

DOKUMENTACE K PROGRAMU

Zobrazování vlnové funkce pro vybrané 1D potenciály

Po částech konstantní potenciál
Nekonečně hluboká pravoúhlá potenciálová jáma
Lineární harmonický oscilátor

Tomáš Škraban

Matematicko-fyzikální fakulta
Katedra didaktiky fyziky

Praha 2017

Obsah

1 Úvod	2
2 Implementace	3
2.1 Globální konstanty	3
2.2 Po částech konstantní potenciál	3
2.2.1 Vlnová funkce	3
2.2.2 Normování	5
2.2.3 Dodatky	6
2.3 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma	6
2.3.1 Vlnová funkce	6
2.4 Kvantový oscilátor	7
2.4.1 Vlnová funkce	7
2.4.2 Dodatky	7
3 Ovládání	8
3.1 Univerzální ovládání	8
3.2 Ovládání menu pro volbu superpozice stavů	9
3.3 Ovládání jednotlivých rozložení	10
3.3.1 Po částech konstantní potenciál	10
3.3.2 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma	11
3.3.3 Kvantový oscilátor	11
3.4 Náhled rozvržení	13

1 Úvod

V dnešní době existuje mnoho webových appletů, které může učitel použít při výuce kvantové mechaniky, zejména pak v části zobrazování vlnové funkce. Problémem je, že mnoho těchto appletů je nepřístupných, kvůli jejich integraci do webových stránek a ukončené podpoře Javy ze strany prohlížečů. Tento program vznikl jako náhrada těchto appletů, které v budoucnu budou obtížně použitelné, či zcela nedostupné.

Všechny funkce programu jsou označeny ikonou a celkově je množství textu v programu minimalizováno na fyzikální popisky stylu $t = 15,4$ fs. Odpadá zde tedy potřeba překladu textů při potenciálním použití v cizojazyčném prostředí. Předpokládá se, že se tato příručka bude distribuovat společně s programem, kde bude k dispozici k nahlédnutí všem uživatelům.

Až na výjimky je možné ovládat program pomocí myši. Pokud není možné myš použít, ovládá se funkce pomocí šipek či kláves jako mezerník a enter. Podrobný popis ovládání programu je v kapitole Ovládání.

Způsob řešení různých problémů je popsán v sekci Implementace, kde je například popsána metoda zobrazování vlnové funkce či tvary řešení potřebných rovnic.

Program nabízí zobrazení vlnové funkce pro tyto jednorozměrného průběhy potenciálu:

- Všechny varianty po částech konstantního potenciálu se dvěma potenciálovými skoky
- Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma
- Lineární harmonický oscilátor.

Pozn.: V celém textu je symbolem i myšlena komplexní jednotka $i^2 = -1$

2 Implementace

V této kapitole jsou uvedeny rovnice zobrazovaných funkcí a metody jejich zobrazování. V první řadě je třeba zmínit, že **osa x** , tedy souřadnice, **je vodorovná** a má směr zleva doprava (ve směru čtení textu). V programu je naznačena šedou úsečkou v prostoru vlnové funkce. **Počátek soustavy souřadnic je vždy ve středu této úsečky. Osa vlnové funkce je kolmá na osu x .**

2.1 Globální konstanty

V programu jsou napevno nastaveny tyto konstanty, které jsou společně všem vlnovým funkcím a potenciálům:

- $\hbar=6,582\,119\,514 \times 10^{-16}$ eV s – redukovaná Planckova konstanta
- $m=9,109 \times 10^{-31}$ kg – hmotnost zkoumané částice (elektron)

2.2 Po částech konstantní potenciál

Potenciální energie v tomto rozložení je rozdělena na tři části, jež mají konstantní průběh. První část je pro $x < a$, kde a je poloha prvního potenciálového skoku, druhá část běží od $x = a$ do $x = b$, kde b je poloha druhého potenciálového skoku, a poslední část je pro $x > b$. Souhrnně tedy lze napsat

$$V(x) = \begin{cases} V_L & \text{pro } x \in (-\infty, a) \\ V_M & \text{pro } x \in [a, b] \\ V_R & \text{pro } x \in (b, \infty) \end{cases}$$

2.2.1 Vlnová funkce

Vlnová funkce v tomto rozložení potenciálu je rozdělena na tři části v závislosti na poloze. V první části potenciálního průběhu má vlnová funkce tvar

$$Ae^{\alpha x} + Be^{-\alpha x},$$

ve druhé části vypadá jako

$$Ce^{\beta x} + De^{-\beta x}$$

a v poslední části je to

$$Fe^{\gamma x} + Ge^{-\gamma x},$$

kde $\alpha = \frac{\sqrt{2m(V_L-E)}}{\hbar}$, $\beta = \frac{\sqrt{2m(V_M-E)}}{\hbar}$ a $\gamma = \frac{\sqrt{2m(V_R-E)}}{\hbar}$. Tímto dostáváme obecný tvar vlnové funkce pro všechny možnosti energií V_L , V_M , V_R a E , jelikož koeficienty α , β a γ jelikož jsou v závislosti na energiích reálné ($E < V$ v příslušném intervalu) či ryze imaginární ($E > V$ v příslušném intervalu). Komplexní konstanty A , B , C , D , F , G musí být nastaveny tak, aby výsledná vlnová funkce byla spojitá a hladká. To se dá vyjádřit soustavou čtyř rovnic o 6 neznámých, kde navazujeme funkce a jejich derivace v místech skoku, tedy v $x = a$ a $x = b$. Zmíněná soustava rovnic má tvar

$$\begin{aligned} Ae^{\alpha a} + Be^{-\alpha a} &= Ce^{\beta a} + De^{-\beta a} \\ A\alpha e^{\alpha a} - B\alpha e^{-\alpha a} &= C\beta e^{\beta a} - D\beta e^{-\beta a} \\ Ce^{\beta b} + De^{-\beta b} &= Fe^{\gamma b} + Ge^{-\gamma b} \\ C\beta e^{\beta b} - D\beta e^{-\beta b} &= F\gamma e^{\gamma b} - G\gamma e^{-\gamma b}. \end{aligned}$$

Aby tato soustava měla jednoznačné řešení je zřejmé, že je třeba „vyloučit“ dvě proměnné. Aplikací fyzikálního modelu zjistíme, že pokud je energie částice $E < V_L$, můžeme celou situaci řešit jako částici, která „nalétává“ zleva (ve směru osy x), konstantu A můžeme chápat jako parametr popisující nalétávající částici. Zároveň na druhé straně máme konstantu G , která v případě $E > V_R$ popisuje „pohyb“ částice proti směru osy x , tedy ve směru, jakým se při zvolené situaci částice rozhodně v této části nepohybuje, a je tedy nulová. Podobně „vyloučíme“ dva koeficienty z neznámých ve všech případech. Například pro $E < V_R$ musí platit $F = 0$, jinak by vlnová funkce v pravé části rostla nade všechny meze. V případě, že $E < V_L$ a zároveň $E > V_R$ řešíme úlohu obdobně, jako nalétávání částice zprava (jinak dostaneme nesmyslnou vlnovou funkci, jelikož by částice nalétávala z nedovolené levé strany). Pokud je $E < V_L$ i $E < V_R$, pak se jedná o vázané stavy a musí platit $B = 0$ a $F = 0$.

Soustava se nám tím zjednoduší na jednoznačně řešitelnou soustavu 4 rovnic o 4 neznámých

$$\begin{aligned} Ae^{\alpha a} + Be^{-\alpha a} &= Ce^{\beta a} + De^{-\beta a} \\ A\alpha e^{\alpha a} - B\alpha e^{-\alpha a} &= C\beta e^{\beta a} - D\beta e^{-\beta a} \\ Ce^{\beta b} + De^{-\beta b} &= Fe^{\gamma b} \\ C\beta e^{\beta b} - D\beta e^{-\beta b} &= F\gamma e^{\gamma b}. \end{aligned}$$

Řešením této soustavy dojdeme z řešení

$$\begin{aligned}
 B &= Ce^{a(\alpha+\beta)} + De^{a(\alpha-\beta)} - Ae^{2\alpha a} \\
 C &= \frac{2\alpha Ae^{a(\alpha-\beta)}(\beta + \gamma)}{(\alpha + \beta)(\beta + \gamma) + (\alpha - \beta)(\beta - \gamma)e^{2\beta(b-a)}} \\
 D &= Ce^{2\beta(\alpha+\beta)} \frac{\beta - \gamma}{\beta + \gamma} \\
 F &= \frac{2C\beta e^{(\alpha+\beta)(\beta-\gamma)}}{\beta + \gamma}.
 \end{aligned}$$

Koeficienty jsou vyjádřeny touto implicitní formou z toho důvodu, že počítač dokáže spočítat jejich hodnotu při menším množství početních operací, než kdyby byly všechny vyjádřeny explicitně pouze na parametru A .

Po dosazení dostaneme vlnové funkce pro každý z intervalů, které na sebe hladce navazují.

2.2.2 Normování

Pro konečné zobrazení vlnové funkce je třeba správně navolit konstantu A , která má roli převrácené hodnoty normovací konstanty. Kvadrát velikosti této konstanty odpovídá kvadrátu velikosti vlnové funkce $|A|^2 = \int_{-\infty}^{\infty} \|\psi(x)\|^2 dx$.

Aby bylo možné použít obecný tvar normovací konstanty pro všechny varianty energií (včetně rozptylových stavů, které nejde normovat od $-\infty$ do ∞ pomocí uvedeného vztahu), je vlnová funkce normována na omezeném intervalu. Interval, na kterém se počítá norma je v programu nastaven na $x_n \in [(a+b)/2 - q, (a+b)/2 + q]$, kde $q=0,8$ nm je pevně nastavená konstanta. Lze si všimnout, že je interval nastaven symetricky podle středu prostřední části ($V(x) = V_M$), což zaručuje vhodnou normu pro různé hodnoty souřadnic a a b .

Výsledná formule pro výpočet normovací konstanty $N \equiv |A|^2$ je

$$N = \int_{\frac{a+b}{2}-q}^a \|\psi_L\|^2 dx + \int_a^b \|\psi_M\|^2 dx + \int_b^{\frac{a+b}{2}+q} \|\psi_R\|^2 dx,$$

kde ψ_L , ψ_M a ψ_R jsou vlnové funkce v intervalech, kde potenciální energie má postupně hodnoty V_L , V_M a V_R .

Po dosazení a vypočtení dostaneme vzorec pro výpočet normy. Výslednou vlnovou funkci poté dělíme odmocninou z tohoto čísla.

2.2.3 Dodatky

- Energetické hladiny pro případ vázaných stavů (tj. pro $E < V_L$ i $E < V_R$) jsou počítány numericky. Každá hladina odpovídá energii, při které je velikost konstanty $|B|$ v lokálním minimu (v blízkosti nuly).

2.3 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

Tato část je speciálním limitním případem konečně hluboké pravoúhlé potenciálové jámy, kdy krajní potenciály V_L a V_R uvažujeme jako nekonečné. Hodnotu potenciální energie na dně jámy volíme nulovou, přičemž jáma o šířce L je v tomto rozložení držena ve středu obrazovky.

2.3.1 Vlnová funkce

Řešením stacionární Schrödingerovy rovnice pro konstantní potenciál dojdeme ke tvaru vlnové funkce

$$\psi(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx},$$

kde $k = \frac{\sqrt{2mE}}{\hbar}$ je konstanta závislá na celkové energii E a hmotnosti částice m .

Jelikož jsou hodnoty potenciální energie v krajních intervalech nekonečně velké, vlnová funkce je v těchto oblastech konstantně nulová. Kvůli tomuto je nutné slevit z požadavků na hladkost v bodech přechodu z krajů do jámy a v těchto bodech vyžadujeme pouze spojitost vlnové funkce.

Po dalším řešení dojdeme ke známému tvaru vlastních vlnových funkcí

$$\psi_n(x) = \begin{cases} \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{pro } n \text{ lichá} \\ \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) & \text{pro } n \text{ sudá,} \end{cases}$$

platícímu pro $x \in (-L/2, L/2)$. V tomto tvaru vlnové funkce je již zahrnuto normování (konstanta $\sqrt{\frac{2}{L}}$).

Energetické hladiny odpovídají energiím $E_n = \frac{n^2\pi^2\hbar^2}{2mL^2}$.

2.4 Kvantový oscilátor

Tento systém má parabolický průběh potenciální energie popsaný funkcí

$$V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2,$$

kde m je hmotnost kmitající částice a ω vlastní frekvence oscilátoru. Tato frekvence slouží jako parametr charakterizující daný oscilátor.

2.4.1 Vlnová funkce

Řešením stacionární Schrödingerovy rovnice pro průběh potenciální energie výše zmíněného tvaru dostaneme vlnovou funkci pro n -tý vlastní stav ve tvaru

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{m\omega}{\pi\hbar}} \frac{1}{\sqrt{2^n n!}} H_n(x) e^{-\frac{m\omega}{2\hbar} x^2},$$

kde $H_n(x)$ je Hermitův polynom n -tého stupně. Vlnová funkce v tomto tvaru je již normovaná.

Vlastní čísla, tedy povolené hodnoty energie, těchto stavů jsou

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \frac{1}{2}\right),$$

což nám dává ekvidistantní energetické spektrum (jednotlivé hladiny jsou od sebe vzdáleny o stejnou hodnotu).

Hermitovy polynomy jsou získávány rekurentním předpisem

$$H_n(x) = \begin{cases} 1 & \text{pro } n = 0 \\ 2x & \text{pro } n = 1 \\ 2xH_{n-1} - 2nH_{n-2} & \text{pro } n > 1, \end{cases}$$

Tato metoda výpočtu H_n je vhodná zejména kvůli snadné naprogramovatelnosti a rychlému výpočtu dostatečně přesných funkčních hodnot počítačem.

2.4.2 Dodatky

- V informační části se též vypisují jednotlivé vlastní energie a jejich pravděpodobnosti ve tvaru $E(n; P)$, kde E je hodnota energie v eV, n je kvantové číslo odpovídající danému vlastnímu stavu a P je pravděpodobnost jeho naměření.

3 Ovládání


Program byl navržen tak, aby se dal co nejpřirozeněji ovládat pomocí klávesnice i myši. Většina funkcí je tedy přístupná jak kliknutím, tak stisknutím příslušné klávesy.

Obrazovka programu je rozdělena do dvou částí. Na horních dvou třetinách se zobrazuje vlnová funkce se svojí osou, zatímco na spodní třetině je rozložení právě studovaného potenciálu (potenciálová lišta). Kraje obrazovky jsou obloženy několika tlačítky, která si v této části představíme.


3.1 Univerzální ovládání

Univerzálním ovládáním jsou myšleny ty funkce, které jsou přístupny pro všechny varianty potenciálu. Jedná se o tyto funkce:


- Přepínání zobrazení rozložení pravděpodobnosti a vlnové funkce

- kliknutím na tlačítko 
- klávesa **ENTER**.


- Zobrazení a skrytí reálné části vlnové funkce

- kliknutím na tlačítko 
- klávesa **R**.

- Zobrazení a skrytí imaginární části vlnové funkce



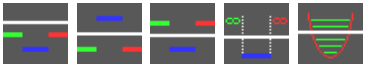
- kliknutím na tlačítko 
- klávesa **I**.

- Zapnutí a vypnutí běhu času

- kliknutím na tlačítko 
- klávesa **SPACE**.


- Zpomalení či zrychlení běhu času

- najetím myši na tlačítko  a točením kolečka myši. Rychlost plynutí času se zobrazuje pod ikonou tlačítka.


- Přibližování a oddalování náhledu
 - najetím myši na tlačítko  a točením kolečka myši
 - klávesami + a -.
- Obnovení náhledu (vrátí oddálení na nejnižší hodnotu)
 - kliknutím na tlačítko  pravým tlačítkem myši.
- Zobrazit/skrýt rozšířené popisky
 - kliknutím do oblasti těsně kolem popisku ukazujícího uběhnutý čas.
- Přepnutí rozložení potenciálů na přednastavené hodnoty
 - kliknutím na tlačítko .

3.2 Ovládání menu pro volbu superpozice stavů

Některá rozložení mají možnost volby superpozice stavů. Pokud je tato možnost k dispozici, zobrazí se v levém horním rohu tlačítko s ikonou pře-

krývajících se vlnových funkcí .

Po kliknutí na toto tlačítko se zobrazí nabídka, kde lze zadávat velikosti koeficientů až pro 10 různých vlnových funkcí. Je možné též přepnout na zobrazení a volbu koeficientů v Gaussově rovině.

- Volba koeficientů jejich velikostí (výchozí možnost)
 - kliknutím na odpovídající políčko se označí pro vstup z klávesnice. Ukončení vstupu stisknutím klávesy **ENTER**.
- Přepnutí na zobrazení koeficientů pomocí Gaussovy roviny.
 - tlačítkem  v pravém spodním rohu nabídky.
- Volba koeficientů v Gaussově rovině
 - kliknutím na žádanou polohu koeficientu v odpovídajícím políčku.
- Otočení koeficientů kolem počátku
 - najetím na políčko daného koeficientu a točením kolečka myši.
- Vynulování koeficientu
 - pravým kliknutím na políčko daného koeficientu.

- Normalizování koeficientů po jejich volbě
- kliknutím na tlačítko superpozice (to, které vyvolává menu).
- Zapnutí/vypnutí náhodné volby koeficientů
- pravým kliknutím na tlačítko superpozice.
- stisknutím klávesy **M**.

3.3 Ovládání jednotlivých rozložení

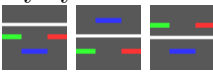
Po startu programu se zobrazí výchozí rozložení. K zobrazení dalších rozložení slouží tlačítka v levé dolní části obrazovky (viz univerzální ovládání).

První tři tlačítka jsou pro po částech konstantní potenciál, přičemž pod každým se skrývá jedno z význačných rozložení. Zbývá dvě tlačítka slouží k přechodu k systémům nekonečné potenciálové jámy a kvantového oscilátoru.

Zobrazená rozložení jsou k tlačítkům přiřazena napevno, po použití lze však parametry systému libovolně měnit. Možnosti změny jednotlivých systémů jsou popsány dále.

3.3.1 Po částech konstantní potenciál

Po stisknutí jednoho z tlačítek pro nastavení po částech konstantního potenciálu se zobrazí zvolený systém.

Ikony těchto tlačítek jsou 

V tomto rozložení lze nezávisle na sobě nastavovat hodnotu jednotlivých energií (E , V_L , V_M , V_R), polohu střední části a její šířku. Všechny změny konané pomocí klávesnice či kolečka myši lze urychlit držením klávesy **SHIFT** či pravého tlačítka myši.

- Změna potenciálních energií V_L , V_M a V_R
- najetím myši na odpovídající část potenciálového lišty a točením kolečka myši.
- najetím myši na odpovídající část potenciálového lišty a klávesami **nahoru** a **dolů**.
- Změna celkové energie E
- najetím myši kamkoli mimo potenciálovou lištu a točením kolečka myši.
- najetím myši kamkoli mimo potenciálovou lištu a klávesami **nahoru** a **dolů**.


- Změna polohy střední části potenciálového průběhu
- najetím myši na střední část potenciálové lišty a potáhnutím příslušným směrem
- najetím myši na střední část potenciálové lišty a držením klávesové zkratky **SHIFT+ doleva/doprava**
- Změna šířky střední části potenciálového průběhu
- potáhnutím příslušným směrem pravou, resp. levou, část potenciálové lišty je možné měnit vždy polohu konce, resp. začátku, střední části.
- držením klávesy **doleva**, resp. **doprava**, lze posouvat konec střední části.
- Zobrazení tečné šipky v bodech napojování vlnové funkce
- stisknutím klávesy **S**.

3.3.2 Nekonečná pravoúhlá potenciálová jáma

Pro přechod do tohoto rozložení slouží čtvrté tlačítko v levé dolní části


s ikonou .

V tomto rozložení lze měnit šířku jámy a celkovou energii po kvantovaných stavech. Též je možné navolit superpozici energetických stavů.

- Změna celkové energie E
- šipkami **nahoru** a **dolů**.
- Změna šířky jámy
- šipkami **doleva** a **doprava**.
- Volba koeficientů pro superpozici energetických stavů
- kliknutím na tlačítko  v levém horním rohu.


3.3.3 Kvantový oscilátor

K tomuto rozložení lze přejít pomocí posledního tlačítka pro volbu roz-

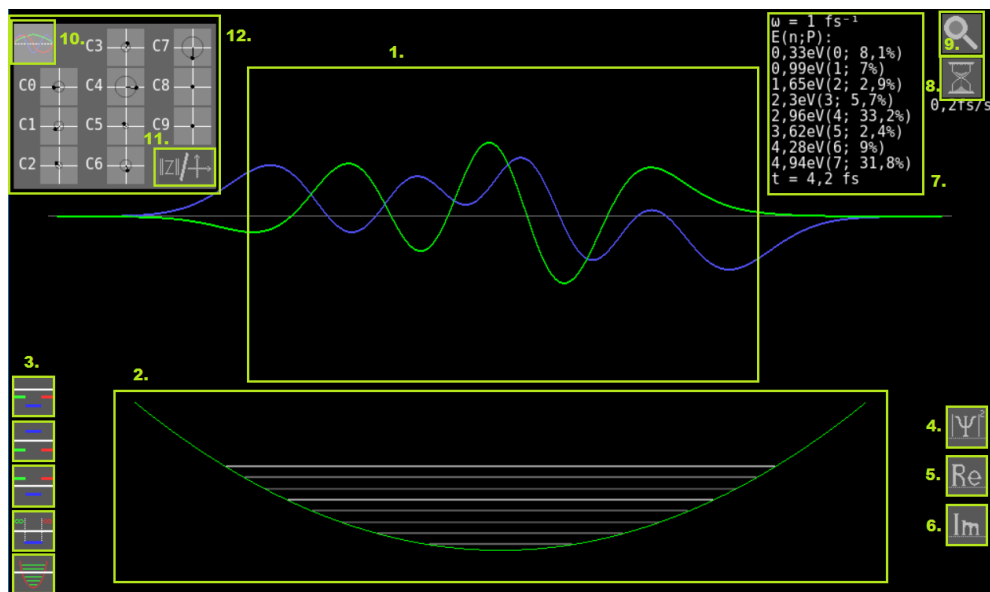
ložení (ikona .

V oscilátoru lze měnit úhlovou frekvenci ω , celkovou energii E a lze použít menu pro superpozici stavů.

- Změna celkové energie E
- šipkami **nahoru** a **dolů**.

- Změna úhlové frekvence ω
- klávesami **doleva** a **doprava**
- Volba koeficientů pro superpozici energetických stavů
- kliknutím na tlačítko  v levém horním rohu.

3.4 Náhled rozvržení



1. Náhled vlnové funkce.
2. Potenciálový panel, náhled rozložení potenciálu a energetických hladin.
3. Tlačítka na volbu rozložení potenciálu.
4. Přepínání rozložení pravděpodobnosti a vlnové funkce.
5. Zobrazení/skrytí reálné části vlnové funkce.
6. Zobrazení/skrytí imaginární části vlnové funkce.
7. Rozšířené informace. Mění se v závislosti na zvoleném rozložení.
8. Tlačítko času. Kliknutím se vypíná a zapíná běh, točením kolečka se mění rychlost běhu času (zobrazeno pod tlačítkem).
9. Tlačítko lupy. Točením kolečka na tomto tlačítku se pohled oddaluje a přibližuje. Pravým kliknutím se pohled obnoví.
10. Tlačítko pro menu superpozice. Kolem lze vidět samotné menu s volbou koeficientů pomocí Gaussovy roviny.

11. Přepínání mezi volbou koeficientů pomocí velikosti a pomocí Gaussovy roviny.
12. Menu superpozice. Zobrazuje a skrývá se tlačítkem pro menu superpozice (11).