

# 1. ATOMY – OD LEUKIPPA PO BERNOULLIHO ( VČ. KINETICKÉ TEORIE )

## Leukippos (500 – 440 př.n.l., Řecko)

- původce *atomismu* – vznikl přehodnocením učení předchozích materialistických filozofů
- podle atomismu existuje na světě nejen bytí, ale i nebytí neboli prázdno
- bytí = hmota složená z velkého množství malých částíček pohybujících se v prázdnu (v prostoru)
- jsou to nejjednodušší nedělitelné části hmoty, nevznikají, nezánikají a nepodléhají žádným vlivům
- vznik a zánik věcí je důsledkem vzájemného spojování a oddělování těchto částíček, které nazval *atomy*, podle řec. slova atomos (nesmírně malý, nedělitelný)
- formuloval zákon kauzality: nic nevzniká náhodou, vše má svůj důvod

## Démokritos (460 – 370 př.n.l., Řecko)

- žák Leukippa, řecký před Sokratovský filozof
- protože nezaložil vlastní školu, jeho učení se přímo nedochovalo
- podle Leukippových základů vytvořil *ucelený důsledně materialistický systém*, jehož základem jsou nekonečné prázdno a v něm se pohybující nekonečné množství atomů
- atomy jsou nevzniklá, neviditelná, nedělitelná a nezničitelná tělíška, ze kterých se vše skládá
- pokud si odpovídají, tak se spojují – tím všechno vzniká
- takto vzniklé objekty se pak od sebe liší díky různorodému tvaru, poloze a uspořádání atomů
- pokud má něco zaniknout, musí zapůsobit vnější síla, která atomy od sebe rozloučí a dá je opět do pohybu, díky němuž mohou v budoucnu vytvořit zase něco jiného
- rozlišil primární (tíha, hustota, ...) a sekundární vlastnosti (barva, vůně, ...), které k věcem přidáváme sekundárně my díky tomu, jak je vnímáme

## Kanáda (Indie)

## Diogénes Laertios (Řecko)

- počátkem všeho jsou atomy a prázdny prostor, všechno ostatní je jen domněnka
- svět je neomezené množství (vznikají a zanikají)
- atomy jsou neomezené co do velikosti a počtu a jsou unášeny ve vesmíru vířivým pohybem, čímž se vytváří složeniny, oheň, voda, vzduch, ...
- atomy jsou neporušitelné a neměnné pro svou tvrdost

## Lucretius (99 – 55 př.n.l., Itálie)

- římský básník, od něhož máme podrobnější informace o řeckém atomismu
- atomy jsou nedělitelné, věčné, neviditelné a ovlivňují je jen nárazy a tíže
- jsou bez barvy, tepla, chuti, zápachu a citu a je jich nekonečně mnoho
- pohybují se v prázdny prostoru stále Brownovým pohybem
- lehčí látky obsahují více prázdna
- pevné látky drží při sobě háčky
- skupenství je určeno tvarem atomů
- atomární je světlo i zvuk

### Isaac Newton (1643 – 1727)

- na počátku Bůh vytvořil hmotu jako pevné, masivní, tvrdé a neproniknutelné částice
- tyto částice byly pevné a neporovnatelně tvrdší než jakékoli pórovité těleso z nich složené
- jsou tak tvrdé, že se nikdy nerozbijí na kousky – neexistuje žádná síla, která by je rozbila
- složením mohou vytvářet tělesa
  
- doted' se jednalo o „metafyzickou“ koncepci
- obecným problémem je dělitelnost a možnost změny částic
- věda vyžaduje přesnější formulaci a schopnosti předpovídat některé pozorované výsledky
- k atomární teorii vedly celkem dvě cesty – fyzikální Bernoulliho a chemická Daltonova

### Daniel Bernoulli (1700 – 1782)

- r. 1738 – **počátek kinetické teorie** = teorie, která spojuje makroskopicky pozorovaný stav látky s mikroskopickým pohybem částic, z nichž je látka složena
- podle této teorie přísluší pohybu každé částice určitá energie, která je úměrná teplotě látky
- mějme píst – tlak při poloze pístu v E je roven P a při poloze e je roven p
- potom platí :  $\frac{eC}{EC} = s$
- tlak se zvětšuje zvětšením počtu částic u pístu a zvětšením frekvence srážek
- je-li počet částic pístu  $\frac{1}{2}$  krát větší, potom je frekvence častí větší o faktor  $\frac{(D-d)}{\left(Ds - ds^{\frac{2}{3}}\right)}$
  
- kde D ... střední vzdálenost částic  
d ... rozměr částic
- celkem :  $\frac{p}{P} = \frac{(D-d)}{\left(Ds - ds^{\frac{2}{3}}\right)}$
  
- pokud je  $d \lll D$ , platí:  $\frac{p}{P} = \frac{1}{s} = \frac{V}{v}$
- z tohoto vztahu lze odvodit **Boyleův-Mariottův zákon** = vztah pro izotermický děj probíhající v ideálním plynu stálé hmotnosti, podle kterého je součin tlaku a objemu plynu stálý

### Kinetický výklad tlaku

- **tlak** = střední výsledek nárazů molekul na stěnu
- uvažujeme dutinu tvaru kvádra s plynem
- pro změnu hybnosti při nárazu jedné částice o rychlosti v platí :  $\Delta p = 2mv_x$  (stěna kolmá na osu x)
- pro dobu mezi nárazy :  $\Delta t = 2 \frac{l_x}{v_x}$
- kde  $l_x$  ... vzdálenost stěn ve směru x
- ze vztahů plyne pro střední sílu od jedné částice :  $F_i = \frac{\Delta p}{\Delta t} = \frac{mv_x^2}{l_x}$

- pro celkovou sílu platí vztah :  $F = \sum F_i = \frac{m}{l_x} \sum v_x^2 = \frac{m}{l_x} \frac{1}{3} \sum v^2 = \frac{1}{3} NW^2 \frac{m}{l_x}$   
kde  $W$  ... střední kvadratická rychlost
- tlak je dán vztahem :  $p = \frac{F}{S} = \frac{1}{3} \frac{mNW^2}{l_x l_y l_z}$   
kde  $S = l_y l_z$  ... velikost stěny
- dále platí :  $pV = \frac{1}{3} mNW^2$   
kde  $V = l_x l_y l_z$
- střední energie jedné částice je dána :  $\varepsilon = \frac{1}{2} mW^2$
- pro celkovou energii částic platí :  $E = \varepsilon N = \frac{1}{2} mNW^2$
- z výše uvedeného :  $pV = \frac{2}{3} E$ , resp. pro 1 mol platí :  $pV = \frac{2}{3} E = RT$   
kde  $R = 8,31451 \text{ J/(molK)}$  ... molární plynová konstanta
- teplota plynu je tedy úměrná jeho střední kinetické energii
- tepelné jevy interpretujeme na základě pohybu částic

## 2. ATOMY – OD DALTONA PO BOHRA

### John Dalton (1766 – 1844)

- r. 1801 – tzv. **zákon parciálních tlaků**: každý plyn ve směsi netečných plynů má právě takový parciální tlak, jako by celý objem vymezený směsí při téže teplotě zaujímal sám
- r. 1803 – **atomová teorie** (zakladatelem moderní atomistiky):
  - a) prvky se skládají z velmi malých dále nedělitelných částic – atomů
  - b) všechny atomy jednoho prvku jsou stejné (speciálně mají stejnou váhu) a naopak atomy různých prvků jsou různé
  - c) v průběhu chem. dějů se atomy spojují, oddělují i přeskupují, nemohou ale vznikat ani zanikat
  - d) slučováním prvků vznikají chemické sloučeniny
- důsledky teorie:
  - a) poměry hmotností prvků tvořících sloučeninu jsou stálé (Josef Proust)
  - b) vytváří-li prvky více sloučenin, jsou poměry výskytu dané látky dané malými celými čísly (existuje-li 1 podvojná sloučenina, je typu AB; jsou-li 2, jsou typu AB a A<sub>2</sub>B nebo AB<sub>2</sub>, apod.)
- vytvořil i soustavu chemických značek, ale ta se neujala

### Amedeo Avogadro (1766 – 1856)

- jedním ze zakladatelů fyziky plynů
- byl synem zámožného šlechtice, vystudoval práva, ale začal se věnovat svému koníčku – fyzice
- jeho práce byla jedním ze základních pilířů moderní chemie

- r. 1811 – **Avogadrův zákon**: ideální plyny obsahují v objemové jednotce plynu při stejném tlaku a stejné teplotě stejný počet molekul
- dokázat se ho ale podařilo až o půlstoletí později na základě kinetické teorie plynů
- **Avogadrova konstanta** = počet částic v jednotkovém látkovém množství (v 1 molu) definovaný jako počet atomů v 0,012 kg izotopu uhlíku C
- standardní množství látky bylo nejprve určeno vůči 1 g vodíku, pak 16 g kyslíku a dnes uhlíku
- r. 1865 – konstantu určil J. J. Loschmidt (po Avogadrovi je pouze pojmenována)
- příslušné hmotnosti se označují jako molární hmotnosti a jsou podle nich uspořádány prvky v PSP

### Albert Einstein (1879 – 1955)

- r. 1905 – zkoumal **Brownův pohyb** = náhodný pohyb mikroskopických částic v kapalině nebo plynu
- vysvětlení pohybu: molekuly v roztoku se vlivem tepelného pohybu neustále srážejí, přičemž směr a síla těchto srážek jsou náhodné – díky tomu je náhodná i okamžitá poloha částice
- s použitím kinetické teorie ukázal, že tento pohyb poskytuje empirický důkaz reality atomů
- předtím byly atomy uznávány jako představa, ale fyzikové a chemikové se přeli, zda existují
- pravděpodobnost výskytu částičky v kapalině splňuje rovnici difúze :  $\frac{\partial p}{\partial t} = D \frac{\partial^2 p}{\partial z^2}$
- tato rovnice má řešení :  $p(z,t) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{z^2}{\pi D t}} e^{-\frac{z^2}{4Dt}}$
- střední uražená vzdálenost se rovná :  $\sqrt{\langle z^2 \rangle} = \sqrt{\int z^2 p(z) dz} = \sqrt{2Dt}$
- koeficient difúze má tvar :  $D = \frac{RT}{N} \frac{1}{6} \pi r \eta$ 
  - kde R ... molární plynová konstanta
  - T ... teplota
  - N ... Avogadrovo číslo
  - r ... poloměr částičky
  - $\eta$  ... viskozita prostředí
- z rovnic vyjde, že částice o rozměru 1 mm urazí ve vodě za dobu 1 s cca 1 mm
- zabýval se i **fotoelektrickým efektem** = jev, při němž vzájemným působením elmg. záření a hmoty dochází k pohlcování fotonů a uvolňování elektronů
- fotoelektrický jev je vysvětlen ukázal, pokud se předpokládá, že se světlo skládá z kvant
- tato představa byla ale v rozporu s vlnovou teorií světla, která vyplývala z MR pro elektromag., a s představou o nekonečné dělitelnosti energie
- r. 1921 – dostal za práci Nobelovu cenu
- teorie světelného kvanta byla předzvěstí **vlnově-částicové duality** = představa, že fyzikální systémy mohou vykazovat jak vlnové, tak i částicové vlastnosti

### Jean Baptiste Perrin (1870 – 1942)

- přesvědčil vědeckou veřejnost o existenci atomu
- r. 1908 – 1913 – zkoumal Brownův pohyb a potvrdil teorii Einsteina-Smoluchowskiho
- zjistil, že se částice emulsí a suspensí chovají podobně jako molekuly plynu
- vyslovil domněnku, že proton je složen z neutronu a pozitronu
- řadou pokusů určil rozměr atomu na cca 0,1 nm a Avogadrovo číslo cca  $6,8 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$

- **současné hodnoty atomárních konstant** (Codata 2002)

- a) Avogadrovo číslo :  $6,022 \cdot 10^{23} \text{ mol}^{-1}$
- b) atomární hmotnost :  $1,661 \cdot 10^{-27} \text{ kg}$
- c) standardní hustota plynu při 273,15 K a 101,325 kPa :  $2,687 \cdot 10^{25} \text{ kg/m}^3$
- d) standardní molární objem :  $22,414 \cdot 10^{-3} \text{ m}^3/\text{mol}$
- e) Bohrov poloměr :  $0,529 \cdot 10^{-10} \text{ m}$

### Michael Faraday (1791 – 1867)

- zjistil, že el. proud procházející vodičem může vyvolat magnetickou sílu
- objevil elektromagnetickou indukci
- zabýval se i **elektrolýzou** = jev, způsobený průchodem el. proudu kapalinou, při kterém dochází k chemickým změnám na elektrodách
- množství látky vyloučené při elektrolýze je úměrné prošlému náboji
- model :  $M = Nm$  a  $Q = Ze$
- z toho plyne :  $M = \frac{m}{ze} Q$ 
  - kde M ... hmotnost
  - N ... počet atomů
  - m ... hmotnost atomu
  - Q ... náboj
  - z ... počet elementárních nábojů
  - e ... elementární náboj

### Antoine Henry Becquerel (1852 – 1908)

- r. 1896 – zkoumal magnetismus, fosforescenci a polarizaci světla, objevil přirozenou radioaktivitu uranu a jeho solí (původně tzv. Becquerelovy paprsky)
- zabýval se paprsky alfa (+) a beta (–), neutrální paprsky gama byly objeveny až později
- při radioaktivních procesech se mění emitující prvek na nový
- spolu s manželi Curierovými dostal Nobelovu cenu

### John Joseph Thomson (1856 – 1960)

- r. 1897 – zkoumal **katodové záření** = proud elektronů uvolněných termoelektrickou emisí z povrchu katody a urychlovaných směrem k anodě (tomu odpovídá pohyb v elstat. i mag. poli)
- určil, že je měrný náboj cca 1000krát větší než náboj částic zjištěný u elektrolytů
  - a) v elektrickém poli je  $e/m = 1 - 3 \cdot 10^{11} \text{ C/kg}$
  - b) v magnetickém poli je  $e/m = 0,6 - 0,9 \cdot 10^{11} \text{ C/kg}$
- dnes je hodnota měrného náboje  $1,759 \cdot 10^{11} \text{ C/kg}$
- je-li měrný náboj stejný jako náboj u částic v elektrolytu, mají částičky v katodovém záření cca 1000krát menší hmotnost než tyto částice
- objevil **elektron**, jehož hmotnost je 1840krát menší než vodíku a jeho náboj je  $1,602 \cdot 10^{-19} \text{ C}$
- r. 1904 – „**puďinkový**“ **model atomu**: koule představuje hmotu atomu s kladným nábojem a rozinky znázorňují elektrony
- jedná se o jednoduchý model atomu, který byl navržen tak, aby byl atom neutrální – elektrony se kompenzují kladným nábojem

- předpokládal, že je kladný náboj (i jeho hmotnost) rovnoměrně rozložen v objemu atomu
- planetární diskový model Nagaoa označil za nesmyslný

### Ernest Rutherford (1871 – 1937)

- nastoupil po J. J. Thomsonovi na místo profesora fyziky v Cambridge
- r. 1911 – **planetární model atomu**: uprostřed je těžké kladně nabitě jádro, které je obklopené elektrony v počtu, který je u různých prvků různý
- předpokládal, že je všechen kladný náboj soustředěn v jádře = oblast, která zaujímá velmi malý objem ve srovnání s objemem atomu a ve kterém je většina hmotnosti atomu
- počet protonů v jádře je roven počtu elektronů a odpovídá pořadí prvků v PSP
- problém planetárního modelu:
  - podle modelu je elektron na orbitu ve stavu dynamické rovnováhy
  - zrychlený pohyb náboje v atomu ale musí být doprovázen vyzařováním elektromagnetických vln – energie elektronu by se tedy při vyzařování zmenšovala tak, že by se neudržel na orbitu a tím pádem by přestal být stabilní
- r. 1932 – objevil **neutron**, částici, jejíž existenci již několik let předvídal
- rozpracoval teorii radioaktivního rozpadu prvků a zformuloval **zákon radioaktivního rozpadu**
- r. 1919 – uskutečnil první umělou radioaktivní přeměnu atomového jádra bombardováním izotopu dusíku částicemi  $\alpha$  – **1. umělá transmutace prvku** (základ fyziky atomového jádra)
- uvědomil si, že  $\alpha$  částice lze použít jako prostředek ke zkoumání atomu
- s Geigerem a Marsdenem provedl experiment:
  - ze zdroje uloženého v dutině oloveného bloku se emitují  $\alpha$  částice, které prochází kanálkem
  - úzký svazek částic dopadá až na zlatou fólii
  - částice, které fólií prošly a byly jí rozptýleny se dostanou na stínítko
  - na stínítku je nanášena speciální látka (scintilátor), která při dopadu nabitě částice nebo elektromagnetického záření vyvolá záblesk (ten se pozoruje mikroskopem)
  - mezi stínítkem a fólií musí být velké vakuum, aby nedocházelo k dodatečnému rozptylu částic
  - experiment ukázal, že téměř všechny  $\alpha$  částice, které prošly fólií, si zachovaly původní směr pohybu nebo byly odkloněny o velmi malý úhel
  - závěr: při průchodu těžké a kladně nabitě částice elektronovým obalem, nemůže dojít k jejímu výraznějšímu odklonu od původního směru
- odvodil vzorec pro závislost počtu částic  $\alpha$  rozptýlených v určitém úhlu  $\varphi$  na energii těchto částic a na náboji jádra
- pravděpodobnost tohoto procesu je vyjádřena **účinným průřezem** = pravděpodobnost, že dojde k rozptylu do určité části prostorového úhlu  $d\Omega$ , který vymezuje  $\varphi$
- počet částic rozptýlených o úhel  $\varphi$  do jednotkové plochy je úměrný 
$$\frac{1}{\sin^4\left(\frac{\varphi}{2}\right)}$$

### Niels Bohr (1885 – 1962)

- r. 1913 – **vlastní model atomu**, ve kterém řeší problém záření v Rutherfordově modelu
- jeho teorie měla za cíl vysvětlit stabilitu atomů a elektronů na orbitalech a kvantový charakter emise

- **Bohrovy postuláty:**

- a) postulát stacionárních stavů – v atomu existují stacionární stavy, každému přísluší energie  $E_n$   
b) při přechodu elektronu z vyšší na nižší orbital se vyžáří energie o velikosti :  $W = \frac{1}{2} \frac{eE}{4\pi\epsilon_0 r}$  a

$$\text{frekvenci: } \omega = \frac{4\pi\epsilon_0}{eE} \frac{\sqrt{(2W)^3}}{\sqrt{m}}, \text{ přičemž platí podmínka vyzařování: } h\Omega = W(n_2) - W(n_1)$$

kde  $W$  ... energie

$e$ , resp.  $E$  ... náboj elektronu, resp. jádra

$r$  ... poloměr dráhy

$m$  ... hmotnost elektronu

- c) kvantování orbitalů – ve stacionárním stavu musí elektron pohybující se po orbitu nabývat diskrétních kvantových hodnot momentu hybnosti

- platí kvantovací podmínka, že energie  $W = \frac{1}{2} nh\omega$  dá  $W = \frac{1}{2} \frac{m(eEh)^2}{(4\pi\epsilon_0)}$ ,  $\omega = \frac{m(eE)^2 (nh)^3}{(4\pi\epsilon_0)^2}$ ,

$$r = \frac{4\pi\epsilon_0}{meE(nh)^2}$$

- takto získané stavy považujeme za stacionární stavy bez vyzařování  
- stav s největší vazebnou energií je **stav základní**  
- číselné hodnoty získaných veličin při  $e = E$   
a) energie: 13 eV  
b) frekvence:  $3,9 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$   
c) rozměr:  $0,55 \cdot 10^{-10} \text{ m}$   
- kvantovací podmínka pro moment hybnosti vyplývá z faktu, že na orbital délky  $2\pi r$  se může vejít jen celistvý počet de Broglieho délek  $\lambda$  ( $2\pi r = n\lambda$ )  
- pro hybnost elektronu platí :  $p = \frac{2\pi h}{\lambda}$   
- z toho plyne, že může mít **kvantovací podmínka** tvar :  $mvr = nh$

### 3. STRUKTURA KVANTOVÉ TEORIE

- **kvantová teorie** = souhrn fyzikálních teorií, které (na rozdíl od klasické fyziky) nepopisují stav systému jen přiřazením určitých hodnot fyzikálních veličin, ale předpokládají i existenci stavů  
- popisuje vlastnosti a chování mikročástic, fyzikálních polí a jejich vzájemnou interakci  
- vychází ze základního předpokladu, kterým je atomistické složení energie  
- charakteristické rysy teorie: kvantová struktura fyzikálních veličin, statistické předpovědi pozorovatelných jevů, korpuskulárně vlnový dualismus, ...  
- součástí kvantové teorie je teorie měření

#### Osobnosti

- **Max Planck** (1858 – 1947) – zakladatel kvantové teorie; zjistil, že se energie šíří po kvantech; autorem Planckova vyzařovacího zákona (Nobelova cena)

- **Albert Einstein** (1879 – 1955) – na základě poznatků Planckova vyzařovacího zákona vysvětlil fotoefekt
- **Niels Bohr** (1885 – 1962) – ve spolupráci s Heisenbergem založil tzv. kodaňskou školu kvantové teorie; dospěli k názoru, že atomové jevy jsou jak částicového, tak i vlnového charakteru
- **Luis de Broglie** (1892 – 1987)
- **Werner Heisenberg** (1901 – 1976) – autorem principu neurčitosti: se stejnou přesností nelze spočítat dráhu a rychlost elektronů, tzn. polohu a energii (Nobelova cena)
- **Erwin Schrödinger** (1887 – 1961) – formuloval nerelativistickou vlnovou rovnici pro popis hmotných částic, tzv. Schrödingerova rovnice (Nobelova cena)
- **Max Born** (1882 – 1970) – statisticky interpretoval vlnovou funkci; dědeček Olivie Newton-John
- **Pascal Jordan** (1902 – 1980)
- **Wolfgang Pauli** (1900 – 1958) – předpověděl existenci neutrina; autor Pauliho vylučovacího principu: žádné dva fermiony nemohou být ve stejném kvantovém stavu
- **Paul Dirac** (1902 – 1984) – předpověděl existenci pozitronu; vypracoval základ kvantové teorie záření; vytvořil relativistickou teorii pohybu elektronu

### Vlnová funkce

- klasická fyzika popisuje stav systému v daném čase pomocí sady hodnot vybraných měřitelných veličin, které se v kvantové fyzice označují jako **pozorovatelné veličiny** (např. stav hmotného bodu je úplně určen, známe-li jeho polohový vektor a vektor hybnosti)
- řešením pohybové rovnice pak můžeme určit, jaký bude stav systému v jiných časech
- pojem **stav systému** v kvantové teorii je složitější
- rozdílem oproti klasické fyzice je možnost, že vybraná pozorovatelná veličina v daném stavu nemá konkrétní hodnotu, ale při měření veličiny můžeme dostat různé výsledky s různou ppstí
- pravděpodobnost naměření hodnoty  $x$  veličiny  $X$  můžeme označit  $P(x)$
- místo jedné hodnoty polohy  $x_0$  musíme k popisu systému udát pravděpodobnosti nalezení částice v každém bodě prostoru
- ukazuje se, že nestačí udávat pravděpodobnostní funkci  $P(x)$ , ale komplexní amplitudu  $\psi(x)$ , přičemž  $P(x) = |\psi(x)|^2$  – amplituda  $\psi$  se pak nazývá vlnová funkce
- **vlnová funkce** = funkce sloužící pro matematický popis fyzikálního systému
- říká o hustotě pravděpodobnosti nalezení částice v okolí bodu
- je řešením kvantové pohybové rovnice, kterou může být např. Schrödingerova rovnice
- lze z ní určit pouze pravděpodobnost, s jakou naměříme určitou hodnotu veličiny
- volné částice jsou popsány postupnými rovinnými vlnami  $\psi(r,t) = Ae^{\frac{i}{\hbar}(pr-Et)} = A \cos(\vec{k}\vec{r} - \omega t)$ ,  
kde  $E = \hbar\omega$  a  $p = \hbar k = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$  jsou vztahy mezi energií, frekvencí, hybností a vlnovým vektorem
- typické hodnoty :  $\lambda = \frac{2\pi\hbar}{mv} = \frac{2\pi\hbar}{\sqrt{2mE}}$ 
  - a) elektron:  $m = 10^{-30}$  kg ,  $E = 1$  eV ,  $\lambda = 1$  nm
  - b) proton:  $m = 1,7 \cdot 10^{-27}$  kg ,  $E = 1$  MeV ,  $\lambda = 28$  fm
  - c) člověk:  $m = 80$  kg ,  $v = 2$  m/s ,  $\lambda = 4 \cdot 10^{-36}$  m



- vlnové chování se projeví, pokud je vlnová délka dostatečně dlouhá – delší než typické rozměry ve zkoumaném případě
- důsledky vztahu energie–frekvence pro světlo: dlouhé vlny jsou na leccos krátké
- např. u světla nemůžeme pozorovat ohyb, protože je příliš malá jeho  $\lambda$

### Elektronový mikroskop

- byl sestaven Ernestem Ruskem na základě skutečnosti, že se elektrony chovají jako vlny
- je obdobou optického mikroskopu, kde jsou fotony nahrazeny elektrony a optické čočky čočkami elektromagnetickými
- využívá se toho, že vlnové délky elektronů jsou o mnoho řádů menší než fotonů viditelného světla
- z tohoto důvodu má elektronový mikroskop o mnoho řádů menší rozlišovací schopnost a může tedy dosáhnout mnohem většího zvětšení (až 1000000 krát)
- existují dva typy mikroskopů:
  - a) **transmisní** (prozařovací) **mikroskop** (TEM) – nepohyblivý elektronový svazek; detekce elektronů prošlých vzorkem na fluorescenčním stínítku; zkoumají se jím tenké vzorky, urychlení až 300 kV, vysoké vakuum, rozlišení až 0,1 nm
  - b) **rastrovací** (řádovací) **mikroskop** (SEM) – pohyblivý svazek elektronů; zobrazení povrchu vzorku pomocí sekundárních nebo odražených elektronů; vzorky libovolné, urychlení jen 30 kV, vysoké vakuum, rozlišení až 1 nm

### Hilbertův prostor

- v obecném případě, kdy není částice volná, je tvar vlnové funkce složitější
- je-li v systému více částic, mají jednu společnou vlnovou funkci
- jsou-li částice navíc stejné, je vlnová funkce symetrická (bosony), resp. antisymetrická (fermiony)
- pro detailnější pochopení kvantové teorie se uvažuje obecnější matematický aparát založený na lineární algebře
- prostor vlnových funkcí je vektorovým prostorem :  $\psi = c_1\psi_1 + c_2\psi_2$   
kde  $c_1, c_2 \dots$  komplexní čísla
- sčítání vlnových funkcí :  $(\psi + \phi)(r) = \psi(r) + \phi(r)$
- násobení vlnových funkcí číslem :  $(c\psi)(r) = c\psi(r)$
- skalární součin vlnových funkcí:  $(\psi, \phi) = \int \psi^*(r)\phi(r)d^3r$ , přitom platí  $(\phi, \psi) = (\psi, \phi)$  a  $(\psi, \psi) \geq 0$
- systémům se přiřazuje tzv. **Hilbertův prostor** = vektorový prostor se skalárním součinem, ve kterém lze zavést (konečnou nebo nekonečnou) ortonormální bázi
- každý vektor představuje možný stav systému a odpovídající vlnovou funkci
- výhodou popisu je zjednodušení vzorců, kde místo integrálních vztahů vystupuje jen skalární součin stavových vektorů

### Měření + operátory

- každé měřené veličině je přiřazena ortonormální báze, každému vektoru potom odpovídá hodnota měřené veličiny
- v obecném případě je vlnová funkce lineární kombinací vektorů báze  $\psi_i$ :  $\psi = \sum c_i \psi_i$
- v tomto případě zjistíme při měření hodnotu  $a_i$  odpovídající vektoru  $\psi_i$  s pravděpodobností  $|c_i|^2$

- bázi a hodnoty zadáváme obvykle pomocí operátorů, které označujeme stříškou a který je zobrazením Hilbertova prostoru
- uvažované operátory jsou lineární, tzn.  $\widehat{A}(c_1\psi_1 + c_2\psi_2) = c_1\widehat{A}\psi_1 + c_2\widehat{A}\psi_2$
- hodnoty, pro které existuje nenulové řešení, se jsou **vlastní hodnoty** a platí pro ně:  $\widehat{A}\psi = a\psi$
- příslušné vektory nazýváme **vlastními vektory** operátoru
- každé pozorovatelné veličině lze přiřadit tzv. **hermitovský operátor** = operátor komplexně sdružený sám se sebou
- pro něj jsou vlastní hodnoty reálná čísla a vlastní vektory tvoří ortonormální bázi
- **základní operátory kvantové mechaniky** se získávají z operátorů polohy a hybnosti
  - a) operátor polohy  $\widehat{r} = (\widehat{x}, \widehat{y}, \widehat{z})$ , kde pro x-složku platí  $\widehat{x}\psi = x\psi$  (analogicky pro y, z)
  - b) operátor hybnosti  $\widehat{p} = -i\hbar\nabla$ , tj. např. pro x-složku  $p_x = -i\hbar\frac{\partial}{\partial x}$
- **vlastní hodnoty a vlastní funkce operátorů**
  - a) poloha – vlastní funkce pro hodnotu X :  $\psi_x = \delta(x - X)$ 
    - platí rozvoj:  $\psi(x) = \int \psi(X)\delta(x - X)dX$ , z něhož plyne, že je hustota pravděpodobnosti nalezení částice v okolí místa X dána vztahem  $\psi^*(X)\psi(X)$
    - kde X ... parametr (místo, ve kterém se počítá)
    - x .... spojitá proměnná
    - $\psi(x)$  ... amplituda v daném místě
  - b) hybnost – vlastní funkce pro hodnotu P :  $\psi_p = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}e^{\frac{i}{\hbar}Px}$ 
    - platí rozvoj :  $\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \int a(P)e^{\frac{i}{\hbar}Px} dP$ , z něho plyne, že je hustota ppsti zjištění hybnosti v okolí hodnoty P dána vztahem  $a^*(P)a(P)$  a je v celém prostoru stejná
- tyto **operátory nekomutují**, tzn. že nelze měřit současně obě pozorovatelné veličiny
- pokud operátory komutují, platí :  $\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} = 0$ ; v opačném případě  $\widehat{A}\widehat{B} - \widehat{B}\widehat{A} \neq 0$
- čím přesněji určíme jednu z nekomutujících veličin, tím nepřesněji určíme druhou, a naopak
- tyto operátory nemohou sdílet vlastní vektory a platí pro ně :  $\widehat{x}_i\widehat{p}_j - \widehat{x}_j\widehat{p}_i = i\hbar\delta_{ij}$
- pro neurčitost polohy  $\Delta x$  a hybnost  $\Delta p_x$  platí :  $\Delta x\Delta p_x \geq \frac{1}{2}\hbar$  (analogicky pro y, z)
 

kde  $\Delta x, \Delta p_x$  ... střední kvadratické odchylky
- optimální stav je pro :  $\Delta p_x = \sqrt{\hbar}$
- mírou neurčitosti je tedy Planckova konstanta  $\hbar$
- **hamiltonián** = matematicky se jedná o hermitovský diferenciální operátor nad Hilbertovým prostorem komplexních vlnových funkcí
- je to operátor energie, který popisuje vývoj vlnové funkce systému
- klasická definice :  $E = \frac{1}{2}mv^2 + V(r) = \frac{p^2}{2m} + V(r)$ , tzn. energie = kinetická + potenciální energie
- kvantová definice :  $\widehat{H} = \frac{\widehat{p}^2}{2m} + V(\widehat{r})$

### Schrödingerova rovnice

- je základní vlnovou rovnicí nerelativistické kvantové mechaniky
- jejím relativistickým zobrazením je Diracova a Kleinova-Gordonova rovnice
- **časová rovnice** říká, jak se mění poloha a hybnost v určitém čas
- používá se k výpočtu pravděpodobnosti kvantových přechodů
- **stacionární rovnice** je rovnicí pro určení všech fyzikálně možných energetických stavů
- časová rovnice :  $ih \frac{\partial}{\partial t} \psi = \hat{H} \psi$
- vlnová funkce určující pravděpodobnosti výsledků měření se mění deterministicky
- protože platí:  $ih \frac{\partial}{\partial t} \psi_E = \hat{H} \psi_E = E \psi_E$  , je  $\psi_E = \psi(r) e^{-\frac{i}{\hbar} Et}$  , jsou vlastní stavy operátoru energie stacionární energetické stavy  
kde  $\psi_E$  ... vlastní funkce operátoru energie

## 4. NEKONEČNÁ A PARABOLICKÁ JÁMA, BARIÉRA

### Nekonečná hranatá jáma

- **potenciálová jáma** = průběh potenciálu, kdy v nějakém prostorovém intervalu klesne jeho hodnota
- uvnitř jámy jsou diskrétní hodnoty energie
- je to znázornění výsledného potenciálu v okolí atomového jádra, který působí na nabitou částici
- šířka jámy určuje dosah jaderné síly
- mezi hybností a vlnovou délkou platí :  $p = \frac{2\pi\hbar}{\lambda}$
- podmínka přípustnosti :  $L = n \frac{\lambda}{2}$  (tzn. jedná se o násobení půlvlnou)
- z rovnic můžeme získat vztah pro diskrétní energii :  $E = \frac{p^2}{2m} = \frac{4\pi^2 \hbar^2}{2m\lambda^2} = \frac{(n\pi\hbar)^2}{2mL^2}$
- příslušné řešení zapisujeme ve tvaru :  $\psi(x) = A \sin\left(\frac{p}{\hbar} x\right) = A \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right)$

### Parabolická jáma

- pro potenciální energii platí :  $V(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{1}{2} m\omega^2 x^2$
- vztah pro dovolenou energii má tvar :  $E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2}\right)$

- úpravou rovnic dostaneme :  $m\omega^2 l^2 = h\omega$ , odkud lze vyjádřit vztah pro typickou délku :  $l = \sqrt{\frac{h}{m\omega}}$
- pokud si zvolíme  $x = \xi l$ , dostaneme řešení ve tvaru :  $\psi = H_n(\xi) e^{-\frac{1}{2}\xi^2}$   
kde  $H_n \dots$  hermitovské polynomy  
n ... stupeň polynomu
- pro polynomy platí :  $H_0(y) = 1$ ,  $H_1(y) = y$ ,  $H_2(y) = 4y^2 - 2$ ,  $H_3(y) = 8y^3 - 12y$
- **aplikace jam:** struktura atomu, struktura molekuly, struktura jádra

### Potenciálová bariéra

- = průběh potenciálu, kdy se v nějakém prostorovém intervalu prudce zvýší jeho hodnota
- interpretuje se i jako největší změna energie reakční soustavy během chemické reakce, kdy vzniká aktivovaný komplex molekul vstupujících do reakce
- po jejím překonání se aktivovaný komplex rozpadá na reakční produkty
- má význam v kvantové mechanice, kde existuje nenulová pravděpodobnost průchodu částice potenciálovou bariérou, jejíž energie je vyšší než energie částice
- **tunelový jev** = jev umožňující částici proniknout potenciálovou bariérou i tehdy, když je energie částice menší než výška potenciálové bariéry
- využití tunelování: v jaderné fyzice, v elektronice (tunelová dioda), apod.
- vlna ve tvaru  $e^{\frac{i}{h}\int p dx}$ , kde  $p = \sqrt{2m(E-V)}$  dá faktor  $e^{-\frac{1}{h}\int \sqrt{2m(V-E)} dx}$   
kde V ... potenciální energie  
$$p = \sqrt{2m(E-V)} \text{ protože } \frac{p^2}{2m} = E - V$$
- pravděpodobnost průchodu bariérou je potom dána :  $D = e^{-\frac{2}{h}\int \sqrt{2m(V-E)} dx}$
- „opačným“ jevem je nadbariérový odraz – může se odrazit i částice s velkou energií

### STM (= řádkovací tunelový mikroskop, angl. Scanning Tunneling Microscope)

- je to druh neoptického mikroskopu, který mapuje povrch vodivého vzorku pomocí změny průběhu potenciálu, resp. proudu při pohybu vodivé sondy nad vzorkem
- přesněji se jedná o závislost množství elektronů, tzn. velikosti el. proudu, který tuneluje z materiálu do hrotu sondy a který je exponenciálně závislý na vzdálenosti
- platí :  $I = e^{-\frac{2}{h}\sqrt{2m\phi}s}$   
kde  $\phi \dots$  střední výška bariéry  
s ... vzdálenost
- hrot sondy se nad vzorkem pohybuje díky piezoelektrickému jevu
- mezi ním a vzorkem je vakuum, které teče uvedený proud
- r. 1981 – vynalezen Binnigem a Rohrerem, kteří za objev dostali Nobelovu cenu

## 5. MOMENT HYBNOSTI, MAGNETICKÁ REZONANCE

### Orbitální moment hybnosti

- jeho definice je analogická klasické fyzice, tzn. :  $\hat{L} = \hat{r} \times \hat{p}$   
kde  $r$  ... polohový vektor  
p ... hybnost
- současně lze měřit kvadrát velikosti momentu a jednu složku (obvykle se měří z)
- platí :  $\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}$  a  $\hat{L}_z Y_{lm} = m\hbar Y_{lm}$  (Bohrova podmínka)  
kde  $l, m$  ... celá čísla ;  $|m| \leq l$  ... k danému  $l$  máme  $(2l + 1)$  hodnot  $m$   
 $Y_{lm}$  ... kulové funkce, které odpovídají vyzářovacím schopnostem antény
- jeho velikost je určena vedlejším kvantovým číslem ( $l = 0, 1, \dots, n-1$ )
- složky tohoto momentu nekomutují

### Vlastní moment hybnosti = spin

- *spin* = vlastnost elementárních částic, jejíž ekvivalent klasická fyzika nezná
- představuje vlastní vnitřní moment hybnosti
- přispívá k celkovému momentu hybnosti
- pro každou částici je přesně daný a nelze ho změnit
- může nabývat celých nebo polocelých násobků Planckovy konstanty
- podle velikost spinu se dělí částice:
  - a) *fermiony* – polocelý spin ( $1/2, 3/2, \dots$ ), např. elektron, proton, neutron
  - b) *bosony* – celočíselný spin ( $0, 1, 2, \dots$ ), např. foton, jádro hélia
- nejjednodušší spin  $1/2$  je např. *spin u elektronu*
- stavy :  $|\uparrow\rangle, |\downarrow\rangle$  ; obecně:  $\alpha|\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\rangle$
- operátory :  $\hat{s}_x = \frac{1}{2}\hbar\sigma_x = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\hat{s}_y = \frac{1}{2}\hbar\sigma_y = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}$ ,  $\hat{s}_z = \frac{1}{2}\hbar\sigma_z = \frac{1}{2}\hbar\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$
- výpočty se provádí v dvourozměrném vektorovém prostoru

### Magnetický moment

- pohyb nabitě částice je vždy spojen s magnetickým momentem
- lze ho měřit několika experimenty, např. měřením jemné struktury spektrálních čar atomů nebo měřením vlivu vnějšího elektromagnetického pole na energetické stavy atomů
- magnetický moment je dán vztahem :  $\mu = IS = -\frac{e}{T}\pi R^2 = -\frac{e}{2} \frac{2\pi}{T} R^2 = -\frac{e}{2m} m\omega R^2 = -\frac{e}{2m} L$   
kde  $I$  ... proud  
 $S$  ... plocha
- výsledný vztah  $\mu = -\frac{e}{2m} L$  je univerzální
- výraz  $e/(2m)$  se označuje jako *gyromagnetický poměr*

- mag. momenty elektronu jsou násobkem **Bohrova magnetonu**  $\mu_B = \frac{eh}{2m_e} = 9,274 \cdot 10^{-24} \text{ Am}^2$
- **magneton** = magnetický moment elektronu ve stavu, v němž se průmět orbitálního momentu hybnosti do zvoleného směru rovná Planckově konstantě
- 1 spinu odpovídá magnetický moment
  - a) pro elektron :  $\mu_E = -1,0012\mu_B = -1,0012 \frac{eh}{2m_e}$  (minus značí působení momentu proti spinu)
  - b) pro proton :  $\mu_p = 2,793\mu_N = 2,793 \frac{eh}{2m_p}$
  - c) pro neutron :  $\mu_N = -1,913\mu_N = -1,913 \frac{eh}{2m_p}$
- **energie magnetického momentu** v magnetickém poli je dána vztahem :  $E = -\mu B$
- rezonanční podmínka a podmínka absorpce elektromagnetického záření: vzdálenost dvou hladin =  $2\mu B =$  energie fotonu  $h\omega$

### Magnetická rezonance

- je to zobrazovací technika používaná především ve zdravotnictví k zobrazení vnitřních orgánů lidského těla, která byla vyvíjena od r. 1973 Lauterburem a Mansfieldem
- s její pomocí je možné získat řezy určité oblasti těla, ty dále zpracovávat a spojovat až třeba k výslednému 3D obrazu požadovaného orgánu
- využívá velké magnetické pole a elektromagnetické vlnění s vysokou frekvencí
- nenese tedy žádná rizika způsobená zářením
- podstatou barevného odlišení jednotlivých tkání je jejich rozdílné chování při stejném vnějším působení
- fyzikální princip magnetické rezonance (MRI) představuje nukleární magnetická rezonance (NMR), která využívá skutečnosti, že protony stejně jako neutrony mají určitý vlastní moment tzv. spin, díky němuž získává celé atomové jádro určitý magnetický moment
- pokud je rotující jádro umístěno v konstantním magnetickém poli  $B_0$  dochází k tomu, že se nasměruje podle působení tohoto pole a osa jádra bude rotovat kolem směru působícího pole  $B_0$
- tento pohyb vzniká při každé změně působícího mag. pole, dokud se jádro v dané poloze neustálí
- pokud vnější pole přestane působit, vrací se jádro do své původní klidové polohy
- jestliže se přidá druhé kolmo působící (transverzální) pole  $B_T$ , začne jádro opět rotovat.
- aby byla jádra udržena ve stálém pohybu, používá se vysokofrekvenční magnetické pole, které současně rotuje v rovině xy
- dříve používaná pole o velikosti 0,2 – 0,5 T nejsou dnes obvyklá a nahrazují je přístroje s poli o velikostech kolem 7 Tesla (ve výzkumu jsou běžná pole až do velikosti 20 T)
- pro vyvolání rotačního pohybu kolem osy má každé jádro určitou rezonanční frekvenci
- ta závisí na působícím magnetickém poli a na vnitřní struktuře jádra
- volbou velikosti prvního statického magnetického pole  $B_0$  a volby velikosti magnetické pole  $B_T$  se dá velice přesně určit, která jádra budou v rezonanci
- rezonancí je magnetický moment jádra překlopen o  $90^\circ$  do roviny xy a osa pak rotuje podle  $B_T$
- pokud je  $B_T$  odpojeno, rotuje jádro stále v rovině xy
- přiblížením cívky do blízkosti rotujícího magnetického momentu se v ní indukuje napětí, které je následně měřeno
- zjednodušeně je velikost naměřeného napětí závislá na poloze a typu tkáně
- na základě naměřeného indukovaného napětí je signál převeden na škálu šedé barvy

## 6. ATOM VODÍKU A VÍCEELEKTRONOVÉ ATOMY

### Atom vodíku

- analýza atomu vodíku má pro fyziku základní význam, protože se jedná o nejjednodušší atomární systém a lze na něm dobře testovat teoretické předpovědi
- rozbor vlnových funkcí elektronu v atomu vodíku dává představu o chování složitějších soustav elektronů
- vlnové funkce elektronu v atomu vodíku poskytují východisko pro výpočet vlnových funkcí víceelektronových atomů a molekul
- úlohou je nalézt stacionární stavy tvořené nepohyblivým jádrem s kladným nábojem a záporně nabitým elektronem, pohybujícím se v centrálním silovém poli
- modelem je stojící bodové jádro a elektron vzájemně elektrostaticky interagující

- Schrödingerova rovnice má tvar :  $\hat{H}\psi = E\psi$

kde  $\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$ , tzn. kinetická + potenciální energie

$$\hat{T} = \hat{T}_{rad} + \frac{\hat{L}^2}{2mr^2} \quad \text{a} \quad \hat{V} = -\frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r}$$

kde  $\hat{T}_{rad} = \frac{p_{rad}^2}{2m}$  ... radiální energie

$\frac{\hat{L}^2}{2mr^2}$  ... energie pohybu elektronu podél koule

- řešení rovnice je ve tvaru :  $\psi = R_{nl}(r)Y_{lm}(\theta, \varphi)$

kde  $R_{nl}(r)$  ... radiální funkce

$Y_{lm}(\theta, \varphi)$  ... kulové funkce

- použijeme-li výše uvedený vztah  $\hat{L}^2 Y_{lm} = l(l+1)\hbar^2 Y_{lm}$ , dostaneme tzv. **radiální rovnici** :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{1}{r} \frac{d^2(rR)}{dr^2} + \frac{l(l+1)R}{r^2} \right) - \frac{Ze^2}{4\pi\epsilon_0 r} R = ER$$

- tato rovnice má správné řešení, jen pokud :  $A \equiv \frac{\sqrt{mZe^2}}{4\pi\epsilon_0 \hbar \sqrt{-2E}} = n_r + l + 1$

kde  $n_r$  ... radiální kvantové číslo (celé číslo větší než nula)

- pokud označíme hlavní kvantové číslo  $n = n_r + l + 1$ , dostaneme pro energii atomu vodíku vztah :

$$E_n = -\frac{mZ^2 e^4}{2(4\pi\epsilon_0 \hbar)^2} \frac{1}{n^2}$$

- při výpočtech je potřeba započíst řadu korekcí

a) jádro není v klidu :  $m_e \rightarrow \frac{m_e}{1 + \frac{m_e}{M}}$

b) vliv spinu elektronu – tzv. spin-orbitální interakce vede k jemné struktuře hladin; magnetické pole je úměrné magnetickému momentu a ten je úměrný momentu orbitálnímu

c) relativistická korekce ke kinetické energii – částice se pohybuje setinou rychlosti světla

d) vliv elektromagnetického pozadí – Lambův posuv

- e) vliv spinu jádra – velejemná struktura; např. sodíkový dublet má dvě hladiny
- f) nebodovost jádra – ovlivní jen s-stavy, protože mají nenulovou pravděpodobnost výskytu elektronu v počátku; jádro je o 5 řádů menší než velikost atomu

### Víceelektronové atomy

- v případě atomů s více elektrony narážíme na problémy, které jsou ve fyzice obvyklé v případě řešení systémů tří a více interagujících částic
- pokud interakční energie částic nemá vhodný tvar, který by umožňoval přímo rozdělit systém n částic na n jednočásticových systémů, je nutno použít jednočásticové přiblížení
- **jednočásticové přiblížení** = postup, kterým je možno dosáhnout separaci rovnice popisující n částic na n rovnic pro jednu částic
- k přiblížení se používá několika metod
  - a) přiblížení neinteragujících částic – v případě malé interakce ji lze zanedbat, výpočet lze zpřesnit použitím poruchové metody
  - b) metoda kvazičástic – provede se transformace souřadnic tak, aby v nových bylo možné provést separaci interakční energie; nové souřadnice nepopisují stav částic původního systému, ale myšlených částic, tzv. kvazičástic
  - c) metoda efektivního potenciálu
- nejčastěji se volí **metoda efektivního potenciálu**
- interakční energie se rozdělí na dvě části
  - a) efektivní potenciál – představuje zprůměrované působení zbývajících částic na danou částici, je možné ho dále separovat
  - b) zbytková interakce – je možno ji zanedbat, nelze ji dále separovat
- metoda se aplikuje na nezávislé elektrony
- nezávislost ale nebude úplná, protože vyjádření tvaru vlnové funkce  $\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2)$  nespĺňuje požadovanou symetrii kde 1,2 ... elektrony  
a,b ... stavy
- správná volba by byla ve tvaru :  $\psi(r_1, r_2) = \psi_a(r_1)\psi_b(r_2) - \psi_a(r_2)\psi_b(r_1)$
- pro a = b je  $\psi = 0$  a jedná se o tzv. Pauliho princip, podle něhož může být v daném stavu maximálně 1 fermion – to je důsledkem symetrie vlnové funkce
- efektivní potenciál je dán vztahem : 
$$V = -\frac{(Z - \sigma)e^2}{4\pi\epsilon_0 r} + \frac{\beta\hbar^2}{2mr^2}$$
 kde  $\sigma$  ... parametr popisující stínění náboje jádra  
 $\beta$  ... deformační parametr
- zavedeme-li  $l'$  jako  $l'(l+1) = l(l+1) + \beta$ , dostaneme stejnou rovnici jako výše, změna bude pouze v  $l'$
- pro energii vázaných stavů tedy platí : 
$$E_n = -\frac{mZ^2e^4}{2(4\pi\epsilon_0\hbar)^2} \frac{1}{n^{*2}}$$
 kde  $n^* = n_r + l' + 1$
- volba vhodných hodnot  $\sigma$  vede k tomu, že stavy s vyšším momentem hybnosti jsou méně vázány



## 7. PŘECHODY V ATOMECH, LASERY

### Přechody v atomech

- atomy se mohou nacházet v excitovaném stavu, tzn. že můžou přecházet do stavu s vyšší energií
- protože má excitovaný stav vyšší energii než stav základní, je potřeba atomu dodat energii
- **způsoby excitace:**
  - a) absorpce světla, tzn. fotonu – energie se získává z elektromagnetického záření
  - b) zvýšení teploty prostředí – excitace nastává vzájemným nárazem atomů látky
  - c) obrovské zahřátí za vzniku plazmy – v plazmatu vznikají volné ionty, dochází k excitacím, ...
  - d) nepružná srážka
- koeficienty, které charakterizují přechody mezi stavy, se nazývají **Einsteinovy koeficienty**
- při přechodu mezi stavy platí tzv. **výběrová pravidla**, podle nichž se mohou při přechodech měnit kvantová čísla momentu hybnosti jen o 0, resp. +/- 1
- pro atom, kde nastává přechod mezi jednotlivými konfiguracemi elektronů, jejichž kvantová čísla jsou označena L a S, platí tato pravidla:
  - $\Delta L = 0, \pm 1$  ... foton má spin 1 (L se tedy mění max o 1)
  - $\Delta S = 0$  ... foton nemá vliv na spin elektronu
- tato pravidla platí pro většinu pozorovaných přechodů
- výjimky nastávají např. při porušení LS vazby, kde se může porušit podmínka  $\Delta S = 0$
- potom mluvíme o **zakázaných přechodech**
- přechody elektronu mezi dvěma hladinami :  $\frac{dn_1}{dt} = -\frac{dn_2}{dt} = -B_{12}n_1u(\omega) + A_{21}n_2 + B_{21}n_2u(\omega)$ 
  - kde  $n_i$  ... obsazení hladin
  - A, B ... Einsteinovy koeficienty
  - $u(\omega)$  ... hustota energie záření
- jednotlivé členy představují: **emise** + **samovolná emise** + vynucená emise
- pro rovnováhu platí :  $\frac{dn_1}{dt} = -\frac{dn_2}{dt} = 0$ , tzn.  $B_{12}n_1u(\omega) = A_{21}n_2 + B_{21}n_2u(\omega)$ , odkud získáme
  - vztah : 
$$u(\omega) = \frac{A_{21}}{B_{12} \frac{n_1}{n_2} + B_{21}}$$
- v rovnováze platí (Boltzmann) :  $\frac{n_1}{n_2} = e^{\frac{h\omega}{k_B T}}$ , tzn.  $u(\omega) = \frac{A_{21}}{B_{12} e^{\frac{h\omega}{k_B T}} + B_{21}}$
- je-li  $B_{12} = B_{21}$  a  $A_{21} = B_{21} \frac{h\omega^3}{\pi^2 c^3}$ , dostaneme Planckovo rozdělení
- pro  $B_{21} = 0$  dostaneme Wienův zákon

### Lasery (=zesilování světla pomocí stimulované emise záření, angl. Light Amplification by Stimulated Emission of Radiation)

- laser je optický zdroj elektromagnetického záření
- světlo laseru je vyzařováno ve formě úzkého svazku a na rozdíl od světla přirozených zdrojů je polarizované, koherentní a monochromatické

- je tvořen
  - a) **rezonátorem** – slouží k výběru vlnové délky zesilovaného záření tvoří ho dvě zrcadla: jedno s odrazivostí 100 % a druhé s odrazivostí o málo nižší (rezonátor nepotřebuje dusíkový laser, který pracuje superradiačně)
  - b) **aktivním prostředím** = látka obsahující oddělené kvantové energetické hladiny elektronů
  - c) **zdrojem energie**
- zdrojem energie je do aktivního prostředí čerpána energie, která nabudí elektrony
- ty při pádu na nižší energetickou hladinu vyzáří energii ve formě fotonů
- fotony následně vrážejí do dalších elektronů, které tím zároveň zase nabudí tím dochází k zesilování toku fotonů, které následně vyletí z média na rezonátor
- jestliže tok dopadne na zrcadlo s odrazivostí 100% je zpátky odražen do zesilovacího procesu, nebo narazí na polopropustné zrcadlo, které paprsek propustí
- metody čerpání
  - a) elektrický náboj – u HeNe laseru: Ne předává energii He, který má metastabilní hladinu (hladina, na které probíhá malá emise)
  - b) absorpce světla – u rubínového laseru, neodymového skla, barvivových laserů (budí se laserem samotným; má celý pás pracovních hladin, tzn. že ho lze ladit)
  - c) chemická reakce – u HF laseru, excimerního laseru (XeF)
  - d) elektrický proud – u polovodičového laseru (AlGaAs)
- podle aktivního prostředí se lasery dělí na:
  - a) plynové – aktivním prostředím je plyn
  - b) pevnolátkové – prostředí, kde vznikají hladiny dopováním
  - c) diodové – polovodič s PN přechodem
  - d) kvantové kaskádní – polovodičové multivrstvy
  - e) lasery na volné elektrony
- elektrony mohou přecházet z vyššího do nižšího stavu jedním z dvou mechanismů:
  - a) spontánní emise – dochází k ní při nízkém stupni obsazení vyšší hladiny
  - b) stimulovaná emise – pro její spuštění je potřeba dosáhnout tzv. **populační inverze**, kdy je vyšší hladina obsazena více elektrony než nižší

### Masery (obří mikrovlnné lasery)

- byly předchůdci laserů
- jedná se o zařízení, které pracuje na stejném principu jako laser, ale generuje mikrovlnné záření
- r. 1953 – první maser, nebyl ale schopný fungovat nepřetržitě
- r. 1960 – Maimann zkonstruoval funkční maser, jako aktivní prostředí použil krystal rubínu s využitím tří energetických hladin (pracoval jen v pulzním režimu)
- nejběžnější molekuly vykazující maserování: OH, H<sub>2</sub>O, CH<sub>3</sub>OH, SiO
- typické zesílení je 100krát, špičkové až 1000krát

## 8. MOLEKULY A PEVNÁ LÁTKA

### Molekuly

- molekula je částice složená z atomů nebo iontů
- je to vícejaderná částice, která je buď elektricky neutrální, nebo má kladný, či záporný náboj
- podle polaritly mluvíme o molekulových kationtech nebo aniontech
- jsou to základní stavební kameny, z nichž jsou vybudována hmotná tělesa
- jednotlivé části molekuly drží pohromadě síly, které nazýváme **chemické vazby**
- různý způsob uspořádání a vzájemného silového působení molekul v tělese určuje jejich vlastnosti
- platí pro ně složitější Schrödingerova rovnice (jako parametry chápeme polohy jader)
- pomocí Bornovy-Oppenheimerovy aproximace hledáme minimum energie systému
- tato aproximace je jedna z metod výpočtu účinného průřezu rozptylu částic
- **účinný průřez** = pravděpodobnost, s jakou bude některá ostřelující částice ze svazku částic o průřezu  $S$  interagovat s částicí terče
- **atomový orbital** = popis prostorového rozložení pravděpodobnosti nalezení elektronu v atomu
- atomové orbitaly jsou u molekul nahrazeny molekulovými
- **molekulový orbital** = grafické vyjádření prostorové komponenty vlnové funkce elektronu
- popisuje chování jednoho elektronu v magnetickém poli generovaném atomovými jádry s průměrnou distribucí elektronů
- k výpočtu elektronových stavů v pevných látkách používáme **metodu LCAO** (Linear Combination of Atomic Orbitals), která popisuje vznik molekulových orbitalů pomocí lineární kombinace atomových orbitalů
- k tomu dojde prostorovým překryvem atomových orbitalů
- velikost překryvu je charakterizována tzv. integrálem překryvu, jehož velikost se pohybuje od 0 (k překryvu nedošlo) až do 1 (mezijaderná vzdálenost je nulová)
- metoda je jednou z teorií vzniku chemické vazby

### Kovalentní vazba

- vazba, u které dochází k překryvu orbitalů a sdílení jednoho elektronového páru dvěma atomy, z nichž každý poskytl jeden elektron
- výklad jejího vzniku podává kvantová mechanika
- vznikne-li vazba tak, že jeden atom poskytne oba elektrony a druhý prázdný vazebný orbital, vytvoří se opět kovalentní vazba, zvaná **koordinačně kovalentní vazba**
- nejjednodušším příkladem kovalentně vázaných atomů je molekula vodíku  $H_2$ , kde k vazbě přispěl každý atom jedním elektronem  $1s$
- pro vodík volíme součtový a rozdílový orbital  $\sigma$ , resp.  $\sigma^*$
- z energetické závislosti vyplývá, že orbital  $\sigma$  je vazební a  $\sigma^*$  je antivazební
- v molekule  $H_2$  jsou oba elektrony v orbitalu  $\sigma$  a mají opačný spin
- např. v molekule amoniaku  $NH_3$  jsou tři kovalentní vazby N-H, v nichž vystupují tři elektrony od atomů vodíku a tři z pěti elektronů atomu dusíku
- zbývající dva elektrony tvoří volný elektronový pár, který může koordinačně vázat  $H^+$
- vznikne amonný kation  $NH_4^+$ , v němž již nelze rozlišit, který vodík byl původně vázán v amoniaku a který byl potom koordinován

### Iontová vazba

- je založena na elektrostatických silách – vznik iontové vazby je jev elektrostatický
- vazebné síly jsou coulombovské
- předpokládá přenos elektronu z jednoho atomu na druhý – vznik iontů (ve skutečnosti se s ní částečně uplatňuje i vazba kovalentní)
- za normálních okolností (tlak, teplota) vzniká vazbou *iontový krystal*
- např. předá-li atom sodíku (ztráta 5,14 eV) svůj jediný valenční elektron z orbitálu 3s atomu chloru (zisk 3,62 eV), který má jedno volné místo v orbitálu 3p, vzniknou ionty  $\text{Na}^+$  a  $\text{Cl}^-$
- v krystalu soli nelze rozlišit jednotlivé molekuly – symbol NaCl má pouze význam vzorce
- disociační energie je 4,27 eV a vzdálenost jader vyjde 0,236 nm

### Pevná látka

- jedno ze skupenství, při kterém jsou částice vázány v „pevných“ polohách, kolem kterých kmitají
- kinetická energie tohoto kmitajícího neuspořádaného pohybu je menší než potenciální energie odpovídající molekulovým přitažlivým silám
- částice kmitají kolem tzv. rovnovážných poloh a na rozdíl od kapalin se tyto polohy nepřemísťují
- atomy i molekuly jsou poměrně pevně vázány, např. v krystalové mřížce
- příklady vnějších projevů pevných látek:
  - a) tělesa z pevných látek mají svůj tvar i objem
  - b) teplo se v pevných látkách nemůže šířit prouděním
- v případě jednotlivých atomů mají elektrony energie dané řešením Schrödingerovy rovnice
- při seskupení atomů do molekul spolu začínají interagovat elektrony z různých atomů
- elektrony jsou tzv. *delokalizované*, tzn. nelze určit ke kterému atomu patří daný elektron
- tyto elektrony vytváří celý *pás povolených energií*, který už nelze popsat Schrödingerovou rovnicí
- k tomu se používá *model Kronig-Penneyův* = pásový model elektronové struktury pevných látek
- v pevné látce vzniká vždy mnoho elektronových páسů, v nichž je počet stavů roven počtu atomů
- pásy se mohou vzájemně překrývat nebo mezi nimi může být mezera, kde se nevyskytuje žádný možný stav – tato mezera se nazývá *zakázaný pás*
- elektrony v látce zaplňují elektronové pásy od energeticky nejnižších stavů
- poslední elektronový pás obsazený elektrony je nazýván *valenční pás* (energetický pás)
- první neobsazený elektronový pás je nazýván *vodivostní pás*
- elektrony v zaplněném valenčním pásu nemohou přispívat k elektrické vodivosti – látka se stane vodivou, až poté co se elektrony dostanou do vodivostního pásu
- zcela zaplněné pásy ani zcela prázdné pásy nepřispívají k vodivosti
- vypočítaný potenciál Kronig-Penneyův se pouze přibližuje reálnému
- jeho řešení má tzv. Blochův tvar:  $\psi_K = e^{ikx} u_K(x)$   
kde  $u_K(x)$  ... periodická funkce
- energie tedy závisí na vlnovém čísle  $k$  a tvoří pásy  $n$
- platí pro ni:  $E = E_n(k)$
- obsazení pásu rozhoduje o tom, zda je látka kov nebo izolant, případně polovodič
  - a) *vodiče* – valenční a vodivostní pás se dotýkají nebo překrývají, tzn. elektrony mohou přecházet mezi pásy s minimem vynaložené energie
  - b) *polovodiče* – mají zakázaný pás, aby ho elektrony překonaly, je nutné dodat zvnějšku energii
  - c) *izolanty* – valenční a vodivostní pásy mají hodně vzdálené

## 9. VLASTNOSTI JÁDRA

- studiem atomového jádra se zabývá fyzika atomového jádra
- existence malých částic nesoucí kladný náboj dokázal svými experimenty už Rutherford
- r. 1932 – při studiu přirozené radioaktivity zjištěno, že částice mají energii v řádech MeV, která nemůže být soustředěna jen v elektronech – vyslovena hypotéza, že jádra mají vnitřní strukturu
- je o pět řádů menší než atom

### Protony + neutrony

- atomové jádro se skládá ze Z (protonové číslo) **protonů** a N (neutronové číslo) **neutronů**
- protony a neutrony označuje souhrnně jako **nukleony** A (nukleonové číslo)
- nukleony mají některé vlastnosti shodné s elektrony – jsou to fermiony a mají stejný spin (1/2)
- od elektronů se ale značně liší svoji hmotností
- proton je částice stabilní – střední doby jejího života je  $10^{32}$  let (více než doba trvání vesmíru)
- neutron je naopak nestabilní, jeho střední doba života je 896 s
- pojmy
  - a) **nuklid** = látka skládající se ze stejných atomů s čísly A a Z
  - b) **izotop** = jeden z nuklidů, které mají stejné Z a jiné N
  - c) **izobar** = jeden z nuklidů, které mají stejné A a jiné Z
  - d) **izomer** = látka tvořená nuklidem, jehož jádra se nachází dlouhou dobu ve vzbuzeném stavu
  - e) **radionuklid** = nuklid, který je nestabilní a rozpadá se
- neutronová a protonová čísla mají význam ve stavbě atomů, protože se nimi souvisí stabilita jádra
  - a) **S-S jádra** (súdo-sudá) – mají sudý počet neutronů i protonů, jsou stabilní, existuje jich 156 (např. vodík)
  - b) **L-L jádra** (lichó-lichá) – mají lichý počet neutronů i protonů, kromě 4 nuklidů (deuterium, lithium, bór a dusík) jsou všechna tato jádra nestabilní
  - c) **L-S jádra**, resp. **S-L jádra** – vesměs jsou stabilní
- nejstabilnější jsou jádra súdo-sudá a z nich jsou úplně nejstabilnější ta, která mají tzv. magický počet protonů, resp. neutronů, resp. protonů i neutronů (2, 8, 20, 28, 50, 82)
- taková jádra se označují jako **magická jádra** a mají výjimečné vlastnosti (např. stabilitu, symetrii, nulový spin i magnetický moment, ...)
- patří mezi ně např. inertní plyny
- neutronů je v jádře obvykle více než protonů
- přebytek neutronů vede k  $\beta^-$  rozpadu, přebytek protonů potom k  $\beta^+$  rozpadu nebo K záchytu
- u těžkých jader dochází k  $\alpha$  rozpadu

### Hmotnost jádra

- vyjadřuje se v atomových hmotnostních jednotkách – hmotnost jádra je s přesností 1 % rovna  $Au$  kde  $u$  ... atomová hmotnostní jednotka,  $u = 1,660\,538\,86(28) \cdot 10^{-27}$  kg = 931,5 MeV

- přesněji platí: 
$$M(A, Z) = ZM_p + (A - Z)M_n - \frac{W(A, Z)}{c^2}$$

kde  $M_p$  ... hmotnost protonu,  $M_p = 1,672\,621\,71(29) \cdot 10^{-27}$  kg = 938,3 MeV

$M_n$  ... hmotnost neutronu,  $M_n = 1,674\,927\,28(29) \cdot 10^{-27}$  kg = 939,6 MeV

$W(A, Z)$  ... vazebná energie jádra

- důležitou veličinou je **nukleonová vazebná energie** :  $\varepsilon(A, Z) = \frac{W(A, Z)}{A}$
  - pro  $A < 16$  tato energie rychle roste, tzn.  $W(A, Z) \approx A(A+1)$
  - pro  $A > 16$  je přibližně konstantní, tzn.  $W(A, Z) \approx A$
  - maximum energie je pro  $A = 60$ , což je nuklid niklu – ten je důležitým rozhraním, protože pro  $A < 60$  se při spojování lehkých jader uvolňuje energie a pro  $A > 60$  se uvolňuje při štěpení těžkých
  - jádro má rozložení nukleonů popsané vztahem :  $\rho = \frac{\rho_0}{e^{\frac{r-R}{a}+1}}$
- kde  $\rho_0$  ... hustota jádra ,  $\rho_0 = 0,17 \text{ n/fm}^3 = 2,7 \cdot 10^{17} \text{ kg/m}^3$   
 $R$  ... poloměr jádra ,  $R = r_0 A^{1/3}$  ,  $r_0 = 1,3 \text{ fm}$   
 $a$  ... tloušťka povrchové vrstvy ,  $a = 0,6 \text{ fm}$
- vazebná energie činí cca 8 MeV nukleon

### Momenty jádra

- moment hybnosti jádra označujeme jako **spin jádra** a značí se  $I$
  - jeho velikost charakterizujeme kvantovým číslem
  - je vektorovým součtem orbitálních a spinových momentů nukleonů
  - S-S jádra mají spin 0
  - jádra s  $I > 1/2$  bývají nesférická a charakterizuje je **kvadrupólový moment**  $Q$  = vlastnost vyjadřující míru geometrické deformace daného kvantového stavu
  - čím je jádro těžší, tím více je nesférické
  - $Q$  se hodí k měření tvarů, které vypadají jako protáhlý nebo zploštělý elipsoid
  - platí pro něj:  $Q = \frac{2}{5}(a_2 - b_2)Ze$  , resp.  $Q = \frac{4}{5}\varepsilon R_2 Ze$
- kde  $\varepsilon = \frac{(a_2 - b_2)}{(a_2 + b_2)}$  a  $R_2 = \frac{1}{2}(a_2 + b_2)$
- **magnetický moment** je vektorovým součtem orbitálního momentu nukleonů a vlastních momentů protonu a neutronu
  - lze ho měřit
  - orbitální magnetický moment je  $\gamma I_{\mu N}$
  - magnetický moment protonu je  $2,793 \mu_N$
  - magnetický moment neutronu je  $1,913 \mu_N$
  - S-S jádra mají nulový magnetický moment

Spin a magnetický moment některých jader					
n	1/2	-1,91	p	1/2	2,79
$^2\text{H}$	1	0,86	$^3\text{H}$	1/2	3
$^3\text{He}$	1/2	-2,1	$^6\text{Li}$	1	0,82
$^7\text{Li}$	3/2	3,3	$^9\text{Be}$	3/2	-1,2
$^{10}\text{B}$	3	1,8	$^{13}\text{C}$	1/2	0,7
$^{14}\text{N}$	1	0,4	$^{15}\text{N}$	1/2	-0,28
$^{17}\text{O}$	5/2	-1,9	$^{19}\text{F}$	1/2	2,6

- neexistuje stabilní jádro s pěti ani s osmi protony

## 10. KAPKOVÝ A SLUPKOVÝ MODEL, SILNÁ INTERAKCE

### Kapkový model

- r. 1938 – autorem je Bohr
- jádro se považuje za těžkou nestlačitelnou kapalinu
- tato představa vede k úměrnosti mezi objemem jádra a počtem nukleonů
- vystihuje základní vlastnosti vazebných energií a hmotností
- poloměr jádra je dán vztahem :  $R = r_0 A^{1/3} = 1,3 \cdot 10^{-15} A^{1/3} [m]$
- závislost hmotnosti nebo vazebné energie jader na číslech Z a A vyjadřuje **Weizsäckerovou formuli** :  $W(A, Z) = a_1 A - a_2 A^{2/3} - a_3 \frac{Z^2}{A^{1/3}} - a_4 \frac{(A - 2Z)^2}{A} + D$
- parametry mají hodnotu: tzv. BEST FIT –  $a_1 = 15,67 \text{ MeV}$  ,  $a_2 = 17,23 \text{ MeV}$  ,  $a_3 = 0,75 \text{ MeV}$  ,  $a_4 = 93,2 \text{ MeV}$  ,  $\delta = 12 \text{ MeV}$
- význam jednotlivých členů formule:
  - a) první člen – tzv. objemový člen, předpokládá závislost velikosti objemu jádra na počtu nukleonů
  - b) druhý člen – tzv. povrchový člen; vystihuje skutečnost, že na povrchu jsou nukleony vázány méně; odpovídá povrchovému napětí nestlačitelné kapaliny, která má tendenci působit proti objemovému členu (tzn. má tendenci stlačit kapku do co nejmenší objemu)
  - c) třetí člen – popisuje elektrostatické odpuzování protonů
  - d) čtvrtý člen – tzv. symetizační člen, vystihuje skutečnost, že stabilní izotopy mají  $Z = N$
  - e) pátý člen – tzv. zubový člen, rozlišuje S-S, L-L, S-L a L-S jádra (pro SS:  $D = +\delta/A^{3/4}$  , pro SL a LS:  $D = 0$  , pro LL:  $D = -\delta/A^{3/4}$ )

### Slupkový model

- r. 1953 – Goepfertová-Mayerová
- v jádře se nukleony párují podobně jako elektrony v atomovém obalu a vytvářejí tak slupky a podslupky, které lze charakterizovat tak, jako elektronové orbitály
- je to tedy popis stavu nukleonů v jádře
- pro nukleony platí **Woodsův-Saxonův potenciál**, který má tvar :  $V = -\frac{V_0}{e^{\frac{r-R}{a}+1}}$
- model umožňuje určit energetické stavy a jejich spin

### Silná interakce

- je to nejsilnější ze všech interakcí, jejíž působnost je omezena jen na subatomární úroveň
- je odpovědná za udržení protonů a neutronů v atomovém jádře i za soudržnost kvarků
- jejím zprostředkovatelem je **gluon** = částice s nulovou klidovou hmotností, bez elektrického náboje, má ale barevný náboj, nevyskytuje se jako samostatné částice
- teorie popisující její chování se nazývá **chromodynamika**

- vlastnosti této síly:
  - a) silnější než elektrická (8 MeV/n oproti 0,75/NP)
  - b) působí mezi hadrony
  - c) mají krátký dosah (2 – 3 fm, nejsou makro)
  - d) vykazují nasycení (u cca 4 nukleonů)
  - e) závisí na spinu a jsou necentrální
  - f) u více částic nestačí párové síly
- silně působené nukleonů můžeme popsat např. tzv. *pařížským principem*
- pro antisymetrický stav platí :  $V = V_{CO}$
- pro symetrický stav :  $V = V_{CI} + \frac{1}{2}V_{SO}SL$   
kde S ... spin  
L ... orbitální moment
- pro větší vzdálenosti nukleonů můžeme použít jednopionovou aproximaci, kde vzájemné působení je způsobeno výměnou *pionů* = částice tvořená nukleonem a antinukleonem
- rovnice pro potenciál má tvar : 
$$\left[ \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \left( \frac{m_\pi c^2}{h} \right) \right] \phi(r, t) = 0$$
- stacionární řešení : 
$$\phi(r, t) = g_\pi \frac{e^{-\frac{m_\pi cr}{h}}}{r}$$
  
kde  $m_\pi$  .. hmotnost pionu
- $m_\pi = 140$  MeV má dosah  $h/(m_\pi c) = 1,4$  fm (je to poloměr pionu)

## 11. RADIOAKTIVITA , SLABÁ INTERAKCE , DATOVÁNÍ

### Radioaktivita a radioaktivní procesy

- *radioaktivita* = samovolná přeměna jader nestabilních nuklidů za vzniku nových jader a ionizujícího záření
- radioaktivní procesy probíhají samovolně bez vnějšího zásahu
- jsou podmíněny nestabilitou jádra a možností přechodu do energeticky nižšího stavu
- v současnosti známe asi 264 stabilních izotopů, ostatní se samovolně rozpadají
- byla objevena Becquerelem, později se jí zabývaly manželé Currierovi
- *přirozené radionuklidy* = radioaktivní látky, které můžeme najít v přírodě
- *umělé radionuklidy* = radioaktivní látky vyrobené např. jadernými reakcemi
- *aktivita radionuklidu* A [Bq] = počet rozpadů v daném množství radionuklidu za 1 s
- počet rozpadů je úměrný množství látky, tzn.  $\frac{dn}{dt} = -\lambda n$
- řešením této rovnice je *zákon rozpadu* :  $n(t) = n_0 e^{-\lambda t}$   
kde  $n(t)$  ... pravděpodobný počet nerozpadlých jader v čase t  
 $n_0$  ... počáteční množství radionuklidu  
 $\lambda$  ... rozpadová konstanta; čím ve vyšší, tím rychleji se vzorek rozpadá



- rychlost přeměny charakterizuje poločas rozpadu :  $T_{1/2} = \frac{\ln 2}{\lambda}$
- radioaktivního rozpadu nestabilních izotopů se využívá i ve vědních oborech – archeologie, palentologie, ...

### $\alpha$ -rozpad

- je to spontánní rozpad jádra, při kterém je vyzářena částice  $\alpha$
- týká se jader těžších než je olovo
- má schématický zápis :  ${}^A_Z X \rightarrow {}^{A-4}_{Z-2} X + {}^4_2 He$
- při tomto rozpadu vylétá z jádra jen jedna  $\alpha$  částice
- energie  $\alpha$  částic: 4 – 9 MeV a odpovídající poločasy rozpadů:  $10^{10} - 10^{-7}$  s
- z hlediska kvantové mechaniky se popisují částice  $\alpha$  pomocí vlnové funkce
- protože není v případě reálného jádra potenciálová jáma nekonečně hluboká, je pravděpodobnost, že se  $\alpha$  částice bude nacházet vně potenciálu, tzn. že dojde k rozpadu  $\alpha$ , je nenulová
- platí vztahy :  $\lambda = \frac{1}{\tau} = \nu T = \frac{1}{\tau_0 T}$  a  $\tau_0 = \frac{2R}{v} = konst. = 10^{-21} s$   
 $\log T = a' + \frac{b}{\sqrt{E}}$  a  $\log \tau = a + \frac{b}{\sqrt{E}}$

kde  $\tau$  ... střední doba života  
 $T$  ... koeficient průchodu  
 $\omega$  ... frekvence kmitů částic

### $\beta$ -rozpad

- je procesem subjaderným, resp. dokonce subnukleonovým
- aby mohl existovat, potřebujeme *neutrino* a novou interakci, tzv. *slabou interakci*
- obecně probíhá podle schématu :  ${}^A_Z X \rightarrow {}^A_{Z-1} Y + e^- + \bar{\nu}$   
kde  $\bar{\nu}$  ... antineutrino = neutrální částice se spinem 1/2, jejíž hmotnost je blízka nule
- k rozpadu může dojít jen tehdy, když je energie potřebná k oddělení elektronu záporná
- podmínkou rozpadu je převaha neutronů, resp. protonu
- rozpadu podléhají jak jádra lehká, tak středně těžká i těžká
- 3 typy  $\beta$ -rozpadu
  - a)  **$\beta^-$  rozpad** odpovídá rozpadu neutronu, probíhá podle reakce :  $n \rightarrow p^+ + e^- + \bar{\nu}$
  - b)  **$\beta^+$  rozpad** odpovídá rozpadu protonu, probíhá podle reakce :  $p^+ \rightarrow n + e^- + \nu$
  - c) **K záchyt elektronu** – je pravděpodobnější než  $\beta^+$  a probíhá podle reakce :  $p^+ + e^- \rightarrow n + \nu$

### $\lambda$ -rozpad

- probíhá u jader, která jsou dál než je oblast stability
- při přechodu jádra z vyšší energetické hladiny se emituje **gama záření** = elektromagnetické záření o energii cca 10 keV – 10 MeV, tzn. o vlnové délce cca 0,1 nm – 0,1 pm
- spektrum gama kvant je diskrétní a jejich energie určuje Bohrova podmínka
- vyzáří se při něm energie od 0,05 MeV do 10 MeV

### Slabá interakce

- při energii cca 1 GeV je o cca 12 řádů slabší než silná
- působí na všechny leptony a kvarky a umožňuje jim interagovat
- je to jediná síla působící na neutrino (gravitační síla na něj působí velice slabě)
- je slabší než elektromagnetická, ale silnější než gravitační
- další vlastnosti
  - a) její intenzita s energií roste
  - b) je bodová – její dosah je  $2 \cdot 10^{-18}$  m
  - c) je univerzální – působí takřka mezi všemi částicemi
  - d) interakce rozlišují mezi pravou a levou stranou a mezi částicemi a antičásticemi

### Radiokarbonové datování (Libby r. 1949)

- uhlík má dva stabilní izotopy  $^{12}\text{C}$  (98,9 %) a  $^{13}\text{C}$  (1,1 %)
- navíc je díky kosmickému záření v atmosféře cca  $10^{-12}$   $^{14}\text{C}$
- spočívá v měření zbytku izotopu uhlíku  $^{14}\text{C}$  v odumřelých organismech, do nichž se dostával ve formě oxidu uhličitého ( $\text{CO}_2$ ) za jejich života
- poločas rozpadu činí 5730  $\pm$  40 a odtud je odvozen vztah :  $-t = 8267 \ln \frac{{}^{14}\text{C}(\text{vzorek})}{{}^{14}\text{C}(\text{sr})}$
- vzorec předpokládá konstantní úroveň  $^{14}\text{C}$ , v atmosféře jsou jeho odchylky 5 %
- z tohoto důvodu se používá kalibrace, obvykle pomocí letokruhů
- metoda je použitelná do cca 50000 let
- chyba se pohybuje od cca 25 let (pro 1000 let) do 100 let (pro 25000 let)

## 12. ZÁKLADNÍ ČÁSTICE DNES

### Elektron

- r. 1881 – idea: Helmholtz
- r. 1897 – potvrzení: J. J. Thomsonem
- stabilní lehká částice ( $M = 0,51$  MeV) se spinem 1/2 a nábojem  $-1$
- zprostředkovává elektromagnetickou a slabou interakci
- stav elektronu v atomu se popisuje elektronovou konfigurací, která předpokládá, že se elektrony vyskytují především v atomovém orbitálu
- patří mezi leptony

### Foton

- r. 1905 – idea: Einstein
- r. 1887, resp. 1912 – potvrzení: Hertz, resp. Millikan
- nestabilní nenabitá částice s nulovou hmotností a spinem 1
- zprostředkovává elektromagnetickou interakci
- pomocí fotonu se popisuje kvantum elektromagnetické energie
- jeho chování zkoumá kvantová elektrodynamika

- k popisu fotonu slouží vlnová délka, frekvence, energie a hybnost
- existuje pouze v pohybu, v klidu není nikdy
- vzniká např. při přechodu elektronu mezi energetickými hladinami

### Proton

- r. 1815 – idea Proust
- r. 1911 – potvrzení: Rutherford
- stabilní těžká částice ( $M = 938 \text{ MeV}$ ) se spinem  $1/2$  a nábojem  $+1$
- zprostředkovává elektromagnetickou, slabou i silnou interakci
- patří mezi baryony
- skládá se ze dvou kvarků up a jednoho down, které se přitahují silnou interakcí

### Neutron

- r. 1920 – idea: Rutherford
- r. 1932 – potvrzení: Chadwick
- nestabilní (doba života 15 min) nenabitá těžká ( $M = 940 \text{ MeV}$ ) částice se spinem  $1/2$
- zprostředkovává elektromagnetickou interakci, slabou i silnou interakci
- mimo jádro je nestabilní – poločas rozpadu 15 min
- skládá se ze dvou kvarků down a jednoho up

### Neutrino

- r. 1930 – idea: Pauli
- r. 1956 – potvrzení: Cowan a Reines
- oscilující nenabitá velmi lehká ( $M < 3 \text{ MeV}$ ) částice se spinem  $1/2$
- zprostředkovává slabou interakci
- oscilací se neutrino sami přeměňují
- neutrino procházejí běžnou hmotou téměř bez jakékoli reakce
- vznikají rozpadem bosonů
- známe 3 druhy neutrino: *elektronové*, *mionové* a *tauonové neutrino*
- zdroje neutrino: jaderné elektrárny (až 50000 neutrino za 1 s), přirozený radioaktivní rozpad hornin, interakce kosmického záření s atmosférou, jaderná fúze na Slunci

### Pion

- r. 1935 – idea: Yukawa
- r. 1947, resp. 1950 – potvrzení: Powell, resp. Boerklund
- nestabilní (26 ns) nabitě ( $\pi^+$ ,  $\pi^-$ ) středně těžké ( $M = 140 \text{ MeV}$ , mezon) částice se spinem 0
- existuje i neutrální varianta  $\pi^0$
- je složený z nukleonu a antinukleonu

### Antihmota

- *antihmota* = hmota složená z *antiatomů* = atomy, jejichž částice jsou nahrazeny *antičásticemi* = částice se stejnou hmotností, dobou života a spinem jako částice, ale opačného náboje než částice
- při srážce hmoty s antihmotou vzniká obrovské množství energie

- r. 1930 – Dirac na předpověděl existenci *pozitronu* = antičástice k elektronu
- r. 1932 – pozitron objevil Anderson
- antiproton, resp. antineutron – antičástice k protonu, resp. k neutronu
- částice dnes (leptony = mion + tau, hadrony = baryon + mezon, bosony)

### Leptony (+antičástice)

- částice, na které nepůsobí silná síla a které neinteragují silně
- počet leptonů udává leptonové číslo (počet antileptonů se zachovává)
- částice považujeme za elementární
- 3 typy
  - a) *mion* ( $M = 106 \text{ MeV}$ ,  $Q = -1$ ,  $\tau = 2,2 \mu\text{s}$ ,  $s = 1/2$ ) a neutrino ( $M < 0,2 \text{ MeV}$ ,  $Q = 0$ ,  $s = 1/2$ )
  - b) *tauton* ( $M = 1777 \text{ MeV}$ ,  $Q = -1$ ,  $\tau = 0,3 \text{ ps}$ ,  $s = 1/2$ ) a neutrino ( $M < 18 \text{ MeV}$ ,  $Q = 0$ ,  $s = 1/2$ )
  - c) *elektron*

### Baryony (+antičástice)

- označení skupiny částic, která vytváří jádra
- jsou to částice podobné nukleonům
- je jich mnoho
- mají spin  $1/2$  nebo  $3/2$
- rozlišujeme:  *$\Delta$  baryony*, *podivné baryony* ( $\Lambda$ ,  $\Sigma$ ,  $\Xi$ ,  $\Omega$ ), *půvabné baryony* a *spodní baryony*
- částice s nejnižší energií žijí dlouho (více než  $0,1 \text{ ns}$ ), částice s vyšší energií naopak krátce ( $10^{-23} \text{ s}$ )
- nejsou elementární – skládají se z kvarků
- počet baryonů udává baryonové číslo (počet antibaryonů se zachovává)
- podléhají Pauliho vylučovacímu principu (jsou to fermiony)

### Mezony (+antičástice)

- barevně neutrální částice tvořená párem kvark-antikvark
- patří mezi bosony
- mezonem je např. pion
- je jich mnoho, ale nejsou elementární
- mají spin  $0$  nebo  $1$
- rozlišujeme: *mezony bez vůně* ( $\pi$ ,  $\eta$ ,  $\rho$ ,  $\omega$ ), *mezony podivné* ( $K$ ), *půvabné* ( $D$ ) a *spodní* ( $B$ )
- částice s nejnižší energií žijí dlouho (více než  $0,1 \text{ ns}$ ), částice s vyšší energií naopak krátce ( $10^{-23} \text{ s}$ ) – tzv. excitované stavy

### Hadrony (+antičástice)

- tuto skupinu tvoří dohromady baryony a mezony
- jsou to silně interagující částice, které považujeme je za elementární
- jsou složeny *kvarků*
- mají baryonové číslo  $1/3$ , leptonové číslo  $0$  a spin  $1/2$

- kvarků je celkem šest a tvoří tři páry
  - a) up ( $M = 2,5 \text{ MeV}$ ,  $Q = 2/3$ ,  $I_z = 1/2$ ) a down ( $M = 6 \text{ MeV}$ ,  $Q = -1/3$ ,  $I_z = -1/2$ )
  - b) charm ( $M = 2,5 \text{ MeV}$ ,  $Q = 2/3$ ,  $C = 1$ ) a strange ( $M = 105 \text{ MeV}$ ,  $Q = -1/3$ ,  $S = -1$ )
  - c) top ( $M = 174 \text{ GeV}$ ,  $Q = 2/3$ ,  $T = 1$ ) a bottom ( $M = 4,3 \text{ GeV}$ ,  $Q = -1/3$ ,  $b = -1$ )
- kvarky mají barevný náboj (R, G, B) a působí na sebe barevnými silami, které přenáší tzv. *gluony*
- každý kvark si uvnitř hadronu neustále vyměňuje barevné náboje s dalším hadronem
- při vzniku více párů kvark-antikvark vznikají tzv. *trysky* (jet)

### Bosony

- částice, které mají symetrickou vlnovou funkci a celočíselný spin
- nedodrží Pauliho vylučovací princip a netvoří stabilní struktury
- předpokládá se, že jako boson se chová pár fermionů při supravodivosti
- existují bosony W a Z
- dnes známe čtyři interakce bosonů
  - a) elektromagnetickou – přenášenou fotony
  - b) barevnou – přenášenou osmi gluony
  - c) slabou – přenášenou bosony W a Z
  - d) gravitační – nemáme pro ni kvantovou teorii, očekáváme existenci *gravitonů* = hypotetická částice zprostředkávající gravitační sílu a pohybující se rychlostí světla
- *Higgsův boson* – hypotetická hmotná skalární částice
- jediná částice, která ještě nebyla pozorována, ale hraje klíčovou roli ve vysvětlení hmotnosti částic

### Fermiony

- částice, které nemají symetrickou vlnovou funkci
- mají poločíselný spin
- platí pro ně Pauliho vylučovací princip

## 13. ENERGIE A LIDSTVO

## 14. VODNÍ, VĚTRNÁ A SLUNEČNÍ ENERGIE

## 15. ŠTĚPENÍ JADER

- **štěpení jádra** = reakce, při níž se jádro rozdělí na dvě i více lehčích částí a uvolní se energie
- je způsobeno zpravidla ostřelováním jader částicemi, zejména neutrony, nebo je spontánní
- při štěpení vznikají 2 nebo 3 neutrony, které vyvolají další štěpení, čímž dochází k **řetězové reakci**
- kromě neutronů jsou produktem i tvrdé gama fotony
- štěpením se uvolní se energie :  $Q = A\varepsilon - (A_1\varepsilon_1 + A_2\varepsilon_2) = A(\varepsilon - \varepsilon_s) \approx 240 \cdot 0,8 \text{ MeV} \approx 200 \text{ MeV}$
- energie je energeticky dále využitelná
- původ štěpné reakce se dá vysvětlit vznikem metastabilního jádra po pohlcení neutronu, které se ve stavu výraznější deformace může roztrhnout
- **podmínka štěpení** – z Weiszäckerovy formule plyne :  $\gamma \frac{Z^2}{A^{1/3}} > \beta A^{2/3}$  , tzn.  $\frac{Z^2}{A} > 17$
- ve skutečnosti se díky energetické bariéře štěpí jádra až od  $A = 210$

### Účinný průřez

- jádra vznikají štěpením mají přebytek neutronů – ty označujeme **sekundární zpožděné neutrony**
- protože mají energie až 1 MeV, musí být zpomaleny tzv. moderátorem (D<sub>2</sub>O, grafit)
- úkolem moderátoru je zvětšení **účinného průřezu**  $\sigma$  [barn = 10<sup>-28</sup> m<sup>2</sup>] = střední počet reakcí za jednotku času na 1 reakčním centru při jednotkovém toku dopadajících částic
- počet reakcí za čas je dán vztahem :  $Nj\sigma$   
kde N ... počet reakčních center  
j ... tok dopadajících částic  
 $\sigma$  ... účinný průřez
- D<sub>2</sub>O :  $\sigma = 1,1$  mbarn
- grafit :  $\sigma = 3,8$  mbarn
- H<sub>2</sub>O :  $\sigma = 670$  mb (vyžaduje obohacení aspoň 3 % <sup>235</sup>U)
- moderováním se sníží energie neutronů na cca 0,05 eV

### Bilance neutronů, multiplikační faktor

- těžká jádra lze štěpit jedním neutronem a v důsledku štěpení vzniká více než jeden neutron
- pro efektivní počet neutronů na záchyt platí :  $\eta = \frac{\nu\sigma(n, f)}{\sigma(n, f) + \sigma(n, \gamma)}$   
kde  $\nu$  ... počet uvolněných neutronů  
 $\sigma(n, f)$  ... účinný průřez štěpení  
 $\sigma(n, \gamma)$  ... účinný průřez bez radiačního záchytu
- každý neutron účastní se štěpení prochází následujícím cyklem: vzniká v reakci štěpení, jistou dobu setrvá ve volném stavu a potom se buď ztrácí nebo znovu štěpí jádro, čímž vzniknou další neutrony – tzv. **neutronový cyklus**
- protože každé nové štěpení začíná jen jedním neutronem, který má za následek rozmnožení počtu štěpení až do řetězové reakce, zavedl se tzv. **multiplikační faktor**  $k$  = poměr celkového počtu neutronů vzniklých při štěpení k celkovému počtu neutronů pohlcených za týž časový interval

- nabývá tří významných hodnot:
  - a) kritický stav –  $k = 1$
  - b) podkritický stav –  $k < 1$ , zánik reakce
  - c) nadkritický stav –  $k > 1$ , reakce se lavinovitě rozvíjí do doby, dokud nenastane stav  $k < 1$

### Uran

- chemický prvek skupiny aktinoidů s protonovým číslem 92, relativní atomovou hmotnost 238, teplotou tání  $1100^{\circ}\text{C}$  a varu  $3800^{\circ}\text{C}$  a hustotou  $19050\text{ kg/m}^3$
- je to stříbrolesklý radioaktivní kov
- v přírodě se vyskytuje ve sloučeninách, např. ve smolinci a karnalitu
- připravuje se například redukcí fluoridu uraničitého
- je chemicky velmi reaktivní – slučuje se s halogeny za obvyčejné teploty, se sírou a dusíkem při  $500^{\circ}\text{C}$  a s fosforem a uhlíkem už při  $100^{\circ}\text{C}$
- reaguje i s vodíkem za vzniku hydridu, který se za vyšší teploty rozkládá
- v jemně rozptýleném stavu reaguje s vodou již za obvyčejné teploty
- ve sloučeninách má oxidační číslo II až VI
- nejdůležitější izotopy:
  - a)  $^{238}\text{U}$  s poločasem rozpadu  $4,5 \cdot 10^9$  let – nedochází u něj k samovolnému štěpení; jen 60% neutronů má energii dostatečnou pro štěpení ( $> 1,4\text{ MeV}$ ), přičemž jen cca každý pátý vyvolá štěpení
  - b)  $^{235}\text{U}$  s poločasem rozpadu  $7,0 \cdot 10^8$  let – je vhodný pro výrobu jaderných zbraní i použití v jaderných reaktorech; dá se připravit uran až o čistotě 99 %; odpadním produktem jeho výroby je tzv. ochuzený uran sloužící k výrobě protitankových dělostřeleckých nábojů; neutrony mají energii až 3 MeV; k samovolnému štěpení dochází za tzv. kritické hmotnosti 47 kg a kritickém objemu 2,5 l
- v jaderných reaktorech se používá např. tzv. **přírodní uran** ( $99,3\% \text{ } ^{238}\text{U} + 0,7\% \text{ } ^{235}\text{U}$ )
- přirozený uran se samovolně neštěpí
- chceme-li vyvolat štěpení, musíme ho buď obohatit (aspoň 7 % izotopu 235 nebo aspoň 5 % 239 plutoniem), nebo zpomalit neutrony
- obohacení vede k množivým reaktorům a zpomalení ke standardním reaktorům

### Černobyl

- černobylská jaderná elektrárna leží na Ukrajině, 16 km od hranic s Běloruskem
- skládá se ze čtyř reaktorů (RBMK 1000) moderovaných grafitem – celkem o výkonu 3,2 GW
- 26. duben 1986 v 1:23:58 místního času – nejhorší jaderná havárie v historii jaderné energetiky
- katastrofa je přisuzována špatnému návrhu reaktoru a chybám, jenž udělali operátoři, kteří kvůli nedostatečnému proškolení nechápali, jak reaktor pracuje pod nízkým stupněm reaktivity
- významnou vadou reaktoru byla také konstrukce jeho regulačních tyčí
- ty nebyly zcela naplněné – ve chvíli, kdy se zasouvaly, byla na prvních pár sekund chladicí kapalina nahrazena dutými částmi regulačních tyčí
- celá havárie se stala díky experimentu – otestování schopnosti generátoru reaktoru vyrábět potřebné množství elektřiny k napájení bezpečnostních systémů reaktoru v případě výpadku energie z reaktoru i vnějších zdrojů elektrické energie
- konstruktér elektrárny počítal s tím, že v takovém případě by měla roztočená turbína poskytnout dostatek energie nutné pro bezpečné odstavení reaktoru
- vyzkoušení, zda je tomu tak skutečně, mělo původně dojít ještě před spuštěním reaktoru, ale politický tlak na rychlé uvedení elektrárny v činnost způsobil, že byl test odložen

- podle plánu měl být reaktor použit k roztočení turbíny, poté měla být turbína od reaktoru odpojena a měla se dál točit jen vlastní setrvačností
- výstupní výkon reaktoru měl být snížen z normálního výkonu 3,2 GW na 700 MW, operátoři snížili výkon až k 30 MW
- následkem toho se zvýšila koncentrace produktu štěpení ( $^{135}\text{Xe}$ , ten pohlcuje elektrony), který by se normálně při vyšších hodnotách výkonu v reaktoru ihned přeměňoval dále
- tomuto jevu se říká **xenonová otrava reaktoru**
- další související jev je pád reaktoru do stavu tzv. **jódové jámy**
- vlivem snížení výkonu se uplatnily parazitní izotop jódu vznikající při štěpné reakci
- ten po několik hodin nedovolí obnovit činnost reaktoru, dokud nedojde k jeho rozpadu
- přestože se úbytek výkonu přiblížil bezpečnostní mezi, osádka se rozhodla nezastavit reaktor a pokračovat v experimentu a navíc zvýšila výstupní výkon z 30 MW jen na 200 MW
- kvůli přemíře  $^{135}\text{Xe}$  byly regulační tyče vysunuty z reaktoru dále, než by bylo přípustné
- jako součást experimentu spuštěny vodní pumpy poháněné generátorem – vodní tok se neustále zvyšoval, a protože voda také pohlcuje neutrony, toto další zvýšení vodního toku si vynutilo odstranění všech regulačních tyčí
- v 1:23:04 byl vypnut přívod elektřiny do vodních pump a začal je pohánět jen generátor setrvačností, čímž se vodní tok zmenšoval
- turbína byla odpojena od reaktoru a tlak páry v jádru reaktoru se zvyšoval
- jak se chladicí kapalina zahřívala, v jejím potrubí se začaly vytvářet kapsy páry
- operátoři se snažili o kompletní vysunutí všech regulačních tyčí
- kvůli pomalému mechanismu spouštění a jejich dutým koncům, došlo ke zvýšení reakčnosti
- zvýšená produkce tepla způsobila deformaci vedení regulačních tyčí, které se zasekly
- během pár sekund vzrostl výkon reaktoru na asi 30 GW
- palivové tyče se tavily a tlak páry způsobil expanzi, která odhodila kryt reaktoru (hmotnost 1000 t)
- asfalt na střeše budovy, jež měla chránit okolí před únikem radiace, se vznítil od žhavých trosek vyletujících z reaktoru a následně se střecha propadla
- okamžitě potom zahájil příval kyslíku v kombinaci s obrovskou teplotou paliva hoření grafitu – tento požár velkou měrou přispěl k rozptýlení radioaktivního materiálu
- po havárii přijeli hasiči hasit, ale nikdo jim neřekl, že má reaktor teplotu asi 2000°C
- při této teplotě se voda rozkládala na vodík a kyslík a opětné slučování těchto látek provázely výbuchy, které dále přispěly k úniku radioaktivity – celkem se uvolnilo 5-12 EBq radioaktivity
- 203 lidí bylo okamžitě hospitalizováno, z nich 31 zemřelo (28 z nich na akutní nemoc u ozáření)
- 5 mil. lidí zasaženo, 135 000 lidí bylo z oblasti evakuováno, 4000 osob zemřelo
- předpokládá se po 70 let min 2 % zvýšení úrovně rakoviny u většiny zasaženého obyvatelstva
- dalších 10 jedinců zemřelo v důsledku havárie na rakovinu
- po havárii byl nad reaktorem postaven betonový sarkofág, který ho ale nedokáže trvale uzavřít
- jeho konstrukce má za následek jeho rychlé stárnutí a pokud by se zhroutil, mohl by se uvolnit další mrak radioaktivního prachu
- pod sarkofágem totiž zůstalo po havárii asi 95 % paliva reaktoru

### Oklo

- Oklo – řeka v Gabunu, u níž jsou uranové doly
- r. 1972 – bylo zde identifikováno 16 vyhořelých prehistorických reaktorů (z doby před 1,8 mld let)
- reaktory pracovaly s obohaceným uranem a byly moderovány vodou
- systém fungoval více než 150 tis. let, a to s průměrným výkonem cca 100 kW
- regulace vypařováním vody
- důsledky: před 2 mld let platila stejná fyzika jako dnes a radioaktivní odpad (kromě Kr) lze udržet na jednom místě až 2 mld let



## 16. SLUČOVÁNÍ JADER

- *slučování jader* = *syntéza* = *fúze* = jeden ze způsobů, jak přeměnit klidovou energii jader na energii kinetickou, tzn. na teplo
- je to v podstatě jediným, dlouhodobě využitelným zdrojem energie s dostatečným výkonem pro uspokojení současných i budoucích energetických potřeb lidstva
- vzhledem k tomu, že zásoby paliv používaných v současné době vystačí pouze na několik málo stovek let, je nejvyšší čas začít se věnovat výzkumu v oblasti termojaderné fúze
- problémem jsou jen vysoké finanční nároky na výzkum
- spojíme-li dvě lehká jádra, bude mít výsledné jádro menší energii než je energie jader, která do reakce vstoupila
- uvolněná kinetická energie je odnášena uvolněnými protony, neutrony nebo gama zářením
- k tomu, aby se k sobě jádra dostatečně blízko přiblížila a udržela se u sebe, musí mít vysokou rychlost a energii, aby překonaly odpuzivé srážky
- potřebná energie k překonání odpuzování je dána :  $E = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 R} \approx 360\text{keV} \approx 4\text{mldK}$
- doba udržení vysoké energie plyne ze vztahu :  $P_{out} = \frac{E}{\tau}$
- při teplotě T platí pro energii :  $E = 2\frac{3}{2}n_e k_B T$
- musí být splněno **Lawsonovo kritérium** = při termonukleární fúzi v plazmatu musí vzniknou větší množství energie než je energie potřebné k ohřevu a náhradě ztrát zářením, tzn.  $n_e \tau > \frac{12k_B T}{\langle \sigma v \rangle E_{CH}}$
- 3 metody udržení vysoké energie jader
  - a) gravitační – termojaderné fúze probíhají např. na Slunci, kterému umožňují neustále zářit
  - b) magnetické pole – tokamaky
  - c) lasery
- př. slučování jader
  - a)  $D + D \rightarrow (50\%) \text{}^3\text{He} (0,8 \text{ MeV}) + n (2,45 \text{ MeV})$   
 $\rightarrow (50\%) \text{T} (1,0 \text{ MeV}) + p (3,02 \text{ MeV})$
  - b)  $D + T \rightarrow (50\%) \text{}^4\text{He} (3,5 \text{ MeV}) + n (14,1 \text{ MeV})$

### Tokamak (=fúzní reaktor)

- r. 1950 – zkonstruoval ho Tamm a Sacharov
- je to obrovský transformátor (20 x 15m), jehož sekundární cívka mající pouze jeden závit má tvar toroidní trubice
- plazma tvořené deuteriem a tritiem se nachází právě této trubice, ve které je jinak vakuum
- el. proud procházející primárním vinutím indukuje v sekundárním obvodu elektromotorické napětí
- v plynu D+T vznikne výboj, plyn se ionizuje a indukovaný proud ho zahřívá na 100 milionů °C
- magnetické pole tohoto proudu udrží vzniklé plazma v ose toroidu, takže se stěn toroidu nedotýká
- díky magnetickému poli, které udržuje plazma v dostatečné vzdálenosti od stěn, se sníží tepelné zatížení stěn komory na technologicky zvládnutelnou hodnotu (1000°C)
- pracuje v pulzním režimu
- do vyčerpané prstencové vakuové nádoby se napustí plyn s vysokou hustotou částic
- proudem tisíců až miliónů A se plyn zahřeje na 10 keV

- k dosažení potřebné teploty se používá ještě doplňkový ohřev:
  - a) ohřev cyklotronní elektronovou rezonancí
  - b) vstřikováním neutrálních částic
  - c) ohřev parametrickými vlnami
  - d) radiofrekvenční ohřev (25 – 55 MHz)
- díky vysoké teplotě se dostanou atomy vodíku k sobě na malou vzdálenost a sloučí se na helium
- hlavní část energie vzniklé touto reakcí je odnášena přebytečnými neutrony, které nejsou zachycovány magnetickou pastí
- vysokoenergetické neutrony jsou zachycovány až obálkou reaktoru, která je tvořena vodou chlazenými štíty s velkým obsahem beryllia
- jako součást obálky reaktoru by bylo možné použít také  ${}^6\text{Li}$
- lithium se navíc pod dopadem neutronů mění na tritium a díky tomu by bylo možné přímo získat tu část paliva tokamaku, která se v přírodě volně téměř nevyskytuje
- tritium by se oddělovalo a odvádělo do skladů nového paliva, v nichž by se podchlazovalo do tvaru kuliček (0,01 mg a poloměr 0,05 mm) a společně s deuteriem vstříkovalo zpět do reaktoru
- největším mezinárodním projektem je výstava obřího tokamaku **ITER** ve Francii
- v ČR je tokamak Castor (v Ústavu fyziky plazmatu AV ČR, který bude nahrazen Compass-D)
- rozměry reaktoru a jeho výkon závisí obvykle na vlastnostech materiálu, které tvoří plášť reaktoru, nikoli od vlastností plazmatu
- předpokládá se, že elektrický výkon těchto reaktorů by byl 2 – 3 GW

hlavní poloměr [m]	3	6,2
vedlejší poloměr [m]	1,25	2
objem [m <sup>3</sup> ]	155	837
proud [mA]	5 – 7	15
magnetické pole [T]	3,4	5,3
trvání pulsu [s]	10	> 300
termonukleární výkon [MW]	10	500
energie neutronů [kW/m <sup>2</sup> ]	60	600