

**MATEMATICKO-FYZIKÁLNÍ
FAKULTA**
Univerzita Karlova

BAKALÁŘSKÁ PRÁCE

Štěpán Janoušek

Úlohy pro práci s aplety – jednodimenzionální a dvoudimenzionální jednoduché problémy v kvantové mechanice

Katedra didaktiky fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Zdeňka Koupilová, PhD.

Studijní program: Fyzika se zaměřením na vzdělávání

Studijní obor: FMUP

Praha 2024

Prohlašuji, že jsem tuto bakalářskou práci vypracoval(a) samostatně a výhradně s použitím citovaných pramenů, literatury a dalších odborných zdrojů. Tato práce nebyla využita k získání jiného nebo stejného titulu.

Beru na vědomí, že se na moji práci vztahují práva a povinnosti vyplývající ze zákona č. 121/2000 Sb., autorského zákona v platném znění, zejména skutečnost, že Univerzita Karlova má právo na uzavření licenční smlouvy o užití této práce jako školního díla podle §60 odst. 1 autorského zákona.

V dne

Podpis autora

Děkuji RNDr. Zdeňce Koupilové, PhD., která svými cennými radami a připomínkami značnou měrou přispěla ke vzniku této práce.

Děkuji studentům, kteří řešili úlohy z pracovních listů uvedených v přílohách této práce. Jejich zpětné vazby k úlohám si velmi cením.

Název práce: Úlohy pro práci s aplety – jednodimenzionální a dvoudimenzionální jednoduché problémy v kvantové mechanice

Autor: Štěpán Janoušek

Katedra: Katedra didaktiky fyziky

Vedoucí bakalářské práce: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D., Katedra didaktiky fyziky

Abstrakt: Práce sestává z pěti pracovních listů, které obsahují úlohy zaměřené na jednoduché problémy kvantové mechaniky, konkrétně na jednodimenzionální a dvoudimenzionální nekonečnou pravoúhlou potenciálovou jámu a jednodimenzionální a dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor. Jeden z pracovních listů je věnován superponovaným stavům. V pracovních listech lze nalézt úlohy převzaté či nově vytvořené. Součástí práce je také studijní text věnovaný vrstevnicovým grafům. Studijní text i pracovní listy jsou určeny primárně pro studenty druhého ročníku studijního programu Fyzika se zaměřením na vzdělávání. Materiály jsou rovněž veřejně dostupné dalším zájemcům.

Klíčová slova: Stacionární stavy, vlnová funkce, hustota pravděpodobnosti, energie částice, časový vývoj

Title: Tasks accompanying applets – 1D and 2D simple problems in quantum mechanics

Author: Štěpán Janoušek

Department: Department of Physics Education

Supervisor: RNDr. Zdeňka Koupilová, Ph.D., Department of Physics Education

Abstract: This bachelor thesis consists of five worksheets containing tasks on simple quantum mechanics problems, namely on one-dimensional and two-dimensional infinite potential square well and one-dimensional and two-dimensional linear harmonic oscillator. One of the worksheets is focused on superposition states. In the worksheets you can find new tasks or tasks adopted from internet sources. The thesis also includes study text focused on contour plots. The study text and the worksheets were created mainly for the second grade students of the study sphere Physics with the focus on education. The materials are also publicly available for the other interested people.

Keywords: Stationary states, wave function, propability density, particle energy, time development

Obsah

Úvod	2
1 O apletech	3
2 Popis pracovních listů	4
2.1 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma	4
2.2 Lineární harmonický oscilátor	5
2.3 Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor	7
2.4 Dvoudimenzionální nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma	8
2.5 Superponované stavy	9
2.6 Vrstevnicové grafy	11
3 Zpětná vazba od studentů	12
Závěr	13
Seznam použité literatury	14
Seznam obrázků	16
A Přílohy	17
1 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma	17
1.1 Zadání úloh	17
1.2 Řešení úloh z pracovního listu „Nekonečná pravoúhlá po- tenciálová jáma“	20
2 Lineární harmonický oscilátor	23
2.1 Zadání úloh	23
2.2 Řešení úloh z pracovního listu „Lineární harmonický osci- látor“	25
3 Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor	27
3.1 Zadání úloh	27
3.2 Řešení úloh z pracovního listu „Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor“	29
4 Dvoudimenzionální nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma	32
4.1 Zadání úloh	32
4.2 Řešení úloh z pracovního listu „Dvoudimenzionální neko- nečná pravoúhlá potenciálová jáma“	35
5 Vrstevnicové grafy	37
6 Superponované stavy	46
6.1 Zadání úloh	46
6.2 Řešení úloh z pracovního listu „Superponované stavy“	49

Úvod

Cílem této bakalářské práce bylo vytvořit sadu úloh pro práci s aplety, které zobrazují řešení jednoduchých kvantových systémů s jednou částicí. Měl jsem o vypracování této práce zájem, neboť jsem po absolvování kurzu kvantové mechaniky ve druhém ročníku měl chuť se kvantovou mechanikou zabývat dál.

Tato bakalářská práce obsahuje paragraf zaměřený na využití apletů ve výuce, následně popis úloh, které jsou obsahem vytvořených pracovních listů, které tvoří přílohy této práce. Listy obsahují zadání úloh a na další straně poté i jejich podrobná řešení.

V září roku 2023 jsem se seznamoval s dostupnými úlohami, což mi pomohlo si řešení jednoduchých problémů kvantové mechaniky osvěžit a prohloubit si své znalosti. Následovala tvorba konkrétních zadání a vypracování řešení úloh. Grafy, které jsou v pracovních listech uvedeny, jsem vytvořil v programu Wolfram Mathematica, jehož studentskou licenci užívám. Původně jsem zamýšlel v práci využít jen grafy dostupné v apletech na stránkách QuVis, nicméně grafy vytvořené zmíněným programem lze upravovat dle potřeby a docílit tak grafu, který bude pro studenty přehledný. Například jsem u každého grafu nastavil duhovou barevnou škálu, aby byly dobře patrné rozdíly ve funkčních hodnotách. U grafů řešení dvoudimenzionálních problémů jsem pro přehlednost ve všech pracovních listech dodržel jejich stejné natočení. U každého grafu jsem ponechal stejné barevné rozmezí, k vrstevnicovým grafům jsem také doplnil i legendu, aby byl graf dobře srozumitelný a studenta nemátl. Při tvorbě grafů jsem využil skript [1], ve kterých jsou uvedeny předpisy vlnových funkcí stacionárních stavů nekonečné pravoúhlé potenciálové jámy a lineárního harmonického oscilátoru. S tvorbou grafů jsem měl hlavně ze začátku menší obtíže, neboť jsem program Wolfram Mathematica nikdy předtím nepoužíval. Zkušenosti jsem měl pouze s programem Wolfram Player, který jsem používal při studiu diferenciální geometrie.

Kromě pracovních listů jsem vytvořil také studijní text věnovaný vrstevnicovým grafům. Tento text obsahuje návod, jak kreslit vrstevnicové grafy vlnových funkcí a hustot pravděpodobnosti v případě řešení dvoudimenzionálních problémů. Tento typ grafů může být pro některé studenty přehlednější než klasický graf, proto jsem se rozhodl tomuto typu grafů věnovat samostatnou část.

1. O apletech

Na základě vlastní zkušenosti mohu říci, že aplety mohou pomoci studentům ve studiu kvantové mechaniky. S aplety, se kterými pracuji v této bakalářské práci, jsem se poprvé seznámil v rámci předmětu „Úvod do kvantové mechaniky a kvantové teorie.“. Kromě nich bych chtěl ještě uvést dva další aplety, které mne zaujaly, a to aplet z kolekce PhET, který zobrazuje vnější fotoelektrický jev [2] a také aplet demonstrující Stern-Gerlachův experiment z kolekce QuVis [3]. Tyto aplety považuji rovněž za velmi nápomocné při studiu kvantové mechaniky.

Aplety z kolekce PhET pokrývají řadu témat z přírodních věd. Student si může vyzkoušet, jaké to je, být vědcem a zkoumat nějaký fyzikální či chemický jev [4]. Pomocí simulací si mohou studenti nechat zobrazit jev, o kterém se právě učí. To je přínosné zejména v případě, kdy se jedná o jevy, které je téměř nemožné ukázat žákům pomocí reálného experimentu. Učitel může použít simulace jednak při výuce, jako ukázkou probírané látky nebo také jako materiál pro domácí úkoly [4]. V ostatních, klasičtějších oblastech fyziky mohou hrát aplety při studiu roli spíše doplňkovou, v kvantové mechanice pak nabývají na významu. Tato oblast fyziky zkoumá jevy odehrávající se na mikroskopické úrovni. Aplety mohou pomoci učinit neviditelné viditelným a lépe proniknout do tajů, které kvantová mechanika skýtá [5].

V roce 2020 byli studenti kvůli pandemii covid-19 odkázáni na studium z domova. Ve svém článku zaměřeném na využití apletů při výuce uvádí autoři mj. toto: „Protože distanční výuka si vyžádala hodně času stráveného u počítače, jevíly se aktivity spojené s objevováním apletů jako smysluplné“ [6]. Moje osobní zkušenost s aplety je pozitivní, jako člověka studujícího daný fyzikální jev mě bavilo objevovat určité zákonitosti a ověřit si svoje hypotézy na konkrétních příkladech.

Při tvorbě úloh jsem se inspiroval úlohami zveřejněnými na stránkách QuVis apletů. Seznámil jsem se jednak s úlohami dostupnými pro širší veřejnost (po rozkliknutí na příslušný aplet v sekci Challenges), jednak s úlohami určenými pro vyučující. Zároveň jsem vytvořil i zcela vlastní úlohy. Na začátku každého pracovního listu je několik otázek, které nabádají studenta, aby si připomněl, co už se o daném tématu naučil, aby se mu úlohy lépe řešily.

Aplety, ke kterým jsem úlohy vybíral či vytvářel, jsou ze dvou zdrojů.

Nejprve jde o aplety z kolekce PhET. Na webové stránce <https://phet.colorado.edu/cs/simulations/filter?type=html> lze nalézt hned několik simulací zaměřených na kvantovou mechaniku. PhET simulace prošly několika testováním, jsou tedy spolehlivým nástrojem pro studium nejen fyzikálních jevů [4].

Druhou skupinu apletů tvoří aplety z kolekce QuVis, což je zkratka slov „The Quantum Mechanics Visualisation Project“. Jde o projekt Univerzity v St Andrews ve Skotsku. České překlady některých apletů jsou k dispozici na stránce <https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/>.

2. Popis pracovních listů

2.1 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

V tomto pracovním listu řešitel pracuje s řešením nekonečné pravoúhlé jednodimenzionální potenciálové jámy. Pracovní list obsahuje pět úloh. Při řešení prvních tří úloh řešitel využije aplet z kolekce QuVis [7], zbylé dvě úlohy jsem vytvořil pro práci s apletem z kolekce PhET [8]. Na začátku sekvence úloh určených pro práci s daným apletem je uveden obrázek převzatý z příslušné webové stránky, na kterém je vidět příklad správného nastavení daného apletu. V řešení úloh uvedených v tomto pracovním listu uvádím vzorce převzaté ze skript [1], konkrétně vzorec pro výpočet energie částice a podobu časového členu vlnové funkce. V řešení jedné z úloh také uvádím převod joulů na elektronvolty [9] a hodnotu redukované Planckovy konstanty [10].

První úloha je zaměřena na práci s grafem. Student má rozhodnout, zda je uvedený graf grafem vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti. Poté má určit energii částice nacházející se v daném stavu. Zde jsem se inspiroval úlohou z webu FyzWeb, která je ale zaměřena na dvoudimenzionální nekonečnou jámu [11].

Ve druhé úloze student mění šířku jámy a pozoruje, jak se změní energetické spektrum jámy a graf vlnové funkce či hustoty pravděpodobnosti. Tuto úlohu jsem převzal z pracovního listu z webu QuVis [12].

Následuje úloha, kde má student za úkol najít souřadnice míst v jámě, kde nalezneme částici s nulovou pravděpodobností. Tuto úlohu jsem částečně převzal z pracovního listu dostupného na QuVis webu. Tam lze nalézt úlohu, kde je naopak po řešiteli vyžadováno najít souřadnice míst, kde najdeme částici s největší pravděpodobností [12]. Použil jsem rovněž jiná kvantová čísla.

Pro poslední dvě úlohy jsem se rozhodl využít aplet z kolekce PhET, jelikož dokáže zobrazit časový vývoj stacionárního stavu a konkrétní hodnoty energie v elektronvoltech. Když pracuje řešitel s konkrétními čísly, tak si, dle mého názoru, lépe zapamatuje proces řešení úlohy a lépe si tak osvojí studovaný fyzikální jev. Pro PhET aplet jsem se rozhodl i přesto, že nezobrazuje nekonečnou, nýbrž po vhodném nastavení parametrů „jen“ velmi hlubokou jámu.

Čtvrtá úloha je zaměřena na časový vývoj stacionárních stavů částice v jámě. Řešitel porovnává časový vývoj stacionárních stavů s odlišnou energií a má za úkol se zamyslet, zda je vypočítané ve shodě s teorií, se kterou se seznámil dříve.

V páté úloze řešitel nastaví zadané parametry a pomocí apletu určuje rozdíly mezi dvěma sousedními energetickými hladinami. Na základě určených hodnot má poté stručně popsat, jaké je energetické spektrum nekonečné potenciálové jámy. Aby se řešitel svými výsledky přiblížil nekonečné jámě, nastaví dle instrukcí jámu co nejhlubší a pracuje pouze s prvními pěti energetickými hladinami, kde rozdíly mezi řešením konečně hluboké a nekonečné jámy nejsou tak velké. Upravil jsem zadání jedné úlohy z materiálů z QuVis webu [12], v jejímž zadání je pozorovat rozdíly mezi energetickými hladinami bez určování konkrétních hodnot.

2.2 Lineární harmonický oscilátor

V tomto pracovním listu řešitel pracuje s řešením lineárního harmonického oscilátoru. Pracovní list obsahuje šest úloh, které jsem sestavil pro práci s apletem z kolekce PhET [8], neboť tento aplet dokáže zobrazit konkrétní hodnoty energetických hladin a také časový vývoj grafu vlnové funkce. Na začátku pracovního listu je uveden obrázek převzatý z příslušné webové stránky, na kterém je vidět příklad správného nastavení apletu. V řešení úloh uvedených v tomto pracovním listu uvádím vzorce převzaté ze skript [1], konkrétně vzorec pro výpočet potenciální energie částice (z klasické fyziky), vzorec pro n -tou hladinu energie LHO a podobu časového členu vlnové funkce. V řešení jedné z úloh také uvádím převod joulů na elektronvolty [9] a hodnotu redukované Planckovy konstanty [10].

První dvě úlohy tohoto pracovního listu jsou zaměřeny na seznámení s tím, co PhET aplet zobrazuje a jaké parametry může řešitel v apletu měnit. V úloze číslo 1 má řešitel za úkol měnit hmotnost částice a sledovat, jak se změní průběh potenciální energie. V této úloze se uplatní klasický, nikoliv kvantový přístup.

Ve druhé úloze je úkolem řešitele zobrazit panel „Configure Potential“ a popsat, jaké veličiny jsou v nabídce uvedeny a v jakých jsou jednotkách. Dále řešitel úlohy pozoruje, jak se se změnou těchto veličin mění průběh potenciální energie.

Tyto dvě úlohy byly inspirovány úlohami z materiálů QuVis [13]. Tento typ úloh se vyskytuje v pracovních listech QuVis velmi často, jde zpravidla o první úlohu z listu, kde se student poprvé seznámí s apletem a zjistí, co a jak zobrazuje. Tento přístup považuji za užitečný, a proto jsem se rozhodl dvě úlohy na seznámení s apletem zařadit na začátek tohoto pracovního listu.

Třetí úloha je zaměřena na časový vývoj stacionárních stavů v LHO. Řešitel má za úkol porovnat časový vývoj stavů s odlišnou energií a svoje pozorování poté porovnat s teorií.

Čtvrtá úloha je znovu zaměřena na časový vývoj; řešitel nastaví postupně dvě různá minima potenciální energie a pro každou z možností porovnává časový vývoj grafu vlnové funkce odpovídající základnímu a druhému excitovanému stavu. První minimum potenciální energie dává poměrně překvapivý výsledek: graf vlnové funkce odpovídající základnímu stavu se v čase vyvíjí s větší „frekvencí“. Jde totiž o stav s větší absolutní hodnotou energie, která se vyskytuje v časovém členu vlnové funkce.

V další úloze řešitel zkoumá grafy hustoty pravděpodobnosti. Nejprve má za úkol vypořádat, zda mají lokální maxima všechna stejnou hodnotu. Následně má za úkol najít vztah mezi kvantovým číslem popisujícím stav, jemuž odpovídá daná hustota pravděpodobnosti, a počtem jejích lokálních maxim. Druhou část této úlohy jsem převzal z pracovního listu z webu QuVis [14] zaměřeném na dvoudimenzionální potenciálovou jámu, kde lze nalézt úlohu na zkoumání vztahu kvantového čísla a počtem lokálních extrémů vlnové funkce či hustoty pravděpodobnosti.

Šestá úloha je zaměřena na zkoumání energetického spektra LHO. Tuto úlohu jsem částečně převzal z pracovního listu z webu QuVis [12], kde lze nalézt úlohu na zkoumání energetického spektra jámy. Řešitel zjišťuje pro každé kvantové číslo hodnotu energie a následně určuje rozdíly mezi sousedními dvěma hladinami. Řešitel pracuje s konkrétními čísly, v řešení je potom uveden výpočet rozdílu dvou libovolných sousedních hladin. Cílem této úlohy je objevit či ověřit, že energetické spektrum LHO je ekvidistantní. I přesto, že řešitel pracuje se zaokrouhlenými hodnotami, lze naměřené hodnoty a vypočítané rozdíly energetických hladin brát jako ověření toho, že spektrum LHO je ekvidistantní.

2.3 Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor

V tomto pracovním listu pracuje řešitel s řešením dvoudimenzionálního lineárního harmonického oscilátoru. Úlohy jsem sestavil pro práci s apiletem z kolekce QuVis [15]. Celkem se v tomto pracovním listu nachází pět úloh. Na začátku pracovního listu je uveden obrázek převzatý z příslušné webové stránky, na kterém je vidět příklad správného nastavení apletu. V řešení úloh uvádím vzorce pro n -tou hladinu energie 1D i 2D LHO převzaté ze skript [1].

První úlohu jsem převzal z pracovního listu ze stránky QuVis [14]. Řešitel má za úkol nastavovat různé kombinace kvantových čísel a pozorovat výsledný graf vlnové funkce. Jeho úkolem je najít vztah mezi kvantovými čísly a počtem lokálních extrémů.

Druhá úloha navazuje na úlohu předchozí. Nyní má řešitel přijít na to, jaká kombinace kvantových čísel zaručí, aby měla vlnová funkce konkrétní počet lokálních extrémů. U této úlohy jsem se inspiroval v pracovním listu na webu QuVis [14].

V zadání třetí úlohy je úkolem nalézt souřadnice míst, kde s největší pravděpodobností nalezneme částici nacházející se ve stavu popsáném zadanými kvantovými čísly. Po řešiteli se nevyžaduje nalézt konkrétní souřadnice, nýbrž pouze slovy popsat, kde se hledaná místa nacházejí. Tuto úlohu jsem převzal z pracovního listu z webu QuVis zaměřeného na jednodimenzionální nekonečnou jámu [12] a upravil ji pro dvoudimenzionální oscilátor.

Čtvrtá úloha je inspirována úlohou ze serveru FyzWeb [15] a úlohou z pracovního listu z webu QuVis [14]. Řešitel má vyjádřit celkovou energii částice nacházející se ve stavu popsáném danými kvantovými čísly. Na serveru FyzWeb je podobná úloha, v jejímž zadání je najít kvantová čísla n_x a n_y tak, aby energie částice nacházející se v tomto stavu měla nějakou konkrétní hodnotu, např. $3\hbar\omega$. Zadání druhé úlohy, která mi byla inspirací, je zamyslet se, jak lze určit energii částice, pokud známe energie E_x a E_y . Tuto otázku jsem položil řešiteli již ve vstupních otázkách, které jsou na začátku pracovního listu.

Pátá úloha je zaměřena na práci s grafy. Zde jsem se opět inspiroval na serveru FyzWeb [15], kde jsou úlohy zaměřené rovněž na práci s grafy. Úkolem v zadání páté úlohy je určit, zda je uvedený graf grafem vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti a poté vyjádřit celkovou energii částice nacházející se v uvedeném stavu. Na serveru FyzWeb [15] je uvedena úloha, kde má řešitel určit kvantová čísla na základě grafu vlnové funkce. Stejný úkol ale musí splnit i v páté úloze mého pracovního listu, pokud chce správně vyjádřit energii částice.

2.4 Dvoudimenzionální nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

V tomto pracovním listu pracuje řešitel s řešením dvoudimenzionální nekonečné pravoúhlé potenciálové jámy. Úlohy jsem sestavil pro práci s apletem z kolekce QuVis [11]. Celkem se v tomto pracovním listu nachází pět úloh. Na začátku pracovního listu je uveden obrázek převzatý z příslušné webové stránky, na kterém je vidět příklad správného nastavení apletu. V řešení úloh uvedených v tomto pracovním listu uvádím vzorec převzatý ze skript [1], konkrétně vzorec pro výpočet energie částice nacházející se v nekonečné 1D jámě. U výpočtu energie částice ve 2D jámě jsem vycházel ze vzorce uvedeného na webu FyzWeb [11].

První úlohu jsem převzal z pracovního listu dostupného na webu QuVis [14]. V zadání je najít vztah mezi hodnotami kvantových čísel a počtem lokálních maxim hustoty pravděpodobnosti, resp. počtem lokálních extrémů vlnové funkce.

Ve druhé úloze má řešitel za úkol určit, jaké kombinace kvantových čísel n_x a n_y zaručí, aby vlnová funkce odpovídající stavu popsaném těmito kvantovými čísly měla určitý počet lokálních extrémů. Tato úloha navazuje na úlohu přecházející, byla inspirována materiály na QuVis webu [14].

Třetí úloha je zaměřena na práci s grafem hustoty pravděpodobnosti. Řešitel má určit souřadnice míst, kde nalezneme částici s největší pravděpodobností. K zadání úlohy jsem uvedl nápovědu, že má řešitel využít graf hustoty pravděpodobnosti. V první podúloze vyžadují konkrétní souřadnice, neboť jde o nejjednodušší možný příklad; u druhé podúlohy už stačí pouze slovně popsat hledaná místa v jámě. Úlohu jsem upravil na základě úlohy z pracovního listu věnovaného jednodimenzionální nekonečné jámě [12].

Ve čtvrté úloze je úkolem vyjádřit celkovou energii částice nacházející se ve stavu popsaném danými kvantovými čísly. Zde jsem se inspiroval úlohou z pracovního listu z QuVis webu [14], v jejímž zadání je zamyslet se, jak pomocí energií E_{n_x} a E_{n_y} získáme celkovou energii částice E . Podobnou otázku pokládám rovněž na samotném začátku pracovního listu. Inspiraci jsem našel též u úlohy dostupné na serveru FyzWeb [11], kde lze nalézt úlohu na hledání kvantových čísel takových, aby celková energie částice byla $50E_1$.

U páté úlohy jsem se rovněž inspiroval úlohami z webu FyzWeb [11], kde lze nalézt hned několik úloh zaměřených na práci s grafy. Řešitel má v této úloze za úkol určit, zda je zadaný graf grafem vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti. Následně má vyjádřit celkovou energii částice. Konkrétně jsem se inspiroval u úlohy ze serveru FyzWeb [11], kde lze nalézt úlohu, ve které má řešitel za úkol na základě grafu vlnové funkce určit hodnotu kvantových čísel. V páté úloze mého pracovního listu musí řešitel rovněž nalézt nejprve kvantová čísla, aby mohl určit správně celkovou energii částice.

2.5 Superponované stavy

V tomto pracovním listu zkoumá řešitel superponované stavy. Celkem tento pracovní list obsahuje pět úloh. První tři úlohy jsem sestavil pro práci s apletem z kolekce QuVis [16]. V těchto úlohách se zabývá řešitel superponovanými stavy částice v nekonečné potenciálové jámě. Zbylé dvě úlohy jsem sestavil pro práci s apletem z kolekce PhET [8]. V těchto úlohách pracuje řešitel s lineárním harmonickým oscilátorem. Na začátku sekvence úloh určených pro práci s daným apletem je uveden obrázek převzatý z příslušné webové stránky, na kterém je vidět příklad správného nastavení daného apletu. V řešení úloh uvedených v tomto pracovním listu uvádím vzorce převzaté ze skript [1], konkrétně vzorec pro výpočet střední hodnoty energie částice nacházející se v superponovaném stavu a předpis vlnové funkce superponovaného stavu částice v jámě.

V první úloze má řešitel za úkol zkoumat časový vývoj grafu hustoty pravděpodobnosti odpovídající superpozici stavů ψ_1 a ψ_2 . Nastavuje hodnotu koeficientu u ψ_2 nejprve na nulu a poté na 1 nebo -1 a všímá si změny v časovém vývoji grafu hustoty pravděpodobnosti. V této úloze řešitel pracuje se superponovanými i stacionárními stavy. U této úlohy jsem se inspiroval u úlohy na serveru FyzWeb [16], v jejímž zadání je vybrat z nabídky stav, jehož hustota pravděpodobnosti je časově nezávislá.

V zadání druhé úlohy je určit pravděpodobnost naměření energie základního stavu, když se částice nachází v zadaném superponovaném stavu. Úlohu jsem částečně převzal z bakalářské práce Martina Landy [17], kde lze nalézt úlohu zaměřenou na spin elektronu. Poté řešitel pozoruje frekvenci vývoje grafu hustoty pravděpodobnosti a pro různé hodnoty koeficientů v lineární kombinaci pozoruje, zda frekvence na těchto koeficientech závisí, či nikoliv. Tuto podúlohu jsem částečně převzal z domácího úkolu, který mi byl zadán během účasti v kurzu kvantové mechaniky pro učitele.

Třetí úlohu jsem vytvořil na základě úlohy z pracovního listu z QuVis webu [18]. Student má za úkol zobrazit střední hodnotu polohy a určit, kdy je nezávislá na čase. Na webu QuVis je úloha, v jejímž zadání je nakreslit graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu, ve kterém je střední hodnota polohy časově nezávislá. Zadání úlohy jsem mírně upravil, neboť jsem považoval za nadbytečné, aby řešitel úlohy kreslil graf hustoty pravděpodobnosti.

Čtvrtá úloha je zaměřena na zkoumání grafů hustoty pravděpodobnosti. Řešitel nastavuje superponované stavy, které jsou superpozicí jen sudých nebo jen lichých stacionárních stavů. Má za úkol odhalit, co mají zobrazené funkce společného. Řešitel má dospět ke zjištění, že všechny hustoty pravděpodobnosti superponovaných stavů ze zadání úlohy jsou sudé funkce. Do zadání úlohy jsem přidal i příklad dvou stavů, jejichž hustoty pravděpodobnosti nejsou sudé funkce.

V páté úloze jsou uvedeny čtyři superponované stavy. Úkolem je vybrat stav s největší střední hodnotou energie. Do zadání úlohy jsem vybral takové stavy, ze kterých lze vybrat ten s největší střední hodnotou energie pouhou úvahou, žádný výpočet potřeba není. Pokud řešitel úlohy tuto úlohu vyřeší bez počítání, pak si ověří, že rozumí tomu, jak hodnoty koeficientů v superpozici ovlivňují

střední hodnotu energie. Zde jsem se rovněž inspiroval u bakalářské práce Martina Landy [17]. Řešitel úlohy poté u každého stavu určí periodu časového vývoje grafu hustoty pravděpodobnosti. Tuto podúlohu jsem částečně převzal z domácího úkolu, který mi byl zadán během účasti v kurzu kvantové mechaniky pro učitele.

2.6 Vrstevnicové grafy

Studijní text věnovaný vrstevnicovým grafům je koncipován tak, aby se čtenář naučil na základě zadaných kvantových čísel nakreslit vrstevnicový graf odpovídající vlnové funkce či hustoty pravděpodobnosti. Tento studijní text může pomoci čtenáři si řešení jednoduchých problémů kvantové mechaniky lépe představit.

Téma jsem rozdělil na dvě části: První část jsem věnoval dvoudimenzionální nekonečné potenciálové jámě, druhou část potom dvoudimenzionálnímu lineárnímu harmonickému oscilátoru. Takovéto uspořádání jsem zvolil z toho důvodu, že předpis pro vlnovou funkci popisující stacionární stav částice v jámě není tak složitý jako předpis pro vlnovou funkci popisující stav částice nacházející se v oscilátoru. V jednom odstavci uvádím předpis pro vlnovou funkci popisující stav částice nacházející se v dvoudimenzionální nekonečné jámě [1]. Vrstevnicový graf odpovídající jámě je potom zřejmě méně obtížné nakreslit.

Kreslení vrstevnicových grafů je časově náročné podle toho, jak pečlivě čtenář daný graf vykresluje. V textu jsem uvedl, že nám při kreslení nejde o přesné zachycení průběhu uvažované funkce, nýbrž o přibližný náčrtek. Se vzniklým náčrtem lze například pohodlněji hledat souřadnice bodů, ve kterých nabývá hustota pravděpodobnosti maxim a hledat tak souřadnice míst, kde najdeme částici s největší pravděpodobností.

Na začátku textu je uveden stručný popis toho, co jsou to vrstevnicové grafy a kde je řešitelé úloh uvedených v pracovních listech mohli potkat. Jako první aktivitu jsem zvolil kreslení vrstevnicového grafu na základě grafu klasického. V části věnované oscilátoru graf nekreslím, pouze uvádím graf vytvořený v programu Wolfram Mathematica. Poté následuje v obou částech kreslení vrstevnicového grafu hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu popsáném danými kvantovými čísly. Před samotným kreslením grafu pokládám otázky, které mohou čtenáři pomoci si rozmyslet, co potřebuje vědět o funkci, jejíž graf se chystá nakreslit. Má si rozmyslet, kolik bude oblastí, na které si rozdělí papír a zda budou tyto oblasti stejně velké, dále pak zda funkce nabývá jen kladných, nebo i záporných hodnot. Má si též rozmyslet, jaké barvy poté využije a kolik vrstevnic bude kreslit. Já jsem při kreslení grafů využil barvy duhy. Na závěr jsem uvedl svůj náčrtek doplněný o přesný graf vytvořený v programu Wolfram Mathematica. U svého náčrtku jsem ponechal stejnou barevnou škálu, jakou jsem zvolil v programu Mathematica.

Na závěr tohoto studijního textu jsem přidal jednu aktivitu, ve které má čtenář za úkol přiřadit ke grafu funkce kvantová čísla a jednu z možností jáma, oscilátor. Při řešení tohoto úkolu čtenář uplatní dovednosti, které získal při kreslení grafů.

3. Zpětná vazba od studentů

Pracovní listy uvedené v přílohách této práce byly zadány vedoucí této práce jako dobrovolný domácí úkol účastníkům kurzu „Úvod do kvantové mechaniky a kvantové teorie“. Za vyplněné pracovní listy mohli studenti získat rovněž body, které jim mohou pomoci k získání zápočtu. Měl jsem možnost prohlédnout si odpovědi studentů, kteří vyplněné pracovní listy odevzdali včas. Studenti měli po vyřešení úloh zodpovědět také tři otázky mající formu zpětné vazby. Odpovídali na tyto otázky:

1. Co jste se díky pracovnímu listu naučili či se v tom procvičili? Pište zcela konkrétní věci.
2. Byla zadání úkolů i doprovodné texty srozumitelné? Pokud ne, prosím, označte konkrétní nesrozumitelná či špatně srozumitelná místa.
3. Navazovaly jednotlivé úkoly logicky na sebe? Postupovaly od jednodušších ke složitějším?

Někteří studenti měli problém s úlohou pět z pracovního listu zaměřeného na dvoudimenzionální pravoúhloú potenciálovou jámu. V zadání úlohy je mj. určit energii částice na základě grafu její vlnové funkce. V zadání úlohy jsem upozornil řešitele, že si mají dát pozor na správné určení rozměrů jámy. I přesto někteří studenti následně neurčili energii částice správně. Proto jsem nově připojil k zadání úlohy upozornění, že jáma z této úlohy má jiné rozměry než jáma ze čtvrté úlohy.

Ve zpětné vazbě od studentů se objevily drobné výhrady k formátování zadání úloh, konkrétně na odsazování úloh z pracovního listu zaměřeného na 1D jámu, kde nebyla zřejmě příliš zdařile odsazena úloha určená pro práci s jedním apletem a instrukce k dalším úlohám určených pro práci s jiným apletem. Výtka k oddělení úloh se týkala i pracovního listu zaměřeného na 2D jámu. Oba tyto náměty na opravu jsem zapracoval, aby byly pracovní listy přehlednější.

Jeden ze studentů ocenil, že jsem upozornil na zadávání desetinných čísel v apletu PhET pomocí tečky, nikoliv čárky. V pracovním listu věnovaném superponovaným stavům jedna ze studentek upozornila, že chybí instrukce k nastavení hodnoty konstanty ω a minima potenciální energie V_0 . Tyto instrukce jsou uvedeny v pracovním listu věnovaném 1D LHO. Ale poněvadž může řešitel pracovní listy procházet v libovolném pořadí, připojil jsem instrukce k nastavení i do tohoto pracovního listu.

Pokud jde o logickou návaznost úloh, tak studenti téměř vždy uváděli, že byli řazeny od jednodušších po složitější. Avšak k pracovnímu listu zaměřenému na 1D LHO jeden ze studentů napsal, že by upřednostnil úlohy zaměřené na časový vývoj umístěné hned za sebou. Rozhodl jsem se pořadí úloh upravit dle studenta.

Celkově studenti ocenili, že si mohli zopakovat učivo probírané ve výuce. Pracovní listy se jim líbily, uvedme konkrétní výrok jedné studentky: „Moc se mi všechny pracovní listy líbily – jsou opravdu užitečné a hodně jsem se při jejich učení naučila.“

Závěr

V rámci této bakalářské práce jsem vytvořil pět pracovních listů, které se věnují jednoduchým problémům kvantové mechaniky. Jedná se o problémy jednodimenzionální a dvoudimenzionální. Součástí práce je dále studijní text věnovaný vrstevnicovým grafům. Pracovní listy jsou určeny primárně studentům učitelství fyziky, kteří navštěvují kurz kvantové mechaniky. I přesto, že část úloh jsem sám vymyslel, považuji za svůj největší přínos v této práci vypracování podrobných řešení všech úloh uvedených v pracovních listech.

Pracovní listy jsou zveřejněny na stránkách serveru FyzWeb, v sekci materiály, konkrétně na adrese <https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/>, kde jsou volně přístupné všem zájemcům o studium jednoduchých problémů kvantové mechaniky.

Úlohy, které jsou v listech obsaženy, jsou různorodé, takže umožní řešitelé nahlédnout na daný problém z více stran a tak ho lépe pochopit. Tyto úlohy mohou značně pomoci zájemcům o kvantovou mechaniku, kteří nemají možnost osobně se účastnit seminářů a přednášek zaměřených na tuto oblast fyziky.

Při tvorbě této práce jsem se naučil lépe pracovat s programem TeX-studio. Tento program je pro tvorbu textu obsahujícího různé rovnice a vzorce vhodnější než některé studenty častěji používané textové editory. Díky této práci jsem také poznal nabídku apletů z kolekce PhET [19]. Několik z nich jsem použil při své pedagogické praxi. Konkrétně se jednalo o aplet zobrazující Newtonův gravitační zákon [20] a také o aplet ukazující zákon zachování mechanické energie [21].

Pracovní listy byly zadány jako dobrovolný domácí úkol účastníkům kurzu „Úvod do kvantové mechaniky a kvantové teorie“. Od čtyř studentů jsem obdržel zpětnou vazbu na pracovní listy. Na základě této zpětné vazby mohu říci, že studenti byli s pracovními listy spokojeni a ocenili možnost zopakovat si učivo probírané ve výuce. Pokud by se v budoucnu objevily nějaké další nápady na vylepšení pracovních listů, potom bych rád tyto změny zapracoval.

Tvorba pracovních listů touto bakalářskou prací nekončí, v následujících měsících bych chtěl vytvořit další listy věnované například jámě kruhového půdorysu. Tato práce přinesla mně samotnému dobrou příležitost si řešení jednoduchých problémů kvantové mechaniky lépe osvojit. Své znalosti v této oblasti fyziky bych v budoucnu rád prohloubil například prací na výše zmíněné kruhové jámě.

Seznam použité literatury

[1] KOUPILOVÁ Zdeňka, KÁCOVSKÝ Petr, LEGERSKÁ Jana. Kvantová fyzika nejen pro budoucí učitele, Praha: Univerita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra didaktiky fyziky. [online] [cit. 26. 3. 2024].

Dostupné z: https://dl1.cuni.cz/pluginfile.php/1646476/mod_resource/content/0/KvantovkaSkripta.pdf

[2] PhET – Photoelectric Effect. [online] [cit. 20. 4. 2024]

Dostupné z: <https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/photoelectric/latest/photoelectric.html?simulation=photoelectric>

[3] QuVis – Superponované vs. smíšené stavy. [online] [cit. 20. 4. 2024]

Dostupné z: <http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Superposition-Mixed-States/superposition-mixed-states.html>

[4] PhET – A Brief Introduction to PhET. [online] [cit. 26. 3. 2024] Dostupné z: <https://phet.colorado.edu/cs/teaching-resources/tipsForUsingPhet>

[5] QuVis – For instructors [online] [cit. 27. 4. 2024]

Dostupné z: <https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/instructors.html>

[6] Zdeňka Koupilová, Petr Kácovský; Interactive applets in introductory course of quantum physics: Their role not only in distance learning. AIP Conf. Proc. 9 May 2022; 2458 (1): 030017. [online] [cit. 3. 5. 2024]

Dostupné z: <https://doi-org.ezproxy.is.cuni.cz/10.1063/5.0078619>

[7] QuVis – Částice na úsečce. [online] [cit. 1. 4. 2024]

Dostupné z: <https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell1d/infwell1d.html>

[8] PhET – Quantum bound states. [online] [cit. 1. 4. 2024]

Dostupné z: <https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/bound-states/latest/bound-states.html?simulation=bound-states>

[9] Jednotky.cz. Chytré převody jednotek. [online] [cit. 29. 3. 2024]

Dostupné z: <https://www.jednotky.cz/prace-energie/elektronvolt>

[10] Wikipedie – Planckova konstanta [online] [cit. 27. 4. 2024] Dostupné z: https://cs.wikipedia.org/wiki/Planckova_konstanta

[11] QuVis – Vlastní stavy energie dvoudimenzionální nekonečné jámy. [online] [cit. 14. 4. 2024]

Dostupné z: <https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell2d/infwell2d.html>

- [12] QuVis – The one-dimensional particle in a box. University of St Andrews [online] leden 2017 [cit. 19. 2. 2024] Dostupné z: https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/docs/download_html5.php?anim_id=37&type=doc
- [13] QuVis – Comparison of the classical and quantum harmonic oscillator. University of St Andrews [online] leden 2015 [cit. 18. 2. 2023] Dostupné z: https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/docs/download_html5.php?anim_id=13&type=doc
- [14] QuVis – Energy eigenfunctions of the two-dimensional infinite well. University of St Andrews [online] leden 2017 [cit. 26. 9. 2023] Dostupné z: https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/docs/download_html5.php?anim_id=32&type=doc
- [15] QuVis – Vlastní stavy energie ve dvoudimenzionálním kvantovém oscilátoru. [online] [cit. 14. 4. 2024] Dostupné z: https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/2DQuantumHarmonicOscillator/2d_oscillator2.html
- [16] QuVis – Superpozice stavů v pravoúhlé nekonečné jámě [online] [cit. 27. 4. 2024] Dostupné z: <https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/SuperpositionStates/SuperpositionStates.html>
- [17] LANDA, Martin. Úlohy pro práci s aplety – axiom o měření v kvantové mechanice. Bakalářská práce, vedoucí Koupilová, Zdeňka. Praha: Univerzita Karlova, Matematicko-fyzikální fakulta, Katedra didaktiky fyziky, 2021. [online] [cit. 29. 3. 2024] Dostupné z: <https://dspace.cuni.cz/handle/20.500.11956/152542>
- [18] QuVis – Superposition states in an infinite square well. University of St Andrews [online] leden 2017 [cit. 18. 2. 2024] Dostupné z: https://www.st-andrews.ac.uk/physics/quvis/docs/download_html5.php?anim_id=29&type=doc
- [19] PhET – Simulace [online] [cit. 30. 4. 2024] Dostupné z: <https://phet.colorado.edu/cs/simulations/filter?type=html>
- [20] PhET – Gravitační laboratoř: základy [online] [cit. 27. 4. 2024] Dostupné z: <https://phet.colorado.edu/cs/simulations/gravity-force-lab-basics>
- [21] PhET – Skatepark energie: základy [online] [cit. 27. 4. 2024] Dostupné z: <https://phet.colorado.edu/cs/simulations/energy-skate-park-basics>

Seznam obrázků

1.1	Správně nastavený QuVis aplet.	17
1.2	Zadání úlohy 1.	18
1.3	Správně nastavený PhET aplet.	19
1.4	Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovým číslem 4.	21
1.5	Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovým číslem 8.	21
2.1	Správně nastavený PhET aplet.	23
3.1	Správně nastavený QuVis aplet.	27
3.2	Zadání úlohy 5.	28
3.3	Graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$ (vlevo) a stavu s $n_x = 0$, $n_y = 5$ (vpravo).	29
3.4	Graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = n_y = 0$	30
3.5	Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 5$, $n_y = 5$, klasický i vrstevnicový graf.	30
4.1	Správně nastavený QuVis aplet.	32
4.2	Zadání úlohy 2.	34
4.3	Vlnová funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$ (vlevo), resp. stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$ (vpravo).	35
4.4	Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 1$	36
4.5	Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 2$, $n_y = 2$	36
5.1	Vlnová funkce odpovídající stavu v 2D potenciálové jámě s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$	37
5.2	Graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 5$, $n_y = 3$	40
5.3	Vrstevnicový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$, ruční náčrtek.	42
5.4	Vrstevnicový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$ vytvořený ve Wolfram Mathematice.	42
5.5	Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 4$, $n_y = 1$, ruční náčrtek.	43
5.6	Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 4$, $n_y = 1$	43
5.7	Vrstevnicový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 5$, $n_y = 3$	44
5.8	Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$, ruční náčrtek.	44
5.9	Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$	45
5.10	Zadání úlohy na přiřazování grafů ke kvantovým číslům.	45
6.1	Správně nastavený QuVis aplet.	46
6.2	Správně nastavený PhET aplet.	47

A. Přílohy

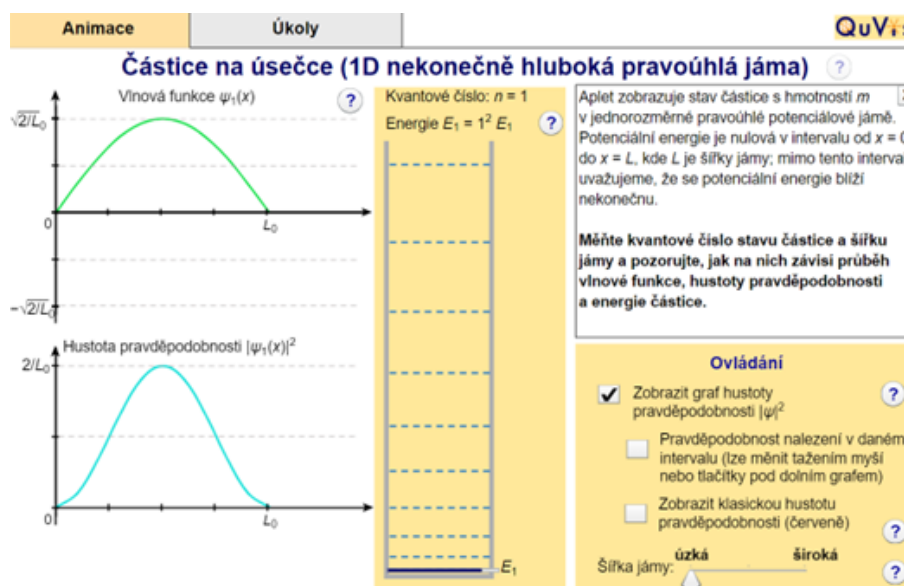
1 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

1.1 Zadání úloh

V tomto pracovním listu budete zkoumat nekonečnou pravoúhlou potenciálovou jámu. Připomeňte si, jak vypadají stacionární vlnové funkce popisující stav částice v této jámě, jak vypadají příslušné hustoty pravděpodobnosti a jaké jsou povolené energie částice. Použijte následující odkaz, který vás zavede na QuVis aplet zobrazující stacionární stavy v nekonečné potenciálové jámě:

<http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell1d/infwell1d.html>

Zobrazí se vám tento aplet:



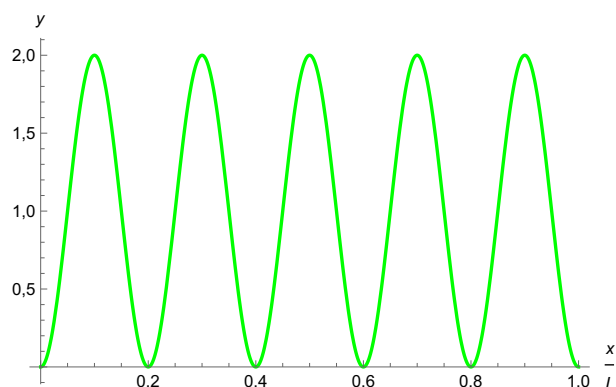
Obrázek 1.1: Správně nastavený QuVis aplet.

Vlevo nahoře vidíte graf vlnové funkce. Uprostřed vidíte schéma energetického spektra, kliknutím na konkrétní energetickou hladinu se vám zobrazí odpovídající vlnová funkce. Vlevo dole rovněž můžete pozorovat graf hustoty pravděpodobnosti. Zobrazí se vám po kliknutí na políčko v pravé části obrazovky.

1. Uvažujme graf na obrázku 1.2.

- Jde o graf vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti? Vysvětlete.
- Vyjádřete energii částice nacházející se ve stavu, jemuž odpovídá tato vlnová funkce, resp. hustota pravděpodobnosti.

2. V této úloze se zaměřte na schéma uprostřed stránky. Zobrazuje energetické hladiny částice v jámě. Na svislé ose je hodnota energie, energie roste směrem nahoru.



Obrázek 1.2: Zadání úlohy 1.

- Klikněte na energetickou hladinu odpovídající některému excitovanému stavu. Jak se změní hodnota energie, když měníte šířku jámy?
- Pozorujte a popište, jak se mění graf vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti konkrétního stacionárního stavu se změnou šířky jámy. Zaměřte se na počet lokálních extrémů a na hodnotu lokál. extrémů.

3. Zobrazte grafy hustoty pravděpodobnosti pro stavy s kvantovým číslem:

- $n = 4$,
- $n = 8$.

Určete pro každý stav x -ové souřadnice míst v jámě, kde částici najdeme s nulovou pravděpodobností. Uvažujte přitom, že je rozměr jámy určen intervalem $[0; L]$.

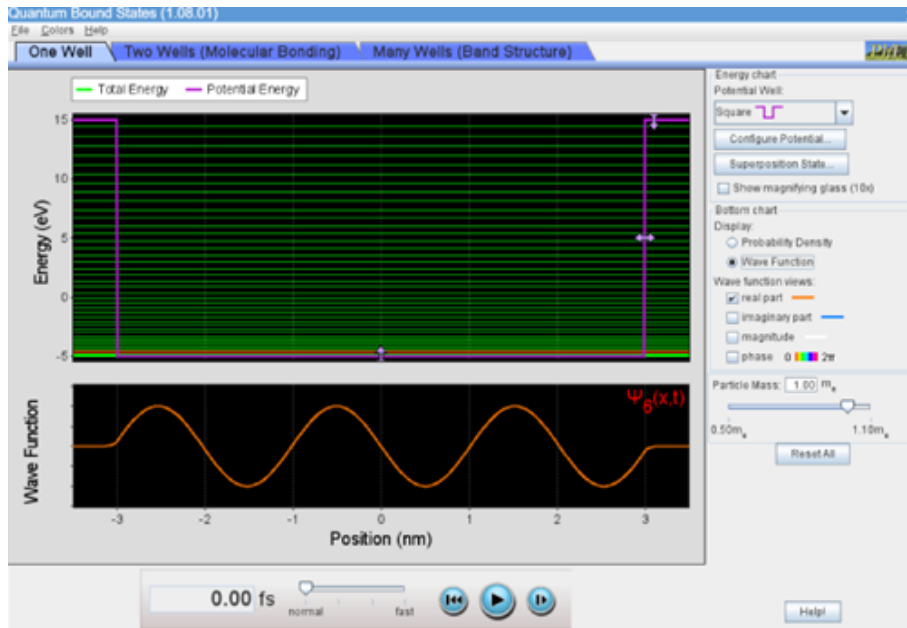
Pro řešení následujících úloh použijte odkaz, který vás zavede na stránku s aplety zobrazující jednoduché problémy kvantové mechaniky:

<https://phet.colorado.edu/sims/cheerpj/bound-states/latest/bound-states.html?simulation=bound-states>

Vpravo nahoře rozklikněte „Potential Well“ a vyberte možnost „Square“. Nastavte co nejhlubší a nejširší jámu. Na obrázku 1.3 je příklad správného nastavení.

Budete pracovat s tímto apletem, neboť umí zobrazit časový vývoj a určit hodnoty energie. Upozorněme předem, že zde nebudete pracovat s nekonečně hlubokou jámou, nýbrž s jámou velmi hlubokou.

4. Připomeňte si podobu časového členu v předpisu stacionární vlnové funkce příslušející kvantovému číslu n . Vyberte si dva stacionární stavy s velice rozdílnými energiemi. Postupně si nechte zobrazit grafy odpovídajících vlnových funkcí a zapněte jejich časový vývoj. Porovnejte periodu časového vývoje těchto grafů. Stručně popište, jak souvisí pořadí stavu s frekvencí vývoje vlnové funkce.



Obrázek 1.3: Správně nastavený PhET aplet.

5. Rozklikněte vpravo možnost „Configure Potential“. Nastavte šířku jámy na 4,7 nm, hloubku jámy na 20 eV a minimum potenciální energie na -5 eV (v apletu označeno jako „Offset“). Hmotnost částice ponechte na hodnotě odpovídající hmotnosti elektronu. Postupně klikněte na pět sousedních energetických hladin, konkrétně na hladiny příslušející stavům s kvantovými čísly 1 až 5. Poznamenejte si kvantové číslo a hodnotu energie, která se vám při kliknutí zobrazí. Poté určete rozdíly mezi sousedními hladinami. Co můžete na základě svých výpočtů říct o energetickém spektru jámy?

1.2 Řešení úloh z pracovního listu „Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma“

- Jde o graf hustoty pravděpodobnosti, neboť zobrazovaná funkce má několik lokálních maxim a minim s hodnotou nula; nabývá pouze nezáporných hodnot. Funkce má na svém definičním oboru globální maximum rovno hodnotě $\frac{2}{L}$. Toto číslo je druhou mocninou normovací konstanty vlnové funkce.
 - Nejprve určíme podle počtu lokálních maxim kvantové číslo příslušející dané hustotě pravděpodobnosti. Kvantové číslo je rovno počtu lokálních maxim hustoty pravděpodobnosti, kterých jsme napočítali pět. Vzorec pro výpočet energie částice o hmotnosti m nacházející se v jámě šířky L ve stavu popsaném kvantovým číslem n má tuto podobu:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = n^2 E_1.$$

Máme částici nacházející se ve stavu s $n = 5$, tedy ve čtvrtém excitovaném stavu. energii částice lze pak vyjádřit ve tvaru:

$$E_5 = \frac{5^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = 25 \cdot \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

- S rozšiřováním jámy energie libovolného stacionárního stavu klesá. Naše pozorování můžeme podpořit použitím vzorce pro energii částice nacházející se v n -tém stavu v jámě šířky L :

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Z tohoto vzorce je vidět, že energie klesá s druhou mocninou šířky jámy.

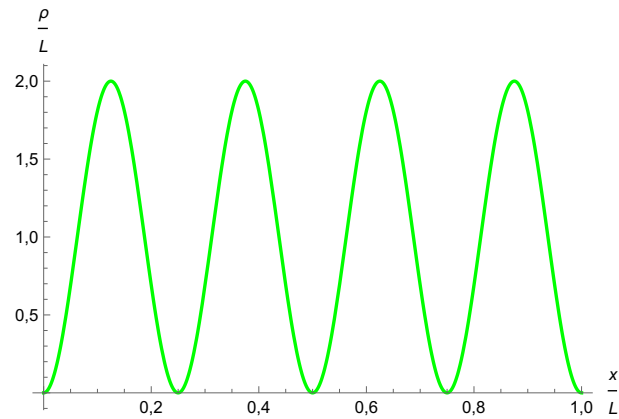
- Když rozšiřujeme jámu, pozorujeme, že počet extrémů vlnové funkce i hustoty pravděpodobnosti se nemění. To, co se mění, je hodnota lokálních extrémů, která se s rozšiřováním jámy zmenšuje, aby výsledné funkce vyhovovaly normovací podmínce.
3. Zobrazíme si v apletu příslušný stacionární stav a z grafu hustoty pravděpodobnosti odečteme x -ové souřadnice míst, v nichž má hustota pravděpodobnosti nulovou hodnotu.

- $n = 4$:

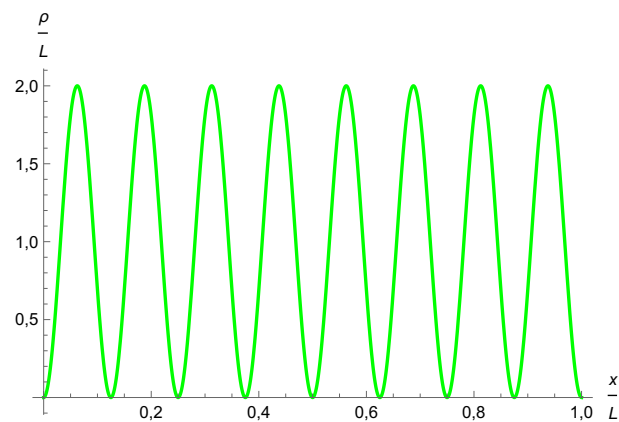
Graf hustoty pravděpodobnosti lze rozdělit na čtyři shodné oblasti. Nulové body hustoty pravděpodobnosti tvoří hranice těchto oblastí. Souřadnice těchto míst budou: $0, \frac{L}{4}, \frac{L}{2}, \frac{3L}{4}, L$, viz obrázek 1.4.

- $n = 8$:

Situace je analogická předchozímu příkladu; opět nastavíme sedmý excitovaný stav a příslušnou hustotu pravděpodobnosti a hledáme její nulové body. Graf je rozdělen na osm oblastí, nulové body tvoří hranice těchto oblastí. Souřadnice míst, kde částici nalezneme s nulovou pravděpodobností, jsou: $0, \frac{L}{8}, \frac{L}{4}, \frac{3L}{8}, \frac{L}{2}, \frac{5L}{8}, \frac{3L}{4}, \frac{7L}{8}, L$, viz obrázek 1.5.



Obrázek 1.4: Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovým číslem 4.



Obrázek 1.5: Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovým číslem 8.

4. Časový člen plynoucí ze Schrödingerovy rovnice má podobu: $e^{\frac{E_n t}{i\hbar}} = e^{-i\omega_n t}$. Čím větší bude energie částice, tím větší bude úhlová frekvence ω_n a tím „rychleji“ se bude měnit graf. Čím větší bude kvantové číslo uvažovaného stavu, tím menší bude perioda vývoje grafu ψ .
5. Nastavili jsme požadované parametry. Nyní zapišme příslušné energetické hladiny:

- $E_1 = -4,98 \text{ eV}$.
- $E_2 = -4,93 \text{ eV} \rightarrow E_2 - E_1 = 0,05 \text{ eV}$.
- $E_3 = -4,85 \text{ eV} \rightarrow E_3 - E_2 = 0,08 \text{ eV}$.
- $E_4 = -4,74 \text{ eV} \rightarrow E_4 - E_3 = 0,11 \text{ eV}$.
- $E_5 = -4,59 \text{ eV} \rightarrow E_5 - E_4 = 0,15 \text{ eV}$.

Vidíme, že rozdíly mezi dvěma sousedními hladinami nejsou všechny stejné, energetické spektrum tedy není ekvidistantní. Zde jsme pracovali s velmi hlubokou, avšak ne nekonečnou jámou. U nekonečné jámy také platí, že energetické spektrum není ekvidistantní.

Stavy s nízkou hodnotou energie se u velmi hluboké, nýbrž ne nekonečné jámy podobají natolik stavům v nekonečné jámě, že můžeme naše výsledky brát jako ověření toho, že spektrum nekonečné potenciálové jámy není ekvidistantní.

Rozdíl mezi dvěma sousedními energetickými hladinami částice nacházející se v nekonečné jámě můžeme určit pomocí vzorce, který jsme již uvedli výše. Vypočítejme tedy rozdíl E_{n+1} a E_n :

$$E_{n+1} - E_n = \frac{(n+1)^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} - \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (n^2 + 2n + 1 - n^2) = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2mL^2} (2n + 1).$$

Z výpočtu je patrné, že rozdíl mezi sousedními energetickými hladinami je lineární funkcí kvantového čísla.

Spočítáme rozdíly mezi hladinami podle tohoto vzorce, například rozdíl E_1 a E_2 určíme takto:

$$E_2 - E_1 = \frac{\pi^2 \cdot (1,06 \cdot 10^{-34})^2 \cdot (2 \cdot 1 + 1)}{2 \cdot 9,1 \cdot 10^{-31} \cdot (4,7 \cdot 10^{-9})^2} \doteq 8,20 \cdot 10^{-21} \text{ J.}$$

Za redukovanou Planckovu konstantu dosazujeme přibližnou hodnotu $\hbar \doteq 1,06 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

Převedeme jouly na elektronvolty pomocí převodního vztahu:

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J.}$$

$$E_2 - E_1 \doteq 5,12 \cdot 10^{-2} \text{ eV.}$$

Stejným způsobem určíme rozdíly mezi dalšími dvojicemi sousedních hladin:

$$E_3 - E_2 \doteq 0,85 \cdot 10^{-1} \text{ eV.}$$

$$E_4 - E_3 \doteq 1,19 \cdot 10^{-1} \text{ eV.}$$

$$E_5 - E_4 \doteq 1,54 \cdot 10^{-1} \text{ eV.}$$

Vidíme, že rozdíly energetických hladin vypočítané podle vzorce odvozeného pro nekonečnou jámu se poměrně dobře shodují s hodnotami, které jsme naměřili v apletu. Je namístě podotknout, že v apletu pracujeme se zaokrouhlenými hodnotami, nejistota se přenáší mezi rozdíly. Pokud jste již řešili úlohy na téma lineární harmonický oscilátor, porovnejte mezi sebou řešení této úlohy, která byla věnovaná energetickému spektru jámy.

2 Lineární harmonický oscilátor

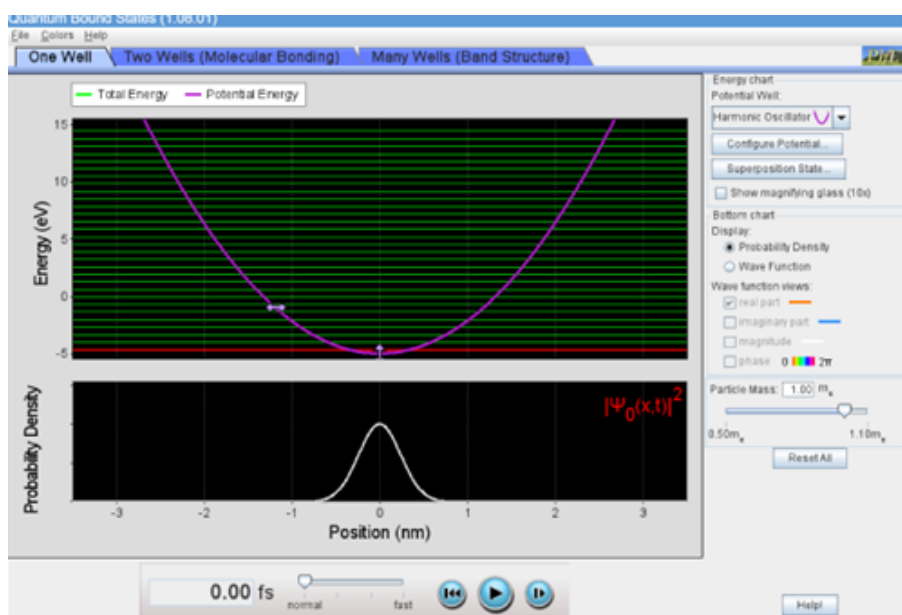
2.1 Zadání úloh

V následujícím pracovním listu se budete zabývat lineárním harmonickým oscilátorem (LHO). Připomeňte si, jaký tvar mají stacionární stavy a jakou podobu mají energetické hladiny lineárního harmonického oscilátoru.

Rozklikněte následující odkaz, který vás zavede na aplet zobrazující řešení jednoduchých jednodimenzionálních problémů kvantové mechaniky:

<https://phet.colorado.edu/sims/cheerj/bound-states/latest/bound-states.html?simulation=bound-states>.

Vpravo nahoře klikněte na „Potential Well“ a vyberte možnost „Harmonic Oscillator“. Zobrazí se vám lineární harmonický oscilátor. Zde je ukázka správně nastaveného apletu:



Obrázek 2.1: Správně nastavený PhET aplet.

Nahoře v hlavní části okna apletu vidíte průběh potenciální energie a energetické hladiny, pod tímto grafem je graf hustoty pravděpodobnosti. V pravé části okna apletu můžete zvolit hustotu pravděpodobnosti nebo vlnovou funkci, podle toho, jaký graf chcete pozorovat ve spodní části hlavního okna. Když kliknete na konkrétní energetickou hladinu, zobrazí se graf odpovídající stavu s vámi vybranou energií. Dole je možnost spustit vývoj grafu v čase.

1. Vpravo dole lze nastavit různou hmotnost uvažované částice. Popište, jak se se změnou hmotnosti částice mění průběh potenciální energie. Vysvětlete, proč tomu tak je.
2. Vpravo nahoře lze měnit další parametry. Zvolte možnost „Configure Potential“ a získáte možnost měnit dvě fyzikální veličiny. O jaké veličiny jde? V jakých jednotkách jsou uvedeny? Zkuste změnit jejich hodnoty a pozorujte průběh potenciálu. Svoje pozorování popište.

3. Nastavte vpravo zobrazení grafu vlnové funkce. Pozorujte časový vývoj grafu vlnové funkce. Nyní zvolte stav odpovídající jiné hodnotě energie a opět pozorujte časový vývoj vlnové funkce. Porovnejte časový vývoj několika stavů s odlišnou energií. Připomeňte si nebo vyhledejte časový člen stacionární vlnové funkce plynoucí ze Schrödingerovy rovnice. Porovnejte svoje pozorování s teorií.
4. Pomocí možnosti „Configure Potential“ nastavte konstantu ω na hodnotu 2 fs^{-1} . Vyzkoušejte dvě hodnoty minima potenciální energie (v apletu označené jako „Offset“):
 - $V_0 = -4,3 \text{ eV}$,
 - $V_0 = 1,1 \text{ eV}$.

Pokud zadáváte hodnoty pomocí klávesnice, použijte desetinnou tečku, nikoliv čárku.

V obou případech porovnejte časový vývoj grafu vlnové funkce příslušející základnímu a druhému excitovanému stavu. Co jste zjistili?

5. Zobrazte několik grafů hustoty pravděpodobnosti příslušejících navzájem různým stacionárním stavům. U jednoho vybraného stavu pozorujte, zda mají lokální maxima hustoty pravděpodobnosti všechna stejnou hodnotu. Jak souvisí počet lokálních maxim s hodnotou kvantového čísla, které je danému stavu přiřazeno?
6. Pro tento úkol doporučuji nastavit spíše „užší“ potenciální energii. Klikněte na několik energetických hladin a poznamenejte si kvantové číslo a hodnotu energie. Spočítejte rozdíly mezi sousedními hladinami, do výpočtu zahrňte prvních pět hladin. K jaké myšlence vás vedou zjištěné rozdíly energií?

2.2 Řešení úloh z pracovního listu „Lineární harmonický oscilátor“

1. Připomeňme, že z klasické fyziky známe vztah popisující závislost potenciální energie na souřadnici pro lineární harmonický oscilátor. Tento vztah je obvykle vyjadřován vzorcem: $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2x^2$, kde ω značí konstantu ovlivňující šířku grafu potenciální energie, v klasické fyzice tato veličina vyjadřuje úhlovou frekvenci kmitání oscilátoru. Písmeno m značí hmotnost částice.

Z tohoto vztahu je vidět, že čím větší bude hmotnost částice, tím bude graf potenciální energie užší.

2. Vpravo nahoře lze pomocí možnosti „Configure Potential“ měnit hodnotu konstanty ω (ta je uvedena ve femtosekundách na minus prvou) a také minimum potenciální energie (v apletu označeno jako „Offset“). Když zvětšíme hodnotu ω , tak bude graf potenciální energie užší. Se změnou minima potenciální energie se graf posouvá nahoru nebo dolů. Energie je uváděna v elektronvoltech, což je pro popis chování částice vhodnější jednotka než například joule. Pro připomenutí ještě uvedme převodní vztah mezi oběma jednotkami:

$$1 \text{ eV} = 1,6 \cdot 10^{-19} \text{ J.}$$

3. Zde porovnáváme dva stavy s různou hodnotou energie. Časový vývoj vlnové funkce stacionárního stavu je dán časovým členem $e^{\frac{E_n t}{\hbar}}$. Čím větší je absolutní hodnota energie částice, tím větší bude frekvence „kmitání“ příslušné vlnové funkce. V apletu pozorujeme, že vlnové funkce příslušející energetickým hladinám více vzdáleným od nulové hladiny energie opravdu kmitají s vyšší frekvencí.
4. Když nastavíme minimum potenciální energie na hodnotu $-4,3 \text{ eV}$, pozorujeme, že graf vlnové funkce základního stavu se mění rychleji než graf vlnové funkce příslušející druhému excitovanému stavu. Druhý excitovaný stav je v tomto případě stavem s energií méně vzdálenou od nulové hladiny. Když je minimum potenciální energie na hodnotě $1,1 \text{ eV}$, tak energie základního stavu je méně vzdálená od nulové hladiny než energie druhého excitovaného stavu. Rychleji se tedy bude měnit graf vlnové funkce druhého excitovaného stavu.
5. Po zobrazení několika funkcí je patrné, že lokální maxima dané funkce nemají všechna stejnou hodnotu, jako tomu je u nekonečné pravoúhlé jámy. Pro stav s kvantovým číslem n platí, že má jeho hustota pravděpodobnosti $n + 1$ lokálních maxim. Zároveň v apletu pozorujeme, že maxima, která jsou více vzdálena od středu oscilátoru, mají větší hodnotu než ta, která jsou v jeho středu.

6. Zde je konkrétní příklad potenciální energie: nastavil jsem konstantu ω na hodnotu $\omega = 2,0 \text{ fs}^{-1}$ a minimum potenciální energie na hodnotu $V_0 = -5 \text{ eV}$. Poznamenal jsem si kvantová čísla a příslušné energie:

- $n = 0$: $E_0 = -4,34 \text{ eV}$,
- $n = 1$: $E_1 = -3,03 \text{ eV} \rightarrow E_1 - E_0 = 1,31 \text{ eV}$,
- $n = 2$: $E_2 = -1,71 \text{ eV} \rightarrow E_2 - E_1 = 1,32 \text{ eV}$,
- $n = 3$: $E_3 = -0,39 \text{ eV} \rightarrow E_3 - E_2 = 1,32 \text{ eV}$,
- $n = 4$: $E_4 = 0,92 \text{ eV} \rightarrow E_4 - E_3 = 1,31 \text{ eV}$.

Mnou vypočítané konkrétní energetické rozdíly naznačují, že energetické spektrum LHO je ekvidistantní. Rozdíly energií nevychází všechny stejně, což je způsobeno zaokrouhlením. O tom, že energetické spektrum LHO je ekvidistantní, se můžeme přesvědčit jednoduchým výpočtem, kde určíme rozdíl mezi sousedními energetickými hladinami E_{n+1} a E_n :

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega\left[\left(n+1\right) + \frac{1}{2}\right] - \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) + \hbar\omega - \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right) = \hbar\omega.$$

Odtud je vidět, že rozdíl dvou sousedních hladin je stále stejný, nezávislý na volbě dvou sousedních hladin. Je nicméně závislý na hodnotě konstanty ω .

Můžeme ověřit správnost určeného rozdílu sousedních dvou hladin rychlým dosazením do odvozeného vzorce:

$$E_{n+1} - E_n = \hbar\omega \doteq 2,12 \text{ J} \doteq 1,32 \text{ eV}.$$

Dosazuji přibližnou hodnotu redukované Planckovy konstanty:
 $\hbar \doteq 1,06 \cdot 10^{-34} \text{ Js}$.

3 Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor

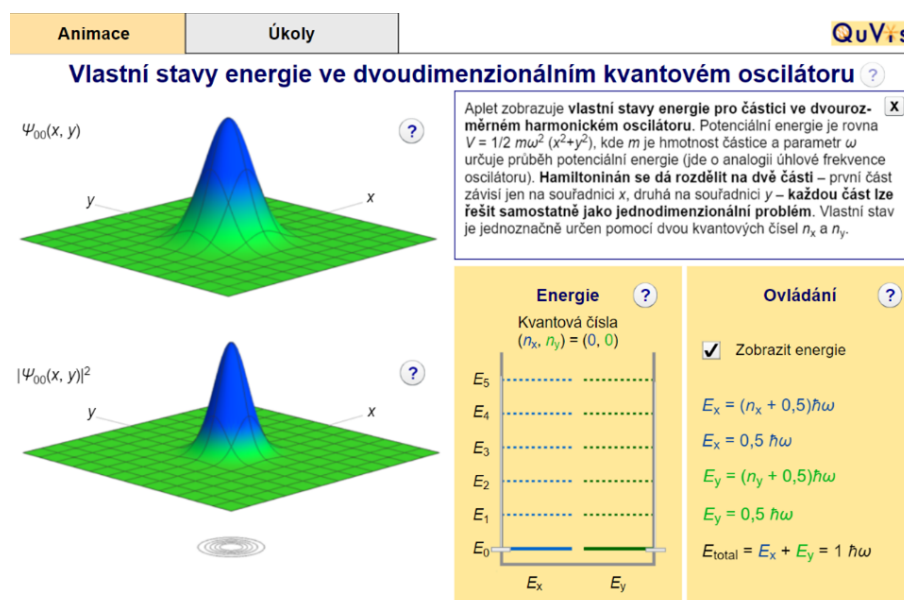
3.1 Zadání úloh

V následujícím pracovním listu se budete zabývat dvoudimenzionálním lineárním harmonickým oscilátorem (2D LHO). Připomeňte si, jak se pomocí jednodimenzionálních problémů poskládá řešení 2D problémů se separovatelnými proměnnými. Rovněž si připomeňte, jak se určí energie n -té hladiny a jaký tvar mají stacionární vlnové funkce 2D LHO.

Využijte odkaz, který vás zavede na QuVis aplet zobrazující dvourozměrný lineární harmonický oscilátor:

http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/2DQuantumHarmonicOscillator/2d_oscillator2.html

Na obrázku níže je aplet, se kterým budete pracovat:



Obrázek 3.1: Správně nastavený QuVis aplet.

Vlevo na stránce je vidět graf vlnové funkce a pod ním graf hustoty pravděpodobnosti. Uprostřed lze nastavit hodnotu obou kvantových čísel odpovídajících řešení příslušných jednodimenzionálních problémů, vpravo si můžete nechat zobrazit energii částice.

1. Nastavujte různé kombinace kvantových čísel a pozorujte grafy vlnových funkcí příslušejících stavům popsáných danými kvantovými čísly. Zkuste odvodit, jaká je souvislost mezi hodnotou kvantových čísel a počtem extrémů vlnové funkce. (Vzpomeňte, jak tomu bylo v případě jednorozměrného lineárního harmonického oscilátoru).

2. Jaká kombinace kvantových čísel n_x a n_y zaručí, že výsledná vlnová funkce bude mít:

- šest lokálních extrémů?
- právě jedno (globální) maximum?

Nejdříve si odpověď rozmyslete a poté svůj odhad ověřte nastavením příslušné kombinace kvantových čísel.

3. Nastavte stav popsaný kvantovými čísly $n_x = 5$ a $n_y = 5$. Kde nalezneme částici nacházející se v tomto stavu s největší pravděpodobností? Nemusíte uvádět konkrétní souřadnice, stačí, pokud slovně popíšete, o jaká místa jde.

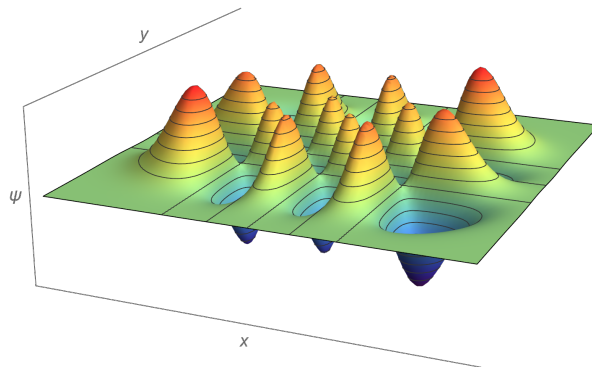
Nápověda: Využijte graf hustoty pravděpodobnosti.

4. Nyní skryjte hodnoty energie. Jaká bude celková energie částice ve stavu, ve kterém budou mít kvantová čísla hodnoty:

- $n_x = n_y = 3$?
- $n_x = 1, n_y = 2$?

Svoje výsledky si následně zkontrolujte v apletu.

5. Mějme tento graf:



Obrázek 3.2: Zadání úlohy 5.

- Jde o graf vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti? Vysvětlete.
- Jaká je celková energie částice nacházející se v tomto stacionárním stavu?

3.2 Řešení úloh z pracovního listu „Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor“

1. U jednorozměrného oscilátoru pro graf vlnové funkce platí, že počet lokálních extrémů je o jedna větší než kvantové číslo, kterým daný stav popisujeme.

Zde je situace analogická, jen nesmíme zapomenout na to, že máme nyní kvantová čísla dvě a počty lokálních extrémů podél jednotlivých os je třeba mezi sebou násobit. Takže když obě kvantová čísla zvětšíme o jedna a následně výsledky vynásobíme, dostaneme počet lokálních extrémů. Pokud označíme počet lokálních extrémů písmenem N , pak platí:

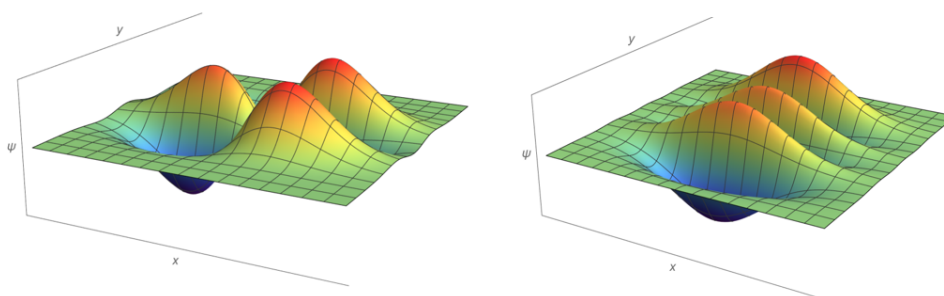
$$N = (n_x + 1) \cdot (n_y + 1).$$

2.
 - Šest lokálních extrémů vlnové funkce zařídí více kombinací kvantových čísel. Vyjdeme z řešení předchozí úlohy. V 1D případě by platilo, že stavu popsaném kvantovým číslem n odpovídá vlnová funkce s $n + 1$ extrémů. Zde hledáme dvě čísla, jejichž součin je šest. Poté tato čísla o jedna zmenšíme a dostaneme kvantová čísla:

první řešení: $n_x = 0, n_y = 5$,

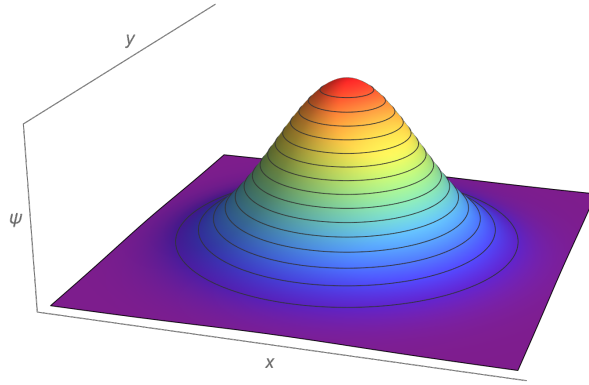
druhé řešení: $n_x = 1, n_y = 2$.

V každém z uvedených řešení je možné kvantová čísla navzájem prohodit, tím se výsledný počet extrémů vlnové funkce nezmění. Celkově má tedy tato úloha čtyři různá řešení. Na obrázku 3.3 jsou uvedena dvě z nich.



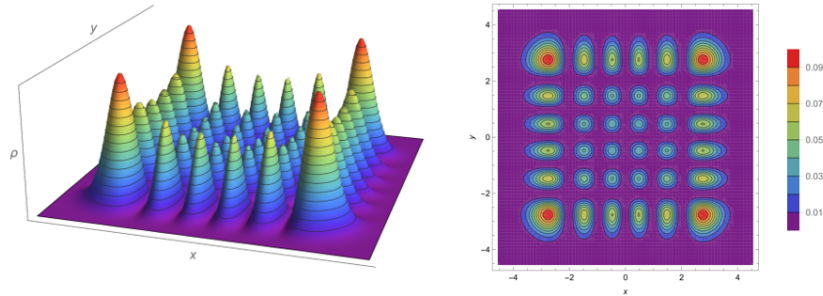
Obrázek 3.3: Graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1, n_y = 2$ (vlevo) a stavu s $n_x = 0, n_y = 5$ (vpravo).

- Aby měla vlnová funkce jedno globální maximum, tak v jednorozměrném případě by kvantové číslo muselo být nulové, částice by se musela nacházet v základním stavu. Zde máme dvě kvantová čísla, obě musí být nulová, $n_x = n_y = 0$ (viz obrázek 3.4).



Obrázek 3.4: Graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = n_y = 0$.

3. Na základě předchozí úlohy víme, že ve stavu popsaném kvantovými čísly $n_x = n_y = 5$ má vlnová funkce 36 lokálních extrémů. Odpovídající hustota pravděpodobnosti má tedy 36 lokálních maxim. Nicméně tato maxima nemají všechna stejnou hodnotu. Hodnoty maxim hustoty pravděpodobnosti se zvětšují s rostoucí vzdáleností od středu potenciálu. Největší hodnotu mají maxima, která jsou nejvíce vzdálena od středu grafu. Pokud bychom si představili, že spojnice maxim rovnoběžné se souřadnicovými osami tvoří čtverec, potom by pravděpodobnost nalezení částice byla největší ve vrcholech tohoto čtverce (viz obrázek 3.5). Níže je uveden jak klasický, tak i vrstevnicový graf.



Obrázek 3.5: Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 5$, $n_y = 5$, klasický i vrstevnicový graf.

4. Připomeňme, že celková energie částice nacházející se v lineárním harmonickém oscilátoru se vypočítá podle vzorce $E = \hbar\omega(n + \frac{1}{2})$. Problém oscilátoru je separabilní, pokud tedy uvažujeme dvoudimenzionální oscilátor, bude celková energie částice rovna součtu dílčích energií E_{n_x} a E_{n_y} .

Pro celkovou energii částice dostáváme vzorec $E = \hbar\omega(n_x + n_y + 1)$.

- $n_x = n_y = 3 \rightarrow E = \hbar\omega(3 + 3 + 1) = 7\hbar\omega$.
- $n_x = 1, n_y = 2 \rightarrow E = \hbar\omega(2 + 1 + 1) = 4\hbar\omega$.

Naše výsledky se shodují s tím, co ukazuje aplet. Pokud jste již řešili úlohy na téma „Dvoudimenzionální nekonečná potenciálová jáma“, porovnejte mezi sebou řešení této úlohy.

- 5.
- Jde o graf vlnové funkce, neboť je vidět, že funkce na obrázku 3.2 nabývá kromě kladných hodnot i hodnot záporných.
 - Z obrázku určíme kvantová čísla podle počtu extrémů. Myslíme na to, že počet extrémů podél dané osy je o jedna větší než příslušné kvantové číslo: $n_x = 5$, $n_y = 3$. Využijeme výsledky z předchozí úlohy a dopočítáme celkovou energii: $E = \hbar\omega(5 + 3 + 1) = 9\hbar\omega$.

4 Dvoudimenzionální nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

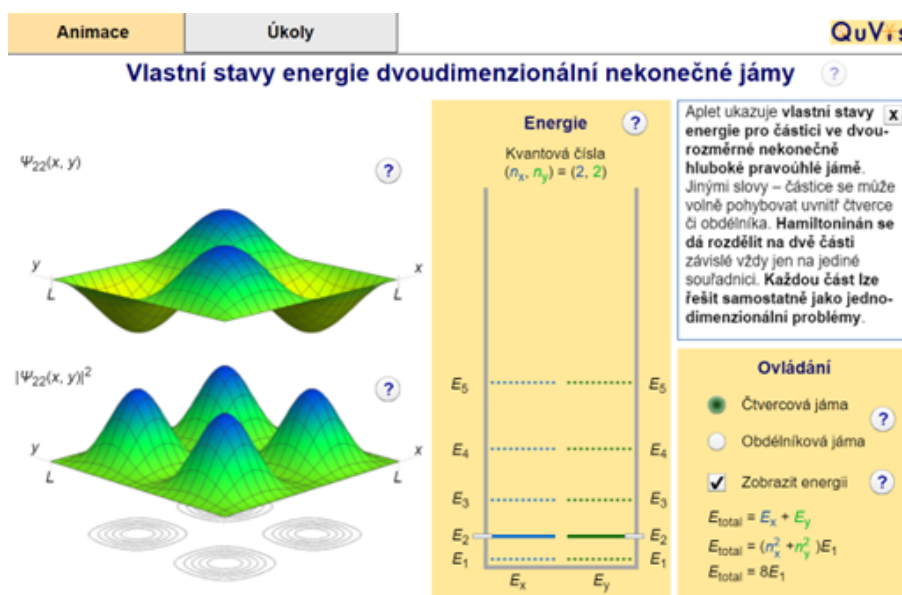
4.1 Zadání úloh

V následujícím pracovním listu se budete zabývat čtvercovou nebo obdélníkovou nekonečnou potenciálovou jámou. Připomeňte si, jak se pomocí jednodimenzionálních problémů poskládá řešení 2D problémů se separovatelnými proměnnými. Rovněž si připomeňte, jak se určí energie n -té hladiny a jaký tvar mají stacionární vlnové funkce 2D jámy.

Využijte odkaz, který vás zavede na QuVis aplet zobrazující 2D potenciálovou jámu:

<http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell2d/infwell2d.html>

Na obrázku níže je aplet, se kterým budete pracovat:



Obrázek 4.1: Správně nastavený QuVis aplet.

Vlevo na stránce je vidět graf vlnové funkce a pod ním graf hustoty pravděpodobnosti. Uprostřed lze nastavit hodnotu kvantových čísel odpovídajících řešení příslušných jednodimenzionálních problémů, vpravo si můžete nechat zobrazit energii částice.

1. Nastavujte různé hodnoty kvantových čísel a pozorujte grafy vlnových funkcí příslušejících stavům popsaných danými kvantovými čísly. Zkuste odvodit vztah mezi hodnotou kvantových čísel a počtem lokálních extrémů vlnové funkce.
2. Jaká kombinace kvantových čísel zaručí, že výsledná vlnová funkce bude mít:
 - právě dva lokální extrémů?
 - právě šest lokálních extrémů?

Nejdříve si odpověď rozmyslete a poté svůj odhad ověřte nastavením příslušné kombinace kvantových čísel.

3. Pro každou z uvedených kombinací kvantových čísel určete souřadnice míst, kde nalezneme částici nacházející se v příslušném stavu s největší pravděpodobností:

- $n_x = n_y = 1$,
- $n_x = n_y = 2$.

U prvního stavu nalezněte konkrétní souřadnice, u druhého stavu se pokuste alespoň slovně popsat hledané místo.

Nápověda: Využijte graf hustoty pravděpodobnosti.

V následujících dvou úlohách se budete zabývat nekonečnou potenciálovou jámou obdélníkového půdorysu. Proto vpravo vyberte možnost „Obdélníková jáma“.

Pozorujte, jak vypadají grafy vlnových funkcí a hustot pravděpodobnosti. Rovněž si uvědomte, jak se změnilo energetické spektrum jámy potom, co jsme změnili její rozměry.

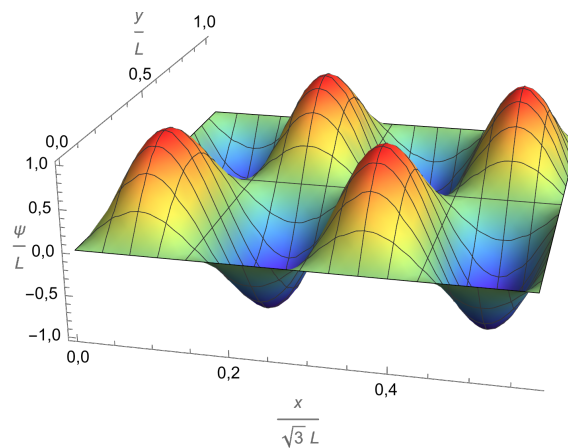
Aplet zobrazuje jámu o rozměrech $x = \frac{L}{\sqrt{2}}$ a $y = L$.

4. Pro tuto úlohu skryjte hodnoty energie. Jaká je celková energie částice nacházející se ve stavu popsaném kvantovými čísly:

- $n_x = 3, n_y = 2$?
- $n_x = n_y = 4$?

Pokud jste již řešili úlohy na téma „Dvoudimenzionální lineární harmonický oscilátor“, porovnejte mezi sebou řešení této úlohy.

5. Mějme následující graf:



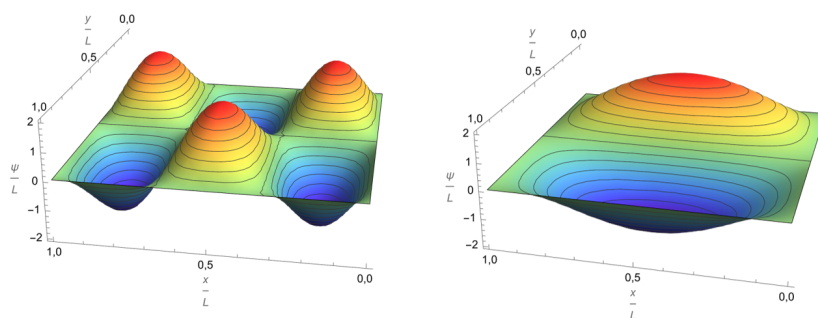
Obrázek 4.2: Zadání úlohy 2.

- Jde o graf vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti? Vysvětlete.
- Jaká je celková energie částice nacházející se v tomto stacionárním stavu? Dejte pozor na správné určení rozměrů jámy. Upozorňuji, že tato jáma má jiné rozměry než jáma, se kterou pracujete ve čtvrté úloze.

4.2 Řešení úloh z pracovního listu „Dvoudimenzionální nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma“

1. V jednorozměrné nekonečné pravoúhlé jámě je počet lokálních extrémů roven kvantovému číslu. Vlnová funkce dvou proměnných je dána součinem vlnových funkcí jedné proměnné, a proto je výsledný počet extrémů roven součinu počtu extrémů dílčích funkcí.
2. U jednodimenzionální jámy platí, že kvantové číslo je rovno počtu lokálních extrémů. Zde je situace analogická, kvantové číslo určuje počet extrémů podél dané osy. Výsledný počet extrémů je tedy dán součinem extrémů podél jednotlivých os. Hledáme tedy rozklad daného čísla na součin.
 - $2 = 2 \cdot 1 \rightarrow n_x = 1, n_y = 2,$
 - $6 = 2 \cdot 3 \rightarrow n_x = 3, n_y = 2$ nebo $6 = 1 \cdot 6 \rightarrow n_x = 1, n_y = 6.$

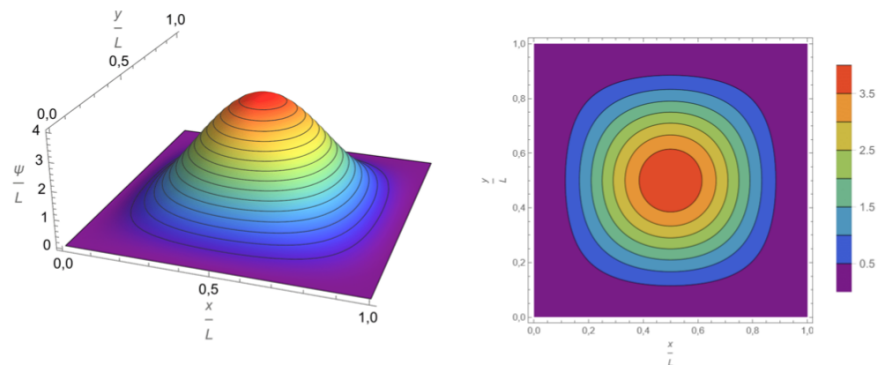
U každé situace je možné kvantová čísla prohodit a výsledný počet extrémů zůstane zachován. Celkově tedy existují čtyři různá řešení této úlohy (viz obrázek 4.3).



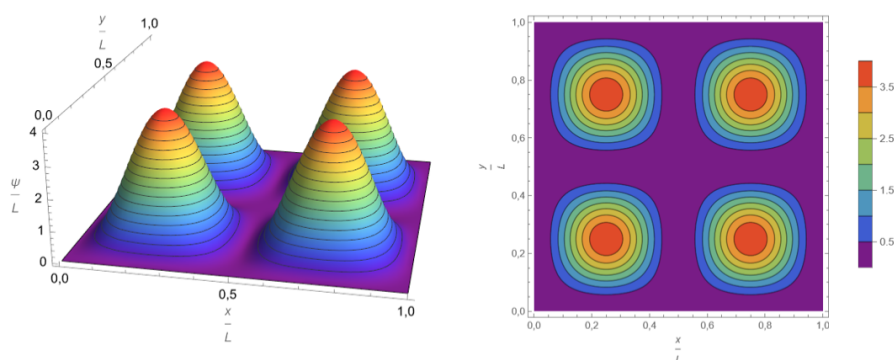
Obrázek 4.3: Vlnová funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3, n_y = 2$ (vlevo), resp. stavu s kvantovými čísly $n_x = 1, n_y = 2$ (vpravo).

3.
 - Zajímá nás, kde je hustota pravděpodobnosti odpovídající základnímu stavu největší. Toto místo se nachází ve středu jámy, to plyne z tvaru základního stavu částice v jednodimenzionální jámě. Pokud umístíme počátek souřadnicového systému do rohu jámy (viz obrázek 4.4), budou souřadnice hledaného místa $[\frac{L}{2}; \frac{L}{2}]$.
 - Nyní nás zajímají souřadnice lokálních maxim hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = n_y = 2$. Hustota pravděpodobnosti má čtyři lokální maxima, přičemž všechna mají stejnou hodnotu. Můžeme si představit spojnice maxim rovnoběžné se souřadnicovými osami. Potom tyto spojnice tvoří čtverec a hledaná místa jsou vrcholy tohoto čtverce. Souřadnice těchto míst jsou $[\frac{L}{4}; \frac{L}{4}], [\frac{L}{4}; \frac{3L}{4}], [\frac{3L}{4}; \frac{L}{4}]$ a $[\frac{3L}{4}; \frac{3L}{4}]$. Lze je dobře odečíst z vrstevnicového grafu. Kromě vrstevnicového grafu hustoty pravděpodobnosti níže uvádím i klasický graf, viz obrázek 4.5.

Připomeňme, že ve čtvrté úloze počítáme s obdélníkovou jámou o rozměrech $x = \frac{L}{\sqrt{2}}, y = L$.



Obrázek 4.4: Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 1$.



Obrázek 4.5: Hustota pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 2$, $n_y = 2$.

4. Chceme určit, jaká je celková energie částice. Vzorec pro celkovou energii částice v nekonečné pravoúhlé jednorozměrné jámě je:

$$E_n = \frac{n^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Celková energie částice nacházející se v nekonečné obdélníkové jámě o zadaných rozměrech se vypočítá dle vzorce:

$$E = \frac{n_x^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(\frac{L}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{n_y^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2}.$$

Dosazením příslušných kvantových čísel vyjádříme energii.

- $n_x = 3$, $n_y = 2 \rightarrow E = \frac{3^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(\frac{L}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{9\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{2\pi^2 \hbar^2}{mL^2} = \frac{11\pi^2 \hbar^2}{mL^2}.$
 - $n_x = 4$, $n_y = 4 \rightarrow E = \frac{4^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \left(\frac{L}{\sqrt{2}}\right)^2} + \frac{4^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{16\pi^2 \hbar^2}{mL^2} + \frac{8\pi^2 \hbar^2}{mL^2} = \frac{24\pi^2 \hbar^2}{mL^2}.$
- 5.
- Na obrázku 4.2 je graf vlnové funkce, neboť vyobrazená funkce nabývá i záporných hodnot.
 - Podle počtu lokálních extrémů jsme schopni určit jednotlivá kvantová čísla: $n_x = 4$, $n_y = 2$. Nyní dosadíme do vzorce pro energii, který jsme uvedli výše: $E = \frac{4^2 \pi^2 \hbar^2}{2m \cdot (\sqrt{3}L)^2} + \frac{2^2 \pi^2 \hbar^2}{2mL^2} = \frac{14\pi^2 \hbar^2}{3mL^2}.$

5 Vrstevnicové grafy

Tento pracovní list je věnován vrstevnicovým grafům. Jde o grafy funkcí dvou proměnných, které umožňují znázornit jejich hodnoty dvojrozměrně, tj. například do roviny papíru.

Nejprve doporučuji navštívit stránky, na které vás zavedou následující odkazy:

http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/2DQuantumHarmonicOscillator/2d_oscillator2.html

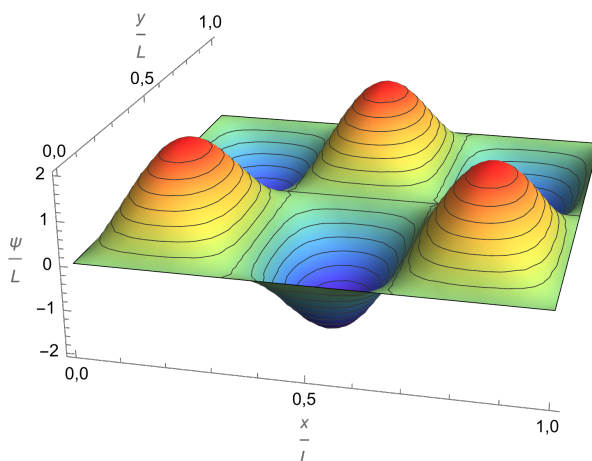
<http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell2d/infwell2d.html>

Odkazy vedou na aplety zobrazující řešení pro obdélníkovou či čtvercovou jámu a dvoudimenzionální harmonický oscilátor. Nastavte různé kombinace kvantových čísel a pozorujte graf vlnové funkce a hustoty pravděpodobnosti. Sledujte také šedé křivky pod grafem hustoty pravděpodobnosti či vlnové funkce. Tyto šedé křivky představují vrstevnicové grafy.

V následujícím textu se s těmito grafy seznámíte. Cílem bude naučit se nakreslit vrstevnicový graf dané funkce, pokud budete znát běžný graf a také se naučit odvodit z podoby vrstevnicového grafu typ funkce a rozhodnout, zda se jedná o jámu nebo oscilátor. Ovládnutí této dovednosti vám může pomoci si vícerozměrné problémy v kvantové mechanice lépe představit.

Budete mít také za úkol některé vrstevnicové grafy sami nakreslit, proto si připravte papír, pastelky, tužku a gumu. Cílem nebude nakreslit přesný graf funkce, nýbrž vytvořit náčrtek, který zachytí charakter průběhu dané funkce.

Začněme grafy znázorňující stavy v nekonečně hluboké potenciálové jámě. Graf na obrázku 5.1 jste již možná viděli, pokud jste řešili úlohy v pracovním listu zaměřeném na nekonečnou dvoudimenzionální potenciálovou jámu.



Obrázek 5.1: Vlnová funkce odpovídající stavu v 2D potenciálové jámě s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$.

Vlnová funkce stacionárního stavu částice v nekonečné čtvercové jámě o straně délky L v čase $t = 0$ s má tvar:

$$\psi(x,y) = \frac{2}{L} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{L}\right) \cdot \sin\left(\frac{n_y \pi y}{L}\right),$$

kde n_x a n_y jsou kvantová čísla charakterizující daný stav. Stacionární stav, kterým se nyní zabýváme, je součinem dvou sinů. Co z toho pro nás vyplývá?

Z vlastností funkce sinus je patrné, že lokální maxima uvedené vlnové funkce mají všechna stejnou hodnotu, totéž platí i pro minima. Hodnoty funkce v maximech se liší od hodnot v minimech jen znaménkem. Vlnová funkce nabývá maxim v bodech, kde mají obě funkce sinus hodnotu $+1$ nebo -1 a minim v takových bodech, ve kterých jeden ze sinů nabývá hodnoty $+1$ a druhý -1 .

Nyní máme za úkol nakreslit vrstevnicový graf vlnové funkce na základě grafu klasického (viz obrázek 5.1). Nejprve je potřeba si na papíře vymežit čtvercovou oblast, do které budeme vrstevnicový graf kreslit. Poněvadž je zadaná funkce periodická, rozdělíme si čtverec na oblasti pro jednu půlperiodu této funkce. O počtu těchto oblastí rozhodují kvantová čísla. V pracovních listech věnovaných dvoudimenzionální nekonečné pravoúhlé potenciálové jámě a dvoudimenzionálnímu lineárnímu harmonickému oscilátoru jsou uvedeny úlohy věnované hledání souvislosti mezi kvantovými čísly a počtem lokálních extrémů vlnové funkce. Pokud si tyto souvislosti nevybavujete, doporučuji si je před kreslením připomenout.

V každé oblasti, na kterou si čtverec rozdělíme, bude funkce ze zadání nabývat extrému. Každá oblast přitom odpovídá jedné půlperiodě funkce.

Položme si tyto otázky:

- Kolik bude oblastí ve směru osy x a y , na které si rozdělíme papír?
- Budou všechny oblasti stejně velké?
- Nabývá funkce jen kladných, nebo i záporných hodnot?
- Jaké barvy použijete? Kolik vrstevnic budete kreslit?

Znáte odpovědi na tyto otázky? Potom se pusťte do kreslení! Můžete přitom mít samozřejmě otevřený klasický graf, nebo to můžete zkusit bez něj! Pokud si nejste jistí, čtěte dále.

Zde jsou odpovědi:

- Ve směru osy x budeme kreslit tři oblasti, ve směru osy y dvě oblasti.
- Všechny oblasti budou stejně velké. To plyne z předpisu vlnové funkce.
- Funkce nabývá jak kladných, tak záporných hodnot.
- Volba barev je čistě na vás, stejně jako počet vrstevnic, které budete kreslit. Dbejte však na to, abyste v každé oblasti nakreslili stejný počet křivek.

Já jsem využil barvy duhy, od fialové po červenou. Fialová reprezentuje hodnoty, kterých funkce nabývá v okolí globálních minim, červená poté hodnoty, kterých funkce nabývá v okolí globálních maxim. Pro hodnoty v okolí nuly jsem použil odstíny zelené.

Na obrázku 5.3 je mnou nakreslený graf vlnové funkce, náčrt je rozdělen do čtyř kroků.

Na obrázku 5.4 je přesný graf vytvořený v programu Wolfram Mathematica, pro přehlednost uvádím i legendu. Jak je vidět na obrázku 5.3, rukou není možné zakreslit přesný tvar vrstevnice, nicméně lze zachytit její tvar dostatečně, aby mi výsledný graf pomohl udělat si představu o průběhu funkce.

Podívejte se na obrázek 5.4. Když máte nyní před sebou vrstevnicový graf, zamyslete se, jak pomocí tohoto grafu odvodíte průběh funkce. Všimněte si, kterých hodnot funkce nabývá, kolik napočítáte extrémů podél jednotlivých os. Na základě toho už byste měli být schopni zpětně určit, o jaký stacionární stav se jedná.

Nyní nakreslíme graf *hustoty pravděpodobnosti* ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 4$, $n_y = 1$. Zkuste nakreslit graf sami! Pokud si nevíte rady, můžete číst dále, níže popíšu postup kreslení.

Zkuste opět zodpovědět následující otázky:

- Na kolik oblastí si papír rozdělíte?
- Budou všechny oblasti stejně velké?
- Nabývá funkce ze zadání jen kladných, nebo i záporných hodnot?
- Jaké barvy použijete? Kolik vrstevnic budete kreslit?

Pomohly vám otázky? Už víte, jak budete graf kreslit? Pokud ano, pusťte se do toho! Pokud si nejste jistí, čtěte dále.

Zde jsou odpovědi na výše uvedené otázky:

- Papír si rozdělíte na čtyři oblasti v jedné řadě podél osy x . Kvantové číslo totiž odpovídá počtu extrémů podél dané osy.
- Všechny oblasti jsou stejně velké.
- Funkce nabývá jen kladných hodnot, jedná se totiž o hustotu pravděpodobnosti.
- Volba barev je čistě na vás, stejně jako počet vrstevnic. Dbejte ovšem na to, abyste v každé oblasti nakreslili stejný počet vrstevnic.

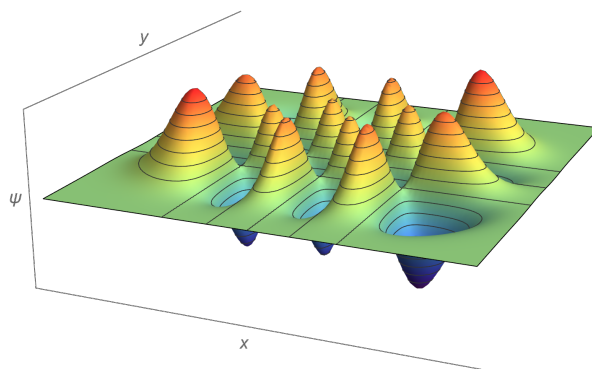
Já jsem využil barvy duhy jako předtím. Použil jsem všechny barvy, fialovou barvou jsem znázornil hodnoty funkce blízké nule. Další možností by poté bylo například použít pro hodnoty blízké nule zelenou barvu, jak tomu bylo v předchozím příkladu. Na obrázku 5.5 je můj náčrt grafu opět rozfázovaný do čtyř kroků.

Přesný graf vytvořený v programu Wolfram Mathematica je uveden na obrázku 5.6.

Pokud bychom chtěli na základě vrstevnicového grafu určit stav, jakému zobrazená funkce přísluší, je dobré nejprve určit, jestli jde o graf vlnové funkce, nebo hustoty pravděpodobnosti. Následně spočítáme extrémy a podle nich určíme kvantová čísla. Úkol na procvičení je zařazen na konec pracovního listu.

Podívejme se nyní na lineární harmonický oscilátor (LHO). Předpis vlnové funkce částice nacházející se v LHO je složitější, v předpisu funkce figurují Hermitovy polynomy a exponenciály.

Uvedme konkrétní graf, který jste již potkali, pokud jste řešili pracovní list zaměřený na 2D lineární harmonický oscilátor. Graf je vyobrazen na obrázku 5.2.



Obrázek 5.2: Graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 5$, $n_y = 3$.

Je vidět, že průměty „kopců“ do roviny xy , které se nacházejí v rozích, zaujímají v rovině xy největší plochu. Vlnová funkce nabývá v těchto oblastech globálních extrémů. Naopak půdorysy kopců uprostřed jsou oproti těm v rozích menší a vlnová funkce v těchto oblastech nenabývá globálně extrémních hodnot.

Když chceme nakreslit vrstevnicový graf, zajímá nás opět nejprve počet „obdélníkových“ oblastí, na které je rovina xy rozdělena a také jejich rozmístění. Počet oblastí v jednom směru je roven kvantovému číslu podél příslušné osy zvětšenému o jedna. Celkový počet oblastí je poté součinem kvantových čísel zvětšených o jedna. Znovu využijeme barvy duhy. Fialová bude jako předtím reprezentovat nejmenší funkční hodnoty, červená potom největší funkční hodnoty.

Vrstevnicový graf vlnové funkce z obrázku 5.2 je uveden na obrázku 5.7.

Zaměřte svou pozornost na tento graf, porovnejte ho s grafem klasickým. Všimněte si rozdílů mezi oscilátorem a jámou. Zamyslete se, jak pomocí tohoto grafu odvodíte hodnoty kvantových čísel. Všimněte si, kterých hodnot funkce nabývá, kolik napočítáte extrémů podél jednotlivých os. Na základě toho už byste zpětně měli být schopni určit, o jaký stacionární stav se jedná.

Nyní nakreslíme vrstevnicový graf *hustoty pravděpodobnosti* příslušející stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$. Zkuste graf nakreslit sami! Pokud si nevíte rady, můžete číst dále, níže popíšu postup kreslení.

Stejně jako v odstavci věnovaném potenciálové jámě zkuste zodpovědět následující otázky:

- Jak si papír rozdělíte?
- Budou všechny oblasti stejně velké?
- Nabývá funkce ze zadání jen kladných, nebo i záporných hodnot?
- Jaké barvy použijete? Kolik vrstevnic budete kreslit?

Pomohly vám otázky? Už víte, jak budete graf kreslit? Pokud ano, pusťte se do toho! Pokud si nejste jistí, čtěte dále.

Zde jsou odpovědi na výše uvedené otázky.

- Papír rozdělte na dvě oblasti podél osy x a tři oblasti podél osy y .
- Oblasti uprostřed budou menší než oblasti v rozích. Opíráme se o pozorování, které jsme učinili u předchozího grafu.
- Funkce nabývá jen nezáporných hodnot, poněvadž jde o hustotu pravděpodobnosti.
- Volba barev je čistě na vás, stejně jako počet zakreslených vrstevnic. Dbejte ovšem na to, abyste v rohových oblastech nakreslili vrstevnic více, než v oblastech blíže středu. Počet vrstevnic by totiž měl respektovat hodnotu, kterou funkce v oblasti nabývá.

Nyní máte všechny potřebné informace k nakreslení grafu. Pustte se do práce!

Já jsem využil barvy duhy, od fialové po červenou. Další možností by bylo například pro hodnoty blízké nule použít zelenou barvu, jako tomu bylo u vlnové funkce. Na obrázku 5.8 je můj náčrt grafu rozfázovaný do čtyř kroků.

Všimněte si, že jsem pro hodnoty funkce blízké maximu použil pro oblasti blíže středu žlutou, nikoliv červenou barvu, protože hustota pravděpodobnosti dosahuje v tomto případě vyšších hodnot v rohových oblastech než v oblastech blíže středu.

Na obrázku 5.9 je přesný graf vytvořený v programu Wolfram Mathematica. Pro přehlednost uvádím i legendu. Srovnejte, nakolik jste se přiblížili tomuto grafu a jak moc se naopak lišíte. Je namístě připomenout, že nejde o přesné zachycení průběhu funkce, nýbrž o alespoň přibližný náčrt.

Podívejte se na obrázek 5.9. Když máte nyní před sebou vrstevnicový graf, zamyslete se, jak pomocí tohoto grafu odvodíte průběh funkce. Všimněte si, kterých hodnot funkce nabývá, kolik napočítáte extrémů podél jednotlivých os. Na základě toho už byste měli být schopni zpětně určit, o jaký stacionární stav se jedná.

Na závěr budete mít za úkol přiřazovat ke zobrazované funkci a kombinaci kvantových čísel správný graf. U každé přiřazené dvojice poté rozhodněte, jestli se jedná o lineární harmonický oscilátor, nebo o nekonečnou čtvercovou potenciálovou jámu.

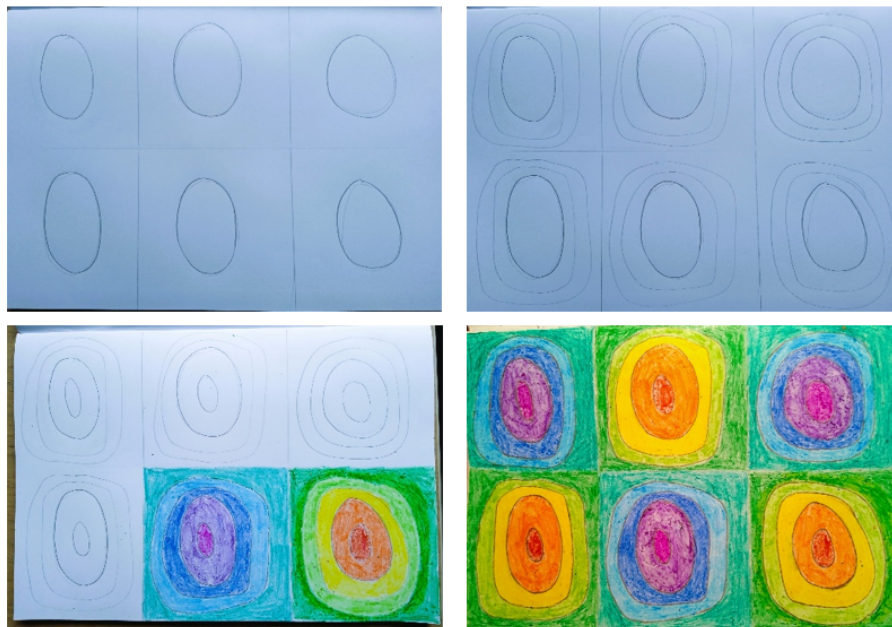
Vybírejte z této nabídky:

1. Vlnová funkce, $n_x = 3$, $n_y = 0$.
2. Hustota pravděpodobnosti, $n_x = 1$, $n_y = 2$.
3. Vlnová funkce, $n_x = 2$, $n_y = 3$.
4. Hustota pravděpodobnosti, $n_x = 2$, $n_y = 2$.

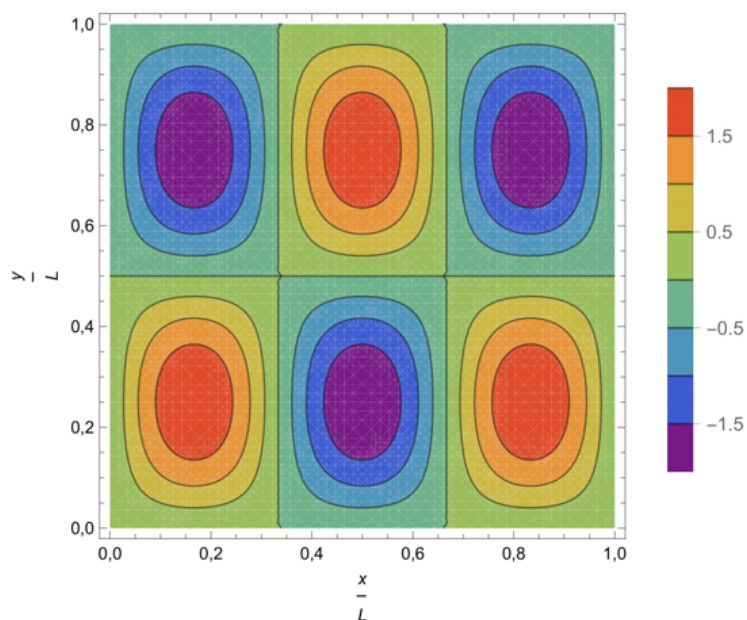
Na obrázku 5.10 jsou grafy, ke kterým přiřazujte z předchozí nabídky.

Pokud si nejste jistí, můžete se vrátit o několik řádků výše a zopakovat si, jak se tvoří vrstevnicové grafy na základě zadaných kvantových čísel.

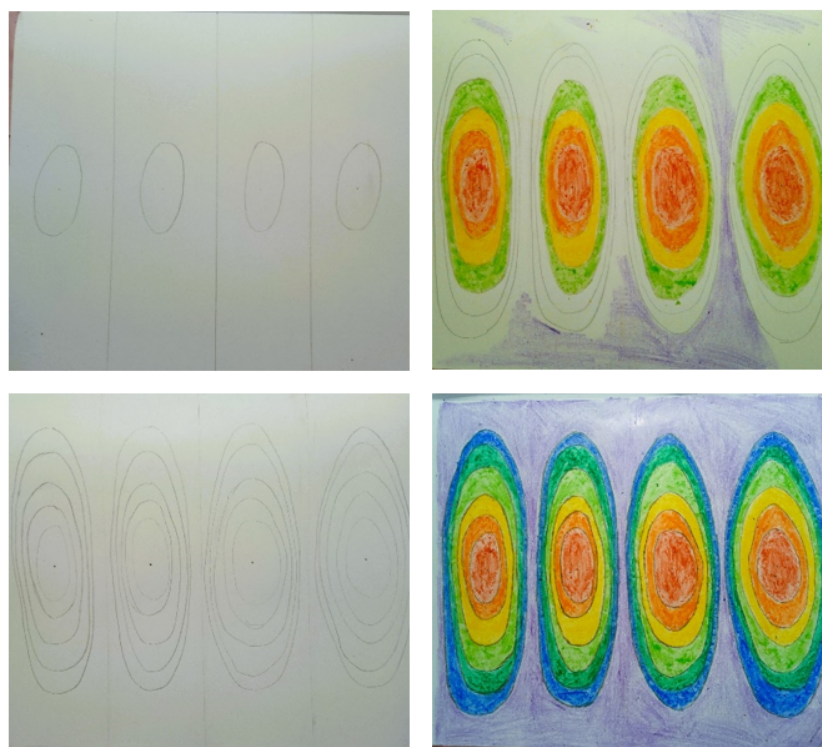
Řešení tohoto cvičení zde neuvádím.



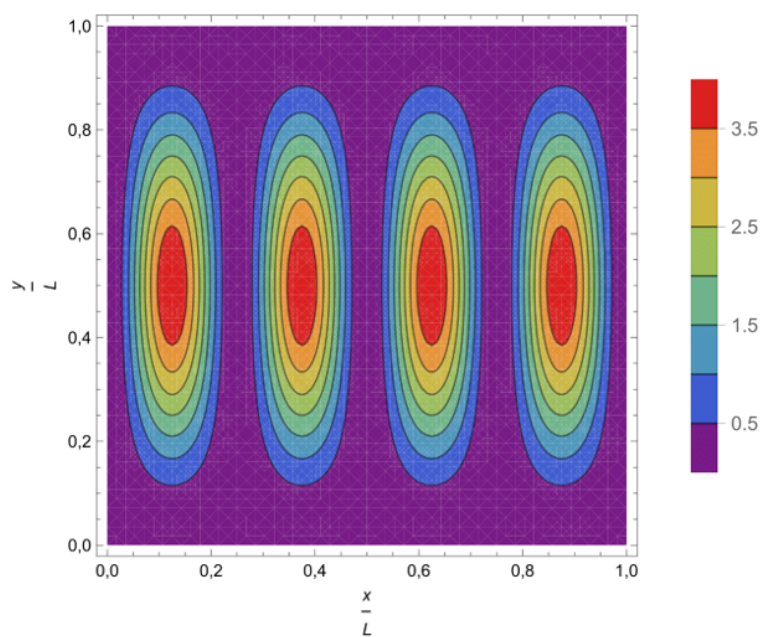
Obrázek 5.3: Vrstevníkový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$, ruční náčrtek.



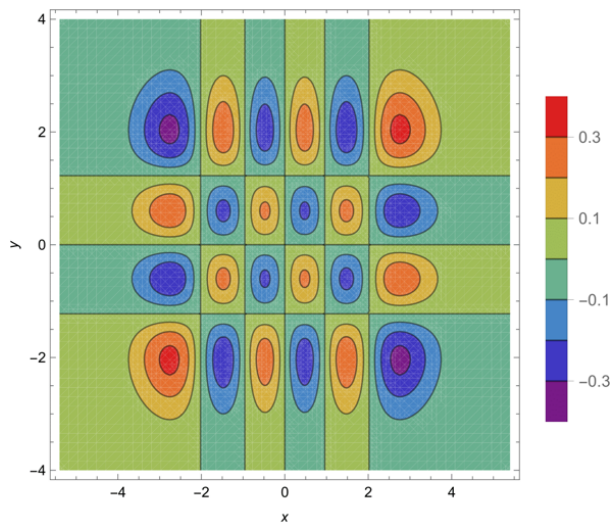
Obrázek 5.4: Vrstevníkový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$ vytvořený ve Wolfram Mathematice.



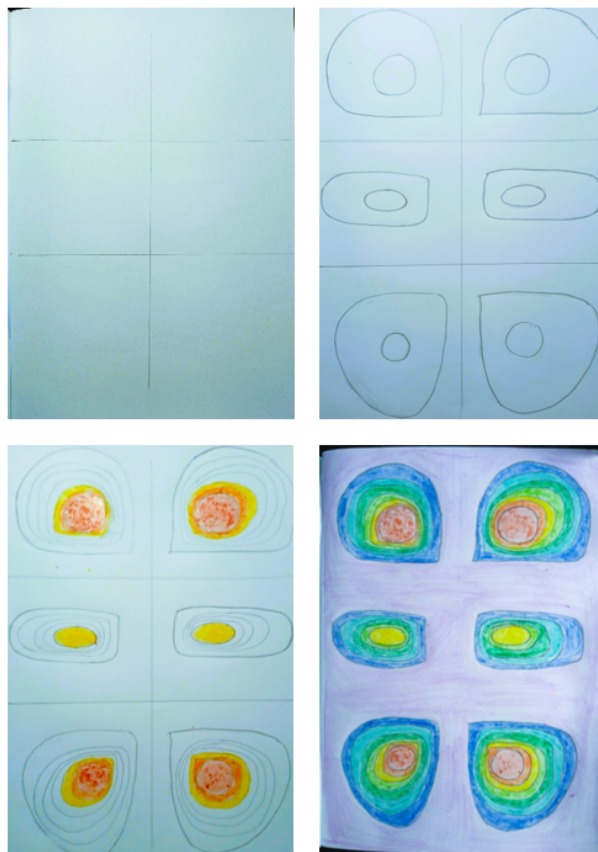
Obrázek 5.5: Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 4$, $n_y = 1$, ruční náčrtek.



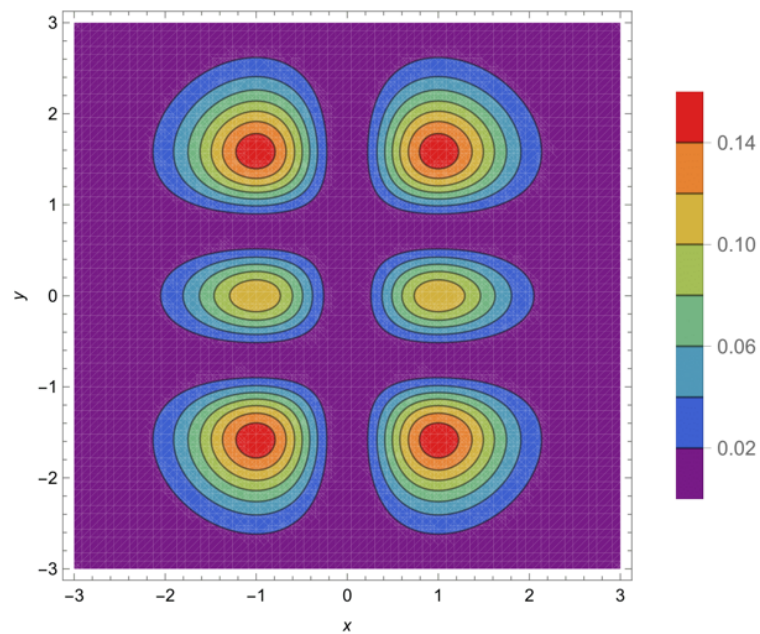
Obrázek 5.6: Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 4$, $n_y = 1$.



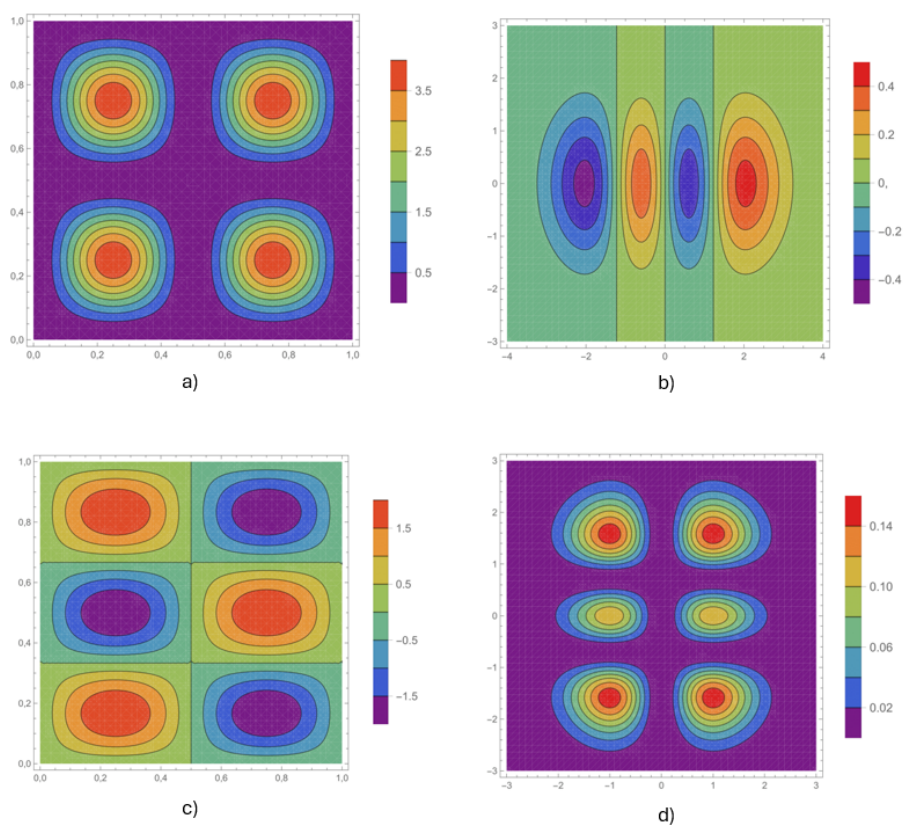
Obrázek 5.7: Vrstevníkový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 5$, $n_y = 3$.



Obrázek 5.8: Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$, ruční náčrtek.



Obrázek 5.9: Vrstevníkový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1, n_y = 2$.



Obrázek 5.10: Zadání úlohy na přiřazování grafů ke kvantovým číslům.

6 Superponované stavy

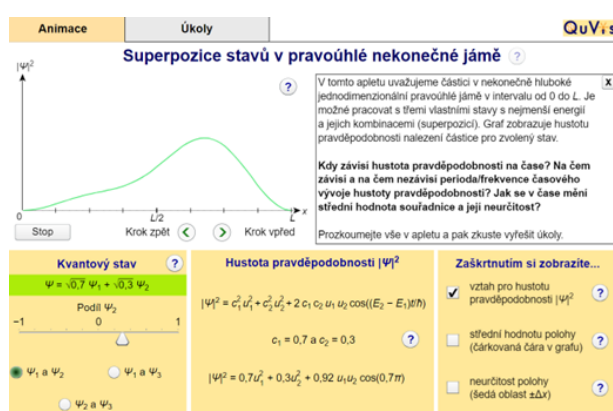
6.1 Zadání úloh

V následujícím pracovním listu se budete zabývat superponovanými stavy částice nacházející se v nekonečné 1D pravoúhlé potenciálové jámě nebo v 1D lineárním harmonickém oscilátoru. Připomeňte si, jak vypadají stacionární stavy částice nacházející se v harmonickém oscilátoru a v nekonečné pravoúhlé jámě. Rovněž si připomeňte, jaký význam mají koeficienty lineární kombinace popisující superponovaný stav.

Využijte odkaz, který vás zavede na QuVis aplet zobrazující superponované stavy částice nacházející se v nekonečné pravoúhlé potenciálové jámě:

<https://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/SuperpositionStates/SuperpositionStates.html>

Na obrázku níže je aplet, se kterým budete pracovat:



Obrázek 6.1: Správně nastavený QuVis aplet.

Vlevo v okně apletu je vidět graf hustoty pravděpodobnosti. Vlevo pod grafem si můžete nastavit různé superponované stavy. Uprostřed okna pak můžete vidět vyjádření hustoty pravděpodobnosti vzorcem, pokud vpravo zakliknete příslušnou volbu.

1. Nastavujte různé lineární kombinace stacionárních stavů ψ_1 a ψ_2 . Pozorujte časový vývoj hustoty pravděpodobnosti ρ . Jaký je časový vývoj ρ ve speciálních případech, kdy je koeficient u vlnové funkce ψ_2 nulový nebo roven hodnotám 1 a -1?
2. Nastavte superponovaný stav $\psi(x,t) = \sqrt{\frac{3}{10}}\psi_1 + \sqrt{\frac{7}{10}}\psi_3$.

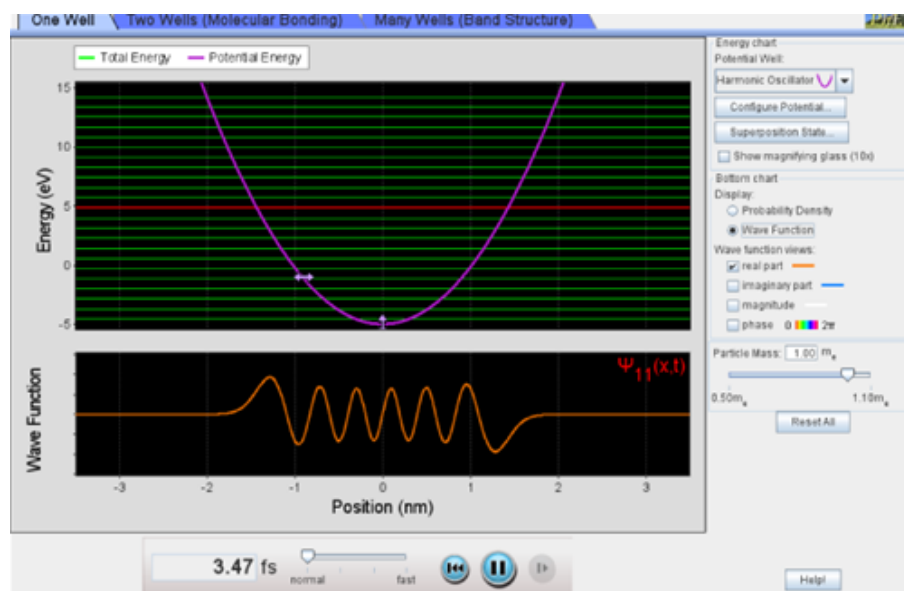
- Určete pravděpodobnost, že částici naměříme celkovou energii rovnou energii základního stavu.
- Pozorujte frekvenci, se kterou se mění graf hustoty pravděpodobnosti. Měňte vzájemnou velikost koeficientů v lineární kombinaci. Mění se frekvence změny hustoty pravděpodobnosti? Pokud ano, jak? Zdůvodněte, proč tomu tak je. Pokud si nevíte rady, rozklikněte v apletu otazník u grafu ρ , zobrazí se vám nápověda.

3. Vpravo si můžete zakliknout, aby se vám v grafu zobrazila rovněž střední hodnota polohy částice v jámě. Nastavujte různé kombinace stacionárních stavů. Pro které superponované stavy platí, že je střední hodnota polohy částice nezávislá na čase?

Rozklikněte následující odkaz, který vás zavede na stránku s apletem z kolekce PhET:

<https://phet.colorado.edu/sims/cheerpi/bound-states/latest/bound-states.html?simulation=bound-states>

Nastavte vpravo nahoře, že chcete pracovat s lineárním harmonickým oscilátorem. Na obrázku 6.2 (viz níže) je příklad správného nastavení apletu.



Obrázek 6.2: Správně nastavený PhET aplet.

Superponovaný stav nastavíte kliknutím na tlačítko „Superposition State“. Nastavte libovolné hodnoty jednotlivých koeficientů. Když kliknete na „Normalize“, tak se velikost koeficientů upraví tak, aby výsledný stav byl normovaný. Klikněte na „Apply“ a pozorujte graf nastaveného superponovaného stavu. Pokud tedy například chcete zobrazit superpozici dvou stacionárních stavů, kde oba koeficienty v lineární kombinaci jsou stejně velké, nastavte požadované koeficienty oba na stejnou, libovolně velkou hodnotu a klikněte na „Normalize“. Kliknutím na „Clear“ se všechny koeficienty vynulují. Všimněte si, že aplet umožňuje nastavovat jen reálné koeficienty, pro naše potřeby jsou však reálné koeficienty dostačující.

4. Pozorujte postupně časový vývoj grafů hustot pravděpodobnosti, které odpovídají následujícím vlnovým funkcím:

- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_5)$,
- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_1 + \psi_3)$,
- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\psi_2 + \psi_6)$.

Co mají grafy hustot pravděpodobnosti všech uvedených stavů společného? K nalezení odpovědi by vám mohly pomoci následující stavy, které danou vlastnost nemají:

- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_4 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_3$,
- $\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_7 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_2$.

Nalezněte obecné pravidlo pro superpozici dvou stacionárních stavů, které mají tuto vlastnost. Zobrazte alespoň jeden další stav, jehož graf hustoty pravděpodobnosti má tuto vlastnost.

5. V pravé části obrazovky rozklikněte „Configure Potential“. Nastavte minimum potenciální energie (označeno jako „Offset“) na hodnotu -5 eV a konstantu ω na hodnotu 1 fs^{-1} . Uvažujme čtyři superponované stavy, jejichž vlnové funkce mají předpis:

- $\psi_a(x,t) = 0,71(\psi_3 + \psi_4)$,
- $\psi_b(x,t) = 0,24\psi_3 + 0,97\psi_4$,
- $\psi_c(x,t) = 0,71(\psi_0 + \psi_4)$,
- $\psi_d(x,t) = 0,24\psi_0 + 0,97\psi_4$.

Kterému z těchto stavů odpovídá největší střední hodnota energie?

Určete pro každý stav čas, za který se graf hustoty pravděpodobnosti vrátí do stejné podoby, kterou měl v čase $t = 0 \text{ fs}$. Rychlost vývoje grafu nastavte na normální.

6.2 Řešení úloh z pracovního listu „Superponované stavy“

1. Když nastavíme koeficient u ψ_2 nulový, zjistíme, že hustota pravděpodobnosti je časově nezávislá, neboť se nejedná o superponovaný, nýbrž o stacionární stav popsany vlnovou funkcí ψ_1 . Jak víme z teorie, platí, že hustota pravděpodobnosti stacionárního stavu je časově nezávislá.

Když bude tento koeficient nenulový a koeficient u ψ_1 nebude roven 1 nebo -1, bude hustota pravděpodobnosti již závislá na čase. Když ale nastavíme hodnotu koeficientu c_2 na hodnotu 1 nebo -1, získáme opět stacionární stav, tentokrát popsany vlnovou funkcí ψ_2 a hustota pravděpodobnosti bude časově nezávislá.

2.
 - Pravděpodobnost naměření energie základního stavu zjistíme tak, že umocníme velikost koeficientu, kterým násobíme stacionární vlnovou funkci základního stavu. Tento postup je použitelný v případě, když je superponovaný stav normovaný, tj. pokud je součet druhých mocnin velikostí koeficientů v lineární kombinaci roven jedné. Superponovaný stav v zadání úlohy má tuto vlastnost, takže můžeme umocnit koeficient, kterým je násobena funkce ψ_1 . Bude tedy $P(E_1) = \left(\sqrt{\frac{3}{10}}\right)^2 = \frac{3}{10}$.
 - Hustota pravděpodobnosti zadaného superponovaného stavu má tvar:

$$\rho(x,t) = \left| \sqrt{\frac{3}{10}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{\pi x}{L}\right) e^{\frac{E_1 t}{i\hbar}} + \sqrt{\frac{7}{10}} \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{3\pi x}{L}\right) e^{\frac{E_3 t}{i\hbar}} \right|^2.$$

Odvoďme, že časový vývoj hustoty pravděpodobnosti uvažovaného stavu je periodický. Uvažujme superpozici libovolných dvou stacionárních stavů částice v jámě:

$$\psi(x,t) = c_k \sin\left(\frac{n_k \pi x}{L}\right) e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} + c_l \sin\left(\frac{n_l \pi x}{L}\right) e^{-\frac{iE_l t}{\hbar}}.$$

Označme $u_k = \sin\left(\frac{n_k \pi x}{L}\right)$, $u_l = \sin\left(\frac{n_l \pi x}{L}\right)$. Hustota pravděpodobnosti je druhá mocnina velikosti vlnové funkce: $\rho(x,t) = |\psi(x,t)|^2$.

$$\begin{aligned} \rho(x,t) &= \left| c_k u_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} + c_l u_l e^{-\frac{iE_l t}{\hbar}} \right|^2, \\ \rho(x,t) &= \left[c_k^* u_k e^{\frac{iE_k t}{\hbar}} + c_l^* u_l e^{\frac{iE_l t}{\hbar}} \right] \cdot \left[c_k u_k e^{-\frac{iE_k t}{\hbar}} + c_l u_l e^{-\frac{iE_l t}{\hbar}} \right], \\ \rho(x,t) &= |c_k|^2 u_k^2 + |c_l|^2 u_l^2 + c_k^* c_l u_k u_l e^{\frac{it(E_k - E_l)}{\hbar}} + c_l^* c_k u_k u_l e^{\frac{it(E_l - E_k)}{\hbar}}, \\ \rho(x,t) &= |c_k|^2 u_k^2 + |c_l|^2 u_l^2 + c_k^* c_l u_k u_l \left[\cos\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right) \right] \\ &\quad + c_l^* c_k u_k u_l \left[\cos\left(\frac{(E_l - E_k)t}{\hbar}\right) + i \sin\left(\frac{(E_l - E_k)t}{\hbar}\right) \right], \\ \rho(x,t) &= |c_k|^2 u_k^2 + |c_l|^2 u_l^2 + [c_k^* c_l u_k u_l + c_l^* c_k u_k u_l] \cos\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right) \\ &\quad + i [c_k^* c_l u_k u_l + c_l^* c_k u_k u_l] \sin\left(\frac{(E_k - E_l)t}{\hbar}\right). \end{aligned}$$

Z tvaru hustoty pravděpodobnosti plyne, že vývoj ρ v čase je periodický, neboť funkce sinus a kosinus jsou periodické. Frekvence časového vývoje ρ je úměrná rozdílu energií příslušejících stacionárním stavům v lineární kombinaci. Na velikosti koeficientů lineární kombinace přitom frekvence časového vývoje nezávisí.

Podobné odvození lze také nalézt na stránce s apletem po rozkliknutí nápovědy v pravé části okna.

3. Stav, pro který je střední hodnota polohy částice časově nezávislá, jsou superpozicí základního a druhého excitovaného stavu. Pro tyto stavy platí, že je graf odpovídající hustoty pravděpodobnosti osově souměrný podle přímky rovnoběžné s osou y a procházející středem jámy. Graf je rozdělen na dvě poloviny tak, že obsahy ploch pod levou částí a pravou částí grafu se neustále rovnají. U ostatních superponovaných stavů je střední hodnota polohy částice časově závislá.
4. Hustoty pravděpodobnosti odpovídající prvním třem vlnovým funkcím jsou sudé funkce. Tuto vlastnost mají stavy, které jsou superpozicí jen sudých nebo jen lichých stavů. Stavů v superpozici přitom může být více než dva. Na velikosti koeficientů nezáleží. Když se vlnová funkce skládá pouze z lichých nebo pouze ze sudých členů, je druhá mocnina její velikosti, což je hustota pravděpodobnosti, sudá funkce. Uvedme tedy další stav, jehož hustota pravděpodobnosti je sudá funkce:

$$\psi(x,t) = \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_1 + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_5 + \sqrt{\frac{1}{3}}\psi_7.$$

5. Střední hodnotu energie lze spočítat jako vážený průměr energií, kde váhami jsou pravděpodobnosti naměření jednotlivých energií:

$$\langle E \rangle = \frac{|c_1|^2 E_1 + |c_2|^2 E_2}{|c_1|^2 + |c_2|^2}.$$

Pokud je stav normovaný, je jmenovatel zlomku roven jedné. Lehce můžeme ověřit, že všechny zadané stavy jsou normované. Ve všech uvedených stavech můžeme naměřit energii E_4 a nějakou menší energii. Největší střední hodnotu energie naměříme částici ve stavu, kde tato menší energie je co největší a navíc není moc pravděpodobné její naměření. Střední hodnota energie bude tedy největší u stavu ψ_b , neboť koeficient u ψ_4 je větší, než jak je tomu u stavu ψ_a . Střední hodnota energie druhého superponovaného stavu je:

$$\langle E \rangle \doteq 0,24^2 E_3 + 0,97^2 E_4 \doteq 0,06 \cdot \frac{7}{2} \hbar \omega + 0,94 \cdot \frac{9}{2} \hbar \omega \doteq 4,44 \hbar \omega.$$

Časy, za které se graf hustoty pravděpodobnosti vrátí do stejné podoby, jakou měl v počátečním čase (časy jsou zaokrouhleny):

$$t_a \doteq 6,4 \text{ fs},$$

$$t_b \doteq 6,4 \text{ fs},$$

$$t_c \doteq 1,6 \text{ fs},$$

$$t_d \doteq 1,6 \text{ fs}.$$

Ze změřených časů je vidět, že graf hustoty pravděpodobnosti se u prvních dvou stavů měnil stejně dlouho a o poznání déle, než graf ρ příslušející ψ_c a ψ_d . Rozdíl energetických hladin, které přísluší vlnovým funkcím, je u prvních dvou stavů nejmenší možný, neboť máme dva sousední stacionární stavy. V obou případech vyšel stejný čas, i když koeficienty měly jinou hodnotu. U druhých dvou superponovaných stavů je energetický rozdíl mezi odpovídajícími energetickými hladinami větší. I zde jsme pozorovali,

že rychlost časového vývoje hustoty pravděpodobnosti nezávisí na velikosti koeficientů v lineární kombinaci.

Doporučuji vyzkoušet například stav popsany touto vlnovou funkcí:

$$\psi(x,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_3 + \frac{1}{\sqrt{2}}\psi_{26}.$$

Energetický rozdíl mezi oběma hladinami reprezentovanými funkcemi v uvedené lineární kombinaci je ještě výraznější než v případě stavů ψ_c a ψ_d . Tomu odpovídá i časový vývoj grafu ρ .