při kterém dojde k promáčknutí.

Jednoduchou trojčlenkou (Charlesův zákon) vyjádříme teplotu vzduchu uvnitř sklenice při promáčknutí jako

$$T_p = T_0 \frac{p_p}{p_0} = T_0 \left( 1 - \frac{F}{\pi r^2 p_0} \right) \doteq 346 \text{ K} \doteq 73 \text{ °C}.$$

Teplotu nesmíme zapomenout do vzorce udávat v Kelvinech. Při promáčknutí víčka tak má marmeláda teplotu stále asi 73 °C.

#### *Bonus*

Tuto vypočtenou teplotu měla marmeláda po čase  $t$  od začátku chladnutí. Pokud budeme znát časový vývoj teploty sklenice, můžeme nalézt čas, kdy marmeláda bude mít teplotu tuhnutí. Předpoklad, že rychlost ochlazování sklenice je úměrná rozdílu její teploty a teploty okolí, můžeme zapsat ve tvaru diferenciální rovnice

$$\frac{dT}{dt} = -k(T - T_{ok}),$$

kde  $k$  je konstanta udávající, jak rychle se sklenice ochlazuje, a  $T$  je teplota sklenice. Rovnici vyřešíme separací proměnných a integrací

$$T = (T_0 - T_{ok}) e^{-kt} + T_{ok},$$



kde jsme konstantu před exponenciálou našli tak, aby teplota sklenice a marmelády v čase  $t = 0$  byla rovna  $T_0$ .

Jediný parametr, který ve funkci  $T(t)$  neznáme, je  $k$ . Známe ovšem teplotu sklenice v čase  $t_p = 30$  minut, pro kterou platí

$$T_p = (T_0 - T_{ok}) e^{-kt_p} + T_{ok} \quad \Rightarrow \quad k = \frac{1}{t_p} \ln \frac{T_0 - T_{ok}}{T_p - T_{ok}}.$$

Jestliže teplota tuhnutí je  $T_t$ , pak pro ni platí

$$T_t = (T_0 - T_{ok}) e^{-kt_t} + T_{ok} \quad \Rightarrow \quad t_t = t_p \frac{\ln \frac{T_0 - T_{ok}}{T_t - T_{ok}}}{\ln \frac{T_0 - T_{ok}}{T_p - T_{ok}}}.$$

Po dosazení za teplotu  $T_p$  dostáváme čas ztuhnutí marmelády jako

$$t_t = t_p \frac{\ln \frac{T_0 - T_{ok}}{T_t - T_{ok}}}{\ln \frac{T_0 - T_{ok}}{T_0 \left(1 - \frac{F}{\pi r^2 p_0}\right) - T_{ok}}} \doteq 98 \text{ min}.$$

Marmeláda ztuhne po 98 minutách od zavření víčka.

## Úloha I.4 ... doprava na horách

Na úpatí hory tvaru dokonalého kužele s vrcholovým úhlem  $\alpha = 90^\circ$  stojí město. Přesně na opačné straně hory ve stejné nadmořské výšce je železniční stanice, proto se radní z města rozhodli pro stavbu silnice ke stanici. Můžou postavit buď tunel, nebo cestu vést po povrchu hory. Jaký může být maximální poměr ceny za kilometr tunelu ku ceně za kilometr silnice, aby byla stavba tunelu levnější? Silnici lze vést libovolnou trasou po povrchu hory. *Matěj staví Semmeringbahn.*

Radní mají několik možností, jak cestu postavit. Mohou vykopat tunel od města až přímo k železniční stanici (možnost A) nebo můžou vést celou cestu po povrchu hory (možnost B). Můžou také vést část cesty z města po povrchu, pak tunelem a pak zase po povrchu až k železniční stanici (možnost C).

### Případ A

Označme si vzdálenost města od vrcholu hory  $l$ . Jestliže  $\alpha$  je úhel město–vrchol–stanice, tak prostorová vzdálenost  $s_A$  města od stanice je

$$s_A = 2l \sin \frac{\alpha}{2},$$

což je zároveň i délka tunelu z města ke stanici.

**Případ B**

Tato možnost je komplikovanější, protože nyní nemusí být jasné, kudy má cesta vést. V případě A jsme vedli tunel nejkratší možnou spojnicí v prostoru – po úsečce. Nyní by se mohlo zdát, že musíme vést cestu po zakřiveném povrchu, což je náročnější<sup>1</sup>. Ve skutečnosti ale povrch kužele není zakřiven, jak by se mohlo zdát. Můžeme jej totiž rozbalit a plášť kužele rozložit do rovné 2D plochy.<sup>2</sup> Po tomto rozbalení již můžeme spojit město s železnicí snadno pomocí úsečky a spočítat její délku.

Obvod podstavy kužele je  $o = \pi s_A$  a ústí tunelu ho dělí na poloviny. Plášť kužele je kruhová výšce  $o$  středovém úhlu  $\varphi = o/l$ . Cesta po povrchu je tak tvořena základnou rovnoramenného trojúhelníka s rameny délky  $l$  a úhlem  $\varphi/2$  mezi nimi. Délka této cesty tedy je

$$s_B = 2l \sin \frac{\varphi}{4} = 2l \sin \left( \frac{1}{2} \pi \sin \frac{\alpha}{2} \right),$$

což je nejkratší spojnice města a železnice po povrchu hory.

**Případ C**

O třetí možnosti lze bez potřeby výpočtů ukázat, že není optimální. Ze symetrie problému plyne, že se cesta z města do začátku tunelu musí být zrcadlově symetrická k cestě z konce tunelu do nádraží. Jedině tak se nám podaří přiblížit konce tunelů tak, abychom museli kopat co nejkratší tunel. Předpokládejme, že by neefektivnějším řešením našeho problému byla možnost C. Tj. postavit cestu z města po povrchu do nějakého bodu, odtamtud vést tunel do zrcadlového bodu a odtud vést cestu k železnici.

Nyní ukážeme, že v optimálním řešení nemůže tunel procházet osou hory. Podívejme se na poměr délky tunelu ku délce pomyslné cesty po povrchu, kterou tunel ušetřil. V případě tunelu vedoucího mimo osu hory je tento poměr určitě ostře větší, než když tunel prochází osou. To platí, protože pomyslná cesta po povrchu vede relativně menší oklikou (vzhledem k délce tunelu), když je tunel blíže k povrchu. Dochází tak k nižší cenové úspoře, a proto se takto kratší mimoosý tunel nikdy nevyplatí stavět.

Pokud by tunel procházel osou hory, tak bude cesta konstruována dosti nešikovným způsobem – silnice povede z města i ze stanice přímo směrem k vrcholu hory a tunel bude položen vodorovně ve vyšší nadmořské výšce. Pokud by toto měla být optimální konstrukce, znamená to, že se mezi těmito vyššími konci tunelů nevyplatí vést cestu po povrchu (analogicky jako cesta v případě B). Jelikož ale poměr délky A ku B není závislý na výšce hory, strategie s výše položeným tunelem nedává ekonomicky smysl, protože si tím jen přidáváme dva nepřijemné úseky cesty.

Tímto sporem jsme ukázali, že případ C nemusíme brát v potaz.

<sup>1</sup>V obecném případě bychom se mohli uchýlit k diferenciální geometrii a využít geodetickou rovnici. *Geodetiky* jsou totiž nejkratší spojnice dvou bodů v zakřiveném prostor(-u/-očase).

<sup>2</sup>Můžeme říkat, že povrch kužele nemá *vnitřní* zakřivení, ale má pouze *vnější* křivost, která je dána tím, jak je „rovný“ 2D plášť vnořen do 3D prostoru.

### Závěr

Kritický poměr ceny za kilometr tunelu ku ceně za kilometr cesty na povrchu je poměr délky povrchové cesty ku délce tunelu

$$\frac{s_B}{s_A} = \frac{\sin\left(\frac{1}{2}\pi \sin \frac{\alpha}{2}\right)}{\sin \frac{\alpha}{2}} \doteq 1,267,$$

Pokud je poměr cen nižší, vyplatí se kopat tunel. Pokud je vyšší, vyplatí se vést cestu kolem hory. V praxi můžeme očekávat, že poměr cen bude řádově vyšší. Přesto se někdy vyplatí kopat tunely, protože reálné hory nejsou kuželovité a často nelze postavit cestu okolo.

Všimněme si, že pokud bychom si neuvědomili, že cestu nemusíme nutně vést vodorovně, vyšel by kritický poměr vyšší, a sice  $\pi/2 = 1,571$ .

### Úloha I.5 ... a zase ta U-trubice

Do U-trubice s celkovou délkou  $l$  a průřezem o obsahu  $S$  nalijeme  $V$  vody (tak, aby byl celý ohyb pod vodou a současně platilo  $S l > V$ ) a necháme ustálit hladinu. Jeden konec U-trubice uzavřeme a vodní hladinu rozkmitáme. Jaká bude perioda malých kmitů vodního sloupce? Karlovi zase hráblo.

V ustáleném stavu bude hladina v obou částech U-trubice stejně vysoko. Odchylku od této rovnovážné polohy označíme  $x$ . Necht' je  $x > 0$  při poklesu hladiny v uzavřené části trubice. Potenciální energii soustavy při odchylce  $x$  budeme značit  $E_p(x)$ .

Lze ukázat<sup>3</sup>, že pro periodu malých kmitů soustavy s potenciální energií závislou pouze na výchylce platí

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{m}{E_p''(x_0)}}, \quad (2)$$

kde  $x_0$  je rovnovážná poloha výchylky (v našem případě  $x_0 = 0$ ),  $E_p''$  je druhá derivace  $E_p$  podle  $x$  a  $m$  je oscilující hmotnost. Výpočet potenciální energie nemusí být v tomto případě snadný, proto místo ní spočítáme sílu. Pro ní totiž platí  $F = -E_p'$ , takže můžeme psát  $E_p'' = -F'$ .

Na vodu působí dvě síly, tlaková a tíhová. Tlak v uzavřené části označme  $p$ , v otevřené bude atmosférický  $p_a$ . Tlaková síla bude zřejmě  $F_p = (p - p_a) S$ . Jelikož jsou oscilace velmi rychlé, stlačování a roztahování vzduchu bude adiabatické, neboli

$$pV_u^\kappa = p_a V_0^\kappa,$$

kde  $\kappa$  je Poissonova konstanta vzduchu,  $V_0$ , resp.  $V_u$ , je počáteční, resp. průběžný objem v uzavřené části a  $p$  je tlak při objemu  $V_u$ . Jelikož je trubice válcová (kromě ohybu dole, který je stejně zaplněn vodou), je její objem

$$V_0 = Sa, \quad V_u = S(a + x),$$

<sup>3</sup>David Morin: *Introduction to Classical Mechanics*.

kde  $a$  je počáteční výška vzduchu v uzavřené trubici. Dosazením do vztahu pro tlakovou sílu dostaneme

$$F_p = (p - p_a) S = p_a \left( \left( \frac{V_0}{V_u} \right)^\kappa - 1 \right) S = p_a \left( \left( \frac{a}{a+x} \right)^\kappa - 1 \right) S.$$

Tíhovou sílu určíme jednoduše – poklesne-li v jedné části voda o  $x$ , ve druhé musí stoupnout o  $x$ . Tím na jedné straně vznikne blok vody o výšce  $2x$  působící silou

$$F_g = -2S\rho gx,$$

kde záporné znaménko znamená, že síla působí proti výchylce. Složením obou sil dostáváme

$$F = F_p + F_g = \left( p_a \left( \left( \frac{a}{a+x} \right)^\kappa - 1 \right) - 2\rho gx \right) S.$$

Nyní můžeme spočítat druhou derivaci potenciální energie

$$\begin{aligned} E_p'' &= -F' = (\kappa p_a a^\kappa (a+x)^{-\kappa-1} + 2\rho g) S, \\ E_p''(0) &= \left( \frac{\kappa p_a}{a} + 2\rho g \right) S. \end{aligned}$$

Poslední, co zbývá, je vyřešení geometrie trubice a určení  $a$ . Předpokládejme, že naše trubice má kruhový průřez (tak jako většina trubic). Označme  $r$  její vnitřní poloměr a  $R$  poloměr dolního ohybu. To je vlastně polovina toru. Vztah pro objem celého toru je

$$V_t = 2\pi^2 R r^2.$$

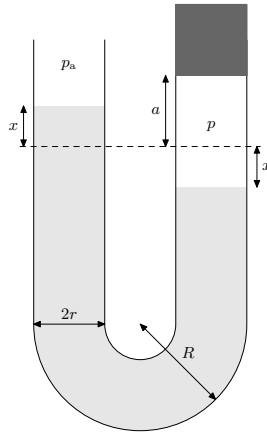
V našem případě voda zatopí celý ohyb čili polovinu toru, který představuje  $\pi R$  z délky trubice. Zbytek vody (neboli  $V - V_t/2$ ) zabere úsek trubice o délce  $l_v$ , takže pro vzduch zbyde

$$2a = l - \pi R - l_v = l - \pi R - \frac{1}{S} \left( V - \frac{1}{2} V_t \right) = l - \frac{V}{S}.$$

Jak vidíme, torus má stejný délkový objem jako rovné části trubice, čímž se výpočet značně zjednoduší.

Nakonec ještě určíme hmotnost vody jako  $m = \rho V$  a dosazením do (2) dostaneme výsledek

$$T = \pi \sqrt{\frac{2V}{S} \left( \frac{\kappa p_a}{\rho} \left( l - \frac{V}{S} \right)^{-1} + g \right)^{-1}}.$$



Obr. 1: Nákres situace.

## Úloha I.P . . . vlaková

Odhadněte spotřebu elektrické energie na jednu jízdu vlaku IC Opavan. Souprava se sedmi vozy má lokomotivu řady 151 a je schopná dosáhnout rychlosti  $v_{\max} = 160 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ . Pro jednoduchost uvažujte, že všichni cestující jedou z Prahy do Opavy. Skřítek jezdí domů vlakem.

### Základné parametre

Medzi pre nás základné parametre, ktoré potrebujeme vedieť je hmotnosť vlaku, uvažujeme podľa zadania plný vlak z východiskovej až do cieľovej stanice. Hmotnosti jednotlivých vozňov a lokomotívy sú v tab. 1<sup>4 5</sup>

Ďalší podstatný parameter, ktorý budeme potrebovať je činiteľ odporu  $C_x$ , ktorý odhadneme porovnaním tvaru vlaku s tabuľkovými hodnotami. Hodnotu sme nakoniec zvolili  $C_x = 0,9$ . Prierez vozidla  $S_{DV}$  budeme uvažovať ako obdĺžnik  $4 \text{ m} \times 3 \text{ m}$ ,<sup>6</sup>  $S_{DV} = 12 \text{ m}^2$ . Posledné, čo potrebujeme vedieť je jazdný čas, ktorý je 3 hod 43 min pre GVD 2021/2022,<sup>7</sup> teda  $t = 3,71 \text{ h}$ .

### Výškový profil trate

Železničná trať podobne ako ostatná líniová infraštruktúra kopíruje terén a prispôbuje sa mu, z tohoto dôvodu trať nevedie po rovine, ale stúpa a klesá. Vlak z Prahy do Opavy začína jazdu v stanici Praha hl.n. s nadmorskou výškou 210 m.n.m., následne začína stúpať z údolia Vltavy až do zastávky Tuklaty (260 m.n.m.), odtiaľ

<sup>4</sup>Spolek ŽelPage: Atlas vozů.cz, dostupné na webe <https://www.atlasvozu.cz/>

<sup>5</sup>VAGONY.CZ: tab. 1: hodnoty součinitele rotačních hmot, dostupné na webe <https://www.vagony.cz/vagony/energie.html>

<sup>6</sup>Ing. Vilém Hoffmann: Typový výkres rady 151

<sup>7</sup>SŽ s.o.: Jízdní řád, dostupné na webe <https://www.spravazeznic.cz/cestujici/jizdni-rad>

Tab. 1: Radenie vlaku s hmotnosťami prázdnych vozňov  $m_p$ , vozňov obsadených  $m_o$ , dĺžky vozňov  $l_v$ , počet cestujúcich  $n$  a rotačná hmotnosť vypočítaná a  $m_r = m_o(1 + \rho_r)$

DV	$\frac{m_p}{t}$	$\frac{m_o}{t}$	$\frac{l_v}{m}$	$\frac{n}{os}$	$\frac{m_r}{t}$
151	82	82	16,74	-	98,4
Bdpee <sup>231</sup>	41	47	24,5	72	49,82
Bmz <sup>226</sup>	48	53	26,4	66	56,18
Bmz <sup>226</sup>	48	53	26,4	66	56,18
Bmz <sup>226</sup>	48	53	26,4	66	56,18
Bbdgmee <sup>236</sup>	46	50	26,4	41	53
ARpeer <sup>61</sup> (ZSSK)	45	47	24,5	24	49,82
Ampz <sup>146</sup>	47	52	26,4	58	55,12
Spolu	405	437	197,74	393	474,7

klesá do údolia Labe, a pred Kolínom dosahuje minimum nadmorskej výšky, niečo málo pod 200 m.n.m. Z Kolína vlak stúpa popri Labe a následne údolím Orlice až do najvyššieho bodu našej cesty, Třebovice v Č., s výškou 420 m.n.m. Odtiaľ klesáme popri rieke Morave až do blízkosti sútoku Bečvy a Moravy tj. Výhybne Dluhonice (200 m.n.m.). Práve popri Bečve sa vydávame opäť do kopca až kúsok za Hranice n. M., konkrétne na zastávku Bělotín (290 m.n.m.), kde sa niveleta koľají opäť mení a klesáme popri rieke Odra do stanice Ostrava-Svinov (215 m.n.m.), kde sa odpájame z koridoru a ďalej budeme pokračovať po jednokoľajnej trati až do konečnej stanice Opava (255 m.n.m.)<sup>8</sup>

K výpočtu energie potrebnej na stúpanie budeme uvažovať jednoduchý model, kde potrebujeme zdvihnúť teleso o hmotnosti  $m_o$  do výšky rovnajúcej sa rozdielu jednotlivých staníc  $\Delta h = h_k - h_z$ , energia jedného stúpania bude  $E_i = \Delta h_i m_o g$  viď Tab. 2. Celkovú energiu  $E_{prev}$  vypočítame ako súčet všetkých stúpaní

$$E_{prev} = \sum_i \Delta h_i m_o g,$$

$$E_{prev} = 1,67 \text{ GJ} = 464 \text{ kWh}.$$

### Rýchlostný profil trate

Vlak nejde po celej trase rovnakou rýchlosťou. Kvôli oblúkom, stavu infraštruktúry, traťovému a staničnému zabezpečovaciemu zariadeniu nedosahuje na celej trase maximálnu rýchlosť, ale musí brzdiť a zrýchľovať. Rýchlostný profil je vyobrazený v grafe 2<sup>9</sup>

<sup>8</sup>Ing. Pavel Krýže, Ph.D, SŽ s.o.: Nadmořské výšky železničních stanic a zastávek, dostupné na webe <https://provoz.spravazeleznic.cz/portal/Show.aspx?path=/Data/Mapy/nadm.pdf>

<sup>9</sup>SŽ s.o.: TTP 525A, 501A, 309A, 309E, 305B, 301F

Tab. 2: Začiatok a koniec stúpaní, ich nadmorské výšky  $h_z$  a  $h_k$ , celkové prevýšenie  $\Delta h$  a energia potrebná na jednotlivé stúpania vlaku  $E$

začiatok stúpania	$\frac{h_z}{\text{m.n.m.}}$	koniec stúpania	$\frac{h_k}{\text{m.n.m.}}$	$\frac{\Delta h}{\text{m}}$	$\frac{E}{\text{MJ}}$
Praha hl.n.	210	Tuklaty z.	260	50	214
Kolín	200	Třebovice v Č.	420	220	943
Vých. Dluhonice	210	Bělotín z.	290	80	343
Ostrava-Svinov	215	Opava	255	40	171

Na tieto zmeny rýchlosti je potrebná energia, predovšetkým na zrýchľovanie. Ak vlak ide rýchlosťou  $v_1$  a zrýchli na rýchlosť  $v_2$  potrebuje k tomu energiu

$$E = E_{k2} - E_{k1},$$

$$E = \frac{1}{2}m_r v_2^2 - \frac{1}{2}m_r v_1^2,$$

$$E = \frac{1}{2}m_r (v_2^2 - v_1^2),$$

ktorú spočítame pre jednotlivé rýchlostné skoky, kde vlak zrýchľuje. Nás, ako vždy, zaujíma celková energia

$$E_{\text{vprof}} = \frac{1}{2}m_r \sum_i v_{i2}^2 - v_{i1}^2,$$

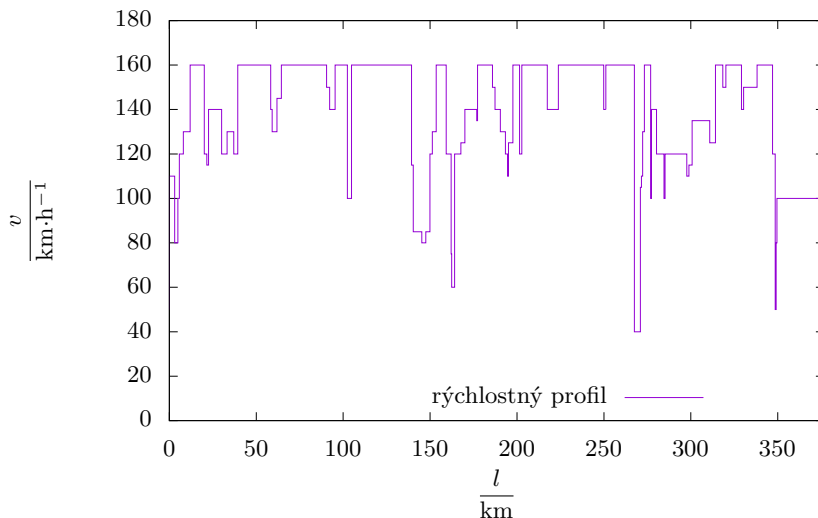
$$E_{\text{vprof}} = 4,20 \text{ GJ} = 1165 \text{ kWh}.$$

V tomto výpočte nie je zahrnuté zastavovanie v staniach, Opavan zastavuje v staniach uvedených v tab. 3.<sup>10</sup> Postupujeme rovnako ako v predchádzajúcom prípade pričom  $v_1 = 0$  a  $v_2 = v_{zst}$ . V tomto prípade potrebujeme na rozbehy  $E_{zst} = 816 \text{ MJ} = 227 \text{ kWh}$ .

Tab. 3: Zástavky IC Opavan spolu s rýchlosťou  $v_{zst}$ , na ktorú sa zo stanice rozbieha

ŽST	$\frac{v_{zst}}{\text{km/h}}$
Praha hlavní nádraží	50
Pardubice hlavní nádraží	100
Olomouc hlavní nádraží	140
Ostrava-Svinov	50
Háj ve Slezsku +	100
Opava východ	-

<sup>10</sup>SŽ s.o.: TTP 525A, 501A, 309A, 309E, 305B, 301F



Obr. 2: Grafické znázornenie rýchlostného profilu  $v$  trate staničného od Prahy hl.n., bez zastavení vlaku v staniaciach

### Odpor vzduchu

Vlak sa nepohybuje vo vákuu a pôsobí naň odpor vzduchu. Odpor vzduchu vypočítame pomocou rýchlostného profilu podľa vzťahu  $F_d = \rho_{vzd} v^2 C_x S_{DV}$ , kde  $C_x$  a  $S_{DV}$  sme si stanovili v úvodnej časti, hustota vzduchu  $\rho_{vzd} = 1,29 \text{ km}\cdot\text{m}^{-3}$  a  $v$  je rýchlosť vlaku. Energiu vypočítame ako  $E_d = F_d l$ ,<sup>11</sup> kde  $l$  je dĺžka, na ktorej pôsobí daná sila, v našom prípade úsek s rovnakou rýchlosťou. Celkovú energiu vypočítame ako

$$E_d = \sum_i \rho_{vzd} v_i^2 C_x S_{DV} l_i,$$

$$E_d = \rho_{vzd} C_x S_{DV} \sum_i v_i^2 l_i,$$

$$E_d = 4,12 \text{ GJ} = 1146 \text{ kWh}.$$

### Vozidlový odpor

Odpor pochádza aj od kolies samotných a všetkých pohyblivých častí podvozku, uvažujeme oporovú silu  $F_v = m_o g (1,35 + 0,0008v + 0,00033v^2)$ .<sup>12</sup> Potom celová energia potrebná na prekonanie tejto sily je  $E_r = F_v l$ , kde  $l$  je celková vzdialenosť, po dosadení dostávame  $E_r = 835 \text{ kWh}$ .

<sup>11</sup>Predpokladáme  $l \gg l_v$ .

<sup>12</sup>VAGONY.CZ: tab. 2: rovnice měrného vozidlového odporu <https://www.vagony.cz/vagony/energie.html>



### Rekuperácia

Rekuperácia alebo návrat spätného prúdu pri brzdení je v sieti SŽ dovolená na celej trati z Prahy do Ostravy, avšak v úseku Ostrava-Svinov – Opava je zakázaná. Rekuperácia sa používa pri brzdení alebo pri jazde z kopca, kde vlak namiesto klasického brzdenia „brzdí motormi“, ktoré sa správajú ako generátory a dodávajú prúd naspäť do siete, a ten používajú iné vlaky. Sieť SŽDC momentálne neumožňuje návrat prúdu do rozvodnej siete. Zároveň pre rekuperáciu platia prísne pravidlá, aby nedošlo k preťaženiu siete, prepáleniu trakčného vedenia, prip. prepätia v trakčnom vedení.

*Ďalšie „netrakčné“ odbery: klimatizácia, technológie potrebné pre jazdu, el. zásuvky a pod.*

Klimatizácia vo vozňoch je tvorená zväčša dvoma jednotkami o jednotkovom príkone  $P \doteq 15 \text{ kW}$ .<sup>13</sup> Celkovo pre 7 vozňov je to 14 klimatizačných jednotiek o celkovom príkone  $P_{cl} \doteq 210 \text{ kW}$ , čo za jazdu spotrebuje  $E_{cl} \doteq 666 \text{ kWh}$ .

V chladnejšom období roka vozeň naopak treba vykurovať, k tomu uvažujeme na vozeň jednu jednotku o výkone  $P = 40 \text{ kW}$ . Čo je rádovo porovnateľné s príkonom klimatizácie.

Vagón má aj osvetlenie a ďalšie systémy, celkový príkon týchto zariadení odhadneme na  $P \doteq 1 \text{ kW}$  na vozeň, celkovo dostávame za jazdu pre 7 vozňov  $E_{os} \doteq 25 \text{ kWh}$ .

Ďalším odberom sú aj elektrické zásuvky, ktoré používajú ľudia. Odhadnime priemerný výkon  $P_1 = 15 \text{ W}$ , pri počte 393 cestujúcich je to celkovo  $P_{el} = 5895 \text{ W}$ , čo odpovedá spotrebovanej energii  $E_{el} = 22 \text{ kWh}$ .

Pomocné systémy má aj lokomotíva, medzi ne patrí napr. pneumatikový hlavný a pomocný kompresor o jednotkovom príkone  $P \doteq 13 \text{ kW}$ . Celkový príkon týchto systémov môžeme odhadnúť  $P \doteq 100 \text{ kW}$ , čo je odhadom  $E_{hdv} \doteq 371 \text{ kWh}$ .

### Celková energia

Výkony môžeme rozdeliť na „trakčné“, vykonávané motormi, a „netrakčné“, pomocné systémy a pod..

Výkony trakčné sú v našom prípade zastupované energiami v tab. 4. Menovitý výkon lokomotívy rady 151 je  $P_{151} = 4000 \text{ kW}$ , nami vypočítaná energia odpovedá priemernému výkonu  $P_t = E_t/t$ , dostávame  $P_t = 1021 \text{ kW}$ , čo je o veľa menej ako maximálny výkon lokomotívy.

„Netrakčné“ energie dosahujú hodnoty  $E_{nt} = 1081 \text{ kWh}$ , z čoho dostávame celkovú potrebnú energiu  $E_c = E_{nt} + E_t = 4873 \text{ kWh}$ .

### Účinnosť

Posledné nad čím sa treba zamyslieť je účinnosť. Samotné motory v dnešných podmienkach majú účinnosť väčšiu ako 90 %, lokomotíva rady 151 je generačne staršia a dá sa predpokladať, že účinnosť sa môže pohybovať okolo 80 %.

<sup>13</sup>Techklíma s.r.o.: skklímy2.crd, dostupné na webe <http://www.techklíma.sk/wp-content/uploads/a4sk.pdf>

Tab. 4: „Trakčné“ energie podľa typu a ich menovité hodnoty

Názov	označenie	$\frac{E}{\text{kWh}}$
Prevýšenie	$E_{\text{prev}}$	464
Zmena rýchlosti	$E_{\text{vprof}}$	1165
Zastavenia v staniaciach	$E_{\text{zst}}$	227
Odpor vzduchu	$E_d$	1146
Vozidlový odpor	$E_r$	835
Spolu	$E_t$	3838

Odporová regulácia, ktorá je používa v rade 151, generuje veľké množstvo tepla a stratového výkonu, odporníky sú umiestnené na streche a sú chladené vzduchom, ktorý na ne fúkajú veľké ventilátory. Hrubý pomer odporu odporníka voči odporu motoru je 1:2, teda účinnosť je rádovo na úrovni 66%.

Medzi ďalšie straty môžeme započítať hlavne prechodové odpory na zberači. Odhad účinnosti prenosu výkonu z trakčného vedenia na nápravu je približne 50 %.

Existuje množstvo ďalších faktorov, ktoré nie sú započítané, napríklad, prevádzkové zastavenia, reálne zrýchľovanie/brzdenie alebo zvýšený odpor v oblúkoch. Zároveň sa jednotlivé jazdy môžu od seba líšiť, či už technikou jazdy rušňovodiča, ale napríklad aj vlakmi pred/za týmto vlakom a tým ovplyvnené napätie v TV a pod.

### Záver

Približná spotrebovaná energia, ktorú IC Opavan potrebuje je 7 MWh.

### Poznámky k riešeniam

Niektorí riešitelia si neuvedomili, že vlak neletí ako lietadlo, ale ide po povrchu Zeme. Preto za vzdialenosť z Prahy do Opavy, ktorú vlak prejde, nemôžeme brať vzdušnú vzdialenosť, ale musíme uvažovať vzdialenosť, ktorú vlak prejde po koľajniciach.

Ďalšia skupina riešiteľov vyťahuje vlak vo vesmíru, pretože za silu, ktorú prekonáva lokomotíva, brali ťaž vlaku (hmotnosť násobenú ťažovým zrýchlením).

Vela ľudí si neuvedomilo, že ide o vlak v Česku, a teda nepôjde celý čas maximálnou rýchlosťou. S tým súvisí aj čas jazdy, ktorý si mnohí riešitelia nedokázali zistiť.

Niektorí z vás dokonca vynašli aj perpetuum mobile. A v neposlednom rade, mnohí z vás nevedia, ktorá spoločnosť je zodpovedná za infraštruktúru (SŽ s.o.), a ktorá za prevádzku vlakov (CD a.s.).

## Úloha II.1 ... žlab na vodu

Žlabem na vodu obdĺnikového prierezu o šírke  $d = 10$  cm teče voda. Na jej hladinu spadne malý list, ktorý sa začne pohybovať rýchlosťou  $60 \text{ cm} \cdot \text{s}^{-1}$ . Výška vody

ve žlabu je  $h = 1,3$  cm. Odhadněte, jak dlouho bude trvat nabrat 50l vody do připraveného vědra. Komentujte použité předpoklady proudění v porovnání s reálnou situací. *Dodo si chladil štípanec od ováda.*

Na začiatok považujeme vodu za ideálnu kvapalinu. V takom prípade by prúdila v celom objeme žlabu rovnakou rýchlosťou, a to rýchlosťou  $v_0$  určenou zadaním. V úlohe vychádzame zo vzťahu pre objemový tok

$$Q_V = Sv = \frac{V}{t}.$$

Po úprave dostávame výraz

$$t = \frac{V}{dhv_0}, \quad (3)$$

z ktorého po dosadení hodnôt získavame  $t = 64$  s. Vedro s objemom 50 litrov by sme teda museli naplňať 64 s.

Ak vodu nechceme považovať za ideálnu kvapalinu, ale práve naopak za kvapalinu s vnútorným trením, viskozitou a podobne, tak sa musíme zamyslieť nad tým, akým modelom chceme zjednodušiť pohyb reálnej kvapaliny.

Pri prúdení reálnej kvapaliny dochádza k tomu, že na molekuly najbližšie pri stene žlabu pôsobí najväčšia trecia sila a tieto molekuly takpovediac prilnú ku stene, čím vytvoria nehybnú medznú vrstvu. Každá ďalšia vrstva sa potom pohybuje rýchlejšie. Najrýchlejšie sa voda pohybuje práve pri hladine, na ktorú dopadol list, ktorého rýchlosť pohybu sme odmerali.

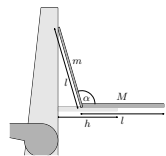
Uvažujme model, kedy sa rýchlosť pohybu molekúl vody mení s ich výškou od dna lineárne. V takom prípade potrebujeme vypočítať strednú rýchlosť pohybu molekúl vody, ktorou keď nahradíme rýchlosť všetkých vrstiev pohybujúcich sa rôznymi rýchlosťami, tak sa objemový prietok nezmení. Túto strednú rýchlosť  $v_s$  vypočítame ako priemer rýchlostí medznej ( $v_m = 0 \text{ cm}\cdot\text{s}^{-1}$ ) a povrchovej vrstvy

$$v_s = \frac{v_m + v_0}{2} = \frac{v_0}{2}.$$

Keď túto strednú rýchlosť dosadíme namiesto pôvodnej rýchlosti  $v_0$  do rovnice (3), tak dostávame  $t_1 = 2t = 128$  s. Vedro by sme podľa tohto modelu naberali až 128 sekúnd. Vidíme, že na zvolení správneho modelu teda veľmi záleží.

## Úloha II.2 ... nepohodlný autobus

Jarda chcel v autobuse sledovať na svojom notebooku prednášku, a preto ho položil na výklopnú poličku sedadla pred ním. Tá má hĺbku  $h = 18$  cm a je kolmá ke vsvislému sedadlu. Jardův notebook, široký  $l = 25$  cm, sa skládá ze spodní časti o hmotnosti  $M = 1200$  g a z obrazovky o hmotnosti  $m = 650$  g. Obě časti považujeme za homogenní. Na jaký největší úhel může notebook rozevřít, aby nespádl z poličky?



*Jarda je workoholik.*

Aby se Jardovi jeho notebook nepřevážil, musí být jeho těžiště nad prostorem poličky. Nejzazší situace nastává tehdy, když těžiště leží přesně nad koncem poličky, tedy ve vzdálenosti

$h = 18$  cm od sedadla.

Chceme při tom, aby byl notebook co nejlíže sedačce. Obrazovka by se jí tak svou zadní částí měla dotýkat. Uvažujme, že rovina obrazovky svírá s rovinou poličky tupý úhel  $\alpha$  (uvědomme si, že platí  $\cos(\alpha) = -\cos(\pi - \alpha)$ , tedy že kosinus doplňkového úhlu má opačné znaménko). Pak vodorovná vzdálenost těžiště obrazovky od sedačky je  $x_m = -(l \cos \alpha)/2$ , kde  $l = 25$  cm je rozměr notebooku. Těžiště spodní části je ve vzdálenosti  $x_M = -l \cos \alpha + l/2$ . Celkové těžiště tak leží

$$x = \frac{x_m m + x_M M}{m + M} = \frac{-ml \cos \alpha - 2Ml \cos \alpha + Ml}{2(M + m)} = h$$

od sedačky, kde poslední rovnost jsme získali z úvahy výše.

Nyní již můžeme vyjádřit  $\alpha$  jako

$$\alpha = \arccos\left(\frac{Ml - 2(M + m)h}{ml + 2Ml}\right) = 120^\circ.$$

Maximální úhel otevření notebooku je po zaokrouhlení pouze  $120^\circ$ . Koukání se na přednášky v autobuse tak není příliš pohodlné, protože polička je poměrně nízko a pro Jardu tak není možné dosáhnout kolmého pohledu na obrazovku.

### Úloha II.3 ... jeřáb na voru

*Uprostřed řeky stojí na voru o zanedbatelné hmotnosti jeřáb a přemísťuje krabice stavebního materiálu o hmotnosti  $m$  z jednoho břehu na druhý. V jednom kroku jeřáb naloží materiál na jedné straně řeky, otočí se na druhou stranu, tam materiál vyloží a otočí se zpět. Určete nejmenší hodnotu úhlu, o který se může během jednoho kroku vor vychýlit oproti původní pozici. Jeřáb aproximujeme homogenním válcem o hmotnosti  $M_j$  a poloměru  $r$  a otáčecím ramenem tvaru tenké tyče o délce  $kr$ . Rychlost řeky i „tření“ mezi vorem a vodou zanedbejte.*

*Vojta se vyučil inženýrem na YouTube.*

Při řešení úlohy vyjdeme ze zákona zachování momentu hybnosti. Pro moment hybnosti vzhledem k ose otáčení platí  $L = J\omega$ , kde  $J$  představuje moment setrvačnosti a  $\omega$  úhlovou rychlost otáčejícího se tělesa. Protože celkový moment hybnosti jeřábu na voru musí zůstat nulový, bude platit

$$J_j \omega_v - J_r \omega_r - m(kr)^2 \omega_r = 0$$

v první fázi pohybu a

$$J_j \omega_v - J_r \omega_r = 0$$

ve druhé fázi. V rovnicích výše představuje  $J_j = M_j r^2/2$  moment setrvačnosti vertikální válcové části jeřábu,  $J_r = M_r (kr)^2/3$  moment setrvačnosti ramena jeřábu o hmotnosti  $M_r$ ,  $\omega_v$  úhlovou rychlost otáčení voru a  $\omega_r$  úhlovou rychlost otáčení

ramena jeřábu. Obě rovnice nyní přenásobíme časem potřebným k otočení ramene o  $180^\circ$ , dosadíme za momenty setrvačnosti a upravíme.

$$\varphi_{v1} = 2k^2 \varphi_r \frac{m + \frac{1}{3}M_r}{M_j},$$

$$\varphi_{v2} = 2k^2 \varphi_r \frac{\frac{1}{3}M_r}{M_j},$$

kde  $\varphi_r = \pi$  rad je úhel pootočení ramene jeřábu a  $\varphi_{v1}$ ,  $\varphi_{v2}$  jsou úhly, o které se v jednotlivých fázích pohybu pootočí vor. Menší úhel, o který se může vor pootočit, pak dostaneme odečtením těchto dvou hodnot – to nastane ve chvíli, kdy se bude jeřáb otáčet v jednotlivých fázích pohybu opačným směrem. Dostáváme tak

$$\Delta\varphi_v = 2k^2 \pi \frac{m}{M_j} \text{ rad.}$$

Všimněme si, že se ve výsledném vztahu nevyskytuje hmotnost ramene jeřábu. To si můžeme intuitivně vysvětlit tak, že se při otočení tam i zpět vychýlení způsobené jeho pohybem navzájem vyruší a vliv na výsledek budou mít jenom hmotnost nákladu a základny jeřábu.

## Úloha II.4 ... rovnoběžná srážka

*Pták Fykosák sleduje, jak se kolem něj v jeho inerciální vztažné soustavě po rovnoběžných trajektoriích pohybují konstantními nerelativistickými rychlostmi dva hmotné body. Stejně jako on najdete odpověď na otázku, jestli se pro nějakého jiného inerciálního pozorovatele můžou tyto trajektorie protnout. Pokud ano, je možné, aby se dané hmotné body při správných počátečních podmínkách srazily v tomto průsečiku? Je to konzistentní s tím, že podle Fykosáka se pohybují paralelně?*

*Marek J. se rád srazí.*

Pohyb dvou hmotných bodů vieme popísať pomocou vektorov. Keďže sa jedná o rovnomerný priamočiary pohyb, tak celú informáciu nám dávajú ich rýchlosti, ktoré označíme  $\mathbf{v}_1$  a  $\mathbf{v}_2$ . Vo Fykosákovskej vzťažnej sústave sú rovnobežné a teda ich vektorový súčin je **nulový**. Transformovanie rýchlostí do iného inerciálneho systému sa redukuje na odčítanie rýchlosti tohto nového systému ( $\mathbf{v}_n$ ) od daných rýchlostí

$$\mathbf{v}_{1n} = \mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_n,$$

$$\mathbf{v}_{2n} = \mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_n.$$

A aby sa mohli pretnúť, musí platiť podmienka  $\mathbf{v}_{1n} \times \mathbf{v}_{2n} \neq \mathbf{0}$ , a teda

$$(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_n) \times (\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_n) \neq \mathbf{0},$$

čo vieme s využitím vlastností vektorového súčinu, podmienky  $\mathbf{v}_1 \times \mathbf{v}_2 = \mathbf{0}$  a identity  $\mathbf{v}_n \times \mathbf{v}_n = \mathbf{0}$  napísať ako

$$(\mathbf{v}_2 - \mathbf{v}_1) \times \mathbf{v}_n \neq \mathbf{0}. \tag{4}$$

Vzťah (4) platí pre všetky  $\mathbf{v}_n$ , ktoré nie sú paralelné s dráhami  $\mathbf{v}_1$  a  $\mathbf{v}_2$  za predpokladu, že  $\mathbf{v}_1 \neq \mathbf{v}_2$ . V prípade rovnosti budú trajektórie rovnoběžné vždy. Avšak pozor, podmienka daná rovnicou (4) je nutná, ale nie postačujúca (uvažujte pohyb hmotných bodov paralelne s osou  $x$  kartézskoho systému a transformáciu danú rýchlosťou len so zložkou  $z$ . V 3D totiž môžu byť trajektórie mimoběžné). Stále však vidíme, že existuje nekonečne veľa pozorovateľov, pre ktorých sa dané trajektórie pretnú! (Na ukážku transformujeme príklad spomenutý skôr, ale teraz s nulovou zložkou  $z$ . Potom ľubovoľná rýchlosť s nenulovými zložkami v  $x$ -ovom a  $y$ -ovom smere transformuje trajektórie na pretínajúce sa.)

Môžu sa však dané dva hmotné body aj reálne zraziť? To by vyžadovalo, aby ich vzájomná vzdialenosť bola v nejakom čase nulová. Popíšme trajektórie hmotných bodov matematicky. Ako počiatok súradnicovej sústavy zvolíme polohu prvého hmotného bodu  $\mathbf{v}$  (nejakom) čase  $t_0$ . Jeho trajektória je potom daná ako  $\mathbf{d}_1 = \mathbf{v}_1 t$ . Povedzme, že pták Fykosák ich videl v čase  $t_0$  vo vzájomnej vzdialenosti  $\mathbf{s}$ . To znamená, že dráha druhého bodu je popísaná výrazom  $\mathbf{d}_2 = \mathbf{v}_2 t + \mathbf{s}$ . Transformáciu do inej inerciálnej sústavy uskutočníme dosadením transformovaných rýchlostí  $\mathbf{v}_{1n}$  a  $\mathbf{v}_{2n}$ , ktoré sú vyjadrené vyššie. Pre zrážku musí teda platiť

$$\mathbf{d}_{1n} - \mathbf{d}_{2n} = \mathbf{0},$$

čím dostaneme

$$(\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2) t = \mathbf{s},$$

čo platí iba ak je  $\mathbf{s}$  rovnoběžný s rýchlosťami vo Fykosákovej sústave. Inými slovami dané body idú po tej istej trajektórii a možné je len obehnutie (pre nejaké veľkosti ich rýchlostí). Pre rozdielne trajektórie zrážka hmotných bodov nie je možná ani v rôznych inerciálnych systémoch.

## Úloha II.5 ... kouzelná magnetická tyčka

*Mějme tenký magnet uzavřený uprostřed tenké duté tyče o délce  $l$ . Materiál tyče je schopný magnetické pole odstíňovat. Těsně za konci tyče je tok magnetického pole roven  $\Phi$ . Vypočítejte velikost a směr magnetické indukce tok, protože materiál tyče magnetické pole odstíňuje a tyč je velmi tenká. Podíváme-li se tak na situaci vně tyče, bude se magnetické pole chovat tak, jako by v bodech na koncích tyče do prostoru „vstupoval“ magnetický tok  $\Phi$ , resp.  $-\Phi$  (znaménko odlišuje jednotlivé konce tyče). Tyč, a dokonce i magnet, nyní již nemusíme řešit. Protože tyč byla velmi tenká, můžeme magnetické toky  $\pm\Phi$  považovat za homogenní. Pro odlišení konců tyče budeme znaménko  $\pm$  používat i nadále.*

*Adam vyrobil foukačku, aby mohl na přednáškách flusat magnety po spolužácích.*

Úloha vypadá na prvý pohľad veľmi komplikovaně. Ve skutečnosti si však problém můžeme přeformulovat tak, že výpočet nebude nijak náročný. Předně si uvědomíme, že problém je osově souměrný vzhledem k ose, která je zároveň podélnou osou symetrie tyče. Navíc skrz stěny tyče neteče žádný magnetický tok, protože materiál tyče magnetické pole odstíňuje a tyč je velmi tenká. Podíváme-li se tak na situaci vně tyče, bude se magnetické pole chovat tak, jako by v bodech na koncích tyče do prostoru „vstupoval“ magnetický tok  $\Phi$ , resp.  $-\Phi$  (znaménko odlišuje jednotlivé konce tyče). Tyč, a dokonce i magnet, nyní již nemusíme řešit. Protože tyč byla velmi tenká, můžeme magnetické toky  $\pm\Phi$  považovat za homogenní. Pro odlišení konců tyče budeme znaménko  $\pm$  používat i nadále.

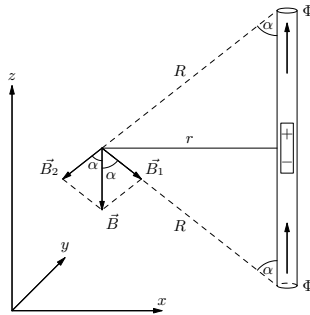
Na takto upravený problém pustíme velmi mocné nástroje nazvané Gaussova věta a princip superpozice. Pro magnetické pole nabývá Gaussův zákon v integrální podobě tvaru  $0 = \int_S B dS$ . Díky principu superpozice budeme počítat magnetické pole pro oba konce tyče zvlášť. Vezmeme velmi malou kulovou Gaussovskou plochu okolo jednoho konce tyče. Celkový tok touto plochou musí být nulový. Platí tedy

$$\Phi_{\pm} \mp \Phi = 0,$$

kde opačné znaménko u druhého členu je dáno tím, že magnetický tok  $\pm\Phi$  do Gaussovské plochy vstupuje. Protože je pole pro každý konec tyče středově souměrné, obsah, kterým protéká magnetický tok  $\pm\Phi$ , je velmi malý a magnetický tok se musí zachovávat, získáme vzorec

$$|B_1| = |B_2| = B_{\pm} = \frac{\Phi_{\pm}}{4\pi R^2} = \frac{\pm\Phi}{4\pi R^2}$$

určující magnetické pole v závislosti na poloměru Gaussovské plochy  $R$ . Magnetická indukce je na tuto Gaussovskou plochu v každém bodě kolmá.



Obr. 3: Nákres situace. Zde znaménko + na magnetu uvnitř tyče značí jeho severní pól, naopak – reprezentuje pól jižní.

Nyní se již jedná pouze o geometrii. S pomocí obrázku 3 vyjádříme  $R = (\sqrt{4r^2 + l^2})/2$  a  $\cos \alpha = l/\sqrt{4r^2 + l^2}$ . Magnetické intenzity ve směru os  $x$  a  $y$  se odečtou a zůstane pouze  $z$ -tová složka. Její velikost bude

$$B = (|B_1| + |B_2|) \cos \alpha = 2B_{\pm} \cos \alpha = 2 \cdot \frac{\Phi l}{\pi (4r^2 + l^2)^{3/2}}.$$

Směr intenzity závisí na orientaci magnetu v tyči. Při natočení magnetu dle obrázku 3 bude intenzita mířit ve směru  $-z$ , při opačné orientaci magnetu by mířila ve směru  $+z$ .

K řešení ještě několik poznámek:

1. Trik, kdy celou úlohu spočítáme, aniž bychom řešili magnet nebo tyč, se může zdát docela random, na druhou stranu jedinou známou veličinou charakterizující magnetické pole je tok na koncích tyče. O magnetu nic nevíme.

2. Není možné, aby oba magnetické toky  $\pm\Phi$  do tyče vstupovaly nebo z ní vystupovaly. Nebyl by poté splněn třetí Maxwellův zákon.
3. Problém si můžeme představit jako dva magnetické monopóly, položit  $Q = \Phi\epsilon$  a řešit vše pomocí rovnic pro elektrostatické pole. Matematicky je to ekvivalentní řešení výše, fyzikálně to ale není správné, protože magnetické monopóly neexistují.

## Úloha II.P . . . planetární atmosféra

*Jaké parametry musí mít planeta, aby si udržela atmosféru srovnatelnou se Zemí? Jaké podmínky jsou nutné, aby takovou atmosféru získala?*

*Karel si vzpomněl na úlohu.*

Za existenciu zemskej atmosféry vďačíme rôznym fyzikálnym procesom. Ďalšie sú zodpovedné za jej ochranu. Ako však vidíme, okrem fyzikálnych procesov sú dôležité aj tie chemické a biologické. Pred začiatkom diskusie o týchto procesoch si však musíme ujasniť náš pohľad na interpretáciu otázky zo zadania – čo znamená, že atmosféra planéty je porovnateľná s atmosférou Zeme? Uvažujme, že nás zaujíma možnosť obývateľnosti takéhoto telesa, teda chceme planétu s atmosférou s nasledovnými vlastnosťami:

- atmosférický tlak okolo  $p_a \approx 100$  kPa,
- rovnovážna povrchová teplota  $T \approx 300$  K,
- chemické zloženie s obsahom dusíka a kyslíka – v prvom priblížení dané strednou molekulovou hmotnosťou okolo  $M_m \approx 15$  g·mol<sup>-1</sup>.

Tieto podmienky zaručia, že aj navonok bude mať atmosféra podobnú hrúbku.

### *Tepelná evaporácia*

Prvým procesom, na ktorý sa pozrieme je tepelný pohyb častíc. Rýchlosť častíc hmotnosti  $m$  v termodynamickvej rovnováhe pri teplote  $T$  je daná Maxwellovým rozdelením rýchlostí

$$f(v) = \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi v^2 e^{-\frac{mv^2}{kT}},$$

ktoré vyjadruje, aký zlomok častíc sa pohybuje rýchlosťou  $v$ , presnejšie pre malý interval rýchlostí šírky  $dv$  máme časť  $dn = f(v) dv$  častíc. Charakteristickým znakom tohto rozdelenia je, že aj pre ľubovoľne veľké rýchlosti nájdeme nejaké častice, ktoré ich dosahujú. Ak má častica rýchlosť väčšiu ako únikovú rýchlosť z povrchu a na jej ceste sa s nijakou inou nezrazí, z atmosféry nenávratne unikne. Pre únikovú rýchlosť platí

$$v_u = \sqrt{\frac{2GM}{R}},$$

kde  $M$  je hmotnosť planéty,  $R$  je jej polomer a  $G$  je gravitačná konštanta. Majme atmosféru hmotnosti  $M_{atm}$ , ktorá má pri povrchu tlak  $p$  a teplotu  $T$ , ktorá je v nej



pomerne nemenná s výškou. Charakteristickú výšku  $H$  takejto atmosféry môžeme odhadnúť zo vzťahu pre hydrostatický tlak a stavovej rovnice pre ideálny plyn

$$p = \rho H g = H \frac{\rho M_m}{R_g T} \frac{GM}{R^2}, \quad H = \frac{R^2}{GM} \frac{R_g T}{M_m},$$

kde  $R_g$  je molárna plynová konštanta a  $M_m$  stredná molárna hmotnosť plynu. Ak sa teda pozeráme na vrstvu atmosféry, kde začínajú byť častice dostatočne riedke, máme pre hmotnostný odtok častíc

$$\frac{\Delta M_{\text{atm}}}{\Delta t} \approx M_{\text{atm}} n(v > v_u) \frac{v}{H} \approx M_{\text{atm}} \frac{v}{H} \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi \int_{v_u}^{\infty} v^2 e^{-\frac{mv^2}{kT}},$$

Nás zaujímajú hlavne veľmi rýchle častice, pre Zem je totiž bežná rýchlosť častice atmosféry niekoľko stoviek  $\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ , zatiaľ čo úniková rýchlosť je okolo desať  $\text{km}\cdot\text{s}^{-1}$ , tj.  $mv_u^2 \gg kT$ . Navyše v tomto prípade dominuje exponenciálny útlm, môžeme teda odhadnúť  $v^2$  pred exponenciálou ako  $vv_u$

$$\begin{aligned} \frac{\Delta M_{\text{atm}}}{\Delta t} &\approx M_{\text{atm}} n(v > v_u) \frac{v}{H} \approx \\ &\approx \frac{M_{\text{atm}} v_u}{H} \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{\frac{3}{2}} 4\pi \int_{v_u}^{\infty} v v_u e^{-\frac{mv^2}{kT}} \approx \\ &\approx \frac{M_{\text{atm}} v_u}{H} \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{\frac{3}{2}} 2\pi v_u \frac{k T}{m} e^{-\frac{mv_u^2}{kT}}. \end{aligned}$$

Z tohto vzťahu vidíme, že ľahké častice z atmosféry unikajú ako prvé. Predstavme si, že uvažujeme stav atmosféry po uplynutí času na škále niekoľko miliárd rokov  $\Delta t = 10^{17}$  s. Za tento čas chceme udržať atmosféru z dusíka, ale chceme sa zbaviť celej atmosféry z vodíku a hélia. Preto dosadíme do predošlého vzťahu  $\Delta M_{\text{atm}} = M_{\text{atm}}$  a  $m \approx 10m_u$ , kde  $m_u$  je atómová hmotnostná jednotka

$$\frac{v_u^2}{H} \left( \frac{m}{2\pi k T} \right)^{\frac{1}{2}} e^{-\frac{mv_u^2}{kT}} = \frac{1}{\Delta t} \approx 10^{-17} \text{ s}^{-1}.$$

Výrazu opäť dominuje člen s exponenciálou, preto dosadíme do členov pred ňou hodnoty pre Zem ako vhodný rádoový odhad. Takto dostaneme hodnotu asi  $3 \text{ s}^{-1}$ . Potrebujeme teda, aby exponenciála dosahovala  $10^{-17}$  a argument exponenciály asi  $-18 \cdot \ln 10 \approx -39$ . Ak chceme rozumnú povrchovú teplotu (300 K) dostaneme hodnotu pre únikovú rýchlosť  $v_u = \sqrt{40kT/m} \approx 3,1 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$ , pričom ide o odhad minimálnej hodnoty únikovej rýchlosti potrebnej na zachovanie atmosféry s obsahom ťažších prvkov. Vidíme, že Zem, Mars a Venuša toto spĺňajú, ale Mesiac už nie. Ak za hmotnosť dosadíme do vzťahu pre hustotu (pre  $\rho = 5 \text{ g}/\text{cm}^3$ ) dostaneme podmienku pre minimálny polomer

$$R > \frac{v_u}{\sqrt{\frac{8G\rho\pi}{3}}} \approx 1900 \text{ km}.$$

Dodajme ďalej, že na udržateľnosť atmosféry môže mať vplyv aj rýchla rotácia telesa – pri rotačnej perióde 1 hodina by Zem na rovníku rotovala únikovou rýchlosťou. Ďalším možným vplyvom je gravitačné pôsobenie ďalšieho telesa, či už pri náhodnom blízkom priblížení, kedy sa atmosféra môže „preliať“ medzi telesami a aj do okolitého priestoru, či slapovým pôsobením v prípade satelitu, resp. naopak pre satelit pôsobenie materskej planéty.

### Vplyv hviezdy

Pre zachovanie príjemnej teploty na povrchu je nutné nachádzať sa v správnej vzdialenosti od materskej hviezdy v tzv. obývateľnej zóne. Tejto otázke sa nebudeme úplne venovať, odkazujeme však na<sup>14</sup> Zamerajme sa však na nepriaznivé vplyvy, ktorými na atmosféru hviezda pôsobí. Jedným z nich je fotodisociácia molekúl. V atmosfére dokážu dosť energetické (spravidla ultrafialové) fotóny rozštiepiť molekuly na atómy, z ktorých sú zložené. Toto zníži hmotnosť častíc a uvoľní množstvo energie, a teda spôsobí, že ich rýchlosti v rovnováhe budú vyššie a jednoduchšie uniknú z gravitačného poľa Zeme.

Ovela nebezpečnejšie sú však najenergetickejšie častice, ktoré na planétu od hviezdy prúdia – častice hviezdneho vetra. Tieto častice, prevažne protóny, prúdia k Zemi bežne rýchlosťami okolo  $300 \text{ km} \cdot \text{s}^{-1}$ . Ak by sa tieto častice dostali k časticiam v atmosfére, zrážkami by ich urýchlili na nadúnikové rýchlosti. Toto je proces, pomocou ktorého prišiel o atmosféru napríklad Mars. Zabrániť tejto erózii musí prítomnosť magnetického poľa planéty. Odhad potrebnej veľkosti magnetického poľa môžeme dostať zo vzťahu pre pohyb nabitých častíc v magnetickom poli. Protóny sa v zemskom magnetickom poli budú pohybovať po špirálových trajektóriách (šrúbovniciah) navinutých na siločiaru magnetického poľa, pričom polomer špirál je daný známym vzťahom pre Larmorov polomer. Upravíme ho do tvaru pre veľkosť magnetickej indukcie

$$B = \frac{mv}{qR_L} = 5 \cdot 10^{-11} \text{ T},$$

kde sme za  $R_L$  dosadili pomerne arbitrárnu hodnotu desať polomerov Zeme – rozsah zemskej magnetosféry v smere k Slnku, v ktorom chceme, aby sa častica stihla „otočiť“. Jedná sa teda len o veľmi hrubý odhad minimálnej potrebnej hodnoty. Pre presnejší popis by sme museli uvažovať vplyv tlaku nabitých častíc na magnetické pole, čo je nad rámec tejto úlohy. Výsledkom takého pohľadu, keď porovnáme hustotu energie častíc a hustotu energie magnetického poľa je tzv. Chapmanova-Ferrarova vzdialenosť<sup>15</sup>

$$R_{C-F} = R \left( \frac{B^2}{\mu_0 \rho v^2} \right)^{\frac{1}{6}},$$

<sup>14</sup><https://www.astro.princeton.edu/~strauss/FRS113/writeup3/>, [https://en.wikipedia.org/wiki/Circumstellar\\_habitable\\_zone](https://en.wikipedia.org/wiki/Circumstellar_habitable_zone)

<sup>15</sup>[http://sun.stanford.edu/~sasha/PHYS780/SOLAR\\_PHYSICS/L23/Lecture\\_23\\_PHYS780.pdf](http://sun.stanford.edu/~sasha/PHYS780/SOLAR_PHYSICS/L23/Lecture_23_PHYS780.pdf)

kde požadujeme, aby  $R_{C-F} > R$  aj pri zásahoch výronmi hmoty z hviezdy.<sup>16</sup> Dostávame teda podmienku  $B > \sqrt{(\mu_0 \rho v^2)} \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ T}$ , čo je o štyri rády silnejšie pole ako v prvom prípade (v predchádzajúcom prípade sme uvažovali pole homogénne, to však smerom od povrchu klesá s tretou mocninou vzdialenosti), no stále o vyše dva rády slabšie ako zemské pole. Silná magnetosféra však dokáže zabrániť aj „odfúknutiu“ atmosféry po erupcii hmoty z povrchu hviezdy. Vysokoenergetické častice sa následne zachytia na špirálových trajektóriách pozdĺž magnetických siločiar. Niektoré z týchto častíc sa dokážu dostať do atmosféry, kde spôsobujú napr. polárnu žiaru alebo vo väčších vzdialenostiach od Zeme tzv. Van Allenove radiačné pásy. Z polárnych oblastí však môžu častice preda len unikať, keďže tu sú siločiarly najmä smerom k Zemi otvorené. Tento jav sa nazýva polárny vietor alebo plazmová fontána.

### Magnetické dynamo

Naša planéta teda potrebuje toto pole nejak vygenerovať. Pri vzniku veľkých telies dochádza k pretaveniu pri zárodočných zrážkach a následnom nabaľovaní hmoty pri bombardovaní menšími telesami. Magnetické pole planéty teda nemôže byť poľom trvalých magnetov – materiál sa určite nachádzal nad jeho Curieho teplotou – ale musí vznikáť procesom magnetického dynamo v tekutom vodivom jadre planéty. Pre planéty podobné Zemi jadro tvoria roztavené kovy ako nikel a železo. Planéta si toto jadro musí udržať tekuté po dostatočne dlhý čas (po stuhnutí jadra dôjde k strate atmosféry už pomerne rýchlo, tak ako v prípade Marsu), čo opäť kladie podmienky na veľkosť planéty. Tepelná kapacita totiž rastie ako tretia mocnina polomeru, zatiaľ čo energia vedená k povrchu a vyžarovaná povrchom rastú s druhou mocninou. Ak využijeme rovnicu vedenia tepla dostaneme

$$Mc \frac{\Delta T}{\Delta t} \approx -k \frac{T}{R} 4\pi R^2,$$

kde  $c$  je merná tepelná kapacita,  $k$  tepelná vodivosť a  $T$  teplota planéty. Ak predpokladáme exponenciálne chladnutie podľa  $T = T_0 \exp(-t/\tau)$  máme

$$\tau = \frac{Mc}{k4\pi R} \approx \frac{c\rho R^2}{3k}.$$

Ak by sme dosadili hodnoty pre železo, dostaneme pre  $\tau = 10^9$  rokov polomer  $R = 1500 \text{ km}$ . Jedná sa, samozrejme, o hrubý odhad, keďže sa toto teplo musí ešte dostať k povrchu cez menej vodivé silikátové vrstvy (zemská kôra) a vyžiariť z povrchu, na ktorý navyše teplo dodáva Slnko. Ďalším procesom, ktorý dokáže udržať vnútro planéty tekuté je slapové pôsobenie, ako v prípade Merkúra (pôsobenie Slnka), či Io (mesiac Jupitera).

<sup>16</sup>  $\rho$ ,  $v$  sú parametre plazmy nalietajúcej na magnetické pole, pre Zem dosahujú maximálne asi  $1000 \text{ km}\cdot\text{s}^{-1}$  a  $m_p \cdot 100 \text{ cm}^{-3}$ . Aktuálne hodnoty si môžete pozrieť napríklad na <https://www.swpc.noaa.gov/products/real-time-solar-wind>

### Vznik atmosféry

Pre pochopenie vzniku atmosféry planét, ako aj tej zemskej, si musíme najprv priblížiť vznik planét samotných. Planéty vznikajú z plynoprachového akréčného disku, ktorý tvorí pozostatok po vzniku centrálnej hviezdy. V závislosti od vzdialenosti od hviezdy z plynu postupne kondenzujú častice – v smere od hviezdy najprv kovy, neskôr silikáty, vodný ľad a vo veľkej vzdialenosti aj ľad metánu, či amoniaku. Tieto častice sa následne zrážkami naakumulovali do tzv. planetizimál veľkosti asteroidov. Tieto sa ďalej zrážali a aj s pomocou vlastnej gravitácie tvorili protoplanéty. Tu nastáva pre nás dôležitý okamih – ak takáto planetezimála získala hmotnosť väčšiu ako asi desať hmotností Zeme, získala schopnosť na seba nabaľovať plyn z okolitej hmloviny vlastnou gravitáciou, čo jej hmotnosť ďalej zvýšilo. Týmto procesom vznikli atmosféry plyných planét, ktoré tvoria väčšinu ich hmotnosti!<sup>17</sup> Ak chceme získať Zem podobnú atmosféru, musí mať teda naša protoplanéta polomer asi do

$$R < R_z \left( \frac{10M_z}{M_z} \right)^{1/3} \approx 14\,000 \text{ km},$$

ak predpokladáme, že hustoty oboch telies sú rovnaké. Pre vývoj (proto)planét je dôležitá aj ich migrácia v sústave po ich vzniku. Vzájomným gravitačným pôsobením viacerých planét sa môžu výsledné orbity výrazne líšiť od tých, na ktorých planéty vznikli, niektoré planéty môžu dokonca spadnúť na materskú hviezdu alebo úplne uniknúť zo sústavy.

Vývoj atmosféry zemskeho typu tak obvykle začína na telese roztavenom zrážkami, ktorého prvotnú atmosféru tvoria roztavené minerály a sopečné plyny ako metán. Neskoršími zrážkami s menšími telesami, však na Zem zo vzdialenejších končín prišla voda, ktorá ako vodná para prispela do zloženia atmosféry. Postupným chladnutím povrch stuhne a neskôr sa z atmosféry môže vyzrážať vodný oceán. Aj vplyvom vulkanickej činnosti je táto „druhá“ atmosféra zložená z oxidu uhličitého a dusíku, ako napríklad na Venuši. Časť oxidu uhličitého sa dokáže rozpustiť v oceánoch a následne uložiť v uhličitanoch, a teda sa eliminovať z atmosféry. Pre zemskú atmosféru však bol významný iný jav, ktorý má od astronómie, či geofyziky pomerne ďaleko – vznik života. Prvé fotosyntetizujúce organizmy – cyanobaktérie – dokázali z oxidu uhličitého vyrobiť kyslík, ktorým obohatili atmosféru. Kyslík môže vzniknúť aj vysoko v atmosfére fotodisociáciou vodnej pary, no tento proces je príliš pomalý v porovnaní s kyslíkom potrebným na oxidáciu minerálov na povrchu. Týmto prvým organizmom teda vďačíme za dnešnú podobu zemskej atmosféry, v ktorej dokážeme žiť aj my – ľudia.

### Zhrnutie

Planéta musí byť dost veľká na to, aby si atmosféru udržala. V dôsledku tepelného pohybu molekúl telesá s polomerom menším ako niekoľko málo tisíc kilometrov

<sup>17</sup>Pre záujemcov je tento proces popísaný vo vedeckých článkoch <https://www.sciencedirect.com/science/article/abs/pii/S0019103586901223>, či <https://academic.oup.com/mnras/article/405/2/1227/1184435>.

o atmosféru na škálach miliárd rokov prídu. Ďalej je potrebné, aby takáto planéta disponovala magnetickým polom tieniacim tok častíc od materskej hviezdy. Nakoniec planéta nemôže byť príliš veľká, inak by počas vzniku začala nabaľovať plyn z okolitej hmloviny a premenila sa na plynného obra. Pre polomer planéty tak máme odhad  $1\,500\text{ km} < R < 14\,000\text{ km}$ . Ak sa zaujímate o atmosféru s obsahom kyslíka, na planéte by sa navyše musel vyvinúť život.

### Úloha III.1 . . . kreatívni řešení problémů

*Danka připojila zahradní hadici s vnitřním průměrem 1,5 cm na vodovodní kohoutek na koleji a druhý konec položila na okraj okna na 8. poschodí ve výšce 23 m nad zemí. Jaký objemový průtok vody by musel kohoutek mít, aby se Danka podařilo postříkat proudem vody lidi stojící pod kolejí ve vodorovné vzdálenosti 9 m od budovy, kteří ruší noční klid? Může se to Danka podařit, pokud voda stříká vodorovně a nefouká vítr?*

*Bonus* Kde nejdále mohou stát tito lidé, aby na ně Danka hadicí dostříkla, pokud je objemový průtok kohoutku  $0,41\text{ s}^{-1}$ ? Danka teď může konec hadice natočit tak, aby voda stříkala pod libovolným úhlem vůči vodorovné rovině.

*Dance opravdu vadí hluk v noci pod okny.*

Keď si situáciu predstavíme, uvedomíme si, že ide vlastne o vodorovný vrh vody, ktorá vytryskuje z hadice nejakou rýchlosťou  $v$ . Rýchlosť vieme určiť z objemového prietoku  $Q$  ako

$$v = \frac{Q}{S},$$

kde  $S = \pi d^2/4$  je plocha prierezu hadice. Potom si môžeme napísať rovnice pre súradnice hmotného bodu pohybujúceho sa vodorovným vrhom

$$\begin{aligned}x &= vt, \\y &= h - \frac{1}{2}gt^2.\end{aligned}$$

Tu označujeme  $x$  a  $y$  postupne vodorovnú a zvislú súradnicu. Počiatok súradnicovej sústavy položíme do bodu na zemi priamo pod oknom. Premenná  $t$  označuje čas, ktorý plynie od okamihu vytrysknutia vody z konca hadice,  $g = 9,81\text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  je tiažové zrýchlenie. Voda je vystrekovaná z počiatočnej výšky  $h = 23\text{ m}$ . Ludia, ktorých chce Danka trafiť, sú na zemi, čiže ich  $y$ -ová súradnica je  $y = 0\text{ m}$ . Od internátu<sup>18</sup> sú vzdialení  $l = 9\text{ m}$ , to je teda aj ich  $x$ -ová súradnica. Máme teda dve rovnice s dvoma neznámymi, ktorými sú čas letu vody  $t$  a rýchlosť  $v$

$$\begin{aligned}l &= vt, \\0 &= h - \frac{1}{2}gt^2.\end{aligned}$$

<sup>18</sup>česky kolej

Vyjadříme preto z druhej rovnice čas

$$t = \sqrt{\frac{2h}{g}},$$

a to dosadíme do prvej z rovníc. Dostávame

$$l = v\sqrt{\frac{2h}{g}}.$$

Rýchlosť vyjadříme cez objemový tok a máme

$$l = \frac{Q}{\frac{\pi d^2}{4}} \sqrt{\frac{2h}{g}}.$$

Úpravami vyjadříme  $Q$  z rovnice a dosadíme hodnoty známych veličín

$$Q = \frac{l\pi d^2}{4} \sqrt{\frac{g}{2h}} \approx 0,73 \text{ l}\cdot\text{s}^{-1}.$$

Danke sa teda nepodarí týmto spôsobom dostreknúť z okna na nepríjemných susedov, pretože z bežného vodovodného kohútika v domácnosti alebo v internáte nedostaneme takto veľký objemový prietok.

### Bonus

Když chceme spočítat maximální dostřel z nenulové výšky, je postup pomocí derivací velmi komplikovaný. Proto použijeme koncept takzvané *ochranné paraboly*, což je množina bodů, za kterou se danou rychlostí vystřiknutý proud vody nedostane pod žádným počátečním úhlem. Nyní si ukážeme její odvození pro konstantní počáteční rychlost proudu vody  $v = 4Q/(\pi d^2)$ . Nejprve si napíšeme závislost obou souřadnic myšleného hmotného bodu na čase pro vrh rychlostí  $v$  pod úhlem  $\varphi$  jako

$$\begin{aligned} x &= v \cos \varphi t, \\ y &= h + v \sin \varphi t - \frac{1}{2}gt^2. \end{aligned}$$

Z těchto rovnic nyní zkusíme vyjádřit, pod jakým úhlem  $\varphi$  musíme hmotný bod vystřelit, aby proletěl pevně daným bodem se souřadnicemi  $[x, y]$ . Z první rovnice tedy nejprve vyjadříme čas, který dosadíme do druhej

$$\begin{aligned} t &= \frac{x}{v \cos \varphi}, \\ y &= h + v \sin \varphi \frac{x}{v \cos \varphi} - \frac{1}{2}g \frac{x^2}{v^2 \cos^2 \varphi}. \end{aligned}$$

Nyní rovnici upravíme, aby v ní vystupoval pouze tangens úhlu  $\varphi$ , který budeme chtít pro pevné  $x$  a  $y$  vyjádřit

$$y = h + x \operatorname{tg} \varphi - \frac{1}{2} g \frac{x^2}{v^2} (1 + \operatorname{tg}^2 \varphi),$$

$$\frac{gx^2}{2v^2} \operatorname{tg}^2 \varphi - x \operatorname{tg} \varphi + y + \frac{gx^2}{2v^2} - h = 0.$$

Vidíme, že pro tangens počátečního úhlu máme kvadratickou rovnici. To znamená, že v závislosti na souřadnicích bodu  $x$  a  $y$  dostáváme buď dvě řešení (můžeme bodem proletět buď cestou nahoru nebo cestou dolů), žádné řešení (rychlost je moc malá a bod nezasáhneme), nebo jedno řešení, což je množina bodů oddělující tyto dvě oblasti. Pro tuto množinu bodů bude diskriminant kvadratické rovnice rovný nule, můžeme ji tedy tímto způsobem snadno popsat

$$x^2 - 4 \frac{gx^2}{2v^2} \left( y + \frac{gx^2}{2v^2} - h \right) = 0,$$

$$\frac{v^2}{2g} - y - \frac{gx^2}{2v^2} + h = 0,$$

$$y = \frac{v^2}{2g} - \frac{gx^2}{2v^2} + h.$$

Pro množinu bodů ohraničujících prostor, kam můžeme danou rychlostí dostřelit a kam ne, tedy dostáváme tento předpis. Ten, jak si můžete všimnout, je rovnicí paraboly. Říkáme mu ochranná parabola, protože žádný bod mimo něj nemůžeme zasáhnout. K určení maximálního dostřelu stačí spočítat průsečík této paraboly se zemí, tedy bod, kde  $y = 0$ :

$$0 = \frac{v^2}{2g} - \frac{gx_{\max}^2}{2v^2} + h,$$

$$\frac{gx_{\max}^2}{2v^2} = h + \frac{v^2}{2g},$$

$$x_{\max}^2 = \frac{2v^2 h}{g} + \frac{v^4}{g^2},$$

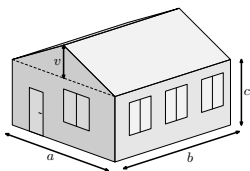
$$x_{\max} = \frac{v}{g} \sqrt{2hg + v^2}.$$

Po dosazení za počáteční rychlost tak dostáváme maximální vzdálenost, ve které Danka treffi hlučné lidi, jako

$$x_{\max} = \frac{4Q}{\pi d^2 g} \sqrt{2hg + \left( \frac{4Q}{\pi d^2} \right)^2} \doteq 4,9 \text{ m}.$$

Pokud tedy stojí hluční lidé dále než 5 m od koleje, jsou před rozzuřenou Dankou v bezpečí.

## Úloha III.2 ... topení na chalupě



Danka přišla uprostřed zimy na svou chalupu, kde bylo uvnitř jen  $T_1 = 12^\circ\text{C}$ . Zapálila proto v krbu oheň, kde topila dřevem s výhřevností  $H = 14,23 \text{ MJ}\cdot\text{kg}^{-1}$ . Kolik ho musí spálit, aby ohřála vzduch vevnitř na  $T_2 = 20^\circ\text{C}$ ? Chalupa má tvar kvádra s rozměry  $a = 6 \text{ m}$ ,  $b = 8 \text{ m}$  a  $c = 3 \text{ m}$ , kde  $c$  je výška stěn, a střechou ve tvaru nepravidelného ležatého trojbokého hranolu s výškou  $v = 1,5 \text{ m}$ , jehož horní hrana je osou půdorysu chalupy. Vzduch zabírá 87 % objemu chalupy, jeho hustota je  $\rho_v = 1,29 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  a měrná tepelná kapacita je  $c_v = 1007 \text{ J}\cdot\text{kg}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ . Odpovídá výsledek očekávání? Diskutujte nad použitým jednoduchým modelem.

*Dance bývá na chalupě zima.*

Aby Danka ohřála vzduch v chalupě, musí získat energii spaláním dřeva. Ak spálí dřevo s hmotností  $M$ , uvolní sa tým z neho teplo

$$Q = MH.$$

Ak sa všetko toto teplo odovzdá vzduchu, bude platit

$$Q = mc_v(T_2 - T_1),$$

kde  $m$  je hmotnosť vzduchu v chalupě. Tú jednoducho vypočítame ako súčin objemu a hustoty vzduchu. Celkový objem chalupy  $V_0$  je súčet objemu kvádra vymedzeného stenami chalupy a trojbokého ihlanu tvoriaceho strechu chalupy. Objem ihlanu sa rovná  $avb/2$ . Následne objem chalupy je

$$V_0 = abc + \frac{1}{2}avb = ab\left(c + \frac{1}{2}v\right).$$

Keďže vieme, že vzduch zaberá len  $\eta = 0,87$  z objemu celej chalupy, môžeme napísať

$$Q = \eta ab\left(c + \frac{1}{2}v\right)\rho_v c_v(T_2 - T_1).$$

Nakoniec dosadíme do tejto rovnice vzťah zo začiatku riešenia, vyjadríme potrebnú hmotnosť dreva a dostaneme

$$M = \frac{\eta\rho_v c_v}{H} ab\left(c + \frac{1}{2}v\right)(T_2 - T_1).$$

Po dosadení zadaných hodnôt dostaneme, že Danke stačí spáliť  $M \approx 0,11 \text{ kg}$  dreva.

Keď sa zamyslíme, uvedomíme si, že v reálnom živote to takto nefunguje. Určite nestačí spáliť iba sto gramov dreva na to, aby sme zohriali vzduch v chalupě o niekoľko stupňov. Z vlastných skúseností by sme to skôr odhadli na niekoľko kilogramov. Náš jednoduchý model je teda nesprávny. Predpokladá totižto, že všetko teplo získané spaláním dřeva, sa bez strát využije na ohrev vzduchu a iba vzduchu.

V skutočnosti hrá pri ohrievaní chalupy rolu niekoľko ďalších faktorov. Najdôležitejším z nich je, že účinnosť odovzdaného tepla zďaleka nie je stopercentná.

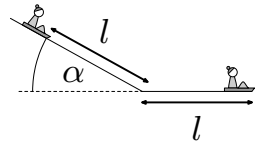


Velké množství teplého vzduchu uniká hore komínem přeč z chalupy. Steny komína sa zohrievajú, pričom budú odovzdávať teplo obklopujúcemu vzduchu v chalupe. Musíme taktiež myslieť na to, že merná tepelná kapacita steny z betónu je rádo-vo podobná mernej tepelnej kapacite vzduchu <sup>19</sup>, ale stena má o niekoľko rádov vyššiu hustotu. Preto celkové teplo potrebné na ohriatie steny je oveľa väčšie ako pre ohriatie vzduchu. Podobne je to aj s predmetmi vnútri chalupy. Ak je chalupa vybavená nejakým nábytkom z dreva, plastu či látky, ten pohltí omnoho viac tepla ako samotný vzduch. V zadaní síce hovoríme iba o ohriatí vzduchu, ale v skutočnosti nemôžeme zanedbať tepelnú výmenu medzi vzduchom v chalupe a predmetmi v nej. Pokiaľ sú predmety chladnejšie ako vzduch, teplo prúdi zo vzduchu do týchto predmetov, čím sa spätne ochladzuje. Aby sme dosiahli stabilnú teplotu vzduchu v miestnosti, musia aj všetky predmety v miestnosti nadobudnúť túto teplotu. Ďalší jav, ktorý sme v riešení nevzali do úvahy, je tepelná izolácia samotnej chalupy. Predpokladali sme, že chalupa je tepelne izolovaná. Avšak u reálnej chalupy dochádza k významnej tepelnej výmene s okolím, pričom jej miera závisí na materiálu chalupy, kvalite izolácie stien a na tom, ako dobre sú utesené okná a dvere.

Ak by sme zohľadnili všetky tieto faktory, bolo by možné spočítať skutočnú hmotnosť spáleného dreva potrebnú na zohriatie vzduchu v chalupe. Potom by podiel hodnoty získanej jednoduchým výpočtom vyššie a skutočnej hodnoty, popisoval niečo, ako účinnosť odovzdanej energie z dreva vzduchu. Ako vidíme podľa nereálne malej hmotnosti získanej výpočtom, táto účinnosť je veľmi nízka.

### Úloha III.3 ... bobování

Matěj s Davidem se kloužou na bobech z kopce se sklonem  $\alpha = 29^\circ$ , který v jeho patě přechází ve vodorovnou zem. Oba vyrazili z klidu ze stejné výšky. Matějovy boby ujedou vždy stejnou vzdálenost  $l$  po nakloněné rovině i ve vodorovné části. Protože se při vyšší zátěži boby proborí hlouběji do sněhu, uvažujte, že třecí koeficient je úměrný normálové síle jako  $f(F) = kF$ , kde  $k$  je kladná konstanta. Určete, kolikrát dále dojede Matěj od paty kopce než David, je-li Davidova hmotnost (i s boby) o 12 % vyšší než Matějova. V patě kopce bobaři neztrácí žádnou energii.



Matěj se rád baví o bobech.

Úlohu vyřešíme pomocí zákona zachování energie. Když jsou bobaři na vrcholu kopce o výšce  $h$ , mají potenciální energii  $E_p$ , která se v průběhu přeměnění na energii kinetickou  $E_k$  a na práci konanou třením  $W_t$ . Po dosažení roviny se kinetická energie  $E_k$  přemění na práci tření  $W'_t$ . Pro práci vykonanou třením platí

$$W_t = F_t d = f F_N d = k F_N^2 d,$$

kde  $d$  je uražená dráha a  $F_N$  normálová síla, pro kterou v tomto případě platí  $F_N = mg \cos \alpha$ .

<sup>19</sup>[https://www.designingbuildings.co.uk/wiki/Specific\\_heat\\_capacity](https://www.designingbuildings.co.uk/wiki/Specific_heat_capacity)

Rozeberme nejdříve pohyb Matěje, u kterého víme, že urazí stejnou dráhu na kopci i po rovince. Označme ji  $l$ . Z geometrie kopce je jasné, že jeho výška bude  $h = l \sin \alpha$ . Napíšeme dvě zmiňované rovnice

$$\begin{aligned} E_{\text{pM}} &= W_{\text{tM}} + E_{\text{kM}}, \\ E_{\text{kM}} &= W'_{\text{tM}}. \end{aligned}$$

které mají po dosažení tvar

$$\begin{aligned} mgl \sin \alpha &= k(mg \cos \alpha)^2 l + E_{\text{kM}}, \\ E_{\text{kM}} &= k(mg)^2 l. \end{aligned}$$

Dále dosadíme z druhé rovnice do první

$$mgl \sin \alpha = k(mg \cos \alpha)^2 l + k(mg)^2 l,$$

odkud po úpravě vyjádříme koeficient  $k$  jako

$$k = \frac{1}{mg} \frac{\sin \alpha}{1 + \cos^2 \alpha}.$$

Obdobně postupujme u Davida, kde známe hmotnost  $m_{\text{D}} = 1,12 m$ , a označme dráhu, kterou urazí na rovince, jako  $l_{\text{D}}$ . Dostáváme

$$\begin{aligned} 1,12 mgl \sin \alpha &= k(1,12 mg \cos \alpha)^2 l + E_{\text{kD}}, \\ E_{\text{kD}} &= k(1,12 mg)^2 l_{\text{D}}. \end{aligned}$$

Znovu vyjádříme za kinetickou energii, k tomu i za koeficient  $k$

$$1,12 mgl \sin \alpha = \frac{1}{mg} \frac{\sin \alpha}{1 + \cos^2 \alpha} (1,12 mg \cos \alpha)^2 l + \frac{1}{mg} \frac{\sin \alpha}{1 + \cos^2 \alpha} (1,12 mg)^2 l_{\text{D}}.$$

a finálně najdeme poměr  $l/l_{\text{D}}$  jako

$$\frac{l}{l_{\text{D}}} = \frac{1,12}{1 - 0,12 \cos^2 \alpha}.$$

Stačí dosadit za úhel  $\alpha = 29^\circ$  a máme výsledek

$$\frac{l}{l_{\text{D}}} \doteq 1,23.$$

## Úloha III.4 ... útěk na Tau Ceti

Protože naše Slunce jednou exploduje, bude potřeba zorganizovat stavbu evakuační lodi, v níž alespoň 0,000 001 % lidstva získá možnost uniknout. Pro únik si vyberou hvězdu Tau Ceti vzdálenou 12 ly. Podaří se jim sestrojít motory, které za velmi krátký čas zrychlí loď na cestovní rychlost  $v = 0,75c$ . Bohužel, právě v polovině vzdálenosti k cíli zpozorují jak explozi Slunce, tak explozi Tau Ceti. Jak dlouho před touto strašlivou scénou exploze nastaly v soustavě spojené s lodí? A kdy v soustavě, ve které jsou Slunce i Tau Ceti nehybné? Předpokládejte, že se vzdálenost mezi oběma hvězdami nemění.

*Karel chtěl uniknout včas. Ale nepovedlo se.*

V súradnicovej sústave spojenej s hviezdami loď dorazí do polovice cesty v čase  $t_1 = d/2v = 8$  rokov po opustení Zeme. V tomto čase na lodi spozorovali výbuch oboch hviezd, ktorého svetlo k lodi z oboch strán cestovalo  $t_0 = d/2c = 6$  rokov. V sústave spojenej s hviezdami teda oba výbuchy nastali  $t_0 = 6$  rokov pred tým, ako boli loďou pozorované.

V sústave spojenej s loďou je situácia komplikovanejšia kvôli vplyvu relativistických efektov. V tejto sústave je loď statická, Slnko sa od nej vzdaluje rýchlosťou  $v$  a Tau Ceti sa približuje rýchlosťou  $v$ . Uvažujme, že vzdialenosť hviezd v sústave spojenej s loďou je  $D$ . Od momentu, keď Slnko vybuchlo, prešlo Slnko vzdialenosť  $vt_1$  a svetlo urazilo  $ct_1$  do okamihu, keď bol výbuch loďou pozorovaný. Čas  $t_1$  označuje čas plynúci na lodi. Vzhľadom na to, že v okamihu pozorovania sa loď nachádza v polovici cesty medzi hviezdami,

$$\frac{D}{2} = ct_1 + vt_1 = ct_2 - vt_2,$$

$$t_1 = \frac{D}{2(c+v)}, \quad t_2 = \frac{D}{2(c-v)},$$

kde sme uvážili podobne pre druhú hviezdu čas  $t_2$  a fakt, že svetlo aj hviezda majú zhodný smer pohybu. Vidíme teda, že pozorovateľ na lodi určí časy výbuchov hviezd ako nie súčasné. Navyše ani vzdialenosť hviezd pozorovaná v sústave lode nie je rovnaká ako v sústave hviezd. Tieto vzdialenosti sú previazané vzťahom pre tzv. kontrakciu dĺžky

$$D = d\sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}}.$$

Celkovo máme pre časy výbuchov Slnka a Tau Ceti pred ich pozorovaním v sústave

lode

$$\begin{aligned}
 t_1 &= \frac{d}{2(c+v)} \sqrt{1 - \frac{v^2}{c^2}} = \\
 &= \frac{d}{2c} \sqrt{\frac{c-v}{c+v}} = \\
 &= t_0 \sqrt{\frac{c-v}{c+v}} \doteq 2,2 \text{ roka}, \\
 t_2 &= t_0 \sqrt{\frac{c+v}{c-v}} = 15,9 \text{ roka}.
 \end{aligned}$$

K tomuto záveru by sa dalo prísť aj vhodným využitím vzorčeka pre Dopplerov posun, ak by sme sa pozreli na periodický signál s periódou  $t_0$ .

Na záver dodajme, že hviezdy sa voči sebe pohybujú rýchlosťami okolo desiatok kilometrov za hodinu, teda predpoklad vzájomnej nehybnosti je oprávnený. Trochu menej realistické je však to, že na konci svojho života bude Slnko (aj Tau Ceti) prechádzať fázou Asymptotickej vetvy obrov, ktorú sprevádzajú výrazné termálne pulzy odhadzujúce veľké množstvo hmoty trvajúce niekoľko stotisíc rokov. Táto hmota následne vytvorí okolo Slnka planetárnu hmlovinu a odhalí jadro, ktoré sa stane bielym trpaslíkom. Na výbuch supernovy je Slnko príliš málo hmotné. Pre život v Slnčej sústave je teda výrazne nebezpečnejšie postupné zvyšovanie žiarivého výkonu Slnka, ktoré znemožní život na Zemi ako ho poznáme už o asi miliardu rokov.

### Komentár k došlým riešeniam

Najčastejšou chybou pri riešení úlohy bola nesprávna transformácia medzi sústavami. Väčšina riešiteľov použila na transformáciu len vzťah pre dilatáciu času alebo kontrakciu dĺžky. Tieto vzťahy je možné použiť len v špeciálnych prípadoch. Plná Lorentzova transformácia medzi súradnicami  $(t, x)$  a  $(t', x')$  dvoch sústav pohybujúcich sa voči sebe rovnomerne priamočiario rýchlosťou  $v$  má tvar

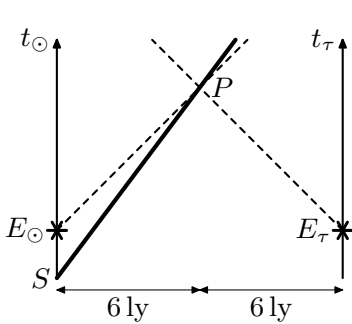
$$t' = \gamma \left( t - \frac{vx}{c^2} \right), \quad x' = \gamma (x - vt).$$

Dôležité sú nasledujúce pozorovania:

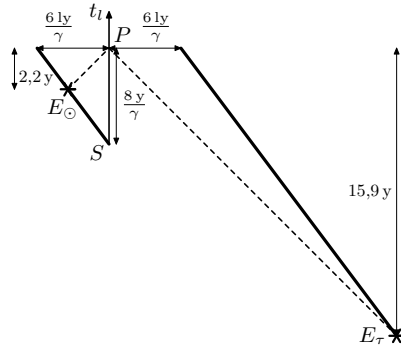
- pre malé rýchlosti  $v \ll c$  je  $t' = t$  a  $x' = x - vt$ , čo je štandardná Galileovská transformácia;
- ak máme dve udalosti, ktoré v jednej zo sústav nastali súčasne  $\Delta t = 0$ , pre ich časový rozostup v druhej sústave máme  $\Delta t' = -\gamma v \Delta x / c^2$ . Ak sa neodohrali na tom istom mieste v prvej sústave, v druhej sústave sa neodohrajú naraz;
- ak pozorujeme hodinky **nepohybujúce sa** v nečiarkovanej sústave ( $\Delta x = 0$ ) z čiarkovanej sústavy, zdá sa nám, že tikajú s intervalom  $\Delta t' = \gamma t$  - dilatácia času;

- ak máme tyč dĺžky  $\Delta x = l$  meranej v nečiarkovanej sústave orientovanú v smere x-ovej osi, v čiarkovanej sústave by pozorovateľ pri meraní oboch koncov **v tom istom časovom okamihu**  $\Delta t' = 0$  zmeral dĺžku  $\Delta x' = \gamma(l - v\Delta t) = \gamma(l - v^2l/c^2) = l/\gamma$ , kde sme dosadili z prvej rovnice za  $\Delta t = v\Delta x/c^2$ . Dostávame tak známy vzťah pre kontrakciu dĺžky.

V našom prípade však výbuch hviezd a ich pozorovanie neboli súčasné ani súmestne javy v ani jednej zo sústav hviezd a lode. Musíme tak použiť plnú Lorenztzovu transformáciu. Celá situácia sa dá graficky znázorniť na časopriestorových diagramoch na obrázkoch 4 a 5. V týchto vynášame časovú osu zvislo a priestorovú osu vodorovne, pričom pri vhodnej voľbe jednotiek (ako napríklad roky a svetelné roky) sa svetlo pohybuje vždy pod uhlom  $45^\circ$ . Svetočiara lode, resp. hviezd je vyznačená tučne, svetelné lúče explózií sú vyznačené prerušovane, loď odštartovala v udalosti S, hviezdy vybuchli v udalostiach E a tieto výbuchy boli loďou pozorované v udalosti P. Vidíme, že pre pozorovateľov v sústave hviezd, resp. lode, sa situácia javí značne odlišne.



Obr. 4: Časopriestorový diagram v sústave hviezd.



Obr. 5: Časopriestorový diagram v sústave lode.

### Úloha III.5 ... kytarová

Mějme kytaru naladěnou při pokojové teplotě. O kolik púltónů (při temperovaném ladění) se přeladí jednotlivé struny, pokud se přesuneme k táboráku, kde bude o  $10^\circ\text{C}$  chladněji? Bude kytara stále znít naladěně? Vzdálenost mezi body upevnění strun je  $d = 65\text{ cm}$ . Struny mají hustotu  $\rho = 8900\text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ , Youngův modul pružnosti  $E = 210\text{ GPa}$  a teplotní roztažnost  $\alpha = 17 \cdot 10^{-6}\text{ K}^{-1}$ .

*Honzovi se opět rozladila kytara.*

### Frekvence struny

Frekvenci struny vypočteme ze vzorce

$$f = \frac{c}{\lambda} = \frac{\sqrt{\frac{F}{\mu}}}{2d},$$

kde  $\mu$  je délková hustota struny. Nyní si rozmyslíme, odkud se bere síla, která strunu napíná. Klidová délka napnutého úseku struny  $L_0$  je menší než  $d$ . Je tedy třeba strunu napnout silou o velikosti  $F$ , aby se natáhla na délku  $d$ . Pokud ovšem přejdeme do chladnějšího prostředí, struna bude mít tendenci se zkrátit, ale bude stále pevně uchycena. Bude tedy napínána silněji. Hookův zákon říká

$$\begin{aligned}\sigma &= E\varepsilon, \\ \frac{F}{S} &= E\varepsilon, \\ \varepsilon &= \frac{F}{SE},\end{aligned}$$

kde  $\sigma$  je mechanické napětí,  $\varepsilon$  je relativní protažení struny a  $S$  je plocha příčného řezu struny. Celková délka natažené struny bude vždy  $d$  a souvisí s  $L_0$  následovně

$$d = L_0 + \varepsilon L_0 = L_0 (1 + \varepsilon).$$

Z předchozí diskuse vyplývá, že po zahrnutí teplotní roztažnosti struny bude vztah pro její délku vypadat

$$d = L_0 (1 + \alpha T) (1 + \varepsilon) = L_0 (1 + \alpha T) \left(1 + \frac{F}{SE}\right).$$

Z této rovnice vyjádříme sílu  $F$  a dosadíme ji do první rovnosti

$$F = SE \left( \frac{d}{L_0 (1 + \alpha T)} - 1 \right).$$

Nyní vyjádříme frekvenci jako

$$f = \frac{\sqrt{\frac{SE \left( \frac{d}{L_0 (1 + \alpha T)} - 1 \right)}{\mu}}}{2d}.$$

Výraz  $S/\mu$  upravíme

$$\frac{S}{\mu} = \frac{S}{\frac{m}{d}} = \frac{1}{\frac{m}{dS}} = \frac{1}{\rho}$$

a dosadíme do vzorce pro frekvenci

$$f = \frac{\sqrt{\frac{E \left( \frac{d}{L_0 (1 + \alpha T)} - 1 \right)}{\rho}}}{2d}.$$

Pokud položíme teplotní rozdíl  $T = 0^\circ\text{C}$ , dostaneme frekvenci  $f_0$ , kterou měla struna uvnitř:

$$f_0 = \frac{\sqrt{\frac{E\left(\frac{d}{L_0} - 1\right)}{\rho}}}{2d},$$

$$L_0 = \left( \frac{d}{\frac{4d^2 f_0^2 \rho}{E} + 1} \right).$$

Z rovnice pro  $f_0$  jsme získali vztah pro neznámou  $L_0$ . Ten dosadíme do vzorce pro  $f$  a výsledný výraz upravíme. Z důvodů vysvětlených níže vyjádříme poměr frekvencí  $f/f_0$ :

$$f = \sqrt{\frac{f_0^2 - \frac{E\alpha T}{4d^2\rho}}{1 + \alpha T}},$$

$$\frac{f}{f_0} = \sqrt{\frac{1 - \frac{E\alpha T}{4d^2\rho f_0^2}}{1 + \alpha T}}.$$

### Hudební teorie

V teorii hudby platí, že tón o oktávu vyšší má dvojnásobnou frekvenci původního tónu. Dále platí, že poměr frekvencí dvou not, které jsou od sebe vzdálené o půltón, je vždy konstantní (označme konstantu  $K$ ). Jelikož je oktáva tvořena dvanácti půltóny, platí

$$f_{\text{vyšší}} = 2f_0,$$

$$f_{\text{vyšší}} = K^{12}f_0,$$

$$K^{12} = 2,$$

$$K = 2^{\frac{1}{12}}.$$

O kolik půltónů se struna přeladí, spočteme následovně

$$\frac{f}{f_0} = \left(2^{\frac{1}{12}}\right)^n,$$

$$\left(2^{\frac{1}{12}}\right)^n = \sqrt{\frac{1 - \frac{E\alpha T}{4d^2\rho f_0^2}}{1 + \alpha T}},$$

$$n = 6 \log_2 \left( \frac{1 - \frac{E\alpha T}{4d^2\rho f_0^2}}{1 + \alpha T} \right),$$

kde  $n$  je počet půltónů, o který se struna původně naladěná na frekvenci  $f_0$  přeladí. Vypočtené hodnoty lze elegantně shrnout do tabulky 5.

Tab. 5: Změna frekvence strun

struna	$\frac{f_0}{\text{Hz}}$	$\frac{f}{\text{Hz}}$	$n$
E	330	334	0,19
H	247	252	0,33
G	196	202	0,52
D	146	154	0,92
A	110	120	1,55
e	82	95	2,62

Lze vidět, že struny naladěné na vyšší frekvence se vlivem změny teploty moc nerozladí, zatímco struny na nižších frekvencích se mohou při běžných teplotních rozdílech přeladit i o celý tón. Jelikož je tato změna nerovnoměrná, tj. všechny struny se nepřeladí o stejnou hodnotu například jednoho tónu, nástroj se nám rozladí.

Ještě bychom měli zmínit, že jsme během výpočtu zanedbali to, že se plocha průřezu vlivem roztahení zmenší. Pokud bychom chtěli započítat i tento jev, museli bychom použít další materiálovou konstantu zvanou Poissonovo číslo (anglicky Poisson's ratio), které vystihuje, jak se materiál smrští ve směru kolmém na směr tahu. Jestliže bychom započítali i tento jev, vypočtené hodnoty by se lišily až na čtvrté nebo páté platné cifře. Můžeme jej tedy s chladnou hlavou zanedbat.

### Úloha III.P ... absurdní kyvadlo

*Jaké jevy mohou ovlivnit měření tíhového zrychlení pomocí kyvadla? Odhadněte, kolik platných cifer by musel obsahovat váš výsledek, abyste je naměřili. Uvažujte i jevy, které běžně zanedbáváte.*

*Kačka přemýšlela, co všechno může napsat do diskuze.*

#### *Skutečné změny tíhového zrychlení*

První skupinou jevů, kterou se budeme zabývat, jsou skutečné změny tíhového zrychlení, tedy vlivy, které bychom zaznamenali i sebedokonalejším přístrojem. Prvním rozdílem od tabelované hodnoty  $9,81 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$  jsou lokální rozdíly dle místa měření.

**Změny dle zeměpisné šířky** Protože Země není přesná koule, ale je to takzvaný *geoid*, tedy nepravidelný útvar, který budeme v prvním přiblížení považovat za elipsoid s rovníkovým poloměrem  $R_r = 6378 \text{ km}$  a polárním poloměrem  $R_p = 6357 \text{ km}$ ,<sup>20</sup> budou se i tíhová zrychlení lišit v rozdílu gravitačního zrychlení, protože dle zeměpisné šířky jsme jinak daleko od centra Země. Pokud budeme

<sup>20</sup>[https://is.muni.cz/el/1441/podzim2007/ZS1BP\\_IVZ1/um/02.Tvar\\_a\\_velikost\\_Zeme.pdf](https://is.muni.cz/el/1441/podzim2007/ZS1BP_IVZ1/um/02.Tvar_a_velikost_Zeme.pdf)



uvažovat veškerou hmotnost soustředěnou v centru Země, můžeme spočítat v obou případech gravitační zrychlení. Hmotnost Země je  $M_Z = 5,9736 \cdot 10^{24}$  kg, tedy gravitační zrychlení na pólu bude

$$g_{\text{pól}} = G \frac{M_Z}{R_p^2} = 6,674 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \frac{5,9736 \cdot 10^{24} \text{ kg}}{(6357 \text{ km})^2} \doteq 9,865 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$$

a na rovníku bude

$$g_{\text{rov}} = G \frac{M_Z}{R_p^2} = 6,674 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \frac{5,9736 \cdot 10^{24} \text{ kg}}{(6378 \text{ km})^2} \doteq 9,801 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}.$$

Jelikož tíhová síla je výslednicí gravitační a odstředivé síly otáčení Země, bude mít tíhové zrychlení různou hodnotu na různých zeměpisných šířkách. Na pólu nepůsobí žádné odstředivé zrychlení, zatímco na rovníku o rovníkovém poloměru  $R = 6378$  km je odstředivé zrychlení velikosti

$$a_{\text{ods}} = \omega^2 R = \frac{4\pi^2}{(1 \text{ den})^2} \cdot 6378 \text{ km} \doteq 0,03 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}.$$

Zeměpisná šířka má tedy na tíhové zrychlení vliv v řádu setin  $\text{m} \cdot \text{s}^{-2}$ , musíme tedy měřit alespoň na tři platné cifry, abychom tento vliv naměřili.

**Změny dle nadmořské výšky** Změny dle nadmořské výšky budeme počítat stejně jako jsme počítali změnu dle zeměpisné šířky, tedy s modelem hmoty soustředěné v centru a pro dva body na rovníku, a to hladinu moře s poloměrem  $R_r = 6378$  km a vrchol Cayambe, který je téměř na rovníku a má nadmořskou výšku  $5790$  m. n. m.,<sup>21</sup> tedy jeho poloměr je  $R_{\text{Cay}} = 6383,79$  km. Tíhové zrychlení na hladině moře z předchozího příkladu máme a je  $g_0 = 9,80 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} - 0,03 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} = 9,77 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ , tíhové zrychlení na Cayambe je

$$\begin{aligned} g_{\text{Cay}} &= G \frac{M_Z}{R_{\text{Cay}}^2} - \omega^2 R_{\text{Cay}} = \\ &= 6,674 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{kg}^{-1} \cdot \text{s}^{-2} \cdot \frac{5,9736 \cdot 10^{24} \text{ kg}}{6383,79 \text{ km}^2} - \frac{4\pi^2}{1 \text{ den}^2} \cdot 6383,79 \text{ km} \doteq \\ &\doteq 9,78 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} - 0,03 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2} = \\ &= 9,75 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}, \end{aligned}$$

rozdíl je tedy opět na druhém desetinném místě. Pro menší výškové rozdíly v řádu stovek metrů bude rozdíl na třetím desetinném místě.

**Vliv podloží** Kromě zeměpisné šířky a nadmořské výšky má vliv i podloží a reliéf okolí. Dle geologického učebního materiálu<sup>22</sup> budou změny tíhového pole způsobené hlubinnými změnami, jako například podzemním ložiskem ropy řádu  $10^{-6} \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ , pro jejich určení tedy musíme měřit s přesností na 7 platných cifer.

<sup>21</sup><https://cs.wikipedia.org/wiki/Cayambe>

<sup>22</sup>[https://is.muni.cz/el/1431/podzim2007/Z0135/um/Uvod\\_06\\_Tihove\\_pole.pdf](https://is.muni.cz/el/1431/podzim2007/Z0135/um/Uvod_06_Tihove_pole.pdf)

**Kosmické okolí** Nyní jsme již zanedbali všechny vlivy pocházející ze Země a lokace bodu na ní. Podíváme se tedy dále, a to do kosmu. Objekty zde jsou sice velmi daleko, ale jsou také velmi hmotné a některé z nich mají nezanedbatelný vliv na těleso Země. Změny tíhového zrychlení způsobené těmito tělesy spočítáme jako rozdíl jejich gravitační síly na bod ve středu Země pro různé vzdálenosti daných těles. Spočítáme tedy rozdíl gravitačního zrychlení od tohoto tělesa v obou těchto polohách, kde gravitační zrychlení spočítáme dle vzorce

$$g = G \frac{M}{r^2},$$

kde  $G = 6,67 \cdot 10^{-11} \text{ m}^3 \cdot \text{s}^{-2} \cdot \text{kg}^{-1}$  je gravitační konstanta,  $M$  je hmotnost daného tělesa a  $r$  je jeho vzdálenost od Země. Výsledky pro vybraná tělesa jsou uvedeny v tabulce 6.

Tab. 6: Vliv kosmických těles na tíhové zrychlení

těleso	$\frac{M}{\text{kg}}$	menší vzdálenost	větší vzdálenost	$\frac{\Delta g}{\text{m} \cdot \text{s}^{-2}}$
Měsíc	$7,35 \cdot 10^{22}$	365 033 km	407 241 km	$7 \cdot 10^{-6}$
Slunce	$1,99 \cdot 10^{30}$	147 098 074 km	152 097 701 km	$4 \cdot 10^{-4}$
Mars	$6,42 \cdot 10^{23}$	0,5 AU	2,5 AU	$6 \cdot 10^{-9}$
Jupiter	$1,90 \cdot 10^{27}$	4,2 AU	6,2 AU	$2 \cdot 10^{-7}$
Pluto	$1,30 \cdot 10^{23}$	38 AU	40 AU	$3 \cdot 10^{-13}$

V této tabulce bylo použito hodnot hmotností a vzdáleností z Wikipedie<sup>23</sup>, kde pro Slunce a Měsíc používáme vzdálenost perihelia a afélia, respektive perigea a apogea, zatímco pro planety používáme součet a rozdíl střední poloosy dané planety a Země.

Nyní ještě můžeme porovnat vliv těchto kosmických těles s gravitačním vlivem malých velmi blízkých těles. Pro člověka o hmotnosti  $M = 80 \text{ kg}$  ve vzdálenosti  $r = 1 \text{ m}$  je gravitační zrychlení přibližně  $\Delta g = 5 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$  a pro kamion o hmotnosti  $M = 40 \text{ t}$  ve vzdálenosti  $r = 50 \text{ m}$  je gravitační zrychlení přibližně  $\Delta g = 1 \cdot 10^{-9} \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ , tedy porovnatelně s vlivem člověka nebo Marsu.

**Slapové síly** V předcházejícím odstavci jsme počítali vliv kosmických těles na bod ve středu Země. Tyto síly jsou však již zahrnuty do pohybu Země ve sluneční soustavě pomocí změn trajektorie. Co však má na měření na povrchu vliv, je slapová síla daná tím, že gravitační síla od jednotlivých těles není stejná na povrchu Země jako v jejím středu. Velikost slapové síly je tedy úměrná gradientu gravitační síly. V přínce procházející středy obou těles pozorujeme slapové zrychlení

$$\frac{2GMr}{R^3},$$

<sup>23</sup><https://cs.wikipedia.org/>

kde  $M$  je hmotnost daného tělesa,  $r$  je poloměr Země,  $R$  je vzdálenost Země od daného tělesa a  $m$  je hmotnost tohoto tělesa. Po dosazení hodnot pro Měsíc dostáváme  $\Delta g \approx 5 \cdot 10^{-7} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$  a pro Slunce  $\Delta g \approx 1 \cdot 10^{-6} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ .<sup>24</sup> Tyto síly jsou sice malé, ale i tak pozorovatelné v podobě přílivu, odlivu a rozdílů v jeho výšce dle fáze Měsíce. Tento vliv je řádově menší než vliv daných rozdílů gravitace na střed Země, obzvláště pro vzdálenější objekty jako Slunce (vzhledem k závislosti na její třetí mocnině). Předpokládejme tedy, že vliv ostatních těles bude také řádově nižší než jejich přímý vliv na střed Země. Pokud tělesa okolo sebe rotují, je třeba připočítat ještě vliv odstředivé síly, který je přibližně poloviční.<sup>25</sup>

### Systematické problémy matematického kyvadla

Skutečné změny tíhového zrychlení máme rozebrané, nyní se podíváme na systematické chyby měření matematickým kyvadlem. Pro náš příklad budeme uvažovat, že naše kyvadlo je realizováno železnou koulí o hmotnosti  $m = 1 \text{ kg}$ , které je uvázáno na ocelové struně tak, že vzdálenosti jejího těžiště od závěsu jsou  $l = 2 \text{ m}$ .

**Matematické kyvadlo, přesnost parametrů** V modelu matematického kyvadla pak pro periodu platí

$$T = 2\pi\sqrt{\frac{l}{g}}.$$

Z měření periody tedy vypočítáme tíhové zrychlení jako

$$g = 4\pi^2 \frac{l}{T^2}.$$

Podívejme se tedy, s jakou přesností bychom museli měřit periodu a délku závěsu, abychom dosáhli dané přesnosti. Z teorie přenosu chyb lze určit, že relativní nejistota měření délky závěsu a tíhového zrychlení budou stejné, tedy abychom například zvládli změřit odchylky tíhového zrychlení řádu  $10^{-9} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ , musíme dosáhnout relativní přesnosti  $10^{-10}$ , tedy bychom museli měřit závěs s přesností  $10^{-10} \text{ m}$ , což je řádově rozměr atomu. Přesnost měření času je zde ještě podstatnější, protože dle přenosu chyb by pro pouze tuto chybu byla relativní chyba měření tíhového zrychlení dvojnásobná oproti relativní chybě měření periody. Pokud bychom např. chtěli dosáhnout přesnosti měření  $g$  do řádu  $10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$  (pro délku už teoreticky možné, bylo by třeba měřit na mikrometry), museli bychom mít relativní přesnost měření periody  $5 \cdot 10^{-6}$ , což pro naše kyvadlo s periodou přibližně 2,8 s dává nejistotu měření času přibližně  $10^{-5} \text{ s}$ . Pro měření stopkami s možnou přesností měření 0,1 s by to tedy znamenalo měřit  $10^4$  kmitů, což by s danou periodou zabralo asi 8 hodin. Pro takto dlouhou dobu už by se kyvadlo pravděpodobně působením dalších vlivů zastavilo. Pro dosažení požadované přesnosti pro měření 100 kmitů (5 minut) bychom tedy potřebovali měřit s přesností alespoň na 0,001 s.

<sup>24</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Tidal\\_force#Sun,\\_Earth,\\_and\\_Moon](https://en.wikipedia.org/wiki/Tidal_force#Sun,_Earth,_and_Moon)

<sup>25</sup>[https://cs.wikipedia.org/wiki/Slapov%C3%A1\\_s%C3%ADla](https://cs.wikipedia.org/wiki/Slapov%C3%A1_s%C3%ADla)

**Matematické kyvadlo, změny délky** Abychom měli délku stabilizovanou na mikrometry, musíme uvážit jevy, které by ji mohly měnit, a to teplotní roztažnost a pružné napínání. Změna délky vlivem délkové teplotní roztažnosti se spočítá jako

$$\Delta l = l_0 \alpha \Delta T,$$

kde  $l_0$  je původní délka,  $\Delta T$  je změna teploty a  $\alpha$  je koeficient délkové teplotní roztažnosti. Jeho velikost nalezneme například v tabulkách<sup>26</sup> a vidíme, že jeho velikost je například pro ocel  $11 \cdot 10^{-6} \text{ K}^{-1}$ , tedy pro bychom potřebovali udržovat přesnou teplotu na desetiny stupně, zatímco pro polyetylen je více než desetkrát větší, tedy tady bychom potřebovali udržovat teplotu na setinu stupně.

Druhý vliv je změna napěťové síly natahující lano vlivem kývání kyvadla. Pokud uvážíme maximální výchylku kyvadla  $5^\circ$ , budou změny tahové síly řádové

$$\Delta F = mg(1 - \cos \varphi) \approx 4 \cdot 10^{-2} \text{ N}$$

Pro přepočítání změny délky použijeme vztah popisující pružnost  $\Delta l = k \Delta F$ , kde  $k$  vyjadřuje tuhost, kterou vypočteme jako  $k = l_0 / (ES)$ , kde  $S$  je průřez vlákna a  $E$  je modul pružnosti v tahu. Předpokládejme tloušťku vlákna  $d = 0,1 \text{ mm}$  a kruhový průřez a modul pružnosti v tahu oceli<sup>27</sup>  $E = 220 \text{ GPa}$ . Pro změnu délky pak dostáváme

$$\Delta l = \frac{l_0}{ES} \Delta F \approx 10^{-3} \text{ m} \cdot \text{N}^{-1} \cdot 4 \cdot 10^{-2} \text{ N} \approx 4 \cdot 10^{-5} \text{ m}.$$

Abychom dosáhli přesnosti  $10^{-6}$  potřebovali bychom úhel maximálně  $0,1^\circ$ , což by dávalo průmět kyvu do vodorovného směru přibližně 3 mm.

**Fyzikální kyvadlo** Nyní se podíváme na náš model fyzikálního kyvadla, tedy už nebudeme považovat naše kyvadlo za hmotný bod na nehmotném závěsu, ale za tuhou kouli a tuhou tyč (obojí z oceli). Pro dobu kmitu fyzikálního kyvadla platí vzorec

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{I}{mgl}}, \quad (5)$$

kde  $l$  je vzdálenost těžiště od bodu otáčení a  $I$  je moment setrvačnosti kolem osy otáčení. Když uvážíme hustotu oceli  $\rho = 7850 \text{ kg} \cdot \text{m}^{-3}$ , spočítáme hmotnost vlákna modelovaného tuhým tyčí  $m_v = 0,12 \text{ g}$  a poloměr koule  $r = 3,12 \text{ cm}$ . Změna polohy těžiště vlivem vlákna bude asi 0,1 mm. Moment setrvačnosti vyjádříme jako součet momentu setrvačnosti tuhé tyče  $I_t = m_v(l - r)^2/3$  a moment setrvačnosti koule  $I_k = 2m_k r^2/5$ , který ovšem musíme posunout o vzdálenost středu koule od

<sup>26</sup><http://kabinet.fyzika.net/studium/tabulky/teplna-kapacita-roztaznost>.

<sup>27</sup><http://kabinet.fyzika.net/studium/tabulky/modul-pruznosti.php>

těžiště  $l$  pomocí Steinerovy věty. Nyní vyjádříme z rovnice (5) tíhové zrychlení a dosadíme za všechny veličiny:

$$\begin{aligned}
 g &= 4\pi^2 \frac{I}{m l T^2} = \\
 &= 4\pi^2 \frac{\frac{2}{5} m r^2 + m l^2 + \frac{1}{3} m_v (l - r)^2}{(m + m_v) \left( l - \frac{m_v l}{2(m + m_v)} \right) T^2} = \\
 &= 4\pi^2 \frac{l \left( \frac{2}{5} \frac{r^2}{l^2} + 1 + \frac{1}{3} \frac{m_v}{m} \left( 1 - \frac{r}{l} \right)^2 \right)}{T^2 \left( 1 + \frac{m_v}{m} \right) \left( 1 - \frac{m_v}{2(m + m_v)} \right)} = \\
 &= g_0 \frac{\frac{2}{5} \frac{r^2}{l^2} + 1 + \frac{1}{3} \frac{m_v}{m} \left( 1 - \frac{r}{l} \right)^2}{\left( 1 + \frac{m_v}{m} \right) \left( 1 - \frac{m_v}{2(m + m_v)} \right)} \approx \\
 &\approx 1,000\,076 g_0
 \end{aligned}$$

Rozdíl naměřeného tíhového zrychlení při započtení modelu fyzického kyvadla je tedy řádově  $7 \cdot 10^{-4} \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ . Další otázkou by bylo, jak přesně by musely být měřeny konkrétní veličiny vystupující ve výpočtu. Zde bychom postupovali opět metodou přenosu chyb, ovšem pro komplikovanost výpočtu pro takto složitý vzorec to zde nebudeme počítat.

**Vliv odporu vzduchu** Jak jsme určili v minulém bodě, závaží bude mít nenulový rozměr, tedy při jeho pohybu ve vzduchu na něj bude působit odporová síla. Abychom mohli použít teorii tlumeného kmitání, budeme uvažovat, že odporová síla je přímo úměrná rychlosti tělesa, tedy obtékání je laminární a pro odporovou sílu můžeme psát

$$F_o = 6\pi\mu r v,$$

kde  $r$  je poloměr koule a  $\mu$  je dynamická viskozita vzduchu, která má hodnotu asi  $\mu = 1,9 \cdot 10^{-5} \text{ kg} \cdot \text{m}^{-1} \cdot \text{s}^{-1}$  a je silně teplotně závislá. Pohybová rovnice má tedy nyní tvar

$$I\ddot{\varphi} + 6\pi\mu r l \dot{\varphi} + mgl \sin \varphi = 0,$$

který po linearizaci a vydělení momentem setrvačnosti upravíme na

$$\ddot{\varphi} + \frac{6\pi\mu r l}{I} \dot{\varphi} + \frac{mgl}{I} \sin \varphi = 0,$$

což identifikujeme jako tvar rovnice pro tlumené kmitání  $\ddot{x} + 2\delta\dot{x} + \omega_0^2 x = 0$  s parametry  $\delta = 3\pi\mu r l^2 \dot{\varphi}/I$  a  $\omega_0^2 = mgl/I$ . Takovýto systém bude mít vlastní frekvenci  $\omega$  modifikovanou, a to

$$\omega = \sqrt{\omega_0^2 - \delta^2},$$

z čehož vypočítáme modifikovanou periodu

$$T = \frac{2\pi}{\sqrt{\left(\frac{2\pi}{T_0}\right)^2 - \delta^2}} = \frac{T_0}{\sqrt{1 - \frac{\delta^2 T_0^2}{4\pi^2}}} \approx 1,000\,001 T_0$$

Odpor vzduchu tedy dává relativní změnu periody  $10^{-6}$ , tedy relativní změnu měřeného tíhového zrychlení přibližně dvojnásobnou, přibližně  $2 \cdot 10^{-5} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ . Amplituda pak klesá jako  $e^{-\delta t}$ , charakteristická konstanta útlumu (kdy se zmenší amplituda na  $1/e$ ) je přibližně  $1,7 \cdot 10^5 \text{ s} \doteq 50 \text{ h}$ . Na zmenšení amplitudy tedy bude mít větší vliv tření v závěsu než odpor vzduchu.

Dalšími zdroji, které by zde mohly hrát roli je teplotní roztažnost koule nebo vliv změn teploty a tlaku na hustotu a dynamickou viskozitu vzduchu. Ty však opět nebudeme pro přílišnou náročnost explicitně počítat.

**Vliv anharmonicity** Při řešení rovnice harmonického oscilátoru užíváme aproximaci  $\sin \varphi = \varphi$ , která platí pro malé výchylky. Když však budeme chtít mít pro výchylky větší přesnost, můžeme použít rozvoj sinu do vyššího řádu, tedy  $\sin \varphi = \varphi + \varphi^3/6$ , což nám dává řešení pro periodu<sup>28</sup>

$$T = 2\pi \sqrt{\frac{l}{g}} \left( 1 + \frac{1}{4} \sin^2 \frac{\varphi}{2} \right).$$

To nám pro maximální úhel  $5^\circ$  dává relativní změnu periody přibližně  $5 \cdot 10^{-4}$ , tedy pro tíhové zrychlení dává rozdíl oproti jednoduchému výpočtu rozdíl řádu  $10^{-2} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ . Pokud bychom chtěli ještě přesnější výsledek, můžeme použít rozvoj sinu do ještě vyššího řádu, pro ty však už nemáme přesné analytické řešení. Maximální úhel ale není stále stejný, ale vlivem odporu vzduchu se postupně zmenšuje, tedy ani řešení z části Anharmonicity není přesné.

**Další vlivy** Dalším podstatným vlivem (viz sekce Vliv odporu vzduchu) je odpor v závěsu, který je ale složité kvantifikovat. Protože však z praxe víme, že kyvadlu trvá zmenšit svou amplitudu na třetinu méně než 50 h, bude rozhodně nezanedbatelný. Dalším vlivem, který bychom museli kontrolovat, je proudění vzduchu v místnosti. To by mělo být ideálně nulové, ale dosáhnout toho je technicky velmi obtížné, tedy bychom se alespoň snažili mít jej stabilní. Stabilitu proudění však může narušit už i pohyb experimentátora či jiných osob v místnosti.

### Závěr

V první části řešení jsme si ukázali, jak velký vliv mají jednotlivé skutečné změny tíhového zrychlení. V druhé části jsme se pak podívali, jaké všechny úvahy a korekce bychom museli zahrnout, abychom dané přesnosti skutečně dosáhli. Vidíme, že z našeho modelu 1 kg závaží na 2 m závěsu nejsme schopni kvůli přesnosti měření délky a času měřit s větší přesností než na  $10^{-6} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ , což je řádově ovlivněno složením podloží se započtením přesné zeměpisné polohy i nadmořské výšky. Měření vlivu kosmických těles je pak zcela mimo naše rozlišovací možnosti. K dosažení přesnosti na  $10^{-6} \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$  pak ale kromě velmi přesného měření vstupních parametrů a hlídání jejich změn musíme započítat i to, že jde o fyzické kyvadlo, které

<sup>28</sup>[https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Classical\\_Mechanics/Classical\\_Mechanics\\_\(Dourmashkin\)/24%3A\\_Physical\\_Pendulums/24.04%3A\\_Appendix\\_24A\\_Higher-Order\\_Corrections\\_to\\_the\\_Period\\_for\\_Larger\\_\\_Amplitudes\\_of\\_a\\_Simple\\_Pendulum](https://phys.libretexts.org/Bookshelves/Classical_Mechanics/Classical_Mechanics_(Dourmashkin)/24%3A_Physical_Pendulums/24.04%3A_Appendix_24A_Higher-Order_Corrections_to_the_Period_for_Larger__Amplitudes_of_a_Simple_Pendulum)

je tlumeno odporem vzduchu, a dokonce je třeba i započíst nepřesnost linearizace problému. Měřit veličiny velmi přesně je tedy velice složité nejen z praktického hlediska a potřeb pečlivého měření a přesné aparatury, ale narážíme i na hranice použité teorie.

### Úloha IV.1 ... vybíjení baterie

Robert zjistil, že do své nové čelovky musí dát 3 baterie o kapacitě 1000 mAh a napětí  $U = 1,5$  V. V čelovce jsou baterie zapojeny sériově. Za jak dlouho se baterie vybijí, pokud napájí čelovku o výkonu  $P = 5$  W a účinnosti  $\eta = 90\%$ ?

*Robertovi nefungovala čelovka.*

Informace o zapojení baterií v čelovce je nadbytečná. Napětí a kapacita baterie nám totiž již dává informaci o energii, která je v baterii uložena. Tuto energii spočítáme jako

$$W = UQ,$$

kde  $Q$  je kapacita baterie. Čelovka má příkon  $P_0 = P/\eta$ . Příkon také spočítáme  $P_0 = W/t$ , kde  $W$  je energie v bateriích a  $t$  je čas, po který čelovka svítí. Tato dvě vyjádření příkonu dáme do rovnosti a získáme

$$\frac{P}{\eta} = \frac{3UQ}{t}.$$

Úpravou této rovnice dostaneme vztah

$$t = \frac{3UQ\eta}{P} \doteq 2920 \text{ s} \doteq 49 \text{ min}.$$

Baterie nám tedy vydrží asi na 49 min svícení.

### Úloha IV.2 ... zmražený balónek

Balónek o hmotnosti  $m_b = 2,7$  g a objemu  $V_0 = 41$  ml byl napuštěn heliem o stejné teplotě, jakou má okolní vzduch, tedy  $T_0 = 20$  °C. Uvnitř balónku je tlak o  $\Delta p = 2$  kPa vyšší než v okolí. Na jakou teplotu musíme balónek a plyn v něm zchladit, aby se přestal vznášet? Předpokládejte, že po zchlazení bude v balónku atmosférický tlak.

*Vojta mění balónky za inspiraci.*

Nejprve potřebujeme určit hmotnost helia v balónku. Vyjděme ze stavové rovnice

$$pV_0 = \frac{m}{M_{\text{He}}} RT_0 \quad \Rightarrow \quad m = \frac{(p_a + \Delta p)V_0 M_{\text{He}}}{RT_0},$$

kde  $p_a$  značí atmosférický tlak a  $M_{\text{He}}$  je molární hmotnost helia. Nyní označíme  $\rho_v = 1,204 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  hustotu vzduchu při teplotě  $T_0$  a atmosférickém tlaku a z rovnosti vztahové a tíhové síly určíme podmínku, aby se balónek již nevznášel. Podmínku formulujeme nerovnicí

$$V \rho_v g < (m + m_b)g \quad \Rightarrow \quad V < \frac{1}{\rho_v} \left( \frac{(p_a + \Delta p)V_0 M_{\text{He}}}{RT_0} + m_b \right),$$

kde objem  $V$  vyjádříme opět ze stavové rovnice v závislosti na teplotě balónku  $T$  jako

$$p_a V = nRT = \frac{(p_a + \Delta p)V_0 T}{T_0} \Rightarrow V = V_0 \left(1 + \frac{\Delta p}{p_a}\right) \frac{T}{T_0},$$

čož můžeme dosadit do výše odvozené nerovnosti a dostaneme

$$T < \frac{p_a}{\rho_v} \left( \frac{M_{\text{He}}}{R} + \frac{T_0}{p_a + \Delta p} \frac{m_b}{V_0} \right) \doteq -71,5 \text{ } ^\circ\text{C}.$$

Balónek tedy stačí ponořit do kapalného dusíku a po chvíli se přestane vznášet.

### Úloha IV.3 ... uzavírka na silnici

*Všichni to známe – uzavírky na silnicích a nekonečné stání na semaforech. Zelená svítí po dobu 60 s, ale než se stačí všichni rozjet, už je zase červená. Uvažujme 0,5 s reakční dobu řidiče, než se rozjede poté, co se dalo do pohybu auto před ním. O kolik procent by se zvýšil počet aut, která projedou uzavírkou, kdyby se všichni ve frontě rozjeli současně? První auto stojí na úrovni semaforu, vzdálenost předních nárazníků všech aut odhadněme na 5 m a všechna se rozjíždí rovnoměrně zrychleně po dobu 5 s na rychlost  $30 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ , kterou pak pokračují dále do uzavírky.*

*U Jardy na vesnici už třetím rokem kopou kanály.*

Označme si najprv veličiny zo zadania: doba, kedy svieti zelená a uzavírkou sa dá prejsť je  $T = 60 \text{ s}$ , reakčná doba vodičov je  $t_r = 0,5 \text{ s}$ , rýchlosť, na ktorú zrýchľujú pomenujeme klasicky  $v = 8,3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$ , vzdialenosť predných nárazníkov áut je  $d = 5 \text{ m}$  a zrýchlenie dopočítame ako:  $a = \Delta v / \Delta t = 8,3/5 = 1,7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-2}$ .

Úloha sa nás pýta na pomer áut, ktoré prejdú uzavírkou v prípade, kedy idú všetci súčasne a v prípade, kedy vodičom reakcia na rozbehnutie auta pred nimi nejaký čas trvá. Spočítajme počty týchto áut pre obe situácie.

V prípade, kedy sa všetci rozbehnú súčasne vieme, že sa autá môžu hýbať až celých  $T$  sekúnd. Teda prejdú maximálne vzdialenosť

$$s = \frac{1}{2} a 5^2 + (T - 5)v \doteq 479 \text{ m}.$$

Dostávame tak vzdialenosť, z ktorej je ešte možné dôjsť k závore pred červenou. Vzdialenosť „ $n$ “-tého auta od závery dostaneme jednoducho ako

$$d_n = (n - 1)d.$$

Z podmienky

$$d_n \leq s,$$

dostaneme, že posledné auto, ktoré stihne prejsť závorou je v poradí  $n_1 = 96$ .

Prípád s reakčnou dobou vodičov len modifikuje (konkrétne znižuje) čas, ktorý majú autá na pohyb. Množstvo času, ktoré takto  $n$ -tému vodičovi „ubudne“ je

$$t_n = (n - 1)t_r.$$



Dráhu, ktorú prejde  $n$ -té auto vypočítame ako

$$s_n = \frac{1}{2}a5^2 + (T - 5 - t_n)v.$$

Pričom limitným prípadom na prejdenie uzávierky je teraz:  $s_n \geq d_n$ . Odkiaľ pre  $n$  dostávame

$$n = \frac{\frac{1}{2}a5^2 + (T - 5)v}{d + vt_r} + 1.$$

To pre dané hodnoty znamená, že ešte  $n_2 = 53$  áut uzávierkou prejde. Hľadaný pomer je  $n_1/n_2 \doteq 1,8$ . Teda keby sa všetci vodiči rozbegli súčasne, uzávierkou prejde o zhruba 80 % viac áut.

#### Úloha IV.4 ... vystřelený ďalekohľed

Máme hvězdářský (Keplerův) ďalekohľed, který chceme vyslat do vesmíru. Nejdřív si ho však vyzkoušíme na Zemi, kde naměříme zvětšení  $Z$ . Jak se musí změnit vzájemná vzdálenost čoček, aby měl stejné zvětšení i ve vesmíru? Čocky mají index lomu  $n$ .

*Karla sem tam chytají ty astromyšlenky.*

Keplerov ďalekohľad je tvorený dvoma spojňými šošovkami, pričom obrazové ohnisko prvej a predmetové ohnisko druhej spľývajú. Vzdialenosť šošoviek je teda  $f_1 + f_2$ . Keď ďalekohľad premiestníme do iného optického prostredia, zmenia sa ohniskové vzdialenosti oboch šošoviek. Aby sme dostali ostrý obraz, musí obrazové ohnisko prvej a predmetové ohnisko druhej šošovky opäť spľývať, čo znamená, že vzdialenosť šošoviek musí byť  $f'_1 + f'_2$ , kde  $f'_1$  a  $f'_2$  sú ohniskové vzdialenosti prvej, resp. druhej šošovky vo vákuu. Ohniskové vzdialenosti vo vzduchu a vákuu prvej šošovky môžeme vyjadriť ako

$$\frac{1}{f_1} = \left(\frac{n}{n_1} - 1\right) \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right),$$

$$\frac{1}{f'_1} = \left(\frac{n}{n_0} - 1\right) \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right).$$

Predelením prvej rovnice druhou dostávame pomer

$$\frac{f'_1}{f_1} = \frac{\left(\frac{n}{n_1} - 1\right) \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right)}{\left(\frac{n}{n_0} - 1\right) \left(\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2}\right)},$$

$$\frac{f'_1}{f_1} = \frac{n_0(n - n_1)}{n_1(n - n_0)}.$$

Tento pomer použijeme na vyjadrenie  $f'_1$  pomocou  $f_1$  a analogicky  $f'_2$  pomocou  $f_2$

$$f'_1 = f_1 \cdot \frac{n_0(n - n_1)}{n_1(n - n_0)},$$

$$f'_2 = f_2 \cdot \frac{n_0(n - n_1)}{n_1(n - n_0)}.$$

Zváženie keplerovho ďalekohľadu  $Z$  vo vzduchu vyjadríme ako

$$Z = -\frac{f_2}{f_1}.$$

Zváženie ďalekohľadu  $Z'$  vo vákuu je

$$Z' = -\frac{f'_2}{f'_1} = -\frac{f_2 \cdot \frac{n_0(n-n_1)}{n_1(n-n_0)}}{f_1 \cdot \frac{n_0(n-n_1)}{n_1(n-n_0)}} = -\frac{f_2}{f_1}.$$

Zváženie sa teda nemení. To, koľkokrát sa zmení vzájomná vzdialenosť šošoviek, vyjadríme pomerom  $p$ , ktorý počítame ako

$$p = \frac{f'_1 + f'_2}{f_1 + f_2} = \frac{f_1 \cdot \frac{n_0(n-n_1)}{n_1(n-n_0)} + f_2 \cdot \frac{n_0(n-n_1)}{n_1(n-n_0)}}{f_1 + f_2} = \frac{n_0(n-n_1)}{n_1(n-n_0)}.$$

Je zrejmé, že vzdialenosť šošoviek sa musí zmenšiť.

Pre predstavu uvažujme hodnoty  $n_0 = 1$ , index lomu skla  $n = 1,5$  a  $n_1 = 1,0003$  je index lomu vzduchu. Potom je hodnota pomeru asi  $p \doteq 0,9991$ .

## Úloha IV.5 . . . vesmírna návšteva

*Dva mimozemšťané bydlí každý na své kosmické stanici. Stanice se nacházejí ve volném prostoru a vzdálenost mezi nimi je  $L$ . Když chce jeden mimozemšťan navštívit druhého, musí nasednout do své nerelativistické rakety a doletět k sousedovi. Jaký nejkratší čas může mimozemšťan strávit na cestě tam i zpět? Hmotnost rakety s palivem je  $m$ , bez paliva  $m_0$ . Výtoková rychlost spalin je  $u$ , tok paliva je libovolný. Jeho soused mu žádné palivo načerpat nedovolí (sám má málo).*

*Jarda potřeboval, aby si nikdo nevšiml, že na chvíli zmizel z porady.*

Nejprve se zamysleme nad prováděnou optimalizací. Aby mimozemšťan strávil na cestě co nejméně času, je potřeba, aby letěl celou cestu co nejvyšší rychlostí. Nejvýhodnější tedy bude, když se již na začátku velmi rychle urychlí na nějakou požadovanou rychlost  $v_1$  a nebude tedy ztrácet čas zrychlováním. Objemový tok paliva není omezen, můžeme si tedy představit, že naráz odhodí část svého paliva rychlostí  $u$ . Analogicky nebude ztrácet čas brzděním, takže zastaví okamžitě. Podobně po cestě zpět.

K vyřešení úlohy použijeme známou Ciolkovského rovnici ve tvaru

$$v_1 = u \ln \frac{m}{m_1},$$

kde  $v_1$  je rychlost, kterou přeletí vzdálenost ke svému sousedovi, a  $m_1$  je hmotnost, která zbyde jeho raketě po zrychlování.

Abychom zastavili u svého kamaráda, potřebuje zpomalit na nulu, takže musí platit

$$v_1 = u \ln \frac{m_1}{m_2},$$

odkud  $m_1/m_2 = m/m_1$ .

Pro cestu zpět analogicky platí  $m_2/m_3 = m_3/m_0$ .

Máme dvě rovnice pro tři neznámé, jako zbývající neznámou zvolíme  $m_2$  (hmotnost rakety, se kterou doletí ke svému kamarádovi). Vyjádříme čas cesty k sousedovi v závislosti na  $m_2$  jako

$$t_1 = \frac{L}{v_1} = \frac{L}{u \ln \frac{m_1}{m_2}} = \frac{L}{u \ln \frac{\sqrt{mm_2}}{m_2}} = \frac{2L}{u \ln \frac{m}{m_2}}.$$

Podobně

$$t_2 = \frac{L}{v_2} = \frac{L}{u \ln \frac{m_2}{m_3}} = \frac{L}{u \ln \frac{m_2}{\sqrt{mm_2}}} = \frac{2L}{u \ln \frac{m_2}{m_0}}.$$

Celkový čas je

$$T = t_1 + t_2 = \frac{2L}{u} \left( \frac{1}{\ln \frac{m_2}{m_0}} + \frac{1}{\ln \frac{m}{m_2}} \right) = \frac{2L}{u} \left( \frac{\ln \frac{m}{m_0}}{\ln \frac{m_2}{m_0} \ln \frac{m}{m_2}} \right).$$

Ted již jen zderivujeme podle  $m_2$  a výslednou funkci položíme rovnu nule, tedy

$$\frac{dT}{dm_2} = -\frac{2L}{u} \ln \frac{m}{m_0} \frac{\left( \frac{1}{m_2} \ln \frac{m}{m_2} - \ln \frac{m_2}{m_0} \frac{1}{m_2} \right)}{\left( \ln \frac{m_2}{m_0} \ln \frac{m}{m_2} \right)^2} = 0,$$

odkud

$$m_2 = \sqrt{mm_0}.$$

Je zřejmé, že se v tomto bodě jedná o minimum dané funkce, protože kdyby  $m_2 \rightarrow m$ , tak by cesta k sousedovi trvala velmi dlouho, naopak kdyby  $m_2 \rightarrow m_0$ , tak by strávil velmi dlouho na cestě zpět.

Dosazením do derivované funkce dostáváme

$$T_{\min} = \frac{2L}{u} \left( \frac{\ln \frac{m}{m_0}}{\ln \sqrt{\frac{m}{m_0}} \ln \sqrt{\frac{m}{m_0}}} \right) = \frac{8L}{u} \frac{1}{\ln \frac{m}{m_0}},$$

což je námi hledaný výsledek.

## Úloha IV.P ... lodička si pluje

*Diskutujte, jaké fyzikální jevy ovlivňují rychlost plavby lodi a ponorky. Jaké odporové síly na ně působí? Jakou nejvyšší rychlostí loď nebo ponorka může plout?*

*Jindra pantoval na řece Cam.*

### Úvod

Při plavbě lode/ponorky sa dejú dve základné veci. Motory, pomocou skrutiek produkujú ťahovú silu, ktorá zrýchľuje loď dopredu a súčasne prostredie (najmä voda) pôsobí odporovou silou proti tomuto pohybu. Maximálna možná rýchlosť (nazývaná aj ako medzná) sa dosiahne vtedy, keď sa obidve sily vyrovnajú. Poďme sa teraz bližšie pozrieť na odporovú silu tekutín, ako vzniká a na aké podtypy sa dá ďalej deliť.

### Odporové sily

Odporová sila tekutín, na rozdiel od klasického trenia závisí od veľkosti rýchlosti vzájomného pohybu tekutiny a telesa, prípadne dvoch vrstiev tekutiny. Pri nízkych rýchlostiach nastáva laminárne prúdenie, pri ktorom odporová sila závisí lineárne na rýchlosti. Po zvýšení rýchlosti nad určitú kritickú hodnotu vzniká prúdenie turbulentné, pre ktoré je charakteristická závislosť odporovej sily od druhej mocniny rýchlosti. To, či ide o laminárne alebo turbulentné prúdenie môžeme zistiť pomocou Reynoldsovho čísla  $Re$ .

$$Re = \frac{\rho v L}{\eta}$$

kde  $\rho$  je hustota kvapaliny,  $v$  vzájomná rýchlosť kvapaliny a daného telesa,  $L$  typický rozmer a  $\eta$  dynamická viskozita kvapaliny. Ak bude  $Re < Re_K$ , pôjde o laminárne prúdenie, ak  $Re > Re_K$ , tak o turbulentné. Hodnotu  $Re_K$  určujeme pre dané geometrické usporiadanie väčšinou experimentálne.

Pri laminárnom prúdení sa jednotlivé vrstvy kvapaliny nemiešajú, naopak pri turbulentnom prúdení sa jednotlivé vrstvy premiešavajú za vzniku vírov. Laminárne prúdenie sa dá od turbulentného odlíšiť aj pohľadom, nakoľko laminárne prúdenie sa javí ako ustálené (tečúca kvapalina vyzerá, ako keby bola „odfotená“) a naopak turbulentné prúdenie mení svoj tvar s časom. Zo skúsenosti môžeme považovať plavbu lode aj ponorky za turbulentné prúdenie.

### Delenie odporových síl

Odporové sily prostredia môžeme podľa vzniku rozdeliť do dvoch hlavných kategórií, a to tlakový (tvarový) odpor a viskózný odpor.

Tvarový odpor súvisí s tvarom telesa, s rozrážaním častíc tekutiny a menení ich smeru pohybu.

Viskózný odpor vzniká trením kvapaliny o stenu telesa. Pri kontakte s kvapalinou na povrchu telesa vznikne infinitezimálne tenká vrstva tejto kvapaliny, ktorá sa z hľadiska na teleso nebude hýbať (túto vrstvu bude teleso „ťahat“ so sebou) a bude sa trieť o ostatné, pohybujúce sa, vrstvy. Pre pomalé lode to tvorí asi 80 % celkového odporu, pre rýchle asi 50 %.

### Výpočet odporovej sily

Celková odporová sila bude súčtom vyššie uvedených efektov. Napríklad pri obtakaní gule zhruba 90 % celkovej odporovej sily vzniká v dôsledku tlakového odporu, naopak pri krídle je to len zhruba 10 %. Odporovú silu  $F_D$  môžeme vypočítať nasledovne (za predpokladu ponorenia celého telesa v kvapaline):

$$F_D = \frac{1}{2} \rho v^2 C_D S.$$

Kde  $\rho$  je hustota danej tekutiny,  $v$  vzájomná relatívna rýchlosť prostredia a telesa,  $S$  účinná plocha (kolmá k smeru pohybu) a  $C_D$  je súčiniteľ odporu, ktorý závisí na geometrickom usporiadaní a určuje sa experimentálne (pre najbežnejšie tvary sa dá nájsť aj na wikipédii).

**Ďalšie delenie tlakového odporu** K veľkosti tlakového odporu prispieva viacero efektov, na ktoré sa bližšie pozrieme v nasledujúcej časti. Nižšie spomenuté efekty môžu v konečnom dôsledku ovplyvniť napríklad aj veľkosť viskózneho odporu, ale príčinou týchto zmien je vždy geometria daného telesa a preto sa tieto efekty zaraďujú ku tvarovému odporu.

**Odpor tvorením vln** Je typ odporu prostredia, ktorý ovplyvňuje len povrchové plavidlá a prezentuje energiu, ktorá je potrebná na odsunutie vody od trupu lode. Táto energia sa spotrebuje na vytvorenie vlny (ktorá ju aj odnáša od lode). Najsilnejšie vlny produkuje predná a zadná časť lode a tieto vlny sa delia na rozbiehavé (divergentné) a priečne.

Priečne vlny tvoria väčšinu tejto odporovej sily, keďže ovplyvňujú, aká plocha trupu je v kontakte s vodou (viskózna časť odporu). Vlnová dĺžka priečných vln je úmerná rýchlosti lode a pri istej rýchlosti (tzv. hull speed) bude vlnová dĺžka priečných vln rovná dĺžke lode (rôzne lode môžu mať rôzne hodnoty hull speed). V takomto prípade bude zmáčaná plocha trupu maximálna, čo dáva maximálnu hodnotu viskózneho odporu (prvé maximum odporovej sily). Ak by sme loď ešte zrýchlili (na tzv. hump speed), tak sa vlnová dĺžka priečných vln zvýši na 1,5násobok dĺžky trupu lode. To bude mať za následok pokles hladiny vody pri korme a naklonenie celej lode, čo vytvorí dojem, že loď ide neustále "hore kopcom". To vo výsledku zvyšuje energiu potrebnú na udržanie danej rýchlosti (druhé maximum odporovej sily). Pri ďalšom zvyšovaní rýchlosti lode sa bude odpor tvorením vln mierne zmenšovať (je potrebné ale prekonať predchádzajúce bariéry).

Rozbiehavé vlny zvierajú spolu uhol  $39^\circ$  (nezávisle od rýchlosti lode) a tvoria vonkajšie vlny v brázde za lodou.

**Odpor tvorením vztlaku** Zatiaľ čo odpor tvorením vln pôsobí silou proti pohybu, tak odpor tvorením vztlaku má aj nejakú zložku sily kolmú na pohyb, ktorú vieme využiť, hlavne v letectve. Tento odpor vzniká dôsledkom Newtonovho zákona akcie a reakcie, keď trup lode/krídlo mení smer pohybu častíc tekutiny smerom dole, čím naň pôsobí reakčná sila smerom nahor (dynamický vztlak).

**Odpor vznikajúci prekonaním sonickej bariéry** Pri prekročení rýchlosti zvuku v danom prostredí vznikajú rázové vlny, ktoré sú príčinou ďalšej straty energie. Veľkosť brzdnnej sily v tomto prípade nezávisí od viskozity danej kvapaliny. Nakoľko lode ani ponorky nedokážu ísť dostatočne rýchlo (rýchlosť zvuku vo vode je cca  $1500\text{m}\cdot\text{s}^{-1}$ ) tak tento efekt nebudeme ďalej uvažovať.

**Výkon odporových síl a maximálna rýchlosť lode** Pri lodiach sa nezvykne udávať ťahová sila motorov ale ich výkon. Z tohto dôvodu by bolo výhodné, keby vieme stratu energiu plavidla popísať stratovým výkonom odporových síl. Potom by medzná rýchlosť bola taká, pri ktorej sa vyrovná výkon motorov lode so stratovým výkonom odporových síl. Stratový výkon odporových síl  $P_D$  dostaneme ak prenásobíme odporovú silu  $F_D$  rýchlosťou  $v$ .

$$P_D = F_D v = \frac{1}{2} \rho v^3 C_D S$$

V rovnováhe bude výkon plavidla  $P = P_D$  a teda pre maximálnu rýchlosť  $v_{\max}$  dostaneme:

$$v_{\max} = \sqrt[3]{\frac{2P}{\rho C_D S}},$$

tento popis je zvlášť výhodný, pokiaľ plavidlo neprodukuje vlny (ponorená ponorka), maximálnu rýchlosť hladinovej lode nemôžeme týmto vzťahom určiť, pretože nepočíta s odporovou silou vzniknutých vln.

**Započítanie odporu vln alebo Crouchova konštanty** George Crouch bol americký inžinier ktorý žil na prelome 19. a 20. storočia a preslávil sa navrhovaním a stavbou rýchlostných lodí, ktoré viackrát zvíťazili v Gold Cupe. Jeho vzťah pre maximálnu rýchlosť lode vyzerať nasledovne:

$$v_{\max} = C \sqrt{\frac{P}{M}},$$

kde  $C$  je Crouchova konštanty (závislá na type lodí),  $P$  je výkon lode a  $M$  jej hmotnosť. Najväčšou nevýhodou tohto vzťahu je fakt, že pán Crouch nepoznal metrický systém a tak zadával výkon  $P$  v konských silách ( $1 \text{ kW} = 1,34 \text{ hp}$ ), hmotnosť  $M$  v librách ( $1 \text{ kg} = 2,2 \text{ lbs}$ ) a rýchlosť  $v_{\max}$  vychádzala v míľach za hodinu ( $1 \text{ mph} = 1,61 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ ). V tabuľke 7 sú uvedené hodnoty Crouchových konštant pre niektoré typy lodí.

Tab. 7: Crouchove konštanty pre rôzne typy lodí

Typ lode	Crouchova konštanty
krížnik, priemerná „runaboat“, výletné lode	150
ľahký vysokorýchlostný krížnik, vysokorýchlostné runaboaty	190
pretekárske lode	210
hydroplány	220
pretekárske katamarány a „sea sledy“	230

### Minimalizácia odporových síl

**Pre lode** Čím vhodnejší tvar bude loď mať, tým väčšiu bude mať Crouchovu konštantu. Tu sa už cesta delí a pre rôzne využitia lodí sa robia rôzne úpravy.

Pri veľkých a pomalých lodiach s veľkým ponorom sa snažíme minimalizovať najmä odpor tvorením vln, nakoľko tvarový odpor by sme vedeli zmenšiť len ponorom lode, čo by nepriaznivo vplývalo na množstvo nákladu, ktorý dokáže uniesť.

Za tímto účelom sa väčšinou do prednej časti lode pridáva valcovitý výbežok, ktorý sa nachádza pod hladinou (angl. bulbous bow). Pri vhodnej vzdialenosti od hlavného trupu lode dokáže tento výbežok vytvoriť priečnu vlnu, ktorá následne deštruktívnou interferenciou vyruší priečnu vlnu, ktorá vznikne na proxe lode, čím sa zníži odpor.

Druhým spôsobom ako zmenšiť odpor je minimalizácia častí lode pod vodou (minimalizácia viskózneho odporu). Tento spôsob sa používa hlavne pri menších a rýchlych lodiach. K dosiahnutiu tohto cieľa sa využíva dynamický vztlak (vzniká pri vhodnom tvare trupu lode), ktorý pomáha statickému vztlaku (Archimedov zákon) v prekonávaní tiažovej sily lode. Čím vyššia bude rýchlosť lode, tým väčší bude a mať dynamický vztlak, čím sa zmenší potrebný statický vztlak a loď sa môže viac vynoriť (čím sa zmenší plocha trupu, ktorá bude brzdená vodou). V praxi sa to dá všimnúť pri malých motorových člnoch, ktoré pri vysokých rýchlostiach viac "letia" po hladine ako plávajú.

Najrýchlejšia loď by teda mala mať dobrý dynamický vztlak (zahrnuté v Crouchovej konštante), nízku hmotnosť a súčasne vysoký výkon (hmotnosť motoru s jeho výkonom súvisí, budeme teda hľadať kompromis).

**Pre ponorky** Pri ponorenej ponorky sa budeme snažiť minimalizovať súčiniteľ odporu  $C_D$ . Po krátkom hľadaní nájdeme v tabuľkách tvar podobný dažďovej kvapke, ktorý má  $C_D = 0,04$ . Pri pohľade na moderné vojenské ponorky si môžeme všimnúť, že majú skutočne tvar predĺženej dažďovej kvapky. Týmto sme optimalizovali tvar ponorky, druhým dôležitým faktorom je veľkosť. Budeme sa snažiť minimalizovať účinnú plochu ponorky na čo najmenšiu. Tretím dôležitým faktorom je výkon, čím vyšší výkon bude ponorka mať, tým rýchlejšie pôjde (tu opäť budeme musieť hľadať vhodný kompromis, nakoľko výkon motora súvisí aj s jeho veľkosťou).

### Konkrétne odhady maximálnych rýchlostí

**Pretekárska loď** Vyberieme si vhodný tvar trupu lode (napríklad sea sled) a budeme uvažovať hodnotu Crouchovej konštanty  $C = 230$ . Môžeme predpokladať, že hmotnosť trupu lode s rastúcim jedným rozmerom bude rásť lineárne, čo pri zachovaní tvaru (raste do všetkých 3 rozmerov) bude dávať kubickú závislosť hmotnosti. Takže dáva zmysel zvoliť čo najmenšiu, jednomiestnu loď. Loď musí niekto riadiť, uvažujme že to bude človek s hmotnosťou 80 kg. Dôležitým faktorom bude výkon motoru, budeme hľadať ten najlepší v pomere výkon/hmotnosť. Samozrejme, navrhnutá loď bude musieť mať vhodný vztlak, aby potrebné komponenty udržala.

Pre jednoduchosť výpočtov uvažujme, že má trup lode tvar kvádra (na ktorý sa sea sled s menšími rozdielmi skutočne podobá), ďalej predpokladajme, že plášť lode bude hrubý 0,5 cm, a že bude z nejakého ľahkého a odolného materiálu, napríklad hliníka. Pôvodné rozmery sea sledu sú: dĺžka 838 cm, šírka 274 cm a hĺbka ponorenej časti 30 cm (celkovú výšku trupu zvolíme 50 cm), čo dáva objem ponorenej časti na hodnotu  $6,9 \text{ m}^3$ . Keďže sea sled nemá presne tvar kvádra, odhadneme, že ponorený objem skutočného tvaru lode bude 60 % z tejto hodnoty, čiže  $V_p =$

$= 4,1 \text{ m}^3$ . V pokoji sa bude musieť tiažová sila vyrovnat vztlakovej, čím určíme maximálnu hmotnosť lode  $m_{\max}$ , čo dáva:

$$m_{\max}g = F_g = F_{vz} = V_p \rho g.$$

Kde hustotu vody budeme uvažovať  $\rho = 1000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$  a rovnicu predelíme tiažovým zrýchlením  $g$ . Po dosadení dostaneme:  $m_{\max} = 4100 \text{ kg}$ .

Odhadnime teraz hmotnosť plášta lode, ktorý bude hrubý 0,5 cm. Najskôr spočítame jeho objem, a to tak, že od objemu kvádra s rozmermi uvedenými v predchádzajúcom odstavci odrátame kváder s rozmermi o hrúbku plášta menšími (teda 837 cm na dĺžku, 273 cm na šírku a 49,5 cm na výšku). Objem plášta teda bude  $V_{\text{pl}} = 0,17 \text{ m}^3$ . Hustota hliníka je  $\rho_{\text{Al}} = 2700 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . To predstavuje hmotnosť  $m_{\text{Al}} = \rho_{\text{Al}} V_{\text{pl}} = 460 \text{ kg}$ .

Trup lode bude treba ale nejak vystužiť, rovnako bude treba pridať nejakú batériu na štartovanie, elektroniku, ovládanie, palivovú nádrž a ďalšie pomocné systémy. Uvažujme teda, že všetky tieto veci spolu nebudú vážiť viac ako 1000 kg.

Na záver už len stačí vybrať vhodný motor. Perfektným kandidátom je príviesny motor s výkonom takmer 450 kW a hmotnosťou 570 kg. Po odrátaní hmotnosti človeka, trupu a ostatných systémov zistíme, že loď môžeme ešte zaťažiť hmotnosťou 2500 kg, čo predstavuje 4 takéto motory s celkovým výkonom 1800 kW, ktoré budú spolu vážiť 2280 kg.

Už vieme všetko potrebné na odhadnutie maximálnej rýchlosti. Celková hmotnosť lode bude  $3820 \text{ kg} = 8420 \text{ lb}$  a jej výkon bude  $1800 \text{ kW} = 2400 \text{ hp}$ . Po dosadení do Crouchovo vzťahu dostaneme:  $v_{\max} = 123 \text{ mph} = 200 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ . Tento rýchlostný rekord sa skutočne podarilo dosiahnuť Garovi Woodovi v roku 1932. Absolútny rekord rýchlosti na vode aktuálne drží Ken Warby, ktorý dosiahol rýchlosť takmer  $560 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$  na lodi s prúdovým pohonom (nutné podotknúť, že úmrtnosť pilotov vysokorýchlostných lodí pri snahe prekonať tento rekord činí asi 60 %).

**Pretekárska ponorka** V tomto prípade bude dôležitý priemer najširšej časti ponorky, ktorý musíme zvoliť tak aby sa do nej zmestil človek. Uvažujme že priemerná výška človeka je 180 cm a že človek bude pri riadení ponorky sedieť. V takomto prípade by najväčší rozmer ponorky mohol byť 2 m, čo by malo postačovať na pohodlné usadenie človeka do prostrednej časti (približná dĺžka potom bude 6 m).

Ako pohon ponorky je výhodné použiť elektromotor s dostatočnou zásobou batérií, keďže nemá prístup na vzduch. Komerčne sa dá zohnať motor na jednosmerný prúd s výkonom od 20 kW do 2000 kW. Výrobca udáva rozmery takéhoto motora na max. 60 cm, čo nám vyhovuje, lebo ho zmestíme do ponorky. Stačí nám už len odhadnúť, koľko batérií potrebujeme a akú energiu do nich vieme uložiť, na základe čoho vyberieme výkon motoru (tak, aby sa ponorka dokázala hýbať dlhšie ako pár minút). Kandidát na batériu má od výrobcu uvedenú kapacitu 1,3 kWh a rozmery (26 × 17 × 23) cm (objem jednej takejto batérie je cca 10 200 cm<sup>3</sup>).

Odhadnime teraz objem ponorky. Kvapkovitý tvar s priemerom 2 m a dĺžkou 6 m aproximujeme valcom s priemerom 1,5 m a dĺžkou 5 m, čo predstavuje



objem přibližně  $8,8 \text{ m}^3$ . Předpokládáme, že člověk na pohodlné sedení potřebuje kváder s výškou 2 m a podstavou širokou 60 cm a dlouhou 70 cm, což dá objem  $0,84 \text{ m}^3$ . Motor má maximální rozměr 60 cm, jeho maximální objem můžeme preto aproximovat kockou s touto hranou, které objem je  $0,216 \text{ m}^3$ . Okrem toho potrebujeme ponorku vybavit aj nejakými pomocnými systémami (kormidlo, komory na potápanie/vynáranie, podpora života, počítač, chladienie. . .), uvažujme, že všetky tieto prístroje nezaberú väčší objem ako  $2 \text{ m}^3$ . Po odrátaní vyššie uvedených vecí z objemu ponorky, nám zostane objem  $5,7 \text{ m}^3$  na batérie, čomu zodpovedá 558 kusov vyššie uvedených batérií. Avšak, nie vždy by sme vedeli batérie do tohto objemu naskladat presne vedľa seba, rovnako ako aj ponorka má zadnú časť pomerne úzku, preto odhadneme, že 20 % z tohto počtu sa do ponorky nezmestí, čím nám zostane 446 kusov bateriek s celkovou kapacitou cca 580 kWh.

Ďalej uvažujme, že 10 % z uloženej energie spotrebujú pomocné systémy ponorky, teda motor bude môcť využiť 522 kWh. Ak zvolíme výkon motora na 1 000 kW, tak sa ponorka bude môcť plaviť polhodinu, čo by malo stačiť na otestovanie jej rýchlostných vlastností. Predpokládame, že motor má účinnosť 90 %, čiže efektívny výkon bude 900 kW. Účinný prierez spočítame pomocou známeho polomeru nasledovne:  $S = \pi d^2/4$ , kde  $d$  je priemer najširšej časti. Po dosadení  $S = 3,14 \text{ m}^2$ . Budeme uvažovať testovanie v sladkej vode s hustotou  $1\,000 \text{ kg}\cdot\text{m}^{-3}$ . Už poznáme všetky potrebné údaje na odhadnutie medznej rýchlosti, po dosadení:  $v_{\max} = 24,3 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1} = 87,5 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ . Pre porovnanie rýchlostný rekord ponorky pod vodou drží Sovietska ponorka K-222 s maximálnou dosiahnutou rýchlosťou  $83 \text{ km}\cdot\text{h}^{-1}$ , takže nami aproximovaný popis funguje skutočne dobre.

### Pár slov na záver

Je nutné podotknúť, že vyššie odhadované modely lodí sú naozaj len hrubé a orientačné, nakoľko sme neuvažovali viacero faktorov, takže to rozhodne neskúšajte doma overiť experimentálne.

### Zdroje

- rozmery pôvodného sea sledu: <https://www.soundingonline.com/boats/hickman-sea-sled>
- výber prívesného motoru: <https://www.mercurymarine.com/en-gb/europe/engines/outboard/verado/verado-600hp/>
- rýchlostný rekord na vode: [https://en.wikipedia.org/wiki/Water\\_speed\\_record](https://en.wikipedia.org/wiki/Water_speed_record)
- k výberu elektromotoru: <https://www.menzel-motors.com/dc-motors>
- k výberu batérie: <https://lionenergy.com/products/lion-safari-ut-1300>
- najrýchlejšia ponorka: [https://en.wikipedia.org/wiki/Underwater\\_speed\\_record](https://en.wikipedia.org/wiki/Underwater_speed_record)

### Úloha V.1 . . . zamáčklý flažolet

*Vojta hraje na violoncello. Na strunu naladěnou na frekvenci  $f$  zlehka přiloží prst do vzdálenosti  $1/n$  její délky od hlavy nástroje a rozezná ji, přičemž slyší tón o zá-*

kladní frekvenci  $f_1$ . Následně strunu na stejném místě úplně přimáčkne ke hmatníku a rozezní ji znovu. Tentokrát nástroj vydává tón o základní frekvenci  $f_2$ . Určete poměr frekvencí  $f_1/f_2$  v závislosti na přirozeném čísle  $n$ .

*Vojta vzpomíná na cello.*

Vlnová délka zvukové vlny, jíž struna vyluzuje, je v základním stavu rovná dvojnásobku délky struny  $l$ . Je proto možné psát

$$f = \frac{v}{2l},$$

kde  $v$  je rychlost šíření vlnění ve struně. Přiložením prstu na strunu odfiltrujeme veškeré kmitání struny s vlnovou délkou vyšší než  $2l/n$ , uslyšíme tedy tón odpovídající  $n$ -té harmonické frekvenci struny, pro který platí

$$f_1 = \frac{vn}{2l} = nf.$$

Když strunu přimáčkne, snížíme efektivně její délku na  $(1 - 1/n)l$ , z čehož můžeme pozorovat, že frekvence vyluzovaného tónu splňuje

$$f_2 = \frac{v}{2l(1 - 1/n)} = \frac{n}{n - 1}f.$$

Nyní už tedy lze vyjádřit hledaný poměr jako

$$\frac{f_1}{f_2} = n - 1,$$

kde pro  $n = 1$  intuitivně doplníme hodnotu poměru jako 1. Chytíme-li tedy strunu např. v  $1/2$ , budou vyprodukované tóny stejné, v  $1/3$  se budou lišit o oktávu a v  $1/4$  dostaneme kvintu přes oktávu neboli duodecimu.

## Úloha V.2 ... dopravní pás

Na pohybující se vodorovný dopravní pás každou sekundu svísele dopadá materiál o hmotnosti  $\mu$ , který na jeho konci padá pryč. Na pás působí odporová síla  $F_{\text{odp}} = kv$ , která je přímo úměrná rychlosti pásu  $v$  přes konstantu  $k$ . Jak velkou rychlostí se bude pás pohybovat, pokud

- na něj působí konstantní pohonná síla  $F$ ?
- je poháněn motorem s konstantním výkonem  $P$ ?

*Karel doufal, že to půjde vyřešit.*

Pás je brzděn nejen odporovou silou, ale také dopadajícím materiálem, který urychluje. Je tomu tak proto, že se za jednotku času mění jeho hybnost. Jelikož každou sekundu z pásu odpadne materiál o hmotnosti  $\mu$ , a to rychlostí pásu  $v$ , musí se také každou sekundu rychlost materiálu o hmotnosti  $\mu$  zvýšit z nuly na  $v$ . Síla je následně změnou hybnosti za daný čas (tedy jednu sekundu), z čehož dostáváme  $F_{\text{mat}} = \mu v$ . Celková síla potřebná k pohonu pásu je proto  $F = F_{\text{odp}} + F_{\text{mat}}$ . Po dosazení známých údajů dostáváme

$$F = \mu v + kv,$$

z čehož po úpravě získáme rychlost

$$v = \frac{F}{K + \mu}.$$

Pokud je pás poháněn konstantním výkonem  $P$ , pak za čas  $t$  vykoná pás práci  $W$ . Práce  $W$  je opět součtem práce, která je potřebná k urychlení materiálu a té, již je třeba za účelem překonání brzdné síly. Za čas  $t$  je dopadajícímu materiálu na zvýšení kinetické energie dodána práce

$$W_k = \frac{1}{2} \mu v^2 t,$$

a na překonání odporových sil je potom potřeba

$$W_{\text{odp}} = F_{\text{odp}} s = F_{\text{odp}} v t = k v^2 t,$$

kde  $s = vt$  je dráha, již za čas  $t$  pás urazí.

Sečtením obou předchozích rovnic a pokrácením času  $t$  dostáváme výslednou rychlost

$$v = \sqrt{\frac{P}{\frac{\mu}{2} + k}}.$$

Pro druhou část naší úlohy by nás mohlo napadanou vyjádřit celkový výkon jako  $P = P_{\text{mat}} + P_{\text{odp}} = (F_{\text{mat}} + F_{\text{odp}})v$ , což by nás ale dovedlo k jinému výsledku, než k tomu, který jsme dostali pomocí našich úvah o energiích. Neplatí totiž  $P_{\text{mat}} = F_{\text{mat}}v$ , protože je materiál urychlován postupně a jeho části mají odlišnou rychlost.

### Úloha V.3 ... čekáme na výtah

Karel jezdí výtahem v budově, která má přízemí a nad ním dalších 12 pater, přičemž výška jednoho patra je  $h = 3,0$  m. Uvažujte, že výtah během své jízdy polovinu doby zrychluje a druhou polovinu doby zpomaluje konstantním zrychlením  $a = 1,0 \text{ m} \cdot \text{s}^{-2}$ . S 50% pravděpodobností výtah stojí v přízemí a zbytek pravděpodobností je rovnoměrně rozdělený mezi ostatní patra. Jaká je očekávaná doba čekání na výtah v jednotlivých patrech budovy? Zanedbejte čas otevírání dveří.

*Bonus* Mějme 2 výtahy opět v dvanáctipatrové budově. Jeden výtah bude odvozlávaný do přízemí. Do jakého patra bychom měli posílat druhý, abychom minimalizovali průměrnou dobu čekání? Předpokládejte analogicky, že polovina jízd bude začínat v přízemí a druhá polovina s rovnoměrnou pravděpodobností v libovolném z dalších pater.

*Karel čekává často na výtah.*

Začněme se základní teorií, která je velice jednoduchá, protože jde pouze zrychlený pohyb. V indexech  $i$  a  $j$  budeme značit, že výtah pojedje z  $i$ -tého do  $j$ -tého patra. Polovinu rozdílu výšek mezi patry  $h_{i,j}$  ujede výtah za polovinu celkové doby  $t_{i,j}$ , což můžeme zapsat jako

$$\frac{h_{i,j}}{2} = \frac{1}{2} a \left( \frac{t_{i,j}}{2} \right)^2,$$

z této rovnice vyjádříme, jak dlouho výtah jede

$$4h_{i,j} = at_{i,j}^2 \quad \Rightarrow \quad t_{i,j} = 2\sqrt{\frac{h_{i,j}}{a}}.$$

Rozdíl výšek je násobek absolutního rozdílu pater, tedy  $h_{i,j} = h|j - i|$ . Rovnici můžeme upravit na tvar

$$t_{i,j} = 2\sqrt{\frac{h}{a}}\sqrt{|j - i|}.$$

Pokud vynásobíme tuto dobu pravděpodobností  $p_i$ , že výtah bude v  $i$ -tém patře, když na něj čekáme v  $j$ -tém, a všechny pravděpodobnosti sečteme, dostaneme celkovou očekávanou dobu čekání na výtah v  $j$ -tém patře

$$T_j = \sum_{i=0}^{12} p_i \sqrt{\frac{h}{a}} \sqrt{|j - i|}.$$

V zadání jsou uvedeny pravděpodobnosti, které vychází z toho, že lidé jezdí rovnoměrně do všech pater a že se do budovy a z ní dostanou pouze v přízemí.<sup>29</sup> Pravděpodobnosti jsou  $p_0 = 1/2$  a  $p_i = 1/24$  pro každé  $i \in \{1, 2, \dots, 12\}$ . Úpravou pak dostaneme

$$T_j = \sqrt{\frac{h}{a}}j + \frac{1}{12}\sqrt{\frac{h}{a}}\sum_{i=1}^{12}\sqrt{|j - i|}.$$

Toto je vlastně požadovaný výsledek s tím, že jej musíme vyčíslit. Můžeme buď samotnou sumu zadat, aby nám ji spočítal program, např. Wolfram Mathematica<sup>30</sup>, nebo můžeme propočítat jednotlivé části např. v Excelu či Google Tabulkách. My jsme se v rámci vzorového řešení rozhodli využít Google Tabulky a postup zveřejňujeme pod odkazem v poznámce.<sup>31</sup> Na prvním listu jsou vypočítané výsledky základní úlohy. V oblasti C5:O17 jsou doby jízdy pro výtah umístěny v patře uvedeném v řádce 3 a čekající bude v patře uvedeném ve sloupci A. V oblasti C20:O32 jsou pak již časy vážené pravděpodobností, že výtah bude v daném patře.

Pro jednotlivá patra nám vyšly výsledky  $T_0 = 4,2\text{s}$ ,  $T_1 = 5,5\text{s}$ ,  $T_2 = 5,8\text{s}$ ,  $T_3 = 6,1\text{s}$ ,  $T_4 = 6,4\text{s}$ ,  $T_5 = 6,7\text{s}$ ,  $T_6 = 7,0\text{s}$ ,  $T_7 = 7,4\text{s}$ ,  $T_8 = 7,7\text{s}$ ,  $T_9 = 8,1\text{s}$ ,  $T_{10} = 8,6\text{s}$ ,  $T_{11} = 9,1\text{s}$ ,  $T_{12} = 9,7\text{s}$ . Pokud bychom chtěli odvolávat výtah do nějakého patra tak, aby se minimalizoval střední čas čekání, pak za předpokladu, že výtah vždy stihne dojet do tohoto patra, bude nejvýhodnější, aby jezdil do přízemí. Což je relativně očekávatelný výsledek, když polovina jízdy začíná v přízemí.

<sup>29</sup>Vzhledem k tomu, že lidé příliš často nevylezají ven z oken, nelezou domů po okapu apod., pak jde o rozumný předpoklad alespoň co se týče přízemí. V reálném provozu nebude splněn předpoklad o rovnoměrnosti ježdění do jednotlivých pater, protože někteří lidé vychází ven častěji. Ale i tak jde o nejlepší odhad, který můžeme mít bez znalosti místních poměrů.

<sup>30</sup>Můžeme také využít zdarma dostupný WolframAlpha <https://www.wolframalpha.com/>.

<sup>31</sup>[https://docs.google.com/spreadsheets/d/10pQ3D7nYGmeDKZK2DYp0CqA2AjqMDX86f9s39\\_1Gfn0](https://docs.google.com/spreadsheets/d/10pQ3D7nYGmeDKZK2DYp0CqA2AjqMDX86f9s39_1Gfn0)

Pokud bychom chtěli úlohu mít více realistickou, pak bychom museli uvážit to, že výtah zrychluje jenom část doby než dosáhne nějaké maximální rychlosti. Dalším problémem by se mohla zdát doba otevírání a zavírání dveří, ale pokud jsou dveře vždy zavřené, pak se náš výsledek změní pouze o konstantu pro jakékoliv patro a nezmění tak pořadí výhodnosti. Čas jízdy nám také ovlivní doba nastupování a vystupování. V reálném provozu, zejména v přízemí, čím déle čekáte, tím více lidí výtah nakonec ve střední hodnotě svezde, což vás opět zdrží při nastupování a i daleko více, pokud výtah po cestě vícekrát zastaví. Minimalizace času jde víceméně také proti šetření za energie.

### *Bonus*

Podle zadání si zafixujeme jeden výtah v přízemí a pak pro všechny kombinace čekajícího a umístění druhého výtahu vytvoříme tabulku, kde opět váženě sečteme doby čekání. Postup je uvedený na druhém listu Google Tabulek. Vzorce jsou sestavené tak, že opět bereme doby jízdy výtahu do daného patra, které získáme ze vzorce pro rovnoměrně zrychlený pohyb. Vybereme ale vždy ten z výtahů, který přijede dříve. Přitom vyzkoušíme všechny pozice druhého výtahu (od 1. do 12. patra) a vypočteme vážený průměr pro všechna patra. Mezivýsledky zde nerozepisujeme, protože by řešení bylo pak zbytečně zdlouhavé.

Výsledkem pro naše vstupní parametry je, že si můžeme vybrat, jestli druhý výtah budeme umísťovat do 8., nebo 9. patra, protože střední čas čekání je identický, a to 2,4 s. Oproti situaci s jedním výtahem ve střední hodnotě tak ušetří lidé 1,8 s, tedy 44 % času čekání.

Pokud by vás zajímalo, jak by to vyšlo, kdybychom se rozhodli přidat třetí výtah, pak řešení již není tak jednoduché, ale dá se očekávat, že druhý výtah by měl také změnit své umístění. Ponecháme pouze ten v přízemí a budeme zkoumat celkové očekávané doby čekání pro různé kombinace 2. a 3. výtahu. Když se zamyslíme, tak zjistíme, že hodně kombinací je duplicitních nebo nepřipadají v úvahu. Nicméně jsme vypsali většinu všech možných a z nich se nám podařilo určit, že optimální rozložení je přízemí, 5. patro a 10. patro. Při této kombinaci je očekávaná doba čekání pouze těsně nad 1,7 s. Takže bychom ušetřili ve střední hodnotě dalších 0,6 s na jednu jízdu.

Dále by se dalo úlohu dále variovat. Můžete se zamyslet, jak nepříjemně by se zkomplikovala, pokud byste měli možnost umístit 3 výtahy, ale pokaždé byste potřebovali 2, protože se vždy přesouváte jako velká skupina, která se ale nevejde do jednoho výtahu. V reálném světě ale nechodí všechny skupiny stejně velké, výtah vždy nemá čas dojet do daného patra a náš předpoklad s konstantním zrychlením byl také velice idealistický. Ještě víc se nám zkomplikuje situace u budov, které nemají jedno význačné patro, ale mají například i podzemní parkoviště.

Drobnou poznámkou může ještě být, že jsme uvažovali, že výtahy umísťujeme pouze do celočíselných pater, ale nechávat výtah v patře devět a tři čtvrtě by bylo dost nepraktické z technického hlediska. Nejspíše i tak bychom došli k závěru, že se i časově hodí mít výtah pouze v celočíselných patrech, protože alespoň ti, kteří vyjždějí z daného patra nemusí čekat. Nevylučujeme, že pro nějaké kombinace počtu výtahů, počtu pater, výšek pater a zrychlení by ale mohlo být časově výhodné zvolit pro některý výtah neceločíselné patro.

## Úloha V.4 ... Dark Side Time

FYKOS plánuje vyslat do vesmíru vlastní družici. Ta bude poháněna solárními články, potřebujeme proto, aby se ve stínu Země nenacházela příliš dlouho. V jaké výšce nad povrchem bude doba průletu stínem Země nejmenší? Při svých výpočtech uvažujte (stejně jako organizátoři), že Země je dokonale kulatá, sluneční paprsky jsou v jejím okolí paralelní a Slunce, Země a trajektorie družice se nachází v jedné rovině.

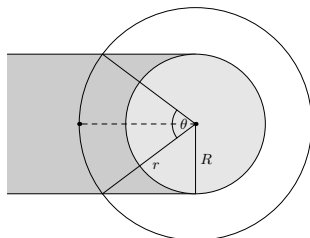
*Bonus* Během řešení narazíte na analyticky neřešitelnou rovnici. Nepoužívejte online řešiče, ale naprogramujte vlastní řešení.

*Honzovi se v Kerbalovi vybilý baterky.*

Nejprve vypočteme úhlovou rychlost oběhu satelitu  $\omega$ .

$$\begin{aligned} F_g &= F_d, \\ G \frac{mM}{r^2} &= \frac{mv^2}{r}, \\ G \frac{M}{r^2} &= \omega^2 r, \\ \omega &= \sqrt{\frac{GM}{r^3}}, \end{aligned}$$

kde  $M$  je hmotnost Země,  $m$  hmotnost satelitu,  $r$  vzdálenost satelitu od hmotného středu Země. Dále potřebujeme zjistit, jakou část trajektorie stráví satelit ve stínu Země. Spočteme tedy úhlovou velikost  $\theta$  kruhového oblouku schovaného ve stínu Země.



Obr. 6: Nákres situace. Zde  $R$  je poloměr Země.

Z náčrtu situace lze vyčíst, že

$$\sin\left(\frac{\theta}{2}\right) = \frac{R}{r},$$

$$\theta = 2 \arcsin\left(\frac{R}{r}\right),$$

kde  $R$  je poloměr Země. Čas ve stínu  $t$  tedy bude

$$t = \frac{\theta}{\omega},$$

$$t = 2 \arcsin\left(\frac{R}{r}\right) \sqrt{\frac{r^3}{GM}}.$$

Tento čas chceme minimalizovat vhodnou volbou parametru  $r$ . Zderivujeme ho tedy podle  $r$  a získaný výraz položíme rovný nule.

$$\frac{dt}{dr} = 0,$$

$$\frac{d}{dr} \left( 2 \arcsin\left(\frac{R}{r}\right) \sqrt{\frac{r^3}{GM}} \right) = 0,$$

$$\frac{d}{dr} \left( r^{\frac{3}{2}} \arcsin\left(\frac{R}{r}\right) \right) = 0,$$

$$\frac{1}{\sqrt{1 - \left(\frac{R}{r}\right)^2}} \frac{-R}{r^2} \left(\frac{r}{R}\right)^{\frac{3}{2}} + \arcsin\left(\frac{R}{r}\right) \frac{3}{2R} \left(\frac{r}{R}\right)^{\frac{1}{2}} = 0.$$

Rovnice, kterou jsme dostali, vypadá velmi nepříjemně. Použijeme tedy první trik – upravíme ji do bezrozměrného tvaru. V tomto případě to bude jednoduché, neboť máme pouze jednu neznámou, jeden parametr a oba mají rozměr délky. Můžeme tedy problém přeformulovat tak, že se zbavíme jednoho parametru a získáme novou rovnici, která je bezrozměrná. Zavedeme tedy normovanou vzdálenost  $u$ , dosadíme ji a výraz upravíme.

$$u = \frac{R}{r},$$

$$\frac{3}{2} \arcsin(u) - \frac{1}{\sqrt{u^{-2} - 1}} = 0.$$

Tuto rovnici nelze řešit analyticky. Použijeme tedy programy Desmos nebo Wolfram Alpha. Získáme výsledek

$$u \doteq 0,823.$$

Po vrácení substituce dostaneme

$$r \doteq \frac{R}{0,823},$$

$$r \doteq 1,215R.$$

Vzhledem k tomu, že  $r$  je poloměr orbity měřen od středu Země, odečteme od obou stran rovnice  $R$ . Tím na levé straně dostaneme výšku nad povrchem  $h$  a na druhé straně hodnotu  $v$  násobcích  $R$

$$h \doteq 0,215R.$$

Po dosazení  $R \doteq 6\,378$  km dostaneme konečný výsledek

$$h \doteq 1\,370 \text{ km}.$$

Zatím víme, že jde o lokální extrém funkce. Chtěli bychom však vědět, že jde o globální minimum. Spočítáme tedy druhou derivaci  $t(r)$ .

$$\frac{d^2t}{dr^2} = \frac{2}{\sqrt{GM}r} \left( \frac{3}{4} \arcsin\left(\frac{R}{r}\right) + \frac{-\frac{r^2}{R^2} + 2}{\sqrt{\frac{r}{R}^2 - 1}} \right),$$

$$\frac{d^2t}{dr^2}(1,215R) \doteq \frac{4.207}{\sqrt{GM}R}.$$

Vidíme, že je kladná, funkce je tedy konvexní a našli jsme lokální minimum.

Jelikož nemáme žádné další kandidáty na extrém, zbývá nám ještě vyšetřit krajní body definičního oboru funkce. V  $R$  nabývá funkce hodnoty  $\pi\sqrt{\frac{R^3}{GM}}$ , což je očividně vyšší než funkční hodnota v námi nalezeném bodě  $2,589\sqrt{\frac{R^3}{GM}}$ .

A jelikož  $\arcsin(x) \approx x$  pro  $x \approx 0$ , chová se funkce  $t(r)$  v nekonečnu jako

$$t(r) = 2 \arcsin\left(\frac{R}{r}\right) \sqrt{\frac{r^3}{GM}} \approx 2\frac{R}{r} \sqrt{\frac{r^3}{GM}} = 2R\sqrt{\frac{r}{GM}}$$

a v limitě do nekonečna tedy roste nade všechny meze. Opravdu jsme našli globální minimum. Samozřejmě místo tohoto výpočtu bylo možné si funkci nechat nějakým programem nakreslit.

### Bonus

Bezrozměrnou rovnici upravíme do tvaru

$$\frac{3}{2} \arcsin(u) - \frac{1}{\sqrt{u^2 - 1}} = 0.$$

Máme-li rovnici tvaru

$$f(x) = 0,$$

pak lze za jistých předpokladů nalézt její kořeny užitím tzv. Newtonovy metody, která funguje následujícím způsobem.

Nejprve se pokusíme odhadnout hodnotou  $x_0$ . Tento odhad budeme dále zpřesňovat použitím rekurentního vzorce

$$x_{k+1} = x_k - \frac{f(x_k)}{f'(x_k)},$$



který bude v našem případě po dosazení a úpravě vypadat

$$u_{k+1} = u_k - \frac{\frac{3}{2} \arcsin(u_k) - \frac{1}{\sqrt{u_k^{-2}-1}}}{\frac{3}{2} \frac{1}{\sqrt{1-u_k^2}} - \frac{u_k^{-3}}{\sqrt{u_k^{-2}-1}}},$$

$$u_{k+1} = \frac{3 - 5u_k^3 - 3\sqrt{1-u_k^2} \arcsin(u_k)}{1 - 3u_k^2}.$$

Pokud byl náš počáteční odhad dobrý<sup>32</sup>, budou se nové prvky takto získané posloupnosti svojí hodnotou přibližovat hodnotě řešení původní rovnice. Pro počáteční podmínku  $u_0 = 0,9$  dostaneme posloupnost

Tab. 8: Hodnoty výsledku v jednotlivých iteracích.

k	$\frac{u_k}{1}$
0	0,900 0
1	0,829 4
2	0,823 6
3	0,823 4
4	0,823 4

Z tabulky 8 vidíme, že už ve 3. iteraci se dostaneme na požadovanou přesnost.

### Pár poznámek na závěr

Pokud bychom polevíli na našich předpokladech, dostaneme další dvě možná řešení.

Tím prvním by byla heliosynchronní dráha. Nedokonale sférický tvar Země způsobuje pomalé stáčení orbit<sup>33</sup> družic, čehož lze pro naše účely využít. Pokud bude mít oběžná dráha naší družice ty správné parametry<sup>34</sup>, bude mít perioda tohoto stáčení délku jednoho roku. Lze tedy zařídit, aby rovina oběhu družice měla neměnnou orientaci vůči spojnici Země a Slunce. Když zvolíme takovou orbitu, která do stínu při prvním oběhu nezachází, nevstoupí do stínu Země dlouhodobě.

Druhým řešením by bylo dát družici do jednoho z Lagrangeových bodů. Avšak toto řešení je poněkud problematické. První tři nejsou stabilní, přesto jsou (první dva z nich) využívány mnoha družicemi jako družice SOHO pozorující Slunce v bodě L1, či dalekohled Jamese Webba v bodě L2. Bod L3 je na opačné straně od Slunce než Země, s potenciální družicí v okolí tohoto bodu by bylo obtížné komunikovat. Body L4 a L5 jsou od Země vzdáleny 1 au, takže by družice taktéž nejspíše byla příliš daleko na to, aby mohla plnit svůj účel.

<sup>32</sup> v našem případě musí být počáteční hodnota v intervalu (0.696, 1), jinak Newtonova metoda nebude konvergovat k danému kořenu, ale k 0.

<sup>33</sup> odborně nazývané precese

<sup>34</sup> Zde je důležitý sklon roviny, ve které družice obíhá, vůči rovině rovníku Země. Pro zájemce detaily kupříkladu na [https://en.wikipedia.org/wiki/Sun-synchronous\\_orbit](https://en.wikipedia.org/wiki/Sun-synchronous_orbit).

## Úloha V.5 . . . xenon šel na vandr

Jednou kladně ionizovaný atom xenonu vyletěl rychlostí  $v = 7 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  ze středu velké válcové cívky a začal se pohybovat homogenním magnetickým polem v rovině kolmé na magnetické siločáry. V tu chvíli cívku odpojíme od zdroje, takže její indukce začne exponenciálně klesat podle vztahu  $B(t) = B_0 e^{-\Omega t}$ , kde  $B_0 = 1,1 \cdot 10^{-4} \text{ T}$  a  $\Omega = 600 \text{ s}^{-1}$ . S jakou odchylkou od původního směru se atom bude pohybovat po ustálení?

*Nápověda:* V úloze se nebojte použít vhodnou aproximaci, nebo ji zkuste řešit numericky. Vojta vymýšlel zadání  
s rozumným řešením několik hodin, ale stejně je to hnus. A to ještě neviděl řešení.

Nejprve si musíme uvědomit, které síly na atom působí. Samozřejmě je tu magnetická síla způsobená přítomností magnetického pole. To se ale s časem mění, proto zde vzniká i pole elektrické, které na elektron také působí. Z Maxwell-Faradayovy rovnice<sup>35</sup> máme pro kruhovou oblast o poloměru  $r$  díky symetrii problému

$$\frac{dB}{dt} \pi r^2 = \frac{d(\mathbf{B} \cdot \mathbf{S})}{dt} = \frac{d\Phi}{dt} = \oint \mathbf{E} \, ds = E 2\pi r \quad \Rightarrow \quad E = \frac{r}{2} \frac{dB}{dt}.$$

Nalezli jsme tak velikost vektoru elektrické intenzity, ale ještě musíme zjistit, kam míří. Předchozí rovnici můžeme vyjádřit také v diferenciálním tvaru

$$\nabla \times \mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}.$$

Operátor rotace  $\nabla \times$  je vektorový součin operátoru  $\nabla$  (což jsou parciální derivace podle jednotlivých souřadnic) s nějakým vektorem jako argumentem (ten je v našem případě intenzita elektrického pole). Například pro komponentu v ose z výsledného vektoru máme  $\frac{\partial E_y}{\partial x} - \frac{\partial E_x}{\partial y}$ .

Orientujeme souřadnicový systém tak, že osa  $z$  míří ve směru magnetické indukce a je totožná s osou symetrie válce. Osy  $x$  a  $y$  pak leží v rovině kolmé k této ose. Necht počátek leží v bodě, odkud vylétá atom a osa  $x$  míří do směru jeho rychlosti. Pak má vektor magnetické indukce tvar  $\mathbf{B} = B_0 e^{-\Omega t} (0, 0, 1)^T$ . Proto i vektor vzniklý operátorem rotace na elektrickou intenzitu musí mít pouze třetí komponentu. Snadno si můžete ověřit, že vektor elektrické intenzity

$$\mathbf{E} = \frac{B_0 \Omega}{2} e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} -y \\ x \\ 0 \end{pmatrix}$$

splňuje Maxwellovu rovnici. Přímý výpočet tvaru vektoru není jednoduchý a vektor dokonce není určený jednoznačně, splňuje ale všechny podmínky, které v rámci elektromagnetismu musí. Samozřejmě jeho velikost koresponduje s velikostí určenou první rovnicí. Směr vektoru bychom už z první rovnice mohli také určit pomocí Lenzova pravidla.

<sup>35</sup>Pro více informací doporučujeme seriál 17. ročníku FYKOSu, který se věnuje elektromagnetismu

Pohybová rovnice pro nabitou částí v elektromagnetickém poli je

$$\mathbf{F} = m\mathbf{a} = q(\mathbf{E} + \mathbf{v} \times \mathbf{B}).$$

V našem případě je částicí kladně nabitý atom o náboji  $q = e = 1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$  a hmotnosti  $m_{\text{Xe}} = m_{\mu} A_{\text{Xe}} = 1,67 \cdot 10^{-27} \text{ kg} \cdot 137,3 = 2,2 \cdot 10^{-25} \text{ kg}$ . Vektorovou pohybovou rovnici rozepíšeme na tři složky podle každé z os

$$\begin{aligned}\ddot{x} &= \frac{eB_0}{m_{\text{Xe}}} e^{-\Omega t} \left( -\frac{\Omega}{2} y + \dot{y} \right), \\ \ddot{y} &= \frac{eB_0}{m_{\text{Xe}}} e^{-\Omega t} \left( \frac{\Omega}{2} x - \dot{x} \right), \\ \ddot{z} &= 0,\end{aligned}$$

kde jsme rozepsali vektorový součin

$$\mathbf{v} \times \mathbf{B} = B_0 e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} \dot{x} \\ \dot{y} \\ \dot{z} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} = B_0 e^{-\Omega t} \begin{pmatrix} \dot{y} \\ -\dot{x} \\ 0 \end{pmatrix}$$

Získali jsme pohybové rovnice pro pohyb elektronu v elektromagnetickém poli. Je to soustava tří lineárních diferenciálních rovnic druhého řádu. Pohyb v ose  $z$  je jednoduše přímočarý a jelikož elektron dle zadání vylétá kolmo k ose symetrie, je jeho rychlost  $v_z$  nulová. Souřadnice  $z$  elektronu je tedy také nulová po celou dobu jeho pohybu.

Problém je s řešením zbylých dvou rovnic, které jsou spolu provázány. Při obecném řešení bychom mohli použít nějaké triky z lineární algebry a rovnice by se nám podařilo separovat (tj. aby v každé rovnici vystupovala jen jedna souřadnice a její časové derivace). Naštěstí se pro vyřešení této úlohy bez tohoto náročného postupu obejdeme. Nakonec není potřeba ani numerická simulace, ale samozřejmě i ta je validním řešením pro takto náročné analytické formule. Do našeho řešení proto přikládáme také jednoduchý kód v Pythonu.

Jeden trik ale přeci jen použijeme. Kvůli tomu, že se v rovnicích vyskytuje součin  $\Omega$  a souřadnice, není jasné, jestli lze něco zanedbat, aby se rovnice zjednodušily. Použijeme proto substituci  $\Omega t = T$ , kde  $T$  bude bezrozměrný čas, pro který platí, že v čase  $T = 1$  bude intenzita magnetického pole ekrát menší než na začátku. Rovnice pak budou mít tvar

$$\begin{aligned}\Omega^2 \frac{1}{\Omega^2} \frac{d^2 x}{dt^2} &= \frac{eB_0}{m_{\text{Xe}}} \Omega e^{-\Omega t} \left( -\frac{1}{2} y + \frac{1}{\Omega} \frac{dy}{dt} \right) \Rightarrow \frac{d^2 x}{dT^2} = \frac{eB_0}{m_{\text{Xe}}} \Omega e^{-T} \left( -\frac{1}{2} y + \frac{dy}{dT} \right), \\ \Omega^2 \frac{1}{\Omega^2} \frac{d^2 y}{dt^2} &= \frac{eB_0}{m_{\text{Xe}}} \Omega e^{-\Omega t} \left( \frac{1}{2} x - \frac{1}{\Omega} \frac{dx}{dt} \right) \Rightarrow \frac{d^2 y}{dT^2} = \frac{eB_0}{m_{\text{Xe}}} \Omega e^{-T} \left( \frac{1}{2} x - \frac{dx}{dT} \right),\end{aligned}$$

Všimněme si bezrozměrného faktoru  $\alpha = B_0 e / (m_{\text{Xe}} \Omega) \doteq 0,13$ , který je docela malý. Zrychlení v ose  $x$  je na začátku nulové, protože  $y$  i  $\frac{dy}{dT}$  můžeme volit jako nulové (to odpovídá tomu, že si souřadnicový systém orientujeme tak, že elektron vylétá ve směru osy  $x$ ). Pak je zrychlení v ose  $x$  úměrné rychlosti a poloze v  $y$ ,

ale přes faktor  $\alpha$ . Ty jsou zase přes stejný faktor  $\alpha$  úměrné rychlosti a poloze v  $x$ . Takže aspoň pro začátek pohybu můžeme odhadnout, že zrychlení v  $x$  je potlačeno přes faktor  $\alpha^2$  vůči rychlosti a poloze ve stejné ose. S časovým vývojem je navíc exponenciálně rychle potlačeno.

To nás přivádí na myšlenku, jak zjednodušit obě rovnice. Napadlo nás, že zrychlení v ose  $x$  je malé, takže můžeme položit rychlost  $\frac{dx}{dT} = V_{x0}$  jako konstantní. Tím se rovnice pro zrychlení v ose  $y$  podstatně zjednoduší

$$\frac{d^2y}{dT^2} = \frac{eB_0}{m_{Xe}\Omega} e^{-T} \left( \frac{V_{x0}T}{2} - V_{x0} \right).$$

Integrací pomocí per partes podle  $T$  dostaneme rychlost jako

$$\frac{dy}{dT} = -\frac{eB_0}{m_{Xe}\Omega} \frac{V_{x0}}{2} e^{-T} (T - 1) + C,$$

kde  $C$  je integrační konstanta, kterou určíme z podmínky, že v čase  $T = 0$  je rychlost nulová. Pak tedy

$$\frac{dy}{dT} = -\alpha \frac{V_{x0}}{2} e^{-T} (T - 1) - \alpha \frac{V_{x0}}{2},$$

kvůli exponenciálnímu tlumení zrychlení se po čase pohyb ustálí na rovnoměrný přímočarý. Jeho směr můžeme určit ze směru vektoru rychlosti. Ten je jednoduše

$$\operatorname{tg} \beta = \frac{V_y(T = \infty)}{V_x(T = \infty)} = \frac{-\alpha \frac{V_{x0}}{2}}{V_{x0}} = \frac{-Be}{2m_{Xe}\Omega} \doteq -0,067.$$

Protože na začátku byl úhel  $\beta$  roven nule, odchýlí se atom od původního směru o  $\beta = \arctg(-Be / (2m_{Xe}\Omega)) = -3,8^\circ$ , tedy o skoro čtyři stupně v záporném směru osy  $y$ .

Ověřme ještě nyní oprávněnost naší aproximace. Zintegrujme polohu v ose  $y$  v závislosti na  $T$

$$y = \alpha \frac{V_{x0}}{2} e^{-T} T - \alpha \frac{V_{x0}T}{2},$$

Dosazením do rovnice pro  $\frac{d^2x}{dT^2}$  dostaneme

$$\frac{d^2x}{dT^2} = \frac{\alpha^2 V_{x0}}{4} e^{-T} (-3e^{-T} T + T + 2e^{-T} - 2).$$

Integrováním od nuly do nekonečna dostaneme změnu rychlosti v ose  $x$  jako

$$\Delta V_x = \frac{\alpha^2 V_{x0}}{4} \left( -\frac{3}{4} + 1 + 1 - 2 \right) = -\alpha^2 V_{x0} \frac{3}{16}.$$

Rychlost v ose  $x$  se změní o

$$\frac{\Delta V_x}{V_{x0}} = -\frac{3\alpha^2}{16} \doteq -0,34\%.$$

Je tedy zřejmé, že náš předpoklad o konstantní rychlosti lze považovat za správný a provedená aproximace je možná.

## Úloha V.P . . . napjatý strom

Popište co nejlíc přírodních vlivů, které způsobí vyvrácení/silné poškození osamocené stromu na louce. Jeden z nich zkuste co nejlíc kvalitativně rozebrat. Jaký je rozdíl mezi listnatým stromem a jehličnanem?

*Bonus* Některý z vlivů rozeberte i kvantitativně.

*Danka sledovala, jak se stromy ohýbají ve větru.*

Nejprve si popíšeme stavbu listnatého stromu a vysvětlíme, jak na něj působí základní přírodní vlivy. Na konci textu pak porovnáme vlastnosti listnatých a jehličnatých stromů.

První třetina výšky listnatého stromu nad zemí je tvořena kmenem, který se dále větví. Stromy rostoucí na loukách mají dostatek prostoru, světla a živin, jelikož jim nekonkurují ostatní stromy, a tudíž je jejich koruna poměrně mohutná a hustě rozvětvená.

V podzemní části pak můžeme pozorovat kořenový systém. Jeho stavba se mezidruhově podstatně liší a rozdělujeme několik typů kořenového systému. Pro naše úvahy však stačí rozdělení na mělkokořenné a hlubokokořenné druhy. Na loukách můžeme předpokládat měkčí podloží, nemělo by tedy docházet k zploštění kořenového systému v důsledku překážek jako je skála a podobně. Naopak, čím méně výživná půda je, tím více je kořenový systém mohutnější (strom musí obsáhnout větší objem půdy, aby získal potřebné živiny). Podoba kořenového systému, a tedy i fyzikální model stromu na louce se může velmi lišit v závislosti na druhu stromu či konkrétním stanovišti.

Osamocené strom uprostřed louky je vystaven řadě přírodních jevů, které jej mohou poškodit. Nyní si alespoň část z nich vyjmenujeme a stručně popíšeme. Budeme se věnovat popisu viditelných větších poškození, tedy vynecháme vlivy jako sucho a nedostatek živin způsobující uhynutí stromu.

### *Silný vítr*

Listnatý strom má díky své mohutné koruně vysoko položené těžiště, navíc - především u olistěného stromu - představuje koruna velkou plochu. V případě silného větru je tak na vrchol stromu vyvíjena velká síla (při bouřce jsou stromy mnohdy velmi viditelně nahnuté ve směru větru). Tu můžeme popsat Newtonovým odporovým vzorcem

$$F = \frac{1}{2} C \rho S v^2, \quad (6)$$

kde  $S$  je průřez větve kolmý na směr proudění vzduchu,  $\rho$  je hustota vzduchu a  $v$  velikost jeho rychlosti.  $C$  je pak experimentálně určený koeficient odporu větve.

Pomocí principu páky sčítáme jednotlivé příspěvky momentů sil působení větru na větvev.

To lze vyjádřit pomocí integrálu

$$M = \int_0^l \frac{1}{2} C \rho R(x) v^2(x) x dx.$$

Moment síly působení větru na větev délky  $l$  zde počítáme klasicky jako součin síly v bodě  $x$  a vzdálenosti tohoto bodu od počátku soustavy souřadnic (tedy  $x$ ), kam jsme si umístili působíště daného momentu sil. Plochu průřezu větve ve směru větru z rovnice (6) jsme zde aproximovali obdélníkem se stranou délky  $R(x)$ , což může být poloměr větve v daném místě a druhou stranu jsme zvolili infinitezimálně malou, tedy  $dx$ .

Síla je takto přenášena po větvích přes kmen až do kořenového systému, kde dojde k disipaci takto získané energie, tedy k její přeměně na teplo.

Moment síly působícího větru je vyrovnán momentem tlakových sil uvnitř větve. Napětí závisí na modulu pružnosti v ohybu, který je specifický pro každý materiál, působící síle a také na tvaru průřezu větve.

$$M = \left| \int_S \sigma y \, dS \right|,$$

kde  $y$  je vzdálenost elementu plochy od středu průřezu.

Napětí lze pak vyjádřit jako

$$\sigma = \frac{M}{W_0}.$$

$W_0$  je průřezový modul v ohybu, který lze nalézt v technických tabulkách. Pro kruhový průřez si jej lze představit jako podíl níže uvedeného kvadratického momentu průřezu (viz rovnici (7)) a poloměru tohoto kruhu.

Pro představu přikládáme ukazující závislost momentu působících sil a poloměru ohybu větve  $R$

$$M = \frac{E}{R} I_a,$$

kde  $E$  je modul pružnosti v ohybu ( $\sim 10\,000$  MPa)<sup>36</sup> a  $R$  poloměr ohybu.  $I_a$  je kvadratický moment průřezu popisující jak daleko od středu větve ( $y$ ) se nachází element plochy průřezu.

$$I_a = \int_S y^2 \, dS. \quad (7)$$

Vidíme tedy, že čím větší je působící moment sil, tím menší je poloměr  $R$  a tím více se ohne větev (nekonečný poloměr odpovídá rovné větvi), což je intuitivní výsledek.<sup>37</sup> Při působení síly se větev ohne tak, aby se vyrovnaly momenty. Je však třeba počítat s tím, že ohnutá větev má menší efektivní průřez, na který působí vítr a tudíž se změní i Newtonova odporová síla.

V případě, že v určité části stromu toto napětí překročí mez pružnosti ( $\sim \sim 100$  MPa), dojde k odlomení některé z jeho částí. Ulomení větve je pravděpodobněji než vyvrácení celého stromu, jelikož je k tomu třeba menší síla. Navíc

<sup>36</sup><https://www.drevenekonstrukce.cz/co-je-to-vaznik-krov-a-jak-drevene-vazniky-vybirat>

<sup>37</sup>podrobnější popis ohybu můžete najít například zde:

[https://physics.mff.cuni.cz/kfpp/skripta/kurz\\_fyziky\\_pro\\_DS/www/fyzika.html](https://physics.mff.cuni.cz/kfpp/skripta/kurz_fyziky_pro_DS/www/fyzika.html)

koruna, stejně jako vítr, není homogenní, některé části jsou tedy namáhány více než jiné. Starší suché větve jsou ke zlomení více náchylné, jelikož již nemají takovou pružnost. U mladých tenkých větví nacházíme větší podíl lýkové části než u větví starších. Z tohoto důvodu vykazují mladé větve větší elasticitu.

Listnaté stromy mají poměrně silný kmen (až na některé druhy jako je bříza), a tedy jejich zlomení je méně pravděpodobné.

V některých případech, kdy je narušen kořenový systém nebo je podloží velmi nestabilní, může dojít i k vyvrácení stromu.

To, k jakému případu dojde, opět velmi závisí na daných podmínkách. Jak je vidět, celý problém je velmi složitý už jen při popisu fyzikálního modelu. Pro získání konkrétních čísel je třeba přistoupit k numerickému řešení a metodám matematického modelování.<sup>38</sup>

### *Blesk*

Při bouři také může docházet k přírodním elektrickým výbojům - bleskům. Blesk vždy uhoří do místa v jeho okolí, které má nejvyšší elektrický náboj. K takovýmto místům patří špičky budov, popřípadě stromů. V případě bouře nad loukou s jedním osamoceným stromem pak blesk uhoří s nejvyšší pravděpodobností právě do tohoto stromu. Tělem stromu pak výboj putuje až do země cestou, která má nejmenší elektrický odpor - tedy je i nejkratší. Přitom dochází především k velkému přenosu tepelné energie. V závislosti na velikosti blesku, tedy množství energie, které stromu předá, pak může dojít k poškození kůry (blesk zanechá viditelné stopy), rozštěpení či dokonce k zažehnutí stromu. K podobnému poškození může dojít i v případě přenosu ohně na strom jiným způsobem. Stromy lze před blesky chránit, podobně jako domy, správným uzemněním.

Náchylnost stromu k zasažení bleskem závisí na výšce samotného stromu a jeho vodivosti. Velmi vysokou náchylnost má například akát, naopak poměrně nízkou náchylnostní disponují buky.<sup>39</sup>

### *Sesuv půdy*

V oblastech se silnou důlní aktivitou, případně po zemětřesení může docházet k sesuvům půdy. Mnohdy dojde k odtržení velké části svahu a spolu se zeminou jsou strženy i stromy. Může tak dojít k částečnému poškození jejich kořenového systému, či dokonce k úplnému vyvrácení. Tento jev lze častěji pozorovat v odlesněných oblastech, kde půda není zpevněna kořenovými systémy stromů (náchylnější jsou tedy opět osamocené stromy s plochým kořenovým systémem).

### *Zvířata, houby a jiné parazitní organismy*

Všechny výše uvedené jevy mají horší následky pro slabé a dříve poškozené stromy. K tomuto poškození pak silně přispívají různé parazitní houby či drobní živočichové

---

<sup>38</sup>Podobný postup výpočtu a také ukázky z modelování dané situace můžete najít v dokumentu, který vznikl při vyšetřování pádu vánočního stromu na Staroměstském náměstí v Praze v roce 2003: [https://akela.mendelu.cz/~xcepl/inobio/inovace/Biomechanika\\_stromu/2\\_vanocni\\_strom.pdf](https://akela.mendelu.cz/~xcepl/inobio/inovace/Biomechanika_stromu/2_vanocni_strom.pdf)

<sup>39</sup><https://szkt.cz/wp-content/uploads/2020/01/blesky1.pdf>

jako kůrovec, které narušují homogenitu dřeva. Dále mohou být menší stromky poškozeny větší zvěří, která okusuje lístky a menší větvičky či stromy cíleně kácí pro stavbu obydlí (bobr). Přirozeně může k poškození dojít také (a to především) lidskou činností.

Existuje samozřejmě mnoho dalších vlivů, které mohou stromy poškodit. Ty však již nejsou tak běžné a nebudeme se jim dále věnovat.

Strom, který roste osamocený, je na rozdíl od stromů žijících v těsné blízkosti ostatních stromů lépe stavěný, a tudíž jako jedinec více odolný. Stromy v lese jsou ale více chráněny okolními stromy. Pravděpodobnost poškození větrem je tak výrazně menší. Snáze se zde však šíří různí parazitní živočichové, a to zejména z důvodu jednodruhové skladby lesa (paraziti jsou většinou potravní specialisté).

Jehličnaté stromy rostoucí na volném prostranství mají větve již velmi blízko u země, na rozdíl od listnatých stromů (což neplatí například u borovice lesní). Zároveň však mají v průměru mělčí kořenový systém než stromy listnaté. Proto dochází u jehličnanů k vývratům častěji. Většina jehličnatých stromů má také v průměru slabší kmen a můžeme tedy pozorovat i častější polomy.

## Úloha VI.1 . . . vodácká záhada

*Za slunečného letního počasí pozorujeme na řece během dne zajímavý průběh chování větru. Ráno při východu slunce je zima a někdy i ranní mlha. Ta se následně rychle rozplyne a teplota vzduchu roste. Poté se rozfouká slabý vítr proti proudu řeky. Večer se situace uklidní a po sklonění slunce k obzoru se směr větru obrátí po proudu řeky. Čím je tento úkaz způsobený? Vysvětlí proces, který v těchto dvou případech probíhá.*

*Katarína plula a pozorovala.*

V noci klesne teplota v údolí až pod rosny bod, díky čemuž vznikne mlha, která se během rána, případně brzkého dopoledne, rozplyne vlivem oteplení vzduchu. Po východu slunce se začne údolí ohřívat a teplý vzduch, který má díky ohřátí nižší hustotu, následně začne proudit směrem vzhůru.

Kromě toho se zahřeje i vzduch v horách, avšak vzduch ve stejné nadmořské výšce nad údolím má ohřev mnohem menší (tento vzduch je dále od povrchu). Tedy vzduch na horách také zmenší hustotu a začne stoupat, čímž se na vrcholu hory vytvoří lokální podtlak. Tento podtlak začne následně nasávat ohřátý stoupající vzduch z údolí směrem k vrcholu hory, čímž vznikne vítr proti proudu řeky.

Tomuto anabatickému větru se říká údolní vítr. Večer teplota pomalu klesá, posléze se ochlazují i svahy a s nimi následně i vzduch, díky čemuž po chvilce proudění ustanou. Vzduch se poté nadále ochlazuje, čímž zvyšuje svojí hustotu a klesá dolů do údolí a následně proudí stále níže po proudu řeky.

Při poklesu do údolí řeky se vzduch může adiabaticky zahřát. Velikost ohřevu závisí na více faktorech (např. teplota údolí nebo výška poklesu). Tento ohřev potom může způsobit stoupání vzduchu z údolí a posilnit nasávání vzduchu z horského svahu.

Tento katabatický vítr se nazývá horský vítr.



## Úloha VI.2 ... shnilé jablko

Jarda našel po FYKOSím soustředění ve svém batohu jablko, které už nebylo v dobrém stavu. Hodil ho do nízkého koše na kuchyňský odpad vzdáleného 1,0 m a samozřejmě se trefil. Jablko házel vodorovně z výšky 0,5 m, dopadlo na rozmezí stěny a dna koše, kde se rozpláclo. Koš o hmotnosti 910 g se po dopadu jablka posunul o vzdálenost 5 cm. Jaký je koeficient tření mezi podlahou a košem? Jablko má hmotnost 230 g.

Jarda zase zapomněl sníst svačinu.

Úloha má tři části – let jablka vzduchem, srážka s košem a brždění koše vlivem tření s podlahou. Označme  $m = 230$  g hmotnost jablka a  $M = 910$  g hmotnost koše.

Srážku jablka a koše vyřešíme pomocí zákona zachování hybnosti. Ta se pro izolovanou soustavu nemění. Před nárazem byla rovna vodorovné rychlosti jablka vynásobené jeho hmotností, tedy  $p = mv_x$ . Po dopadnutí jablka do koše budou mít oba předměty stejnou rychlost, protože srážka je nepružná (jablko se rozpláclo). Jejich hybnost tak bude  $p = (m + M)u$ . Odtud najdeme jejich energii jako

$$E_k = \frac{1}{2} (m + M) u^2 = \frac{p^2}{2(m + M)} = \frac{m^2 v_x^2}{2(m + M)}.$$

Tato kinetická energie se přemění kvůli tření a koš s jablkem zastaví. Ze zákona zachování energie platí

$$f = \frac{E_k}{(m + M)gd} = \frac{m^2 v_x^2}{2(m + M)^2 gd},$$

kde  $d = 5$  cm je posunutí koše.

Zbývá nám ještě dosadit za rychlost

$$v_x = \frac{D}{t} = \frac{D}{\sqrt{\frac{2h}{g}}},$$

kteou jsme našli z charakteristik vrhu jablka. Vrh byl vodorovný a jablko spadlo o  $h = 0,5$  m ve vzdálenosti  $D = 1,0$  m.

Konečný vztah pro koeficient tření tak je

$$f = \frac{m^2 D^2}{4(m + M)^2 hd} \doteq 0,4.$$

Zaokrouhlili jsme výsledek na jednu platnou cifru. Jednak je to z důvodu, že hodnota 5 cm v zadání je také jen na jednu platnou cifru, ale také je to z celkového zadání „experimentu“. V praxi bychom totiž *metodou shnilého jablka* asi jen těžko naměřili koeficient tření s přesností na setiny.

## Úloha VI.3 ... odporné bipyramidky

V drátěném modelu pravidelného  $2N$ -stěnného dvojješanu jsou vodivá spojení v rovině symetrie tvořena odpory  $R_2$ , zatímco spojení jdoucí z jednoho z vrcholů do bodu v pravidelném  $N$ -úhelníku mají odpor  $R_1$ . Určete odpor mezi

- hlavními vrcholy (nad a pod rovinou základny),
- sousedními vrcholy v rovině základny,
- protějšími vrcholy v rovině základny (ty nejvzdálenější) pro  $N$  sudé.

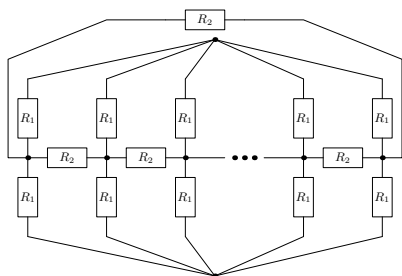
*Karel chtěl  $N$ -gonální bipyramidy.*

Všechny podúlohy se dají řešit mnoha způsoby. Obecně však budeme hledat symetrie, které nám pomohou v řešení. Některé větve obvodu budeme moct rovnou vypustit z výpočtu, protože jimi nepoteče proud. Jiná symetrie nám pomůže tak, že bude stačit vypočítat pouze část obvodu. Pro přehlednost uvažujme, že rovina základny (dále označovaná jako hlavní) leží vodorovně a zbývající dva vrcholy ješanu leží jeden nad a jeden pod hlavní rovinou.

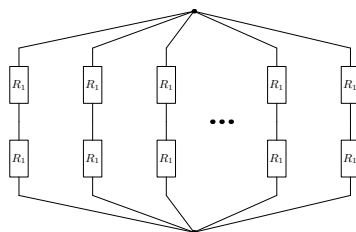
## Mezi hlavními vrcholy

Připojíme-li zdroj napětí na hlavní vrcholy, pak všechny odpory ležící v hlavní rovině budou na stejném potenciálu. To je dané tím, že u každého vrcholu je stejný poměr odporů nad rovinou a pod rovinou. Když je ve větvi nulový rozdíl potenciálů mezi uzly, větví neteče proud a můžeme tyto větve z obvodu vynechat a schéma zjednodušit. Na obrázku 8 vidíme, že se nám situace zjednodušila na takovou, kde máme  $N$  paralelně zapojených větví a v každé z nich jsou dva dráty s odporem  $R_1$ . Celkový odpor zapojení je tedy:

$$\frac{1}{R_{aN}} = \sum_{i=1}^N \frac{1}{2R_1} \implies R_{aN} = \frac{2R_1}{N}.$$



Obr. 7: Schéma pro zapojení přes sousední vrcholy základny.



Obr. 8: Zjednodušené schéma pro zapojení dvojješanu přes hlavní vrcholy; vertikálních větví je  $N$ .

*Mezi sousedními vrcholy v rovině základny*

Následující 2 podúlohy (nejspíš) neumíme obecně vyřešit tak jako část a), ale s trochou představivosti můžeme nalézt algoritmus, jakým lze úlohu manuálně vypočítat pro předem dané  $N$ . Jako bonus si ukážeme, jak takový algoritmus zapsat rekurzivně pomocí rovnic, což nám umožní jednodušeji nalézt obecné řešení pro  $N + k$ .

**$N$  sudé** V tomto případě je objekt souměrný podle roviny, která je kolmá na úsečku spojující připojené sousední vrcholy a nachází se v její polovině. Označme ji za vertikální rovinu souměrnosti. Úsečky, které vedou z hlavní roviny do horního vrcholu můžeme rozdělit do dvojic, které jsou podle ní souměrné. Jedním z těchto drátů teče proud do horního hlavního vrcholu a druhým z něj vytéká pryč, přičemž velikost těchto proudů musí být ze symetrie stejná. Proto můžeme uvažovat, že v horním hlavním vrcholu nemají tyto drátky elektrický styk s ostatními, které jsou z jiných vrcholů  $N$ -úhelníku. Na výsledný odpor této části obvodu to nebude mít vliv. Analogická úvaha platí i pro spodní poloprostor.

Nyní zavedeme ještě jedno značení. Objekt orientujeme tak, že úsečku, na kterou je připojeno napětí, budeme nazývat přední. Úsečku přímo na druhé straně  $N$ -úhelníku budeme nazývat zadní. K samotnému výsledku se potom můžeme dopracovat tak, že budeme postupovat od zadní části úsečky k přední.

Začneme tedy u zadní úsečky. Z každého jejího konce vedou dva dráty do hlavních vrcholů, jeden dolů a jeden nahoru. Jak jsme již zmínili, spojení těchto drátů v hlavních vrcholech můžeme díky symetriím oddělit od zbytku odporu. Pro celkový odpor mezi konci zadní úsečky  $R_z$  pak bude jednoduše platit

$$\frac{1}{R_z} = \frac{1}{R_2} + \frac{1}{2R_1} + \frac{1}{2R_1},$$

jelikož se jedná o paralelní zapojení tří obvodů u odporech  $R_2$  (odpor zadní úsečky),  $2R_1$  (cesta z jednoho konce úsečky na druhý přes horní vrchol) a znovu  $2R_1$  (analogicky přes spodní vrchol).

Nyní postupujme směrem k přední úsečce. V rovině základny vedou od zadní úsečky dva vodiče s odpory  $R_2$  a na konci právě zmíněných vodičů jsou body, ze kterých znovu vedou vodiče do hlavních vrcholů. Chceme spočítat, jaký odpor bude teď mít tato rozšířená „zadní část“ obvodu, připojíme-li ke každému jejímu konci zdroj napětí. Stejně jako předtím můžeme tuto část v hlavních vrcholech oddělit od zbytku obvodu. Máme zde potom opět paralelní zapojení tří větví. Dvě z nich mají odpor  $2R_1$  a v té poslední, která leží v hlavní rovině, máme sériově zapojený obvod s odporem  $R_z$  a dva vodiče s odpory  $R_2$ . Označíme-li si  $R_{z3}$  jako odpor mezi těmito body (3 v indexu značí, že jsme započítali 3 hrany  $N$ -úhelníku), pak platí:

$$\frac{1}{R_{z3}} = \frac{1}{R_2 + R_2 + R_z} + \frac{1}{2R_1} + \frac{1}{2R_1}.$$

Analogicky pak můžeme postupovat dále a dále a získávat odpory  $R_{z2}, R_{3z3}, \dots$ , až dokud nespočítáme  $R_{z(N-1)}$ . K tomuto odporu stačí paralelně připojit odpor  $R_2$ , který se nachází na přední úsečce, a máme vyhráno.

$$\frac{1}{R_{bN}} = \frac{1}{R_{z(N-1)}} + \frac{1}{R_2}$$

Nyní se přesunme na rekurzi. Uvažujme, že známe  $R_{b(N-2)}$  a toužíme znát  $R_{bN}$ . Od  $R_{b(N-2)}$  nám paralelně stačí odečíst  $R_2$  (čímž získáme  $R_{z(N-3)}$ ), sériově dvakrát přičíst  $R_2$  a k tomuto celému paralelně přičíst dvakrát  $2R_1$  (čímž získáme  $R_{z(N-1)}$ ) a nakonec jednou  $R_2$ . Zapsáno v rovnici

$$\frac{1}{R_{bN}} = \frac{1}{R_2} + \frac{1}{R_1} + \frac{1}{2R_2 + \left(\frac{1}{R_{b(N-2)}} - \frac{1}{R_2}\right)^{-1}}.$$

Zavedeme označení

$$G_{bK} = \frac{R_1}{R_{bK}}$$

a pro další přehlednost poměr

$$p = \frac{R_1}{R_2}.$$

Potom rekurentní rovnici píšeme ve tvaru

$$R_1 \frac{1}{R_{bN}} = 1 + p + p \frac{G_{bN-2} - p}{2G_{bN-2} - p}.$$

Zbývá určit počáteční podmínku. Nejnižší možné  $N - 2$  je 4, protože zadání hovoří o jehlanu. Pak vychází

$$G_{b4} = 1 + p + \frac{p(p+1)}{3p+2}.$$

Navíc teď, když známe rekurentní rovnici a její počáteční podmínku, si můžeme (částečně) obecné řešení pro sudá  $N$  nechat spočítat programem Mathematica

$$R_{bN} = R_2 \frac{2}{\sqrt{2p+1} \left( 1 - \left( \frac{-p + \sqrt{2p+1}}{p^2} \right)^{-N/2} \left( \frac{-p + \sqrt{2p+1}}{p^2} \right)^{N/2} \right)} - R_2 \frac{1}{\sqrt{2p+1}} + R_2.$$

Nyní se dostaneme k případu, kdy  $N$  je liché.

$N$  **liché** Znovu předpokládejme orientaci objektu tak, že napětí je připojené k přední přímkce. Nyní už nemáme zadní přímkku, ale zadní bod, ze kterého vedou vodiče s rezistory do hlavních vrcholů. Vzhledem k symetrii si můžeme rozmyslet, že těmito vodiči nepoteče proud (!) „Zadním bodem“ totiž musí v rovině základny vytékat stejný proud, jaký do něj vtéká, a zároveň nemůže těmito vodiči proud z jednoho hlavního vrcholu vytékat do druhého nemůže proud zase vtékat, protože by to porušilo symetrii.

Vodiče ze zadního do hlavních vrcholů tak nemusíme uvažovat. Jinak budeme postupovat naprosto stejně jako v případě, kdy  $N$  bylo sudé, jen s tím rozdílem, že odpor na „zadní úsečce“ je teď  $2R_2$  (zadní úsečka je teď v podstatě mezi těmi body v hlavní rovině, ze/do kterých teče proud do/z hlavních vrcholů).

Znovu použijeme rekurentní rovnici z předchozí části. Nejmenší liché  $N$ , pro které má úloha smysl řešit, je  $N = 3$ . Z přechozích komentářů můžeme odvodit, že odpor pro takový útvar je

$$R_{b3} = \left( \frac{1}{R_2} + \frac{1}{2R_2} + \frac{1}{2R_1} + \frac{1}{2R_1} \right)^{-1} = \frac{R_1}{\frac{3}{2}p + 1}$$

Rekurentní posloupnost začíná na jiném členu, proto je evidentní, že jsme museli příklad rozdělit na dva případy. Obecné řešení si opět můžeme nechat spočítat:

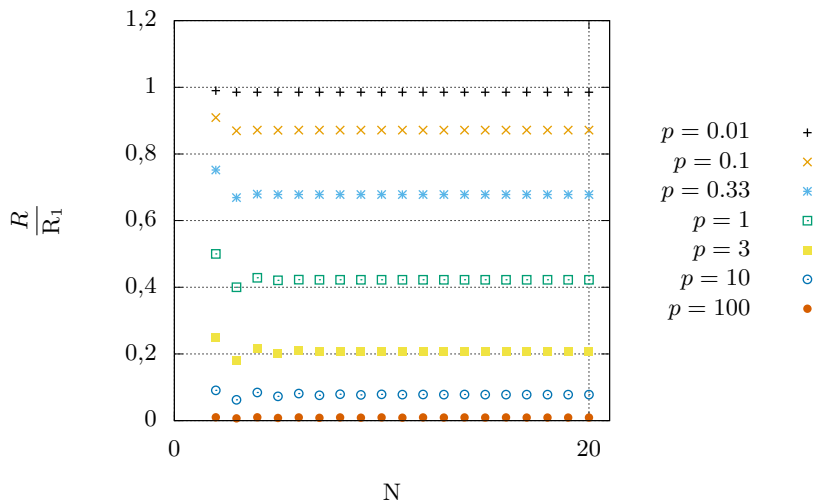
$$R_{bN} = \frac{2R_1}{\left( \frac{-1-p+\sqrt{2p+1}}{p^2} \right)^{-(N-1)/2} \left( -\frac{1+p+\sqrt{2p+1}}{p^2} \right)^{(N-1)/2} + \sqrt{2p+1} + 2p + 1}$$

### Mezi protějšími vrcholy v základně

Když budeme hledat odpor mezi protějšími vrcholy v hlavní rovině, bude řešení dost podobné. Objekt si umístíme tak, aby jeden z vrcholů, mezi kterými počítáme odpor, byl přední a druhý zadní. Mezi těmito vrcholy, kolmo k hlavní rovině, vede rovina symetrie (říkejme jí třeba první rovina symetrie). Kolmo na tuto rovinu a na hlavní rovinu vede středem  $N$ -úhelníku další rovina symetrie (kterou budeme označovat jako druhou). Řešení se bude dále lišit podle případů, kdy  $N$  je dělitelné čtyřmi a kdy není. Je totiž rozdíl, jestli druhá rovina symetrie protíná  $N$ -úhelník v jeho vrcholu, nebo půlí některou jeho stranu.

$N$  **není dělitelné čtyřmi** Jestliže  $N$  není dělitelné čtyřmi, pak druhá rovina symetrie protíná  $N$ -úhelník v polovině jedné z úseček (těm budeme říkat krajní). Při výpočtu postupujme právě od této úsečky, což bude analogické předchozí části. Z jednoho konce krajní úsečky opět poteče proud přes hlavní vrchol do druhého a vodivý kontakt v hlavním vrcholu nemusíme uvažovat.

Celý objekt mezi předním a zadním vrcholem si rozdělíme na čtyři větve. Dvakrát máme větev, která jde z předního přes hlavní vrchol do zadního a dvakrát máme krajní větev. Celkový odpor je tvořen paralelním zapojením těchto čtyř větví. Opět sestavíme rekurzivní rovnici. Předpokládejme, že známe odpor  $R_{c(N-4)}$ .


 Obr. 9: Závislost odporu v úloze b) na  $N$  a na  $p$ .

Pomocí něj spočítáme odpor jedné krajní větve tak, že jeho převrácenou hodnotu vydělíme dvěma a odečteme větev (jednu) jdoucí přes hlavní vrchol. Pak už jen stačí paralelně dvakrát připojit části jdoucí přes hlavní vrchol (každá o odporu  $2R_1$ ) a sériově  $2R_2$ , čímž získáme odpor zvětšené krajní větve. Nakonec znovu paralelně spojíme s druhou stejnou větví a s cestou přes hlavní vrcholy. Máme vyhráno. V rovnici to můžeme zapsat jako

$$\frac{1}{R_{cN}} = \frac{2}{2R_1} + \frac{2}{2R_2 + \left( \frac{2}{2R_1} + \frac{1}{2R_{c(N-4)}} - \frac{1}{2R_1} \right)^{-1}}.$$

Zavedeme stejné substitute jako v minulé části a rovnici upravíme na tvar

$$G_{cN} = 1 + p \frac{(1 + G_{c(N-4)})}{1 + p + G_{c(N-4)}}.$$

Nejmenší  $N$  je  $N = 6$ . Pro něj je hledaný odpor

$$R_{c6} = \left( 2 \frac{1}{2R_1} + 2 \frac{1}{2R_2 + \frac{R_1 R_2}{R_1 + R_2}} \right)^{-1} = \frac{R_1}{1 + 2p \frac{1+p}{2p(1+p)+p}},$$

což odpovídá

$$G_{c6} = 1 + 2p \frac{1+p}{3p+2}.$$

Je pozoruhodné, že bychom tento výsledek dostali dosazením

$$G_{c2} = G_{b2} = 2p + 1.$$

do rekurze. S touto počáteční podmínkou je ale obecné řešení i tak příliš škaredé.

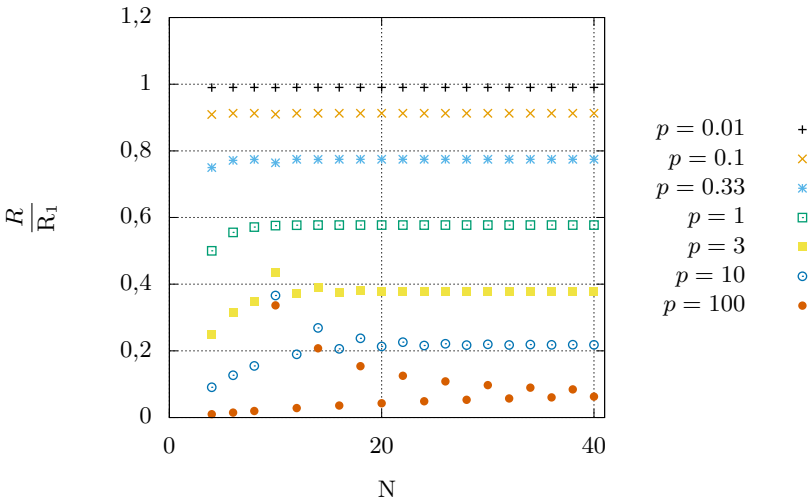
**$N$  dělitelné čtyřmi** Jestliže  $N$  je dělitelné čtyřmi, pak druhá rovina symetrie protíná  $N$ -úhelník v jednom z vrcholů. Stejně jako předtím z tohoto vrcholu díky symetrii nepoteče proud do hlavních vrcholů, a tyto vodiče tak můžeme vynechat. Rekurze je pak stejná jako v předchozí části.

Nejmenší  $N$  je zde  $N = 4$ , pro něž platí:

$$R_{c4} = \left( \frac{1}{2R_2} + \frac{1}{2R_2} + \frac{1}{2R_1} + \frac{1}{2R_1} \right)^{-1} = \frac{R_1}{p+1},$$

což odpovídá

$$G_{c4} = p + 1 \implies \implies R_{cN} = \frac{R_1}{\frac{2\sqrt{2p+1}}{\left(\frac{-1-p+\sqrt{2p+1}}{p^2}\right)^{-N/4} \left(\frac{-1+p+\sqrt{2p+1}}{p^2}\right)^{N/4} + \sqrt{2p+1}}}$$



Obr. 10: Závislost odporu v úloze c) na  $N$  a na  $p$ .

Vidíme, že pro  $N \rightarrow \infty$  hodnota odporu v oboch podúlohách konverguje. Tuto limitu môžeme spočítat, položíme-li rovnosť  $R_{bN} = R_{bN-2}$ , prípadne  $R_{cN} = R_{cN-4}$  a dosadíme do rekurentných rovníc. Dostávame

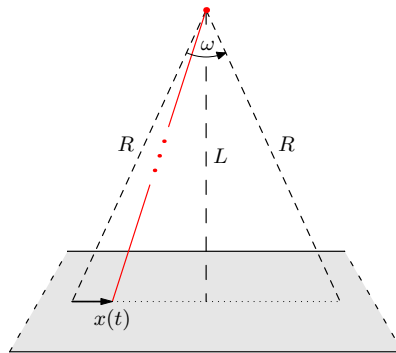
$$R_{b\infty} = R_1 \frac{2}{2p+1+\sqrt{2p+1}} \quad \text{a} \quad R_{c\infty} = R_1 \frac{1}{\sqrt{1+2p}}.$$

### Úloha VI.4 . . . svetlo rychlejší než svetlo

Ve vzdálenosti  $L$  od rozlehlého stínítka se nachází laser. Ten až do času  $t = 0$  s svítí na stínítko tak, že vzdálenost skvrny od laseru je  $R > L$ . Náhle začneme laserem otáčet rovnoměrnou úhlovou rychlostí  $\omega$ , přičemž vzdálenost skvrny na stínítku od laseru se zmenšuje na  $L$  a následně zpět na  $R$ . Vyjádřete rychlost této skvrny vzhledem na stínítko. Může překročit rychlost světla ve vakuu  $c$  nebo být dokonce nekonečná? Jak (kvalitativně) tato rychlost závisí na poloze skvrny na stínítku? Celá aparatura se nachází ve vakuu.

*Marek J. si chce overiť výroky o zdanlivom prekonaní rýchlosti svetla.*

Pri riešení nás budú zaujímať prípady, kedy  $L/c \gg 1$ s. Keďže sa zadanie pýta, či rýchlosť svetelného bodu na tienidle môže prekročiť rýchlosť svetla vo vákuu  $c$ , pozrieme sa na to, aké hodnoty nadobúda pre  $L \rightarrow \infty$ . Úlohou tohto riešenia je okrem popisu výsledku poskytnúť a použiť niekoľko prístupov k problému, ktoré vám snáď pomôžu úspešne spočítať aj iné úlohy.



Obr. 11: Nákres situácie.  $x(t)$  značí polohu svetelného bodu v čase  $t$ .

Geometria myšlienkového experimentu pozostáva z rovnoramenného trojuholníka s počiatkom lúča v jednom vrchole, s dvoma stranami o dĺžke  $R$ , pričom tretiu stranu tvorí časť tienidla.

Prvým tipom ako na riešenie úloh, okrem pochopenia a vlastnej reformulácie zadania, je **úlohu si zjednodušiť a vyriešiť ju tak**.

Začiatok experimentu tak ponechajme nezmenený, ale namiesto rovnomerne sa otáčajúceho laseru uvažujme dva lasery: jeden totožný s laserom zo začiatku expe-



rimentu a druhý vypnutý, ktorý mieri kolmo na tienidlo – strana  $L$ . Experiment začneme tak, že prvý laser vypneme a druhý zapneme.

Keby bolo tienidlo umiestnené blízko laserov, čo zodpovedá každodennému životu, v našom experimente by sme pozorovali okamžité zhasnutie prvého svetelného bodu a súčasné zasvetenie druhého svetelného bodu. Ak však platí  $L/c \gg 1$  s, tak po vypnutí prvého a zapnutí druhého laseru bude na tienidle stále svietiaci prvý bod, potom sa objaví druhý svetelný bod a až potom zhasne prvý. Deje sa niečo zvláštne, akoby zasvetenie druhého laseru nastalo skôr ako zhasnutie toho prvého. Poďme si dané časy presne spočítať a možno sa nám objasní, čo sa vlastne deje.

Z konečnej rýchlosti svetla vyplýva, že svetlu bude nejaký čas trvať, kým sa dostane k tienidlu, ale rovnako sa informácia o vypnutí prvého laseru nepresunie k tienidlu okamžite (podstata relativity súčasnosti). Dané časy v spomenutom poradí vieme vypočítať ako

$$t_1 = \frac{L}{c},$$

$$t_2 = \frac{R}{c}.$$

Keďže platí, že  $R > L$  tak  $t_2 > t_1$ , a teda informácia o zapnutí druhého laseru dorazí na tienidlo skôr ako informácia o vypnutí prvého. Efekt ďalšieho oneskorenia, vznikajúceho odrazom laserov od tienidla k pomyselnému pozorovateľovi pri tienidle ignorujeme, keďže by len zosiloval pozorované javy.

Vidíme teda, že zo zadania spomínaná nadsvetelná rýchlosť bude mať súvis s meniacou sa dĺžkou laserového lúča. Takisto by sme si daný efekt (v prvom priblížení) mohli predstaviť tak, že rýchlosť svetelného bodu spočítame pomocou uhlovej rýchlosti  $\omega$  ako  $v = l\omega$ , kde  $l$  je aktuálna dĺžka lúča (teda klasická obvodová rýchlosť) a pri  $l \rightarrow \infty$   $v$  pôjde takisto do nekonečna. Je to však skutočne tak? Poďme konečne na riešenie problému zo zadania.

Uvedomíme si, že správanie rýchlosti laserového bodu na tienidle je symetrické podľa kolmice vedenej z vrcholu trojuholníka na tienidlo, teda podľa dĺžky  $L$  definovanej v zadaní. Tu prichádza druhá rada k riešeniu úloh: **nájdite v úlohe symetriu a skúste ju využiť k zjednodušeniu úlohy**. V tomto prípade stačí na zodpovedanie otázok v zadaní brať do úvahy len jednu polovicu trojuholníka. Uvažujme tak začiatok experimentu v bode dopadu laserového lúča s dĺžkou  $L$  a koniec experimentu v bode dopadu laserového lúča s dĺžkou  $R$ .

Ďalšou dôležitou voľbou je *výber súradnicového systému*. Väčšinou platí, že by mal vystihovať symetriu úlohy a ušetriť nám počítanie, či už zjednodušením výrazov alebo napríklad tým, že nemusíme stále pripočítavať konštantné členy, a podobne.

V našom prípade nám dobre poslúži súradnica  $x$ , ktorá je totožná s polohou na tienidle a  $x = 0$  znamená začiatok experimentu (dopad laserového lúča o dĺžke  $L$ ). Podobne aj čas  $t$  a uhol  $\varphi$  začínajú na nule. Pre uhol však ešte vieme napísať vzťah  $\varphi = \omega t$ . **Jasne definovať veličiny spojené s úlohou a uvedomenie si súvislostí medzi nimi** vie rovnako častokrát pomôcť k získaniu riešenia.

Polohu svetelného bodu označujeme ako  $x(t)$  a použitím Pytagorovej vety dostávame:

$$x(t) = \sqrt{l^2(t) - L^2}, \quad (8)$$

kde  $l(t)$  je dĺžka trajektórie aktuálne vyslaného laserového fotónu, končiaca na tienidle (premyslite si, že lúč v tomto prípade nemá tvar priamky) a pre ňu platí

$$l(t) = \frac{L}{\cos(\omega t)}. \quad (9)$$

Keby sme neuvažovali žiadne oneskorenie informácií o pohybe laseru, tak by sme dosadením vzťahu pre (9) do (8) a následne deriváciou  $x(t)$  podľa času dostali závislosť rýchlosti svetelného bodu od času  $v(t)$ . My však oneskorenie uvažovať potrebujeme. Pre  $x(t)$  teda po dosadení za  $l(t)$  platí

$$x(t) = L \operatorname{tg}(\omega t). \quad (10)$$

Teraz sa pustíme do počítania oneskorenia prenosu informácie o pohybe laserového lúča. To závisí od dĺžky lúča pri jeho vyslaní laserom. Čas oneskorenia je daný trajektóriou fotónu a delený rýchlosťou svetla. Označme teda čas s daným oneskorením, s ktorým dostáva informácie z počiatku pomyselný pozorovateľ pri tienidle,  $t'$ :

$$t' = t - \frac{l(t')}{c} = t - \frac{L}{c \cos(\omega t')}. \quad (11)$$

Mohla by vzniknúť otázka, či náhodou do závislosti  $l$  nepatrí čas  $t$ , k tienidlu sa však dostávajú lúče vyslané z minulosti, teda v čase  $t$  na tienidlo dopadá lúč vyslaný v čase  $t'$  (oneskorený čas), čiže lúč prechádzajúci dráhu  $l(t')$  (dráhy sú totiž určené už pri namierení laseru).

Pre oneskorený čas  $t'$  tak dostávame transcendentnú rovnicu, a teda ho nevieme vyjadriť priamo. Dá sa však nájsť pre dané parametre numericky. To nám nevádi, keďže na otázky zo zadania vieme odpovedať aj s rovnicami, kde vystupuje „posunutý“ čas „ $t'$ “, keďže to správanie rýchlosti (jej hodnoty, maximum a podobne) nemení.

Fiktívny pozorovateľ pri tienidle uvidí lúče resp. svetelné body na tienidle s oneskorením vyjadreným v (11) a ich polohu môžeme vyjadriť jednoducho dosadením vzťahu pre  $t'$  do rovnice pre  $x(t)$ , dostávame tak

$$x' \equiv x(t') = L \operatorname{tg} \left[ \omega \left( t - \frac{L}{c \cos(\omega t')} \right) \right]. \quad (12)$$

Derivovaním vzťahu (12) podľa času  $t$  dostaneme našu hľadanú závislosť  $v(t)$

$$v(t'(t)) = \frac{\omega L c}{c \cos^2(\omega t') + \omega L \sin(\omega t')}, \quad (13)$$

kde sme štandardne derivovali, využili definičné vzťahy uvedené vyššie, či vlastnosti goniometrickej funkcie tangens. Z rovnice (4) sme dopočítali

$$\frac{dt'}{dt} = \frac{c \cos(\omega t')}{c \cos(\omega t') + \omega L \operatorname{tg}(\omega t')}.$$

Vzťah (13) popisuje rýchlosť svetelného bodu vzhľadom na tienidlo pre časy  $t' \geq 0$  (keďže predtým je svetelný bod nehybný).

Teraz môžeme odpovedať na všetky zvyšné otázky v zadaní.

Pre uhol  $\varphi$  uvažujeme kladné hodnoty menšie ako pravý uhol, teda nám žiadne problémy v skúmaní správania pre  $L \rightarrow \infty$  výrazy s ním spôsobovať nebudú, pretože sú nenulové a konečné. V našej ďalšej diskusii ich teda môžeme ignorovať.

Uhlová rýchlosť  $\omega$  a rýchlosť svetla  $c$  sú na tom podobne. Vidíme, že čitateľ výrazu (13) obsahuje  $L$  rádovo rovné menovateli, a teda pre  $L \rightarrow \infty$  je rýchlosť „modulovaná“ sínusom v menovateli a v určitých úsekoch tienidla sa blíži k nekonečnu. Samozrejme sa nerozprávame o skutočnom nekonečne, vtedy by sa laser nikdy k tienidlu ani nedostal, podstatou je, že dostaneme ľubovoľne veľkú rýchlosť.

Zostáva už len kvalitatívny popis vývoja rýchlosti svetelného bodu na tienidle v myšlienkovom experimente zo zadania. Vidíme, že zo začiatku bude svetelný bod zotrvať na tienidle v polohe zodpovedajúcej lúču  $R$  (začiatok experimentu), potom, keď informácia o pohybe lasera docestuje k tienidlu, sa bod začne hýbať smerom k stredu svojej dráhy, určenému lúčom s dĺžkou  $L$ , pričom sa daná rýchlosť na ceste k stredu zvyšuje ( $l(t)$  sa zkracuje). V okolí stredu dosiahne svoje maximum, a potom bude spomaľovať až ku druhému bodu určenému druhým lúčom s dĺžkou  $R$ .

Otázka na záver pre čitateľa: prečo to neodporuje špeciálnej teórii relativity?

## Úloha VI.5 ... gadoliniová koule

*Jaké najmenší množství gadolinia 148 je nutné dát k sobě dohromady, aby se svým jaderným rozpadem zahřívalo tak, že by došlo k lokálnímu tavení? Uvažujte, že probíhají pouze rozpady  $\alpha$  a že materiál je ve vzduchu pokojové teploty.*

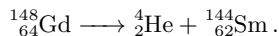
*Karel přemýšlel nad prvky a Matěj Rz. ho změnil.*

Úloha kombinuje více jevů

1. jaderný rozpad,
2. interakce záření s hmotou,
3. sdílení tepla.

### Teorie

Teorie týkající se jaderného rozpadu a interakce záření s hmotou potřebná k této úloze, je v úloze T.5 z Fyziklání 2021.<sup>40</sup> Jádro  $^{148}\text{Gd}$  je nestabilní a rozpadá se. Jelikož jde o těžké jádro, rozpadá se  $\alpha$  rozpadem<sup>41</sup>

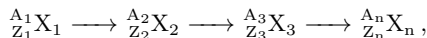


<sup>40</sup><https://fyziklani.cz/download/2021/reseni.pdf>

<sup>41</sup><http://nucldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

Při rozpadu se uvolňuje značné množství energie (v literatuře známé jako „Q-value“) – v našem případě 3271 keV na 1 rozpad.<sup>42</sup>

Při jaderném rozpadu je nutno zmínit, že dceřiné jádro<sup>43</sup> se také může rozpadat. Zde toto vlastně vůbec nemusíme řešit, protože zadání říká, že koule je z <sup>148</sup>Gd. Kdybychom zadali, že je potřeba uvažovat časovou závislost, problém by se trochu zkomplikoval. Zde máme ten jednodušší případ – <sup>148</sup>Gd se rozpadá pouze rozpadem alfa<sup>44</sup> a dceřiné <sup>144</sup>Sm je stabilní.<sup>45</sup> V případě, že bychom měli kaskádu po sobě jdoucích rozpadů



dostali bychom soustavu diferenciálních rovnic, tzv. Batemanovy rovnice.<sup>46</sup> Jejich řešením bychom dostali časové závislosti množství jader  $N_i(t)$ , resp. jejich aktivit  $A_i(t)$  a z nich pak tepelný výkon v čase.

Částice  $\alpha$  jsou těžké a nabitě, proto interagují s hmotou intenzivně, a tedy se rychle zastavují. Konkrétně zde máme na mysli elektromagnetickou interakci částice  $\alpha$  (s nábojem +4e) s nabitými částmi okolní hmoty (jádra, elektrony), která vede k ionizaci okolního prostředí. Pro představu toho, jak rychle částice  $\alpha$  interaguje, uvedme, že její střední volná dráha ve vzduchu je sotva 20 cm nebo se (dle známé poučky<sup>47</sup>) dá zastavit listem papíru. Z tohoto důvodu můžeme předpokládat, že vzniklé  $\alpha$  částice se zastaví ještě v materiálu (Gd) a předají mu energii. Součet energií všech rozpadů pak vede k nezanedbatelnému tepelnému výkonu a tedy k zahřívání materiálu.<sup>48</sup> Tepelný výkon na jednotku objemu  $P_V$  pak můžeme odvodit přímo z definice

$$P_V = \frac{Q\Lambda N_A \rho}{M}, \quad (14)$$

kde  $Q$  je Q-value,  $\rho$  je hustota,  $M$  je molární hmotnost,  $\Lambda = (\ln 2)/T$  je rozpadová konstanta a  $N_A$  je Avogadrova konstanta. Součin  $\Lambda N_A$  má význam aktivity 1 molu materiálu, tj. kolik jader se rozpadne za 1 s v 1 molu látky.

Přenos tepla se realizuje

- kondukcí (neboli *vedením*),
- konvekcí (neboli *prouděním*),
- radiací (neboli *zářením*).

Kondukcce je realizována srážkami atomů nebo kmity krystalické mřížky<sup>49</sup> – proto je typicky výraznější v pevných látkách, hlavně v kovech. V tekutinách existuje

<sup>42</sup><http://nuclldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

<sup>43</sup> „mateřské jádro“ je původní (na levé straně rovnice), „dceřiné“ je nově vzniklé (na pravé straně rovnice)

<sup>44</sup><http://nuclldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

<sup>45</sup><http://nuclldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=620144>

<sup>46</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Bateman\\_equation](https://en.wikipedia.org/wiki/Bateman_equation)

<sup>47</sup>[https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Alfa\\_beta\\_gamma\\_neutron\\_radiation.svg](https://commons.wikimedia.org/wiki/File:Alfa_beta_gamma_neutron_radiation.svg)

<sup>48</sup> Ne zcela – částice vzniklé blízko okraje materiálu, které jsou emitovány směrem ven, mohou uniknout a tedy svoji energii předají okolí (zde vzduchu). Jelikož se tato vrstva dá omezit určitou hloubkou, její význam klesá s tloušťkou materiálu.

<sup>49</sup> Z tohoto důvodu můžeme říct, že se tepelné vzruchy šíří rychlostí zvuku, neboť mechanismus je stejný.

tuje také, ale většinou je zanedbatelná kvůli větším meziatomárním vzdálenostem. Pro obecný popis kondukce slouží rovnice vedení tepla

$$a \nabla^2 T + \frac{P_V}{\rho c_p} = \frac{dT}{dt}, \quad (15)$$

kde  $a = \lambda/\rho c_p$  je součinitel teplotní vodivosti ( $\lambda$  je součinitel tepelné vodivosti,  $c_p$  je měrná tepelná kapacita),  $T$  je teplota,  $\rho$  je hustota materiálu a  $t$  je čas. Rovnice popisuje bilanci tepla v systému. Vstupními veličinami jsou vlastnosti materiálu a geometrie, řešením pak získáme teplotní profil, tj. závislost  $T(x, y, z, t)$ .

Konvekce je realizována přesunem hmoty – tj. atomy skutečně mění svou rovnovážnou polohu, pohybují se často po komplikovaných trajektoriích. Z tohoto důvodu o ní hovoříme u tekutin. Podle působení vnějších sil odlišujeme nucenou konvekci, kde je proudění tekutiny hnáno nějakou vnější silou (např. prací čerpadla), a přirozenou, která funguje díky vztakovým silám vznikajícím v důsledku teplotní roztažnosti tekutiny – horká tekutina má menší hustotu, proto vlivem vztakových sil stoupá vzhůru.

Z hlediska množství tepla odvedeného z jednotkové plochy je výraznější nucená konvekce, v absolutním měřítku je pak významnější přirozená, neboť se realizuje i ve velkých systémech (jako je zemská kůra nebo hvězdy).

Sdílení tepla radiací je realizováno přímo uvolňováním fotonů. Každý předmět s nenulovou (absolutní) teplotou vyzařuje. Zářivost (množství energie předané radiací za 1 s jednotkovou plochou) je daná vztahem

$$M_e = \sigma T^4, \quad (16)$$

kde  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2} \cdot \text{K}^{-4}$  je Stefan-Boltzmannova konstanta.<sup>50</sup> Konstanta  $\sigma$  je malá, ale člen  $T^4$  roste rychle, proto je pro vysoké teploty radiace dominantní. Jelikož vyzařují všechny objekty, musíme k získání energetické bilance od vyzařené energie odečíst energii přijatou absorpcí záření z okolního prostředí

$$M_{e,\text{ef}} = M_{e,\text{plocha}} - M_{e,\text{okolí}} = \sigma (T_{\text{plocha}}^4 - T_{\text{okolí}}^4).$$

Výše uvedený vztah potřebuje ještě korekci na odrazivost – ne všechno dopadající záření se absorbuje – něco se odrazí. Poměrnou část absorbované energie vyjadřuje absorpance  $\alpha$

$$M_{e,\text{ef}} = M_{e,\text{plocha}} - \alpha M_{e,\text{okolí}} = \sigma (T_{\text{plocha}}^4 - \alpha T_{\text{okolí}}^4).$$

### Výpočet

K tavení potřebujeme, aby teplota v nejteplejším místě byla vyšší než teplota tavení. Z tabulek<sup>51</sup> zjistíme teplotu tavení  $T_{\text{melt}} = 1585 \text{ K}$ . Zamysleme se nad tím, v jaké geometrii dosáhneme v daném množství materiálu největší teplotu ve středu. Tu získáme, pokud

<sup>50</sup>Odvození je nad rámec této úlohy. Pro zvědavé řešitele prozradíme, že vztah vznikl integrací Planckova vyzařovacího zákona přes všechny vlnové délky a přes prostorový úhel.

<sup>51</sup><https://www.webelements.com/gadolinium/thermochemistry.html>

- minimalizujeme plochu, protože zmenšením plochy snížíme přestup tepla, tedy k ustálení rovnováhy se objekt bude muset více zahřát,
- maximalizací vzdálenosti „nejvíc vnitřního“ bodu od okraje – protože teplota roste směrem od povrchu.

Bez důkazu použijme fakt, že výše uvedené vlastnosti splňuje koule. Jelikož je koule pevná, bude přestup tepla realizován hlavně vedením – proto řešíme rovnici vedení tepla (15) v kulové geometrii. Chceme řešit stacionární stav (tj. stav, který nastane po dostatečně dlouhé době, kdy bude systém v rovnováze a už se nebude měnit v čase). Proto bude pravá strana rovnice rovna nule

$$a\nabla^2 T + \frac{P_V}{\rho c_p} = 0. \quad (17)$$

Pro další ulehčení můžeme celou rovnici vydělit  $a$  a dostaneme

$$\nabla^2 T + \frac{P_V}{\lambda} = 0. \quad (18)$$

Laplaceův operátor v kulové geometrii (za předpokladu, že problém je závislý pouze na radiální souřadnici<sup>52</sup>) je

$$\nabla_{\text{sph}}^2 = \frac{\partial^2}{\partial r^2} + \frac{2}{r} \frac{\partial}{\partial r} = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial}{\partial r} \right).$$

Dosazením do (18) dostáváme

$$\begin{aligned} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) + \frac{P_V}{\lambda} &= 0, \\ \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial T}{\partial r} \right) &= -\frac{P_V}{\lambda} r^2, \\ r^2 \frac{\partial T}{\partial r} &= -\frac{P_V}{3\lambda} r^3 + C_1. \end{aligned}$$

Jako okrajovou podmínku volme, že uprostřed koule je maximum, tj.

$$\frac{\partial T}{\partial r}(r = 0) = 0 = C_1.$$

Pokračujeme další integrací

$$\begin{aligned} r^2 \frac{\partial T}{\partial r} &= -\frac{P_V}{3\lambda} r^3, \\ \frac{\partial T}{\partial r} &= -\frac{P_V}{3\lambda} r, \\ T(r) &= -\frac{P_V}{6\lambda} r^2 + C_2. \end{aligned}$$

<sup>52</sup>Což zde není zcela pravda, viz diskusi.

Nakonec použijeme okrajovou podmínku na známou teplotu ve středu  $T(r = 0) = T_{\text{in}}$

$$T(r) = T_{\text{in}} - \frac{P_V}{6\lambda} r^2,$$

pro teplotu na okraji pak platí

$$T(R) = T_{\text{in}} - \frac{P_V}{6\lambda} R^2. \quad (19)$$

Teplotu na okraji určíme z podmínky, že celý tepelný výkon koule musí být odveden. Počítat přirozenou konvekci by bylo složité, proto udělejme pro začátek odhad, že všechno teplo je do okolí předáváno radiací a že absorpance je 1, tj. vše, co na kouli dopadne, je pohlceno. Pak

$$P_V V = SM = S\sigma (T_{\text{surf}}^4 - T_{\text{out}}^4). \quad (20)$$

Dosažením za objem a povrch koule a za teplotní průběh v kouli dostaneme

$$T_{\text{in}} = \frac{P_V}{6\lambda} R^2 + \sqrt[4]{\frac{P_V}{3\sigma} R + T_{\text{out}}^4}. \quad (21)$$

Explicitně vyjádřit  $R$  tak, aby  $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$  by bylo náročné, můžeme si pomoci vykreslením grafu  $T_{\text{in}}(R)$  a najdeme, kde nastane  $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$ . Postupně použijeme  $T_{1/2} = 74,6$  y (z Nuclear Data Search<sup>53</sup>) na získání rozpadové konstanty  $\Lambda$ , dále pak  $Q = 3271,21$  keV (tentýž zdroj),  $N_{\Lambda} = 6,022 \cdot 10^{+23}$  mol<sup>-1</sup> (Avogadrova konstanta),  $\rho = 7900$  kg·m<sup>-3</sup> (z Wikipedie<sup>54</sup>) a  $M = 0,148$  kg·mol<sup>-1</sup> (nic lepšího jsme nenašli) do vztahu (14) a získáme  $P_V$ . Dále  $T_{\text{out}} = 293,15$  K (ze zadání) a  $\lambda = 10,6$  W·m<sup>-1</sup>K<sup>-1</sup> (taktéž z Wikipedie) do (21) a dostaneme závislost na obr. 12. Oblíbenou numerickou metodou nebo hrubou silou zjistíme

$$R = 7,01 \text{ cm}.$$

Z toho vyplývá  $m = 11,4$  kg.

### Vliv přirozené konvekce

Pojďme vyhodnotit vliv přirozené konvekce – ve výpočtech výše jsme ji zanedbali, ale nijak jsme to neobhájili. Do bilanční rovnice (20) přidáme člen za přirozenou konvekci  $q_{\text{conv}}$

$$P_V V = S (\sigma (T_{\text{surf}}^4 - T_{\text{out}}^4) + q_{\text{conv}}). \quad (22)$$

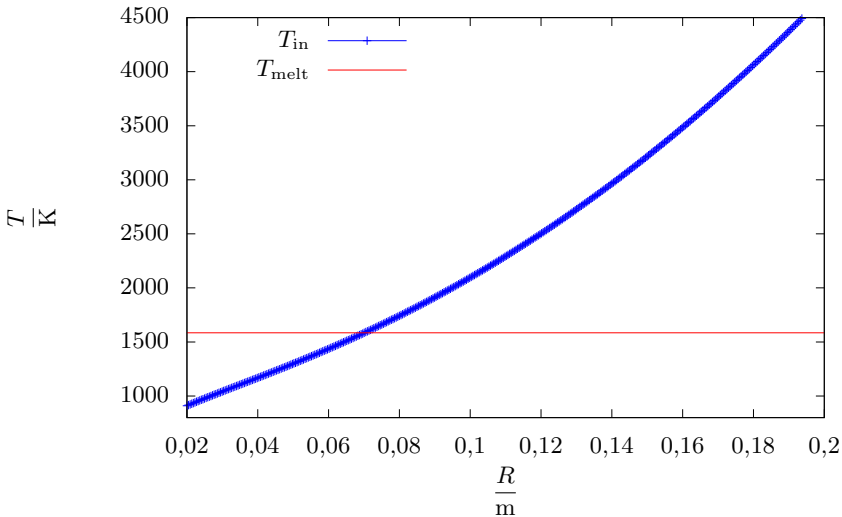
Tento člen  $q_{\text{conv}}$  musíme určit. Pro přenos tepla mezi 2 médii se obecně používá Newtonův vztah

$$q_{\text{conv}} = \alpha (T_{\text{surf}} - T_{\infty}),$$

kde  $T_{\infty}$  je „teplota dostatečně daleko v okolním médiu“, neboť tekutina v bezprostřední blízkosti horké koule bude mít teplotu vyšší. Potřebujeme najít součinitel

<sup>53</sup><http://nucldata.nuclear.lu.se/toi/nuclide.asp?iZA=640148>

<sup>54</sup><https://en.wikipedia.org/wiki/Gadolinium>



Obr. 12: Závislost teploty  $T_{in}$  ve středu koule v závislosti na poloměru za předpokladu, že teplo je předáváno do okolí pouze radiací.

$\alpha$  – ten je dán typem povrchu, tvarem a typem proudění – které je zase ovlivněno teplotou stěny, takže máme problém s příliš mnoho neznámými. Obecně  $\alpha$  roste s rozdílem  $T_{surf} - T_{\infty}$ , protože vyšší nahřátí stěny způsobí větší rozdíl hustot okolního vzduchu, což ve výsledku způsobí intenzivnější přirozené proudění. Přesný analytický výpočet neexistuje. Můžeme buď použít numerické řešení Navier-Stokesových rovnic s přenosem tepla, což umí většina moderních CFD softwarů,<sup>55</sup> nebo použít podobnostní teorie a empirické korelace. Ukažme si tedy odhad pomocí podobnostní teorie (necht nám teoretici odpustí). Pro výpočet  $\alpha$  můžeme použít Nusseltovo podobnostní číslo definované jako

$$Nu = \frac{\alpha L}{\lambda},$$

kde  $L$  je charakteristický rozměr – v případě koule průměr. A Nusseltovo číslo  $Nu$  máme z korelace<sup>56</sup>

$$Nu = \left(2^{0,816} + 0,15Ra_D^{0,277}\right)^{1/0,816},$$

kde  $Ra_D$  je Rayleighovo podobnostní číslo, definováno jako

$$Ra_D = \frac{g\beta}{\nu\alpha} (T_{surf} - T_{out}) D^3,$$

<sup>55</sup>CFD je z *Computational Fluid Dynamics* – typicky založeno na metodě konečných objemů. Příklady používaných kódů jsou ANSYS Fluent, Siemens StarCCM+ nebo OpenFOAM.

<sup>56</sup><https://thermopedia.com/content/786/>



kde  $g$  je tíhové zrychlení,  $\beta$  je koeficient teplotní objemové roztažnosti,  $\nu$  je kinematičká viskozita a  $D$  je charakteristický rozměr – zde průměr. Po všech dosazeních dostaneme

$$\sigma (T_{\text{surf}}^4 - T_{\text{out}}^4) + \frac{\lambda}{2R} (T_{\text{surf}} - T_{\text{out}}) \cdot \left( 2^{0,816} + 0,15 \left( \frac{g\beta}{\nu a} (T_{\text{surf}} - T_{\text{out}}) \cdot 8R^3 \right)^{0,277} \right)^{1/0,816} - \frac{1}{3} P_V R = 0, \quad (23)$$

zde bychom ještě měli dosadit ze vztahu (19) pro převod  $T_{\text{surf}}$  na  $T_{\text{in}}$ , nakonec vyjádřit  $T_{\text{in}}$  v závislosti na  $R$  a zjistit, odkud bude  $T_{\text{in}} > T_{\text{melt}}$  – anebo obráceně, dosadit  $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$  a vyřešit pro  $R$ . Rovnice je už tak velmi ošklivá, dosadíme  $T_{\text{in}} = T_{\text{melt}}$ , na počítači vypočítáme levou stranu rovnice (23) pro různá  $R$  a najdeme, kdy bude rovna nule. Dostaneme

$$R = 12,42 \text{ cm},$$

čemuž odpovídá hmotnost 63,34 kg. Mějme však na paměti, že vztahy jsou přibližné a vždy bychom se měli zajímat o jejich podmínky platnosti.

Ukázali jsme tedy, že původní předpoklad o dominantní radiaci byl špatný. Můžeme si jen pro zajímavost dopočítat, že povrchová teplota koule je 374 K, což vskutku není mnoho – mezi slupkou koule a vnitřkem je rozdíl přes 1 200 K, což je důsledek kombinace objemového zdroje tepla a spíše špatné tepelné vodivosti (pro příklad uveďme, že oceli mají zhruba  $8 - 60 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ , hliník dokonce přes  $200 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ; naopak izolační materiály jako polystyren  $0,3 \text{ W}\cdot\text{m}^{-1}\cdot\text{K}^{-1}$ ).

Nakonec ještě okomentujme předpoklad ze zadání, že nedochází ke štěpení. To nemůžeme říct zcela jistě – jen je problém, že pro štěpení nemáme dost dat, protože izotop  $^{148}\text{Gd}$  se v přírodě běžně nevyskytuje ani se běžně nepoužívá (Gd se běžně používá jako vyhořívající absorbátor do jaderných reaktorů, ale tam se uplatňují hlavně  $^{155}\text{Gd}$  a  $^{157}\text{Gd}$ ).

Kvůli vzácnosti tohoto izotopu je také úloha nereálná – je těžko představitelné, že by se někde nacházel  $\alpha$  zářič v tak velkém množství. Když už, šlo by o velmi malá množství. Úloha byla inspirována radioizotopovými termoelektrickými generátory, kde se  $\alpha$  zářiče skutečně používají k výrobě tepla – např. izotop  $^{238}\text{Pu}$  v MMRTG<sup>57</sup> na roveru Curiosity.

### Dodatek – jaderná data

V úloze jsme data brali z „různých“, někdy až „příliš otevřených zdrojů“. Pro úlohu do FYKOSu to není problém, ale v akademických pracích by uvedené zdroje nemuly být brány jako „dostatečně věrohodné“. Dále v komplikovanějších výpočtech by bylo potřeba ještě více dat – různé poločasy rozpadu, druh a energie produktů rozpadu; v případě neutronických výpočtů pak i účinné průřezy. Z výše uvedených důvodů je vhodné mít všechna data na jednom místě a někým ověřená.

<sup>57</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Multi-mission\\_radioisotope\\_thermoelectric\\_generator](https://en.wikipedia.org/wiki/Multi-mission_radioisotope_thermoelectric_generator)

Proto existujú ENDF (*Evaluated Nuclear Data File*). Pro jednotlivé izotopy existujú ENDF soubory obsahujúci různá data – účinné průřezy, produkty rozpadu, parametry jádra, . . . Existují celé knihovny ENDF souborů jako např. evropská knihovna JEFF nebo americká ENDF/B. Knihovny se typicky považují za důvěryhodný zdroj<sup>58</sup>

Ukažme si na této úloze, jak v jaderných datech vyhledávat. Jedním z dostupných nástrojů je JANIS<sup>59</sup>. Na hlavní stránce volíme tlačítko „Browse“, dále „Radioactive data“. Zvolíme knihovnu – např. JEFF-3.3. Dále „Radioactive decay data“, „Gd“, „<sup>148</sup>Gd“. Otevře se nám prázdné okno vizualizéru a dole v tabulce rozklikneme seznam „Decay data“ a v řádku „Discrete Alpha“ volíme  $T$ . V okně vizualizéru by se měla otevřít nová záložka s tabulkou s jedním řádkem 3 182 800 eV, tedy námi použitá hodnota se trochu lišila. Podobný postup bychom mohli použít pro jiná data týkající se nějakého izotopu a jeho rozpadů a reakcí.

## Úloha VI.P . . . zem na plné obrátky

*Odhadněte horní limit práce za čas, kterou je možné na Zemi dlouhodobě vykonávat. Planeta musí zůstat obyvatelná a pokud možno se stejným klimatem i pro další generace.*

*Jáchymovi se přehřívá notebook.*

### Úvodné slová

Na začiatok sa budeme musieť poriadne zamyslieť nad tým, ako si vyložíme zadanie, pretože od toho záleží aj to, ako budeme pristupovať k riešeniu tejto úlohy a ktoré faktory nás budú limitovať. V texte budeme hovoriť veľa o energii, pre nás najdôležitejšia energia bude elektrická, pretože sa ľahko premieňa na iné formy energie, a teda aj na prácu.

**Ekológia, biosféra a klíma** Planéta má zostať obývateľná, to znamená že naše vykonávanie práce a získavanie potrebnej energie nemôže vážne narušovať biosféru Zeme. Z tohto pohľadu je nevhodné, napríklad, celý povrch pokryť solárnymi panelmi, pretože by pohltili všetko dopadajúce slnečné žiarenie, a tým pádom by nutne žiadne nezostalo rastlinám, bez ktorého by nemohli prežiť. Asi netreba ďalej rozoberať, že bez rastlín by sa následne zrútil celý potravinový reťazec, postupne vyhynula väčšina foriem života a planéta by sa stala neobývateľnou. Preto budeme potrebovať vysokovýkonné zdroje energie, ktoré nebudú zaberáť veľa miesta, prípadne ich bude možné umiestniť pod povrch Zeme.

Druhým dôležitým faktorom pre biosféru je priemerná teplota planéty. Tú ovplyvňuje viacero faktorov. Jedným z najdôležitejších bude globálne otepľovanie, ktoré súvisí s množstvom skleníkových plynov v atmosfére. Ak máme dlhodobo vyrábať energiu a konať prácu (o tom ako dlho by to dlhodobo malo byť sa pobavíme

<sup>58</sup>Pořád se liší množstvím dat a obecně poskytují trochu jiné výsledky. Akademici pak mají své favority, takže „vhodnost“ dat použitých na výpočet může být předmětem dlouhých debat.

<sup>59</sup>JANIS je pouze k prohlížení a vizualizaci jaderných dat, nejde o knihovnu. Je dostupná na <https://oecd-nea.org/janisweb/>

neskôr), tak nutne chceme vypúšťať čo najmenej skleníkových plynov, najlepšie žiadne. Z tohto pohľadu sú fosílna palivá nevhodné (tie sú nevhodné aj z pohľadu udržateľnosti, ale o tom neskôr).

Väčšina odborníkov sa zhoduje, že k veľkým ekonomickým, sociálnym a ekologickým škodám dôjde, ak priemerná teplota Zeme stúpne o 2 °C v krátkom čase.<sup>60</sup>

**Udržateľnosť** Na dlhodobé vykonávanie práce budeme potrebovať spoľahlivý udržateľný zdroj energie. No a čo si máme predstaviť pod pojmom udržateľný? Možno sme si predstavili obnoviteľný zdroj energie a za to si nemôžeme nič vyčítať, pretože to nám vtĺkajú do hláv už od nepamäti. Pravda je taká, že nič ako obnoviteľný zdroj energie neexistuje. Energia sa nedá vyrobiť, môžeme len premeniť jednu formu energie na nejakú inú, ktorú vieme lepšie použiť. Veterné elektrárne využívajú energiu vetra, prípadne vzdušných prúdov, vodné elektrárne zase energiu kolobehu vody. Vietor vzniká v dôsledku rozdielov tlakov, a tie môžu vzniknúť napríklad rozdielnou teplotou. Rozdielnu teplotu môže zabezpečiť slnečná energia. Vyparovanie je dôležitou súčasťou kolobehu vody a energiu na vyparovanie opäť dodáva Slnko. A Slnko nebude energiu dodávať večne, pretože za cca 5 miliárd rokov spáli väčšinu paliva (vodíka a hélia) a stane sa z neho biely trpaslík. Z tohto kontextu nemôžeme ani hviezdy považovať za obnoviteľný zdroj energie.

Hrá tu úlohu aj 2. termodynamický zákon, z ktorého, okrem iného, vyplýva, že celý vesmír speje k nevyhnutnej „tepelnej smrti“. k tomuto zákonu sa ešte vrátíme.

O hviezdach a vyššie spomenutých *obnoviteľných* zdrojoch energie avšak môžeme hovoriť v kontexte udržateľnej energie, pretože ju môžeme čerpať rádovo viac ako desiatky tisíc rokov. Povedzme, že zdroj energie budeme pokladať za udržateľný ak by vydržal viac ako tisíc rokov (počas tejto doby by aj tak pokročila technológia a fyzici by sa pozerali na túto úlohu inak).

**Zdroj energie** Budeme potrebovať výkonný zdroj energie, ktorý nezaberie veľa miesta. Obnoviteľné zdroje energie nie sú vhodné, kvôli nespoľahlivosti (produkcia závisí od počasia) a potrebe veľkého množstva miesta (nízkej hustoty výkonu). Vhodnejším kandidátom sa zdá byť štepna alebo fúzna jadrová energia.

### *Model horného odhadu*

V nasledujúcej časti navrhne model, ktorým sa budeme snažiť odhadnúť horný limit možnej vykonávajúcej práce bez ohľadu na to, či potrebnú energiu sme schopný získať. Avšak aj na získavanie energie si necháme nejaké reštrikcie, a to najmä druhý termodynamický zákon. V modeli sa zameriame hlavne na množstvo odpadovej tepelnej energie, ktorú Zem dokáže vyžiarit do okolia bez toho, aby priemerná teplota na jej povrchu stúpala o 2 °C.

<sup>60</sup><https://www.britannica.com/science/global-warming>

**Súčasná energetická bilancia Zeme - bez vykonávania práce** Priemerná teplota povrchu Zeme bola v pred industriálnej ére  $13,7^{\circ}\text{C}$ .<sup>61</sup> Súčasne vieme, že zo Slnka na Zem dopadá  $P_{\text{S}} = 173\,000\text{ TW}$  energie a ďalších  $P_{\text{J}} = 47\text{ TW}$  z jadrových rozpadov v kôre,<sup>62</sup> vidíme, že táto hodnota je úplne zanedbateľná oproti energii dopadajúcej zo Slnka, čiže stačí brať  $P_{\text{S}} + P_{\text{J}} \approx P_{\text{S}}$ . Zem musí vyžarovať energiu s rovnakým výkonom, aby bola v termodynamickej rovnováhe. Budeme predpokladať, že Zem vyžaruje ako čierne teleso. Tušíme, že Zem nie je úplne čierne a preto doplníme ešte konštantu  $\varepsilon$ , ktorú dopočítame. Bilancia energie teda bude s použitím Stefan-Boltzmannovho vzťahu vyzeráť nasledovne

$$P_{\text{S}} = \varepsilon\sigma ST^4,$$

kde  $\varepsilon$  bude predstavovať dopočítanú emisivitu Zeme,  $\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8}\text{ W}\cdot\text{m}^{-2}\cdot\text{K}^{-4}$  je Stefan-Boltzmannova konštanta,  $S$  povrch Zeme a  $T = 13,7^{\circ}\text{C}$  priemerná teplota povrchu. Po dosadení za povrch Zeme  $S = 4\pi R^2$ , kde  $R = 6378\text{ km}$  dostaneme pre emisivitu vzťah

$$\varepsilon = \frac{P_{\text{S}}}{4\pi R^2\sigma T^4},$$

po dosadení číselných hodnôt  $\varepsilon \approx 0,88$ .

**Trochu termodynamiky** Pri konaní akejkoľvek práce vzniká odpadové teplo, rovnako tak aj pri tvorení elektrickej energie, ktorú budeme používať. Konec koncov po uplynutí dosť dlhého času sa na teplo zmení každá vykonaná práca. V dlhodobom horizonte nás teda zaujíma, len aký výkon navyše dokáže Zem vyžiariť, aby sa jej povrchová teplota nezvýšila o viac ako  $2^{\circ}\text{C}$ . Tento celkový výkon bude pozostávať z odpadového tepla z výroby elektrickej energie a z vykonávania práce, čo spolu bude predstavovať tepelnú energiu, ktorá bola vyprodukovaná na výrobu elektrickej energie v reaktore.

**Množstvo tepla, ktoré vie Zem vyžiariť navyše** Teraz odhadneme, aký veľký tepelný výkon by Zem vyžarovala navyše, keby sa jej povrch zahrial o  $2^{\circ}\text{C}$ . k jeho výpočtu upravíme vzťah použitý v kapitole o energetickej bilancii Zeme. Upravíme ho na tvar

$$P + P_{\text{S}} = 4\pi R^2\sigma\varepsilon(T + 2^{\circ}\text{C})^4,$$

kde  $P$  je tepelný výkon, ktorý by Zem vyžarovala navyše. Vyjadrením dostaneme tvar

$$P = 4\pi R^2\sigma\varepsilon(T + 2^{\circ}\text{C})^4 - P_{\text{S}},$$

a po dosadení a vyčíslení  $P = 4\,600\text{ TW}$ . V roku 2021 bola celková energetická spotreba na Zemi  $176\,000\text{ TWh}$ <sup>63</sup>, čo predstavuje priemerný výkon  $20\text{ TW}$  počas roka. Ako môžeme vidieť, globálne oteplovanie nebude spôsobené tým, že vyrábame príliš veľa energie, ale skôr tým ako ju vyrábame a čo pri tom vypúšťame.

<sup>61</sup><https://www.climate.gov/news-features/understanding-climate/climate-change-global-temperature>

<sup>62</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Earth%27s\\_internal\\_heat\\_budget](https://en.wikipedia.org/wiki/Earth%27s_internal_heat_budget)

<sup>63</sup><https://ourworldindata.org/energy-production-consumption>

**Druhý termodynamický zákon alebo niečo o účinnosti** Druhý termodynamický zákon tvrdí, že najvyššia účinnosť, ktorú môže mať tepelný stroj medzi horúcejším tepelným rezervoárom s teplotou  $T_H$  a chladnejším tepelným rezervoárom s teplotou  $T_S$  je

$$\eta = \frac{T_H - T_S}{T_H},$$

čo udáva účinnosť Carnotovho cyklu. Druhý termodynamický zákon vylučuje existenciu perpeta mobile II. druhu, kedy by sa všetka tepelná energia premenila na mechanickú energiu. Naše tepelné elektrárne teda nemôžu mať vyššiu účinnosť, než udáva vzťah vyššie.

**Užitočná práca, ktorú vieme vykonávať** Jadrová, geotermálna, prípadne aj fúzna elektrárňu bude používať parnú turbínu na tvorbu mechanickej a následne elektrickej energie. V turbínach aj potrubiach bude prúdiť prehriata para pod vysokým tlakom. Uvádza sa, že materiálové limity na teplotu takejto pary sú cca 650 °C. Uvažujme, že para vychádzajúca z turbíny bude mať 100 °C. Potom pre horný odhad účinnosti turbíny s použitím II. TMD zákona dostaneme približne 60 %. Tento odhad je vyšší, bežné turbíny majú účinnosť okolo 40 – 50% (kombinované plynové elektrárne môžu mať účinnosť aj jemne cez 60 %), ale tak budme optimisti.

S účinnosťou výroby energie 60 % môžeme teda dlhodobo na Zemi produkovať 2 800 TW elektrickej energie a ak na vykonávanie práce budeme používať elektromotory s účinnosťou 90 % tak môžeme vykonávať užitočnú prácu s výkonom 2 500 TW.

### *Produkcja potrebnej energie*

Takúto obrovskú spotrebu energie budeme musieť nejak zabezpečiť. V úvode sme vraveli, že napr. také solárne panely nie sú na to úplne vhodné. Celkový výkon 4 600 TW tvorí cca 3 % z celkovej slnečnej energie, ktorá dopadne na Zem. S uvažovaním, že 2/3 povrchu tvoria oceány by sme museli takmer desatinu povrchu nahradiť solárnymi panelmi (minimálne o dvoj až trojnásobok viac ak uvažíme, že časť panelov bude na odvrátenej strane kde bude tma alebo nebude tak efektívne produkovať energiu kvôli počasiu), čo by pre biosféru asi nebolo úplne vhodné. Na druhú stranu treba spomenúť, že táto energia by úplne nespôsobilala zahriatie Zeme, pretože by sme len časť solárnej energie premenili najskôr na elektrickú energiu a potom na prácu, pričom klasicky sa premieňa na teplo priamo.

Pri súčasnej produkcii jadrovými elektrárnami a so súčasnými odhadmi ložísk uránu na planéte by nám malo toto množstvo vystačiť na 230 rokov.<sup>64</sup> Avšak s lepšou technológiou sa môže tento čas až zdvojnásobiť. Ak by sme používali rýchle typy reaktorov, ktoré dokážu recyklovať použité palivo, tak by nám zásoby uránu mohli vystačiť až na 30 000 rokov, pri súčasnej spotrebe a produkcii energie. Ten istý zdroj tvrdí, že súčasná ročná produkcia energie v atómových elektrárnach je 2 800 TWh. V optimistickom modeli teda máme v uráne uložených  $84 \cdot 10^6$  TWh

<sup>64</sup><https://www.scientificamerican.com/article/how-long-will-global-uranium-deposits-last/>

energie, čo by pri maximálnej možnej spotrebe vydržalo okolo dvoch rokov. V moriach sa nachádza tiež veľké množstvo uránu, ktorý v súčasnosti nevieme extrahovať, no vyzerá to tak, že štiepenie na takúto prácu stačiť nebude. No na pomoc by sme si mohli zavolať silnejšieho súrodca, a to jadrovú fúziu.

**Súčasná možnosť fúzie** Hoci máme od funkčnej fúznej elektrárne ešte pomerne ďaleko, môžeme sa v tejto úlohe zaoberať jej teoretickým konceptom. V prvej generácii fúzných reaktorov sa predpokladá ako palivo deutérium a trícium v látkovom pomere 1 : 1. Pri jednej takejto zrážke sa uvoľní 17,6 MeV. Deutérium sa dá ľahko získať z morskej vody, s tríciumom je ale väčší problém, na jeho výrobu budeme potrebovať lítium.

**Množstvo líthia a deutéria** Na Zemi sa v oceánoch nachádza  $1,338 \cdot 10^9 \text{ km}^3$  vody v moriach a oceánoch.<sup>65</sup> Hustota morskej vody je premenlivá ale predpokladajme, že priemerná hustota bude do  $1020 \text{ kgm}^{-3}$ . Morská voda obsahuje aj rôzne rozpustné soli (okrem samotnej vody), predpokladajme, že množstvo rozpustených solí tvorí priemerne 4% hmotnosti vody, čím môžeme odhadnúť hmotnosť vody v Zemských oceánoch na  $1,35 \cdot 10^{18} \text{ t}$  vody. Molárna hmotnosť vody je  $18 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ , vodíka vo vode  $2 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$  (pozor, molekula vody totiž obsahuje dva atómy vodíka). Hmotnosť vodíka vo vode teda bude v pomere molárnych hmotností 2 : 18 a číselne pre hmotnosť vodíka v oceánoch dostaneme  $\approx 1,51 \cdot 10^{17} \text{ t}$ . Deutérium tvorí približne 0,031% hmotnosti všetkého vodíka v oceánoch,<sup>66</sup> teda náš odhad deutéria na Zemi činí  $4,7 \cdot 10^{13} \text{ t}$ .

Celkové množstvo lítia v ložiskách na Zemi sa odhaduje na  $89 \cdot 10^6 \text{ t}$ , pričom vyťažiteľných je  $22 \cdot 10^6 \text{ t}$ ,<sup>67</sup> okrem toho sa ešte nachádza vo väčšom množstve v morskej vode. My budeme predpokladať, že vieme vyťažiť všetko lítium v ložiskách, čo nám dáva  $89 \cdot 10^6 \text{ t}$  lítia.

Lítium sa v prírode vyskytuje v 2 izotopoch, a to  ${}^6\text{Li}$  a  ${}^7\text{Li}$ . Na produkciu trícia sa dajú použiť obidva izotopy (obidva dávajú trícium v látkovom pomere 1 : 1 z lítia), avšak  ${}^6\text{Li}$  je na to vhodnejší. Lítium je tvorené z 4,85% práve z  ${}^6\text{Li}$ , odkiaľ dostávame  $4,3 \cdot 10^6 \text{ t}$ , ktoré sú vhodné na využitie pri fúzii.<sup>68</sup>

**Energia ukrytá vo fúzii** Na prvý pohľad je jasné, že limitujúcim faktorom pre fúziu bude práve lítium (je ho výrazne menej, čo znamená aj menej trícia). Už máme všetko potrebné pre odhad energie, ktorý urobíme vzťahom

$$E = E_1 N = E_1 N_A \frac{m_{\text{Li}}}{M_{\text{Li}}},$$

---

<sup>65</sup><https://www.usgs.gov/special-topics/water-science-school/science/how-much-water-there-earth>

<sup>66</sup><https://en.wikipedia.org/wiki/Deuterium>

<sup>67</sup>[https://bettermeetsreality.com/how-lithium-is-left-in-the-world-will-we-run-out-what-happens-if-utm\\_content=expand\\_article](https://bettermeetsreality.com/how-lithium-is-left-in-the-world-will-we-run-out-what-happens-if-utm_content=expand_article)

<sup>68</sup><https://en.wikipedia.org/wiki/Lithium#Occurrence>

kde  $E$  je celková energia,  $E_1 = 17,6$  MeV predstavuje energiu uvoľnenú z jednej syntézy deutéria s trícium,  $N$  počet častíc, ktoré máme (pripomíname, že limitujúcim faktorom je lítium),  $N_A = 6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$  je Avogadrova konštanta,  $m_{\text{Li}} = 4,3 \cdot 10^6 \text{ t}$  je hmotnosť  ${}^6\text{Li}$  a  $M_{\text{Li}} = 6,02 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$  molárna hmotnosť  ${}^6\text{Li}$ . Po dosadení  $E = 7,57 \cdot 10^{36} \text{ MeV} \approx 336 \cdot 10^6 \text{ TWh}$ , čo vydrží na vykonávanie tak veľkej práce 8,3 roku.

Ak by sme sa rozhodli použiť aj o trochu horšie  ${}^7\text{Li}$ , tak by sme za  $m_{\text{Li}}$  dosadili celkovú hmotnosť lítia a za  $M_{\text{Li}}$  relatívnu molárnu hmotnosť lítia  $6,94 \text{ g}\cdot\text{mol}^{-1}$ . V takomto prípade by sa  $E = 1,36 \cdot 10^{38} \text{ MeV} \approx 6,04 \cdot 10^9 \text{ TWh}$ , čo by vydržalo na 24 rokov vykonávania práce.

### *Záver*

Teoreticky môžeme dlhodobo vykonávať prácu, bez zničenia klímy až s výkonom 2500 TW. Avšak, so súčasnými technologickými možnosťami by sme nedokázali vyprodukovať toľko energie, aby sme dokázali túto prácu vykonávať viac ako dve storočia.



## Zadání experimentálních úloh

### Úloha I.E ... hustý led

13 bodů

Změřte hustotu ledu.

(řešení str. 107)

### Úloha II.E ... reproduktor

12 bodů

Naměřte závislost hladiny intenzity zvuku vydávaného vašim reproduktorem/mobilem/počítačem na vzdálenosti od zdroje. Určete také závislost hladiny intenzity na nastavení výstupní hlasitosti (tzv. volume). Nezapomeňte data fitovat.

(řešení str. 115)

### Úloha III.E ... vybíjená

13 bodů

Třením nabijte předmět a poté proměřte závislost jeho samovolného vybíjení na čase. Určete elektrickou vodivost vzduchu. Uvažujte, že velikost náboje se mění jako

$$Q = Q_0 e^{-\frac{\sigma}{\varepsilon} t},$$

kde  $Q_0$  je počáteční náboj,  $\varepsilon$  je permitivita vzduchu a  $\sigma$  je hledaná vodivost.

*Nápověda:* Zavěste na tenké dlouhé vlákno malý kovový předmět (např. maticku). Třením nabijte brčko a přeneste část náboje na předmět. Měl by se od brčka začít odpuzovat. Z jejich vzájemné vzdálenosti pak určíte součin nábojů a poté vodivost.

(řešení str. 122)

### Úloha IV.E ... hodím si to

12 bodů

Mějme přes tyč omotané lano se závažím o hmotnosti  $m$  na jednom svém konci. Změřte závislost hmotnosti zátěže  $M$  na druhém konci potřebné k uvedení lana do pohybu na počtu obtočení lana kolem tyče.

(řešení str. 128)

### Úloha V.E ... mizící CD

12 bodů

Pomocí difrakce na mřížce určete hustotu zápisu dat na CD. Zkuste porovnat výsledky s DVD.

(řešení str. 130)

### Úloha VI.E ... minivlny

13 bodů

Sestavte aparaturu, která bude schopná měřit co nejmenší vlnky na povrchu kapaliny. Nádobu si můžete sami určit – může to být hrnek, láhev či něco jiného. Aparaturu celou řádně popište a vyfoťte. Určete, jakou minimální amplitudu jste schopni naměřit.

(řešení str. 135)





## Řešení experimentálních úloh

### Úloha I.E . . . hustý led

Změřte hustotu ledu.

Karlovi zamítli úlohu s ledem, tak vymyslel jinou.

#### Úvod

Na první pohled se může zdát, že se jedná o velmi jednoduchý úkol. Led však rychle odtává, což můžeme sice částečně eliminovat ochlazením nástrojů použitých k měření, ale i přesto je experiment velmi náročný na přesné provedení. Postupně si představíme tři metody, kterými lze hustotu ledu určit, a zhodnotíme jejich přesnost.

Hustotu  $\rho$  (hmotnostní) můžeme určit jako podíl hmotnosti  $m$  a objemu  $V$

$$\rho = \frac{m}{V}. \quad (24)$$

Objem můžeme měřit několika způsoby. Nejjednodušší je změřit rozměry tělesa a objem vypočítat. Objem je také možné určit ponořením do kapaliny. Jelikož má však led nižší hustotu než voda, je třeba jej buď zastrčit pod hladinu nebo použít kapalinu s nižší hustotou (například olej).

Další z možností je využití Archimédova zákona ve tvaru

$$V = \frac{m}{\rho_k}.$$

Zde budeme muset do ledu přidat závaží, aby se potopil, a také vhodně upravit výše uvedený vzorec. Odvození těchto vztahů lze najít v dodatku na konci tohoto řešení.

#### Metody měření

**1. metoda – určení objemu pomocí rozměrů kostky** Nejjednodušeji určíme hustotu ledu tak, že změříme jeho hmotnost, objem a následně provedeme výpočet dle vzorce 24.

Pro experiment byly použity dva kusy ledu ve tvaru válce. Jeden byl velmi malý o velikosti běžné kostky ledu, k vytvoření druhého byla použita kovová nádoba s kruhovou podstavou o průměru 12 cm.

Průměr malého kusu jsme měřili tak, že jsme polybovali pravítkem po podstavě a snažili se jej umístit do středu, dokud jsme nenaměřili co největší vzdálenost (průměr je nejdelší sečna kružnice). Naopak výšku jsme měřili tak, že jsme se snažili najít nejkratší (tedy kolmou) spojnicí obou postav. Takto jsme výrazně zvýšili přesnost obou měření. K měření bylo použito pravítko, chybu měření jsme odhadli na 0,2 cm. Běžně se bere jako chyba velikost nejmenšího dílku (případně

jeho polovina). V tomto případě ale měříme nerovný povrch (námi vytvořený kus ledu není ideální), výška i průměr mohou být na různých místech válce odlišné, proto jsme odhadli chybu měření o něco větší.

K měření průměru většího válce jsme potřebovali najít střed podstavy, to jsme provedli způsobem, že jsme na led pomocí fixu nakreslili sečnu, našli její střed a vedli jím kolmicí. Průsečík dvou takto vzniklých os jsme pak považovali za střed. Samotný průměr podstavy jsme měřili tak, aby hrana pravítka procházela třemi body, jedním z nich byl střed a další dva body ležely na okraji podstavy. Toto měření jsme následně provedli čtyřikrát. Výška válce byla měřena stejným způsobem jako u malého ledu, měření bylo provedeno třikrát.

Hmotnost jsme vždy určovali pomocí kuchyňské váhy s přesností 1 g. Tato přesnost je velmi nízká, bylo by lepší použít jemnější technické váhy.

V případě, že bychom si zvolili tuto první metodu měření, bylo by vhodné provést oněch měření výrazně více a hodnotu hustoty ledu určit jako průměr naměřených hodnot. Kromě opakování experimentu by bylo dobré zvolit lepší tvar tvořítka na led, u kterého by se lépe měřily rozměry, například velkou formu ve tvaru krychle. Čím větší led bude, tím bude menší relativní chyba měření jeho rozměrů.

**2. metoda – určení objemu pomocí ponoření do kapaliny** Další možností měření objemu je ponoření předmětu do kapaliny v odměrném válci, na jehož stupnici odečítáme, kolik daný předmět kapaliny vytlačil, a tedy jaký je jeho objem. K tomu je třeba použít kapalinu o nižší hustotě, než má těleso, aby byl předmět zcela ponořen. V případě ledu, který má hustotu kolem  $0,917 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ <sup>1</sup>, nemůžeme použít vodu (s hustotou  $0,997 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ ). Menší hustotu má například technický lín či řepkový olej, který jsme použili.

Pro zpřesnění výsledků je třeba alespoň částečně zabránit odtávání ledu. Všechny nástroje jsme proto předem ochladili v ledničce. K manipulaci s ledem jsme dále používali ochlazené dřevěné kleště.

Do odměrného válce jsme nalili vychlazený řepkový olej a ze stupnice odečetli jeho objem. Na kuchyňských vahách jsme určili hmotnost několika kousků ledu a vše postupně zaznamenávali do tabulky.

Jelikož kostky ledu jsou poměrně malé, používali jsme jich pro jedno měření více (vždy náhodný počet kolem 4–5 kostek), čímž jsme také snížili relativní chybu měření hmotnosti či objemu (chyba byla stále 1 g, ale místo 9 g led vážil okolo 50 g). Neurčovali jsme však průměrnou hmotnost či objem jedné kostky, poněvadž led jsme vytvořili tak, že se mezi sebou kostky drobně liší.

Po zvážení jsme led opatrně kleštěmi (aby nedocházelo k výraznému přenosu tepla z rukou na led) přendali do odměrného válce. V případě, že se kostky nepotopili celé, zatlačili jsme je pomocí vařečky opatrně pod hladinu. Jelikož řepkový olej má menší hustotu než led, kostky již zpět nevyplavaly. Opět jsme ze stupnice na odměrném válci určili objem jeho obsahu. Konzistentně jsme odčítali vždy

<sup>1</sup>MIKULČÁK, Jiří. Matematické, fyzikální a chemické tabulky pro střední školy. 14. vyd. Praha: SPN, 1985. Pomocné knihy pro žáky (Státní pedagogické nakladatelství).

od dolního (nebo vždy od horního) menisku, aby rozdíl těchto objemů odpovídal objemu vloženého ledu. Snažili jsme se postupovat velmi rychle, neboť led odtával a měnil se tak jeho objem.

Nejistotu měření objemu určíme jako hodnotu nejmenšího dílku, tedy 5 mm. Dílky byly poměrně velké, takže jsme rozlišovali i polovinu dílku, nicméně výsledný objem byl získán rozdílem těchto hodnot, celkovou chybu pak určíme jako odmocninu ze součtu kvadrátů chyb obou měření, tedy  $\sqrt{2,5^2 + 2,5^2} \doteq 4$ . Jelikož k drobné chybě mohlo docházet i špatným určením polohy horního či dolního konce hladiny, rozhodli jsme se chybu nechat větší - odpovídající velikosti jednoho dílku.

**3. metoda – určení hustoty pomocí Archimédova zákona** Posledním možným přístupem,<sup>2</sup> který si zde uvedeme, je využití Archimédova zákona. Jak je patrné ze vzorce 32, umíme pomocí něj určit objem ponořené části tělesa. Jelikož led má nižší hustotu než voda, bude se na hladině vznášet a nikdy se zcela neponoří. Z tohoto důvodu jsme při vytváření ledu do tvořítka přidali předmět o větší, známé hustotě (zde jsme použili tři ocelové hřebíky). Menší závaží by mohlo při odtávání ledu odpadnout, kdybychom jej nechali zamrznout na okraji ledu. Proto je vhodné zmrazit pouze část vody, na zamrzlou hladinu položit kovový předmět, nádobu na led dolít vodou a nechat opět zamrznout. Tak se nám podaří těleso umístit zhruba doprostřed ledu.

Následně jsme takto vytvořený kus ledu vložili do nádoby s vodou a nechali pozvolna rozpouštět. S ubývajícím množstvím ledu se objekt pomalu ponořoval. Počkali jsme, dokud neodtála taková část ledu, že se kostka celá ponořila a plovla pod hladinou, aby stále ještě byla v rovnováze vztlaková a tíhová síla (tedy předmět ještě nepadal ke dnu).

V tento moment jsme těleso vytáhli a vložili do prázdné nádoby. Zde jsme jej ponechali, dokud všechny led neroztál a následně jsme změřili hmotnost vody a hřebíků.



Obr. 13: Ledy

<sup>2</sup>Inspirováno textem [http://fyzikalniolympiada.cz/archiv/58/fo58d1\\_r.pdf](http://fyzikalniolympiada.cz/archiv/58/fo58d1_r.pdf)

### Výsledky

**1. metoda** Použitá malá kostka ledu válcového tvaru má průměr podstavy  $(2,5 \pm 0,2)$  cm a výšku  $(2,2 \pm 0,2)$  cm .

Objem vypočteme ze vzorce

$$V = \pi \left( \frac{d}{2} \right)^2 h .$$

Použitý kousek ledu měl hmotnost  $m = 9$  g. Nyní již můžeme vypočíst hustotu ze vzorce 24.

V rámci měření je potřeba spočítat chybu výsledku. Známe-li chyby naměřených veličin, můžeme pomocí nich a vzorce pro výpočet veličiny  $A$  spočítat její chybu  $\sigma_A$ . Pro jednoduché vzorce, kde se všechny veličiny vyskytují jen v součinu nebo podílu, platí, že relativní chyba<sup>3</sup> veličiny  $A$  je odmocnina za součtu kvadrátů relativních chyb měřených veličin. Vyskytuje-li se některá z těchto veličin v  $n$ -té mocnině, bereme relativní chybu této veličiny  $n$ -krát

$$\sigma_A = A \sqrt{\sum \left( \frac{n\sigma_{x_i}}{x_i} \right)^2} . \quad (25)$$

Zde pak  $n$  reprezentuje mocninu, s jakou se tato veličina ve vzorci vyskytuje.

V tomto případě je vztah pro výpočet chyby ve tvaru

$$\sigma_\rho = \rho \sqrt{\left( \frac{\sigma_h}{h} \right)^2 + \left( \frac{2\sigma_d}{d} \right)^2 + \left( \frac{\sigma_m}{m} \right)^2} .$$

Tímto postupem jsme určili hustotu ledu jako  $\rho_{\text{led}} = (0,8 \pm 0,3)$  g·cm<sup>-3</sup>. Chybu jsme zaokrouhlili na jednu platnou číslici, výsledek pak zaokrouhlíme tak, aby jeho poslední uvedená číslice byla stejného řádu jako chyba.

U velkého válce byly změřeny následující hodnoty (uvedené v tabulce s chybou, která byla získána jako odmocnina součtu kvadrátů směrodatné odchylky a chyby měřidla).

Tab. 9: Rozměry ledu o hmotnosti  $m = 354$  g ve tvaru velkého válce.

č.	$\frac{d}{\text{cm}}$	$\frac{h}{\text{cm}}$
1	12,5	3,0
2	12,6	3,1
3	12,8	2,7
4	–	2,9
průměr	$12,6 \pm 0,1$	$2,9 \pm 0,2$

<sup>3</sup>Relativní chyba je podíl absolutní chyby naměřené veličiny a její hodnoty.

Objem byl opět spočten ze vzorce

$$V = \pi \left(\frac{d}{2}\right)^2 h$$

a hustota jako podíl hmotnosti a objemu. Chybu jsme jsme opět určili jako

$$\sigma_\rho = \rho \sqrt{\left(\frac{\sigma_h}{h}\right)^2 + \left(\frac{2\sigma_d}{d}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_m}{m}\right)^2}.$$

Výsledná hodnota hustoty je pak  $\rho_{\text{led1velky}} = (0,94 \pm 0,06) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ .

**2. metoda** Měření s řepkovým olejem jsme provedli celkem 6krát, naměřené hodnoty jsou uvedeny v tabulce 10.

Chybu počítáme jako

$$\sigma_\rho = \rho \sqrt{\left(\frac{\sigma_m}{m}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_V}{V}\right)^2}. \quad (26)$$

Tab. 10: Experimentálně určené hodnoty hustoty ledu. Objem ledu byl měřen ponořováním do řepkového oleje.

č.	$\frac{m}{\text{g}}$	$\frac{V_{\text{bez ledu}}}{\text{cm}^3}$	$\frac{V_{\text{s ledem}}}{\text{cm}^3}$	$\frac{V_{\text{led}}}{\text{cm}^3}$	$\frac{\rho}{\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}}$
1	32	150	185	35	$0,9 \pm 0,1$
2	42	235	280	45	$0,9 \pm 0,1$
3	44	437	485	48	$0,9 \pm 0,1$
4	46	350	400	50	$0,92 \pm 0,09$
5	51	415	470	55	$0,93 \pm 0,09$
6	43	420	465	45	$1,0 \pm 0,1$

Hustotu určíme jako průměr hodnot z jednotlivých měření, kde nezahrneme poslední naměřenou (šestou) hodnotu, jelikož se od ostatních velmi odchyluje (hodnota spadá mimo interval  $3\sigma$ ). U tohoto měření patrně došlo k nějaké velké chybě a zbytečně by nám zkreslovalo výsledek. Průměrnou hodnotu je třeba doplnit směrodatnou odchylkou, tedy údajem, nakolik se naměřené hodnoty liší od průměru. Tato veličina je definována vzorcem

$$\sigma_{\text{sm. odch.}} = \sqrt{\sum \frac{(\bar{x} - x_i)^2}{n(n-1)}}.$$

Nesmíme ještě zapomenout na chybu metody, kterou máme uvedenou jako chybu jednotlivých hustot v předchozí tabulce. Jelikož jsme měření prováděli vždy

pro jiné množství ledu, chyba metody se zmenší  $\sqrt{N}$ -krát na  $0,1 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}/\sqrt{6} = 0,04 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  (hodnoty nejsou vždy stejné). Systematická chyba průměrné hodnoty je menší, jelikož systematické chyby způsobené tím, že by například kostka vážila vždy 7,4 g a váha ukázala nepřesnou hodnotu 8 g (to samé s objemem) se vyrušily při průměrování. Pravděpodobně totiž docházelo i k případům, kdy se hmotnost (popřípadě objem) zaokrouhlovala nahoru.

Celková chyba je tedy  $\sigma_c = \sqrt{\sigma_{\text{sm. odch.}}^2 + \sigma_m^2} = \sqrt{0,04^2 + 0,004^2} = 0,04 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ . Mohli jsme si při výpočtu také všimnout, že směrodatná odchylka je oproti chybě metody zanedbatelná.

Takto určená hustota má hodnotu  $\rho_{\text{led2}} = (0,92 \pm 0,04) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ .

**3. metoda** Experiment se závažím v kusu ledu jsme provedli celkem dvakrát, a to pokaždé se třemi ocelovými hřebíky. Údaje jsme uvedli do tabulky 11 včetně výsledků vypočtených ze vzorce 33. Za hustoty jsme dosadili z tabulek  $\rho_v = \rho_{\text{voda}} = 0,997 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  a  $\rho_z = \rho_{\text{ocel}} = 7,850 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ . Chybu jsme určili pomocí vzorce pro přenos chyb 25 jako

$$\sigma = \rho \sqrt{\left(\frac{\sigma_{m_v}}{m_v}\right)^2 + \left(\frac{\sigma_{m_z}}{m_z}\right)^2}.$$

Tab. 11: Experimentálně určené hodnoty hustoty ledu pomocí Archimédova zákona.

č.	$\frac{m_z}{\text{g}}$	$\frac{m_v}{\text{g}}$	$\frac{\rho}{\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}}$	$\frac{\rho_s \text{ chybou}}{\text{g}\cdot\text{cm}^{-3}}$
1	14	109	0,899 2	$0,90 \pm 0,06$
2	14	106	0,896 6	$0,90 \pm 0,06$

Při přesnějším měření by bylo třeba ještě změřit teplotu vodní lázně, abychom dosadili správnou hodnotu její hustoty (stejně tak by bylo třeba přepočíst hustotu oceli pro teplotu  $0^\circ\text{C}$ , kterou měl led. V našem případě je ale chyba způsobená dosažením hustot při teplotě  $25^\circ\text{C}$  řádově zanedbatelná oproti chybě určení hmotnosti.

### Diskuze

První metoda je pro menší kus ledu velmi nepřesná, hodnotu hustotu jsme určili jako  $\rho_{\text{led1}} = (0,8 \pm 0,3) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ . Tedy v rámci chyby může být námi určená hustota stejně velká, případně dokonce větší než hustota vody. Je tedy opravdu vidět, že pokud bychom měli měřit hustotu ledu touto metodou, je zapotřebí provést mnohem více měření a použít lepší měřící přístroje. Výrazného zlepšení můžeme dosáhnout také použitím většího kusu ledu. Pro válec s více než 4krát větším průměrem podstavy jsme dostali hodnotu  $\rho_{\text{led1velky}} = (0,94 \pm 0,06) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ , tedy se nám chyba snížila o řád.

Hustota ledu určená ponořováním do oleje je  $\rho_{\text{led2}} = (0,922 \pm 0,004) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ . V rámci chyby se tak námi naměřená hustota ledu téměř shoduje s tabulkovou hodnotou<sup>4</sup>  $\rho_{\text{tab.}} = 0,917 \text{ g}/\text{cm}^3$ .

U druhé metody dosahujeme poměrně přesné hodnoty (na rozdíl od první metody). Jedním ze způsobů zvýšení přesnosti by mohlo být použití technických vah, které by nám poskytly výsledek na více platných cifer. Když se ale detailněji podíváme na vzorec pro výpočet chyby a zkusíme do něj dosadit chybu měření hmotnosti 0 g, vidíme, že se celková chyba téměř nezměnila. Pro snížení celkové chyby je tedy třeba zjemnit i stupnici odměrného válce, nebo použít jinou metodu měření hustoty (viz třetí metodu).

K odchylkám od reálné hodnoty mohlo dojít kvůli některým systematickým chybám, které se opakovaným měřením nevyruší – jsou to chyby způsobené zejména rychlým odtáváním ledu. Při měření hmotnosti led odtává a kleštěmi pak nabereme kostku o něco lehčí, než byla její původní hmotnost. To by mělo naměřenou hustotu zvýšit (do oleje pak dáváme kostku o menším objemu). Led pak taje i ve vodě. Ježto má led menší hustotu než voda, po jeho částečném odtání se objem zmenšuje, což také zvýší naměřenou hodnotu. K malému zmenšení objemu dochází také tím, že část oleje ulpí na tyčince při potápění kostek ledu. Tyto chyby v měření mohou být jedny z důvodů, proč námi naměřená hodnota je téměř ve všech měřeních větší než tabulková. Pokud však postupujeme rychle a máme všechny nástroje i olej podchlazené na co nejnižší teplotu, tyto rozdíly by měly být téměř zanedbatelné oproti nepřesnosti měřidel. Navíc při vytváření ledu v kostkách vznikají drobné bublinky, které naopak celkovou hustotu snižují, díky čemuž výsledná odchylka od reálné hodnoty nebyla příliš velká. K drobné odchylce od tabulkové hodnoty (i v rámci chyby) pravděpodobně přispěla systematická chyba, jinak je měření relativně přesné a výsledek poměrně dobře odpovídá očekávané (tabulkové) hodnotě.

Nejlepším způsobem by mohla být třetí metoda, která objem neměří a k určení hustoty využívá Archimédův zákon. Zde měříme pouze hmotnost, přesnost tohoto měření můžeme snadno zvýšit použitím technických vah. Nevýhodou této metody je potřeba závaží se známou hustotou (kdybychom ji ověřovali experimentálně v domácích podmínkách například druhou metodou, opět budeme potřebovat měřit objem, což sníží naši přesnost). Touto metodou jsme hustotu určili jako  $\rho_{\text{led3}} = (0,90 \pm 0,06) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ . Může se zdát, že při obou měřeních vyšla hodnota hustoty výrazně menší, než je uvedena v tabulkách, výsledek máme však zatížen chybou, díky které nelze určit přesnou hodnotu. K případné nižší hustotě mohlo dojít v důsledku většího množství bublin ve vytvořeném ledu, které výslednou hustotu o něco snížily. Zvýšený obsah bublin může být způsoben mimo jiné přítomností hřebíků, které naruší přirozené zamrzání ledu. Tomu by nasvědčovalo i pozorování, že při druhé metodě, kdy led zamrzal samostatně, jsme tak velké množství bublin nepozorovali.

<sup>4</sup>MIKULČÁK, Jiří. Matematické, fyzikální a chemické tabulky pro střední školy. 14. vyd. Praha: SPN, 1985. Pomocné knihy pro žáky (Státní pedagogické nakladatelství).

V případě použití lepších vah by byla chyba měření srovnatelná se směrodatnou odchylkou druhé metody.

Třetí metoda je oproti druhé sice více přesná z hlediska měřidel, může být ale náročnější na rychlost a pochybení experimentátora - led je třeba vytáhnout ve správnou chvíli.

### Závěr

První metoda, kdy jsme objem ledu určovali pomocí naměřených rozměrů, byla velmi nepřesná. Výsledek  $\rho_{\text{led1}} = (0,8 \pm 0,3) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  byl zatížen velkou chybou. Pro mnohonásobně větší válec jsme ale již i první metodou obdrželi dobrý výsledek  $\rho_{\text{led1velky}} = (0,94 \pm 0,06) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ . Nepřesnost měření objemu byla v druhé metodě vylepšena, při měření objemu v odměrném válci se chyba snížila o řád. Výsledná hustota  $\rho_{\text{led2}} = (0,92 \pm 0,04) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$  v rámci chyby téměř odpovídá tabulkové hodnotě  $\rho_{\text{led-tabulkova}} = 0,917 \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ . Třetí metodou byla hustota ledu určena jako  $\rho_{\text{led3}} = (0,90 \pm 0,06) \text{ g}\cdot\text{cm}^{-3}$ .

### Dodatek

K určení hustoty tělesa lze použít Archimédův zákon, který zde uvádíme v jeho známém znění: Těleso ponořené v kapalině je nadlehčováno silou, jejíž velikost je rovna tíze kapaliny tělesem vytlačené. Toto tvrzení si nyní odvodíme, přičemž výpočtem získáme též vzorec, který využijeme k experimentu. Na těleso o hmotnosti  $m$  v homogenním tíhovém poli Země s tíhovým zrychlením  $g$ , působí tíhová síla, kterou určíme ze vzorce

$$F_G = mg. \quad (27)$$

Ponoříme-li toto těleso do kapaliny, bude na něj působit ale také síla vztlaková. Molekuly kapaliny jsou taktéž v tíhovém poli Země, na vrstvičku kapaliny o hustotě  $\rho_k$  ve vzdálenosti  $h$  od hladiny působí tíhová síla

$$F_G = mg = \rho_k Shg, \quad (28)$$

kde  $S$  je velikost plochy průřezu tohoto sloupce kapaliny. Kapalina tedy působí na námi zkoumanou vrstvičku tlakem

$$p_G = mg = \rho_k hg. \quad (29)$$

Těleso ponořené do této kapaliny nyní pomyslně rozřezejme na malé válečky o průřezu  $dS$ , které jsou kolmé na hladinu. Na horní podstavu  $i$ -tého válečku, která je ve výšce  $h_1$ , působí kapalina silou  $F_1$ , na dolní podstavu  $h_2$  působí naopak silou  $F_2$ . Výslednou vztlakovou sílu na tento váleček získáme jako rozdíl těchto dvou sil (geometricky se jedná o součet, jelikož síly působí proti sobě - na horní plošku kapalina působí tlakem ve směru ke dnu, na dolní plošinu naopak působí síla, která má tendenci těleso nadnášet). Sílu na takovýto malý váleček tedy určíme jako

$$F_{vzi} = F_2 - F_1 = \rho_k g dSh_2 - \rho_k g dSh_1 = \rho_k g dS(h_2 - h_1). \quad (30)$$



Celkovou vztlakovou sílu na váleček pak získáme součtem sil působících na jednotlivé válečky. Pokud jsme udělali válečky infinitezimálně malé, suma nám přejde do integrálu, stále však lze intuitivně nahlížet na integrál jako na součet

$$F_{vz} = \int \rho_k g \Delta h \, dS = \rho_k g \int \Delta h \, dS = \rho_k g V', \quad (31)$$

kde  $V'$  je objem části tělesa, která je ponořená do kapaliny.

Těleso zůstává v klidu (případně v rovnoměrném přímočarém pohybu), pokud je výslednice všech sil na něj působících nulová. V našem případě se tedy těleso ustálí tak, že se vyrovná tíhová a vztlaková síla

$$\begin{aligned} F_{vz} &= F_G, \\ \rho_k g V' &= mg. \end{aligned} \quad (32)$$

Vidíme, že tímto způsobem můžeme určit pouze objem ponořené části tělesa. Pokud bychom led ponořili do vody, v důsledku své menší hustoty by se ponořil pouze částečně. Pro plné ponoření je třeba do ledu přidat závaží, čímž zvýšíme celkovou hustotu takto vzniklého tělesa. Nyní si ukážeme, jak se změní námi odvozený vztah 32.

Pokud je závaží v ledu dostatečně lehké, těleso se neponoří celé. K jeho potopení pod hladinu dojde až po odtátí části ledu. Zaměříme se nyní na tento okamžik, kdy je těleso plně ponořeno, ale síly jsou stále ještě v rovnováze (těleso nepadá ke dnu, ale plove). V tuto chvíli lze z našeho vzorce 32 určit celkový objem tělesa.

$$V = \frac{m}{\rho_k},$$

což můžeme upravit s využitím toho, že hmotnost  $m$  je součet hmotnosti závaží  $m_z$  a vody/ledu  $m_l$ ,  $V_v$  objem vody,  $V_z$  objem závaží a  $\rho_z$  je hustota závaží. Dosazením za hustotu kapaliny  $\rho_k$  hustotu vody  $\rho_v$  poté vzorec přechází na tvar

$$\rho_{\text{led}} = \frac{m_l}{V_l} = \frac{m_l}{V - V_z} = \frac{m_l}{\frac{m}{\rho_v} - V_z} = \frac{m_l}{\frac{m}{\rho_v} - V_z} \frac{1}{V_z} = \frac{\rho_v}{1 + \frac{m_z \rho_v}{m_v} \left( \frac{1}{\rho_v} - \frac{1}{\rho_z} \right)}. \quad (33)$$

## Úloha II.E ... reproduktor

Naměřte závislost hladiny intenzity zvuku vydávaného vašim reproduktorem/mobilem/počítačem na vzdálenosti od zdroje. Určete také závislost hladiny intenzity na nastavení výstupní hlasitosti (tzv. volume). Nezapomeňte data fitovat.

*Jarda toho v zadní lavici už moc neslyší.*

### Úvod a teoretický základ

Hladina intenzity zvuku je zřejmě nejznámější akustická veličina. Její jednotkou je decibel dB. Už její dlouhý název nám napovídá, že tato veličina není na pochopení tak jednoduchá jako například hmotnost nebo délka (aspoň v klasické fyzice). Je definována jako

$$L = 10 \cdot \log \frac{I}{I_0},$$

kde  $I$  je intenzita zvuku v měřeném místě,  $I_0 = 10^{-12} \text{ W} \cdot \text{m}^{-2}$  je intenzita prahu slyšení a číslo 10 se zde objevuje proto, že základní jednotkou je decibel, a ne jenom bel. Intenzita zvuku  $I$  je zase podíl akustického výkonu  $P$  a plochy  $S$ , kterou prochází. Intenzita a hladina intenzity tak jdou pomocí tohoto vztahu určit jedna ze druhé.

Hladina intenzity zvuku je tedy bezrozměrná veličina. Navíc se chová logaritmicky - zvětšíme-li intenzitu zvuku na dvojnásobek (například přidáním stejné hlučného zdroje), zvýší se  $L$  přibližně o 3 dB. Logaritmické měřítko je zvoleno kvůli tomu, že lidské ucho vnímá intenzitu logaritmicky a navíc dokáže fungovat v rozmezí asi 12 řádů, takže je to vhodné třeba i kvůli zakreslování hluku do grafu.

Promysleme si rovnou, jak se bude chovat závislost hladiny intenzity zvuku na vzdálenosti od bodového zdroje. Bodový zdroj je takový zdroj, že můžeme zanedbat jeho rozměry vůči vzdálenosti od něj. Předpokládejme, že z něj vychází nějaký výkon  $\Delta P$  do prostorového úhlu  $\Delta\Omega$ . Plocha, kterou tento prostorový úhel vytíná na kouli o poloměru  $r$  se středem ve zdroji, je  $\Delta S = \Delta\Omega r^2$ <sup>5</sup>. Intenzita ve vzdálenosti  $r$  tak je

$$I = \frac{\Delta P}{\Delta S} = \frac{\Delta P}{\Delta\Omega} \frac{1}{r^2}.$$

Intenzita tedy ne příliš překvapivě klesá se druhou mocninou vzdálenosti. Hladina intenzity zvuku se pak bude měnit jako

$$L = 10 \cdot \log \frac{I}{I_0} = 10 \cdot \log \frac{\Delta P}{I_0 \Delta\Omega} \frac{1}{r^2} = 10 \cdot \left( \log \frac{\Delta P}{I_0 \Delta\Omega} - 2 \log r \right),$$

z toho vyplývá, že klesá jako konstanta minus logaritmus vzdálenosti. Pokud si ale na osu  $x$  vyneseme vzdálenost v logaritmické škále (tedy místo  $r$  budeme vynášet  $\log r$ ), měli bychom dostat lineární závislost s koeficientem  $-20$ . Musíme ovšem poznamenat, že zápis ve tvaru  $\log r$  není fyzikálně zcela správně a logaritmus v předchozí rovnici bychom neměli rozdělovat na rozdíl dvou logaritmů. Pro grafickou názornost je ovšem lepší poslední zápis, díky kterému budeme moci vynést datové body do přímky a určit její sklon.

Měření budeme provádět pomocí hlukoměru. Pokud nemáme k dispozici nějaký profesionálnější přístroj, stáhneme si na mobil aplikaci, která toto měření umožňuje.

---

<sup>5</sup>Pokud by byl prostorový úhel roven  $4\pi$ , tak dostáváme plochu povrchu celé koule

## Naměřené hodnoty a zpracování výsledků

Pro měření závislosti hladiny intenzity zvuku na vzdálenosti použijeme malý reproduktor, který by mohl reprezentovat bodový zdroj zvuku. Měření provádíme v běžné místnosti, nedokážeme proto zcela zamezit odrazům zvuku od stěn a nábytku. Generujeme zvuk o stálé frekvenci 440 Hz. Pro samotné měření používáme aplikaci *Zvukoměr* instalovanou na mobilní telefon.<sup>6</sup>

Tab. 12: Závislost hladiny intenzity zvuku na vzdálenosti od zdroje.

$\frac{r}{\text{cm}}$	$\frac{L}{\text{dB}}$	$\frac{r}{\text{cm}}$	$\frac{L}{\text{dB}}$
5	87	60	69
10	86	70	63
15	83	80	66
20	81	90	68
25	80	100	70
30	78	120	67
35	77	140	62
40	76	160	66
45	75	180	66
50	74	200	65

Naměřenou závislosti zobrazíme v grafu 14.

Jak jsme zmínili v teoretickém úvodu, vyneseme ještě vodorovnou osu v logaritmické škále v grafu 15.

Datové body v grafu jsme rovnou proložili přímkou.<sup>7</sup> Program sám určí takovou přímkou, která nejlépe odpovídá zobrazeným bodům. V našem případě je to po zaokrouhlení koeficientů na počet platných cifer určených odchylkou

$$y = -(17 \pm 1)x + (101 \pm 3).$$

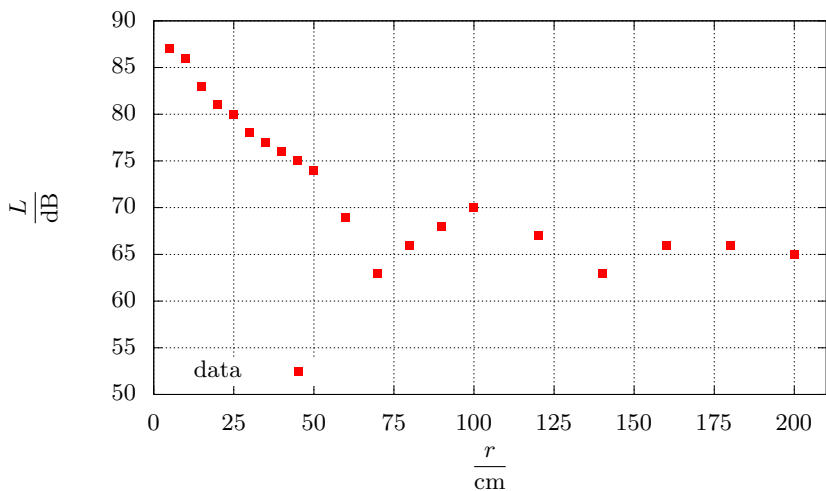
Chybu určení koeficientů nám ukáže program, ve kterém jsme koeficienty hledali.<sup>8</sup> Zde však hodnoty chyb uvádíme zejména proto, abychom mohli diskutovat přesnost určení koeficientů. Podle předchozí rovnice určuje koeficient před  $x$  rychlost klesání intenzity zvuku. Pro bodový zdroj zvuku klesá intenzita jako  $r^{-2}$ , pro lineární jako  $r^{-1}$ . V našem případě dostáváme  $r^{-1,7}$ , tedy blíže k bodovému zdroji, jak bychom předpokládali.

Dále jsme naměřili závislost hladiny intenzity zvuku na nastavení výstupní hlasitosti, tedy na tzv. volume. Tento parametr budeme v našem řešení značit  $v$ . Měřili jsme ve dvou vzdálenostech v rozmezí 0 až 100 jednotek (označíme  $j$ ). Jako zdroj zvuku jsme použili laptop.

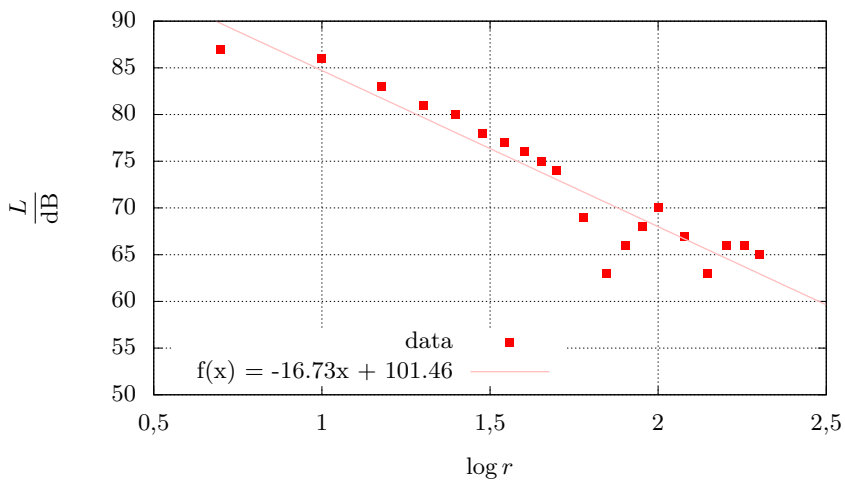
<sup>6</sup>Lze samozřejmě použít i jiné aplikace, např. známou aplikaci *Phyphox*

<sup>7</sup>Například v programu *Excel* funkce *spojnice trendu – lineární*. Přesnou rovnici proložené přímkou získáme, pokud zaklikneme její zobrazení do grafu.

<sup>8</sup>V našem případě *Gnuplot*. V *Excelu* bohužel není snadné tento údaj dohledat.



Obr. 14: Závislost hladiny intenzity zvuku na vzdálenosti od zdroje.

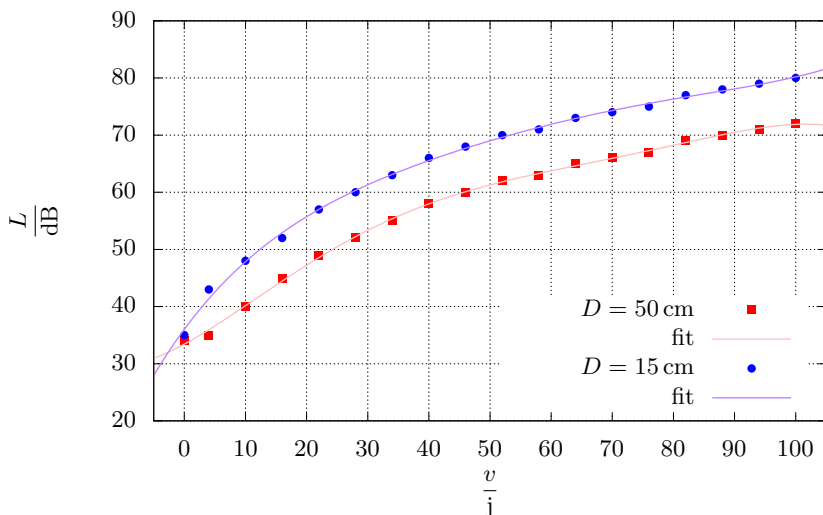


Obr. 15: Závislost hladiny intenzity zvuku na logaritmu vzdálenosti od zdroje.

Tab. 13: Závislost hladiny intenzity zvuku na volume. Index u  $L$  určuje vzdálenost  $D$  od zdroje v centimetrech.

$\frac{v}{j}$	$\frac{L_{15}}{\text{dB}}$	$\frac{L_{50}}{\text{dB}}$
0	35	34
4	40	35
10	48	40
16	52	45
22	57	49
28	60	52
34	63	55
40	66	58
46	68	60
52	70	62
58	71	63
64	73	65
70	74	66
76	75	67
82	77	69
88	78	70
94	79	71
100	80	72

Naměřené hodnoty zobrazíme v grafu 16. Rovnou do něj přidáme i polynomy, kterými dané funkce aproximujeme. Proč budeme body prokládat právě "náhodnými" polynomy? Naměřili jsme jen několik datových bodů. Kdyby nás ale zpětně zajímalo, jaká by byla hladina intenzity zvuku například při volume  $v = 50$  j, stačí dosadit do našeho polynomu a dostáváme poměrně přesnou hodnotu. Navíc nemáme žádný teoretický základ pro proložení závislosti něčím jiným.



Obr. 16: Závislost hladiny intenzity zvuku na volume.

Závislost jsme proložili polynomem pátého stupně, protože máme poměrně hodně dat a nižší stupně polynomů by nebyly dostatečně přesné pro malé nebo velké hodnoty  $v$ . Pro závislost v  $D = 15$  cm je rovnice polynomu

$$y = 1,2 \cdot 10^{-8}x^5 - 3,8 \cdot 10^{-6}x^4 + 4,6 \cdot 10^{-4}x^3 + 3,1 \cdot 10^{-2}x^2 + 1,5x + 36,$$

zatímco pro  $D = 50$  cm pak

$$y = -2,3 \cdot 10^{-8}x^5 + 5,9 \cdot 10^{-6}x^4 - 5,3 \cdot 10^{-4}x^3 + 1,4 \cdot 10^{-2}x^2 + 5,8 \cdot 10^{-1}x + 33.$$

### Diskuze

V teoretickém úvodu jsme se zamýšleli nad chováním hladiny intenzity zvuku v různých vzdálenostech od bodového zdroje. Odvodili jsme, že intenzita klesá s druhou mocninou vzdálenosti. Pokud tedy vyneseme hladinu intenzity v decibelech na svislou osu, a na vodorovnou vzdálenost v logaritmu, dostaneme přímkou se sklonem  $10 \cdot (-2) = -20$  (10 kvůli tomu, že pracujeme v desetinách belu, a  $-2$  je mocnina vzdálenosti). V našem případě jsme naměřili sklon  $-17 \pm 1$ , intenzita zvuku

tedy klesá se vzdáleností jako  $r^{-(1,7\pm 0,1)}$ . Protože je toto číslo menší než u bodového zdroje, je zřejmé, že nemůžeme zanedbat rozměry reproduktoru. Relativní chyba určení tohoto exponentu je přibližně 6 procent, můžeme tedy tvrdit, že data odpovídají lineární závislosti a určení koeficientu je poměrně přesné.

Výsledek může být nepřesný z několika důvodů. Měření jsme prováděli pouze pomocí aplikace na mobilním telefonu, u které nemáme jistotu, že naměří stejné hodnoty jako profesionální zkaliibrovaný přístroj. Lepších výsledků bychom mohli dosáhnout po kalibraci aplikace, jak je to u aplikace *Phyphox*. Zároveň použitá aplikace neuvádí nepřesnost měření, nemůžeme tak stanovit chybu měření.

Měření probíhalo v běžné místnosti. V důsledku přítomnosti stěn a podlahy mohlo docházet k odrazům zvuku, a tedy k ovlivnění výsledku.<sup>9</sup> Na druhou stranu byla místnost vybavená klasickým nábytkem a kobercem, část zvuku tak byla pohlcena a ne odražena směrem k měřicímu telefonu.

Co je ale z pohledu na graf naprosto zřejmé, jsou dvě místa, kde dochází k výraznému snížení intenzity oproti zbytku závislosti. Jejich poloha (přibližně 70 cm a 140 cm) není náhodná, podezřele se blíží k násobkům vlnové délky měřeného zvuku, která je

$$\lambda = n \frac{c}{f}, \quad (34)$$

kde  $c \doteq 340 \text{ m}\cdot\text{s}^{-1}$  je rychlost šíření zvuku a  $f = 440 \text{ Hz}$  je použitá frekvence. Pro tyto hodnoty vychází 77 cm a 154 cm, což přibližně odpovídá zmíněným bodům. V důsledku experimentálního uspořádání tak dochází k destruktivní interferenci. O správnosti této teorie bychom se mohli přesvědčit, kdybychom polohy bodů, kde se intenzita výrazně snižuje, naměřili i pro jiné frekvence. Ukázalo by se, že tato závislost se řídí přibližně rovnicí (34).

Při měření hladiny intenzity v závislosti na volume si můžeme všimnout, že graf neroste lineárně. Při nižších hodnotách je nárůst strmější, při vyšších pomalejší. Jestliže si tedy zvyšujeme hlasitost, čím výše jsme, tím méně je to efektivní. Naměřená závislost však patrně závisí na konkrétním přístroji a softwaru.

## Závěr

Naměřili jsme závislost hladiny intenzity zvuku na vzdálenosti od zdroje a vynesli ji do grafu. Zjistili jsme, že intenzita zvuku klesá se vzdáleností přibližně jako  $r^{-(1,7\pm 0,1)}$ . Reproduktor se tak chová přibližně jako bodový zdroj.

Závislost hladiny intenzity zvuku jsme naměřili ve dvou vzdálenostech. V každé z obou vzdáleností od zdroje (laptopu) jsme určili polynom pátého stupně, který danou vzdálenost dobře popisoval. Je zřejmé, že hladina intenzity zvuku neroste s volume lineárně, ale pro jeho větší hodnoty roste pomaleji než pro menší.

<sup>9</sup>Můžeme si to představit, jako když vedle zrcadla postavíme lampičku - taky ji vidíme dvakrát a jde k nám více světla

### Úloha III.E . . . vybíjená

Třením nabijte předmět a poté proměřte závislost jeho samovolného vybíjení na čase. Určete elektrickou vodivost vzduchu. Uvažujte, že velikost náboje se mění jako

$$Q = Q_0 e^{-\frac{\sigma}{\epsilon} t},$$

kde  $Q_0$  je počáteční náboj,  $\epsilon$  je permitivita vzduchu a  $\sigma$  je hledaná vodivost.

*Nápověda:* Zavěste na tenké dlouhé vlákno malý kovový předmět (např. matičku). Třením nabijte brčka a přeneste část náboje na předmět. Měl by se od brčka začít odpuzovat. Z jejich vzájemné vzdálenosti pak určíte součin nábojů a poté vodivost.

*Jarda*

*se tak dlouho pokoušel měřit náboj, až celou úlohu předělal na měření vodivosti.*

#### Úvod a teoretický základ

Experiment lze naměřit tak, jak je uvedeno v nápovědě. Ve vztahu pro rychlost vybíjení v zadání není žádná závislost na tvaru předmětů. Budeme proto dále předpokládat, že tvar ani poloha předmětů nehrají při ztrátě náboje žádnou roli. Použijeme dvě matičky ze stavebnice Merkur, které přivážeme na dlouhou niť. Tu přehodíme přes tyčku a matičky umístíme do stejné výšky. Plastové brčko třením o papírový kapesník nabijeme a dotykem s matičkami přeneseme část náboje na ně. Brčko můžeme nabít ještě jednou a položíme jej mezi obě matičky, které by se nyní měly odpuzovat od sebe a od brčka, které jsme upevnili. Může se stát, že se jedna z matiček elektřinově „přilepí“ k brčku, zatímco druhá matička začne být odpuzována. Na naše měření závislosti náboje na čase to ale nebude mít vliv, protože tvar předmětů nehraje roli.

Ačkoli postup vysvětlený v předchozím odstavci funguje, ve svém řešení jsme nakonec použili pouze jednu zavěšenou matičku (viz obrázek dále), kterou jsme nechali se odpuzovat od brčka. To jsme umístili co nejlépe původnímu místu, kde se matička nacházela. Polohu matičky budeme fotoaparátem snímat po dobu několika minut, během kterých dojde k samovolnému vybití nábojů na brčku i na matičce.

Nyní se zaměříme na geometrii experimentu a na to, jak díky ní získat informaci o náboji.

Protože odchylka matičky od kolmice byla vždy malá, můžeme uvažovat  $\text{tg } \alpha \approx \sin \alpha \approx \alpha$  a  $\cos \alpha \approx 1$ . Pak tedy  $\alpha = d/l$ , kde  $l$  je délka závěsu a  $d$  je průběžná vzdálenost středů matičky a brčka.

Na matičku působí odpuzující elektrostatická síla  $F_e$ , tíhová síla  $F_G$  a tahová síla závěsu  $T$ . V aproximaci malého úhlu  $\alpha$  působí  $F_e$  vodorovně a vyrovná se se složkou tahové síly  $T\alpha$ , zatímco tíhová se vyrovná s vertikální složkou  $T \cos \alpha \approx T$ . Z jedné rovnice pak vyjádříme  $T$  a dosadíme do druhé, čímž dostaneme  $F_e = mg\alpha$ .

Nyní nastává otázka, jak vyjádřit elektrickou sílu  $F_e$ . Nemůžeme zde jednoduše použít Coulombův zákon, protože nemáme bodové zdroje náboje. Elektrickou sílu se pokusíme spočítat pomocí vztahu  $F_e = EQ_m$ , kde  $Q_m$  je náboj na matičce a  $E$  je



elektrická intenzita vyvolaná nábojem na brčku. Tu v závislosti na vzdálenosti od středu brčka odhadneme vztahem

$$E = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon d},$$

kde  $\lambda$  je délková hustota náboje na brčku, kterou považujeme za homogenní (lepší odhad nemáme). Brčko přitom považujeme za dlouhý tenký drát.

Z rovnosti sil tak můžeme vyjádřit závislost mezi nábojem a vzdáleností  $d$  jako

$$mg\alpha = \frac{\lambda}{2\pi\epsilon d}Q_m \Rightarrow \frac{2\pi\epsilon mg}{l}d^2 = \lambda Q_m.$$

Jestliže na začátku měření byl na matičce náboj  $Q_{m_0}$  a na brčku nábojová hustota  $\lambda_0$ , můžeme pravou stranu rovnice zapsat jako

$$\lambda Q_m = \lambda_0 e^{-\sigma t/\epsilon} Q_{m_0} e^{-\sigma t/\epsilon} = \lambda_0 Q_{m_0} e^{-2\sigma t/\epsilon}.$$

Závislost vzájemné vzdálenosti  $d$  na čase pak vyjádříme jako

$$d = \sqrt{\frac{l\lambda_0 Q_{m_0}}{2\pi\epsilon mg} e^{-\sigma t/\epsilon}}.$$

Vzdálenost by tak měla v čase klesat exponenciálně rychle.

### Naměřené hodnoty a zpracování výsledků

Vzdálenost jsme určovali pomocí fotoaparátu, který jsme nechali na stálém místě. Ten každých 10 s udělal snímek polohy matičky vůči brčku (viz obrázky níže). Matičku jsme zavěsili na dlouhé vlákno a zaznamenali si, kde je její stabilní poloha. Nabili jsme brčko třením a dotekem s matičkou jsme část náboje přenesli. Matička se začala od brčka odpuzovat. Brčko jsme umístili tak, aby bylo těsně vedle stabilní polohy matičky, tedy aby po vybití veškerého náboje bylo vlákno svislé a matička v původní stabilní poloze.

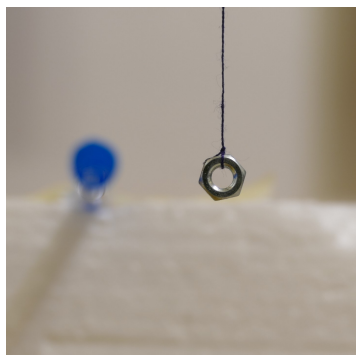
Hmotnost použité matičky je přibližně  $m = 0,4$  g a délka závěsu činila  $l = 76$  cm. Vzdálenost protějších rovnoběžných stran matičky je  $r = 0,6$  cm.

V programu *Geogebra* jsme pak změřili u každé fotografie vzdálenost středů matičky a brčka. Tu jsme naměřili v relativních jednotkách. Pomocí rozměru matičky v reálném světě a v relativních jednotkách jsme jednoduše schopni přepočítat vzdálenosti na fotografii na reálné centimetry pomocí trojčlenky

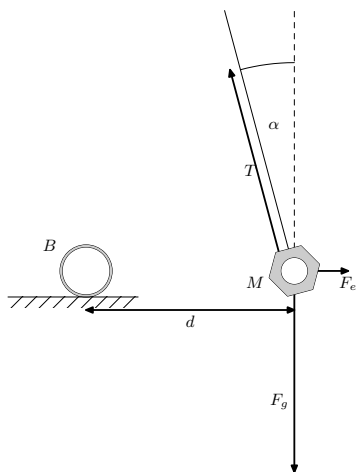
$$d = \frac{r}{r'} d',$$

kde  $r$  je rozměr matičky v centimetrech a čárkované veličiny jsou udávány v relativních jednotkách na fotografii. Relativní jednotka na fotografii byla zvolena tak, aby byl přepočet triviální, tedy  $r' = 0,6$  j, což odpovídalo již výše zmíněnému průměru matičky  $r = 0,6$  cm.

Byla provedena tři (použitelná) měření. V jistém okamžiku přibližování matičky k brčku jsme viděli změnu chování – matička se rychle přiblížila k brčku a "připípla" se k němu – začala působit přitažlivá síla. Chybu jednotlivých vzdáleností



Obr. 17: Fotografie provádění experimentu.



Obr. 18: Nákres situace s důležitými prvky. Velikosti veličin nejsou v měřítku.

na fotce odhadneme na 0,1 cm, pro názorné grafické zpracování však v tabulce udáváme hodnoty na tři platné číslice. V grafu nevykreslujeme chybové úsečky, protože jejich hodnota by byla všude stejná a navíc jsme ji jen odhadli.

Všechny tři závislosti vyneseme do grafu a proložíme je exponenciálou. Pro měření číslo 2 nebudeme zohledňovat poslední tři datové body, protože zcela evidentně se systém začal chovat podle jiných zákonů. V měření 2 a 3 máme méně datových bodů, protože se matička přitáhla k brčku dříve než při měření 1.

V programu *Gnuplot* jsme závislosti proložili exponenciálou a zobrazili si jejich rovnice ve tvaru

$$y = Ae^{Bt}. \quad (35)$$

Koeficienty jsou určeny parametry podle rovnice 35. Chyby těchto koeficientů jsou též vypočítané programem *Gnuplot*.

Počítat průměr pro hodnotu parametru  $A$  nedává smysl, protože tento parametr závisí na počátečním náboji, který je pro každé měření jiný. Naopak  $B$  by mělo být ve všech případech podobné a rovné zlomku  $-\sigma/\varepsilon$ . Vodivost vzduchu tak dostaneme jako

$$\sigma = -B\varepsilon = (3,2 \pm 0,4) \cdot 10^{-14} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}.$$

Dosadili jsme  $\varepsilon = \varepsilon_0 = 8,85 \cdot 10^{-12} \text{ F} \cdot \text{m}^{-1}$ , neboť permitivita vzduchu je blízká permitivitě vakua a při naší přesnosti měření způsobí toto zaokrouhlení zanedbatelnou chybu.

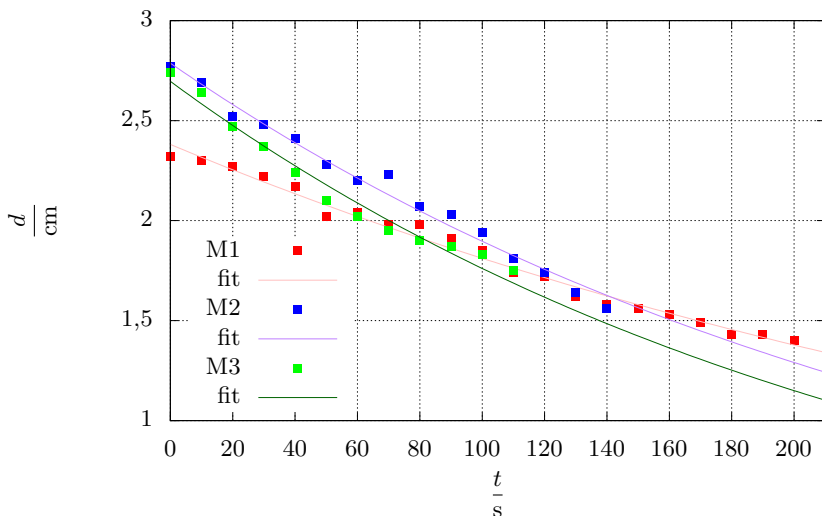
Relativní chyba vodivosti  $\sigma$  je zde stejná, jako relativní chyba parametru  $B$ , protože obě tyto veličiny se liší jen přenásobením konstantou  $\varepsilon$ , která má chybu řádově menší a můžeme ji zanedbat. Chyba parametru  $B$ , v tabulce výše ve

Tab. 14: Závislost vzdálenosti mezi matičkou a brčkem na čase. Hodnoty jsou uvedeny po přepočtu z relativních jednotek. Pro názornost poklesu je necháváme zapsané na tři platné číslice.

$\frac{t}{s}$	$\frac{d}{cm}$	$\frac{d}{cm}$	$\frac{d}{cm}$
0	2,32	2,77	2,74
10	2,30	2,69	2,64
20	2,27	2,52	2,47
30	2,22	2,48	2,37
40	2,17	2,41	2,24
50	2,02	2,28	2,10
60	2,04	2,20	2,02
70	1,98	2,23	1,95
80	1,98	2,07	1,90
90	1,91	2,03	1,87
100	1,85	1,94	1,83
110	1,74	1,81	1,75
120	1,72	1,74	0
130	1,62	1,64	0
140	1,58	1,56	0
150	1,56	1,45	0
160	1,53	1,10	0
170	1,49	0,51	0
180	1,43	0	0
190	1,43	0	0
200	1,40	0	0

Tab. 15: Parametry fitování. Symbolem  $\Delta$  jsou označeny chyby příslušných veličin.

Parametr	Měření 1	Měření 2	Měření 3	Průměr
$\frac{A}{cm}$	238	290	270	
$\frac{\Delta A}{cm}$	2	10	3	
$\frac{B}{s^{-1}}$	$-2,7 \cdot 10^{-3}$	$-3,8 \cdot 10^{-3}$	$-4,3 \cdot 10^{-3}$	$-3,6 \cdot 10^{-3}$
$\frac{\Delta B}{s^{-1}}$	$0,1 \cdot 10^{-3}$	$0,1 \cdot 10^{-3}$	$0,2 \cdot 10^{-3}$	$0,5 \cdot 10^{-3}$



Obr. 19: Závislost vzdálenosti mezi matičkou a brčkem na čase.

sloupečku s označením *Průměr* je určena jako směrodatná odchylka aritmetického průměru parametru  $B$ .

### Diskuze

Samotný experiment byl poměrně obtížně proveditelný. Ne vždy se totiž náboj přenesl z brčka na matičku tak, jak jsme potřebovali, a k odpuzování tak nedošlo. Často se dokonce stávalo, že se matička k brčku celou dobu přitahovala. Jen v několika málo případech se experiment povedl tak, jak bylo zamýšleno. Ovšem i v průběhu těchto měření převládly přitažlivé síly a matička se na brčko nakonec přilepila. Jakmile se totiž náboj na ní částečně vybil, vlivem elektrostatické indukce se zbytek náboje přeuspořádal. Jestliže bylo brčko a matička nabitý jedním druhem náboje, tak se na matičce na straně směrem k brčku indukoval náboj opačného znaménka. Ačkoli jeho celková velikost mohla být menší než velikost náboje opačného znaménka na matičce, tak byl blíže brčku, takže převážila elektrostatická síla opačným směrem.

Rozměry předmětů hrají velkou roli při navrhování vhodného modelu pro danou situaci. Podle vztahu ze zadání na tvaru tělesa nezávisí, neznáme ovšem rozložení náboje na tělesu, velikost a ani působíště elektrostatické síly.

V použitém modelu jsme předpokládali, že brčko je rovnoměrně nabitý dlouhý drát. Je ale velmi nepravděpodobné, že bychom brčko nabili aspoň přibližně homogenně po jeho nějaké delší části. Kousek náboje jsme navíc hned přenesli na matičku. Ta se v průběhu experimentu nenacházela příliš daleko od brčka, proto nemůžeme zanedbat jeho válcovitý tvar. Zároveň také brčko není „velmi dlouhé“

v porovnání s měřítkem experimentu a zřejmě bychom měli počítat s jeho konečnými rozměry, to je ale matematicky mnohem náročnější.

Podobný problém nastává u matičky. V navrženém modelu jsme ji považovali za bodový náboj s polohou uprostřed. Ani matička ale nemá rozměry zanedbatelné vůči měřítku experimentu, proto je tento model poměrně odvážný. Zároveň je vyrobená z vodivého materiálu, takže se na ní náboj může přeuspořádat a působíště elektrostatische síly tak mění svoji polohu.

Podle zadání úlohy jsme měli proměřit závislost vybíjení na čase. Tuto formulaci můžeme také brát tak, že proměříme závislost celkového náboje na čase. V rámci svého experimentu ovšem od sebe nejsme schopni oddělit jednotlivé náboje v součinu  $Q_m \lambda$ . Dle teorie v zadání se ale oba náboje vybíjí stejně rychle, takže zadání splňuje i závislost  $\sqrt{Q_m \lambda}$  na čase. A protože dle našeho modelu je  $\sqrt{Q_m \lambda}$  přímo úměrné vzdálenosti  $d$ , tak vynesem  $d$  do grafu jsme vlastně vynesli i závislost  $\sqrt{Q_m \lambda}$  na čase, pouze v jiných jednotkách.

Z naměřených hodnot tedy pozorujeme, že náboj, který způsobíme třením, ztratí předměty v řádu jednotek minut. V běžném životě nás tedy tyto jevy výrazně nelimitují.

Porovnejme námi naměřenou hodnotu vodivosti vzduchu  $(3,2 \pm 0,4) \cdot 10^{-14} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$  s příklady uvedenými na internetu. Anglická wikipedie<sup>10</sup> uvádí rozsah  $1 \cdot 10^{-15} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$  až  $1 \cdot 10^{-9} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$  při pokojové teplotě, velmi tedy závisí na dalších parametrech vzduchu, například na vlhkosti. Jinde<sup>11</sup> můžeme nalézt rozmezí  $3 \cdot 10^{-15} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$  až  $8 \cdot 10^{-15} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$ . Nyní se ale ještě vraťme k předchozí diskuzi našeho modelu a uvědomme si, že jsme předpokládali, že síla mezi brčkem a matičkou je úměrná  $d^{-1}$ , což pravděpodobně není pravda. Síla bude závislá na rozměru brčka, a i když tuto závislost aproximujeme na daném rozsahu mocninnou funkcí, bude hodnota v exponentu pravděpodobně vyšší (v absolutní hodnotě, protože při konečných rozměrech se brčko chová alespoň trochu více jako bodový zdroj). Velikost tohoto exponentu se promítne do naměřené vodivosti přímo úměrně, tedy kolikrát bude větší exponent, tolikrát bude větší vodivost.

Další nepřesnost je způsobena předpokladem  $\alpha = d/L$ , který je poměrně obtížné splnit, je potřeba přesné umístění brčka vůči matičce. Také vůbec definice vzdálenosti  $d$ , na kterou elektrostatische síla působí, jako vzdálenosti středů obou těles nemusí být správná, protože v matičce se náboj může volně pohybovat a nemůžeme si být jisti, že působíště síly je přesně ve středu.

Přes všechny tyto nepřesnosti však můžeme konstatovat, že jsme vodivost vzduchu určili aspoň řádově dobře a máme představu, jak je velká (nebo spíše malá, naměřili jsme něco o velikosti  $1 \cdot 10^{-14} \text{ S} \cdot \text{m}^{-1}$ , i když samozřejmě závisí na definici jednotek). Také tedy už víme, že vzduch je izolant, protože konduktivita je malá.

## Závěr

Sestavili jsme experiment dle nápovědy v zadání a proměřili vzdálenost matičky od brčka v závislosti na čase. Určení náboje je pak podle zvoleného modelu úměrné

<sup>10</sup>[https://en.wikipedia.org/wiki/Electrical\\_resistivity\\_and\\_conductivity](https://en.wikipedia.org/wiki/Electrical_resistivity_and_conductivity).

<sup>11</sup><https://www.thoughtco.com/table-of-electrical-resistivity-conductivity-608499>.

této vzdálenosti. Po proložení dat exponenciálou jsme určili vodivost vzduchu za normálních podmínek jako  $(3,2 \pm 0,4) \cdot 10^{-14} \text{ S}\cdot\text{m}^{-1}$ .

## Úloha IV.E ... hodím si to

Mějme přes tyč omotané lano se závažím o hmotnosti  $m$  na jednom svém konci. Změřte závislost hmotnosti zátěže  $M$  na druhém konci potřebné k uvedení lana do pohybu na počtu obtočení lana kolem tyče.

*Patrik přemýšlí o různých metodách... výpočtu.*

### Teorie

Pro určení koeficientu tření vyjdeme z tzv. Capstanovy rovnice, která popisuje napětovou sílu  $F$  na oblých površích

$$F = F_0 e^{f\varphi}, \quad (36)$$

kde  $\varphi$  je úhel obtočení lana,  $f$  značí koeficient statického tření mezi lanem a zaobleným povrchem a  $F_0$  odpovídá počáteční napětové síle. Odvození vztahu (36) naleznete ve starší úloze lano.<sup>12</sup>

V našem případě bude  $F_0$  zprostředkovaná tíhovou silou danou působením našeho zvoleného závaží o hmotnosti  $m$  a  $F$  bude tíhová síla závaží  $M$  pro různé úhly obtočení  $\varphi$ . Pro výslednou závislost potřebujeme znát pouze hmotnosti závaží potřebné pro uvedení lana do pohybu

$$M(\varphi) = m e^{f\varphi}.$$

### Měření

**Pomůcky** K měření jsme použili závaží o hmotnosti  $m = (0,500 \pm 0,001) \text{ kg}$ , plastové lano s průměrem  $d = 2 \text{ cm}$  o celkové hmotnosti  $m' = 25 \text{ g}$  a ocelovou hrazdu do dveří o průměru  $D = 10 \text{ cm}$ .

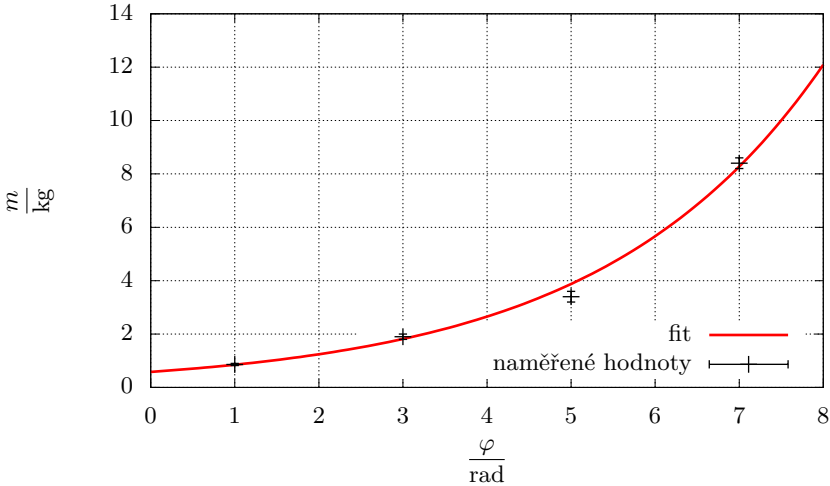
**Postup měření** Na jeden konec lana jsme upevnili závaží o hmotnosti  $m$ , na druhý konec uchytili nádobu na vodu o hmotnosti  $m'' = (0,325 \pm 0,001) \text{ kg}$ . Lano jsme vždy obtočili okolo hrazdy o požadovaný počet otáček a následně jsme do nádoby postupně přilávali vodu, dokud se lano nezačalo samovolně pohybovat. Měření bylo provedeno pro každou otočku jednou. Měření hmotnosti nádoby s vodou jsme prováděli na kuchyňské váze s přesností na 1 g, poslední měření jsme kvůli velké hmotnosti provedli na osobní váze.

<sup>12</sup>[https://fykos.org/\\_media/rocnik32/ulohy/pdf/uloha32\\_6\\_4.pdf](https://fykos.org/_media/rocnik32/ulohy/pdf/uloha32_6_4.pdf)

**Naměřené hodnoty a zpracování výsledků** Naměřená data jsou uvedena v Tab. 16. Data jsme následně vynesli do grafu na Obr. 20 a v softwaru **gnuplot** proložili rovnicí ve tvaru

$$y(x) = Ae^{Bx}, \quad (37)$$

kde  $A = (0,58 \pm 0,05)$  kg a  $B = (0,379 \pm 0,015)$  rad<sup>-1</sup> jsou fitované parametry. Nejistota uvedená u měření hmotnosti byla určena z objemu přilité vody, která odpovídala právě tomu úseku, kdy se lano začalo tíhou nádoby samovolně odmotávat.



Obr. 20: Graf závislosti úhlu  $\varphi$  na hmotnosti  $m$ .

Tab. 16: Závislost hmotnosti nutné k uvedení lana do pohybu v závislosti na úhlu obtočení.

$\frac{\varphi}{\text{rad}}$	$\frac{m}{\text{kg}}$
$\pi$	$0,86 \pm 0,04$
$3\pi$	$1,90 \pm 0,10$
$5\pi$	$3,40 \pm 0,20$
$7\pi$	$8,40 \pm 0,20$

### Diskuse

Z proložené rovnice (38) na Obr. 20 vidíme, že jsme v rámci nejistoty správně určili původní zátěž  $M$  a zároveň i hledaný koeficient tření  $f = (0,379 \pm 0,015)$ .

Hmotnost lana  $m'$  jsme mohli při výpočtech zanedbat vzhledem k relativně velké hmotnosti závaží  $M$  a faktu, že lano je z větší části namotané na tyči.

V experimentu jsme měřili exponenciální závislost. Vzhledem k jejímu průběhu je obvykle složité naměřit velký počet hodnot, protože požadovaná hmotnost pro rozpo-  
hybování lana roste exponenciálně, a tudíž síla potřebná k překročení třecí síly, může být i vyšší, než je maximální nosnost lana. Z grafu na Obr. 20 vidíme, že pro namotání  $\varphi = 9\pi$  rad bychom vzhledem ke zkoumané závislosti již pro rozpo-  
hybování lana potřebovali zavěsit závaží o hmotnosti přibližně 20 kg, což by bylo pravděpodobně za hranici pevnosti použitého lana. Zároveň bude při jeho zátěži docházet k deformaci, to by však mělo mít minimální vliv na námi zkoumanou závislost, jelikož si část omotaná okolo hrazdy stále zachovává svoji délku. Sta-  
tistická nejistota určení jednotlivých datových bodů by šla snížit zvýšením počtu měřených hodnot. Maximální možný zkoumaný počet obtočení bychom mohli efek-  
tivně navýšit použitím lehčího závaží, v tom případě bychom ale pravděpodobně museli započítat i nenulovou hmotnost samého lana.

Při namotávání jsme nechávali malý volný prostor mezi jednotlivými smyč-  
kami lana, aby nedocházelo ke vzájemnému tření mezi jednotlivými smyčkami lana. Samotný povrch tyče byl pokovovaný, takže jeho koeficient tření by byl při translačním pohybu relativně malý. Přesnějších výsledků bychom dosáhli použitím siloměru, čímž bychom se vyhnuli nejistotě vzniklé při manipulaci s vodou.

Porovnáme-li rovnice (36) a (38), můžeme formálně zanedbat jednotku u pa-  
rametru fitu  $B$  a stanovit tak koeficient statického tření mezi lanem a tyčí jako  $f = (0,379 \pm 0,015)$ . Porovnáním hodnoty  $f$  s tabelovanými hodnotami<sup>13</sup> můžeme říci, že se nejvíce blíží hodnotě koeficientu tření kombinace oceli a nylonu  $f' = 0,4$ , který se používá pro výrobu lan.

### Závěr

Seznámili jsme se s jevem tření na zaoblených površích a proměřili závislost hmot-  
nosti zátěže  $M$  na druhém konci potřebné k uvedení lana do pohybu na počtu obtočení lana kolem tyče. Naměřené hodnoty v Tab. 16 jsme proložili očekávanou závislostí z Capstanovy rovnice

$$y(x) = Ae^{Bx}, \quad (38)$$

kde parametry splňují  $A = (0,58 \pm 0,05)$  kg a  $B = (0,379 \pm 0,015)$  rad<sup>-1</sup>. Formálním zanedbáním jednotky u parametru  $B$  jsme určili koeficient statického tření mezi lanem a tyčí jako  $f = (0,379 \pm 0,015)$ , který dobře odpovídá  $f' = 0,4$  pro dvojici povrchů nylon a ocel v rámci  $2\sigma$ .

### Úloha V.E ... mizící CD

*Pomocí difrakce na mřížce určete hustotu zápisu dat na CD. Zkuste porovnat výsledky s DVD. Káta má doma ještě stále spoustu CDček. Pepa jí to závidí.*

---

<sup>13</sup>[https://www.engineeringtoolbox.com/friction-coefficients-d\\_778.html](https://www.engineeringtoolbox.com/friction-coefficients-d_778.html)



## Teorie

Jistě jste již někdy slyšeli, že světlo je elektromagnetické záření a že se tedy chová jako vlna. Jedním z důsledků tohoto vlnového chování je jev zvaný difrakce.

Mějme koherentní zdroj světla, v našem případě laser, a posvítkme jím na tzv. optickou mřížku – tenkou folii, obsahující periodicky se opakující vrypy, umožňující světlu snáze projít skrz. Většina záření projde skrz beze změny směru, ale část se vlivem difrakce vychýlí a kvůli interferenci vytvoří na stínítku interferenční obrazec. Měli bychom vidět lichý počet světelných teček, odborně nazývaných maxima, v přímce, kde prostřední tečka (hlavní maximum) je nejjasnější – odpovídá průchodu světla bez interference. Symetricky vůči tomuto středu vidíme další maxima.

Jejich polohu vypočteme s pomocí vzorce<sup>14</sup>

$$\sin \theta_k = \frac{k\lambda}{b},$$

kde  $\theta_k$  je úhel odchýlení  $k$ -tého maxima od směru hlavního maxima,  $\lambda$  je vlnová délka světla a  $b$  je tzv. mřížková konstanta udávající vzájemnou vzdálenost vrypů.<sup>15</sup> Jelikož sinus libovolného úhlu bude vždy menší nebo roven jedné, nemůžeme  $k$  volit libovolně velké – dostaneme tedy konečný počet maxim.

Jelikož přímo nebudeme měřit úhel  $\theta_k$ , ale vzdálenost  $k$ -tého maxima od hlavního maxima, vypočítáme tento úhel z měřených vzdáleností jako

$$\theta_k = \operatorname{arctg} \frac{d_k}{L},$$

kde  $d_k$  je vzdálenost  $k$ -tého maxima od hlavního maxima a  $L$  je vzdálenost stínítka od difrakční mřížky. Po dosazení dostaneme složenou funkci  $\sin(\operatorname{arctg}(x))$ . Obecně, pokud skládáme nějakou goniometrickou funkci s nějakou inverzní goniometrickou funkcí, jde tento zápis zjednodušit. V našem případě lze odvodit následující vztah

$$\begin{aligned} \sin x &= \operatorname{tg} x \cos x = \frac{\operatorname{tg} x}{\frac{1}{\cos x}} = \frac{\operatorname{tg} x}{\sqrt{\frac{1}{\cos^2 x}}} = \\ &= \frac{\operatorname{tg} x}{\sqrt{\frac{\sin^2 x + \cos^2 x}{\cos^2 x}}} = \frac{\operatorname{tg} x}{\sqrt{\frac{\sin^2 x}{\cos^2 x} + 1}} = \frac{\operatorname{tg} x}{\sqrt{\operatorname{tg}^2 x + 1}}. \end{aligned}$$

<sup>14</sup>Tento vzorec platí, pouze pokud dopadá paprsek laseru kolmo na difrakční mřížku

<sup>15</sup>Pro představu, typická velikost  $b$  u optické mřížky jsou jednotky mikrometrů.

Dosažením tohoto vztahu se dostaneme ke konečné podobě vzorce, který použijeme k výpočtu  $b$

$$\begin{aligned}\sin \operatorname{arctg} \frac{d_k}{L} &= \frac{k\lambda}{b}, \\ \frac{\frac{d_k}{L}}{\sqrt{\left(\frac{d_k}{L}\right)^2 + 1}} &= \frac{k\lambda}{b}, \\ b &= k\lambda \sqrt{1 + \left(\frac{L}{d_k}\right)^2}.\end{aligned}$$

Nakonec ještě něco málo k tomu, proč se CD a DVD chovají jako difrakční mřížky. Na povrchu CD a DVD se pod ochrannou vrstvou nachází pravidelně uspořádané nerovnosti, ze kterých po přechzení optickou mechanikou počítač zrekonstruuje uložená data. A právě díky těmto pravidelným nerovnostem se CD i DVD chová jako optická mřížka a je tedy možné zjistit rozměr těchto nerovností, tedy hustotu zápisu informace.

### *Průběh měření*

Nejprve jsme se pokusili oddělit od obou disků průhlednou ochrannou část nesoucí informaci. Jelikož se nám to v případě CD nepodařilo, museli jsme zvolit dva různé postupy měření.

**Měření DVD** U DVDčka, u kterého se nám povedlo průhlednou část oddělit, jsme postupovali následovně. DVD jsme přilepili ke hraně stolu a na plochu stolu jsme položili laserové ukazovátka. To svítilo zeleným světlem přibližně o vlnové délce 532 nm. Jelikož nesvítilo přímo rovně, bylo třeba ho pomocí izolepy důkladně přilepit, aby svítilo pořád do jednoho místa. Jako stínítko jsme použili  $(78,5 \pm 0,5)$  cm vzdálenou skříň. Když jsme na ni posvítili, viděli jsme interferenční obrazec popsáný v teoretické části. Celkem byla vidět 3 maxima, ale pouze dvě se vešla na skříň. Bylo třeba, aby laser svítil kolmo na plochu DVD. To jsme zajistili tak, že jsme laser připevnili ke kovovému průduchu na stole, což mělo zajistit pro naše potřeby dostatečnou kolmost.

Po rozsvícení laseru jsme označili polohu vedlejšího maxima tužkou a otočili DVD, abychom nesvítili pořád na stejné místo. Takto jsme postupovali celkem desetkrát. Jelikož jsme si laserové ukazovátka dobře upevnili, stačilo hlavní maximum zakreslit pouze jednou, protože se pokaždé nacházelo na stejném místě. Nakonec jsme pomocí metru změřili vzdálenost mezi vedlejšími maximy a bodem, kde se nacházelo hlavní maximum.

**Měření CD** Jelikož se nám u CD nepovedlo oddělit ochrannou vrstvu, museli jsme zvolit jiný postup. Laser jsme připevnili vertikálně tak, aby svítil co nejvíce kolmo na CD položené na povrchu stolu. Opět spoléháme na to, že geometrie nábytku zajistí dostatečnou kolmost. Svazek na povrchu CD difraktuje, odrazí se

a vytvoří interferenční obrazec na poliče nacházející se  $(99,0 \pm 0,5)$  cm nad CD. Jelikož má CD menší hustotu zápisu, bylo interferenčních maxim celkem 5 a byla k sobě blíže.

Během měření jsme postupovali podobně jako u DVD. Při každém měření jsme si tužkou zaznamenali polohu prvního a druhého maxima a otočili CD. Takto jsme postupovali pětkrát – provedli jsme tedy deset měření. Opět jsme počítali s tím, že se poloha hlavního maxima nemění. Vzdálenost vedlejších maxim od hlavního maxima jsme opět měřili metrem.

### Naměřená data

Laserové ukazovátko vytvářelo rozbíhavý svazek, který měl při dopadu na stínítko přibližně 0,5 cm v průměru, proto jsou vzdálenosti  $d_k$  udávány s touto přesností. Zároveň si nemůžeme být jisti, s jakou přesností je určena vlnová délka laseru. Na základě údajů od výrobce<sup>16</sup> odhadneme absolutní odchylku jako  $\Delta\lambda = 10$  nm.

**Hodnoty pro DVD** Naměřená data jsme zapsali do tabulky 17.

Tab. 17: Změřené vzdálenosti 1. maxima  $d_1$  u interference na DVD.

N	$\frac{d_1}{\text{cm}}$
1	82,0
2	81,0
3	81,5
4	83,0
5	83,0
6	81,0
7	81,0
8	81,5
9	78,0
10	77,5

Po výpočtu střední hodnoty a standardní odchylky zjistíme vzdálenost  $d_1 = (81,0 \pm 1,8)$  cm. Hodnotu mřížkové konstanty pro DVD a její absolutní odchylku

<sup>16</sup>[https://www.avetech.cz/data/original/vario/7F31EC60-D261-4801-B59E-DCFD9A32FD1E\\_DB5CA8C0-F923-4E38-8E7A-DCDDFAE936A8.pdf](https://www.avetech.cz/data/original/vario/7F31EC60-D261-4801-B59E-DCFD9A32FD1E_DB5CA8C0-F923-4E38-8E7A-DCDDFAE936A8.pdf)

spočteme pomocí vzorce z konce teoretické části.

$$\begin{aligned}
 b_{\text{DVD}} &= k\lambda \sqrt{1 + \left(\frac{L}{d_k}\right)^2}, \\
 \Delta b_{\text{DVD}} &= \sqrt{\left(\frac{\partial b_{\text{DVD}}}{\partial \lambda}\right)^2 \cdot \Delta \lambda^2 + \left(\frac{\partial b_{\text{DVD}}}{\partial d_1}\right)^2 \cdot \Delta d_1^2 + \left(\frac{\partial b_{\text{DVD}}}{\partial L}\right)^2 \cdot \Delta L^2} = \\
 &= \sqrt{k^2 \left(1 + \left(\frac{L}{d_k}\right)^2\right) \Delta \lambda^2 + \frac{(k\lambda)^2}{1 + \left(\frac{L}{d_1}\right)^2} \frac{L^4}{d_1^6} \cdot \Delta d_1^2 + \frac{(k\lambda)^2}{1 + \left(\frac{L}{d_1}\right)^2} \frac{L^2}{d_1^4} \cdot \Delta L^2}, \\
 b_{\text{DVD}} &= (741 \pm 16) \text{ nm}.
 \end{aligned}$$

**Hodnoty pro CD** Zde jsou hodnoty z druhého měření zanesené do tabulky 18. Z naměřených dat stejným způsobem získáme

Tab. 18: Změřené vzdálenosti 1. maxima  $d_1$  a 2. maxima  $d_2$  u interference na CD.

N	$\frac{d_1}{\text{cm}}$	$\frac{d_2}{\text{cm}}$
1	38,5	106,5
2	38,5	107,0
3	39,0	106,0
4	38,5	106,5
5	38,0	105,5

$$d_1 = (38,5 \pm 0,4) \text{ cm},$$

$$d_2 = (106,2 \pm 0,8) \text{ cm}.$$

Tyto hodnoty dosadíme do vzorců výše, čímž získáme mřížkovou konstantu podle prvního měření  $b_{\text{CD1}}$  a mřížkovou konstantu podle druhého měření  $b_{\text{CD2}}$ .

$$b_{\text{CD1}} = (1468 \pm 31) \text{ nm},$$

$$b_{\text{CD2}} = (1455 \pm 28) \text{ nm}.$$

Poznamenejme, že podle teorie by obě hodnoty měly vyjít stejně, protože mřížková konstanta samozřejmě nezávisí na řádu maxima.

### Diskuse

Podle zdrojů na internetu<sup>17</sup> je hustota zápisu na DVD  $b_{\text{DVD}} \doteq 740 \text{ nm}$  a hustota zápisu na CD  $b_{\text{CD}} \doteq 1600 \text{ nm}$ . V prvním případě spadá naměřená hodnota do chybového intervalu. V druhém sice nikoliv, ale rozdíl není příliš velký. I přesto jsme měřili s relativně nízkou chybou. Vysvětlením může být fakt, že existuje více typů CD nosičů: CD-ROM, CD-R, Audio CD, ... a každý z nich může mít trochu jinou hodnotu hustoty zápisu. Jedná se ale stále o stejnou technologii, takže lze čekat, že se tyto hodnoty nebudou řádově příliš lišit.

Zároveň stojí za zmínění, že jsme změřili hustotu kružnicových stop, do kterých jsou vrypy uspořádány. Hustota zápisu podél těchto stop je ještě vyšší a produkovala maxima, tentokrát jsou v kolmém směru vůči první sadě. Ta však byla daleko od sebe a nemohli jsme je proto naměřit.

Největším zdrojem chyby byla naše neschopnost přesně určit vlnovou délku laseru, což bychom vyřešili použitím lepšího např. laboratorního laseru. Dalším zdrojem chyby je naše neschopnost přesně stanovit polohu interferenčních maxim. Maxima totiž nebyly jednoznačné body, ale skvrny o velikosti 0,5 cm. Tento problém bychom mohli vyřešit použitím laseru s lépe připraveným svazkem.

### Závěr

Změřili jsme mřížkovou konstantu příčného zápisu na DVD  $b_{\text{DVD}} = (741 \pm 16) \text{ nm}$ . Hodnota pro CD nosič byla změřena zvlášť pro první a druhé maximum jako  $b_{\text{CD1}} = (1468 \pm 31) \text{ nm}$  a  $b_{\text{CD2}} = (1455 \pm 28) \text{ nm}$ .

## Úloha VI.E ... minivlny

*Sestavte aparaturu, která bude schopná měřit co nejmenší vlnky na povrchu kapaliny. Nádobu si můžete sami určit – může to být hrnek, láhev či něco jiného. Aparaturu celou řádně popište a vyfoťte. Určete, jakou minimální amplitudu jste schopni naměřit.*

*Karel se díval do blba... totiž psal dizertaci.*

### Úvod

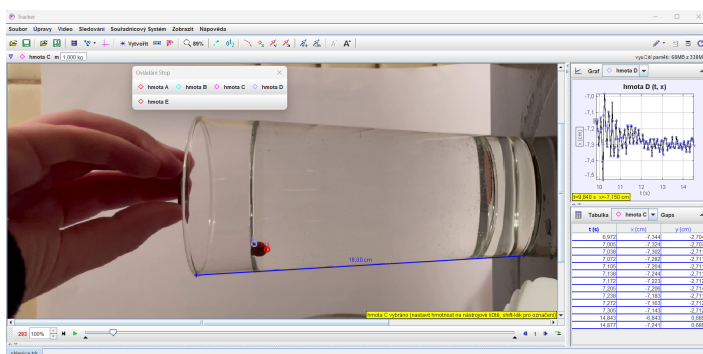
Cílem úlohy je naměřit co nejmenší vlny na vodní hladině. Potřebujeme tedy získat co nejlepší rozlišení s tím, že přesnost pro nás není tak rozhodující. Zároveň potřebujeme měřit průběžně, abychom zaznamenali postupně se snižující amplitudu vln. Nakonec musíme určit, kdy naměřená data ještě odpovídají vlnám a kdy už měříme pouze šum.

### Postup 1: plovák

**Měření** První metodou, kterou jsme použili, bylo přímé měření hladiny vody pomocí záznamu na video, kde byl použit malý plovák k lepší vizualizaci úrovně hladiny. Jako nádoby byly použity sklenice a větší várnice na čaj kvůli vyzkoušení dvou různých rozměrů. Jako plovák sloužila kulička nového koření. Celý proces

<sup>17</sup>[https://www.nnin.org/sites/default/files/files/Karen\\_rama\\_TG\\_part2\\_0.pdf](https://www.nnin.org/sites/default/files/files/Karen_rama_TG_part2_0.pdf)

byl natáčen na kameru mobilního telefonu, video pak bylo zpracováno v programu *Tracker*. K pozorování byl použit jeden bod na spodní straně plováku a jeden z bodů jeho kontaktu s hladinou, protože střed plováku byl těžko identifikovatelný. Ukázku ze zpracování videa můžete vidět na obrázku 21.



Obr. 21: Ukázka ze zpracování dat měření pomocí plováku.

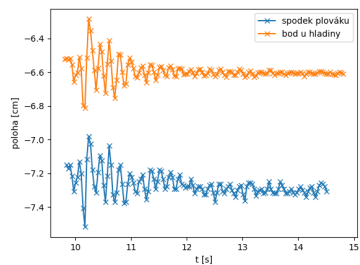
Vývoj polohy sledovaných bodů v závislosti na čase pro obě nádoby je zakreslen na následujících grafech 22.

U obou nádob a obou bodů měření dokážeme rozeznat nejmenší amplitudy řádově 0,2 mm. Pro kontrolu jsme si navíc v programu *Tracker* změřili vzdálenost 20 pixelů, odkud jsme určili vzdálenost středu dvou sousedních pixelů přibližně jako 0,2 mm, tedy stejně jako naměřená amplituda.

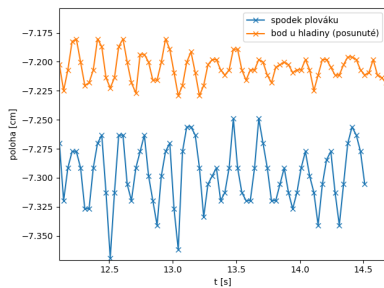
**Diskuze** Z poměru naměřené amplitudy a teoretické meze přesnosti jako vzdálenosti dvou pixelů vidíme, že jsme se dostali na technickou hranici takto sestavené aparatury, protože určování výchylek polohy plováku s vyšší přesností než jeden pixel na záznamu je velmi problematické. Z obrázku 22 můžeme vidět, že pro konvici byly naměřené polohy spodku plováku v protifázi s polohami bodu u hladiny, což značí, že plovák měl příliš velkou setrvačnost a nestíhal se změněm přizpůsobit. U sklenice díky jiné frekvenci vlnění tento problém nenastává, avšak tento jev nám naznačuje, že i takto malý plovák může vlnění nezanedbatelně ovlivňovat. Vyšší přesnosti bychom mohli dosáhnout snímáním menšího prostoru, kdy by jeden pixel zobrazoval menší skutečnou vzdálenost.

### Postup 2: odrazy laseru

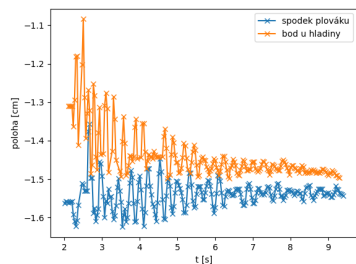
**Teorie** Druhá metoda spočívala ve využití zákona odrazu paprsku laseru od vodní hladiny. V tomto měření posvítíme na hladinu vody laserem pod malým úhlem od kolmice a pozorujeme pohyb odrazu na vzdáleném stínítku (např. na stropě). Když se hladina vody vychýlí o úhel  $\varphi$ , bude změna úhlu odraženého



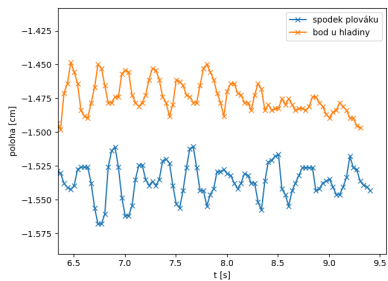
(a) Sklenice



(b) Sklenice – detail



(c) Konvice



(d) Konvice – detail

Obr. 22: Závislost výchylky na čase v obou nádobách, měření pomocí plováku.

paprsku  $2\varphi$ . Pokud označíme vzdálenost hladiny od stropu jako  $h$  a výchylku od rovnováhy polohy odrazu paprsku jako  $x$ , můžeme psát pro malé úhly

$$2\varphi \approx \operatorname{tg} 2\varphi = \frac{x}{h}.$$

Nevýhodou tohoto měření je, že měříme úhel náklonu, a ne přímo amplitudu, kterou musíme z úhlu odhadnout.

Pro odhad amplitudy se tedy nejprve detailněji podíváme na vlnění vody v nádobě. Jelikož je nádoba prostorově omezená, bude u vyvolané vlny docházet k opakovaným odrazům o stěny, až po nějaké době vznikne stojaté vlnění, jehož parametry se pokusíme odhadnout. Stojaté vlnění nemůže mít libovolnou frekvenci a vlnovou délku, ale jeho parametry závisí na rozměrech nádoby a takzvaném módu, což je zjednodušeně počet vln, které se do prostoru (nádoby) vejdou. Jak dále víme, vlnění je tlumené, což je způsobeno zejména viskozitou vody. Tlumení není stejně silné pro všechny módy, ale vyšší módy jsou utlumeny rychleji. Pro náš odhad amplitudy tedy budeme počítat pouze základní mód, přičemž sklenici budeme považovat za rezonátor s volnými konci, jelikož hladina u stěn se také vlní. Pak budeme v nejjednodušším případě uvažovat vlnu s vlnovou délkou rovnou dvojnásobku průměru sklenice  $d$ . Tvar vlny v závislosti na souřadnici  $x$  a čase  $t$  pak můžeme popsat rovnicí

$$A(x, t) = A_0 \sin\left(2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right)\right),$$

kde  $T$  je perioda a  $\lambda$  vlnová délka. Sklon hladiny  $\varphi$ , respektive tangens tohoto úhlu dostaneme derivací podle souřadnice  $x$

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{A_0 2\pi}{\lambda} \cos\left(2\pi\left(\frac{x}{\lambda} - \frac{t}{T}\right)\right).$$

Pokud budeme hledat maximum této funkce, položíme kosinus rovný 1, tedy maximální amplitudu dostaneme jako

$$\operatorname{tg} \varphi = \frac{A_0 2\pi}{\lambda} = \frac{A_0 \pi}{d}.$$

Pokud budeme opět považovat aproximaci malých úhlů a vlnovou délku rovnou dvojnásobku průměru sklenice (tedy maximální kmity uprostřed), můžeme položit tangens úhlu rovný úhlu v radiánech, tedy můžeme psát

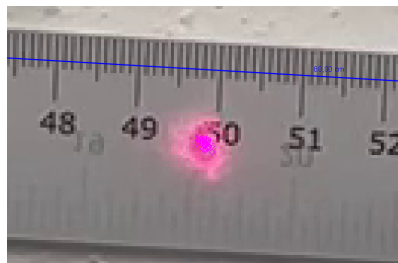
$$\frac{x}{2h} = \frac{A_0 \pi}{d} \quad \Rightarrow \quad A_0 = \frac{xd}{2\pi h}, \quad (39)$$

čímž máme odhadnutou maximální amplitudu, kterou může mít námi měřená vlna způsobující výchylku paprsku o  $x$ .





(a) Použitá aparatura



(b) Ukázka naměřených dat

Obr. 23: Měření pomocí odrazu laserového paprsku.

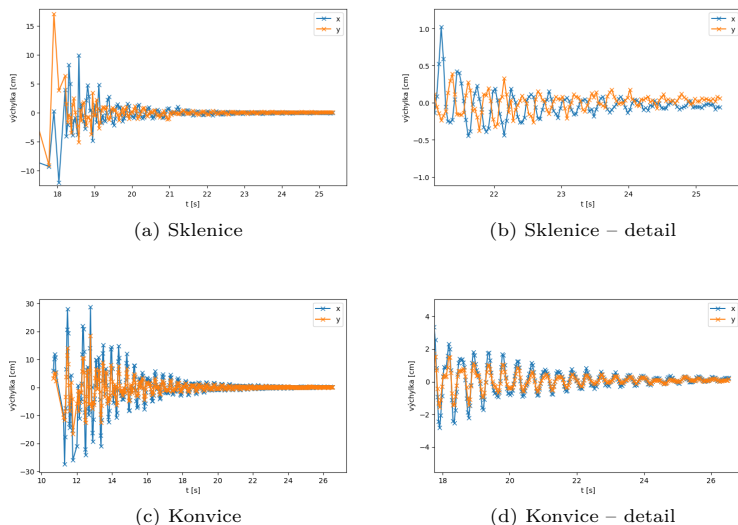
**Postup a výsledky** V našem měření jsme použili červené laserové ukazovátko, které jsme na stole upevnili v držáku a svítili jím na hladinu sklenice vody umístěné na zemi. Jako stínítko jsme použili strop místnosti, na který jsme lepicí páskou upevnili metr. Oblast kolem rovnovážné polohy odrazu jsme pak snímali kamerou na mobilu. Aparatura je zobrazena na obrázku 23a, ukázka odrazu použitého ke zpracování pak na obrázku 23b.

Naměřené polohy odrazu pak byly zpracovány v programu Tracker, který byl zkalibrován pomocí zobrazeného metru. Ostatní parametry aparatury byly naměřeny pásmem nebo posuvným měřítkem a jsou uvedeny v tabulce 19, nejistoty měření byly určeny jako polovina nejmenšího dílku, v případě výšky  $h$  pak součet nejistoty měření výšky místnosti 0,5 cm a nejistoty měření polohy hladiny, kterou jsme z důvodů kapilárních jevů u stěny nádoby odhadli na 1 mm.

Tab. 19: Parametry měření laserem.

	sklenice	konvice
$\frac{d}{\text{cm}}$	$7,22 \pm 0,05$	$14,3 \pm 0,1$
$\frac{h}{\text{cm}}$	$265,4 \pm 0,6$	$272,9 \pm 0,6$

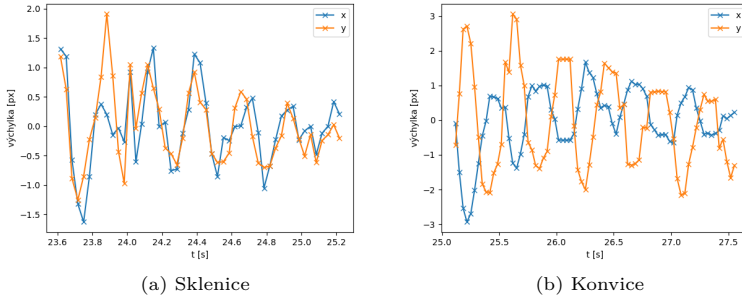
Měření bylo opět prováděno se dvěma nádobami, z nichž každá měla jiný polo-  
měr a jinou výšku hladiny, tudíž byla jiná výška  $h$  od hladiny ke stropu. Z měření  
v Trackeru byly určeny souřadnice poloh odrazu na jednotlivých snímcích a rovno-  
vážná poloha určena jako jejich průměr. Na obrázku 24 jsou zakresleny výchylky  
od rovnováhy v obou souřadnicích pro obě nádoby.



Obr. 24: Závislost výchylky laserového odrazu na čase v obou rozměrech.

Z grafů vidíme, že u sklenice můžeme dobře identifikovat vlny do amplitudy  
0,2 cm, zatímco pro konvici jen do 0,5 cm. Pro menší amplitudy jsme pak při zpra-  
cování dat pozorovali, že změna polohy odrazu laseru je sice poznatelná, ale špatně  
se určuje střed odrazu, jelikož odraz laseru má na stínítku rozměr téměř půl cen-  
timetru. Proto jsme se rozhodli použít k dalšímu zpracování program *Python*, do  
kterého jsme načítali jednotlivé snímky videa. V těch jsme v červeném kanálu spo-  
čítali polohu těžiště odrazu (jako váhu jsme použili intenzitu v červeném kanálu)  
a tyto hodnoty použili jako polohy odrazu. Závislost polohy odrazu na čase je vy-  
kreslena v grafech na obrázku 25. Jelikož zde již nefungovala kalibrace z Trackeru,  
jsou hodnoty výchylek uvedeny v pixelech a pro přepočítání jsme použili novou kalib-  
raci určenou z poloh krajních bodů metru. Z této kalibrace vyplývá, že jeden pixel  
odpovídá 0,58 mm pro měření se sklenicí a 0,39 mm pro měření s várnicí. Jelikož je  
nejistota určení obou krajních bodů  $\pm 1$  px a vzdálenost těchto bodů odpovídá des-  
átkám pixelů, je nejistota kalibrace menší než 1 %, a tudíž vůči ostatním chybám  
zanedbatelná.

Zde již dokážeme pro měření se sklenicí identifikovat vlny o amplitudě 0,5 px  $\doteq$



Obr. 25: Detailní graf výchylek určených pomocí zpracování v Pythonu.

$\doteq 0,29$  mm a pro měření s konvicí vlny o amplitudě  $1 \text{ px} \doteq 0,39$  mm. Ve skutečnosti jsou námi naměřené vlny  $\sqrt{2}$ -krát větší, protože amplituda má danou velikost ve dvou na sebe kolmých směrech, pro sklenici tedy máme  $x = 0,41$  mm a pro várnici  $x = 0,55$  mm. Vzhledem k nepřesnosti určení amplitudy odhadujeme nejistotu měření na 10 %, jedná se tedy spíše o řádový odhad, což nám ale v tomto případě příliš nevádí. Po dosazení do vzorce (39) dostaneme amplitudu vlny pro měření ve sklenici  $A_0 = (1,8 \pm 0,1) \text{ } \mu\text{m}$  a pro měření na hladině v konvici  $A_0 = (4,6 \pm 0,5) \text{ } \mu\text{m}$ .

**Diskuze** S touto metodou jsme se dostali na řádově vyšší přesnost, a to na identifikaci vln o amplitudách v řádu mikrometrů. Tato metoda však ve své podstatě měří úhel náklonu hladiny, ze kterého je amplituda jen odhadnuta s předpokladem stojatého vlnění o dané vlnové délce a namíření laseru do jeho uzlu (tj. bodu s největšími sklony). Přesnost určení velikosti amplitudy je tak omezená (jedná se spíše o řádový odhad), avšak z tohoto měření můžeme s velkou jistotou říci, zda se hladina vlní či nikoli. Hlavními problémy tohoto měření je nedokonalost laserového paprsku, který není přesně bodový, a jeho divergence (neboli rozbíhání), kvůli které má stopa na stínítku průměr přibližně půl centimetru. Ke zlepšení citlivosti měření by tak bylo potřeba použít kvalitnější laser s menší stopou. Dalšími nejistotami měření jsou nepřesné kalibrace měření výchylky odrazu laseru, ať už nepřesným určením na fotografii nebo samotným nedokonalým připevněním metru na strop, který byl mírně prohnutý. Dále v tomto měření zanedbáváme změnu vzdálenosti hladiny od stínítka, která je vzhledem k velikosti amplitudy vlny velmi malá.

V této části jsme vlnu považovali za jednorozměrnou a zanedbali tak kruhový tvar sklenice. Pro jeho započtení bychom museli řešit vlnovou rovnici na kruhovém prostoru, což by vedlo na Besselovy funkce s mnoha různými módy. Vzhledem k tomu, že jejich popis je složitý, vzniklé rovnice je nutné řešit numericky a výsledky se liší od aproximace rovinné vlny jen o několik procent, použili jsme zde pouze

přibližný postup, který pro náš řádový odhad stačí. Zájemce o přesný popis vlnění na vodní hladině odkazujeme na bakalářskou práci zabývající se tímto tématem.<sup>18</sup>

### *Diskuze*

Obě měření vln spočívala v co nejpřesnějším pozorování obrazu na videu, ať už se jednalo o plovák v prvním případě, nebo o odraz laseru v druhém případě. Přesnost měření by se tedy dala u obou možností zvýšit použitím kamery s vyšším prostorovým i časovým rozlišením, nebo snímáním menší části prostoru. V případě laseru bychom pak mohli promítat jeho odraz přímo na čip kamery, avšak museli bychom použít vhodné filtry, aby nedošlo k jeho poničení. I s použitím běžného telefonu jsme se však dostali na zlomky milimetru v přímém měření a na jednotky mikrometrů v měření pomocí laserového paprsku, což je velmi dobrá přesnost.

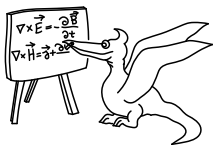
U obou měření nám šlo především o řádový odhad možností použité aparatury spíše než o přesné změření dané vlny, proto jednotlivá měření amplitud mají nejistotu desítky procent. Pokud bychom chtěli dosahovat ještě vyšších přesností, nabízelo by se použití interferometru, který by nám umožňoval měřit s přesností srovnatelnou s vlnovou délkou použitého světla, tedy řádově stovky nanometrů. Konstrukce interferometru by však vyžadovala speciální pomůcky a velmi dobré vyladění aparatury.

### *Závěr*

Použili jsme dvě metody k měření amplitudy vln na vodní hladině. Při přímém měření amplitudy pomocí záznamu na kameru jsme byli schopni naměřit vlny o amplitudě přibližně 0,2 mm, při měření pomocí odrazu laseru od vodní hladiny jsme se dostali až k vlnám o amplitudě  $(1,8 \pm 0,1) \mu\text{m}$  v případě měření ve sklenici a  $(4,6 \pm 0,5) \mu\text{m}$  v případě měření v konvici na čaj. Měření pomocí odrazu laserového paprsku nám tedy dovolilo měřit až stokrát menší vlny.

---

<sup>18</sup>[https://is.muni.cz/th/mqi9u/Peckova\\_Vlny\\_na\\_vodni\\_hladine.pdf](https://is.muni.cz/th/mqi9u/Peckova_Vlny_na_vodni_hladine.pdf)



## O kvantové chemii

### Kapitola 1: Hledáme kvanta

Letos se v seriálu podíváme na kvantovou fyziku. Zaměříme se na to, co můžeme zjistit o světě kolem nás. Detaily matematického formalismu, kterými se učebnice kvantové fyziky zabývají obvykle, odsuneme do pozadí. Zatím bych nerad prozrazoval příliš mnoho, proto se nechte překvapit!

Dneska si povíme něco o jejich základech a jejím vzniku – kvantová fyzika nespadla z nebe, ale samozřejmě vychází z pozorování světa okolo nás. Bylo by fér, abychom se dnes podívali a vysvětlili si (některé) experimenty, které vedly ke vzniku kvantové mechaniky tak, jak se používá dnes.

### Historický úvod do vzniku kvantové mechaniky

Psal se konec 19. století, když se zdálo, že jsou známy veškeré fyzikální zákony a fyzici tehdejší doby mají v rukou teorii popisující veškeré fyzikální interakce ve vesmíru. Tento dojem krásně shrnuje dnes již legendární citát:

„Ve fyzice už není nic, co by se ještě dalo objevit. Zbývá jen stále přesnější a přesnější měření.“

Často je připisován Lordu Kelvinovi, přestože podle všeho se zdá, že jej nikdy nevyslovil.

Tehdy ještě nikdo netušil, jak moc je toto tvrzení mylné. Nějaké náznaky ukazující na neúplnost tehdejší fyziky, kterou dnes označujeme jako klasickou teorii, samozřejmě byly známy už v tehdejší době. Například podle klasické teorie by měly atomy interagovat se všemi barvami světla stejně. Experimenty ale ukazovaly, že každý atom preferuje své oblíbené barvy, zatímco jiných si ani nevšimne. Dále bylo pro vysvětlení některých experimentů nutné zavést myšlenku éteru, který ale nikdo nikdy neviděl (a později se ukázal jako nadbytečný).

O něco později, na začátku 20. století, fyzici začali tyto nesoulady zkoumat a přetavili je ve velikou ránu klasickému pohledu na svět. Vznikly totiž dvě nové teorie, které zásadním způsobem změnilly tehdejší chápání světa. Trošku překvapivě u zrodu obou stál jeden a ten samý pán, o kterém jste nejspíš již někdy slyšeli. . .



Jedna z těchto teorií ukázala, že pojem prostoru a času není úplně tak rigidní a univerzální, jak se do té doby soudilo. Dnes je známá jako teorie relativity. V tomto seriálu se ale budeme spíše zajímat o tu druhou, kvantovou teorii. Podle ní se příliš malé částice vůbec nechovají tak jako běžné objekty, které známe ze světa okolo nás, tedy podle zákonů, které formuloval jeden jablkem do hlavy praštěný génius o něco více než 2 století předtím. Jejich chování je naopak podle našeho vnímání velmi podivné a ještě podivnější, ale to již trochu předbíháme.

Pojďme se ale vrátit k nesrovnalostem experimentální fyziky a klasické teorie. Již v 19. století se vědělo, že tělesa, která mají nenulovou teplotu, vyzařují elektromagnetické záření. Spektrum takového tělesa se mění s jeho teplotou. Pro teploty běžné kolem nás toto záření leží zejména v infračervené oblasti. Naše lidské oči ho proto nevidí, narozdíl třeba od hadů nebo jiné havěti. Pokud chceme, aby předmět svítil i ve viditelném spektru, stačí se ho zahřát na teploty řádově tisíců stupňů (rozžhavit do ruda, případně do běla).

Se zaváděním úsporných žárovek je tento problém docela aktuální. Výrobci přímo na obalech uvádějí teplotu světla, aniž by takové teploty žárovky skutečně dosahovaly, proto se astronomicky vysokých teplot nemusíme bát. Místo toho je na obalu uvedena teplota černého tělesa, jehož spektrum by nám přišlo stejné jako spektrum daného zdroje světla uvnitř obalu. A to i přesto, že například zářivky nebo mnohé LED zdroje tvoří bílé světlo jen z pár konkrétních vlnových délek, oproti relativně rovnoměrnému rozložení černého tělesa. Paradoxně zdroje označované jako teplé mají nejnižší teplotu, protože mají tendenci být zabarveny do červena, což je vnímáno jako teplá barva. (Možná, kdyby oheň v krbu měl 10000 °C, bylo by tomu jinak.)

Vraťme se ale k absolutně černému tělesu a pojďme ho nadále zahřívát. Začneme si hrát s plazmatem o teplotě miliónů stupňů (nedoporučuji!) a máme zase smůlu. Naše oko ani v tomto případě záření nevidí, protože vyzařované světlo nám uteče do ultrafialové části spektra. Lidé pracující na tokamaku by vám mohli vyprávět, že ty jasné zářící oblasti v něm jsou trochu paradoxně právě ty nejstudenější.

Každopádně, spektrum záření absolutně černého tělesa bylo přesně změřené dávno před 20. stoletím. Zároveň z termodynamiky a především statistické fyziky, oborů překotně se rozvíjejících na konci 19. století, se povedlo odvodit Rayleighův-Jeansův zákon, který dává velice přesné předpovědi pro dlouhé vlnové délky. Bohužel diverguje pro opačnou část spektra (krátké vlnové délky) a předpovídá ne-

konečnou vyzářovanou energii v ultrafialové oblasti. Asi nemusím zdůrazňovat, že takový výsledek je silně problematický, také by se dal označit za nefyzikální. Pro krátké vlnové délky byl naopak znám empirický Wienův vzorec, který je ale pro změnu nepoužitelný pro dlouhé vlnové délky.

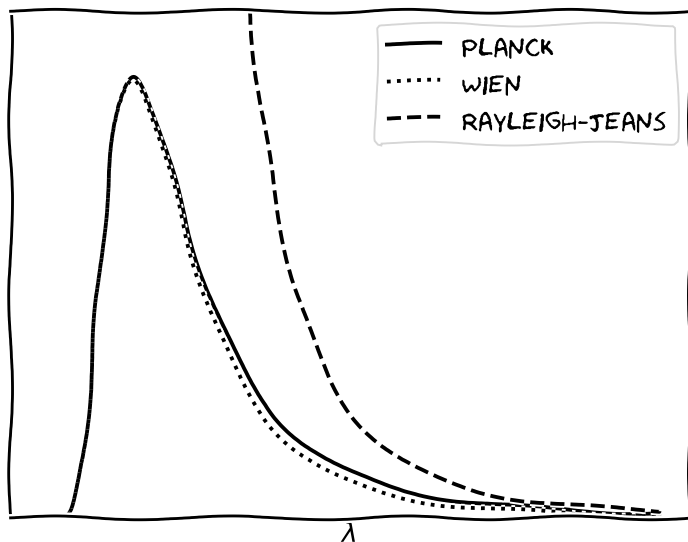
Perfektní shodu mezi teoretickou předpovědí a experimentálně změřeným zářením absolutně černého tělesa dostal poprvé v roce 1901 německý fyzik Max Planck. Do té doby nevídanou univerzálnost předpovědi získal zavedením úplně jednoduchého předpokladu. Těleso v jeho práci nemůže energii zářením vydávat libovolně, ale musí tak činit v balíčcích o přesně dané velikosti úměrné frekvenci záření. Balíčkům se později začalo říkat kvanta a daly název celému oboru, který se okolo této myšlenky později začal rozvíjet. Navíc nebyl problém určit ze známého spektra konstantu této úměrnosti  $h$  ve vztahu  $E = h\nu$ . Tato konstanta od té doby nese Planckovo jméno a asi vás nepřekvapí, že se s ní ještě mnohokrát setkáme. Bohužel Planck ale neměl správnou fyzikální intuici, a celý koncept kvant považoval více za matematický trik než za novou fundamentální změnu v chápání fyziky.

Tuto chybu ale vzápětí napravil již v úvodu (implicitně) zmiňovaný Albert Einstein, který použil stejný „trik“, aby v roce 1905 vysvětlil fotoefekt. Když do kovu svítíme ultrafialovým světlem, začneme z něj vyrážet elektrony. Jakmile ale frekvenci záření snížíme pod nějakou mez, najednou elektrony vylétávat přestanou, i kdybychom zvyšovali intenzitu nízkofrekvenčního světla sebevíc. V takovém případě bychom dříve kov roztavili, než bychom z něj vyrazili elektrony (ve skutečnosti při teplotě kolem 1000 °C dochází k termoemisi, ale to není příliš podstatné). Závislost fotoefektu na frekvenci světla a nezávislost na intenzitě světla je velmi neintuitivní. I Einstein dokázal z experimentálních dat přesně určit konstantu úměrnosti mezi frekvencí záření a energií „balíčků“ a (pro nás už nepříliš) překvapivě obdržel přesně stejnou hodnotu jako Planck!

Einstein ale narozdíl od Plancka správně usoudil, že to nemůže být náhoda, a tak povýšil tento matematický trik na fundamentální fyzikální zákon. Světlo se vždy musí šířit v kvantech o přesně dané energii. Energie nemůže být libovolná, ale je daná součinem frekvence záření a Planckovy konstanty. Zároveň zavedl dodnes používané označení pro tato kvanta, fotony. Vzkřísil tak teorii o částicové povaze světla, která v té době byla považována za překonanou.

Viceméně souběžně s tím probíhala snaha vysvětlit strukturu atomů a molekul, která se vyznačovala vytvářením teoretických modelů, které byly vzápětí vyvraceny novými experimentálními daty. Z počátku to byly spíše dohady – John Dalton na začátku 19. století je považoval za tuhé koule, později naopak zmíněný Lord Kelvin očekával, že jsou to víry v éteru. První experimentem podložený model přišel po roce 1897, kdy J. J. Thompson objevil elektrony. Definitivně tedy prokázal, že atom má nějakou vnitřní strukturu, na což navázal v roce 1904 svým pudinkovým modelem atomu. Atom si představoval tak, že záporně nabitě elektrony plavou v rovnoměrně rozprostřeném kladném náboji.

V letech 1908-1913 prováděl Ernest Rutherford se svými spolupracovníky experimenty s rozptylem alfa částic na tenké zlaté fólii. Zjistil, že část částic se



Obr. 26: Rozložení vyzařovaného výkonu absolutně černého tělesa podle vlnové délky, jak jej předpovídali tři teorie zmiňované v textu. Všimněme si, že přestože Rayleighův-Jeansův vzorec vypadá velmi odlišně od toho Planckova, pro velmi dlouhé vlnové délky dávají podobný výsledek. A naopak Wienův vzorec pro dlouhé vlnové délky začne předpovídat nižší vyzařovaný výkon. Přestože se tento rozdíl může zdát malý, celkový výkon vyzařovaný přes všechny vlnové délky (plocha pod křivkou) je asi o 8% menší, ale pořád je to lepší předpověď než Rayleighova-Jeansova.



rozptyluje a velmi významně přitom změní směr, některé se dokonce odrazily zpět do směru, ze kterého přiletěly. To je neslučitelné s Thompsonovým modelem, protože v rozprostřeném náboji „pudinku“ by se nabitě částice rozptylovaly naprosto minimálně. Rutherford výsledky (správně!) interpretoval tak, že veškerý kladný náboj a hmotnost v atomu jsou koncentrovány v jádře, které je téměř bodové. Tak vznikl Rutherfordův planetární model atomu, kde kolem těžkého, téměř bodového a kladně nabitého jádra obíhají lehké elektrony. Energie elektronů v takovém modelu musí nutně záležet na poloměru dráhy daného elektronu. Jedním z největších problémů tohoto modelu bylo, že podle zákonů klasické elektrodynamiky nemohl být stabilní. Elektron obíhající kolem jádra se chová jako miniaturní anténa, která vysílá elektromagnetické záření. Ze systému by takové záření odnášelo energii, což by mělo vést k tomu, že elektron během zlomku vteřiny spadne do jádra.

Tento drobný nedostatek vyřešil Niels Bohr zdánlivě jednoduchým předpokladem, že se elektrony nemohou v atomech pohybovat po libovolných drahách, ale jen po specifických orbitách. Elektrony sice mohou libovolně mezi orbitami přeskakovat, popřípadě se od jádra úplně odpoutat. Tím zároveň vysvětlil úplně jiný jev, který jsme zatím nezmiňovali. Atomy totiž nevyzařují záření spojitě, ale jen na konkrétních vlnových délkách - spektrálních čarách.

Již na počátku 19. století si Joseph von Fraunhofer (jakož i před ním William Hyde Wollaston) všimli, že když pomocí hranolu (nebo Fraunhofer pomocí difrakční mřížky, kterou sám vymyslel) rozloží sluneční světlo na jednotlivé barvy, ve výsledném spektru barev jsou černé čárky. Ty se interpretují tak, že dané vlnové délky ve spektru chybí. Zanedlouho poté byl velmi podobný jev objeven i u prvků zde na Zemi. Atomy při zahřátí vyzařují na přesně daných vlnových délkách. Vědci nelenili a velmi rychle vznikla empirická pravidla popisující chování spektrálních čar, jakož i byly změřeny vlnové délky čar tehdy známých prvků. Vyvrcholení přišlo v roce 1868, kdy Norman Lockyer našel ve slunečním spektru spektrální čáru, která neodpovídala žádnému dosud známému prvku. Neznámý prvek, helium, byl o 20 let později objeven a izolován i na Zemi.

Pro náš příběh je ale zajímavé hlavně to úplně nejjednodušší spektrum, a to konkrétně spektrum atomu vodíku. Vodík má jen jeden elektron, a tak jeho spektrum nemůže být ovlivněno interakcí mezi více elektrony, která zásadním způsobem ovlivňuje polohy spektrálních čar. Právě u takového spektra si Johann Jakob Balmer, který byl trochu posedlý numerologií, všiml, že vlnové délky spektrálních čar vodíku lze vyjádřit vcelku jednoduchým vztahem, který pak Johannes Rydberg zobecnil na

$$\frac{1}{\lambda} = R \left( \frac{1}{n_1^2} - \frac{1}{n_2^2} \right),$$

kde  $R$  je Rydbergova konstanta a  $n_1, n_2$  jsou libovolná přirozená čísla.

Když se teď vrátíme zpět k Bohrovu modelu atomu, zjistíme, že přirozeným způsobem zahrnuje i tyto spektrální čáry. Rozdíly mezi energiemi Bohrových orbit by v takovém modelu odpovídaly spektrálním čarám daného atomu. Zároveň je (trochu ad hoc) zajištěná stabilita atomů, protože z nejnižší orbity již elektron nemůže spadnout do jádra.

Pokud použijeme Rydbergův vztah na spektrum atomu vodíku, zjistíme, že odpovídá přeskokům mezi hladinami o energiích daných vztahem  $\frac{hcR}{n^2}$ , kde  $n$  je číslo hladiny. Z toho Bohr vyvodil, že podobně jako kvanta světla u Einsteina a Plancka předtím, i v tomto případě máme kvantovanou veličinu. Tou je tentokrát moment hybnosti elektronu, který na povolených drahách nabývá celočíselného násobku  $\hbar = \frac{h}{2\pi}$ . Ač je Bohrův model v podstatě pravdivý, stále nedokáže vysvětlit, proč toto kvantování vzniká.

V roce 1924 přišel Louis de Broglie ve své dizertační práci s revoluční myšlenkou. Pokud se světlo chová v některých případech jako vlnění a v jiných případech jako částice, proč by se nemohly entity doposud považované čistě za částice (například elektrony) chovat v některých případech jako vlna? Ze vztahů pro hybnost a energii fotonu o konkrétní vlnové délce odvodil, že vlnová délka elektronu o hybnosti  $p$  by měla být

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

Zároveň učinil pozorování, že podmínka kvantování momentu hybnosti v Bohrově modelu odpovídá tomu, že na kruhovou orbitu se vejde právě celočíselný počet vln (ve chvíli, kdy o elektronu v tomto případě uvažoval jako o vlně). Část vědecké komunity ale byla k této myšlence silně skeptická. Dokonce se traduje (spíše ale nepodložená) historka, že kdyby se za jeho dizertaci předtím nepostavil sám Einstein, de Broglie by svoji práci neobhájil. Na druhou stranu jiný nositel Nobelovy ceny, Max von Laue, o této teorii prý prohlásil: „Pokud se toto ukáže být pravdivé, přestanu se věnovat fyzice.“ (Asi tušíte jak to dopadlo: Poté, co se de Broglieho hypotéza potvrdila experimentálně, obdržel roku 1929 Nobelovu cenu a Max von Laue se věnoval fyzice až do své smrti v roce 1960. Paradoxně experiment, který ukázal, že de Broglie měl pravdu, byl velice podobný tomu, za který obdržel Nobelovu cenu Laue.)

Okolo roku 1925 začal Werner Heisenberg formulovat rigorózní teorii kvantovaných elektronů pomocí násobení nekomutujících matic, ale protože je dost komplikovaná na pochopení, tak se s dovolením přeneseme až do roku 1926. To Erwin Schrödinger, vycházející z de Broglieho ideje, formuloval rovnici, která jako řešení pro pohyb volného elektronu dává právě de Broglieovy rovinné vlny. K všeobecnému přijetí této rovnice ale vedlo až to, že její řešení pro atom vodíku, tedy elektron pohybující se v elektrostatickém potenciálu jádra, přesně odpovídalo experimentálně změřenému spektru.

Tato rovnice, která se v téměř nezměněné podobě používá dodnes, nás bude provázet celým zbytkem seriálu. Ale tuto rovnici si ukážeme až příště, včetně řešení pro jednoduché modelové systémy.

## Úloha I.S ... hledáme kvanta

10 bodů

Najděte si hodnotu Rydbergovy konstanty a určete, které spektrální čáry vodíku náležejí do viditelného spektra. Tyto čáry jsou jediné, které mohl Rydberg k objevení svého vztahu použít, protože UV ani IR spektra ještě nebylo možné měřit. Jakou mají barvu a kterým přechodům v Bohrově modelu odpovídají? (3 b)

Spočítejte si svoji de Broglieho vlnovou délku. Jaká je tato hodnota ve srovnání s velikostí atomu, případně atomového jádra? (3 b)

Máme kyvetu s 10 ml roztoku fluoresceinu ve vodě, do které svítíme argonovým laserem o vlnové délce 488 nm a výkonu 10 W. Zároveň molekula fluoresceinu fluorescenčně vyzařuje na vlnové délce 521 nm s kvantovým výtěžkem (podíl absorbovaných fotonů, které se vyzaří zpět) 95 %. Pokud je počáteční teplota kyvety 20 °C, za jak dlouho se její obsah začne vařit? Předpokládejte, že kyveta je dokonale tepelně izolovaná, že paprsek se v ní plně absorbuje a že množství fluoresceinu je zanedbatelné z hlediska tepelné kapacity. (4 b) *(řešení str. 193)*

## Kapitola 2: Počítáme kvanta

V dnešním díle si zavedeme Schrödingerovu rovnici, jak jsme si slíbili minule. Rovnou si s ní můžeme začít i hrát.

### *Díky, teď jsem se ztratil*

Než si ale ukážeme zmíněnou rovnici, je potřeba se nejdříve úplně oprostít od klasické (Newtonovské) mechaniky. Musíme si uvědomit, že se nemění jen pohybová rovnice řídící pohyb těles, ale i samotné veličiny popisující pohyb.

V klasické mechanice se vyskytují zejména dvě veličiny: poloha a rychlost (hybnost) částice v každém bodě trajektorie. Pokud známe tyto dvě veličiny pro všechny částice, stačí nám to k úplnému popisu jejich pohybu. Pohyb je tedy popsán funkcemi času:  $\vec{x}(t)$ ,  $\vec{v}(t)$ . První z nich rozlišuje, jestli se šíp nachází v luku nebo již byl vystřelen po kořisti. Druhá z nich pak rozlišuje stojící šíp od letícího (což je problém, který trápil Zenóna v antice natolik, že jej nazýval paradoxem).

V kvantové mechanice tyto dvě veličiny nahradíme jedinou funkcí všech prostorových souřadnic a zároveň i času, nazývanou vlnová funkce. Standardně se označuje řeckým písmenem  $\psi(\vec{x}, t)$ . Oproti klasické poloze a hybnosti navíc může tato vlnová funkce obecně nabývat i komplexních hodnot. Její složitosti se nemůžeme divit, protože je v ní zakódována informace jak o poloze, tak o hybnosti částice. Schválně říkáme zakódována, protože v kvantové mechanice se přesná informace o tom, kde částice jsou nebo jak rychle se pohybují, zcela vytrácí. Dekódovat se mohou pouze pravděpodobnosti, například s jakou se částice na daném místě nachází.

Tato pravděpodobnost je daná jako čtverec absolutní hodnoty vlnové funkce

$$P_{\text{částice} \in \vec{x}} \sim |\psi(\vec{x})|^2 .$$

Rovnost zde nepíšeme zcela záměrně, protože uvažovat pravděpodobnost výskytu v jednom konkrétním bodě prostoru je z matematického hlediska ošemetné (bod zabírá nekonečně malou část prostoru, a proto podle matematické logiky pravděpodobnost výskytu v něm nemůže být nenulová). Časovou závislost tu pro jednoduchost explicitně nepíšeme, ale samozřejmě pokud se naše vlnová funkce v čase

mění, bude se měnit v čase i tato pravděpodobnost. Odborně se této veličině říká hustota pravděpodobnosti

$$\rho(\vec{x}) = |\psi(\vec{x})|^2 .$$

Pokud tuto hustotu přintegrujeme přes nějakou oblast, získáme pravděpodobnost výskytu částice v této oblasti (podobně jako je hmotnost integrálem z hustoty přes objem)

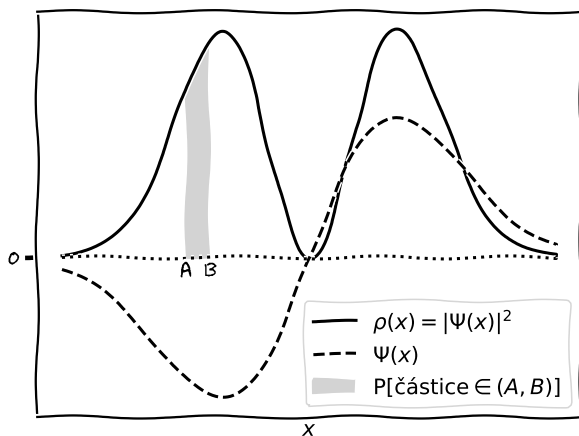
$$P_{\text{částice} \in (a,b)} = \int_a^b \rho(x) dx .$$

Toto je jednorozměrný příklad, ale ve vícerozměrném případě je to podobné. A pokud vás seznámení s integrály ještě čeká, pak vezte, že to znamená jen spočítat plochu pod nějakou částí grafu. Pokud by hustota pravděpodobnosti byla ve všech bodech uvažované části prostoru stejná, byla by pravděpodobnost pouhým součinem hustoty a objemu.

Vcelku přirozeným požadavkem je pak to, že chceme, aby celková pravděpodobnost výskytu částice byla 1 (tedy, že částice se zcela určitě někde nachází)

$$P_{\text{Tot}} = \int_{-\infty}^{\infty} \rho(x) dx = \int_{-\infty}^{\infty} |\psi(\vec{x})|^2 dx = 1 ,$$

který se nazývá též požadavek normalizace vlnové funkce.



Obr. 27: Vlnová funkce (přerušovaná čára) a hustota pravděpodobnosti (plná čára). Pravděpodobnost, že se částice vyskytuje někde mezi  $A$  a  $B$ , je pak plocha šedě vybarvené oblasti.

Hybnost je pak zakódována pomocí takzvaného operátoru hybnosti (Co je to operátor si řekneme vzápětí, ale značíme jej stříškou.), který je dán derivací

$$\hat{p} = -i\hbar \frac{d}{dx}.$$

Derivace je matematická operace, která v každém bodě funkce nahradí funkční hodnotu jejím sklonem. Tedy například derivací lineární funkce (jejíž sklon se nemění) je konstantní funkce. Hybnost není možné interpretovat tak jednoduše jako polohu, v tom smyslu, že pomocí operátoru hybnosti nelze jednoduchým způsobem zavést hustotu pravděpodobnosti pro hybnost. (A složitý způsob přesahuje rámec tohoto textu.)

Na co ale můžeme (ne úplně rigorózně) nahlédnout, je platnost Heisenbergova principu neurčitosti, tedy že čím přesněji známe polohu částice, tím méně víme o její hybnosti. Když si představíme, že vlnovou funkci při zachování plochy pod křivkou chceme co nejvíce „splácnout“, aby neurčitost polohy byla malá, zjistíme, že hybnost daná sklonem křivky bude ohromná a bude se hodně měnit. Opačně, pokud chceme mít nízké změny sklonu, vlnová funkce se nám „rozplizne“ do prostoru (ale vlnová funkce s konkrétní hodnotou hybnosti musí být komplexní). To je i podstatou mnoha vědeckých vtipů, například:

Zastává Heisenberga v autě policista a ptá se

„Víte, jak rychle jste jel?“

„Ne, ale zato vím přesně, kde jsem.“

„No jel jste 95 km/h v obci.“

„Díky, teď jsem se ztratil!“

Nyní již můžeme odpovědět na zásadní otázku, která nám tak trochu zůstala z minulého dílu – proč elektron vlastně nespadne do jádra. Odpověď je prostá, kvůli principu neurčitosti! Kdyby elektron spadl přímo do jádra, měl by sice nejnižší potenciální energii, ale byl by přesně lokalizovaný, takže by nám rostla neurčitost hybnosti nade všechny meze. Kvůli tomu by pak elektron měl nekonečnou kinetickou energii. Proto elektron preferuje takové stavy, kde je neurčitost v poloze a v hybnosti vyvážená.

### Konečně rovnice

Když už máme rozumný popis pomocí vlnové funkce  $\psi(\vec{x})$  v každém čase, tedy vlastně pomocí funkce prostoru i času  $\psi(\vec{x}, t)$ , nic nám nebrání zavést časovou Schrödingerovu rovnici

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi(\vec{x}, t) = \hat{H} \psi(\vec{x}, t). \quad (40)$$

Tu nelze nijak odvodit z klasické fyziky, sám Schrödinger její tvar odhadl z toho, že chtěl, aby její řešení pro částici bez žádného vnějšího potenciálu byly rovinné vlny. To zase byl trochu šťastný tip de Broglieho, jak si jistě pamatujete z minulého dílu. Postupně se pak ukázalo, že tato rovnice dokáže popsat svět okolo nás. Na

levé straně této rovnice máme součin imaginární jednotky, redukované Planckovy konstanty a parciální derivace vlnové funkce podle času. Na pravé jsme pro popis systému vypůjčili z teoretické mechaniky operátor hamiltoniánu ( $\hat{H}$ ), který ale pro rozumné systémy není nic jiného než součet kinetické a potenciální energie. Jeho tvar v kvantové (bez stříšky i v klasické) mechanice je jednoduchý

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x),$$

v případě 3D prostoru pak jen druhou derivaci nahradíme Laplaceovým operátorem. Všimněme si, že se nejedná o běžnou fyzikální veličinu, ale operátor (proto ta stříška!). To je matematický objekt, který vezme funkci a udělá z ní jinou funkci (taková „funkce na funkcích“). Jak vidíme, operátor může být například derivace, vynásobení konstantou, umocnění na třetí nebo jiná operace, kterou můžeme s funkcemi dělat. Konkrétně pak hamiltonián vezme libovolnou funkci (narozdíl od zápisu používaného pro působení funkcí nepíšeme funkci na kterou operátor působí do závorek, ale prostě vpravo od operátoru), pak ji nejdříve dvakrát zderivuje, přenásobí ji faktorem  $-\frac{\hbar^2}{2m}$  (to odpovídá kinetické energii) a nakonec k výsledku přičte součin potenciálu a původní vlnové funkce (to odpovídá potenciální energii).

Schrödingerova rovnice je o mnoho komplikovanější než ty, se kterými se setkáváte běžně. Je to rovnice, jejímž řešením není číslo, ale rovnou celá funkce, která danou rovnici splňuje (takové rovnice se nazývají diferenciální).

Protože ale řešit tuto rovnici zároveň pro prostorové rozložení a časový vývoj by bylo neúměrně složité, ještě Schrödingera při jejím zavádění rovnou napadlo hledat taková řešení, kde se hustota pravděpodobnosti v čase nemění (v těchto stavech se totiž takový kvantový systém jako třeba atom bude vyskytovat). Je to vlastně podobná myšlenka jako u Bohrova modelu, že jsou povolené jen některé trajektorie. Takové stavy lze snadno najít hledáním řešení ve tvaru

$$\psi(x, t) = e^{-i\frac{E}{\hbar}t} \psi(x),$$

kde  $E$  je celková energie systému. Funkci polohy a času  $\psi(x, t)$  jsme tak rozložili na součin dvou funkcí, z nichž jedna závisí pouze na čase (část s exponenciálou) a druhá pouze na poloze  $\psi(x)$ . Vyzkoušejte si, že po dosazení vlnové funkce v tomto tvaru do časově závislé Schrödingerovy rovnice (40) se závislost na čase vykrátí. Dostaneme tak rovnici jen pro prostorovou část vlnové funkce ve tvaru

$$\hat{H}\psi(x) = E\psi(x), \quad (41)$$

kteřá se nazývá bezčasová Schrödingerova rovnice. Výhodou je, že jsme se zbavili nutnosti řešit časový vývoj vlnové funkce, ale platíme za to tím, že naše rovnice obsahuje ještě druhou neznámou – energii odpovídající dané vlnové funkci. Takhle jednoduše se času můžeme zbavit jenom tehdy, když nám hamiltonián nezávisí explicitně na čase. To vlastně ale není tak speciální příklad, naopak většinou se stává, že hledáme pohyb sady částic v nějakém statickém potenciálu. Dokonce, i když počítáme vlnovou funkci celé molekuly, vystačíme si s bezčasovou Schrödingerovou rovnicí. Naopak, když počítáme, jak tato molekula reaguje na oscilující elektrické

pole silného laseru, již potřebujeme časově závislou rovnici. (I když i v tomhle případě dost často jde najít nějaké triky, jak tuto časovou závislost obejít.)

Bezčasová Schrödingerova rovnice má z matematického hlediska zajímavý tvar. Hledáme v ní takovou funkci, která po zapůsobení operátoru zůstane až na multiplikatívni konstantu stejná. V matematice se tento proces nazývá hledání vlastních funkcí operátoru. Multiplikatívni konstanta pro danou funkci se označuje jako vlastní číslo. Vlastní čísla jsou pro nás často stejně důležitá, ne-li důležitější než vlastní funkce samy. Matematici si dokonce vypůjčili fyzikální terminologii a sadě všech vlastních čísel se říká spektrum. Triviálním příkladem může být operátor „násobení 7“. Tento operátor funkci vynásobí sedmi, takže jeho vlastními funkcemi jsou všechny funkce. Vlastní číslo na pravé straně je pak samozřejmě sedm. Jiným příkladem může být operátor derivace. Jednou z jeho vlastních funkcí je  $e^x$ , neboť derivace exponenciály je exponenciála. Vlastním číslem je v tomto případě jednička. (Další například  $e^{2x}$  s vlastním číslem 2.)

Můžeme si rovnou ověřit, že Schrödingerovu rovnici (41) splňují pro volnou částici v 1D prostoru (nepůsobí na ni žádné vnější síly, potenciál je nulový  $V(x) = 0$ ) o hybnosti  $p$  (pozor, tu je to konkrétní hodnota, ne operátor) de Broglieho vlny ve tvaru

$$\psi(x) = e^{i \frac{px}{\hbar}}.$$

(Skutečně se jedná o vlny, protože pokud si rozepíšeme komplexní exponenciálu pomocí Moivreovy věty, dostaneme  $\cos(\frac{px}{\hbar}) + i \sin(\frac{px}{\hbar})$  a vidíme, že jak reálná, tak imaginární část je periodická, jak bychom od takové vlny čekali.)

Pokud na tuto funkci zapůsobíme hamiltoniánem, dostaneme

$$\hat{H}\psi(x) = \frac{\hat{p}^2}{2m}\psi(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} e^{i \frac{px}{\hbar}} = \frac{p^2}{2m} e^{i \frac{px}{\hbar}}.$$

Asi nás nepřekvapí, že v tomto případě je energie daná klasickým vzorcem  $E = p^2/2m$ . Všimněme si, že tato rovnice má tím pádem (dokonce 2) řešení pro libovolnou nezápornou hodnotu energie. Uvidíme vzápětí, že jakmile částici „uzavřeme“ potenciálem do nějakého konečného prostoru, tak to platit nebude, a budeme mít jen některé konkrétní „povolené“ hodnoty energie. (Vzpomeňte znovu na Bohrův atom!) Ještě je dobré poznamenat, že v tomto případě je konkrétní řešení dané jediným reálným parametrem, hybností  $p$ , která může nabývat kladných i záporných hodnot. Dokonce, pokud zapůsobíme na vlnovou funkci operátorem hybnosti

$$\hat{p}\psi(x) = -i\hbar \frac{d}{dx} e^{i \frac{px}{\hbar}} = p e^{i \frac{px}{\hbar}} = p\psi(x),$$

zjistíme, že de Broglieho vlna je vlastní funkcí operátoru hybnosti. To v kvantové mechanice znamená, že má konkrétní hodnotu hybnosti. A aby byly splněny relace neurčitosti, je vlnová funkce rovnoměrně rozprostřena po celé reálné ose.

Nejjednodušší systém s potenciálem, který můžeme studovat, se běžně nazývá nekonečná potenciálová jáma, nebo doslovným překladem anglického označení

částice v krabici. V jednorozměrném případě interval „krabice“ zvolíme jako  $(0, L)$  a potenciál této krabice pak bude

$$V(x) = \begin{cases} 0 & \text{pokud } x \in (0, L) \\ \infty & \text{pokud } x \in (-\infty, 0) \cup (L, \infty) \end{cases}.$$

V tomto případě ani nemusíme přímo řešit Schrödingerovu rovnici, ale můžeme vyjít z toho, že známe řešení pro jednotlivé části této rovnice a poslepovat je. Při slepování musíme dbát pouze na to, aby slepovaná řešení měla stejnou energii a aby výsledná vlnová funkce byla spojitá.

V oblastech s nekonečným potenciálem se částice (ani kvantová) vyskytovat nemůže, vlnová funkce tam tedy bude identicky nulová. Zbývá nám tedy pro řešení jen oblast  $x \in (0, L)$ . V té ale se částice pohybuje volně, tedy zde bude řešení ve tvaru de Broglieho vln. Pro každou energii máme vždy dvě vlny lišící se jen znaménkem hybnosti (směrem šíření). Zkusíme tedy vlnovou funkci pro  $x \in (0, L)$  napsat jako součet dvou vln o zatím neurčené hybnosti se zatím neznámými koeficienty  $A, B$

$$\begin{aligned} \psi(x) &= Ae^{i\frac{px}{\hbar}} + Be^{-i\frac{px}{\hbar}} \\ &= A \left( \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right) \right) + B \left( \cos\left(\frac{px}{\hbar}\right) - i \sin\left(\frac{px}{\hbar}\right) \right), \end{aligned}$$

kde jsme si rozepsali komplexní exponenciály pomocí Eulerova vzorce atoho, že sinus je lichá a kosinus sudá funkce. Pokud chceme splnit požadavek, aby vlnová funkce byla spojitá v bodě  $x = 0$  (tedy chceme, aby  $\psi(0) = 0$ ), musí nám zůstat jen sinové příspěvky, což zajistíme volbou  $B = -A$ . Nyní musíme splnit požadavek, aby takto upravená vlnová funkce byla spojitá i v bodě  $x = L$

$$\psi(x = L) = 2iA \sin\left(\frac{pL}{\hbar}\right) = 0.$$

Toho nelze dosáhnout pomocí volby koeficientu  $A$  (ten určíme později, aby byla splněna podmínka normalizace), ale musíme najít vyhovující hodnotu hybnosti  $p$ . Dosazením do  $\psi(L) = 0$  můžeme z vlastností funkce sinus získat požadavek

$$\frac{pL}{\hbar} = k\pi,$$

kde  $k$  je libovolné přirozené číslo. Z toho určíme povolené hodnoty hybnosti a dosazením do původní rovnice dostaneme výslednou vlnovou funkci na intervalu  $(0, L)$

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

kde jsme rovnou zvolili koeficient před sinem tak, aby byla splněna podmínka normalizace – sami si můžete ověřit, že nyní platí

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

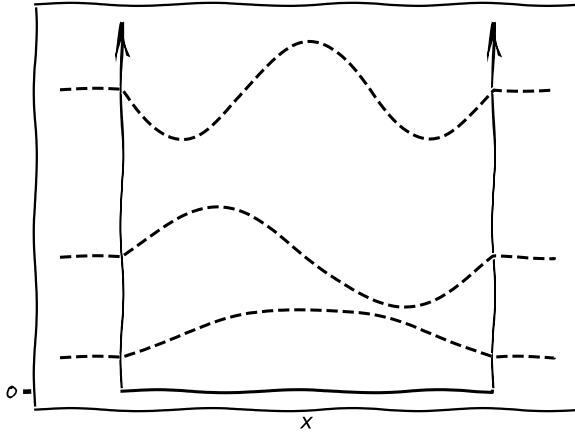


pro všechna  $k$ .

Energie stavů pak získáme působením operátoru hamiltoniánu na vlnovou funkci.

$$\hat{H}\psi(x) = \frac{k^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}\psi(x) \rightarrow E_k = \frac{k^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}.$$

Ve výsledku pak dostáváme sadu vlastních stavů, popsaných pomocí jediného parametru  $k$ , který je diskrétní, jeho hodnota může být pouze přirozené číslo. Energie těchto stavů pak je úměrná  $k^2$ .



Obr. 28: Graf zobrazující nejnižší 3 stavy nekonečné potenciálové jámy. Plnou čarou je zobrazen potenciál. Vlnové funkce zobrazujeme způsobem, který se v kvantové mechanice běžně používá – vlnové funkce jsou od nuly posunuty svisle o hodnotu odpovídající energii daného stavu. (Tedy v tomto obrázku jsou všechny vlnové funkce mimo jámu nulové, nikoliv jen konstantní, jak by se na první pohled mohlo zdát.)

Všimněme si toho, že najednou nejsou všechny energie dovolené. To souvisí s tím, že částice je uzavřena do potenciálu na omezené ploše. Čímž pádem na ní klademe okrajové podmínky. Zároveň, podobně jako když de Broglieho částice, se chová jako vlna v prostoru. Takto zavřenou částici lze popsat jako stojaté vlnění, podobně jako u struny. Dokonce i pohybové rovnice jsou podobné jako rovnice pro naši vlnovou funkci. A také u struny nakonec vedou k tomu, že nemůže kmitat na libovolné frekvenci, ale má svých konkrétních harmonických frekvencí. No není fyzika krásná, jak je univerzální?

A pokud byste měli pocit, že se jedná o úplně umělý systém, vezte, že na mnohých místech je takovýto model docela rozumný. Dají se s ním modelovat lineární

uhlovodíky s mnoha konjugovanými vazbami, protože elektrony z takovýchto vazeb se mohou celkem volně pohybovat po celé délce tohoto konjugovaného systému (pohyb v jámě), zatímco je pro ně velký problém z molekuly vystoupit (je potřeba překonat vysoký potenciál).

Také se jednoduchou jámou dají popsat kvantové tečky, což jsou mikroskopické kuličky polovodiče, které mají zajímavé optické vlastnosti, například fluorescenci. Tyto vlastnosti navíc nejsou dány chemickým složením kuličky, ale její velikostí, protože tím přirozeně omezí pole působnosti elektronů zodpovědných za vodivost, čímž se jim vnutí konkrétní elektronické stavy podobně jako výše.

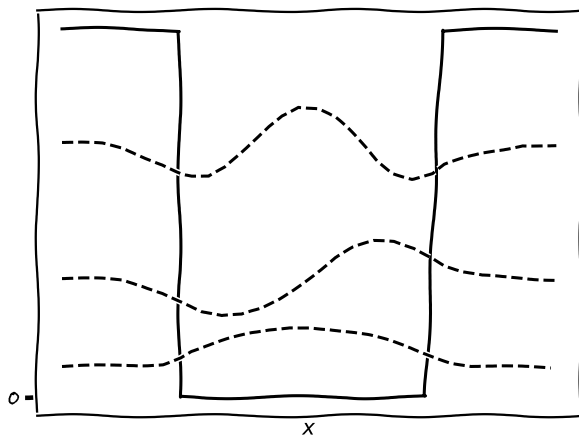
Nakonec se sluší zmínit, že pomocí takovéto jámy byla popisována struktura atomových jader, a to ještě předtím, než vůbec byla pořádně rozluštěna povaha sil působících mezi protony a neutrony (a dost často i potom, protože tyto síly jsou matematicky mnohem složitější na výpočty než elektromagnetická interakce mezi elektrony. I dnes je to problém na hraně výpočetních možností superpočítačů.).

Nakonec si rychle (bez odvozování) ukážeme, co se stane, pokud potenciál vně jámy bude konečný. To způsobí, že částice, která by předtím měla vlnovou funkci mimo jámu nulovou, najednou může povylézt ven, ačkoliv pravděpodobnost toho klesá exponenciálně se vzdáleností od okraje jámy. Jinak je postup řešení obdobný jako u potenciálové jámy. Pokoušíme se navázat vlnovou funkci tak, aby byla spojitá a aby navazovala hladce („neměla zub“). Matematicky to znamená, že chceme spojitost i v první derivaci. To vede na sadu algebraických rovnic, které ale nejsou analyticky řešitelné. (Klidně si to můžete zkusit!) Zároveň nás asi nepřekvapí, že do takové jámy se nám vejde jen konečné množství stavů. Přesný počet závisí na poměru hloubky a šířky jámy, ale matematicky je zajištěno, že musí být vždy alespoň jeden. Takové stavy nazýváme také vázané. Zbytek stavů má vyšší energii než je hloubka jámy a v zásadě připomínají vlnovou funkci volné částice. (Ale narozdíl od volné částice se mohou na hraně jámy s nějakou pravděpodobností odrazit a letět zpět.)

### *A co když je elektronů víc?*

Když řešíme Schrödingerovu rovnici pro více částic, je situace mnohem komplikovanější, máme pro celý systém jednu vlnovou funkci, ale ta je teď funkcí poloh všech částic. Pro představu pro jednu částici ve 3D prostoru máme diferenciální rovnici pro funkci 3 proměnných, pro dvě částice 6 a tak dále. To nás obecně zbavuje šance řešit problém na papíře, ale i numericky v počítači, protože běžný přístup funkci reprezentovat pomocí její hodnoty v daných mřížových bodech převede problém na obří soustavu klasických lineárních rovnic.

Když si ale představíme, že prostor v každém směru rozdělíme na 10 bodů, což je ještě velmi hrubé dělení, tak pro jednu částici ve 3D prostoru potřebujeme 1000 bodů, což je pro počítač hračka. Pro dvě částice bodů milion, což běžný počítač ještě schroustá, ale tři už by chtěly bodů miliardu, což jen na uložení chce pár gigabajtů paměti. Čtyři se sotva vejdu na superpočítač, a pro pět už jsou data v řádu petabajtů, což jen tak někde do RAM nedostanete. A teď si vezměte, že jediný atom uranu má elektronů skoro sto!



Obr. 29: Vlnové funkce nejnižších stavů konečné potenciálové jámy.

Nezoufejte, ukážeme si v dalších dílech, že to není tak beznadějně, pokud na problém půjdeme chytřeji. Ale dnes si nakonec lehce zmíníme jedno zjednodušení, které často může dát docela dobrý fyzikální náhled.

Pokud máme sadu částic a zanedbáme interakci mezi nimi, vidí každá z nich stejný potenciál. Pro každou částici pak řešíme Schrödingerovu rovnici zvlášť, takže všechny částice mají stejné vlastní stavy. Poté obsazujeme jednotlivé stavy postupně od nejnižší energie částicemi, tak aby byl splněn Pauliho vylučovací princip, o kterém jste jistě slyšeli v chemii. Pokud máme elektrony, tak po dvou, protože mají ještě spin, který může mířit jedním ze dvou směrů. Celková energie tohoto systému částic v tomto přiblížení je pak daná součtem energií jednotlivých částic, protože jsou neinteragující.

Konečkonců na této myšlence je založená celá periodická soustava prvků. Tam postupně obsazujeme orbitály, které jsou řešením Schrödingerovy rovnice pro jediný elektron.

## Úloha II.S ... počítáme kvanta

10 bodů

1. Najděte si molekulu betakarotenu a zkuste spočítat, jakou by měla mít barvu, respektive na jaké vlnové délce absorbuje. Použijte jednoduchý model nekonečné potenciálové jámy, ve které jsou „uvězněny“  $\pi$  elektrony z dvojných vazeb, tedy za každou dvojnou vazbu dva elektrony. Absorpce pak odpovídá takovému přechodu, že elektron přeskočí z nejvyšší obsazené hladiny na první

neobsazenou. Srovnejte s experimentální hodnotou. Proč hodnota z našeho modelu nevychází tak, jak bychom chtěli? (5b)

2. Zkusme zlepšit náš model. Při studiu některých látek, především kovů či polovodičů, zavádíme efektivní hmotnost elektronu. Místo toho, abychom složité popisovali prostředí, ve kterém se elektrony pohybují, se tváříme, že elektrony jsou lehčí nebo těžší než ve skutečnosti. Jakou by musely mít hmotnost, aby nám vyšla správná experimentální hodnota? Uveďte ji v násobcích hmotnosti elektronu. (2b)
3. Pokud vyrobíme mikroskopické kuličky (nanočástice) selenidu kademnatého (CdSe) o velikosti 2,34 nm. Rozzáří se po ozáření UV světlem jasně zelenou barvou na vlnové délce 536 nm. Když je zvětšíme na velikost 2,52 nm, posune se vlnová délka vyzařovaného světla do žluté oblasti s vlnovou délkou 570 nm. Jakou velikost kuliček bychom potřebovali, aby vyzařovaly oranžově na vlnové délce 590 nm? (3b)

*Nápověda* CdSe je polovodič, má tedy plně obsazený elektronový pás, pak (úzký!) zakázaný pás a nakonec prázdný vodivostní pás. Tedy musíme uvažovat, že vyzařovaný foton odpovídá přeskoku z vodivostního pásu, kde jsou zase stavy známé z nekonečné potenciálové jámy, do obsazeného pásu. Všechny energie vyzařovaných fotonů tedy budou posunuty o neznámou konstantní hodnotu odpovídající šířce zakázaného pásu.

*Bonus* Nakonec pro ty, které by mrzelo, kdyby si nezaintegrovali – 1s orbital atomu vodíku má sféricky symetrickou vlnovou funkci s radiálním průběhem  $\psi(r) = \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi a_0^3/2}}$ , kde  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$  je Bohrov poloměr. Protože orbitály jakožto funkce tří prostorových proměnných by se nám špatně vykreslovaly, raději zobrazujeme oblast, ve které se bude elektron s velkou pravděpodobností vyskytovat. Jaký je poloměr sféry centrované na jádře, ve které se elektron bude vyskytovat s pravděpodobností 95 %? (+2b) (řešení str. 196)

### Kapitola 3: Kvanta orbitalů

Dnes se podíváme na to, že pracovat v kvantové mechanice s funkcemi je vlastně nepraktické, a jak se dá tato formulace zjednodušit. Tento díl sice bude trochu náročnější na pochopení, ale pokud byste se v něm třeba i ztratili, nezoufejte, další díly už budou jednodušší a na dnešní seriál nebudou úplně navazovat.

#### Kvantově oscilujeme

Vše si ukážeme na lineárním harmonickém oscilátoru. Tento systém má potenciál ve tvaru paraboly

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

kde  $\omega$  je frekvence oscilátoru a  $m$  hmotnost částice. Pokud dosadíte vztah pro frekvenci oscilací pružiny  $\omega = \sqrt{k/m}$ , dostanete místo toho známější výraz s tuhostí  $k$ , který je  $V = 1/2kx^2$ . Tento systém je jedním z nejdůležitějších ze všech,

kteřé umíme analyticky řešit. (Další zásadní jsou volná částice a atom vodíku.) Jedním z důvodů, proč je pro nás tak důležitý, je předpoklad, že v libovolném potenciálu se bude částice nacházet v okolí jeho minima. Potenciál okolí minima lze téměř vždy dobře aproximovat parabolou.

Pokud tento parabolický potenciál dosadíme do Schrödingerovy rovnice  $H\psi = E\psi$  z minulého dílu, získáme rovnici

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

Tu je sice možné řešit napřímo, ale my si s ní ukážeme úplně jinou myšlenku. Pro zjednodušení můžeme položit  $m = 1, \omega = 1$ , čímž se zbavíme nutnosti opisovat je do dalších rovnic.

Představte si, že vám někdo prozradí, že vlnová funkce základního stavu je Gaussova funkce. Můžeme ověřit, že funkce

$$\varphi_1(x) = e^{-x^2/2\hbar}$$

je řešením Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\varphi_1(x) = \frac{\hbar}{2}e^{-x^2/2\hbar} = \frac{\hbar}{2}\varphi_1(x)$$

s energií  $\hbar/2$ . Normalizací se můžeme zabývat až později, pro výpočet energie není podstatná.

Zkusíme-li teď vzít druhou funkci

$$\varphi_2(x) = x^2 e^{-x^2/2\hbar},$$

zjistíme, že tato funkce není řešením Schrödingerovy rovnice

$$\hat{H}\varphi_2(x) = -\hbar^2 e^{-x^2/2\hbar} + 2\hbar x^2 e^{-x^2/2\hbar} = -\hbar^2 \varphi_1(x) + 5/2\hbar \varphi_2(x) \neq E\varphi_2(x).$$

Místo toho nám aplikací hamiltoniánu přibyl ve funkci nějaký příspěvek od vlnové funkce základního stavu. Ale není nic jednoduššího, než zkusit tuto funkci opravit, aby již Schrödingerovu rovnici splňovala. To se dá udělat jednoduše tak, že vezmeme součet těchto 2 funkcí s neznámými koeficienty

$$\psi(x) = c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x).$$

Když tuto formu vlnové funkce dosadíme do Schrödingerovy rovnice, dostaneme

$$\begin{aligned} \hat{H}\psi(x) &= c_1\hat{H}\varphi_1(x) + c_2\hat{H}\varphi_2(x) = \\ &= c_1\frac{\hbar}{2}\varphi_1(x) - c_2\hbar^2\varphi_1(x) + 5/2c_2\hbar\varphi_2(x) = \\ &= E(c_1\varphi_1(x) + c_2\varphi_2(x)). \end{aligned} \tag{42}$$

Protože nám nezáleží na normalizaci, můžeme položit  $c_2 = 1$  a stačí nám pak najít odpovídající hodnotu  $c_1$ . Z původní diferenciální rovnice nám zbyla rovnice pro dvě neznámé, koeficient  $c_1$  a energii  $E$ .

$$c_1 \frac{\hbar}{2} \varphi_1(x) - \hbar^2 \varphi_1(x) + 5/2 \hbar \varphi_2(x) = E(c_1 \varphi_1(x) + \varphi_2(x))$$

Pohledem na koeficienty u  $\varphi_2$  vidíme, že energie se musí rovnat  $5/2\hbar$ . Nyní již hravě dopočítáme i koeficient  $c_1$  z rovnice

$$c_1 \frac{\hbar}{2} \varphi_1(x) - \hbar^2 \varphi_1(x) = 5/2 \hbar c_1 \varphi_1(x).$$

Dostáváme  $c_1 = \hbar/2$ . To nám dá vlnovou funkci

$$\psi(x) = \hbar/2 \varphi_1(x) + \varphi_2(x),$$

což je až na normalizaci přesně výsledek, který můžeme najít v učebnicích. Je to až druhý excitovaný stav, protože první excitovaný stav je lichá funkce  $x$ , zatímco naše dva stavy jsou sudé. Protože máme symetrický potenciál, tak nám hamiltonián sudé a liché stavy nemíchá. To je jeden z mnoha případů, kdy se nám v kvantové mechanice projeví symetrie.

Zkusme se ještě jednou zamyslet nad tím, co jsme teď vlastně udělali. Mísoto toho, abychom řešili komplikovanou diferenciální rovnici pro neznámou funkci, jsme si vzali nějakou (vhodnou!) sadu pevně daných funkcí a hledali jen koeficienty u jejich váženého součtu (nazývaného lineární kombinace). Tím jsme vlastně převedli celou ošklivou diferenciální rovnici na rovnici algebraickou, která je mnohem příjemnější na řešení. Musíme si ale dát pozor, abychom zvolili takové funkce, které dobře popisují daný problém. Díky tomu nám jich stačí vzít relativně malé množství, abychom měli správný (nebo dostatečně přesný přibližný) výsledek. Například, pokud bychom chtěli stavy lineárního harmonického oscilátoru popsat pomocí obyčejných polynomů, určitě tušíte, že kdybychom jich vzali libovolné konečné množství, nikdy bychom vlnovou funkci lineárního harmonického oscilátoru nezískali úplně přesně. Hodnota přesné vlnové funkce jde totiž do nuly pro  $x$  jdoucí do nekonečna, naopak libovolný polynom jde do (kladného nebo záporného) nekonečna.

Zatím ale jsme hodnoty koeficientů určili trochu nesystematicky, což teď napravíme. Vraťme se trochu zpět, k rovnici (42). Když jí celou vynásobíme funkcí  $\varphi_1(x)$  a uděláme integrál podle  $x$  přes celou reálnou osu, dostaneme

$$\begin{aligned} & \int_{-\infty}^{\infty} (c_1 \varphi_1(x) \hat{H} \varphi_1(x) + c_2 \varphi_1(x) \hat{H} \varphi_2(x)) dx = \\ & = \int_{-\infty}^{\infty} E(c_1 \varphi_1(x)^2 + c_2 \varphi_1(x) \varphi_2(x)) dx, \end{aligned} \quad (43)$$

což můžeme snadno upravit na

$$\begin{aligned} & c_1 \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi_1(x) \hat{H} \varphi_1(x)) dx + c_2 \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi_1(x) \hat{H} \varphi_2(x)) dx = \\ & = E \left( c_1 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1(x)^2 dx + c_2 \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1(x) \varphi_2(x) dx \right). \end{aligned} \quad (44)$$

Protože  $\varphi_1(x)$  a  $\varphi_2(x)$  jsou pevně dané funkce, můžeme si všimnout, že máme všechny „ingredience“ k vypočítání integrálů a mohli bychom tím pádem všechny integrály rovnou přesně vyčíslit a dosadit jejich konkrétní hodnotu. My to nebudeme dělat, místo toho se je jen pro obecnost označíme písmenky

$$\begin{aligned} S_{11} &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1(x)^2 dx, \\ S_{12} &= \int_{-\infty}^{\infty} \varphi_1(x) \varphi_2(x) dx, \\ H_{11} &= \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi_1(x) \hat{H} \varphi_1(x)) dx, \\ H_{12} &= \int_{-\infty}^{\infty} (\varphi_1(x) \hat{H} \varphi_2(x)) dx. \end{aligned}$$

Předchozí rovnice (44) pak vypadá mnohem pěkněji

$$H_{11}c_1 + H_{12}c_2 = E(S_{11}c_1 + S_{12}c_2).$$

Když zopakujeme tento postup, ale rovnici (43) vynásobíme  $\varphi_2(x)$  a přeintegrujeme ji, dostaneme s použitím podobného značení

$$H_{21}c_1 + H_{22}c_2 = E(S_{21}c_1 + S_{22}c_2).$$

### Vektory a matice

Nyní musíme udělat trochu odbočku, abychom si zavedli nové, šikovnější značení. Pokud již máte zkušenosti s maticemi, nebojte se tuto část přeskočit. Bohužel tento díl není natahovací, takže seznámení bude velice zrychlené, ale pokud se chcete o maticích dozvědět víc, věnoval se jim například celý 5. díl seriálu 16. ročníku, který můžete dohledat na FYKOSím webu.

Jistě jste se ve škole již seznámili s vektory. Pokud máme nějaký souřadnicový systém, můžeme v něm vektor zapsat jako sloupeček čísel. Zobecněním tohoto konceptu pro operace na vektorech v prostoru (například zobrazení rotace nebo natahování) dostaneme tabulku čísel, kterou nazýváme matice. My si vystačíme s čtvercovými maticemi, ale mohou mít i tvar obdélníku. Působení operace na vektory v těchto „tabulkách čísel“ se přeneso do operace maticového násobení. Jeho výsledkem je vektor, který na každé pozici má skalární součin starého vektoru

s odpovídajícím řádkem dané matice. Tedy nový vektor má na první pozici skalární součin prvního řádku s původním vektorem a tak dále.

To, že po působení matice  $\mathbb{A}$  na vektor  $\vec{x}$  nám vyjde  $\vec{y}$ , značíme

$$\mathbb{A}\vec{x} = \vec{y}.$$

Podobně můžeme vynásobit i dvě matice mezi sebou – matici v součinu napravo rozebereme na jednotlivé vektory, na ty zapůsobíme levou maticí, a pak tyto nové vektory zase po sloupcích poskládáme do výsledné matice. Násobení dvou matic je ekvivalentní složení dvou operací reprezentovaných těmito maticemi. Dejte si pozor, násobení matic obecně není komutativní,  $\mathbb{A}\mathbb{B} \neq \mathbb{B}\mathbb{A}$ . Ono totiž není komutativní ani skládání dvou zobrazení, můžete si sami vyzkoušet, že pokud obrázek přezrcadlíte podle osy  $x$  a pak otočíte o  $90^\circ$ , dostanete něco jiného, než když to provedete v opačném pořadí. Trochu názornější, proč jsme si toto zavedli, bude, pokud si zavedeme indexovou notaci. Pokud  $i$ -tý prvek vektoru  $\vec{x}$  označíme  $x_i$  a prvek matice  $\mathbb{A}$  na  $i$ -tém řádku a v  $j$ -tém sloupci jako  $A_{ij}$ , působení matice na vektor nám přejde na

$$\vec{y} = \mathbb{A}\vec{x} \rightarrow y_i = \sum_{j=1}^N A_{ij}x_j.$$

Ale to je přesně to, co máme v naší rovnici! Tedy jednotlivé koeficienty  $c_i$  můžeme prohlásit za (abstraktní!) vektor, a tím pádem můžeme přepsat celou rovnici pomocí matic

$$\mathbb{H}\vec{c} = E\mathbb{S}\vec{c}.$$

Matice hamiltoniánu  $\mathbb{H}$  nám říká, jak působí hamiltonián mezi jednotlivými bázovými funkcemi. Matice  $\mathbb{S}$  má ještě jednodušší interpretaci. Ta nám jen říká jak moc se jednotlivé bázové funkce překrývají (říkáme jí překryvová matice). Té se navíc můžeme jednoduše zbavit. Stačí si vybrat bázové funkce tak, aby překryv každé funkce se sebou samou byl roven 1 a překryv mezi libovolnými různými bázovými funkcemi byl 0. V analogii s vektory v 3D prostoru pak říkáme, že máme ortogonální bázi funkcí. Překryvová matice pak má hezký tvar, jedničky na diagonále a na všech ostatních pozicích nuly. Taková matice při působení na jakýkoliv vektor vrátí přesně ten samý vektor, takže ji můžeme z rovnice úplně vypustit. Pro ortogonální bázi funkcí pak máme mnohem hezčí tvar rovnice

$$\mathbb{H}\vec{c} = E\vec{c}.$$

Tato rovnice má vlastně úplně stejný tvar jako bezčasové Schrödingerova rovnice, jen s maticemi a vektory místo funkcí a operátorů. Výhodou je, že pro matice je tento typ rovnic standardní problém, nazývaný diagonalizace nebo také hledání vlastních čísel a vlastních vektorů.

Vlastní vektor, který hledáme, je takový, který působením matice nezmění orientaci, ale jen velikost. Tedy po působení matice na vlastní vektor dostaneme ten samý vektor, jen přenásobený nějakým číslem. To nazýváme vlastní číslo k danému vektoru. Vlastních vektorů je v principu nekonečně mnoho, protože vynásobením



vlastního vektoru libovolným nenulovým číslem dostaneme vlastní vektor se stejným vlastním číslem. Omezujeme se tedy na to, že najdeme jeden od každého „typu“. Matice mávájí většinou tolik různých vlastních vektorů, kolik je sloupců čtvercové matice. Ač pro malé matice se takové vlastní vektory dají najít analyticky, přesahuje to rámec tohoto textu a my se spokojíme s tím, že tento problém budeme řešit numericky v počítači.

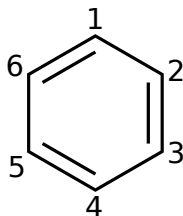
### Počítáme molekuly

Nyní si ukážeme, jak pomocí jednoduchého přiblížení můžeme počítat stavy uhlovodíků s konjugovanými dvojnými vazbami. Toto přiblížení se nazývá Hückelova metoda, podle Ericha Hückela, který ji v roce 1930 zavedl.

Podobně jako u úlohy v minulém díle seriálu se omezíme jen na p orbitály, které se účastní dvojných vazeb, tedy jeden za každý atom uhlíku s dvojnou vazbou. Bázové funkce jsou pak právě jednotlivé p orbitály. Protože překryv mezi p orbitály na různých atomech je obecně hodně malý, můžeme jej zanedbat, a tím považovat celou bázi za ortogonální. Pak nám stačí jen zkonstruovat matici hamiltoniánu, který je v tomto přiblížení úplně jednoduchý.

Hodnota hamiltoniánu pro interakci orbitalu se sebou samým je jen energie elektronu v p orbitalu uhlíku, tedy  $-11,4$  eV. Ten se značí  $\alpha$ . Mnohem zajímavější jsou elementy hamiltoniánu, které jsou mezi orbitály na různých atomech. Pokud se jedná o atomy, které spolu nesousedí (tedy nejsou spojené vazbou), interakci mezi nimi zanedbáváme. Prvek matice hamiltoniánu bude tedy 0. Pokud spolu sousedí, má nenulovou hodnotu  $\beta$ , která je určována empiricky z experimentálních hodnot pro různé vlastnosti molekul. Hodnota  $\beta$  se různí podle toho, jaké molekuly a experimentální hodnoty se použijí k jejímu získání, ale obecně můžeme uvažovat hodnotu mezi  $-1$  eV a  $-3$  eV. Každopádně Hückelova metoda se používá spíš pro kvalitativní pochopení, takže energie jednotlivých orbitalů se většinou vyjadřují jako násobky  $\beta$ .

Rovnou si ukážeme příklad, jak by vypadal výpočet pro molekulu benzenu. Očíslujeme si atomy uhlíku a rovnou uděláme tabulku, jak vypadají jednotlivé prvky hamiltoniánu. Na diagonále této tabulky z levého horního do pravého spodního rohu jsou  $\alpha$ , protože to je prvek hamiltoniánu pro orbital interagující sám se sebou. Na sousedních diagonálách jsou  $\beta$ , protože řádek a sloupec mají hodnotu lišící se o jedna, tedy (v našem očíslování) se jedná o sousední atomy. Nakonec, protože naše molekula je cyklická a sousedí i atomy 1 a 6, dostaneme  $\beta$  také v pravém horním a levém dolním rohu. Všude jinde zůstanou nuly.



	1	2	3	4	5	6
1	$\alpha$	$\beta$	0	0	0	$\beta$
2	$\beta$	$\alpha$	$\beta$	0	0	0
3	0	$\beta$	$\alpha$	$\beta$	0	0
4	0	0	$\beta$	$\alpha$	$\beta$	0
5	0	0	0	$\beta$	$\alpha$	$\beta$
6	$\beta$	0	0	0	$\beta$	$\alpha$

Tato tabulka je přímo matice hamiltoniánu a můžeme rovnou najít její vlastní čísla. Ještě si trochu zjednodušíme práci, pokud ji přepíšeme jako

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix} =$$

$$= \alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Všimněme si, že první matice s prefaktorem  $\alpha$  je jednotková, tedy působí na všechny vektory stejně. Tím pádem její efekt je jen posun energie všech stavů o hodnotu  $\alpha$ . Stačí nám tedy diagonalizovat jen druhou matici (bez  $\beta$ ) a dostaneme jednotlivé energetické hladiny právě v násobcích  $\beta$ . V tomto textu se nebudeme snažit o analytické řešení, přestože díky hezkému tvaru této matice je možné, ale spokojíme se s numerickým řešením. K diagonalizaci matice můžeme použít některý online nástroje, známý je například [www.wolphramalpha.com](http://www.wolphramalpha.com), kde bychom použili příkaz `eigenvalues`  $\{\{0,1,0,0,0,1\},\{1,0,1,0,0,0\},\{0,1,0,1,0,0\},\{0,0,1,0,1,0\},\{0,0,0,1,0,1\},\{1,0,0,0,1,0\}\}$ . My jsme k diagonalizaci použili krátký skript v Pythonu.

```
#!/usr/bin/python

import numpy as np

N = 6
H = np.zeros((N, N)) #inicializujeme matici nul NxN

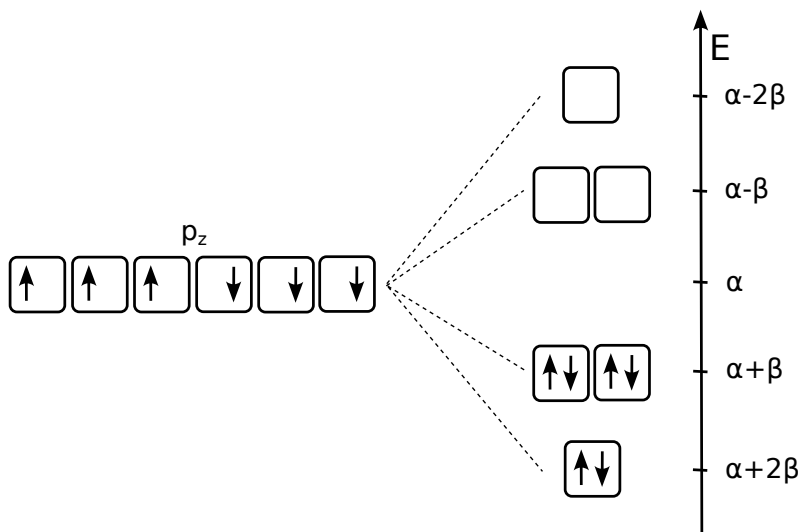
#proběhneme celou matici a~nastavíme 1 vedle diagonaly
for i in range(N-1):
    H[i, i+1]=1
    H[i+1, i]=1

#nastavíme 2 prvky v~rozích, index (N-1), protože čísujeme od 0!
H[N-1, 0]=1
H[0, N-1]=1

vl_cisla, vl_vekt = np.linalg.eig(H) #vlastni diagonalizace
print(vl_cisla) #vytiskneme vysledek
```

Po spuštění tohoto skriptu dostaneme vlastní čísla  $-2, -1, -1, 1, 1, 2$ . To že jsou tam některá vlastní čísla dvakrát znamená jen to, že máme dva různé vlastní vektory se stejným vlastním číslem. Nazýváme je také degenerované vlastní stavy.

Tím ale naše práce nekončí. Protože jsme při diagonalizaci hamiltoniánu „zapomněli“ jednotkovou matici a prefaktory  $\alpha$  a  $\beta$ , musíme je tam teď vrátit. To je ale jednoduché a dostaneme vlastní stavy s energiemi  $\alpha - 2\beta, \alpha - \beta, \alpha - \beta, \alpha + \beta, \alpha + \beta, \alpha + 2\beta$ . Tím pádem máme 6 stavů (orbitalů), do kterých musíme rozmístit 6 elektronů, přirozeně tak, abychom minimalizovali energii. To znamená, že dvakrát obsadíme 3 stavy s nejnižší energií. Výsledná energie pak je  $6\alpha + 8\beta$ . Nezapomeňte, že  $\alpha$  i  $\beta$  jsou záporné!



Obr. 30: Orbitály v molekule benzenu. Vlevo je hypotetický stav, kdy by  $p_z$  orbitály v benzenu vůbec neinteragovaly. Působením interakce dostaneme orbitály vpravo, kde elektrony přirozeně obsadí ty, které mají nejnižší energii.

Energie orbitalů roste odspoda nahoru.

Ale celková energie není něco, co by nás reálně zajímalo, už jenom proto, že v naší aproximaci v ní vůbec nejsou zahrnuty ostatní elektrony, které se neúčastní dvojných vazeb. Zkusme tedy vyextrahovat nějaké další vlastnosti, které lze experimentálně zjišťovat.

Excitační energie, tedy energie potřebná k excitaci z nejvyšší obsazené na nejnižší virtuální hladinu, je  $-2\beta$ . Po dosazení konkrétní hodnoty  $\beta = -3\text{ eV}$  dostáváme velikost excitační energie  $6\text{ eV}$ . Protože nejvyšší obsazený i nejnižší neobsazený orbital je dvakrát degenerovaný, máme ve skutečnosti 4 různé možné excitace. Přestože Hückelův model jim přiřazuje stejnou energii, ve skutečnosti (z experimentu) mají 3 různé hodnoty, konkrétně  $4,90\text{ eV}$ ,  $6,20\text{ eV}$  a  $6,94\text{ eV}$  (jedna z energií

odpovídá 2 excitacím). Ale vidíme, že naše hrubá aproximace s vhodnou empirickou hodnotou  $\beta$  dává vlastně docela dobré výsledky.

Když spočítáme ionizační energii, tedy energii, kterou potřebujeme na vytržení elektronu z nejvyššího obsazeného orbitalu, dostaneme vlastně záporně vzatou energii tohoto orbitalu, tedy  $-\alpha - \beta$ ). Po dosazení by nám vyšlo více než 14 eV. Je vidět, že se začínáme vzdalovat od experimentální hodnoty 9,24 eV. Když totéž zkusíme pro elektronovou afinitu, tedy energii, která se uvolní při přidání elektronu, máme  $-\alpha + \beta$ , tedy něco přes 8 eV, což už je úplně mimo skutečnou hodnotu 1,15 eV. Vidíme tedy, že opravdu se jedná o metodu pro kvalitativní pochopení než kvantitativní výsledky.

Na závěr si ještě ukážeme, jak si docela snadno pomocí Hückelova modelu demonstrovat podstatu chemické vazby. Pokud vezmeme molekulu ethylenu (ethen), tak pro ni pomocí Hückelovy metody vytvoříme docela jednoduchý hamiltonián. Jeho matice má tvar

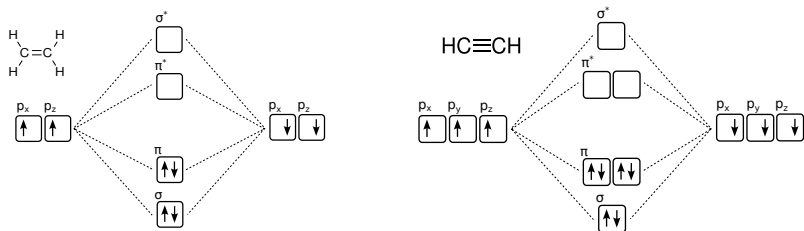
$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta \\ \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Pokud tento hamiltonián diagonalizujeme, dostaneme dva stavy, jeden s energií  $\alpha + \beta$  a druhý s energií  $\alpha - \beta$ . Přirozeně dva elektrony umístíme do prvního z nich, protože má nižší energii. Tedy ve výsledku máme celkovou energii  $2\alpha + 2\beta$ . Pokud bychom dva atomy uhlíku odtáhli na takovou vzdálenost, že interakce mezi nimi by byla zanedbatelná, parametr  $\beta$  popisující interakci je nulový, zatímco parametr  $\alpha$  se nezmění. V tomto případě tedy oba stavy mají stejnou energii  $\alpha$ .

Interakce molekul tak „vyrobí“ stav, který má o  $\beta$  nižší energii. Tedy obsazením tohoto stavu (orbitalu) dostaneme energii, která je nižší, než kdyby oba účastníci se atomy byly daleko od sebe. Tedy tento orbital drží tyto atomy blízko sebe – vytváří chemickou vazbu. Nazývá se proto vazebný orbital. Naopak druhý orbital má při obsazení vyšší energii než izolované atomy, ten chemickou vazbu naopak „sabotuje“. Označuje se tedy jako protivazebný orbital. V našem modelu je energie vazebného orbitalu nižší o přesně stejnou hodnotu, o kterou je protivazebný vyšší, ale ve skutečnosti, pokud bychom nezanedbávali překryv mezi jednotlivými orbitaly, byl by protivazebný výš o něco víc, než o kolik je vazebný níž.

Zatím jsme ale popsali jen vazbu mezi p orbitaly mířící kolmo ke spojnici jader, která tvoří jen jednu z dvojice vazeb ve dvojně vazbě. Druhá z nich je tvořená p orbitaly ve směru vazby, a najdeme ji i například v molekule v etanu. Pro tu bychom ale mohli vytvořit úplně stejný (avšak stále pouze přibližný) hamiltonián, jen s jiným parametrem  $\beta$ . Parametr  $\alpha$  by v tomto případě dokonce mohl zůstat stejný, protože v ethylenu tuto vazbu také tvoří p orbitaly, jen jinak natočené. Díky tomu pro tuto vazbu dostaneme také vazebný a protivazebný orbital.

Pro vazebné a protivazebné orbitaly je navíc zaveden standardní značení. Pro vazebný orbital, který je v ose vazby, se používá označení  $\sigma$ . Protivazebný k němu se pak značí  $\sigma^*$ . Podobně orbitaly tvořící další vazby v násobných vazbách se značí  $\pi$  a  $\pi^*$ . Ve většině molekul  $\sigma$  orbital leží níže než  $\pi$ , a naopak  $\sigma^*$  orbital leží nad  $\pi^*$ . Pokud máme trojnou vazbu, jaká je například v molekule acetylenu, máme obsazený jeden  $\sigma$  a dva degenerované  $\pi$  vazebné orbitaly.



Obr. 31: Vazebné a protivazebné orbitály v molekule ethyleny (vlevo) a acetyleny (vpravo)

Těmito třemi díly seriálu jsme si trochu zacvičili s počítáním a od příště již za sebe necháme plně počítat počítač.

### Úloha III.S ... kvanta orbitalů

10 bodů

- Podobně jako v seriálu vytvořte pomocí Hückelovy metody matici hamiltoniánu pro molekulu cyklobutadienu a ověřte, že její vlastní čísla jsou  $\alpha + 2\beta$ ,  $\alpha$ ,  $\alpha$ ,  $\alpha - 2\beta$ . Načrtněte do diagramu, jaké jsou energie vzniklých orbitalů a jak by je obsadily elektrony. (4 b)

*Bonus:* Jaký je zásadní rozdíl v charakteru těchto orbitalů a jejich obsazení oproti molekule benzenu, kterou jsme si ukázali v seriálu? Jaké to má pro molekulu cyklobutadienu důsledky? (2 b)

- Zkuste se vrátit k molekule betakarotenu a znovu spočítat, na jaké vlnové délce by měla absorbovat, tentokrát pomocí Hückelovy metody. Kolik by musel být parametr  $\beta$ , aby vyšla experimentální hodnota?

*Alternativa* Pokud narazíte na problém s diagonalizací hamiltoniánu, proveďte úlohu s molekulou hexa-1,3,5-trienu. Experimentální hodnota absorpce je v tomto případě na vlnové délce 250 nm. (4 b)

- Co se stane s molekulou (stačí taková, která má jen jednoduché vazby), pokud pomocí UV světla excitujeme elektron ze  $\sigma$  do  $\sigma^*$  orbitalu? (2 b)

(řešení str. 200)

## Kapitola 4: Kvanta molekul

V dnešním díle se konečně podíváme na to, jak se pomocí kvantové fyziky počítají molekuly.

### Nic není tak jednoduché

Jak jistě tušíte a také jak Vám jistě napověděl závěr druhého dílu seriálu, spočítat celou molekulu není tak jednoduché. V průběhu řešení musíme provést řadu zjednodušení. Začínáme už tím, jakou uvažujeme fyziku problému, tedy jaké fyzikální efekty bereme v potaz. V první řadě většinou neuvažujeme efekty speciální teorie

relativity, tedy například to, že pohybující se elektron je těžší. Druhá, zásadnější úvaha je, že atomová jádra jsou mnohonásobně těžší než elektrony, a tím pádem se budou pohybovat na mnohem větších časových škálách. Výsledkem toho je, že elektrony vidí jádra jako téměř nehybná, a tedy můžeme řešit jejich pohyb (vlnovou funkci) se zafixovanými jádry a jejich pohybem se případně zabývat až později. Ze stejného důvodu můžeme i zanedbat kvantovou povahu jader a považovat je za bodové náboje.

Ve výsledku tedy řešíme Schrödingerovu rovnici jen pro sadu elektronů v elektrostatickém poli zafixovaných jader. Samozřejmě nechceme zanedbávat elektrostatickou interakci mezi elektrony, takže hamiltonián bude obsahovat příslušné členy. Ale pokud si znovu vzpomenete na závěr druhého dílu, ani toto není vůbec jednoduché. Tam jsme si naznačili, že na přesné řešení Schrödingerovy rovnice můžeme v případě, kdy máme více než několik málo elektronů, rovnou zapomenout. A to si uvědomme, že nás často zajímají molekuly, které mají mnoho desítek atomů a pár set elektronů.

Řešení tohoto problému je snadné, stačí si vzpomenout na minulý díl. Zavedeme si báze funkce. V případě, že chceme počítat molekuly, máme k dispozici mnoho různých optimalizovaných sad. Většinou se jedná o funkce, které připomínají atomové orbitály, jak je známe, jen jsou definované tak, aby se s nimi lépe numericky počítalo. Při výpočtu pak použijeme pro každý atom jednu sadu funkcí s parametry specifickými pro konkrétní prvek, které jsou centrovány okolo polohy tohoto atomu. Většinou nám stačí pro každý atom jen několik desítek bázevých funkcí.

Mohlo by se zdát, že máme vyhráno – povedlo se nám zredukovat problém na několik set až pár tisíc bázevých funkcí, přestože předtím jsme měli více mřížových bodů, než je částic ve vesmíru! Opak je ale pravdou. Musíme si uvědomit, že nemáme jednočásticový problém. Tedy základní „konstrukční“ jednotkou nejsou samotné orbitály, ale stavy, kde máme v dané sadě orbitalů nějakým způsobem naskládané elektrony. Každý takovýto stav pak bude mít svůj vlastní neznámý koeficient. Kolik takových stavů je? To dokážeme jednoduše určit. Máme  $N$  bázevých funkcí, to znamená  $N$  různých orbitalů, které můžeme obsazovat elektrony. V každém orbitalu může být elektron se spinem nahoru, dolů, oba, nebo ani jeden. To znamená, že máme vlastně  $2N$  chlívčků, do kterých umísťujeme po jednom elektronu. Pokud je jejich počet  $k$ , počet možností je dán kombinačním číslem  $\binom{2N}{k}$ . To je stále pro většinu systémů astronomické číslo; například pokud máme 40 elektronů a 100 orbitalů, počet možností je řádově  $10^{42}$ . A to odpovídá ještě docela malé molekule, například benzenu. Ale naštěstí existuje aproximace, která nás z této kaše umí dostat.

### *Hartree-Fockova aproximace*

Jak z toho ven? Problém vězí v tom, že se snažíme řešit problém pro všechny elektrony najednou. Musíme se pokusit problém rozdělit tak, abychom měli nezávislou rovnici pro každý elektron zvlášť, ale zároveň jsme nezanedbali odpuzování mezi jednotlivými elektrony, jako jsme to dělali doteď. Prvním krokem je opustit

myšlenku toho, že můžeme mít různé konfigurace ve vlnové funkci, tedy že do vlnové funkce přispívají různé způsoby, jak mohou být orbitály obsazeny. Místo toho využijeme to, že vlnovou funkci většiny molekul můžeme dobře popsat jedinou konfigurací – takovou, že postupně odspodu dvakrát obsazujeme orbitály s nejnižší energií. Celý problém se nám pak postupně smrskne jen na hledání správného tvaru těchto obsazených orbitalů. Jak ale tyto orbitály hledáme? Představme si, že by nám někdo prozradil, jak vypadají všechny obsazené orbitály kromě jednoho. Pak bychom mohli vzít vlnové funkce všech těchto orbitalů a vyrobit z nich hustotu pravděpodobnosti, kterou jsme si zavedli v druhém dílu seriálu. Když ale tuto hustotu pravděpodobnosti vynásobíme nábojem elektronu, dostaneme nábojovou hustotu!

Tím pádem známe jak elektrostatický potenciál jader, tak rozložení náboje ostatních elektronů. Už nám nic nebrání vytvořit Schrödingerovu rovnici pro poslední orbital s potenciálem daným tímto rozložením náboje a tu snadno vyřešit. Najednou máme jen několik set neznámých, což je pro počítač hračka. (Hledáme jen jeden neznámý koeficient pro každou básovou funkci.) Výsledkem pak je vlnová funkce posledního orbitalu a energie elektronu v tomto orbitalu.

A jak se vypořádáme s tím, že vlnové funkce jednotlivých obsazených orbitalů neznáme? Na začátku si je nějakým způsobem odhadneme. Tyto orbitály pak použijeme k sestavení hamiltoniánů pro jednotlivé elektrony. Vyřešíme odpovídající rovnice a získáme novou sadu orbitalů, která je přesnější než náš původní odhad. Pak celý postup opakujeme s novými orbitály a pokračujeme do té doby, než dostaneme stejné orbitály, jaké jsme použili k vyrobení hamiltoniánu, tedy než orbitály zkonvergují.

Proč výsledek této aproximace není přesný? Háček spočívá v tom, že elektrostatický potenciál od ostatních elektronů v Schrödingerově rovnici pro orbital je nezávislý na poloze tohoto elektronu. V reálném světě si jistě dokážeme představit, že podle toho, kde se elektron nachází, bude v důsledku odpuzování ostatní orbitály různě deformovat. To ale bohužel neumíme popsat, pokud řešíme rovnici pro jediný elektron.

Celková chyba této aproximace je asi 1% ve výsledné energii. Pro popis chemických dějů však většinou potřebujeme přesnost výrazně vyšší. Proto se velká část vývoje metod na kvantově chemické výpočty zaměřuje právě na to, jak obejít tento nedostatek, aniž by se neúměrně zvýšila výpočetní náročnost. Proč je ale vlastně jedno procento tak velká chyba?

Musíme si uvědomit, že celková energie molekuly, kterou vypočítáme, je energie, kterou bychom potřebovali k „rozebrání“ na jednotlivé elektrony a jádra a na jejich odtahení do nekonečna. Tato energie je ve srovnání s energií chemických reakcí ohromná. V chemických reakcích totiž dochází jen k přeuspořádání orbitalů ve valenční vrstvě. Když tedy počítáme energii reakce, musíme počítat celkovou energii produktů a od ní odečíst celkovou energii reaktantů. Pokud máte zkušenosti s tím, jak se při matematických úpravách pracuje s odchylkami, víte, že odchylka reakční energie bude ohromná. Dokonce může vyjít i vyšší než energie samotné reakce. Proto se snažíme, aby se nám chyba u energie reaktantů a produktů co

nejlépe vykompenzovala – musíme použít pro oba výpočty stejnou metodu i bázi.

### *A co s geometrií molekuly?*

Jak jsme si již na začátku řekli, pozice jader jsou v celém výpočtu zafixované a musíme jejich souřadnice na začátku běhu programu zadat. Kde ale tyto souřadnice jader získáme? Sice je někdy můžeme získat z experimentu pomocí rentgenové difrakce, ale ve většině případů je předem neznáme. Co s tím? Stačí nám vědět, jak chceme, aby molekula vypadala, a z toho určíme přibližnou geometrii. Pro tu spočítáme energii. Pak zkusíme jádru trochu pohnout nějakým směrem a sledujeme, zda se nám energie sníží. Postupně takto dojdeme až k takové geometrii, která má nejnižší energii. Výhodou je, že nemusíme tato posunutí jader hledat „naslepo“, ale umíme přímo z vlnové funkce spočítat gradient energie, tedy směr, ve kterém se nám energie snižuje nejrychleji.

Díky tomu dokážeme najít i struktury takových molekul a komplexů, které experimentálně pozorovat téměř nemůžeme, například krátce žijící meziproducty některých chemických reakcí.

### *A jak to vypadá v praxi?*

Nyní si ukážeme, jak v praxi vypadají výpočty. My budeme používat program Psi4, který je volně dostupný (<https://psi4code.org/>). Zkusme si celý postup ukázat na molekule vody. Musíme si připravit vstupní soubor, kde tomuto programu popíšeme, co po něm vlastně chceme.

V první řadě je potřeba popsat molekulu. Na vstupu zadáme molekulu vody, to se udělá pomocí

```
molecule{
0 1
  O      -1.818556   -0.320567    1.225399
  H      -0.898992   -0.062457    1.771117
  H      -2.278145   -1.054597    1.903623
}
```

Primárně by nás měla zajímat první řádka 0 1. První číslo udává náboj molekuly. Číslo 0 tedy značí, že máme neutrální molekulu. V případě kationtu bychom měli kladné číslo, pro aniont bychom měli číslo záporné. Druhé číslo značí spinovou multiplicitu. To je trochu složitější koncept, který označuje celkový počet nespárovaných elektronů, tedy o kolik je víc elektronů se spinem nahoru než dolů. Z historických důvodů se označuje číslem o jedna vyšším, než je nespárovaných elektronů. Tedy pokud máme všechny elektrony spárovány, jedná se o singletní stav a značíme jej 1. Stav se dvěma nespárovanými elektrony je triplet (3). Radikály mohou mít i jeden nespárovaný elektron, pak máme dublet. Každopádně drtivá většina molekul jsou v základním stavu singlet, takže daná řádka je málokdy jiná než 0 1. Notorickou výjimkou je molekula kyslíku O<sub>2</sub>, která je triplet. Dále následují souřadnice jader udané v angstromech.



Bázi udáme řádkem `set basis cc-pvdz`. Zkratka `cc-pvdz` označuje jednu z běžně používanýchází. Další možnosti se vzrůstající velikostí (tedy vzrůstající přesností i výpočetní náročností) jsou: `sto-3g`, `cc-pvdz`, `cc-pvtz`, `cc-pvqz`.

Ve chvíli, kdy máme toto zadefinované, už můžeme na závěr přidat řádek `optimize("HF")`, který spustí geometrickou optimalizaci. "HF" říká, že chceme optimalizovat právě Hartree-Fockovou metodou. Pokud bychom měli již správné souřadnice jader a chtěli bychom jen spočítat energii, vystačili bychom si s příkazem `energy("HF")`.

Když tedy dáme všechny tyto řádky dohromady, dostaneme celý vstup pro program:

```
set basis cc-pvdz
molecule {
0 1
  O      -1.818556   -0.320567   1.225399
  H      -0.898992   -0.062457   1.771117
  H      -2.278145   -1.054597   1.903623
}
optimize("HF")
```

který můžeme uložit jako soubor pojmenovaný například `vstup.inp`. Výpočet můžeme spustit v příkazové řádce pomocí `psi4 vstup.inp`.

Po proběhnutí programu ve složce najdeme soubor `vstup.inp.dat`, případně `vstup.out` nebo podobný, který obsahuje veškeré informace z běhu programu. Pokud vše proběhlo v pořádku, na konci tohoto souboru najdeme výsledné optimalizované souřadnice jednotlivých atomů a výslednou energii celé molekuly. V tomto případě získáme na konci souboru:

```
...
==> Convergence Check <==
```

Measures of convergence in internal coordinates in au.

Criteria marked as inactive (o), active & met (\*), and active & unmet ( ).

Step	Total Energy	Delta E	Max Force	RMS Force	Max Disp	RMS Disp
Convergence Criteria		1.00e-06 *	3.00e-04 *	o	1.20e-03 *	o
7	-76.02703278	-6.09e-06	3.51e-05 *	2.65e-05 o	1.79e-04 *	1.05e-04 o

Next Geometry in Ang  
Fragment 1 (Ang)

```
O  0.0057046143  -0.0645290211  0.0000000000
H -0.7911519198  0.4458305979  0.0000000000
H  0.7006716423  0.5777071999  0.0000000000
```

Final optimized geometry and variables:  
Molecular point group: cs

Full point group: Cs

Geometry (in Angstrom), charge = 0, multiplicity = 1:

O	0.005700842385	-0.064489709337	0.000000000000
H	-0.791211319490	0.445805409758	0.000000000000
H	0.700734813858	0.577693076293	0.000000000000

Psi4 stopped on: Wednesday, 04 January 2023 05:36PM

Psi4 wall time for execution: 0:00:01.40

\*\*\* Psi4 exiting successfully. Buy a developer a beer!

Z kolonky **Final energy** v tabulce, kde je uvedeno  $-76.02703278$ , zjistíme, že celková energie molekuly je  $-76,027$  Ha. Jednotky Ha v tomto případě značí hartree a jeden hartree odpovídá  $27,21$  eV, tedy asi  $2625,5$  kJ·mol<sup>-1</sup> nebo  $4,36 \cdot 10^{-18}$  J. Pokud bychom měli optimalizovanou geometrii a počítali jen energii, stačilo by nám hledat řádek **Total Energy** =  $-76.02703278$ . Těsně před koncem souboru je již výsledná optimalizovaná geometrie molekuly.

### *Pár poznámek na závěr*

Jak samotné hledání správných orbitalů, tak geometrická optimalizace jsou iterativní procedury. Tím pádem se může stát, a docela často se i stává, že iterace nekonvergují, tedy i kdybychom program nechali běžet nekonečně dlouho, nezískáme správný výsledek. Proto je program nastavený, aby vyhodil chybu a skončil, pokud nedosáhne konvergence po určitém množství iterací. V takovém případě je třeba jej zkusit spustit znovu s odlišnou vstupní geometrií, případně i jiným nastavením programu, ale to již žádá zkušeného kvantového chemika.

Zároveň Hartree-Fockova metoda v původní formulaci předpokládá molekulu, která má všechny orbitály molekuly buď obsazené dvěma elektrony, nebo prázdné. To automaticky znamená, že molekula je v singletním stavu. Pokud bychom chtěli počítat jiný spin (například triplet u zmíněného kyslíku), musíme tento požadavek uvolnit pomocí řádku **set reference rohf**.

Při přípravě geometrie komplikovanějších molekul se často hodí používat grafické programy, kde si molekulu můžeme „nakreslit“. Dobrý je v tomto ohledu například program Avogadro.

### *A jak nainstalovat a použít Psi4 na Windows?*

Instalační program na Windows si můžete stáhnout přímo z [http://vergil.chemistry.gatech.edu/psicode-download/Psi4conda-1.7-py38-Windows-x86\\_64.exe](http://vergil.chemistry.gatech.edu/psicode-download/Psi4conda-1.7-py38-Windows-x86_64.exe). Během instalace můžete zakliknout volbu „Add Psi4conda to my PATH environment variable“, pak je možné ke spuštění možné použít přímo Windows příkazovou řádku. V každém případě vám po instalaci v menu Start přibude program „Anaconda prompt“, který můžete použít úplně stejně. Pokud otevřeme Anaconda prompt, můžeme napsat „psi4“, abychom si ověřili, že všechno funguje. Program by se měl spustit a vynadat nám, že nemá vstupní soubor.

Dalším krokem je tedy vzít vstupní soubor (můžete použít například ten ze seriálu), a dát jej programu jako parametr. Pouze je třeba dát si pozor na to, v jaké složce jsme v rámci příkazové řádky a kde je uložený vstupní soubor. Buď je třeba dát za příkaz celou cestu k souboru (např: `psi4 Dokumenty\psi4\vstup.inp`, pokud si na vstupy vyrobíme složku `psi4` v Dokumentech) Druhou z možností je použít příkaz `cd`, který nás přesunuje mezi složkami. (Tedy bychom použili příkaz `cd Dokumenty`, pak `cd psi4`, a nakonec spustili program přes `psi4 vstup.inp`) Pokud bychom se chtěli přesunout o složku výše, je na to příkaz `cd ...`. A příkazem `dir` vypíšeme obsah aktuální složky. Výsledkem běhu programu je v tomto případě soubor `vstup.inp.out`, který si můžeme otevřít pomocí poznámkového bloku.

Tímto končí díl seriálu, a příště na něj navážeme tím, že si ukážeme, co se stane, když jádrům dovolíme se přeci jen hýbat.

## Úloha IV.S ... kvanta molekul

10 bodů

1. Na začátku seriálu jsme zmínili několik aproximací, které jsme použili – jednak zafixování jader a jednak zanedbání relativistických efektů. Pro které prvky čekáte, že se budou elektrony nejvíce vzájemně ovlivňovat s pohybem jader, a proč? A ve které části periodické tabulky si myslíte, že se nejvíce projeví relativistické efekty? Z jakého důvodu? (2 b)
2. Celková energie molekuly vody, jak ji dostaneme z kvantově chemického výpočtu, je cca.  $-75$  Ha. Energie uvolněná slučováním vodíku a kyslíku na vodu je  $242 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . Pokud spočítáme energii reaktantů i produktů s chybou 1 %, jaká bude chyba v určení reakční energie? Také zkuste najít nějakou analogii s měřením v reálném světě. (Například: „Zvážím se s pětikorunou a bez ní, abych určil její hmotnost.“) (3 b)
3. Nainstalujte si program Psi4 a pokuste se spočítat, o kolik se liší energie lodičkové a (zkřížené) vaničkové konformace cyklohexanu. Můžete použít přiložené vstupní soubory s již optimalizovanou geometrií. Jak moc se liší výsledek od experimentální hodnoty  $21 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ? (2 b)

*Poznámka:* Pokud narazíte na problémy s programem Psi4, neváhejte se ozvat na emailovou adresu [mikulas@fykos.cz](mailto:mikulas@fykos.cz)

4. Zkuste spočítat energii reakce pro chloraci benzenu  $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{Cl}_2 \Rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} + \text{HCl}$ . Srovnejte s experimentální hodnotou  $-134 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . Můžete využít geometrii molekuly benzenu. (3 b)

*Bonus:* Vyberte svoji oblíbenou (nebo jakoukoliv jinou) chemickou reakci a spočítejte její energii. (až +3 b)

(řešení str. 202)

## Kapitola 5: Vibrující kvanta

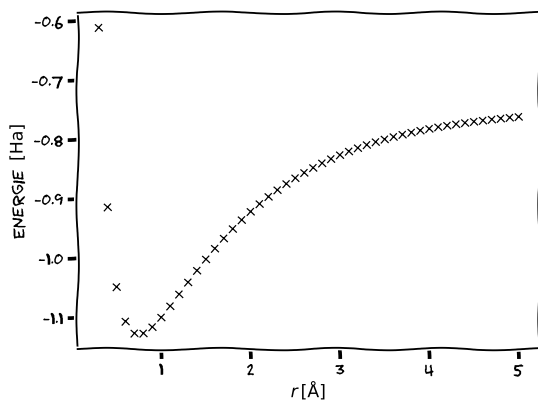
V dnešním díle se konečně podíváme na to, co se stane, pokud v molekulách přeci jen rozpohybujeme jádra.

*To chce mít potenciál!*

Pokud si ještě vzpomenete, tak v minulém díle jsme si zjednodušili Schrödingerovu rovnici pro molekulu tím, že jsme našli efektivní potenciál, ve kterém se pohybuje každý elektron, a tím pádem jsme nemuseli řešit Schrödingerovu rovnici dohromady pro všechny elektrony i jádra. Místo toho nám stačilo vyřešit sadu téměř nezávislých rovnic pro jednotlivé elektrony. Nyní bychom chtěli podobným způsobem najít potenciál pro pohyb jader.

V předchozím díle jsme také při výpočtech zafixovali jádra na základě toho, že se elektrony kvůli rozdílu hmotností pohybují mnohem rychleji než jádra, a tedy pro potřeby modelování elektronového obalu můžeme předpokládat, že jsou jádra nehybná. Nyní ale řešíme přesně opačný problém. Zabýváme se problémem jader, a elektrony v něm fungují jen jako jakési lepidlo, které jádra drží pohromadě. Tentokrát nám nepomůžou triky z minula. Bohužel by nefungovalo ani to, kdybychom vzali zprůměrovanou nábojovou hustotu elektronů (kterou bychom si předem spočítali) a z ní bychom potom utvořili potenciál pro pohyb jader. Problémem je v toto případě, že orbitály elektronů jsou centrovány na jádrech, a tedy se hýbou spolu s nimi. Navíc z toho, jak se mění geometrie molekuly, se změně i jejich tvar. Co tedy s tím?

Představme si, že máme nějakou dvojjadrovou molekulu, například  $H_2$ . Tu vezmeme, pro nějakou konkrétní vzdálenost jader, například  $0,3 \text{ \AA}$ , a spočítáme její elektronovou energii. V tomto případě dostaneme hodnotu  $-0,61 \text{ Ha}$ . Nyní jádra malinko posuneme, na  $0,4 \text{ \AA}$ . Dostaneme energii o něco nižší,  $-0,91 \text{ Ha}$ . Takhle můžeme postupně projít všechny možné vzdálenosti a vynést si energie do grafu. Dostaneme takovýto obrázek, jež se též nazývá disociační křivka molekuly.



To ale skoro vypadá jako potenciál pro pohyb jader. Trochu potíží je, že nemáme pouze jednu částici, která by se v tomto potenciálu pohybovala, ale dvě částice, které se k sobě přibližují a zase oddalují. Tento nedostatek nicméně snadno vyřešíme trikem, který je mnohem starší než kvantová mechanika samotná a už po

více než století se používal k popisu pohybu astronomických těles. Ukazuje se, že pokud popisujeme pohyb dvou těles, jejichž vzájemná síla závisí na vzdálenosti, můžeme místo toho vzít odpovídající potenciál, a v něm nechat pohybovat se těleso o takzvané redukované hmotnosti  $\mu$ . Tato redukovaná hmotnost pro dvě tělesa o hmotnostech  $m_1$  a  $m_2$  je daná vztahem

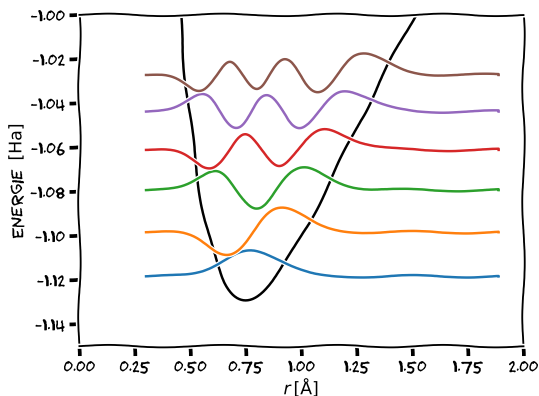
$$\mu = \frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2}.$$

Ve speciálním případě, kdy obě tělesa mají stejnou hmotnost (tedy  $m_1 = m_2$ ), bude redukovaná hmotnost rovna přesně polovině hmotnosti těles  $\mu = m_1/2$ . Naopak v limitním případě, že je jedno z těles řádově těžší než druhé  $m_2 \gg m_1$ , bude redukovaná hmotnost téměř rovna hmotnosti lehčího z těles  $\mu \approx m_1$ .

Nyní nám nic nebrání k tomu vyřešit numericky Schrödingerovu rovnici pro pohyb jader v tomto potenciálu

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\Psi(x)}{dx^2} + V(x)\Psi(x) = E\Psi(x),$$

kde  $V(x)$  je potenciál daný disociační křivkou molekuly. Získáme tím následující stavy, které vykreslíme podobně jako ve druhém díle seriálu. Tedy vykreslíme vlnovou funkci několika stavů s nejnižší energií, kterou posuneme ve svislém směru o energii daného stavu.



Výsledné vlnové funkce  $\Psi(x)$  mají i v tomto případě interpretaci amplitudy pravděpodobnosti. Je zde ale drobný rozdíl, hustota pravděpodobnosti  $|\Psi(x)|^2$  v tomto případě neodpovídá přímo pravděpodobnosti výskytu částice v konkrétním místě, ale udává pravděpodobnost, že jsou od sebe jádra vzdálena o danou hodnotu. Tedy v základním stavu můžeme očekávat, že mezijaderná vzdálenost molekuly je s největší pravděpodobností v okolí minima potenciálu. Naopak pro první excitovaný stav lze očekávat, že molekula bude mít buď větší nebo naopak

menší vzdálenost jader, než je rovnovážná vzdálenost, protože v okolí minima je hustota pravděpodobnosti nulová.

Může se zdát, že šlo jen jakési cvičení na použití kvantové mechaniky, ale opak je pravdou. Když se zamyslíme, zjistíme, že jsme v podstatě do kvantového podoby převedli vibrace molekul. Jistě Vás tedy nepřekvapí, že se tyto vibrace často mohou objevit i v přírodě.

### *Vibrace molekul v přírodě i v laboratoři*

Tak jako může molekula působením elektromagnetického záření přejít do excitovaného stavu, což vlastně znamená přeskok na vyšší kvantový stav elektronů, může stejně tak dobře přeskočit do vyššího vibračního stavu. Rozdíl je v tom, že elektronové přeskoky mají energie, které odpovídají fotonům v ultrafialové a viditelné oblasti spektra, takže je často můžeme přímo pozorovat jako barvy jednotlivých chemických sloučenin. Na rozdíl od toho vibrační přechody molekul leží v infračervené oblasti, takže pro pozorování potřebujeme speciální přístroje. Přesto jsou pro nás zásadní. Například vibrační přechody molekul vody, oxidu uhličitého i dalších molekul v atmosféře absorbují infračervené záření, které by se jinak vyzářilo do vesmíru. To je podstatou dnes tak často zmiňovaného skleníkového efektu.

Zároveň se vibrace složitějších molekul dají použít k rychlé a přesné identifikaci látky v neznámém vzorku. Sice je možné měřit přímo infračervené spektrum, ale je to značně komplikované. Jedním z nejzásadnějších problémů je, že látky, které máme zafixované jako průhledné, například sklo či voda, pro infračervené záření vůbec průhledné nejsou. Přicházíme tak o možnost pozorovat vzorky v roztoku. Z tohoto důvodu se ujal trik, který nám umožňuje celou dobu pracovat s viditelným zářením, pomocí jevu nazývaného Ramanův rozptyl. Pokud prochází látkou světlo o vlnové délce, která není absorbována, tak se pořád občas může při náhodných srážkách s molekulami rozptylovat a odrážet v jiném než původním směru. Tento efekt se nazývá Rayleighův rozptyl, a mimo jiné způsobuje modré zbarvení oblohy. (A vlastně i to, že ve stínu není tma jako v pytli.) Nicméně v malém zlomku případů (uvádí se jeden z milionu) se při rozptýlení fotonu zároveň excituje molekula na vyšší vibrační stav. To je pak právě ten zmiňovaný Ramanův rozptyl. Logicky se tedy kvůli zákonu zachování energie musí i o malinko změnit vlnová délka rozptýleného fotonu.

Na tomto principu je založená Ramanova spektroskopie, kdy vzorek osvítíme laserem o konkrétní vlnové délce a detekujeme rozptýlené záření, které se s vlnovou délkou liší od původního záření. Do grafu pak vynášíme jen hodnotu tohoto posunu. Z toho, o kolik se vlnová délka posune, pak můžeme určit energie jednotlivých vibračních hladin. Tato metoda se dnes již používá i v mnoho oblastech praktického života. Například jako užitečná se ukázala při metanolové aféře. Tam se využilo toho, že metanol můžeme detekovat přes sklo, tedy aniž bychom museli otevřít lahev. Běžně se ale také používá na letištích, kde slouží k detekci výbušnin i drog. Dokonce i nejnovější vozítko na Marsu, Perseverance, má v sobě jeden Ramanův spektroskop zabudovaný. Úspěch Ramanovy spektroskopie je v tom, že zvláště u organických molekul má každá funkční skupina konkrétní frekvence, na kterých

vibruje. Ty pak můžeme snadno ve spektru poznat a díky tomu zjistit, jak daná molekula vypadá.

### Praktické aspekty výpočtu vibračních spekter.

Při hledání potenciálu pro jádra jsme museli opakovat kvantově chemický výpočet pro řadu různých mezijaderných vzdáleností. To ale znamená, že pro jeden výpočet vibrací jader musíme provést velké množství jednotlivých výpočtů pro elektrony. To velmi rychle pro větší molekuly začne být výpočetně příliš náročné. Naštěstí máme v rukávu ještě jeden trik. Podíváme-li se na disociační křivku, v okolí minima, kde nás zajímá, by se dala docela dobře proložit parabolou. Obecný předpis funkce paraboly je  $f(x) = ax^2 + bx + c$ , který ale můžeme doplnit na čtverec, a dostaneme předpis našeho parabolického potenciálu  $V(x) = k(x - x_{\min})^2/2 + E_{\min}$ . Zde ale většinu parametrů známe!  $x_{\min}$  je rovnovážná vzdálenost a  $E_{\min}$  je energie v minimu potenciálu. Parametr  $E_{\min}$  navíc jen posunuje energie všech stavů, a proto jej můžeme položit nule, a všechny energie, které nám vyjdou, pak budou definované jako rozdíl vůči této hodnotě.

Jedinou neznámou je tedy v tomto případě tuhost  $k$ . Tu nemusíme určovat pomocí fitování, ale můžeme ji rovnou určit z druhé derivace energie podle polohy jader. Tuto druhou derivaci lze analyticky určit přímo z vlnové funkce v optimalizované geometrii a celkově nám tedy stačí jediný kvantově chemický výpočet. Při výpočtu derivace z definice bychom přitom potřebovali výpočty energie minimálně tři.

Tím ale zjednodušení nekončí! Vzpomenete-li si na začátek třetího dílu, ukázali jsme si tehdy lineární harmonický oscilátor, který má přesně takový, parabolický potenciál. Tím pádem se nemusíme trápit numerickým řešením Schrödingerovy rovnice, ale můžeme energie jednotlivých hladin najít analyticky. Schrödingerova rovnice harmonického oscilátoru má tvar

$$-\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{k}{2} x^2 \psi(x) = E\psi(x),$$

kde jsme rovnou použili výše zavedenou redukovanou hmotnost  $\mu$ .

Nebudeme si ukazovat postup, jakým se rovnice řeší, protože by se seriál neúměrně natáhnul. Pro výpočet poloh vibračních čar ve spektrech nám totiž stačí znát energie jednotlivých hladin. Tyto hladiny jsou ekvidistantní a energie  $n$ -té hladiny je daná vzorcem

$$E_n = \sqrt{\frac{k}{\mu}} \hbar \left( n + \frac{1}{2} \right),$$

kde  $n$  nabývá celočíselných hodnot od 0 do  $\infty$ . Všimněte si, že rozdíl energie mezi jednotlivými hladinami je  $\hbar\sqrt{k/\mu}$ , což odpovídá fotonu o přesně stejné frekvenci, jakou by měl oscilátor s tuhostí  $k$  v klasické mechanice. Toto je jeden z mnoha příkladů korespondence mezi klasickou a kvantovou mechanikou. Přeskoky mezi sousedními hladinami budou tedy způsobovat absorpci právě na této na energii  $\hbar\sqrt{k/\mu}$ . Navíc se ukazuje, že přeskoky o více než jednu hladinu jsou zakázané, a tedy v přírodě téměř neprobíhají.

*A co když máme atomů víc?*

Pokud máme více než dvouatomovou molekulu, je situace o něco složitější. Celkem totiž má soustava  $N$  atomů  $3N$  stupňů volnosti, protože polohu každého atomu lze popsat pomocí tří souřadnic. Z toho 3 stupně volnosti odpovídají translaci, tedy pohybu celé molekuly jako celku. Dále 3 stupně volnosti odpovídají rotaci molekuly. (Pro lineární molekulu jen 2). Pokud tyto zanedbáme, protože pro nás nejsou zajímavé, tak nám zbyde  $3N - 6$  ( $3N - 5$  pro lineární molekulu) stupňů volnosti, které odpovídají různým vibracím.

Postup řešení je v zásadě obdobný, jako jsme si ukázali v předchozí části pro jednu vibraci, až na to, že řešíme problém v mnoha dimenzích. Najdeme optimální geometrii, spočítáme vlnovou funkci a z ní druhé derivace energie ve všech směrech. Z těch pak nakonec získáme energie jednotlivých vibrací. Výhodou je, že programy celou tuto sekvenci kroků provádí automaticky, takže nám stačí zoptimalizovat geometrii a o zbytek se program postará sám.

Výsledkem výpočtu jsou v tomto případě vlastní módy, tedy stojatá vlnění, která mají přesně určenou frekvenci. To je opět analogie s klasickou mechanikou, kde při vibraci makroskopických těles můžeme takovéto módy též pozorovat. Nás ale primárně zajímají frekvence těchto módů, které pak například umíme srovnat s experimentálním Ramanovým spektrem. Může se také někdy stát, že nám program některé frekvence vypíše záporné – To značí, že nemáme optimální geometrii, protože ve směru daného vibračního módu se energie snižuje.

Jako příklad si ukážeme výpočet v programu Psi4 na molekule vody. Připravíme si vstup podobný jako v minulém díle, jen přidáme řádek `frequency("HF")`. Vstup pro Psi4 tedy bude vypadat:

```
set basis cc-pvdz
molecule {
0 1
O -1.818556 -0.320567 1.225399
H -0.898992 -0.062457 1.771117
H -2.278145 -1.054597 1.903623
}
optimize("HF")
frequency("HF")
```

Po spuštění ve výpisu najdeme těsně před koncem sekci `Harmonic Vibrational Analysis`, kde můžeme najít výsledné frekvence. Na konci této sekce je

...

```
Vibration 7 8 9
Freq [cm-1] 1776.1024 4113.4307 4211.9124
Irrep Ap Ap Ap
Reduced mass [u] 1.0817 1.0461 1.0820
Force const [mDyne/A] 2.0105 10.4283 11.3092
Turning point v=0 [a0] 0.2503 0.1673 0.1625
```



```

RMS dev v=0 [a0 u^1/2] 0.1841 0.1210 0.1196
IR activ [km/mol] 80.8468 21.1727 60.6078
Char temp [K] 2555.4159 5918.3109 6060.0042

```

```

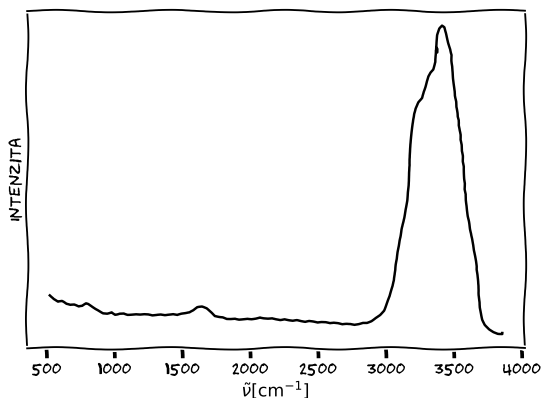
-----
1 0-0.01 -0.07 0.00 -0.00 0.05 -0.00 -0.07 -0.01 0.00
2 H 0.38 0.59 -0.00 0.61 -0.35 0.00 0.59 -0.38 -0.00
3 H -0.48 0.52 0.00 -0.54 -0.45 -0.00 0.52 0.48 0.00

```

...

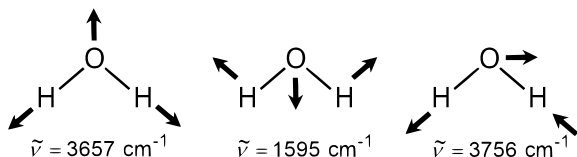
To je v souladu s výše uvedeným pravidlem, které předpovídá právě 3 vibrační módy. Molekula vody by tedy měla vibrovat na energiích  $1776\text{ cm}^{-1}$ ,  $4113\text{ cm}^{-1}$  a  $4211\text{ cm}^{-1}$ . Energie vibrací ve spektroskopii se standardně udávají pomocí vlnočtu v recipročných centimetrech ( $\text{cm}^{-1}$ ). Výhodou je, že vlnočty  $\tilde{\nu} = 1/\lambda = E/(hc)$  je přímo úměrný energii záření, na rozdíl od vlnové délky.

Nyní se můžeme podívat na experimentální Ramanovo spektrum vody.



Můžeme v něm najít všechny tři módy, ač, jejich frekvence se od té, co jsme spočítali my, trochu liší. Dvě čáry, které v našich výpočtech mají energie  $4113\text{ cm}^{-1}$  a  $4211\text{ cm}^{-1}$ , se slíjí do jednoho širokého píku, který ve skutečnosti leží mezi  $3000\text{ cm}^{-1}$  a  $3500\text{ cm}^{-1}$ . Naopak třetí čára, která nám vyšla na  $1776\text{ cm}^{-1}$ , je v grafu sotva zřetelná, ale zato leží téměř tam, kde jsme ji spočítali, přibližně na  $1600\text{ cm}^{-1}$ . To je další úskalí výpočtů vibračních spekter, ne všechny přechody se v Ramanově spektroskopii projeví. Některé mohou být zakázané, takže ve spektru budou slabé nebo se neprojeví vůbec. Z výpočtu lze samozřejmě určit i intenzity jednotlivých přechodů, ale to už přesahuje rámec našeho textu.

Na závěr ještě dodáme, že zmíněné tři módy vypadají takto. Pod obrázky jsou uvedeny jejich experimentální energie.



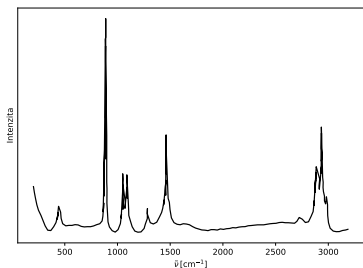
### Úloha V.S ... etanol či metanol?

10 bodů

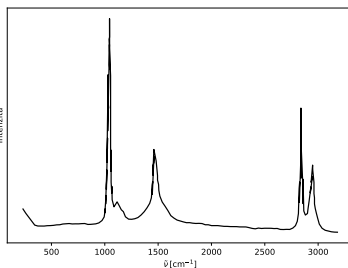
Vazebná energie molekuly fluoru je přibližně 37 kcal/mol. Pokud uvážíme dosah vazebných interakcí přibližně 3 Å od optimální vzdálenosti, jakou (průměrnou) silou musíme působit, abychom molekulu roztrhli? Spočítejte „tuhost“ molekuly fluoru, pokud by uprostřed tohoto rozmezí působila síla o velikosti této průměrné síly. Jaká by byla vibrační frekvence této molekuly? Srovnajte s experimentální hodnotou 916,6 cm<sup>-1</sup>. (4 b)

Zkuste pomocí Psi4 spočítat disociační křivku F<sub>2</sub> a proložit ji v okolí minima parabolou. Jaká vám z ní tentokrát vyjde energie vibračních přechodů? (3 b)

Máte dvě lahve alkoholu, které vám přišly přinejmenším podezřelé. Vzali jste je tedy do laboratoře a získali z nich následující Ramanova spektra. Pomocí programu Psi4 spočítejte, na jakých frekvencích jsou vibrační přechody molekul metanolu i etanolu, a na základě toho odhadněte, ve které lahvi je metanol a ve které etanol. Můžete využít přibližné geometrie etanolu a metanolu, které jsou součástí zadání na webu. (3 b)



Obr. 32: Ramanovo spektrum lahve A



Obr. 33: Ramanovo spektrum lahve B

(řešení str. 208)

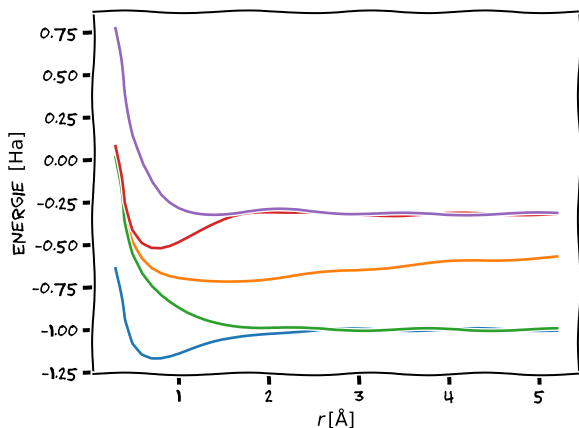
## Kapitola 6: Excitující kvanta

V dnešním, závěrečném díle se detailněji podíváme na excitované stavy molekul a přechody mezi nimi.

V předchozích výpočtech jsme uvažovali molekuly jen v základním stavu. V takovém případě můžeme pro většinu molekul očekávat, že máme jednoduchý stav,

kde jsou všechny nejnižší orbitály až po nějakou úroveň obsazené dvěma elektrony, a pak prázdné, což nám zjednodušuje výpočty. Naopak, jakmile nějaký elektron excitujeme do vyššího orbitalu, tento předpoklad rozhodně platit nebude, což s sebou přináší komplikace.

Celkově je svět excitovaných stavů mnohem bohatší, než když se omezíme jen na základní stav. Jako ilustraci si vezměme jednoduchou molekulu vodíku, která má jen dva elektrony. Nyní můžeme, podobně jako v minulém díle, pro každou mezijadernou vzdálenost napočítat energii několika nejnižších elektronových stavů. Jak se tyto excitované stavy počítají si ukážeme později. Když nyní vyneseme tyto energie do grafu, podobně jako jsme to udělali v minulém díle pro disociační křivku, dostaneme obrázek 34.



Obr. 34: Energie elektronových stavů

V něm každá křivka odpovídá nějakému konkrétnímu stavu. Vidíme, že některé křivky nemají charakter vázaného stavu, protože jejich energie monotónně roste s přibližujícími se jádry a nejnižší energii mají pro nekonečně vzdálená jádra. Naopak disociační křivky pro jiné stavy mají téměř stejný tvar jako křivka základního stavu, jen s vyšší energií. V takovémto stavu tedy může molekula setrvat delší dobu. Zároveň tento vázaný excitovaný stav bude mít svojí vlastní sadu vibračních stavů.

Z minulého dílu navíc víme, že pro molekulu, která má  $N$  atomů, musíme uvažovat potenciálové křivky (plochy) v  $3N - 6$  ( $3N - 5$ ) dimenziálním prostoru. Jistě tedy tušíte, že tento svět je nesmírně bohatý, ale zároveň i nesmírně komplikovaný a stále v této oblasti probíhá intenzivní výzkum jak na experimentální, tak i teoretické úrovni.

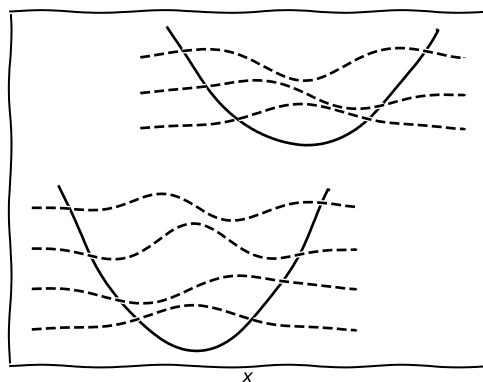
Přestože je však svět molekul a jejich excitovaných stavů velice komplikovaný, můžeme najít mnoho univerzálně se vyskytujících jevů, z nichž některé si můžeme

hned ukázat.

### Fluorescence

Fluorescence je jedním z nejvíce známých jevů souvisejících s přechodem mezi různými elektronovými stavy. Zjednodušený popis je, že molekula pohltí foton nějaké frekvence, čímž se dostane do excitovaného stavu. V něm pak setrvá do doby, než dojde ke spontánní emisi, tedy vyzáření fotonu a opětovnému přechodu do základního stavu.

Udělejme si jednoduchý model tohoto procesu. Podobně jako v minulém díle si aproximujeme potenciálové křivky základního i nejnižšího excitovaného stavu v okolí minima parabolou. Každý z těchto stavů bude navíc mít svoji sadu vibračních stavů. Dostaneme tak například obrázek 35.

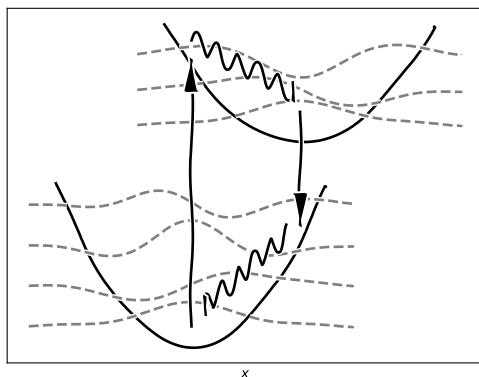


Obr. 35: Aproximace potenciálových křivek

Všimněte si, že rovnovážná geometrie excitovaného stavu se liší od geometrie základního stavu. Při absorpci fotonu dojde k excitaci do vyššího elektronového stavu. Protože se jedná primárně o přeuspořádání elektronového obalu, nedochází při ní ke změně geometrie. Jak ale víte z minula, jádra také mají kvantový charakter. Proto sice mluvíme o geometrii molekuly, ale ve skutečnosti musíme uvažovat vlnovou funkci danou vibračním stavem a odpovídající hustotu pravděpodobnosti. Také přímo nemůžeme mluvit o tom, jestli mají základní a excitovaný stav stejnou geometrii, ale pouze jaká je pravděpodobnost, že základní stav a excitovaný stav budou mít stejnou geometrii. Tím pádem pravděpodobnost, že k excitaci skutečně dojde, závisí na tom, jak moc se překrývají hustoty pravděpodobnosti výskytu jader pro základní a excitovaný stav. Proto pokud se rovnovážná „geometrie“ excitovaného stavu liší, tak excitací nejčastěji skončíme v nějaké vyšší vibrační hladině

excitovaného stavu, protože vyšší vibrační hladiny mají i vyšší pravděpodobnost výskytu dále od rovnovážné polohy.

Po excitaci pak dojde k vibrační relaxaci, tedy molekula postupně přejde na nejnižší vibrační hladinu daného stavu. To se děje primárně interakcí s okolními molekulami, které přijmou energii ve formě tepla. Tato vibrační relaxace probíhá nesmírně rychle, mnohem rychleji, než kdyby molekula přeskakovala na nižší vibrační hladiny vyzařováním infračervených fotonů. Z něj pak dojde k spontánní emisi a molekula přejde opět do základního elektronového stavu. Ze stejných důvodů jako prve opět přejdeme na vyšší vibrační hladinu. (Molekula má teď totiž geometrii excitovaného stavu.) Pak opět dojde k vibrační relaxaci a skončíme ve stavu, ve kterém jsme byli na začátku. Celé to můžeme vidět na diagramu 36



Obr. 36: Přejchod mezi stavy

Rovnou šipkou jsou označeny přechody spojené s absorpcí nebo uvolněním fotonu, zatímco vlnitou jsou označené nezářivé přechody. Nenechte se zmást tím, že zde zakreslujeme potenciálové křivky daných elektronových stavů. Ve skutečnosti tyto potenciály slouží jen jak vodítko a molekula jen přeskakuje po různých vibračních stavech.

Z diagramu také vidíme, že energie fotonů vyzářených fluorescencí bude nižší než energie excitačního záření. Rozdíl mezi maximem v absorpčním spektru a maximem fluorescence se nazývá Stokesův posuv. Navíc, spektra absorpce a fluorescence mívají podobný tvar, jen jsou zrcadlová. K tomu dochází, protože velikost překryvu nejnižší vibrační hladiny základního stavu s  $n$ -tou hladinou excitovaného stavu je podobná velikosti překryvu mezi nejnižší vibrační hladinou excitovaného stavu s  $n$ -tou vibrační hladinou stavu základního.

Přestože se nám může zdát, že fluorescence probíhá okamžitě (a životnost excitovaných stavů bývá opravdu v řádu nanosekund), tak v mikrosvětě se jedná

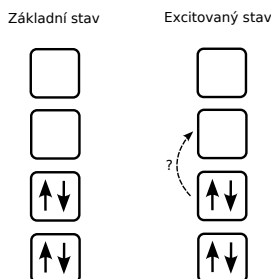
spíše o pomalý proces. Například zmíněná vibrační relaxace je alespoň o tři řády rychlejší, jedná se o pikosekundy. Díky tomu můžeme předpokládat, že molekula „nestihne“ vyzářit foton, než se zrelaxuje, a fluorescence probíhá téměř vždy z nejnižší vibrační hladiny.

Kromě fluorescence může dojít i k tomu, že molekula přejde do základního stavu bez vyzáření fotonu. To nazýváme nezářivý přechod. Podobně jako u vibrační relaxace molekula během něj předá energii okolním molekulám. V důsledku to znamená, že molekula fluorescenčně vyzáří méně fotonů než absorbuje. Procento fotonů, které molekula vyzáří zpět, nazýváme kvantovým výtěžkem. V závislosti na molekule může být hodnota kvantvého výtěžku blízka 100 % (u fluorescenčních barviv), i 0 % – taková molekula pak fluorescenčně nevyzařuje vůbec. (Například beta karoten.)

Molekuly samozřejmě většinou mívají více excitovaných stavů. Narozdíl od základního stavu jsou ale rozdíly mezi energiemi různých excitovaných stavů nižší. V důsledku toho se překrývají vibrační spektra obou stavů, což vede k tomu, že i pokud je molekula na nejnižší vibrační hladině nějakého vyššího excitovaného stavu, místo vyzáření fotonu může velice rychle relaxovat do vyšší vibrační hladiny jiného stavu. Díky tomu fluorescence probíhá téměř vždy jen z nejnižšího excitovaného stavu. Toto je podstatou Kashova pravidla, které tvrdí, že vlnová délka fluorescenčního záření nezávisí na tom, jakou vlnovou délkou molekulu excitujeme.

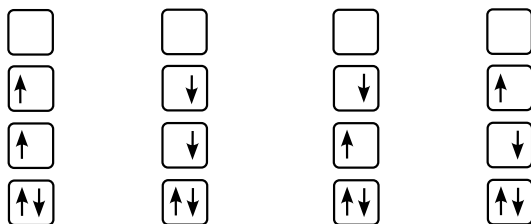
### Vlnové funkce excitovaných stavů

Jak už jsme zmínili na začátku, vlnové funkce excitovaných stavů bývají komplikovanější než ty stavu základního. Zatímco v základním stavu jsou všechny hladiny dvakrát obsazené, excitované stavy budou mít nějaký z elektronů excitovaný do nějakého vyššího neobsazeného orbitalu, jak je naznačeno na obrázku 37.



Obr. 37: Základní a excitovaný stav orbitalů

Můžeme očekávat, že nejnižší energii stavu dostaneme, pokud excitujeme elektron z nejvyššího obsazeného do nejnižšího neobsazeného orbitalu. Celkově máme 4 možnosti, jak vůči sobě mohou být orientované spiny elektronů v těchto dvou orbitalech.



Obr. 38: Možnosti excitace

Než ale budeme tyto stavy interpretovat, musíme si ještě něco povědět o spinu. Spin je kvantová veličina, která je interpretovaná jako vnitřní moment hybnosti částice, který se pro nabitě částice projevuje jako vnitřní magnetický moment. Částice lze charakterizovat dvěma spinovými čísly. Jednak je to celková velikost spinu, která je charakteristická pro konkrétní typ částice (například elektron má spin  $1/2$ ). Dále je to projekce spinu do konkrétního směru. Ta, v závislosti na velikosti spinu, má jen některé konkrétní hodnoty, kterých může nabývat. Tedy například u elektronu se spinem  $1/2$  máme dvě možné hodnoty projekce,  $+1/2$  a  $-1/2$ . Tyto dvě možné hodnoty v nám již dobře známých orbitálních diagramech značíme pomocí šipek nahoru a dolů.

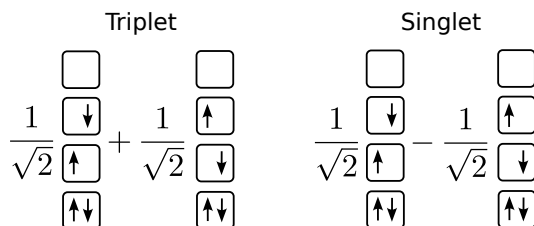
Stejným způsobem můžeme pomocí spinu klasifikovat i stavy molekul. Pokud máme všechny elektrony spárované, což je běžné u základního stavu mnoha molekul, máme celkovou hodnotu spinu 0. Takový stav nazýváme singlet, protože má jedinou povolenou spinovou projekci, a to 0. Naopak, pokud například máme dva nespárované elektrony, jejichž spiny se „sečtou“, hovoříme o tripletním stavu. Ten má tři možné hodnoty projekce, 1, 0 a -1.

Pokud se vrátíme k našim 4 možnostem orientací elektronů v excitovaném stavu, vidíme, že první dvě kombinace zleva budou dvě z možných projekcí tripletu, s projekcí 1 a -1. V prvním případě se nám sečtou projekce  $1/2$  od dvou elektronů, zatímco v druhé se sečtou dvě projekce  $-1/2$ . Zbylé dvě kombinace jsou složitější. Evidentně obě mají projekci spinu nula, protože příspěvky obou nespárovaných elektronů se vykrátí. Pokud bychom ale řešili problematiku detailněji, zjistili bychom, že tyto dvě kombinace vůbec nemají konkrétní hodnotu spinu, nejedná se o čisté spinové stavy. Je to podobné, jako když vezmeme obecnou vlnovou funkci. Ta pravděpodobně nebude vlastní funkcí hamiltoniánu, a proto jí nemůžeme přiřadit konkrétní hodnotu energie.

Místo toho musíme vzít takovéto kombinace spinů. Výsledkem je jedna vlnová funkce, která je singletní a druhá, která je třetí chybějící projekcí tripletu.

Dá se ukázat, že v důsledku interakcí mezi elektrony má excitovaný triplet nižší energii než excitovaný singlet. Působí zde stejné principy jako v případě hundových pravidel, které také upřednostňují elektrony mířící stejným směrem.

Pro nás nejpodstatnější důsledek je, že protože se spin v přírodě zachovává (podobně jako u momentu hybnosti), zářivě přechody mezi stavy o různém spinu



jsou zakázané, a tím pádem neprobíhají tak rychle. To je podstatou fosforescence, kterou si hned ukážeme.

Pro pořádek ještě dodejme, že pokud bychom vycházeli jen ze Schrödingerovy rovnice, zářivý přechod by neměl probíhat vůbec. Tím pádem se ale mohou projevit jiné, slabší vlivy. V tomto případě se začnou projevovat relativistické efekty, které umožní, aby takovýto přechod proběhl, i když pomaleji.

### Fosforescence

Jak jsme si teď zmínili, přechod mezi základním stavem, který je obvykle v singletním stavu, a některým tripletním excitovaným stavem je zakázaný. Proto nemůžeme pomocí světla excitovat přímo do tripletního stavu. Přesto se molekula může do tohoto stavu dostat. Excitujeme molekulu do nějakého singletního stavu, odkud pak, nejčastěji kvůli interakci s momentem hybnosti obíhajících elektronů, může sklouznout do nižšího tripletního stavu. Takový proces se nazývá mezisystémový přechod.

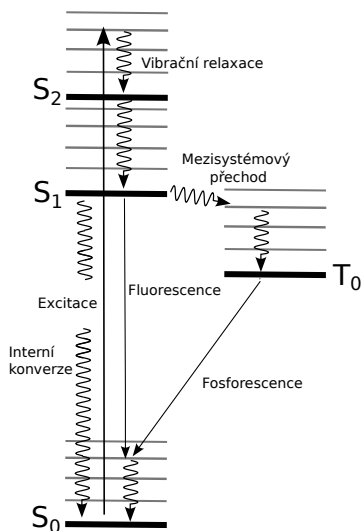
Když už se molekula jednou dostane do tripletního stavu, pak, podobně jako jsme si popsali u fluorescence, sklouzne molekula do nejnižšího z tripletních stavů. Tam je ale molekula uvězněná. Nemůže samovolně přejít do žádného jiného z excitovaných stavů, protože ty mají vyšší energii, a to se neslučuje se zákonem zachování energie. Musí tedy počkat, než se jí nakonec „povede“ vyzářit foton a přejít zpět do základního stavu. Protože je ale tento přechod zakázaný, molekula vydrží v tomto excitovaném stavu dlouho, jeho životnost je v řádu sekund, minut, i déle. Toto pomalé vyzařování pak nazýváme fosforescencí.

Právě na tomto jsou založené všechny možné předměty, které svítí ve tmě – dokud jsou na světle, postupně se v nich hromadí molekuly vyexcitované na tripletní hladinu. Když pak zhasneme, tyto molekuly postupně slabě vyzařují, právě pomocí fosforescence. V tomto případě se ale používají anorganické materiály, například ZnS s různými příměsmi. U organických molekul je fosforescence slabší, protože mají lehčí atomy, a tím pádem se tolik neprojevuje relativita.

Všechny tyto efekty se obvykle znázorňují pomocí takzvaného Jablonského diagramu.

V něm značíme tlustými čarami jednotlivé elektronové stavy a tenkými čarami jsou u každého stavu naznačeny odpovídající vibrační hladiny. V jednom sloupci jsou singletní stavy, které jsou vykresleny nad sebou, zatímco tripletní jsou vpravo od nich. Přechody mezi různými stavy pak značíme šipkami. Rovnou šipkou





Obr. 39: Jablonského diagram

značíme takový přechod, který je spojen s uvolněním či vyzářením fotonu. Naopak vlnitou značíme přechody, kde se žádný foton nevzaruje a energie se uvolní jiným způsobem, například ve formě tepla.

### A jak se to počítá?

Jak jistě již tušíte, na excitované stavy nám Hartree-Fockova metoda nebude stačit. Musíme se totiž oprostít od toho, že vlnová funkce má jen jediné konkrétní obsazení orbitalů. Vezmeme tedy vlnovou funkci, která obsahuje několik konfigurací s různě obsazenými orbitaly, které jsou sečtené s různými váhovými koeficienty. V celém problému tedy optimalizujeme jednak tvar orbitalů, jednak neznámé koeficienty u jednotlivých orbitalů. Taková metoda se nazývá multikonfigurační selfkonzistentní pole (MCSCF).

Protože řešit, které konfigurace musíme vzít pro popis daného problému, by bylo silně netriviální, zjednodušujeme si práci tím, že místo konkrétních konfigurací vybereme všechny orbitaly důležité pro popis daného problému a uvažujeme všechny možné konfigurace, které můžeme získat rozmístěním konkrétního množství elektronů v daných orbitalech. Daná sada orbitalů se nazývá aktivní prostor. Metoda se pak nazývá CASSCF.

Při výpočtu pomocí metody CASSCF nejdřív musíme provést ty kroky, které jsme prováděli i v minulých dílech. Tedy optimalizujeme geometrii, pak spočítáme energii Hartree-Fockem, abychom získali úvodní sadu orbitalů. Pak z těchto orbitalů vybereme aktivní prostor a můžeme spustit výpočet CASSCF.

Jak pak vypadá výpočet v programu Psi4? Ukážeme si to na molekule vody. Budeme počítat 3 stavy – základní stav, první excitovaný singlet a nejnižší tripletní stav. Protože stavy s různými spiny jsou do značné míry nezávislé, můžeme je počítat zvlášť. Budeme mít tím pádem dva výpočty, jeden pro singlet, kde budeme počítat dva stavy, a druhý pro triplet, kde nám stačí jeden stav.

Protože čekáme, že vlnová funkce těchto nejnižších excitovaných stavů bude vypadat přesně tak, jak jsme si ukázali před chvílí, tak nám stačí vzít do aktivního prostoru dva orbitaly. Jeden, který je v základním stavu dvakrát obsazený, druhý naopak nejnižší neobsazený. Takže na začátku vstupu bude již známá část s bází a geometrií. Abychom si ušetřili komplikace s geometrickou optimalizací, do vstupu zadáme geometrii, kterou jsme si předem zoptimalizovali.

```
set basis cc-pvdz
molecule H2O{
symmetry c1
0 1
O -0.005700842385 -0.064489709337 0.000000000000
H -0.791211319490 0.445805409758 0.000000000000
H 0.700734813858 0.577693076293 0.000000000000
}
```

Pokud jste pozorní, jistě vám neuniklo, že v geometrii je oproti minule jeden řádek navíc, `symmetry c1`. Ten přidáváme proto, že molekula vody je symetrická, tedy má dvoučetnou rotační osu a dvě roviny zrcadlení. Program Psi4 pak jednotlivé orbitaly dělí podle toho, jak se chovají vůči těmto operacím, tedy jestli zůstanou stejné, nebo například změní znaménko. Přestože ve spoustě případů se hodí je takto dělit, náš výpočet by to zbytečně komplikovalo. Proto jsme tímto řádkem nastavili program tak, aby k molekule přistupoval, jako kdyby žádnou symetrii neměla.

Dále potřebujeme nastavit, které orbitaly budou v aktivním prostoru. To uděláme tak, že nastavíme počet orbitalů, které jsou dvakrát obsazené ve všech konfiguracích, a počet orbitalů v aktivním prostoru. Voda má celkem 10 elektronů (8 z kyslíku a jeden z každého z vodíků), v základním stavu je tedy dvakrát obsazeno 5 orbitalů, z čehož jeden chceme v aktivním prostoru. Orbitaly obsazené ve všech konfiguracích tedy budou 4. Naopak aktivní orbitaly chceme dva. To nastavíme pomocí následujících řádků:

```
set restricted_docc [4]
set active [2]
```

Dále potřebujeme nastavit ještě nějaké další věci. Jednak chceme, aby program hlídal, jestli máme správnou multiplicitu. To zařídíme pomocí

```
set calc_s_squared true
set S 0
```

kde druhý řádek pak nastavuje přímo hodnotu multiplicity. Pozor, tady se udává přímo celková hodnota spinu, tedy pro singlet 0, pro triplet 1, atd.

Nakonec si musíme říct o to, že chceme dva stavy. Protože ale každý stav má svoje „optimální“ orbitaly, tak programu musíme říct, že nemá se snažit najít optimální orbitaly pro jeden ani druhý stav, ale raději má vytvořit „zprůměrované“ orbitaly vhodné pro oba stavy stejně.

```
set num_roots 2
set avg_states [0,1]
```

Druhý řádek nám nastavuje, přes které stavy (číslované od 0) program průměruje orbitaly. Sami si pak můžete zkusit, že pokud v hranatých závorkách necháte jen [0], program sníží energii nejnižšího, základního stavu, a naopak energie excitovaného stavu se výrazně zvýší. Naopak [1] sníží energii excitovaného stavu na úkor stavu základního.

Ted už stačí jen spočítat energii pomocí `energy('casscf')`. Celý vstup tedy bude vypadat takto:

```
set basis cc-pvdz
molecule H2O{
symmetry c1
0 1
O 0.005700842385 -0.064489709337 0.000000000000
H -0.791211319490 0.445805409758 0.000000000000
H 0.700734813858 0.577693076293 0.000000000000
}
```

```
set restricted_docc [4]
set active [2]
```

```
set calc_s_squared true
set S 0
```

```
set num_roots 2
set avg_states [0,1]
```

```
energy('casscf')
```

Ve výstupním najdeme kousek před koncem:

```
==> Energetics <==

SCF energy = -76.027032779942914
Total MCSCF energy = -75.868406011147982

==> MCSCF root 0 information <==
```

MCSCF Root 0 energy = -76.012806678099437

Active Space Natural occupation numbers:

A 1.999576 A-0.000424

The 4 most important determinants:

\* 1 0.999894 ( 0, 0) 5AX  
 \* 2 -0.014555 ( 1, 1) 6AX  
 \* 3 0.000000 ( 0, 1) 5AA 6AB  
 \* 4 0.000000 ( 1, 0) 5AB 6AA

==> MCSCF root 1 information <==

MCSCF Root 1 energy = -75.724005344196783

Active Space Natural occupation numbers:

A 1.000000 A 1.000000

The 4 most important determinants:

\* 1 0.707107 ( 0, 1) 5AA 6AB  
 \* 2 0.707107 ( 1, 0) 5AB 6AA  
 \* 3 0.000000 ( 1, 1) 6AX  
 \* 4 0.000000 ( 0, 0) 5AX

Pozor, nenechte se zmást, v tomto případě nás nezajímá řádek **Total MCSCF energy**, protože tato energie je také „zprůměrovaná“, ale energie jednotlivých stavů (tu nazývaných **root** - kořen), které jsou níže. Vidíme tedy, že energie nejnižšího stavu je  $-76,012\,806\,678\,099\,437$  Ha, zatímco první excitovaný stav má energii  $-75,724\,005\,344\,196\,783$  Ha. Nyní upravíme vstup pro triplet – změňme řádek **set S 0** na **set S 1** a smažeme řádky, kde jsme chtěli dva stavy.

Dostaneme takovýto vstup,

```
set basis cc-pvdz
molecule H2O{
symmetry c1
0 1
O 0.005700842385 -0.064489709337 0.000000000000
H -0.791211319490 0.445805409758 0.000000000000
H 0.700734813858 0.577693076293 0.000000000000
```

}

```

set restricted_docc [4]
set active [2]

set calc_s_squared true
set S 1

energy('casscf')

```

a po spuštění pak energii tripletního stavu  $-75,770492145528493$  Ha.

Odečtením energií obou singletních stavů dostaneme excitační energii  $0,28$  Ha, což je  $7,62$  eV. To rozhodně není špatný výsledek, protože experimentální hodnota je okolo  $7,4$  eV.

Na závěr se hodí zmínit, že metoda CASSCF je jedno z nejsilnějších kladiv v arzenálu kvantového chemika, a používá se na výpočty s těmi nejzákeřnějšími molekulami. Hodí se tedy například na výpočty komplexů přechodných kovů, excitovaných stavů, nebo tranzitních struktur při chemických reakcích.

### *Pár slov na závěr*

Tímto dílem jsme uzavřeli náš seriál o kvantové chemii. Doufám, že se Vám líbil a že jste se dozvěděli něco nového. A snad již je Vám jasné, že tvrzení, že „chemie je jen aplikovaná fyzika“, je sice pravdivé, ale že v praxi ta aplikace fyziky na molekuly rozhodně není triviální.

## Úloha VI.S ... excitující kvanta

10 bodů

Nejnižší excitovaný singletní stav beta karotenu má energii o  $1,8$  eV vyšší než je energie základního stavu. Přejít mezi tímto stavem a základním stavem je ale zakázaný, takže molekula na této energii fotony neabsorbuje. Naopak přechod na druhý nejnižší singletní stav o energii  $2,4$  eV je povolený a zodpovědný za zářivě oranžovou barvu molekuly. Nejnižší tripletní hladina pak je na energii  $0,9$  eV. Načrtněte Jablonského diagram a pomocí něj vysvětlete, proč beta karoten nefluoreskuje, přestože silně absorbuje viditelné světlo. (3 b)

*Bonus:* Proč je pro život na zemi tak zásadní, že kyslík je v základním stavu triplet? (+1 b)

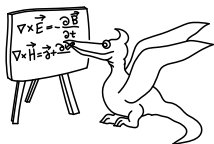
Zkuste spočítat, jaký je přibližně limit pro počet orbitalů v aktivním prostoru u metody CASSCF. Uvažujte, že v aktivním prostoru máte stejně elektronů jako orbitalů (což odpovídá tomu, že v HF by právě polovina byla obsazená) a že většina dnešních superpočítačů na výpočty má maximálně  $1$  TB operační paměti, do které se vám potřebuje vejít hamiltonián. (3 b)

Pro litografickou výrobu moderních polovodičových čipů se používají takzvané excimerové lasery, které září v daleké UV oblasti. Jsou založené na takzvaných excimerech, což jsou molekuly, které jsou stabilní pouze v excitovaném stavu,

zatímco v základním stavu se rozpadnou. Díky tomu se molekula po vyzáření fotonu rozpadne a máme zajištěné splnění podmínky pro fungování laseru, tedy to, že ve vyšším stavu je větší část molekul než v tom nižším. Zkuste pomocí Psi4 pro dimer helia ( $\text{He}_2^*$ ) spočítat a vykreslit disociační křivky základního a nejnižšího excitovaného stavu. ( $\text{He}_2^*$  se pro lasery zatím nevyužívá, ale například  $\text{Ar}_2^*$  či  $\text{Kr}_2^*$  ano.) Na jaké vlnové délce vám vyjde, že by laser pracoval? Srovnajte s experimentální vlnovou délkou 66 nm. (4 b)

*Poznámka:* U úlohy na webu najdete připravený vstupní soubor pro jednu geometrii. Nelekněte se, že v něm jsou nastavené celkově tři stavy, je to proto, že máme dva excitované stavy blízko sebe, a pokud bychom počítali jen s jedním z nich, pro některé mezijaderné vzdálenosti by to vedlo k problémům s konvergencí.

(řešení str. 212)



## Řešení úloh ze seriálu

### Úloha I.S ... hledáme kvanta

Najděte si hodnotu Rydbergovy konstanty a určete, které spektrální čáry vodíku náleží do viditelného spektra. Tyto čáry jsou jediné, které mohl Rydberg k objevení svého vztahu použít, protože UV ani IR spektra ještě nebylo možné měřit. Jakou mají barvu a kterým přechodům v Bohrově modelu odpovídají? (3 b)

Spočítejte si svoji de Broglieho vlnovou délku. Jaká je tato hodnota ve srovnání s velikostí atomu, případně atomového jádra? (3 b)

Máme kyvetu s 10 ml roztoku fluoresceinu ve vodě, do které svítíme argonovým laserem o vlnové délce 488 nm a výkonu 10 W. Zároveň molekula fluoresceinu fluorescenčně vyzařuje na vlnové délce 521 nm s kvantovým výtěžkem (podíl absorbovaných fotonů, které se vyzáří zpět) 95 %. Pokud je počáteční teplota kyvety 20 °C, za jak dlouho se její obsah začne vařit? Předpokládejte, že kyveta je dokonale tepelně izolovaná, že paprsek se v ní plně absorbuje a že množství fluoresceinu je zanedbatelné z hlediska tepelné kapacity. (4 b) Dárek od Mikuláše.

Pokud nahlédneme do vhodných tabulek (nebo do hlubin internetu, na tom nesejde), najdeme minimálně dvě různé „Rydbergovy“ konstanty. Jedna, značená nejčastěji  $R_\infty$ , je skutečně fundamentální konstanta o hodnotě  $10\,973\,731\text{ m}^{-1}$ . Tato hodnota by ale platila jen v případě, kdy bychom měli skutečně nehybné jádro neovlivňované pohybem elektronu. V reálném atomu vodíku jej samozřejmě trochu ovlivňuje, podobně jako Měsíc a Země obíhají kolem společného těžiště. To ale lze analyticky zahrnout (podobně jako u pohybu vesmírných těles zavedeme redukovanou hmotnost) a získáme Rydbergovu konstantu pro vodík  $R_H$ . Její hodnota je ale velmi podobná,  $1,096\,78 \cdot 10^7\text{ m}^{-1}$ . Například pro deuterium už by ale byla jiná. Vzhledem k tomu, že se hodnoty liší na čtvrté platné číslici, je v našem příkladu jedno, kterou použijeme.

Začneme tím, že se podíváme na přechody ze základního stavu, tedy pro  $n_1 = 1$  v Rydbergově vzorci. Pokud zvolíme  $n_2 = 2$ , pak dosazením získáme hodnotu vlnové délky asi 122 nm, což už je tvrdé ultrafialové záření (nazývané také vakuové UV, protože ve vzduchu je silně absorbováno, takže pro práci s ním potřebujeme vakuovou aparaturu). Přechody na vyšší hladiny budou mít ještě větší energii, takže jejich vlnové délky nemá smysl počítat, protože budou od viditelného světla ještě vzdálenější.

Pokud budeme přecházet z prvního excitovaného stavu vodíku do toho nejbližšího vyššího ( $n_1 = 2$ ,  $n_2 = 3$ ), dostaneme vlnovou délku 656 nm, tedy už ve viditelné části spektra. Konkrétně je v červené oblasti, blízko přechodu do oranžové. Zkusme ještě ostatní možné hodnoty  $n_2$ . Pro  $n_2 = 4$  máme vlnovou délku asi 486 nm a odpovídající čára má barvu, kterou lze asi nejlépe označit jako azu-

rovou. Přechod na  $n_2 = 5$  odpovídá vlnové délce 434 nm (všimněte si, jak se nám spektrální čáry zahušťují!) a čára má modrou barvu. Další s  $n_2 = 6$  má 410 nm a je fialová. Následující čára má vlnovou délku 397 nm, což spadá již mimo oblast tradičně vnímanou jako viditelné světlo, která sahá přibližně do 400 nm. Ve skutečnosti je toto rozdělení na viditelné a UV světlo neostré, často se udává jako hraniční hodnota i 390 nm či 380 nm, což by nám přidalo další 1 až 3 čáry, ale faktem zůstává, že v reálném světě se zkombinuje klesající citlivost oka na vlnové délky blízké UV s tím, že intenzita vyzařování těchto vyšších excitací klesá aťv praxi je již čára na 410 nm téměř nezatelná.

Pokud uvažujeme přechody z  $n_1 = 3$  na vyšší hladiny, tak pro nejbližší vyšší hladinu  $n_2 = 4$  máme vlnovou délku 1875 nm, což je již v infračervené oblasti. I když budeme uvažovat libovolně vysoké hladiny, tak v limitě pro  $n_2 \rightarrow \infty$  jsme na vlnové délce 821 nm, která je stále v infračervené oblasti. A i pro excitace z vyšších hodnot  $n_1$  se z infračervené oblasti nedostaneme.

Tedy pro přehlednost ještě shrneme výsledky do tabulky, spolu se značením těchto čar používaným v astronomii.

Čára	Přechod	Vlnová délka	Barva
$H_\alpha$	$2 \rightarrow 3$	656 nm	Červená
$H_\beta$	$2 \rightarrow 4$	486 nm	Azurová
$H_\gamma$	$2 \rightarrow 5$	434 nm	Modrá
$H_\delta$	$2 \rightarrow 6$	410 nm	Fialová

Jistě jste si všimli, že spektrální čáry pro excitaci z konkrétní hladiny  $n_1$  spadají do nějaké jedné oblasti elektromagnetického spektra. Mluvíme o takzvaných sériích spektrálních čar, které jsou většinou pojmenované po člověku, který je objevil. Výjimkou je právě série pro  $n_1 = 2$ , jejíž začátek je ve viditelném spektru, která se nazývá Balmerova. Toho jsme ostatně zmiňovali i v seriálu.

Pro  $n_1 = 1$  mluvíme o sérii Lymanově, která je celá v ultrafialové oblasti spektra. Pro čáry s excitacemi z  $n_1 = 3$  mluvíme o Paschenově sérii, která je naopak v infračervené oblasti. Tyto dvě série byly pozorovány mezi roky 1906 a 1914, takže to docela zapadá do historické linky popsané v seriálu. Další série (Brackettova, Pfundova) byly pozorovány v letech 1922 a 1924. Další série byla experimentálně pozorovaná až v roce 1953, tedy asi o třicet let později. Vědce také dlouho mátl spektrální čáry  $He^+$  ve spektrech hvězd. Ty vychází tak, že polovina čar ve viditelném spektru se překrývá s těmi vodíkovými, zatímco druhá polovina vychází přesně mezi ně. Dlouho byly považované za „poločíselné“ čáry vodíky, než je Niels Bohr správně přiřadil iontu  $He^+$ .

Zároveň je vhodné zmínit, že každá ze sérií obsahuje nekonečně mnoho čar, které zahrnují excitace na všechny vyšší elektronové hladiny až do limity pro  $n_2 = \infty$ , která odpovídá úplnému odtržení elektronu od atomu. Takže vlastně máme štěstí, že nám spektrální čáry Balmerovy série utečou do UV oblasti, jinak by toto vzorové řešení mělo nekonečnou délku.

Před hledáním své de Broglieho vlnové délky si musíme uvědomit, že úloha je (naschvál) zadaná neúplně, de Broglieho vlnová délka je totiž závislá na naší



hybnosti. My si tedy zvolíme rychlost chůze, tedy  $5 \text{ km} \cdot \text{h}^{-1}$ , a hmotnost  $60 \text{ kg}$ . To nám dá hybnost ze vzorce  $p = mv$  asi  $80 \text{ kg} \cdot \text{m/s}$  (nebojme se hodně zaokrouhlovat, stejně nám jde spíše o řádový odhad). Nyní musíme dosadit do vzorce ze seriálu  $\lambda = h/p$ . Hodnota Planckovy konstanty je přibližně  $6,6 \cdot 10^{-34} \text{ kg} \cdot \text{m}^2 \cdot \text{s}^{-1}$ , což dává de Broglieho vlnovou délku okolo  $8 \cdot 10^{-36} \text{ m}$ . To je úplně zanedbatelná hodnota oproti velikosti atomu  $\sim 10^{-10} \text{ m}$  i velikosti atomového jádra  $\sim 10^{-15} \text{ m}$ . Dokonce je to méně než Planckova vzdálenost  $1,6 \cdot 10^{-35} \text{ m}$ , což je v moderní teoretické fyzice považováno za nejmenší vzdálenost, která má smysl z hlediska fyzikálních zákonů.

Co to ale znamená? Když se podíváme na klasickou optiku, tak vlnové vlastnosti světla se projevují (jako difrakce nebo interference) na škálách srovnatelných s vlnovou délkou (velikost mřížky, tloušťka filmu). Takže pokud se pohybujeme na našich makroskopických škálách, vlnové charaktery se „desynchronizují“ a žádnou interferenci nepozorujeme. To se odborně nazývá dekoherence. Kvůli tomu se v každodenním životě kvantové jevy neprojeví, podobně jako světlo žárovky na jemném sítku neinterferuje. Tímto způsobem Planckova konstanta  $h$  určuje škálu, na které se projeví kvantové efekty. Pokud by byla její hodnota řádově  $1 \text{ J} \cdot \text{s}$ , náš život by byl kvantový.

Nakonec je nutné zmínit, že podobně jako hybnost, tak i de Broglieho vlnová délka závisí na volbě vztažného systému. To ale nebrání tomu formulovat kvantovou teorii tak, aby byla na volbě vztažného systému nezávislá.

K řešení úlohy s fluoresceinem je vhodné si nejdříve uvědomit, co se vlastně v kyvetě děje. Světlo laseru je absorbováno a každý foton záření excituje jednu molekulu fluoresceinu do nějakého vyššího excitovaného stavu. Excitované stavy molekuly si můžeme představit pomocí jednoduchého modelu. Elektron se v atomech molekuly nemohou pohybovat libovolně, ale mají své povolené dráhy podobné jako orbity Bohrova modelu. Tyto dráhy nejsou okolo jádra jediného atomu, místo toho elektrony obíhají celou molekulu. Excitovaný stav pak je, když nějaký elektron vyskočí do nějaké vyšší orbity (později si ukážeme, že to vlastně není až tak hloupá představa). Odtud se pak postupně „propadá“ do druhého nejnižšího stavu. Přebytečnou energii v tomto případě nevyzáří jako foton, ale předává ji během vzájemných srážek okolním molekulám vody ve formě kinetické energie (my makroskopičtí tuto kinetickou energii nazýváme teplem). Samozřejmě by tato molekula mohla vyzářit i foton, ale předávání energie okolním molekulám v tomto případě probíhá mnohem rychleji, takže z praktického hlediska můžeme vyzáření fotonu zanedbat. Z druhého nejnižšího stavu pak již molekula přechází do nejnižšího (základního) stavu. To v zásadě může udělat dvěma způsoby: buď do základního stavu seskočí a vyzáří přitom jeden foton o vlnové délce  $521 \text{ nm}$ , což nastane v  $95 \%$  případů. V těch ostatních pokračuje v předávání energie okolním molekulám vody, takže se nevyzáří nic (mluvíme o nezářivém přechodu).

Když už jsme si vyjasnili fyziku problému (i když zjednodušeně, nerozlišujeme stavy molekuly způsobené vibračními jader od těch způsobených pohybem elektronů), můžeme si spočítat, jak velká část výkonu laseru se skutečně použije. Je jasné, že v těch  $5 \%$  případech, kdy se foton absorbuje a nevyzáří žádný zpět, se veškerá energie laseru spotřebuje na ohřev roztoku. V druhém případě si podíl energie,

kteřá způsobuje ohřev, musíme spočítat. „Účinnost“ fluorescenčního ohřevu bude daná jako

$$\eta_{F1} = \frac{E_{La} - E_{F1}}{E_{La}},$$

kde jsme energii fotonu přicházejícího z laseru označili  $E_{La}$  a fotonu vyzářeného fluorescencí jako  $E_{F1}$ . Dosadíme-li energii fotonu  $h\nu = hc/\lambda$  a provedeme-li pár úprav, konstanty se pokrátí a získáme vztah

$$\eta_{F1} = 1 - \frac{\lambda_{La}}{\lambda_{F1}}.$$

Z toho pak získáme celkovou účinnost

$$\eta = 0,05 + 0,95 \eta_{F1}.$$

Dosazením pak zjistíme, že tato účinnost je asi 11 %.

Nyní, když známe účinnost, již můžeme snadno spočítat dobu ohřívání

$$t = \frac{m_{CH_2O} \Delta T}{\eta P}.$$

Dosazením do předchozího vztahu získáme výsledek něco málo přes 3000 s, tedy asi 50 min.

## Úloha II.S . . . počítáme kvanta

1. Najděte si molekulu betakarotenu a zkuste spočítat, jakou by měla mít barvu, respektive na jaké vlnové délce absorbuje. Použijte jednoduchý model nekonečné potenciálové jámy, ve které jsou „uvězněny“  $\pi$  elektrony z dvojných vazeb, tedy za každou dvojnou vazbu dva elektrony. Absorpce pak odpovídá takovému přechodu, že elektron přeskočí z nejvyšší obsazené hladiny na první neobsazenou. Srovnejte s experimentální hodnotou. Proč hodnota z našeho modelu nevychází tak, jak bychom chtěli? (5b)
2. Zkusme zlepšit náš model. Při studiu některých látek, především kovů či polovodičů, zavádíme efektivní hmotnost elektronu. Místo toho, abychom složitě popisovali prostředí, ve kterém se elektrony pohybují, se tváříme, že elektrony jsou lehčí nebo těžší než ve skutečnosti. Jakou by musely mít hmotnost, aby nám vyšla správná experimentální hodnota? Uveďte ji v násobcích hmotnosti elektronu. (2b)
3. Pokud vyrobíme mikroskopické kuličky (nanočástice) selenidu kadmnatého (CdSe) o velikosti 2,34 nm. Rozzáří se po ozáření UV světlem jasně zelenou barvou na vlnové délce 536 nm. Když je zvětšíme na velikost 2,52 nm, posune se vlnová délka vyzářovaného světla do žluté oblasti s vlnovou délkou 570 nm. Jakou velikost kuliček bychom potřebovali, aby vyzářovaly oranžově na vlnové délce 590 nm? (3b)  
*Nápověda* CdSe je polovodič, má tedy plně obsazený elektronový pás, pak (úzký!) zakázaný pás a nakonec prázdný vodivostní pás. Tedy musíme uvažovat, že vyzářovaný foton odpovídá přeskoku z vodivostního pásu, kde jsou

zase stavy známé z nekonečné potenciálové jámy, do obsazeného pásu. Všechny energie vyzařovaných fotonů tedy budou posunuty o neznámou konstantní hodnotu odpovídající šířce zakázaného pásu.

*Bonus* Nakonec pro ty, které by mrzelo, kdyby si nezaintegrovali – 1s orbital atomu vodíku má sféricky symetrickou vlnovou funkci s radiálním průběhem  $\psi(r) = \frac{e^{-r/a_0}}{\sqrt{\pi a_0^3/2}}$ , kde  $a_0 = \frac{4\pi\epsilon_0\hbar^2}{me^2}$  je Bohrov poloměr. Protože orbitály jakožto funkce tří prostorových proměnných by se nám špatně vykreslovaly, raději zobrazujeme oblast, ve které se bude elektron s velkou pravděpodobností vyskytovat. Jaký je poloměr sféry centrované na jádře, ve které se elektron bude vyskytovat s pravděpodobností 95 %? (+2b) *Předčasná Mikulášská nadílka.*

Pokud se podíváme na vzorec pro energii hladin v nekonečné potenciálové jámě, jediné parametry, které nejsou fundamentální konstanty, jsou hmotnost částice a šířka jámy. Protože pracujeme s elektrony, máme hmotnost částice danou a stačí určit velikost jámy. Vzhledem k tomu, že v uhlovodících nejsou vazby v jedné linii, ale „cikcak“, nabízí se otázka, jak máme vzdálenost vlastně počítat a jestli i elektrony běhají rovně nebo cikcak. Protože ale máme už tak hrubou aproximaci, nemusíme si tolik lámat hlavu s přesností. (Napadla mě formulace „přesnost na milimetry“, ale ta v tomto kontextu není ideální.) Proto jako první nástřel vezmeme průměrnou délku vazby v betakarotenu, tedy 140 pm, a vynásobíme jí počtem vazeb. Těch je 21, 11 dvojných a 10 jednoduchých mezi nimi. (Kvůli konjugaci ale takto rozdělit úplně nejdou, což tu právě počítáme!) Tím nám vyjde délka jámy 2,94 nm. Pokud tedy dosadíme tyto hodnoty do vzorce pro energii hladin, dostaneme  $E_n = n^2 \cdot (6,97 \cdot 10^{-20} \text{ J})$ . Máme 11 dvojných vazeb, což odpovídá 22 elektronům. Tím pádem v základním stavu budou hladiny až po  $n = 11$  obsazené 2 elektrony. Nejnižší excitovaný stav dostaneme, když excitujeme jeden elektron z hladiny  $n = 11$  na hladinu  $n = 12$ . Absorbovaná energie pak je  $\Delta E = (12^2 - 11^2) \cdot (6,97 \cdot 10^{-21} \text{ J}) = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J}$ , což je energie fotonu o vlnové délce přibližně 1240 nm. Tato vlnová délka leží v blízké infračervené oblasti a je na hony vzdálená skutečné vlnové délce okolo 450 nm. (Toto je hodnota maxima absorpce, ale jinak betakaroten absorbuje na celém intervalu od cca. 500 nm (zelená) až po fialovou oblast. Proto nám „nechá“ jen žluté a červené světlo, čímž pádem se nám betakaroten zdá oranžový.) Pokud bychom uvažovali variantu, že elektrony běhají „rovně“, můžeme ji aproximovat využitím toho, že úhel mezi sousedními vazbami je  $120^\circ$ , pak délku karotenu vynásobíme  $\sqrt{3}/2$ , což je poměr délky dvou stran šestiúhelníku a odpovídající „tětivy“. Vyjde nám, že vlnová délka je  $3/4$  té původní, tedy přibližně 930 nm, což je sice o něco lepší, ale stále to není ani ve viditelném spektru.

Proč tomu tak je? Přeci jen je naše aproximace dosti hrubá. Jednak elektrony v betakarotenu nejsou úplně volné, ale působí na ně elektrostatický potenciál jader, byť je stíněn ostatními elektrony v nižších slupkách. Jednak pak úplně ignorujeme elektrostatické odpuzování mezi jednotlivými elektrony, které má podobný, ne-li větší vliv na konečný výsledek. Důkazem toho je, že stav, který odpovídá absorpci na 450 nm, je až druhý excitovaný, protože přechod na první excitovaný stav je tak-

zvaně zakázaný a téměř neprobíhá. (Mluvíme také o temném stavu.) Podíváme-li se pak na charakter vlnové funkce těchto stavů, zjišťujeme, že stav, který odpovídá absorpci, opravdu vypadá tak, že jeden elektron se excituje o jednu hladinu (orbital) výš, ale zároveň má zmíněn temný stav komplikovanou elektronickou strukturu s vlnovou funkcí, jež je součtem mnoha různých excitovaných stavů. V realitě tedy sice je absorpce fotonu spojená s excitací až do druhého excitovaného stavu, ovšem charakter této excitace odpovídá tomu, co jsme počítali – tedy nejnižší excitaci v našem modelu potenciálové jámy. Ukazuje nám to, že reálné molekuly jsou často mnohem komplikovanější než naše modely.

Pokud tedy chceme vylepšit svůj model, musíme „sáhnout“ na hmotnost elektronu. Pohledem na vzorec pro energii nekonečné potenciálové jámy zjistíme, že energie přechodu je nepřímo úměrná hmotnosti, díky čemuž platí přímá úměra mezi vlnovou délkou přechodu a hmotností částice. Jednoduchou trojčlenkou tedy můžeme najít vztah pro efektivní hmotnost  $m^*$  elektronu

$$\frac{m^*}{m_e} = \frac{\lambda_{\text{Experiment}}}{\lambda_{\text{Výpočet}}}.$$

Dosazením zjistíme, že hledaná efektivní hmotnost  $m^*$  je rovna asi  $0,5m_e$ . Může se zdát absurdní, že by elektron interakcemi „ztratil“ přes půlku svojí hmotnosti, ale v pevných látkách (kovech a polovodičích) se efektivní hmotnosti vodivostních elektronů skutečně pohybují od zlomku až po několiknásobek původní hmotnosti.

Z předchozího výpočtu vidíme, že zkoušet z jednoduchého modelu počítat přesné hodnoty spektrálních čar je trochu pošetilé, ale zde pro kvantové tečky můžeme využít toho, že máme zadané hodnoty pro 2 různé velikosti. Když se znovu podíváme na vzorec pro energie hladin, vidíme, že energie je nepřímo úměrná druhé mocnině délky jámy. Toto škálování s velikostí se nám přeneso i do 3D jámy, přestože řešení vypadá trochu jinak. Když budeme předpokládat, že délka jámy odpovídá průměru nanočástice, můžeme rovnou napsat závislost energie přechodu na průměru  $d$  nanočástice

$$E = \frac{hc}{\lambda} = a + \frac{b}{d^2}, \quad (45)$$

kde jsme si zavedli dva neznámé parametry  $a$  a  $b$ . Tento tvar má fyzikální smysl. Parametr  $a$  odpovídá velikosti zakázaného pásu, který je dán materiálem nanočástice, a do  $b$  jsme schovali všechny parametry svého modelu nekonečné potenciálové jámy (kromě závislosti na velikosti nanočástice).

Pokud nyní do této rovnice dosadíme průměry a vlnové délky obou zadaných nanočástic, dostaneme soustavu dvou rovnic pro neznámé koeficienty  $a$  a  $b$

$$\begin{aligned} \frac{hc}{\lambda_1} &= a + \frac{b}{d_1^2} \\ \frac{hc}{\lambda_2} &= a + \frac{b}{d_2^2}. \end{aligned}$$

Odečtením těchto rovnic od sebe, můžeme vyjádřit  $b$

$$b = \frac{\frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2}}{\frac{1}{d_1^2} - \frac{1}{d_2^2}}.$$

To pak můžeme dosadit do první rovnice a získat  $a$

$$a = \frac{hc}{\lambda_1} - \frac{\frac{hc}{\lambda_1} - \frac{hc}{\lambda_2}}{1 - \frac{d_1^2}{d_2^2}} = \frac{\frac{hc}{\lambda_2} - \frac{d_1^2}{d_2^2} \frac{hc}{\lambda_1}}{1 - \frac{d_1^2}{d_2^2}}.$$

Dosazením hodnot ze zadání získáme hodnoty  $a = 1,31 \text{ eV}$ ,  $b = 5,48 \text{ eV/nm}^2$ . Pokud nyní vyjádříme průměr kuličky ze svého původního vztahu (45)

$$d_3 = \sqrt{\frac{b}{\frac{hc}{\lambda_3}} - a},$$

dosazením najdeme hledaný průměr  $d_3 = 2,63 \text{ nm}$ . Za povšimnutí také stojí, že hodnota  $a$  skutečně zhruba odpovídá velikosti zakázaného pásu CdSe, která je  $1,74 \text{ eV}$ .

### Bonus

Řešení bonusu je vlastně velice přímočaré, ačkoliv vyžaduje velmi pokročilou matematiku. Budeme integrovat hustotu pravděpodobnosti přes poloměr koule ve sférických souřadnicích. Protože máme sférickou symetrii, stačí nám integrovat přes radiální souřadnici, pokud přidáme faktor odpovídající povrchu koule o daném poloměru. Pravděpodobnost výskytu elektronu v kouli o poloměru  $R$  bude tedy

$$\begin{aligned} P &= \int_0^R \rho(r) 4\pi r^2 dr = \int_0^R |\psi(r)|^2 4\pi r^2 dr = \\ &= \int_0^R \frac{4}{a_0^3} r^2 e^{-2r/a_0} dr = \\ &= 1 - \left( \frac{2R^2}{a_0^2} + \frac{2R}{a_0} + 1 \right) e^{-2R/a_0}, \end{aligned}$$

kde jsme k vyčíslení integrálu využili dvakrát integraci per partes. Pokud nyní tuto pravděpodobnost postavíme rovnou 0,95, jak vyžaduje zadání, dostaneme rovnici pro neznámý poloměr  $x = R/a_0$

$$1 - (2x^2 + 2x + 1)e^{-2x} = 0,95.$$

Tuto rovnici musíme řešit numericky a zjistíme, že hledaný poloměr je přibližně  $3,15a_0$ , tedy  $167 \text{ pm}$ . To je o něco větší vzdálenost, než je běžná délka kovalentních vazeb, ve kterých figurují atomy vodíku, ale menší, než je délka vodíkových můstků, což je docela očekávatelné (kovalentní vazby jsou založené na překryvu orbitalů, kdežto vodíkové můstky ne).

## Úloha III.S ... kvanta orbitalů

1. Podobně jako v seriálu vytvořte pomocí Hückelovy metody matici hamiltoniánu pro molekulu cyklobutadienu a ověřte, že její vlastní čísla jsou  $\alpha + 2\beta$ ,  $\alpha$ ,  $\alpha$ ,  $\alpha - 2\beta$ . Načrtněte do diagramu, jaké jsou energie vzniklých orbitalů a jak by je obsadily elektrony. (4b)

*Bonus:* Jaký je zásadní rozdíl v charakteru těchto orbitalů a jejich obsazení oproti molekule benzenu, kterou jsme si ukázali v seriálu? Jaké to má pro molekulu cyklobutadienu důsledky? (2b)

2. Zkuste se vrátit k molekule betakarotenu a znovu spočítat, na jaké vlnové délce by měla absorbovat, tentokrát pomocí Hückelovy metody. Kolik by musel být parametr  $\beta$ , aby vyšla experimentální hodnota?

*Alternativa* Pokud narazíte na problém s diagonalizací hamiltoniánu, proveďte úlohu s molekulou hexa-1,3,5-trienem. Experimentální hodnota absorpce je v tomto případě na vlnové délce 250 nm. (4b)

3. Co se stane s molekulou (stačí taková, která má jen jednoduché vazby), pokud pomocí UV světla excitujeme elektron ze  $\sigma$  do  $\sigma^*$  orbitalu? (2b)

*Mikuláš znovu naděloval, tentokrát dokonce skoro ve správnou roční dobu.*

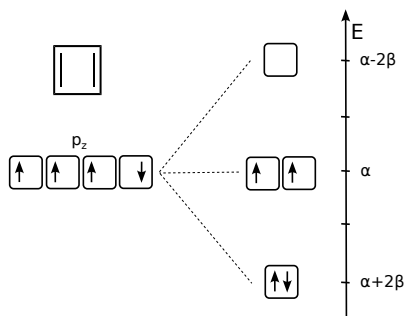
1. Pro molekulu cyklobutadienu vytvoříme matici hamiltoniánu podle stejných pravidel jako pro benzen. Výsledkem bude velmi podobná matice, jen zmenšená na  $4 \times 4$ .

$$\begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & \beta \\ \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta \\ \beta & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

Tu rozložíme stejně jako v seriálu na

$$\alpha \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \beta \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Vlastní čísla druhé z matic jsou 0, 0, 2, -2. Tím pádem vlastní čísla celé matice hamiltoniánu budou  $\alpha$ ,  $\alpha$ ,  $\alpha + 2\beta$ ,  $\alpha - 2\beta$ . (Moc se omlouvám za chybu v zadání, na kterou nás upozornil jeden z řešitelů.) Máme 4 orbitály, do kterých je potřeba umístit 4 elektrony. První dva jsou jasné, ty obsadíme do nejnižší hladiny s energií  $\alpha + 2\beta$ . (Parametry  $\alpha$  i  $\beta$  jsou záporné.) Zbývají dva elektrony jsou složitější. Ty musíme obsadit do dvou orbitalů, které mají stejnou energii  $\alpha$ . Na úrovni Hückelova modelu je jedno, jak tyto orbitály obsadíme, tedy jestli oba elektrony dáme do jednoho z orbitalů, nebo zda každý orbital obsadíme jedním elektronem. Pokud ale chceme započítat vlivy jako je odpuzování mezi elektrony, které v Hückelově modelu zanedbáváme, musíme elektrony obsadit podle Hundových pravidel. Umístíme tedy po jednom elektronu do každého orbitalu tak, aby spiny obou elektronů mířily stejným směrem. Obsazenost orbitalů bude vypadat jako na obrázku.



Hlavní rozdíl oproti molekule benzenu je, že na nejvyšší obsazené hladině máme ve 2 orbitalech o stejné energii jen dva elektrony (není plně obsazená). To má zásadní důsledky. Především nedojde ke stejné stabilizaci delokalizovaných  $\pi$  orbitalů jako u molekuly benzenu, cyklobutadien se proto nechová jako aromatické uhlovodíky. Dokonce existuje pravidlo, které říká, že pro to, aby byl cyklický uhlovodík aromatický, musí mít  $4n + 2$   $\pi$ -elektronů, kde  $n$  je přirozené číslo. Zároveň existuje taková deformace geometrie molekuly, která sníží energii jednoho z orbitalů na úkor zvýšení energie toho druhého. To se v tomto případě vyplatí, jelikož můžeme obsadit dvěma elektrony ten orbital se sníženou energií a mít nižší celkovou energii. Ve skutečnosti tedy molekula cyklobutadienu není čtvercová, ale má tvar obdélníku.

- Hamiltonián pro betakaroten, vzhledem k tomu, že máme 22 atomů uhlíku v konjugovaném systému, bude matice  $22 \times 22$ . Její tvar je i přes velikost jednoduchý:

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & & 0 & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & \dots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & & 0 & 0 & 0 \\ & \vdots & & \ddots & & \vdots & \\ 0 & 0 & 0 & & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & \beta & \alpha & \beta \\ 0 & 0 & 0 & & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}.$$

Diagonalizací Hamiltoniánu dostaneme celkem 22 vlastních čísel. Podstatná jsou pro nás jen 11. a 12. v pořadí při seřazení podle velikosti, protože odpovídají orbitalům, mezi kterými elektron při excitaci přeskakuje. Energie těchto orbitalů jsou  $\alpha + 0,136\beta$  a  $\alpha - 0,136\beta$ . Energie přechodu bude tedy  $-0,272\beta$ . Pokud dosadíme hodnotu  $\beta = -3\text{ eV}$ , dostaneme energii přechodu přibližně  $0,816\text{ eV}$ , což odpovídá vlnové délce  $1520\text{ nm}$ . To je ještě horší výsledek než který jsme získali v minulém díle z nekonečné potenciálové jámy, která nám dala  $1240\text{ nm}$ . Abychom dostali experimentální hodnotu  $450\text{ nm}$ , která odpovídá energii přechodu  $2,76\text{ eV}$ , muselo by  $\beta$  mít hodnotu  $-10,15\text{ eV}$ . Takto velké fluktuace  $\beta$  v závislosti na tom, co počítáme, indikují, že Hückelova

metoda je občas příliš drastická aproximace na to, abychom dostali přesné hodnoty.

Pokud pracujeme s molekulou hexa-1,3,5-trienu, pak místo toho diagonalizujeme Hamiltonián

$$\mathbb{H} = \begin{pmatrix} \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta & \alpha & \beta & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \beta & \alpha \end{pmatrix}$$

a dostaneme energie odpovídajících hladin  $\alpha + 0,445\beta$  a  $\alpha - 0,445\beta$ . Energie přechodu pak bude  $-0,89\beta$  a s  $\beta = -3\text{ eV}$  nám vyjde vlnová délka 464 nm. Pokud bychom chtěli experimentální vlnovou délku, potřebovali bychom  $\beta$  o hodnotě  $-5,57\text{ eV}$ .

3. Pokud excitujeme elektron z  $\sigma$  do  $\sigma^*$  orbitalu, musíme si uvědomit, co se stane s energií. Elektron v  $\sigma$  orbitalu bude mít sice nižší energii oproti situaci, kdy by atomy ve vazbě byly nekonečně vzdáleny, penalizace za druhý elektron v  $\sigma^*$  orbitalu však bude vyšší. I celková energie molekuly proto bude vyšší, než kdyby oba atomy ve vazbě byly nekonečně vzdáleny. Vyplatí se jí proto postupným zvyšováním vzdálenosti atomů ve vazbě „sklouznout“ do stavu s nižší energií, a dojde tak k rozpadu celé molekuly na dvě části. Molekula by sice mohla vyzářit foton a vrátit se do původního stavu s oběma elektrony ve vazebném orbitalu, vyzařování fotonu ale probíhá na mnohem delších časových škálách než geometrické změny, molekula to před svým rozpadem „nestihne“. Toto je důvod, proč je záření s fotony o vysoké energii (UV, Röntgenovo a  $\gamma$ ) tak škodlivé. Dokáže ničit molekuly, včetně těch v našem těle. (Je nutné ale poznamenat, že lidské tělo je náchylné především na poškození DNA, na což stačí excitace z  $\pi$  do  $\pi^*$ , které pak způsobí chemické vazby mezi molekulami dvou různých bází, což naruší strukturu DNA natolik, že ji tělo neumí opravit.)

## Úloha IV.S . . . kvanta molekul

1. Na začátku seriálu jsme zmínili několik aproximací, které jsme použili – jednak zafixování jader a jednak zanedbání relativistických efektů. Pro které prvky čekáte, že se budou elektrony nejvíce vzájemně ovlivňovat s pohybem jader, a proč? A ve které části periodické tabulky si myslíte, že se nejvíce projeví relativistické efekty? Z jakého důvodu? (2 b)
2. Celková energie molekuly vody, jak ji dostaneme z kvantově chemického výpočtu, je cca.  $-75\text{ Ha}$ . Energie uvolněná slučováním vodíku a kyslíku na vodu je  $242\text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . Pokud spočítáme energii reaktantů i produktů s chybou 1 %, jaká bude chyba v určení reakční energie? Také zkuste najít nějakou analogii s měřením v reálném světě. (Například: „Zvážím se s pětikorunou a bez ní, abych určil její hmotnost.“) (3 b)



3. Nainstalujte si program *Psi4* a pokuste se spočítat, o kolik se liší energie lodičkové a (zkřížené) vaničkové konformace cyklohexanu. Můžete použít přiložené vstupní soubory s již optimalizovanou geometrií. Jak moc se liší výsledek od experimentální hodnoty  $21 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ ? (2 b)

*Poznámka:* Pokud narazíte na problémy s programem *Psi4*, neváhejte se ozvat na emailovou adresu [mikulas@fykos.cz](mailto:mikulas@fykos.cz)

4. Zkuste spočítat energii reakce pro chloraci benzenu  $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{Cl}_2 \Rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} + \text{HCl}$ . Srovnejte s experimentální hodnotou  $-134 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . Můžete využít geometrii molekuly benzenu. (3 b)

*Bonus:* Vyberte svoji oblíbenou (nebo jakoukoliv jinou) chemickou reakci a spočítejte její energii. (až +3 b)

*Mikuláš rozdává i po Vánocích.*

Jak jste již jistě postřehli, kvantové jevy se projevují pro věci, které jsou malé. Není tedy překvapivé, že kvantové jevy na úrovni pohybu jader se nejvíc projeví u těch nejlehčích prvků. A dokonce i pokud zůstaneme u klasické fyziky, tak v nejjednodušším případě, kdy máme jen jeden elektron a jedno jádro, by měly obíhat kolem společného těžiště. Čím těžší bude jádro, tím bude těžiště ležet blíže k jádru, a tím pádem bude mít poloha elektronů menší vliv na polohu těžiště molekuly. Proto se bude pohyb jader s pohybem elektronů nejvíce ovlivňovat pro nejlehčí prvky. A protože i jádro nejlehčího prvku, vodíku, je skoro 2000krát těžší než elektron, pro většinu výpočtů elektronové struktury si vystačíme se zafixovanými jádry. Naopak, pokud chceme studovat efekty související s mícháním pohybu elektronů a jader, nebo dokonce kvantové efekty jako tunelování, stačí je studovat pro vodík, protože nejbližší těžší prvky se nechovají tak chemicky zajímavě. (Helium je inertní, lithium se vyskytuje především ve formě kationtu  $\text{Li}^+$  a elektrostatická interakce nám ostatní efekty přebije, atd.)

Naopak relativistické efekty se budou projevovat nejvíce tam, kde se elektrony pohybují velice rychle. To budou prvky, kde jádra mají veliký náboj a elektrony se musí pohybovat rychle, aby odstředivou silou vyrovnaly silnější působení jádra. Můžeme tedy očekávat, že relativistické efekty se projevují především ve spodní části tabulky. Zde už se totiž elektrony na vnitřních slupkách pohybují podstatným zlomkem rychlosti světla, což se nakonec projeví i na chemickém chování prvků. Obecně se soudí, že relativistické jevy je naprosto zásadní uvažovat v soustavě prvků od lanthanoidů dále, protože tam již mají vliv i pozorovatelný na makroskopickém chování daných prvků. Dokonalým příkladem je zlato. U něj relativistické jevy způsobují, že se nechová tolik jako jeho přímý soused nad ním, tedy stříbro, ale více jako prvek ještě o patro výše, tedy měď. Nejvýraznější na první pohled je, že není stříbrné, ale podobně jako měď je barevné. Říká se, že nebýt relativity, zlato by nebylo zlaté, rtuť tekutá a auto byste nenastartovali, protože baterie v autě by měla místo 12 V napětí jen 2 V.

Pokud počítáme reakční energii, musíme v kvantové chemii spočítat celkovou energii reaktantů i produktů, a ty od sebe odečíst. Pokud ale odečítáme dvě hodnoty zatížené chybou, tyto odchylky se sčítají. Zvláště v tomto případě, kdy je rozdíl dvou hodnot malý oproti hodnotám samotným, to může vést k tomu, že

chyba může být i řádově větší než sama výsledná hodnota. Pokud uvažujeme, že reaktanty i produkty mají celkovou energii přibližně  $-75$  Ha s relativní chybou 1 %, tak velikost chyby u obou je 0,75 Ha. To znamená chybu 1,5 Ha v reakční energii, tedy skoro  $4000 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . To je skutečně o řád vyšší než reakční energie samotná.

Celková energie molekuly vody je přibližně  $200\,000 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . To je řádově tisíckrát více než reakční energie. Pokud se budeme držet příkladu v zadání, tedy vážení předmětu v kapse, pro 80 kg člověka to vychází cca 80 g, což je hmotnost malého jablka. Zvážíme se tedy s tímto jablkem v kapse, pak bez něj, a z rozdílu určíme jeho hmotnost. Určíte si zvládnete udělat představu o tom, jak přesné je takovéto měření. Navíc pokud budeme počítat větší molekuly, případně molekuly obsahující těžší prvky (kde 1s orbitály přispívají k energii stovkami Hartree, ač se reakce téměř neúčastní), snadno dosáhneme stavu, kdy pro srovnatelnou hodnotu reakční energie budeme od sebe odčítat energie v řádu tisíců až desetitisíců Hartree. Pak by již dával smysl i průměr s pětikorunou, případně ještě lehčím objektem.

Pro zjištění rozdílu energie dvou konformací cyklohexanu použijeme přiložené vstupní soubory. Po spuštění souboru pro vaničku ve výstupu programu najdeme ke konci souboru:

```
Nuclear Repulsion Energy = 256.0298826585392931
One-Electron Energy = -822.4160185529569844
Two-Electron Energy = 332.1735967136023646
Total Energy = -234.2125391808153836
```

Z toho nás zajímá poslední řádek, tedy celková energie molekuly, která je  $-234,21$  Hartree. Podobně najdeme pro židličku, že hodnota energie je  $-234,22$  Ha. Vidíme tedy, že molekula nám vychází o něco stabilnější v židličkové konformaci, což odpovídá realitě. Pokud tyto dvě energie odečteme, dostaneme rozdíl 0,0113 Ha. To odpovídá  $30 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ . To není špatná shoda s experimentální hodnotou  $21 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ , uvážíme-li, že optimální přesnost, které se snaží kvantová chemie dosáhnout, je asi  $1 \text{ kcal}\cdot\text{mol}^{-1}$ , což jsou asi  $4 \text{ kJ}\cdot\text{mol}^{-1}$ .

U reakce benzenu na chlorbenzen už si započítáme trochu více. Musíme totiž vzít celou reakci, tedy  $\text{C}_6\text{H}_6 + \text{Cl}_2 \Rightarrow \text{C}_6\text{H}_5\text{Cl} + \text{HCl}$ . Chceme-li energii, musíme spočítat zvlášť energie všech 4 molekul v reakci, a pak celkovou energii získáme pomocí

$$E_{\text{Reakce}} = E(\text{C}_6\text{H}_5\text{Cl}) + E(\text{HCl}) - E(\text{C}_6\text{H}_6) - E(\text{Cl}_2).$$

Na rozdíl od předchozí úlohy si musíme geometrie všech molekul optimalizovat sami. Pomocí přiložené geometrie vytvoříme vstup pro benzen

```
set basis cc-pVDZ
molecule {
0 1
C -0.000000000000 1.388721052559 0.000000000000
H -0.000000000000 2.470895972113 0.000000000000
C -1.202667654441 0.694360499538 0.000000000000
H -2.139858588291 1.235447933148 0.000000000000
C -1.202667654441 -0.694360499538 0.000000000000
```

```

H -2.139858588291 -1.235447933148 0.000000000000
C 0.000000000000 -1.388721052559 0.000000000000
H 0.000000000000 -2.470895972113 0.000000000000
C 1.202667654441 -0.694360499538 0.000000000000
H 2.139858588291 -1.235447933148 0.000000000000
C 1.202667654441 0.694360499538 0.000000000000
H 2.139858588291 1.235447933148 0.000000000000
}
optimize("HF")

```

Vzhledem k tomu, že tato geometrie ze zadání je již optimalizovaná se stejnou metodou a bází, měl by program proběhnout jen jedinou iterací geometrické optimalizace a vyhodnotit, že geometrie je již optimální. Na konci souboru s výpisem tedy najdeme:

```
==> Convergence Check <==
```

Measures of convergence in internal coordinates in au.

Criteria marked as inactive (o), active & met (\*), and active & unmet ( ).

```

-----
Step Total Energy Delta E Max Force RMS Force Max Disp RMS Disp
-----
Convergence Criteria 1.00e-06 * 3.00e-04 * o 1.20e-03 * o
-----
1 -230.72192588 -2.31e+02 1.44e-04 * 4.82e-05 o 3.02e-04 * 1.02e-04 o
-----

```

Next Geometry in Ang

Fragment 1 (Ang)

Final optimized geometry and variables:

Molecular point group: d2h

Full point group: D2h

Geometry (in Angstrom), charge = 0, multiplicity = 1:

```

C -0.000000000000 1.388721052559 0.000000000000
H -0.000000000000 2.470895972113 0.000000000000
C -1.202667654441 0.694360499538 0.000000000000
H -2.139858588291 1.235447933148 0.000000000000
C -1.202667654441 -0.694360499538 0.000000000000
H -2.139858588291 -1.235447933148 0.000000000000
C 0.000000000000 -1.388721052559 0.000000000000
H 0.000000000000 -2.470895972113 0.000000000000

```

```
C 1.202667654441 -0.694360499538 0.000000000000
H 2.139858588291 -1.235447933148 0.000000000000
C 1.202667654441 0.694360499538 0.000000000000
H 2.139858588291 1.235447933148 0.000000000000
```

Psi4 stopped on: Tuesday, 10 January 2023 10:48PM

Psi4 wall time for execution: 0:00:02.47

\*\*\* Psi4 exiting successfully. Buy a developer a beer!

Z tohoto tedy získáme energii molekuly benzenu  $-230,721\,925\,88$  Ha.

Dobrý odhad vstupní geometrie pro optimalizaci chlorbenzenu získáme, pokud jeden z vodíků nahradíme atomem chloru. Vstup tedy může vypadat takto:

```
set basis cc-pVDZ
molecule {
O 1
C -0.000000000000 1.388721052559 0.000000000000
Cl -0.000000000000 2.470895972113 0.000000000000
C -1.202667654441 0.694360499538 0.000000000000
H -2.139858588291 1.235447933148 0.000000000000
C -1.202667654441 -0.694360499538 0.000000000000
H -2.139858588291 -1.235447933148 0.000000000000
C 0.000000000000 -1.388721052559 0.000000000000
H 0.000000000000 -2.470895972113 0.000000000000
C 1.202667654441 -0.694360499538 0.000000000000
H 2.139858588291 -1.235447933148 0.000000000000
C 1.202667654441 0.694360499538 0.000000000000
H 2.139858588291 1.235447933148 0.000000000000
}
```

optimize("HF")

Na konci výstupu opět najdeme řádek s energií. Musíme si dát pozor, abychom energii brali opravdu z poslední iterace a ne někde z průběhu optimalizace geometrie.

```
==> Convergence Check <==
```

Measures of convergence in internal coordinates in au.

Criteria marked as inactive (o), active & met (\*), and active & unmet ( ).

```
-----
Step Total Energy Delta E Max Force RMS Force Max Disp RMS Disp
-----
Convergence Criteria 1.00e-06 * 3.00e-04 * o 1.20e-03 * o
-----
```

13 -689.64209882 -6.68e-07 \* 5.45e-05 \* 9.67e-06 o 2.98e-04 \* 4.79e-05 o

-----

Energie v chlorbenzenu tedy bude  $-689,642\,098\,82$  Ha. Optimalizovaná geometrie je:

```
C 0.000000000000 0.000000000000 0.421760303147
Cl 0.000000000000 0.000000000000 2.170797070268
C -1.207631129031 -0.000000000000 -0.256682861045
H -2.136797603674 -0.000000000000 0.293524814393
C -1.200300224567 -0.000000000000 -1.644450321492
H -2.139926866970 -0.000000000000 -2.180334147000
C 0.000000000000 0.000000000000 -2.340986942849
H 0.000000000000 0.000000000000 -3.422438848199
C 1.200300224567 0.000000000000 -1.644450321492
H 2.139926866970 0.000000000000 -2.180334147000
C 1.207631129031 0.000000000000 -0.256682861045
H 2.136797603674 0.000000000000 0.293524814393
```

Nakonec jen musíme připravit vstupy pro molekuly chloru a chlorovodíku. To je jednoduché, pro dvouatomovou molekulu stačí ponechat všechny souřadnice nulové až na jednu, která má přibližně délku vazby, tedy třeba  $1.5$  Ångströmu. Vstup pro chlor tedy bude:

```
set basis cc-pVDZ
molecule {
O 1
Cl 0.000000000000 0.000000000000 0.000000000000
Cl 0.000000000000 1.500000000000 0.000000000000
}
```

```
optimize("HF")
```

A pro chlorovodík máme:

```
set basis cc-pVDZ
molecule {
O 1
H 0.000000000000 0.000000000000 0.000000000000
Cl 0.000000000000 1.500000000000 0.000000000000
}
```

```
optimize("HF")
```

Po spuštění těchto souborů dostaneme zbylé dvě potřebné energie, jakož i optimální hodnoty délky vazeb,  $2,008\,03$  Å pro  $\text{Cl}_2$  a  $1,277\,28$  Å pro  $\text{HCl}$ . Máme tedy energie všech molekul v naší reakci, konkrétně energie pro benzen je  $-230,722$  Ha, pro chlorbenzen  $-689,642$  Ha, pro chlor  $-918,961$  Ha a  $-460,089$  Ha pro chlorovodík. Pokud je dosadíme do výše uvedeného vzorce pro reakční energii, vyjde nám přibližně  $-0,048$  Ha, což je  $-128$  kJ·mol<sup>-1</sup>. To ve srovnání s experimentální

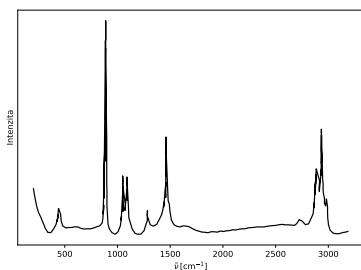
hodnotou  $-134 \text{ kJ} \cdot \text{mol}^{-1}$  vůbec není špatné, naopak lze říct, že se jedná o hezkou shodu.

## Úloha V.S ... etanol či metanol?

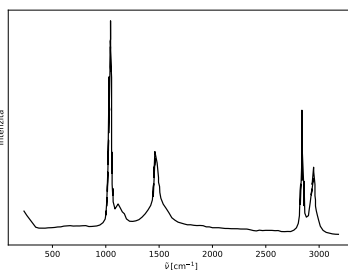
Vazebná energie molekuly fluoru je přibližně  $37 \text{ kcal/mol}$ . Pokud uvážíme dosah vazebných interakcí přibližně  $3 \text{ \AA}$  od optimální vzdálenosti, jakou (průměrnou) silou musíme působit, abychom molekulu roztrhli? Spočítejte „tuhost“ molekuly fluoru, pokud by uprostřed tohoto působila síla o velikosti této průměrné síly. Jaká by byla vibrační frekvence této molekuly? Srovnajte s experimentální hodnotou  $916,6 \text{ cm}^{-1}$ . (4b)

Zkuste pomocí Psi4 spočítat disociační křivku  $\text{F}_2$  a proložit ji v okolí minima parabolou. Jaká vám z ní tentokrát vyjde energie vibračních přechodů? (3b)

Máte dvě lahve alkoholu, které vám přišly přinejmenším podezřelé. Vzali jste je tedy do laboratoře a získali z nich následující Ramanova spektra. Pomocí programu Psi4 spočítejte, na jakých frekvencích jsou vibrační přechody molekul metanolu i etanolu, a na základě toho odhadněte, ve které lahvi je metanol a ve které etanol. Můžete využít přibližné geometrie etanolu a metanolu, které jsou součástí zadání na webu. (3b)



Obr. 40: Ramanovo spektrum lahve  
A



Obr. 41: Ramanovo spektrum lahve  
B

*Alkohol od Mikuláše?!*

Na výpočet síly si vystačíme s tím nejzákladnějším vzorečkem pro výpočet práce,  $E = Fx$ . Abychom předešli problémům s jednotkami, převedeme všechny veličiny na jednotky SI. Síla v tomto případě bude  $F = \frac{2,57 \cdot 10^{-19} \text{ J}}{3 \cdot 10^{-10} \text{ m}} = 8,56 \cdot 10^{-10} \text{ N}$ . Tuhost pak ze vzorce  $F = kx$  vychází  $k = \frac{8,56 \cdot 10^{-10} \text{ N}}{1,5 \cdot 10^{-10} \text{ m}} = 5,7 \text{ N/m}$ . Všimněte si, že jsme se dostali už do normálních hodnot pro makroskopické objekty, přestože se jedná o molekulu!

Nakonec spočítáme frekvenci z

$$f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}} = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{5,7 \text{ N/m}}{0,5 \cdot 19 \cdot 1,6605 \cdot 10^{-27} \text{ kg}}} = 3,02 \cdot 10^{12} \text{ Hz},$$

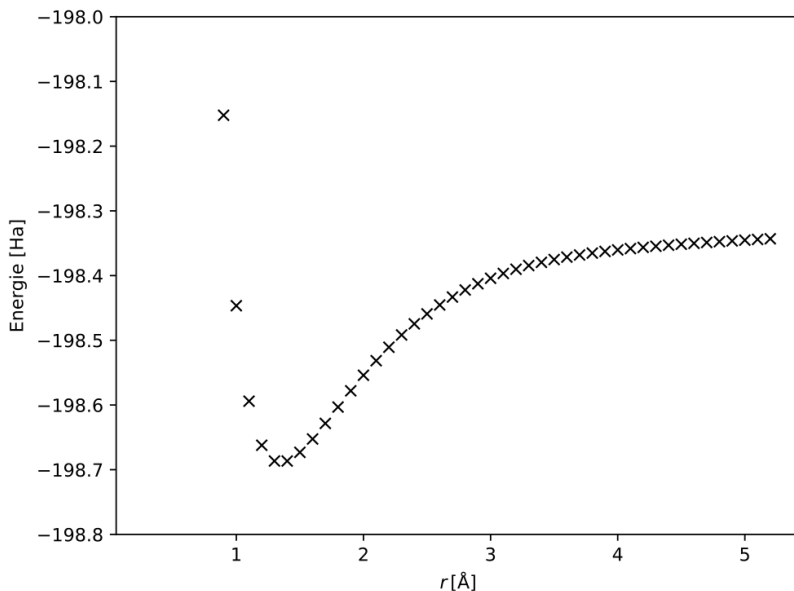
což odpovídá přibližně  $100 \text{ cm}^{-1}$ . Na to, jak drastický jsme udělali odhad, to je vlastně velmi dobrá shoda.

Pokud chceme přesnější odhad, tak vezmeme molekulu fluoru a v programu Psi4 pomocí Hartree-Fockovy metody v bázi `cc-pvdz` získáme celou potenciálovou křivku. To uděláme tak, že si připravíme vstup, který vypadá

```
set basis cc-pvdz
molecule F2{
0 1
F 0. 0. 0.
F XXX 0. 0.
}
```

`energy('HF')`,

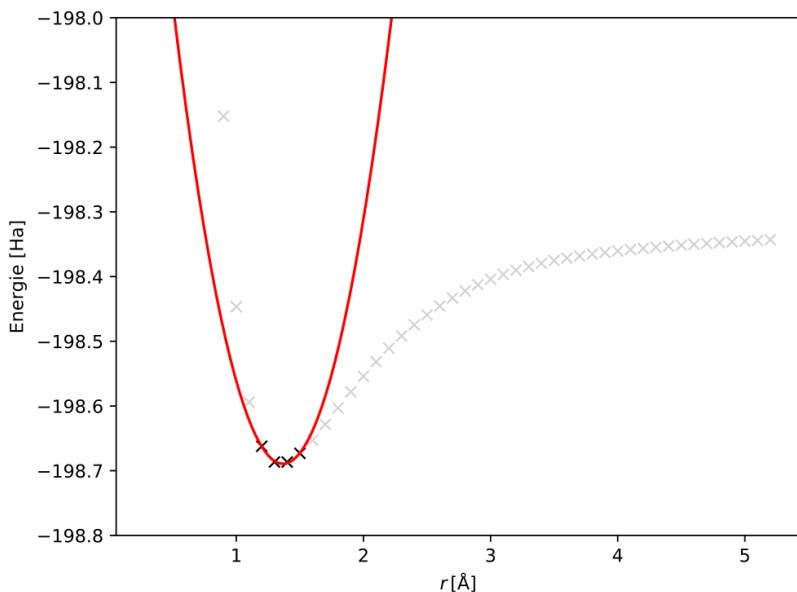
a postupně dosazujeme za `XXX` jednotlivé mezijaderné vzdálenosti. Každý takový soubor pak spustíme v programu Psi4 a získáme energii. Když pak vyneseme závislost energie na vzdálenosti, dostaneme následující křivku.



Obr. 42: Potenciálová křivka molekuly fluoru.

Pro prokládání vybereme jen body v okolí minima a proložíme jimi parabolickou funkci  $f(x) = \frac{1}{2}k(x - x_{\min})^2 + E_{\min}$ . Výsledný fit můžeme vidět na následujícím obrázku, kde jsme světle šedou barvou zaznačili ty body, které jsme z fitování vyřadili.

Dostali jsme následující parametry  $k = 1,89 \text{ Ha}/\text{\AA}^2$ ,  $x_{\min} = 1,367 \text{ \AA}$  a  $E_{\min} = -198,689 \text{ Ha}$ . Pro nás je podstatný jen parametr  $k$ , který má v jednotkách SI hodnotu  $824 \text{ J/m}^2$ . Po dosazení do vzorce pro frekvenci  $f = \frac{1}{2\pi} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$  získáme hodnotu  $36,4 \text{ THz}$ , což odpovídá přechodu na  $1213 \text{ cm}^{-1}$ .



Obr. 43: Potenciálová křivka molekuly fluoru, aproximovaná v okolí minima parabolou.

To už je o dost lepší shoda než předtím, ale kdybychom chtěli výsledek ještě přesněji, museli bychom použít nějakou výrazně lepší metodu pro výpočet energie molekuly. Na závěr se sluší dodat, že pokud místo fitování použijeme energii získanou přímo z Psi4 pomocí druhé derivace, dostaneme  $1180 \text{ cm}^{-1}$ , a pokud numericky vyřešíme Schrödingerovu rovnici pro jádra, dostaneme  $1174 \text{ cm}^{-1}$ .

Pro řešení poslední úlohy použijeme připravené geometrie a vytvoříme z nich vstupní soubory pro metanol

```
set basis cc-pvdz
molecule Met{
C -3.720857 1.264467 0.014321
H -5.081582 2.621135 0.111960
O -4.091493 2.612354 0.044506
H -4.166693 0.761523 -0.871149
H -4.031107 0.758163 0.954084
```



H -2.616521 1.197075 -0.068199

}

optimize("HF")

frequency("HF") .

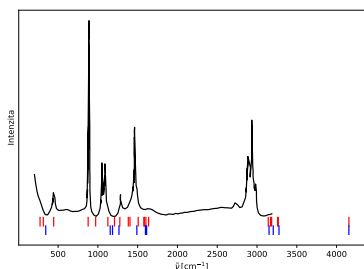
Po jeho spuštění dostaneme následující frekvence ( $\text{v cm}^{-1}$ )

344.7353	1155.1089	1184.1534	1265.1312	1489.7828	1597.6150
1600.4981	1612.5931	3151.1258	3203.9524	3276.1868	4154.4543

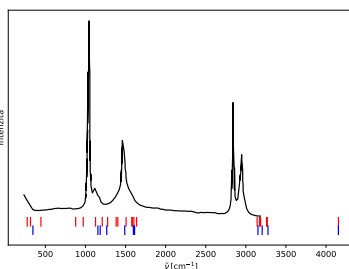
Podobně frekvence pro etanol ( $\text{v cm}^{-1}$ )

273.3196	314.2444	444.6461	877.5750	972.2065	1125.5706
1208.7315	1275.9318	1382.3368	1403.6507	1506.6482	1578.0625
1583.8727	1603.8039	1637.3176	3141.0952	3170.6320	3183.8335
3259.2164	3267.7417	4154.9101			

Pokud nyní zaznačíme vypočítané pozice do grafů, dostaneme následující obrázky. V něm jsou červenou čarou vyznačeny vypočítané čáry etanolu a pod ním mod-



Obr. 44: Ramanovo spektrum lahve  
A



Obr. 45: Ramanovo spektrum lahve  
B

ře čáry metanolu. Ač jsou ve spektrech nesrovnalosti, vcelku bezpečně můžeme usoudit, že v levé lahvi A je etanol a v pravé metanol.

Vodítek k tomu je několik. Jednak levé spektrum má čáru mezi  $400 \text{ cm}^{-1}$  až  $500 \text{ cm}^{-1}$ , která v pravém spektru chybí. Spočítané spektrum metanolu nemá žádný mód, který bychom tomuto píku přiřadili. Dále máme v levém spektru velice intenzivní pík na  $900 \text{ cm}^{-1}$ , který opět nemá protějšek ve spočítaném spektru metanolu, ale naopak velice přesně odpovídá jednomu z módů etanolu. Na závěr okolo  $3000 \text{ cm}^{-1}$  můžeme v levém spektru rozlišit nejméně 4 píky, ale výpočet pro metanol v této oblasti předpovídá jen 3. Naopak pro etanol nám zde vychází píků 5, ač jsou posunuté k o něco vyšším energiím.

Každopádně to vše nás utvrzuje v našem závěru, že v levé lahvi je etanol. Ostatně to jsme mohli tipnout už jen z toho, že levé spektrum má mnohem víc píků, protože pro etanol očekáváme  $3 \cdot 9 - 6 = 21$  vibračních módů, zatímco pro metanol jen  $3 \cdot 6 - 6 = 12$ .

## Úloha VI.S . . . excitující kvanta

Nejnižší excitovaný singletní stav beta karotenu má energii o 1,8 eV vyšší než je energie základního stavu. Přechod mezi tímto stavem a základním stavem je ale zakázaný, takže molekula na této energii fotony neabsorbuje. Naopak přechod na druhý nejnižší singletní stav o energii 2,4 eV je povolený a zodpovědný za zářivě oranžovou barvu molekuly. Nejnižší tripletní hladina pak je na energii 0,9 eV. Načrtněte Jablonského diagram a pomocí něj vysvětlete, proč beta karoten nefluoreskuje, přestože silně absorbuje viditelné světlo. (3 b)

*Bonus:* Proč je pro život na zemi tak zásadní, že kyslík je v základním stavu triplet? (+1 b)

Zkuste spočítat, jaký je přibližně limit pro počet orbitalů v aktivním prostoru u metody CASSCF. Uvažujte, že v aktivním prostoru máte stejně elektronů jako orbitalů (což odpovídá tomu, že v HF by právě polovina byla obsazená) a že většina dnešních superpočítačů na výpočty má maximálně 1 TB operační paměti, do které se vám potřebuje vejít hamiltonián. (3 b)

Pro litografickou výrobu moderních polovodičových čipů se používají takzvané excimerové lasery, které září v daleké UV oblasti. Jsou založené na takzvaných excimerech, což jsou molekuly, které jsou stabilní pouze v excitovaném stavu, zatímco v základním stavu se rozpadnou. Díky tomu se molekula po vyzáření fotonu rozpadne a máme zajištěné splnění podmínky pro fungování laseru, tedy to, že ve vyšším stavu je větší část molekul než v tom nižším. Zkuste pomocí  $\text{Psi4}$  pro dimer helia ( $\text{He}_2^*$ ) spočítat a vykreslit disociační křivky základního a nejnižšího excitovaného stavu. ( $\text{He}_2^*$  se pro lasery zatím nevyužívá, ale například  $\text{Ar}_2^*$  či  $\text{Kr}_2^*$  ano.) Na jaké vlnové délce vám vyjde, že by laser pracoval? Srovnějte s experimentální vlnovou délkou 66 nm. (4 b)

*Poznámka:* U úlohy na webu najdete připravený vstupní soubor pro jednu geometrii. Nelekněte se, že v něm jsou nastavené celkově tři stavy, je to proto, že máme dva excitované stavy blízko sebe, a pokud bychom počítali jen s jedním z nich, pro některé mezijaderné vzdálenosti by to vedlo k problémům s konvergencí.

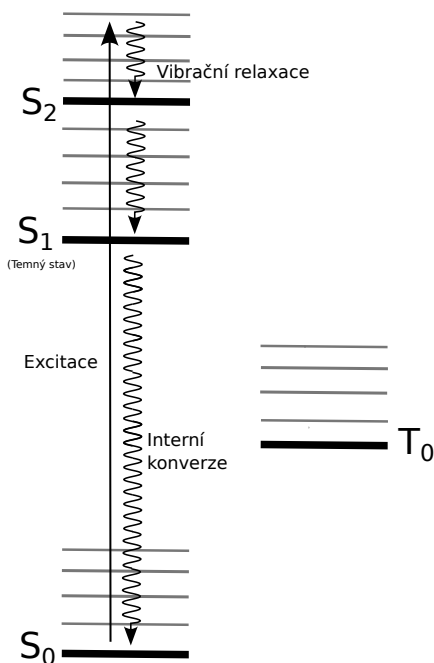
*Nebojte, další Mikulášská nadílka bude zase až 5. prosince.*

Jablonského diagram pro betakaroten vypadá dost podobně jako ten obecný v seriálu, jen jsme upravili vertikální polohy elektronových hladin tak, aby odpovídaly energiím v zadání.

A proč beta karoten nemá fluorescenci? Tím, že je zakázaný zářivý přechod na nejnižší singletní hladinu, musí být zakázaný i zářivý přechod z této hladiny do základního stavu. (Pokud by tomu tak nebylo, mohli bychom dosáhnout stavu, kdy by se zahřátý betakaroten sám chladil vyzářováním, kterým by předával teplo okolí, a zároveň by toto záření od okolí nepřijímal. Tím by mohl samovolně předávat teplo objektu teplejšímu než on a byl by porušen druhý termodynamický zákon.) Při excitaci pak dojde k tomu, že molekula se excituje do stavu  $S_2$ , ze kterého rychle vibračně relaxuje do  $S_1$ . V tomto stavu pak musí zůstat do okamžiku, než dojde k interní konverzi, protože přechod s vyzářením fotonu (fluorescence) je zakázaný. Nemá tedy způsob, jak vyzářit foton ani z jednoho z excitovaných stavů.

Ze stavu  $S_1$  nemůže, protože se jedná o zakázaný přechod, a ze stavu  $S_2$  to nestihne, protože vibrační relaxace proběhne mnohem rychleji. Teoreticky by mohl přejít i do tripletního stavu, ale tento přechod je podmíněný relativistickými efekty, a tím pádem pro organické molekuly bude slabý, protože relativita je doménou spíše dolní části periodické tabulky.

Řešení bonusu je jednoduché, pokud si uvědomíme jednu věc. Podobně jako přechody mezi různými spinovými stavy jedné molekuly jsou zakázané, tak i reakce, kde se mění spin, budou probíhat pomaleji. Jak jsme si zmínili ve čtvrtém díle seriálu, většina organických molekul i běžné produkty oxidačních reakcí jsou v základním stavu singletní, proto tripletní kyslík „nemá komu“ svůj spin předat. Můžeme si to také představit tak, že kyslík si při reakci s organickými molekulami „vynutí“ tripletní tranzitní strukturu, které má vyšší energii, což zvyšuje aktivační energii celé reakce. Každopádně kdyby byl kyslík v základním stavu singlet, byl by natolik reaktivní, že život, jak jej známe v kyslíkové atmosféře, by nebyl možný, protože všechny organické molekuly by velmi rychle shořely.

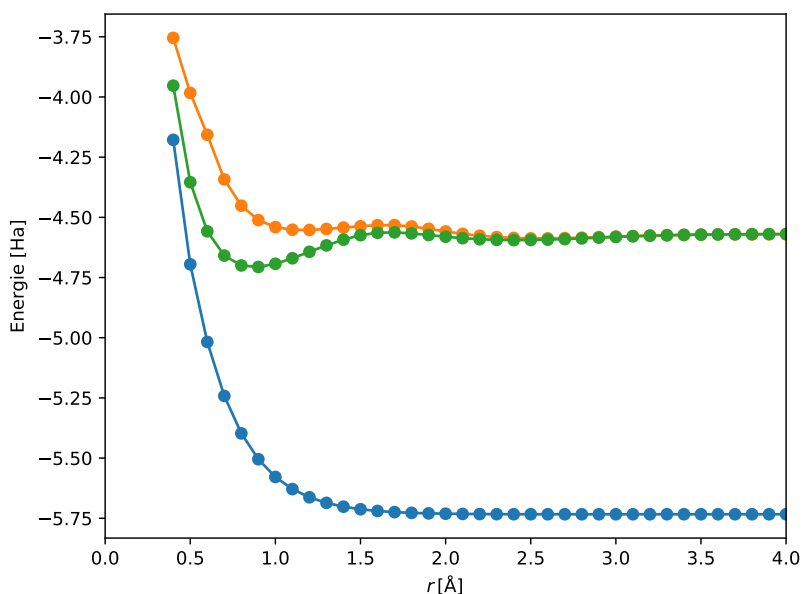


Obr. 46: Jablonského diagram beta karotenu.

I teď se občas stane, že v živých organismech dojde k excitaci molekul kyslíku do singletního stavu, který pak poškozují buňku. Proto například při užívání některých léků (antibiotik) nebo třezalky je problematické chodit na slunce, protože

usnadňují excitaci kyslíku do singletního stavu. Rostliny, které kvůli fotosyntéze mají větší tendenci tvořit singletní kyslík, mají pro ochranu v listech betakaroten a podobné molekuly, které umí tento kyslík deexcitovat („zhášet“), než stihne napáchat škody.

U třetí úlohy se nesmíme nechat zmást tím, že se ptáme na limitující počet orbitalů. Limitující je pro nás totiž primárně počet konfigurací, tedy možností, jak do daného počtu orbitalů můžeme naskládat elektrony. Například pro dva orbitály a dva elektrony v aktivním prostoru máme 6 možností, jak elektrony uspořádat – čtyři z nich jsou ukázány v textu seriálu, zatímco zbylé dvě mají dvakrát obsazený buď nižší, nebo vyšší orbital. V praxi bychom se při výpočtech omezili na ty konfigurace, které mají správnou hodnotu spinu, v našem případě bychom tedy měli 3 singletní konfigurace a 3 projekce spinu u jedné tripletní konfigurace. Pro náš odhad se ale nebudeme tímto trápit, a tedy můžeme vzít celkový počet možností, jak rozmístit  $N$  elektronů do  $N$  orbitalů. Celkový počet takových konfigurací je  $\binom{2N}{N}$ , protože vlastně máme  $2N$  přihrádek,  $N$  pro elektron se spinem nahoru a  $N$  pro spin dolů. Tento počet můžeme snížit tím, že budeme uvažovat jen



Obr. 47: Potenciálově křivky základního a dvou excitovaných stavů dimeru helia.

takové konfigurace, kde je stejný počet elektronů nahoru jako dolů. Počet těchto konfigurací je nižší, a dá se určit tak, že nezávisle do sady  $N$  orbitalů umistujeme  $N/2$  elektronů se spinem nahoru a dolů. To odpovídá  $\binom{N}{N/2}^2$  konfiguracím. Vi-

díme tedy, že počet konfigurací roste s počtem orbitalů velice rychle, a můžeme čekat, že limitní počet orbitalů nebude až tak vysoký. Každopádně, pokud pro oba odhady použijeme Stirlingovu aproximaci faktoriálu, tak dostaneme horní odhad, podle kterého počet konfigurací roste jako  $2^{2N}$ , což by odpovídalo stavu, kdy nás nezajímá ani jestli má konfigurace správný počet elektronů. (Každý z  $2N$  chlívčeků může být obsazený, nebo prázdný.)

Matice hamiltoniánu bude celkem obsahovat  $X^2$  hodnot, kde  $X$  je počet konfigurací. Každá z hodnot pak, kvůli reprezentaci desetinných čísel v počítači, zabere 8 bajtů. Pokud vyjdeme z velikosti operační paměti 1 TB, tak po vydělení 8 B a odmocnění získáme limit asi 370 000 konfigurací.

Pokud vyjdeme ze vzorce  $2^{2N}$ , tak  $\log_2(370000) \approx 18,5$ , čímž dostaneme řádový limit něco přes 9 orbitalů. Pokud vezmeme vzorec  $\binom{N}{N/2}^2$ , tak pro  $N = 10$  dostaneme nižší číslo, necelých 64 000 konfigurací a pro  $N = 12$  pak 850 000 konfigurací. S tímto odhadem tedy máme limit někde mezi 11 a 12 orbitaly.

Dodejme, že v praxi, pokud silně optimalizujeme tím, že vybereme opravdu jen ty konfigurace, které mají správný spinový stav, a zároveň využijeme toho, že velká část hodnot v matici hamiltoniánu je nulová, tak se tato hranice dá posunout na něco přes 16 orbitalů. Pro větší aktivní prostory pak musíme sáhnout k tomu, že použijeme nějakou metodu, která vybere jen ty konfigurace, které jsou pro popis problému nejdůležitější.

Poslední úlohu snadno vyřešíme pomocí připraveného vstupu, ve kterém jen upravujeme mezijadernou vzdálenost. Když vykreslíme energie všech tří stavů do grafu, dostaneme následující obrázek.

V něm krásně vidíme, jak nejnižší (základní) stav nemá vázané minimum, zatímco první excitovaný má minimum, ve kterém excitovaná molekula zůstane, než dojde k deexcitaci do základního stavu a vyzáření fotonu ultrafialového záření. Pokud chceme zjistit, jakou energii má tento foton, musíme se podívat do grafu, kde má excitovaný stav minimum. Přestože by bylo ideální hledat optimální geometrii pro excitovaný stav, my si vystačíme s tím, že ze struktur, které jsme počítali pro vykreslení disociačních křivek, vybereme tu s nejnižší energií. Prostým pohledem do grafu vidíme, že nejnižší energii má struktura s mezijadernou vzdáleností 0,9 Å. Když tedy projdeme výstup výpočtu s touto mezijadernou vzdáleností, najdeme následující řádky: ==> Energetics <==

```
SCF energy = -5.495165873340969
Total MCSCF energy = -4.907437749031700

==> MCSCF root 0 information <==

MCSCF Root 0 energy = -5.504811925243551

Active Space Natural occupation numbers:

A 1.996503 A 1.994097 A 0.005637
```

A 0.003764

Mohlo by nás zmást, že ve výstupu máme řádek **Total MCSCF energy**. To je „zprůměrovaná“ energie přes všechny stavy, která je pro naše účely k ničemu. My se musíme podívat na energie jednotlivých stavů, které jsou vypsány níže ve výstupu.

Energii základního stavu získáme z řádku

$$\text{MCSCF Root 0 energy} = -5.504811925243551.$$

O něco níže pak najdeme řádek s energií excitovaného stavu

$$\text{MCSCF Root 1 energy} = -4.706122682516050.$$

Energii přechodu pak dostaneme jako rozdíl těchto dvou energií, tedy přibližně 0,8 Ha nebo 21,7 eV. To odpovídá záření na 57 nm, které spadá do oblasti extrémního ultrafialového záření, které téměř sousedí s rentgenovou oblastí. Ve srovnání s experimentální hodnotou 66 nm se jedná o docela dobrou shodu.



## Akce FYKOSu

### Podzimní soustředění v Kořenově

Podzimní soustředění 36. ročníku FYKOSu se konalo od 24. 9. do 2. 10. 2022 na Chatě Zvonice v severočeském Kořenově.

#### Organizátoři

Veronika Hendrychová (vedoucí soustředění a tvůrce legendy), Jan Benda, Vojtěch David (tvůrce legendy), Jakub Dřevo, Daniel Dupkala, Daniela Dupkalová, Daniel Fousek, Ivan Hudák, Elena Chochořáková, Jindřich Jelínek, Patrik Kašpárek, Karel Kolář (tvůrce legendy), Radka Křížová, Viktor Materna, Marek Milička, Šimon Pajger, Kateřina Rosická, Josef Trojan (tvůrce legendy), Tomáš Tuleja, Martin Vaněk, Jitka Vysloužilová (zdravotnice)



Obr. 48: Velbloudí dostihy.

#### Účastníci

Martin Kysela, Pavel Provazník, Jiří Vestfál, Richard Materna, Anežka Čechová, Lukáš Linhart, David Bálek, Matouš Mišta, Daniel Čtvrtěčka, Lukáš Létal, Vojtěch Marek, Ivan Žemlička, Pavla Šimová, Daniela Karpíšková, David Škrob, Jaromír Potůček, Veronika Bartáková, Vladimíra Jiříčková, Jan Lepič, Michal Stroff, Ludmila Šírová, Tereza Hochmanová, Veronika Plevná, Mikuláš Vlčan, Monika

Drexlerová, Tereza Voltrová, Tomáš Kubrický, Jakub Savula, Vladimír Slanina, Petr Brettschneider, Katarína Horská, Jan Klír, Maxmilian Ladislav Skuda, Anna Vodáková, Lucia Kleščová, Jakub Radim Zbončák, Vojtěch Kubrycht, Matej Karpáč, Matyáš Beran, Martin Zuzek



Obr. 49: Obyvatelé Fykoreje byli pravidelně obdarováni Vůdčokoládami.

### *Legenda*

Celkem 40 účastníků dostalo za své zásluhy pozvánku na Cestu kolem světa za 8 dní, která začínala na kořenovském letišti. Po odletu z druhé destinace, kterou byla egyptská Káhira, se však cestující neplánovaně ocitli v diktátorském státu Fykorea. Zde byli vydáni napospas nemilosrdnému režimu uznávajícímu pouze oddanost Vůdci a přísnou kázeň. Během své cesty stihli účastníci navštívit velbloudí dostihy, zúčastnili se fykorejské dražby, byli nuceni přizpůsobit se pravidlům režimu a mnoho dalšího. Nakonec se pokusili o útěk nočním přechodem hranice; zda se jim to podařilo, už vědí pouze účastníci soustředění.

### *Jarní soustředění ve Frýdštejně*

Soustředění se konalo v Penzionu Sport ve Frýdštejně od soboty 22. 4. do neděle 30. 4. 2023.

### *Organizátoři*

Jan Bajer (Legendový tým), Dávid Brodňanský, Vojtěch David, Daniel Dupkala, Daniela Dupkalová, Nicolas Gavorník, Ivan Hudák, Elena Chochořáková (Vedoucí byrokracie), Juraj Jánošík (Legendový tým), Patrik Kašpárek, Jakub Kliment,



Jiří Kohl, Viktor Materna, Radomír Mielec, Šimon Pajger (Vedoucí soustředění),  
Viačeslavas Šinkonis, Josef Trojan, Tomáš Tuleja (Legendový tým), Martin Vaněk  
(Zdravotník)



Obr. 50: Fotografie účastníků a organizátorů z výletu

### *Účastníci*

Richard Materna, Anežka Čechová, Martin Švanda, Lukáš Linhart, Lukáš Létal, Ivan Žemlička, David Škrob, Jaromír Potůček, Michal Stroff, Lukáš Jarábek, Ludmila Šírová, Veronika Plevná, Patrik Stercz, David Ševčík, Lukáš Franta, Monika Drexlerová, Jiří Sýkora, Vladimír Slanina, Petr Brettschneider, Katarína Horská, Barbora Klusáková, Jan Klír, Mária Mederlyová, Jakub Radim Zbončák, Vojtěch Kubrycht, Matyáš Beran, Gabriela Kotúčová, Linda Tománková, Soňa Vasilíková, Maroš Jankovič, Jan Strnad, Vladimíra Brabcová, Jakub Hlavenka, Gala Dědková, Barbora Blínová, Vojtěch Jan Schreib, Anna Škrdletová, Jakub Kubica

### *Legenda*

Děj soustředění byl inspirován hrou Star Realms. Celkem 40 účastníků dostalo pozvánku na výběrové řízení vesmírné agentury FASA. Společně pak objevovali vesmír a když už byl prozkoumán, snažili se na tom co nejvíce zbohatnout. To se samozřejmě neobešlo bez bojů, během kterých povstaly různé vesmírné říše. Nakonec bylo třeba odrazit invazi mimozemských blobů, což ale účastníci úspěšně zvládli a tak lidstvo přežilo. Kromě mnoha legendových her připravili organizátoři několik bloků odborných i populárních přednášek, zajímavé experimenty nebo menší Fyziklání. Řešitelé Fyzikální olympiády měli navíc možnost napsat si krajské kolo přímo na soustředění.



Obr. 51: Dostat lidi na měsíc je náročné

## Stáže

V letošním roce poprvé pod křídly FYKOSu probíhaly vědecké stáže. Během léta zavítalo několik účastníků na dva týdny na různá pracoviště MFF UK, kde si mohli vyzkoušet vědeckou praxi na vlastní kůži. Zapojili se do projektů jako Generace superkontinua ve fotonickém vlákne a jeho využití v ultrarychlé spektroskopii, Deterministické přesto nepředpověditelné, Radiální vývoj parametrů slunečního větru nebo Staň se kvantovou fyzikou/kvantovým fyzikem pevných látek. Do stáží byli vybráni především na základě svých výsledků v řešení experimentálních úloh tohoto ročníku semináře. Stáže vymyslel a zorganizoval Tomáš Červeň.

## Fyziklání 2023

V únoru roku 2023 se konal již 17. ročník Fyziklání. V návaznosti na úspěch předchozího ročníku soutěž opět probíhala v letňanském výstavišti PVA Expo Praha, kam se letos sjelo rekordních 1167 účastníků z 21 zemí světa. V pátek 10. února se tak v soutěžním klání střetlo 251 týmů z Česka, Slovenska, Polska, Itálie, Rumunska, Bulharska, Španělska, Rakouska, Srbska, Estonska, Lotyšska, Německa, Filipín, Indie, Brazílie, Indonésie, Ukrajiny, Litvy, Belgie, Velké Británie a Bosny a Hercegoviny.

V soutěži bezkonkurenčně zvítězil rumunský tým *CaminBaieti* a odnesl si tak první místo v kategorii A. V kategorii B pak dominoval indický tým s názvem *Power of Phi* a kategorii C ovládl český tým *Kdo maže, ten jede* z Gymnázia Opatov v Praze. České týmy velmi dobře odolávaly konkurenci i ve vyšších kategoriích – páté místo v kategorii A obsadil tým *Error404* (žáci Gymnázia Brno, třída Ka-

pitána Jaroše) a na bronz v kategorii B dosáhl tým *Lubor nemá večer čas* (žáci Gymnázia Budějovická v Praze a Gymnázia Brno, třída Kapitána Jaroše).

Fyziklání se účastní nejvýše pětičlenné týmy středoškoláků. Jejich cílem v průběhu tříhodinové soutěže je získat co nejvyšší počet bodů za řešení fyzikálních úloh. Soutěžící obdrží na začátku zadání sedmi úloh a pokaždé, když se jim podaří některou z nich správně vyřešit, dostanou zadání nové, většinou obtížnější úlohy.



Obr. 52: Pohled na soutěžící v PVA Expo Praha.

## Výsledky

### Kategorie A

- |   |        |
|---|--------|
| 1. CaminBaieti (5× RO)                    | 197 b. |
| 2. The Kaldashians (5× RO)                | 178 b. |
| 3. Löö ölu üle onu Ülo öe äia öla (5× EE) | 150 b. |

### Kategorie B

- |                                   |        |
|-----------------------------------|--------|
| 1. Power of Phi (5× IN)           | 166 b. |
| 2. Atmosas Baltija (2× LT +3× EE) | 116 b. |
| 3. Lubor nemá večer čas (5× CZ)   | 104 b. |

### Kategorie C

- |                                     |       |
|-------------------------------------|-------|
| 1. Kdo maže, ten jede (5× CZ)       | 86 b. |
| 2. Arcig (5× CZ)                    | 74 b. |
| 3. i gattini di Schrödinger (5× IT) | 74 b. |

Kompletní výsledková listina a podrobná pravidla jsou k nalezení na webových stránkách soutěže <https://fyziklani.cz>.



Obr. 53: Účastníci Fyziklání.

### *Doprovodný program a Fyziklani Scholarship*

Samotná soutěž byla sice jádrem celého Fyziklání, ale již tradičně zdaleka ne jeho jedinou částí. Během celého týdne od 6. do 12. února probíhal doprovodný program, během kterého mohli soutěžící nejen hlouběji proniknout do oblasti fyziky, ale také se navzájem poznat a představit si své kultury.

V rámci odborné části programu účastníci navštívili specializované laboratoře MFF UK i dalších vědeckých institucí v okolí Prahy, poslechli si přednášky odborníků, mezi kterými nechyběli ani prof. RNDr. Jiří Podolský, CSc., DSc. z MFF UK či host z Hamburku, prof. Dr. Christian Bressler nebo měli možnost pokládat vědcům dotazy v rámci panelové diskuze.

V doprovodném programu nechyběl ani prostor pro odreagování – ať už prostřednictvím párty večer po soutěži, či sobotního slavnostního rautu. Zvyky, pokrmy či tance typické pro svou zemi si pak účastníci ze zahraničí vzájemně představili během Večera národů a obzvláště pro účastníky zdaleka mohl být lákavý třeba výlet na Karlštejn či městská hra, která potrápila jejich mozkové buňky a provedla je zákoutími Prahy a již byl celý týden zakončen.

Tato významná zahraniční účast byla pro prezenční Fyziklání rekordní a byla z velké části umožněna díky významné podpoře partnera ESPR (*European Summer Program on Rationality*), který umožnil účast na celém doprovodném programu dvanácti týmům z různě odlehlých koutů světa.

Letošní ročník Fyziklání byl také prvním, který vedl Vojtěch David. Ten v této roli vystřídal Daniela Dupkalu, který stál za realizací 11. až 16. ročníku soutěže a jehož přínos soutěž posunul z komornější akce v posluchárnách MFF UK k mezinárodní události v největším veletržním areálu v Praze.





Obr. 54: Účastníci na panelové diskuzi s vědci.



Obr. 55: Společná fotka účastníků a organizátorů Fyziklani Scholarship.

## Fyziklání Online

Ve středu 23. 11. 2022 se 3766 účastníků z 59 zemí světa tvořících 904 týmů společně utkalo již ve 12. ročníku internetové soutěže Fyziklání Online.

Soutěž s počtem 328 bodů ovládl opět tým z kategorie Open, složený z vědeckých pracovníků z USA, tentokrát s názvem *S.I.M.P.S.*. První příčku v kategorii A obsadil tým *Orion's Third Leg* ze Singapuru s 255 body. Výhercem kategorie B a zároveň nejlepším středoškolským týmem se stal tým *Power Of Phi* z Indie, který získal 262 bodů. V kategorii C pak zvítězil tým z Rumunska *Micutza ChiKuray* se ziskem 212 bodů. Nejlepší české i zahraniční týmy byly oceněny věcnými cenami podle svého výběru.

### Pravidla

Na začátku soutěže každý tým o maximálně pěti členech obdržel sedm úloh s jednoznačným číselným výsledkem. Po zadání správného výsledku do našeho webového systému získal tým zadání následující úlohy. Soutěž trvala 3 hodiny, přičemž v průběhu soutěže proběhla také Hurry-up část, v níž byly úlohy rozděleny do tří fyzikálních témat a vyřešení každé úlohy bylo hodnoceno bonusovými body. Soutěžící mohli k řešení použít libovolnou literaturu, internet či počítačový software, nesměli však komunikovat s žádnou osobou mimo svůj tým.

### Výsledky

#### **Středoškoláci A**

- |                         |        |
|-------------------------|--------|
| 1. Orion's Third Leg    | 255 b. |
| 2. The Kaldashians      | 251 b. |
| 3. The Böltzmann Brains | 246 b. |

#### **Středoškoláci B**

- |                     |        |
|---------------------|--------|
| 1. Power Of Phi     | 262 b. |
| 2. Bhautik Shastris | 197 b. |
| 3. BASIS Peoria     | 182 b. |

#### **Středoškoláci C**

- |                         |        |
|-------------------------|--------|
| 1. Micutza ChiKuray     | 212 b. |
| 2. Schrodinger's Cats   | 133 b. |
| 3. Schrödinger's Legion | 124 b. |

**Středoškoláci A - CZ/SK**

- |                               |        |
|-------------------------------|--------|
| 1. Archimedova Vaňa           | 202 b. |
| 2. Error404                   | 134 b. |
| 3. NAFTA - netflix adaptation | 113 b. |

**Středoškoláci B - CZ/SK**

- |                             |        |
|-----------------------------|--------|
| 1. Lubor is Stayin' Alive   | 152 b. |
| 2. Šerif nemá odpoledne čas | 138 b. |
| 3. MN4U                     | 106 b. |

**Středoškoláci C - CZ/SK**

- |                       |       |
|-----------------------|-------|
| 1. Skopová Křídélka   | 99 b. |
| 2. Betta team         | 89 b. |
| 3. Kdo maže, ten jede | 88 b. |

**Open**

- |                             |        |
|-----------------------------|--------|
| 1. S.I.M.P.S.               | 328 b. |
| 2. Pentagonal Supersymmetry | 316 b. |
| 3. Five Ugly Faces          | 307 b. |



Obr. 56: Organizátoři v průběhu soutěže.

*Ve výsledkové listině jsou uvedeny pouze nejlepší týmy. Kompletní výsledková listina včetně bodování jednotlivých úloh je k nalezení na webových stránkách soutěže <https://online.fyziklani.cz/2022/vysledky/>.*

## Fyzikální Náboj

Letošní ročník Fyzikálního Náboje se uskutečnil 4. listopadu 2022 a byl organizován slovenským FKS a FYKOsem. Princip soutěže je podobný Fyziklání – pětičlenné týmy během dvou hodin řeší fyzikální úlohy a snaží se získat co nejvíce bodů za správná řešení. Oproti Fyziklání se liší soutěžním časem (dvě hodiny místo tří) a bodováním (za správnou odpověď je vždy 1 bod). Tento rok byl Náboj po dvou letech online režimu opět prezenčně.

Náboj probíhá v několika evropských městech současně. Letos to v Čechách bylo v Praze (Gymnázium Christiana Dopplera a nově i Didaktikon Hybernská) a Ostravě (Vysoká škola báňská – Technická univerzita Ostrava za organizace Gymnázia Ostrava-Zábřeh, Volgogradská 6a). Spolu v České republice soutěžilo 85 týmů (z toho 41 v kategorii Junioři a 44 v kat. Senioři).

### Vítězné týmy, kat. Senioři, ČR

1. (6.) Gymnázium Christiana Dopplera, Zborovská 45, Praha 5
2. (8.) Gymnázium, Mikulášské náměstí, Plzeň
3. (12.) Gymnázium (SŠ), Palackého náměstí, Boskovice

### Vítězné týmy, kat. Junioři, ČR

1. (5.) Gymnázium J.A.Komenského a JŠ s pr.SJZ, Komenského, Uherský Brod
2. (7.) Gymnázium Opatov, Konstantinova, Praha 4
3. (9.) Gymnázium, Mikulášské náměstí, Plzeň

*V závorkách je uvedeno pořadí v rámci mezinárodního žebříčku. Kompletní výsledkovou listinu najdete na webu soutěže <https://physics.naboj.org>.*

## Den s experimentální fyzikou

Na podzim proběhl již 28. ročník Dne s experimentální fyzikou (DSEF). 7. listopadu měla stovka středoskoláků možnost navštívit vědecká pracoviště v areálu Troja Univerzity Karlovy a následně v Praze a okolí.

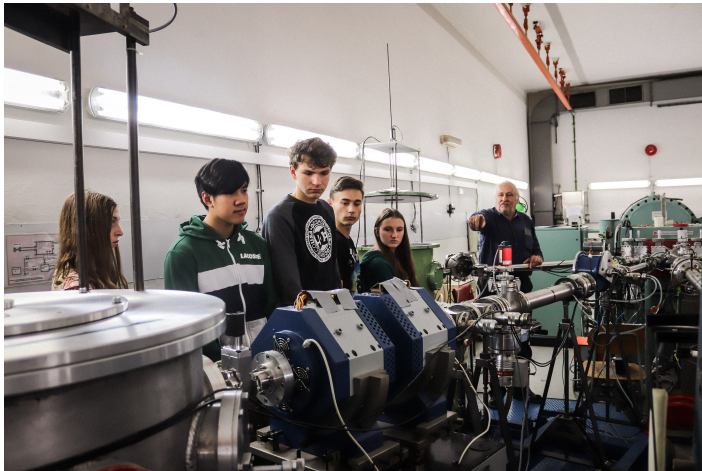
Akce započla přednáškou pana doc. RNDr. Jakuba Pšenčíka, Ph.D. na téma "Fotosyntéza jako inspirace pro nové způsoby využití sluneční energie", na které účastníkům přiblížil způsoby využití fotosyntézy jako nového způsobu získání obnovitelné energie. V navazujícím dopoledním programu měli účastníci v rámci 13 skupin možnost navštívit celkově 15 vědeckých pracovišť. Exkurze pokrývaly širokou škálu témat od fyziky atmosféry přes křemíkové detektory, různé spektroskopické metody, fyziku plasmatu ve vesmíru po fyziku nízkých tlaků nebo fyziku povrchů.

Po již tradičním občerstvením bagetou vyrazili účastníci odpoledne do laboratoří po celé Praze. Celkem 11 skupin mělo možnost navštívit pracoviště ELI Beamlines v Dolních Břežanech, Ústav jaderného výzkumu Řež, Ionosférickou observatoř,

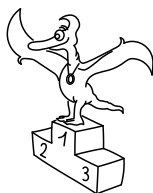


Český hydrometeorologický ústav v Komořanech, vybraná pracoviště FZU AV ČR, či skryté laboratoře Mikrotroonu uprostřed Starého Vítkovského tunelu.

V rekordním ročníku DSEF nás navštívilo 99 účastníků, kteří měli možnost se setkat se špičkovými laboratořemi v Praze a okolí. Za rok na viděnou.



Obr. 57: Studenti si prohlédli i Kryogenní pavilon v Troji.

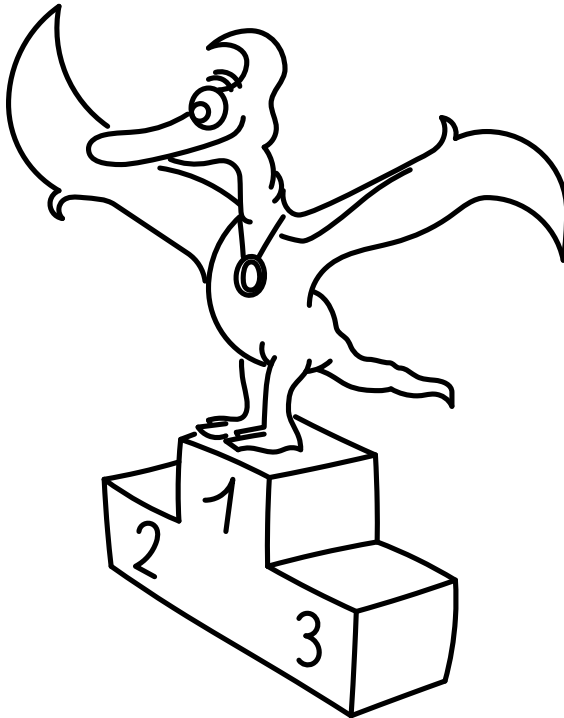


## Pořadí řešitelů

### Kategorie prvních ročníků

<b>jméno</b>	<b>škola</b>	<b>Σ</b>
<i>Student Pilný</i>	MFF UK	<b>396</b>
1. <i>Kosma Šatánek</i>	ZŠ a MŠ Telecí	<b>310</b>
2. <i>Damian Šatánek</i>	G Teplice	<b>289</b>
3. <i>Jiří Preč</i>	G J. A. Komenského, Uh. Brod	<b>254</b>
4. <i>Vojtěch Jan Schreib</i>	G Jírovcova, České Budějovice	<b>227</b>
5. <i>Ludmila Šírová</i>	Mensa G, Praha 6	<b>191</b>
6. <i>Adam Pustka</i>	G F. X. Šaldy, Liberec	<b>189</b>
7. <i>Lukáš Franta</i>	G Christiana Dopplera, Praha	<b>152</b>
8. <i>Gala Dědková</i>	G, Roudnice nad Labem	<b>147</b>
9. <i>Vojtěch Kubrycht</i>	G, Budějovická, Praha	<b>146</b>
10. <i>Jakub Hlavenka</i>	G Brno, tř. Kpt. Jaroše	<b>134</b>
11. <i>Anežka Skupinová</i>	G, Hodonín	<b>106</b>
12. <i>Michal Stroff</i>	G, Budějovická, Praha	<b>104</b>
13. <i>Ondřej Skála</i>	G Volgogradská 6a, Ostrava	<b>103</b>
14. <i>Patrik Pöschl</i>	G F. X. Šaldy, Liberec	<b>95</b>
15. <i>Barbora Blínová</i>	Podkrušnohorské G, Most	<b>73</b>
16.–17. <i>Domínik Kaňka</i>	Lepařovo G, Jičín	<b>59</b>
16.–17. <i>Md Faiyaz Siddiquee</i>	DPS STS School Dhaka	<b>59</b>
18.–19. <i>Matej Karpáč</i>	ZŠ Jána Švermu, Humenné	<b>54</b>
18.–19. <i>Mikuláš Vlčan</i>	SPŠ, Třebíč	<b>54</b>
20. <i>Arkadip De</i>	Salt Lake School, India	<b>52</b>
21. <i>Monika Nováková</i>	Reálné G a ZŠ, Prostějov	<b>46</b>
22. <i>Tomáš Řehák</i>	G Brno, tř. Kpt. Jaroše	<b>38</b>
23. <i>Ján Lakota</i>	G Grösslingová, Bratislava	<b>34</b>
24. <i>Samuel Šandor</i>	G Poštová, Košice	<b>31</b>
25. <i>Vojtěch Janáček</i>	G F. X. Šaldy, Liberec	<b>28</b>
26. <i>Vojtěch Novosád</i>	G a SOŠPg Jeronýmova, Liberec	<b>27</b>
27.–29. <i>Roberto Franchin</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>25</b>
27.–29. <i>Daniel Švaňa</i>	G Christiana Dopplera, Praha	<b>25</b>
27.–29. <i>Nina Vážna</i>	ŠpMNDaG, Bratislava	<b>25</b>
30. <i>Teo Višňovský</i>	ŠpMNDaG, Bratislava	<b>24</b>
31. <i>Petr Němec</i>	Wichterlovo G, Ostrava	<b>23</b>
32. <i>Filip Krafčík</i>	G T. Vansovej, Stará Lubovňa	<b>21</b>
33. <i>Erik Ježek</i>	Smíchovská SPŠ Praha 5	<b>20</b>
34. <i>Vít Vycudilik</i>	Gymnázium Oty Pavla, Praha	<b>18</b>
35.–36. <i>Bára Kopačková</i>	G a SOŠ Podbořany	<b>17</b>
35.–36. <i>Barbora Salajová</i>	G, Litoměřická, Praha	<b>17</b>
37.–39. <i>Petr Barták</i>	Slovanské G, Olomouc	<b>16</b>
37.–39. <i>Pavlna Kuthanová</i>	G a SOŠ Podbořany	<b>16</b>
37.–39. <i>Linda Mičicová</i>	Bilingválne G, Sučany	<b>16</b>

<b>jméno</b> <i>Student Pilný</i>	<b>škola</b> MFF UK	$\Sigma$ <b>396</b>
<b>40.–41.</b> <i>Tomáš Ferbas</i>	Slovanské G, Olomouc	<b>15</b>
<b>40.–41.</b> <i>Nela Šlešková</i>	G, Na Zatlance, Praha	<b>15</b>
<b>42.</b> <i>Helena Muchová</i>	G Jana Keplera, Praha	<b>14</b>
<b>43.</b> <i>Jindřich Anderle</i>	G, Budějovická, Praha	<b>12</b>
<b>44.</b> <i>Jakub Učík</i>	G Z. Wintra, Rakovník	<b>11</b>
<b>45.</b> <i>Ishaan Puri</i>	Singapore American School, SG	<b>10</b>
<b>46.</b> <i>Alberto Quondam</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>9</b>
<b>47.</b> <i>Vojtěch Zielina</i>	G, Třinec	<b>8</b>
<b>48.</b> <i>Michal Ševčík</i>	G, Karviná	<b>6</b>
<b>49.</b> <i>Jakub Busínský</i>	SPŠ strojní a stavební, Tábor	<b>5</b>
<b>50.</b> <i>Patricie Labuťová</i>	G B. Němcové, HK	<b>3</b>
<b>51.</b> <i>Tadeáš Těhan</i>	G Volgogradská 6a, Ostrava	<b>2</b>



## Kategorie druhých ročníků

<b>jméno</b> <i>Student Pilný</i>	<b>škola</b> MFF UK	$\Sigma$ <b>396</b>
1. <i>David Něníčka</i>	G, Rožnov pod Radhoštěm	<b>282</b>
2. <i>Lukáš Hrdý</i>	G, Lesní čtvrť, Zlín	<b>255</b>
3. <i>Vladimír Slanina</i>	G Poštová, Košice	<b>253</b>
4. <i>Filip Cihlář</i>	G J. S. Baara, Domažlice	<b>221</b>
5. <i>Linda Tománková</i>	G, Boskovice	<b>219</b>
6. <i>Jakub Kubica</i>	G F. Hajdy, Ostrava	<b>207</b>
7. <i>Anna Škradletová</i>	G, Lovosice	<b>181</b>
8. <i>Tomáš Kubrický</i>	G Poštová, Košice	<b>171</b>
9.–10. <i>Zuzana Grycová</i>	G Botičská, Praha	<b>165</b>
9.–10. <i>Daniel Švec</i>	G a Obch. ak., Pelhřimov	<b>165</b>
11. <i>Hana Žitňanská</i>	Slovanské G, Olomouc	<b>159</b>
12. <i>Tomáš Otrubčák</i>	G Ludovíta Štúra, Trenčín	<b>156</b>
13. <i>Petr Brettschneider</i>	G, Dukelská, Bruntál	<b>152</b>
14. <i>Radim Švec</i>	G a Obch. ak., Pelhřimov	<b>148</b>
15. <i>Ivan Žemlička</i>	G Ústavní, Praha	<b>145</b>
16. <i>Pavla Šimová</i>	G, Šumperk	<b>135</b>
17. <i>Matyáš Beran</i>	G dr. A. Hrdličky, Humpolec	<b>134</b>
18. <i>Tomáš Bourek</i>	G J. Heyrovského, Praha	<b>130</b>
19. <i>Lujza Lea Lavriková</i>	G, P. Horova, Michalovce	<b>128</b>
20. <i>Martin Zuzek</i>	G Dobruška	<b>125</b>
21. <i>Jakub Buzalka</i>	G, Považská Bystrica	<b>120</b>
22. <i>Matouš Mišta</i>	G, Olomouc-Hejčín	<b>104</b>
23. <i>Gabriela Kotúčová</i>	G PdC, Piešťany	<b>84</b>
24. <i>Petr Kozák</i>	G, Písek	<b>83</b>
25. <i>Giulio Vertucci</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>82</b>
26. <i>Kate Timofeeve</i>	Physics and Mathematics S, SFU	<b>80</b>
27. <i>Soňa Vasilová</i>	G, Kukučínova, Poprad	<b>79</b>
28. <i>Jakub Radim Zbončák</i>	G, Křenová, Brno	<b>77</b>
29. <i>Sabina Mihulová</i>	G, Nad Alejí, Praha	<b>69</b>
30. <i>Veronika Pavlíková</i>	G, Křenová, Brno	<b>67</b>
31. <i>Ondřej Hejsek</i>	G a SOŠ, Jilemnice	<b>63</b>
32. <i>Martin Uhrin</i>	G Hubeného, Bratislava	<b>60</b>
33.–34. <i>Petr Toman</i>	G, Velké Meziříčí	<b>58</b>
33.–34. <i>Eva Žilková</i>	G Fr. Švantnera	<b>58</b>
35. <i>Zuzana Harbutová</i>	G L. Štúra, Zvolen	<b>55</b>
36. <i>Lucia Kleščová</i>	G Poštová, Košice	<b>52</b>
37. <i>Matěj Pěnička</i>	G, Nad Alejí, Praha	<b>50</b>
38. <i>Jana Bartoňová</i>	G, Broumov	<b>48</b>
39. <i>Petra Ivanišová</i>	G, Ohradní, Praha-Michle	<b>44</b>
40. <i>Tudor Popescu</i>	Inter. Computer HS, Bucharest,RO	<b>42</b>
41.–42. <i>Michal Friml</i>	G Dobruška	<b>41</b>
41.–42. <i>Pavel Kučera</i>	G F. Palackého, Val. Mez.	<b>41</b>
43.–45. <i>Adam Filip</i>	G, Česká Lípa	<b>39</b>
43.–45. <i>Klaudia Lalová</i>	G L. Svobodu, Humenné	<b>39</b>
43.–45. <i>Mária Mederlyová</i>	G Grösslingová, Bratislava	<b>39</b>
46. <i>Terézia Dadažová</i>	Gymnázium Federica Garcíu Lorcu	<b>38</b>
47. <i>Tereza Kendrová</i>	Gymnázium Ladislava Novomeského	<b>35</b>
48. <i>Jozef Smolár</i>	G Antona Bernoláka, SK	<b>34</b>
49. <i>Miroslav Pajger</i>	Bilingválne G, Sučany	<b>33</b>
50. <i>Matěj Hušek</i>	G, Turnov	<b>31</b>

<b>jméno</b> <i>Student Pilný</i>	<b>škola</b> MFF UK	$\Sigma$ <b>396</b>
<b>51.–52.</b> <i>Sebastian Jakub Machel</i>	G M. Štefánika N. Mesto n. V.	<b>30</b>
<b>51.–52.</b> <i>Matyáš Matta</i>	Masarykovo G, Plzeň	<b>30</b>
<b>53.</b> <i>Šimon Zemčák</i>	G Kežmarok	<b>27</b>
<b>54.</b> <i>Mária Popovičová</i>	G, Park mládeže, Košice	<b>26</b>
<b>55.–56.</b> <i>Lorenzo Borri</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>24</b>
<b>55.–56.</b> <i>Daniel Križan</i>	Gymnázium Ladislava Novomeského	<b>24</b>
<b>57.</b> <i>Daniel Linda</i>	SPŠ, Ječná, Praha	<b>23</b>
<b>58.</b> <i>Ondřej Sedláček</i>	Gymnázium Oty Pavla, Praha	<b>22</b>
<b>59.–61.</b> <i>Tereza Lomecká</i>	G, U Libeňského zámku, Praha	<b>21</b>
<b>59.–61.</b> <i>Lenka Prokešová</i>	G, Třeboň	<b>21</b>
<b>59.–61.</b> <i>Václav Verner</i>	PORG, Praha	<b>21</b>
<b>62.</b> <i>Yahor Herashchanka</i>	G, Turnov	<b>19</b>
<b>63.</b> <i>Daniel Ondryáš</i>	Jazykové G P. Tigrida, Ostrava	<b>18</b>
<b>64.–65.</b> <i>Šimon Borovský</i>	G Grösslingová, Bratislava	<b>17</b>
<b>64.–65.</b> <i>Sebastian Laskowski</i>	G, U Libeňského zámku, Praha	<b>17</b>
<b>66.–67.</b> <i>Adam Bretšnajder</i>	G Z. Wintra, Rakovník	<b>16</b>
<b>66.–67.</b> <i>Eliška Vokáčová</i>	G B. Hrabala	<b>16</b>
<b>68.–70.</b> <i>Tomáš Hořejší</i>	G V. Hlavatého, Louny	<b>14</b>
<b>68.–70.</b> <i>Eduard Plic</i>	Masarykovo G, Plzeň	<b>14</b>
<b>68.–70.</b> <i>Kristóf Szócs</i>	Gymnázium Zoltána Kodálya	<b>14</b>
<b>71.–72.</b> <i>Michal Martínek</i>	G Ústavní, Praha	<b>12</b>
<b>71.–72.</b> <i>Vít Stružka</i>	Gymnázium Oty Pavla, Praha	<b>12</b>
<b>73.</b> <i>Jindřich Urban</i>	G, Benešov	<b>11</b>
<b>74.–76.</b> <i>Róbert Front</i>	G Stropkov	<b>10</b>
<b>74.–76.</b> <i>Ondřej Šmíd</i>	G, Strakonice	<b>10</b>
<b>74.–76.</b> <i>Arsen Zhazybekov</i>	G, Mostecká, Chomutov	<b>10</b>
<b>77.–80.</b> <i>Jonatán Gaus</i>	G, U Libeňského zámku, Praha	<b>8</b>
<b>77.–80.</b> <i>Katarína Gersová</i>	G Jura Hronca, Bratislava	<b>8</b>
<b>77.–80.</b> <i>Matyáš Křivánek</i>	G, Děčín	<b>8</b>
<b>77.–80.</b> <i>Natálie Machalová</i>	Gymnázium J. Blahoslava a SŠ ped	<b>8</b>
<b>81.–85.</b> <i>Albert Bakoč</i>	G Christiana Dopplera, Praha	<b>6</b>
<b>81.–85.</b> <i>Ondřej Brož</i>	G, Česká, České Budějovice	<b>6</b>
<b>81.–85.</b> <i>Jan Slosiarik</i>	G, U Libeňského zámku, Praha	<b>6</b>
<b>81.–85.</b> <i>Elena Stirparo</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>6</b>
<b>81.–85.</b> <i>Guglielmo Uva</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>6</b>
<b>86.–87.</b> <i>Dominik Marton</i>	G Poštová, Košice	<b>5</b>
<b>86.–87.</b> <i>Aneta Vostrá</i>	G, Český Brod	<b>5</b>
<b>88.–90.</b> <i>Filip Anger</i>	G Grösslingová, Bratislava	<b>4</b>
<b>88.–90.</b> <i>Niccolò D'Agostino</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>4</b>
<b>88.–90.</b> <i>Tobiáš Hrbáček</i>	G, U Libeňského zámku, Praha	<b>4</b>
<b>91.–92.</b> <i>Linda Kašická</i>	G sv. Jána Pavla II., Poprad	<b>2</b>
<b>91.–92.</b> <i>Mária Klíngová</i>	G sv. Jána Pavla II., Poprad	<b>2</b>
<b>93.</b> <i>Radim Gabriel</i>	G Volgogradská 6a, Ostrava	<b>0</b>

## Kategorie třetích ročníků

<b>jméno</b> <i>Student Pilný</i>	<b>škola</b> MFF UK	<b>Σ</b> <b>360</b>
1. <i>Jan Klír</i>	G B. Hrabala	361
2. <i>Radovan Lev</i>	G F. Palackého, Val. Mez.	350
3.–4. <i>Patrik Stercz</i>	G Poštová, Košice	289
3.–4. <i>Jan Strnad</i>	G, Postupická, Praha	289
5. <i>Martin Mičuch</i>	G Šrobárova, Košice	273
6. <i>Jiří Sýkora</i>	G, Trhové Sviny	264
7. <i>Monika Drexlerová</i>	G, Rožnov pod Radhoštěm	248
8. <i>Matej Kundrlik</i>	G Poštová, Košice	237
9. <i>Adam Harmanský</i>	G Poštová, Košice	229
10. <i>David Ševčík</i>	G, Uherské Hradiště	211
11. <i>Lukáš Jarábek</i>	G Grösslingová, Bratislava	208
12. <i>Jana Mária Žeňuchová</i>	G, P. Horova, Michalovce	206
13. <i>Veronika Plevná</i>	G, Cheb	204
14. <i>Filip Hošek</i>	Masarykovo klasické G, Říčany	155
15. <i>Michael Ruman</i>	G V. P. Tótha, Martin	123
16. <i>Maroš Jankovič</i>	G V. Nedožerského, SR	118
17. <i>Maamilián Ladislav Skuda</i>	G, Boskovice	108
18. <i>Cristina Mihaela Rău</i>	CNI Tudor Vianu, Romania	100
19. <i>Vladimíra Jiříčková</i>	G J. Vrchlického, Klatovy	96
20. <i>Tadija Jelesijević</i>	Gymnazija Kruševac	80
21. <i>Terézia Hanáková</i>	Gymnázium Janka Matúšku Galanta	79
22.–23. <i>Anežka Čechová</i>	G Brno, tř. Kpt. Jaroše	75
22.–23. <i>Richard Materna</i>	G Brno, tř. Kpt. Jaroše	75
24. <i>Lukáš Linhart</i>	G P. Bezruč, Frýdek-Místek	71
25. <i>Barbora Klusáková</i>	BG B. Balbína, Hradec Králové	70
26. <i>Veronika Bartáková</i>	Slovanské G, Olomouc	68
27. <i>Tomáš Vysoký</i>	G Poštová, Košice	67
28. <i>Martin Marciničák</i>	G Šrobárova, Košice	66
29.–30. <i>Nikola Beňáková</i>	G, P. Horova, Michalovce	61
29.–30. <i>Daniel Čtvrtečka</i>	G Christiana Dopplera, Praha	61
31. <i>Kamila Čídlinská</i>	G Botičská, Praha	59
32. <i>Jakub Savula</i>	G Jírovcova, České Budějovice	58
33.–34. <i>Štěpán Fröde</i>	G Dobruška	56
33.–34. <i>Lachyn Hydryova</i>	86th specialized school, TM	56
35. <i>Ondřej Kopeček</i>	G, Lesní čtvrť, Zlín	54
36. <i>Jan Šimáček</i>	Gymnázium Brno-Bystrc	48
37. <i>Matej Bryja</i>	G D. Tatarku, Poprad	45
38. <i>Ondřej Kadlec</i>	G, Moravský Krumlov	42
39. <i>Martin Kubánek</i>	G, Roudnice nad Labem	36
40. <i>Kateřina Šmádová</i>	Gymnázium Brno-Bystrc	35
41. <i>Klaudia Sýkorová</i>	G Poštová, Košice	31
42. <i>Magdalena Tyrmerová</i>	G a SOŠE, Sedlčany	27
43.–45. <i>Šimon Kiriak</i>	G Poštová, Košice	26
43.–45. <i>Tereza Lichtenbergová</i>	G Botičská, Praha	26
43.–45. <i>Jan Strmiska</i>	Mensa G, Praha 6	26
46. <i>Julie Křížková</i>	Wichterlovo G, Ostrava	25
47.–49. <i>Nicolas Matej</i>	G J. Tajovského, B. Bystrica	24
47.–49. <i>Timotej Vida</i>	G V. Nedožerského, SR	24
47.–49. <i>Jan Zrůst</i>	G Botičská, Praha	24
50.–51. <i>Šimon Kala</i>	G, Roudnice nad Labem	23

<b>jméno</b> <i>Student Pilný</i>	<b>škola</b> MFF UK	$\Sigma$ <b>360</b>
<b>50.–51.</b> <i>Iren Kishinevskaya</i>	Slovanské gymnázium Praha 5 - Ko	<b>23</b>
<b>52.</b> <i>Stanislav Barčák</i>	G Velká okružná, Žilina	<b>22</b>
<b>53.</b> <i>Vít Říha</i>	G Volgogradská 6a, Ostrava	<b>19</b>
<b>54.–55.</b> <i>Anna Kopecká</i>	G a SOŠ, Jilemnice	<b>18</b>
<b>54.–55.</b> <i>Jakub Svobodník</i>	G Volgogradská 6a, Ostrava	<b>18</b>
<b>56.</b> <i>Petr Dymanus</i>	G, Špitálská, Praha	<b>17</b>
<b>57.–58.</b> <i>Filippo Massi Benedetti</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>16</b>
<b>57.–58.</b> <i>Maurizio Polverari</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>16</b>
<b>59.</b> <i>Filip Rásó</i>	Leaf Academy	<b>15</b>
<b>60.</b> <i>Aneta Vašíčková</i>	G Dašická, Pardubice	<b>14</b>
<b>61.</b> <i>Lukáš Müller</i>	Podkrušnohorské G, Most	<b>12</b>
<b>62.–66.</b> <i>Ramazan Amanzhol</i>	Nazarbayev Int. (KZ)	<b>11</b>
<b>62.–66.</b> <i>Eduard Fedorčuk</i>	Evanjelické G JAK, Košice	<b>11</b>
<b>62.–66.</b> <i>Johana Kačurová</i>	Evanjelické G JAK, Košice	<b>11</b>
<b>62.–66.</b> <i>Pavol Alexander Komloš</i>	G Poštová, Košice	<b>11</b>
<b>62.–66.</b> <i>Adam Kuny</i>	G Jura Hronca, Bratislava	<b>11</b>
<b>67.–71.</b> <i>Kristýna Bělušová</i>	G J. Pivečky, Slavičín	<b>10</b>
<b>67.–71.</b> <i>Emir Garajayev</i>	86th specialized school, TM	<b>10</b>
<b>67.–71.</b> <i>Daniela Macková</i>	Katolícke gymnázium Š. Moyses	<b>10</b>
<b>67.–71.</b> <i>Tomáš Scholz</i>	G Chotěboř	<b>10</b>
<b>67.–71.</b> <i>Jan Vojta</i>	G Brno, tř. Kpt. Jaroše	<b>10</b>
<b>72.–74.</b> <i>Sára Herianová</i>	G a SOŠP, Čáslav	<b>9</b>
<b>72.–74.</b> <i>Klára Plchová</i>	G, Boskovice	<b>9</b>
<b>72.–74.</b> <i>Vojtěch Tyleček</i>	G Brno, tř. Kpt. Jaroše	<b>9</b>
<b>75.</b> <i>Julie Matulová</i>	G Dobruška	<b>8</b>
<b>76.–77.</b> <i>Mainak Chandra</i>	B. D. M. International, IN	<b>6</b>
<b>76.–77.</b> <i>Filip Neubauer</i>	Akademické G, Praha	<b>6</b>
<b>78.–79.</b> <i>Davide Arnesano</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>5</b>
<b>78.–79.</b> <i>Matyáš Pokorný</i>	G Jana Nerudy, Praha	<b>5</b>
<b>80.–81.</b> <i>Giancarlo Fuochi Tinarelli</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>3</b>
<b>80.–81.</b> <i>Soňa Hanáková</i>	G sv. Jána Pavla II., Poprad	<b>3</b>
<b>82.</b> <i>Zuzana Kallová</i>	G sv. Jána Pavla II., Poprad	<b>2</b>
<b>83.</b> <i>Sadiq Shaik</i>	Chelsea International Academy	<b>1</b>
<b>84.</b> <i>Leonardo Rizzolio</i>	Liceo Sci. Augusto Righi, Roma	<b>0</b>

## Kategorie čtvrtých ročníků

<b>jméno</b> <i>Student Pilný</i>	<b>škola</b> MFF UK	<b>Σ</b> <b>360</b>
1. <i>Jakub Hadač</i>	G V. Hlavatého, Louny	235
2. <i>Martin Švanda</i>	Arcibiskupské G, Praha	230
3. <i>Tereza Voltrová</i>	G Mikulášské n. 23, Plzeň	216
4. <i>Níkola Kadlečková</i>	G, nám. TGM, Zlín	197
5. <i>Tereza Hochmanová</i>	G Chotěboř	151
6. <i>Daniela Karpíšková</i>	Masarykovo G, Plzeň	147
7. <i>Jiří Vestfál</i>	G a SOŠPg Jeronýmova, Liberec	141
8. <i>Dzenan Midzic</i>	JU Gimnazija Bihac, BiH	133
9. <i>Katarína Horská</i>	G Jana Keplera, Praha	120
10. <i>Lukáš Létal</i>	G J. Škody, Přerov	99
11. <i>David Bálek</i>	G Legionářů, Příbram	91
12. <i>David Škrob</i>	SPŠ a VOŠT Brno	90
13. <i>Pavel Horský</i>	G, Brno-Řečkovice	88
14. <i>Jaromír Potůček</i>	G Jana Keplera, Praha	85
15. <i>Juraj Pavolko</i>	G, P. Horova, Michalovce	74
16. <i>Vladimíra Brabcová</i>	SPŠ Ostrov n. Ohří	70
17. <i>Jakub Vyskočil</i>	G P. Bezruč, Frýdek-Místek	65
18. <i>Jakub Ježek</i>	G B. Němcové, HK	57
19. <i>Filip Liška</i>	1. súkromné G v Bratislave	56
20.–22. <i>Patrik Jendele</i>	SPŠ stavební Plzeň	52
20.–22. <i>Radek Košinár</i>	G Brno, tř. Kpt. Jaroše	52
20.–22. <i>Rudolf Žižka</i>	G, Brno-Řečkovice	52
23. <i>Jonáš Dej</i>	Wichterlovo G, Ostrava	46
24. <i>Jan Lepič</i>	G, Strakonice	41
25. <i>Barbora Růžičková</i>	G, Moravská Třebová	39
26. <i>Adam Juttner</i>	G, Nový Jičín	31
27. <i>Emilija Zdravković</i>	Gimnazija Kruševac	28
28. <i>Maxim Arkhipov</i>	G, Voděradská, Praha	27
29. <i>Jakub Kopcil</i>	G Mikulášské n. 23, Plzeň	25
30. <i>Martin Bánský</i>	G Fr. Švantnera	23
31. <i>Jakub Gerža</i>	G Dobruška	21
32.–33. <i>Maxim Archipov</i>	G, Voděradská, Praha	20
32.–33. <i>Josef Lezna</i>	G dr. K. Polesného., Znojmo	20
34.–35. <i>Jan Engler</i>	G, Hodonín	19
34.–35. <i>Eduard Mrug</i>	G Grösslingová, Bratislava	19
36. <i>Dovletgeldi Merdanov</i>	86th specialized school, TM	16
37. <i>Martin Hraba</i>	G, Benešov	15
38. <i>Robin Rádek</i>	G Neumannova, Žďár n. S.	12
39. <i>Yashwinder Rajput</i>	Bhupindra Int. PS, India	11
40. <i>Michal Almáši</i>	G, Park mládeže, Košice	10
41. <i>Vojtěch Marek</i>	Biskupské G, Brno	9
42. <i>Anna Vodáková</i>	G, Litovel	5
43. <i>Natália Čigašová</i>	G Poštová, Košice	4
44.–46. <i>Fatma Amin</i>	G, Uherské Hradiště	3
44.–46. <i>Pragun Pudukoli</i>	NC for Excellence, India	3
44.–46. <i>Vojtěch Štěpán</i>	G, Benešov	3
47. <i>Tomaš Názler</i>	SPŠ a VOŠT Brno	2
48. <i>Katsiaryna Kireyeva</i>	Gymnasium No.20 of Minsk, BY	1



# MARTIN VANĚK A KOLEKTIV

## Fyzikální korespondenční seminář

### XXXVI. ročník – 2022/23

*Předmluva:* Martin Vaněk

*Náměty úloh:*

Karel Kolář (I.2, I.5, I.E, II.P, III.4, IV.4, V.2, V.3, VI.3, VI.5, VI.E), Jaroslav Herman (I.1, I.3, II.2, II.E, III.E, IV.3, IV.5, VI.2), Mikuláš Matoušek (I.S, II.S, III.S, IV.S, V.S, VI.S), Vojtěch David (II.3, IV.2, V.1, V.5), Daniela Dupkalová (III.1, III.2, V.P), Jan Benda (III.5, V.4), Marek Jankola (II.4, VI.4), Matěj Mezera (I.4, III.3), Jáchym Bártík (VI.P), Katarína Častulíková (VI.1), Kateřina Charvátová (V.E), Robert Gemrot (IV.1), Jindřich Jelínek (IV.P), Patrik Kašpárek (IV.E), Jozef Lipták (II.1), Adam Mendl (II.5), Kateřina Rosická (III.P), Matěj Rzehulka (I.P), Josef Trojan (V.E),

*Řešení úloh:*

Jaroslav Herman (I.1, I.3, II.2, II.E, III.E, IV.5, V.2, V.5, VI.2, VI.3), Mikuláš Matoušek (I.S, II.S, III.S, IV.S, V.S, VI.S), Vojtěch David (I.2, II.3, IV.2, V.1, V.5), Jan Benda (III.5, V.4, V.E), Marek Jankola (II.4, IV.3, VI.4), Kateřina Rosická (III.1, III.P, VI.E), Kateřina Charvátová (I.E, V.P), Juraj Jánošík (IV.P, VI.P), Patrik Kašpárek (III.3, IV.E), Jozef Lipták (II.P, III.4), Adam Mendl (I.2, II.5), Daniela Dupkalová (III.1, III.2), Jan Bajer (VI.1), Jáchym Bártík (I.5), Dávid Brodňanský (II.1), Lubor Čech (I.2), Michal Červeňák (I.P), Elena Chochořáková (IV.4), Josef Knápek (IV.1), Karel Kolář (V.3), Eliška Malá (V.2), Matěj Mezera (I.4), Jakub Mikeš (VI.3), Matěj Rzehulka (VI.5),

*O kvantové chemii:* Mikuláš Matoušek

*Legenda podzimního soustředění:* Veronika Hendrychová

*Legenda jarního soustředění:* Šimon Pajger

*Sazba:* Adam Krška

*Obrázky a grafy:* Tomáš Tuleja, Jaroslav Herman, Jakub Smolík

*Jazykové korektury:* Elena Chochořáková, Jaroslav Herman, Jiří Zelenka, Jakub Dřevo, Anežka Bakočová, Veronika Hendrychová, Denisa Zdvorilá, Vojtěch Votruba, Ema Wayan Danielová

*Oborné korektury:* Jaroslav Herman, Juraj Jánošík, Šimon Pajger, Elena Chochořáková, Patrik Kašpárek, Jindřich Jelínek, Adam Mendl, Kateřina Rosická, Jiří Zelenka, Jan Benda, Vojtěch David

---

Fyzikální korespondenční seminář je organizován studenty MFF UK. Je zastřešen Oddělením propagace a mediální komunikace MFF UK a podporován Ústavem teoretické fyziky MFF UK, jeho zaměstnanci a Jednotou českých matematiků a fyziků. Realizace projektu byla podpořena Ministerstvem školství, mládeže a tělovýchovy.

MARTIN VANĚK A KOLEKTIV  
**Fyzikální korespondenční seminář  
XXXVI. ročník – 2022/23**

Vydal MatfyzPress  
nakladatelství Matematicko-fyzikální fakulty  
Univerzity Karlovy  
Sokolovská 83, 186 75 Praha 8  
jako svou 687. publikaci.

Vytiskl ReproStředisko a nakladatelství MatfyzPress MFF UK

Publikace neprošla recenzním ani lektorským řízením.  
Nakladatelství neodpovídá za kvalitu a obsah textu.  
Vydáno pro interní potřebu MFF UK.  
Neprodejná publikace

236 stran, 57 obrázků  
Sazba písmem Latin Modern v programu X<sub>Y</sub>L<sup>A</sup>T<sub>E</sub>X  
Vydání první  
Náklad 500 výtisků

Praha 2023

ISBN 978-80-7378-493-5