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

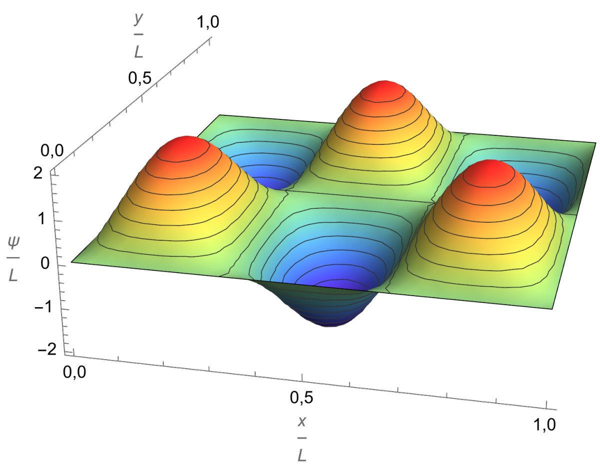
http://fyzweb.cz/materialy/kvantovka/Infwell2d/infwell2d.html

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 1 jste již možná viděli, pokud jste řešili úlohy v pracovním listu zaměřeném na nekonečnou dvoudimenzionální potenciálovou jámu.



Obrázek 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 $t = 0\,\mathrm{s}$ 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 1). Nejprve je potřeba si na papíře vymezit 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 3 je mnou nakreslený graf vlnové funkce, nákres je rozdělen do čtyř kroků.

Na obrázku 4 je přesný graf vytvořený v programu Wolfram Mathematica, pro přehlednost uvádím i legendu. Jak je vidět na obrázku 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 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 rozdělte 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.

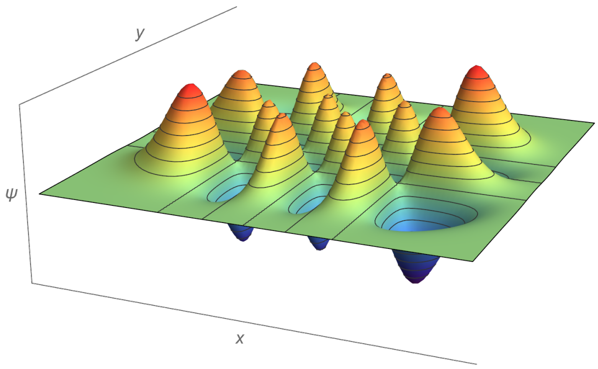
Já jsem využil barvy duhy jako předtím. Použil jsem všechny barvy, fialovou barvou jsem znázornil hodnoty funkce blízké nule. Další možností by poté bylo například použít pro hodnoty blízké nule zelenou barvu, jak tomu bylo v předchozím příkladu. Na obrázku 5 je můj nákres grafu opět rozfázovaný do čtyř kroků.

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

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



Obrázek 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 2 je uveden na obrázku 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. Pusťte 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 8 je můj nákres 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 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 nákres.

Podívejte se na obrázek 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.

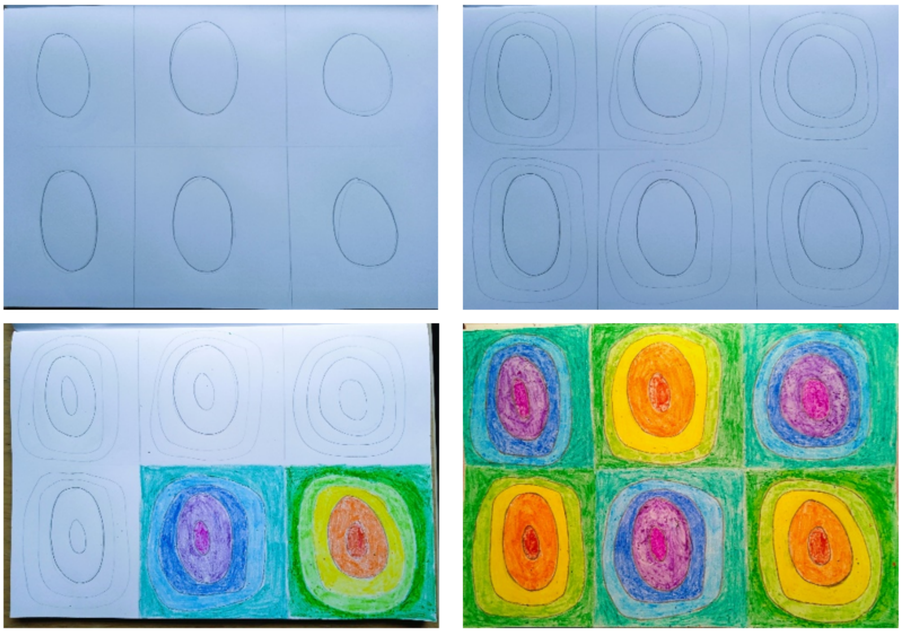
Vybírejte z této nabídky:

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, $n_x = 2$, $n_y = 2$.

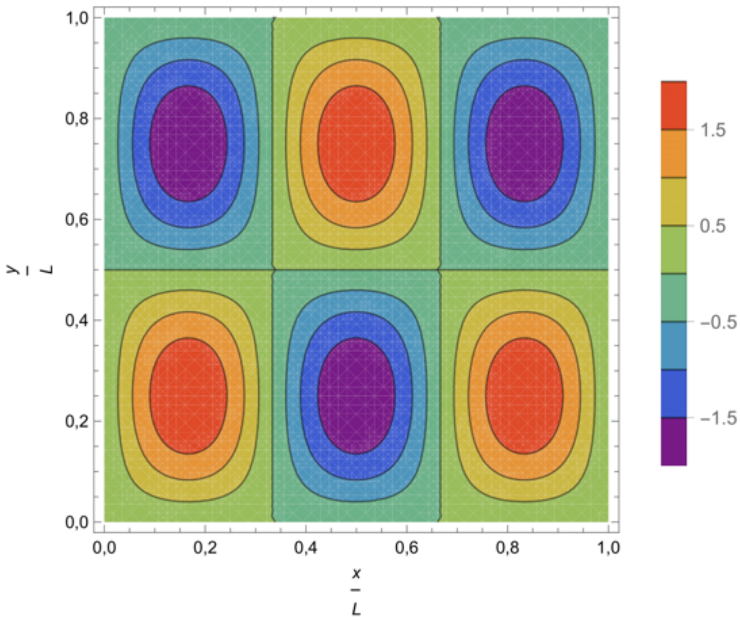
Na obrázku 10 jsou grafy, ke kterým přiřazujte z předchozí nabídky.

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

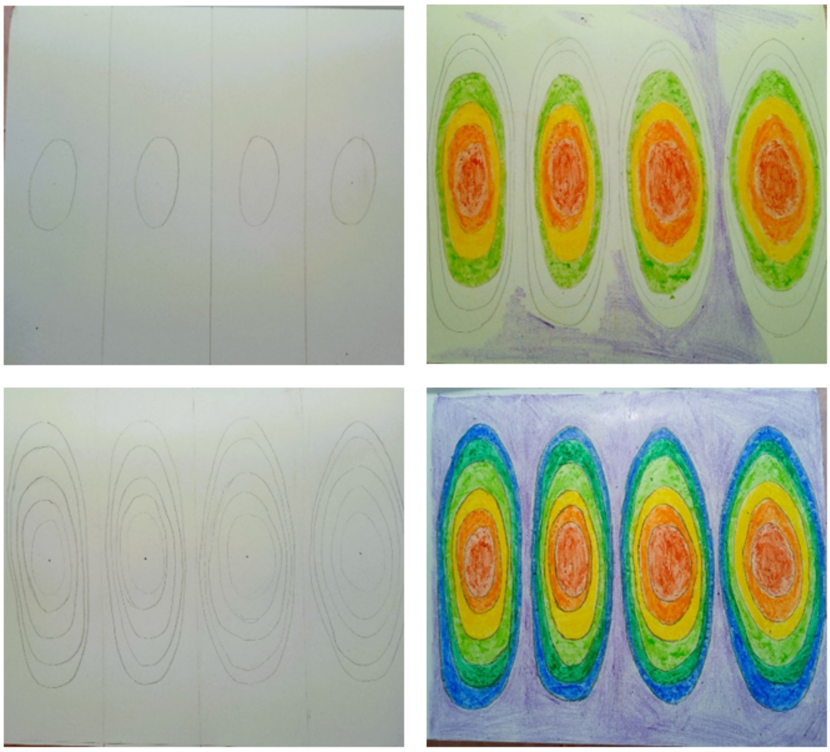
Řešení tohoto cvičení zde neuvádím.



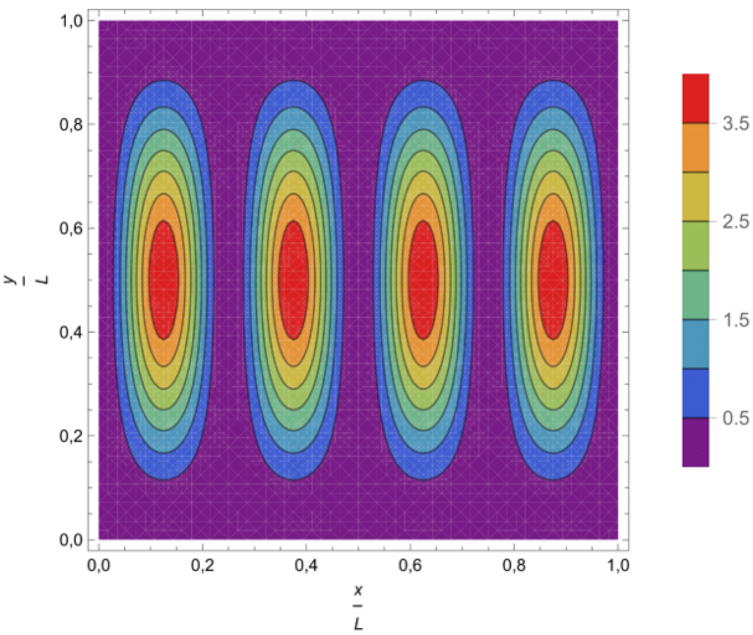
Obrázek 3: Vrstevnicový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$, ruční náčrtek.



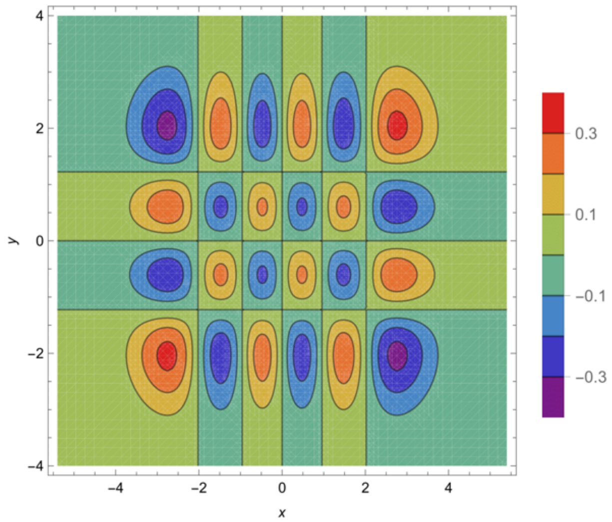
Obrázek 4: Vrstevnicový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 3$, $n_y = 2$ vytvořený ve Wolfram Mathematice.



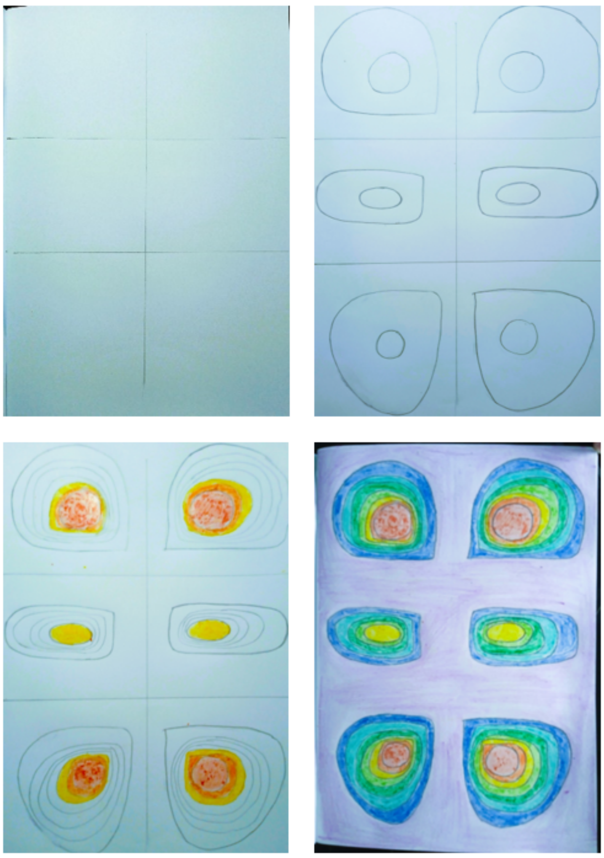
Obrázek 5: Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 4$, $n_y = 1$, ruční náčrtek.



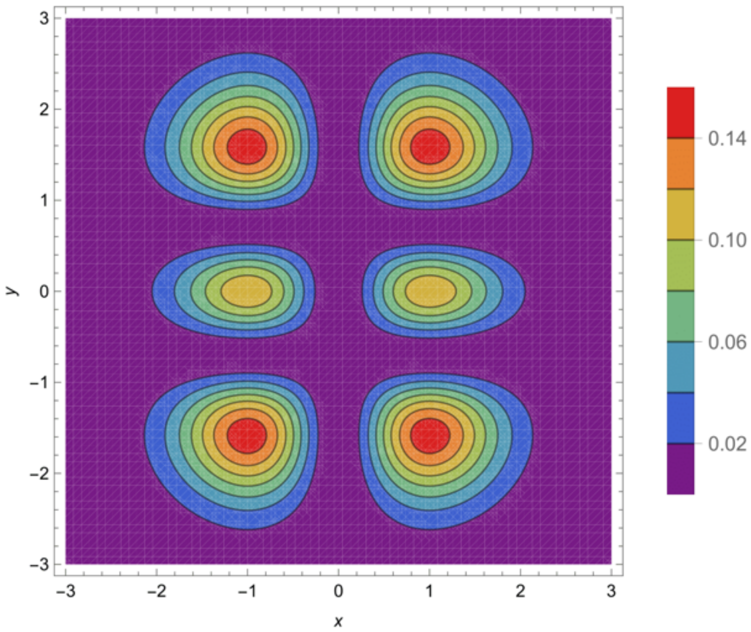
Obrázek 6: Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 4$, $n_y = 1$.



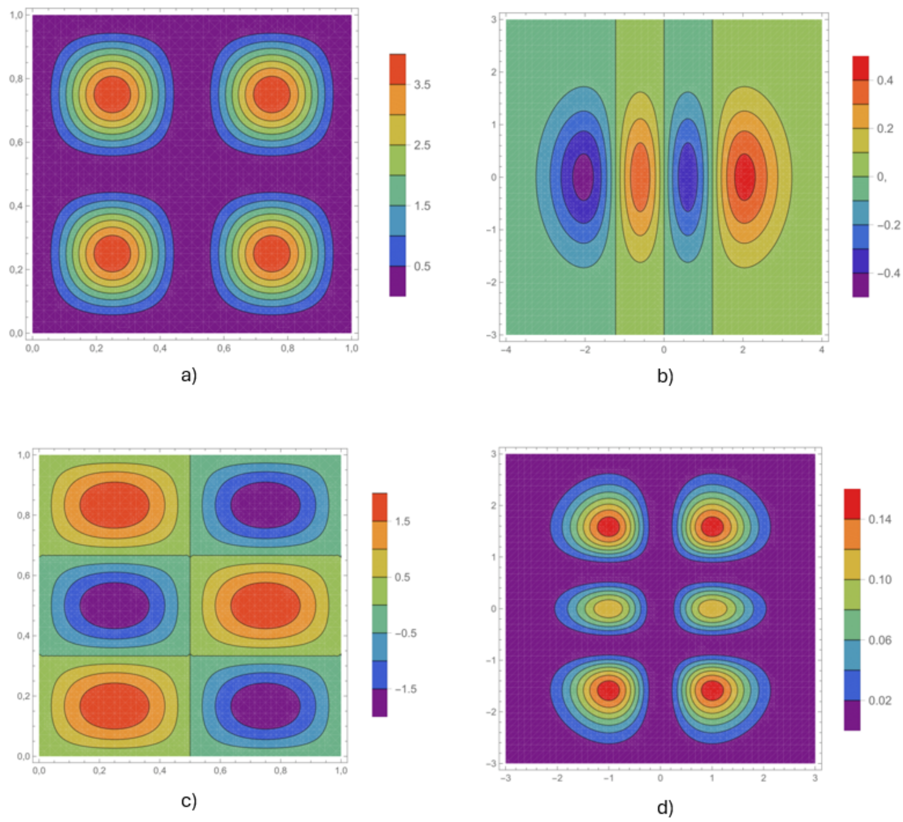
Obrázek 7: Vrstevnicový graf vlnové funkce odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 5$, $n_y = 3$.



Obrázek 8: Graf hustoty pravděpodobnosti odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1$, $n_y = 2$, ruční náčrtek.



Obrázek 9: Vrstevnicový graf ρ odpovídající stavu s kvantovými čísly $n_x = 1, n_y = 2$.



Obrázek 10: Zadání úlohy na přiřazování grafů ke kvantovým číslům.