

# Pokroky matematiky, fyziky a astronomie

---

Miroslava Trchová; Lucie Jirůtková  
Kvantová mechanika netradičně

*Pokroky matematiky, fyziky a astronomie*, Vol. 40 (1995), No. 1, 18–35

Persistent URL: <http://dml.cz/dmlcz/138596>

## Terms of use:

© Jednota českých matematiků a fyziků, 1995

Institute of Mathematics of the Czech Academy of Sciences provides access to digitized documents strictly for personal use. Each copy of any part of this document must contain these *Terms of use*.



This document has been digitized, optimized for electronic delivery and stamped with digital signature within the project *DML-CZ: The Czech Digital Mathematics Library* <http://dml.cz>

# Kvantová mechanika netradičně

## Grafické znázornění

### kvantově-mechanických stacionárních stavů s použitím modelovacího systému FAMULUS

*Miroslava Trchová, Lucie Jirůtková*

#### 1. Úvod

Pro popis přírody v atomárním nebo subatomárním měřítku, to znamená pro popis jevů atomové, jaderné nebo částicové fyziky, je nutné použít speciální aparát kvantové mechaniky. Existuje celá řada velmi důležitých jevů, které lze plně vysvětlit pouze pomocí kvantové mechaniky, například podstata chemické vazby nebo činnost polovodičových obvodů v počítačích. Je proto velmi důležité, aby studenti fyziky, chemie nebo elektroinženýrství byli dostatečně obeznámeni se základy a metodami kvantové mechaniky.

Pro většinu studentů je však kvantová mechanika velice náročná a abstraktní, především ve srovnání s mechanikou hmotných bodů. V klasické mechanice se mohou při studiu vedle přednášek opírat o vlastní zkušenosti, které si ještě utvrzují v laboratoři nebo řešením problémů ve cvičeních. Existuje zde velké množství přímých a jednoduchých experimentů, z nichž většina je i snadno proveditelná.

To vše je zcela odlišné v případě kvantové mechaniky. Ačkoli jsou elementární částice zdánlivě podobné hmotným bodům, je pro ně zcela neudržitelný pojem trajektorie, a to v důsledku relací neurčitosti. K popisu jejich stavu je nutné použít vlnovou funkci. Tuto funkci nelze přímo měřit, její vlastnosti lze zjišťovat nepřímo například z experimentů zahrnujících měření optických spekter nebo rychlostních konstant [1]. Navíc většina netriviálních úloh naráží na výpočetní problémy a vyžaduje aproximativní nebo numerické metody. Sami studenti mohou vyřešit jen velmi málo problémů.

Většinu kvantově mechanických problémů lze rychle řešit numericky na počítači. Výsledky můžeme přitom často snadno analyzovat v grafické podobě. Ve světě tak vzniklo mnoho interaktivních programů [2, 3], umožňujících zadat kvantově mechanický problém, jejichž výstupem je množství grafických ilustrací k základům kvantové mechaniky.

---

RNDr. MIROSLAVA TRCHOVÁ, CSc. (nar. 1950), odborná asistentka na katedře fyziky polymerů MFF UK, V Holešovičkách 2, Praha 8.

LUCIE JIRŮTKOVÁ (nar. 1969), studentka MFF UK v letech 1988–1993.

Vznikla tak i zde myšlenka využít modelovacího systému FAMULUS k vytvoření série modelů, ilustrujících základní úlohy kvantové mechaniky, vhodných pro přípravu budoucích učitelů fyziky, studentů nižších ročníků odborné fyziky a případně i nadaných středoškoláků. Jde především o zobrazení stacionárních stavů volné částice, částice v poli jednorozměrné potenciálové stěny a potenciálové bariéry, v jednorozměrné potenciálové krabici, lineárního harmonického oscilátoru a atomu vodíku.

Cílem předkládaných modelů bylo:

1. Zobrazit stacionární stavy základních kvantově-mechanických úloh, řešených analyticky v přednáškách. Na rozdíl od numerického řešení je zobrazení hotových řešení relativně rychlé i na menších počítačích a studenti se mohou přesvědčit z analytických výrazů, obsažených v knihovně systému FAMULUS, že zobrazují skutečně to, co spočítali.

2. Prezentovat řešení v reálných jednotkách a pro reálné rozměry objektů, na rozdíl od bezrozměrných veličin, užívaných často v teoretické fyzice. Studenti tak lépe získají cit pro jevy mikrosvěta.

3. Zobrazit i některé závislosti, nevyskytující se v dostupné literatuře. Kromě reálné a imaginární složky vlnových funkcí byly zobrazeny též dopadající a odražená vlna u potenciálové stěny, průběhy koeficientu odrazu a průchodu u bariéry, kulové funkce atomu vodíku a pod.

## 2. Stacionární stavy

Stav atomárních objektů v kvantové mechanice popisuje vlnová funkce. Pro jednu částici jde obecně o komplexní, jednoznačnou, konečnou a spojitou funkci polohového vektoru  $\mathbf{r}(x, y, z)$  a času  $t$ , se spojitými prvními derivacemi podle těchto proměnných. Získáme ji řešením časové Schrödingerovy rovnice, která má pro jednu částici s jedním stupněm volnosti tvar

$$(1) \quad i\hbar \frac{\partial \varphi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = \hat{H} \varphi(\mathbf{x}, t),$$

kde

$$(2) \quad \hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \hat{U}(x)$$

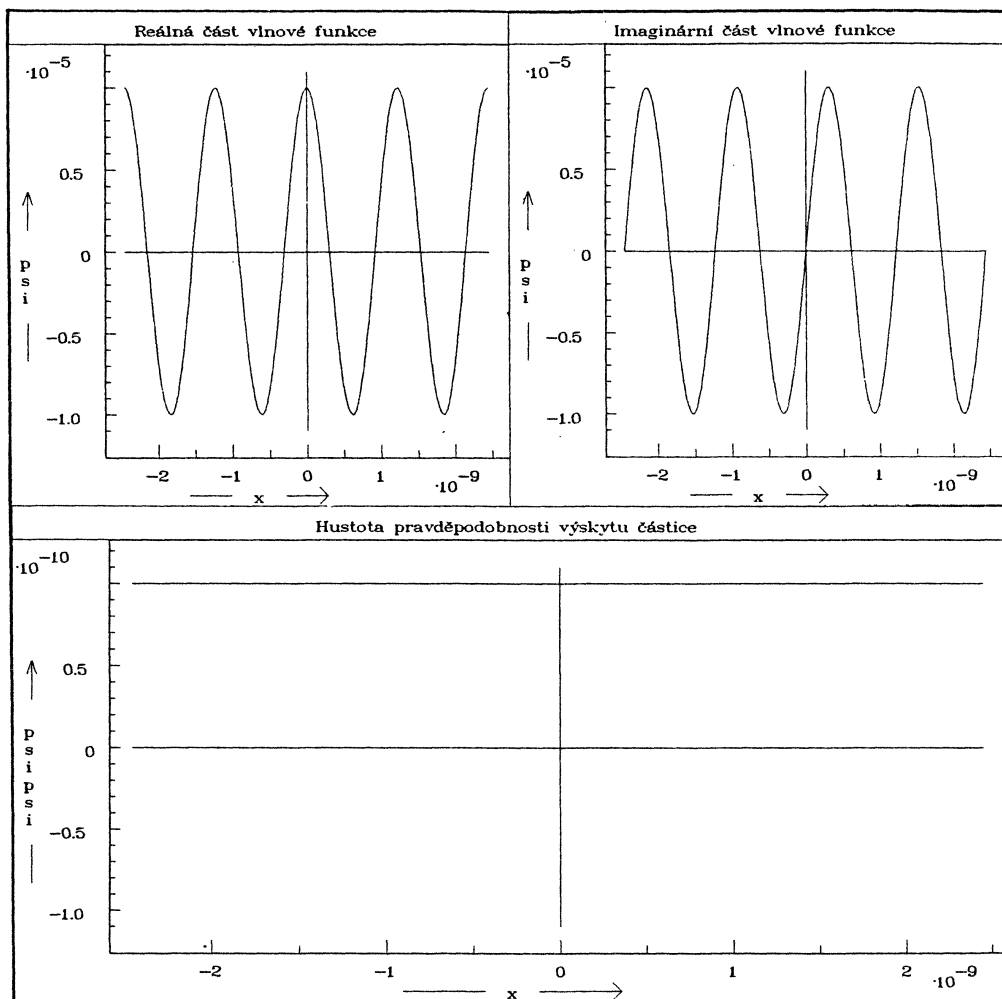
je Hamiltonův operátor, daný součtem operátoru kinetické a potenciální energie,  $\hbar$  je Planckova konstanta dělená  $2\pi$ .

V případě, že Hamiltonův operátor nezávisí na čase, existují specifická řešení rovnice (1) ve tvaru

$$(3) \quad \varphi(\mathbf{x}, t) = \psi(\mathbf{x}) e^{-iEt/\hbar},$$

kde  $E$  je energie částice a funkce  $\psi(\mathbf{x})$  je řešením bezčasové Schrödingerovy rovnice

$$(4) \quad \hat{H} \psi(\mathbf{x}) = E \psi(\mathbf{x}).$$

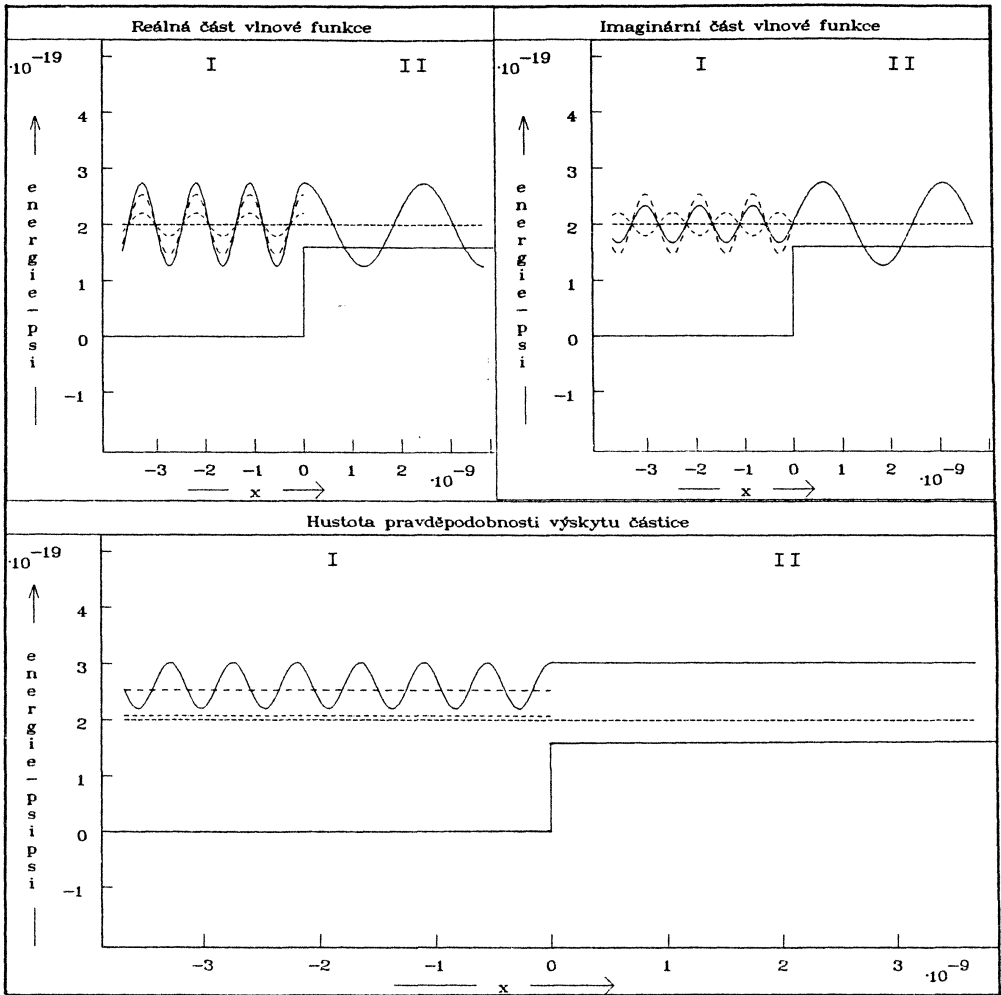


Obr. 1. Zobrazení stacionárního stavu volné částice o hmotnosti  $9,11 \times 10^{-31}$  kg a energii  $1,602 \times 10^{-19}$  J. Na ose  $x$  je vzdálenost v metrech.

Poznámka: Amplituda vlnové funkce postupující v kladném směru osy  $x$  (koeficient  $A_1$ ) je zvolena  $10^{-5}$ . V okně 3 jde o relativní hustotu pravděpodobnosti výskytu (nebo intenzitu toku částic).

Základní vlastnosti stacionárních stavů jsou [1]:

- Časová závislost vlnových funkcí je jednoznačně určena hodnotou energie.
- Střední hodnota libovolné fyzikální veličiny, jejíž operátor nezávisí explicitně na čase, je konstantní.
- Pravděpodobnost naměření určité hodnoty libovolné fyzikální veličiny nezávisí na čase.



Obr. 2. Zobrazení stacionárního stavu elektronu s energií  $2 \times 10^{-19}$  J dopadajícího zleva na jednorozměrnou potenciálovou stěnu výšky  $1,602 \times 10^{-19}$  J.

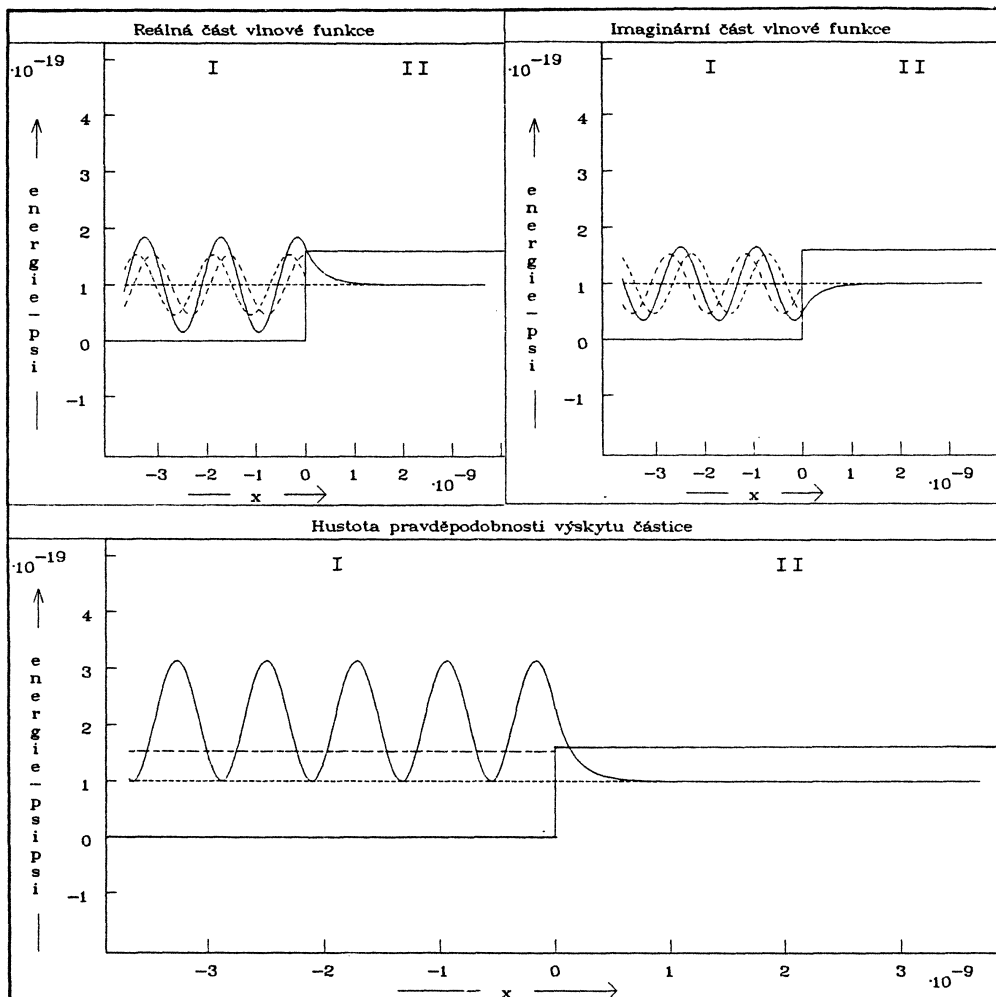
Označení: Osa  $x$  — vzdálenost v metrech, osa  $y$  — hodnota potenciální energie v joulech

- Legenda:   
 ----- část vlnové funkce, odpovídající toku dopadajících částic   
 ..... část vlnové funkce, odpovídající toku odražených částic   
 ————— celková vlnová funkce (v oblasti II odpovídá toku procházejících částic)

Poznámka: Amplituda dopadající vlny je volena libovolně, ostatní amplitudy vyplývají ze spojitosti vlnové funkce a její první derivace v bodě  $x = 0$ .

Normovaná vlnová funkce vyhovuje vztahu (pro jeden stupeň volnosti)

$$(5) \quad \int_{-\infty}^{+\infty} \psi^* \psi dx = 1.$$



Obr. 3. Zobrazení stacionárního stavu elektronu s energií  $1 \times 10^{-19}$  J dopadajícího zleva na jednorozměrnou potenciálovou stěnu výšky  $1,602 \times 10^{-19}$  J. Označení stejné jako v obr. 2.

Reálná funkce  $\varrho = \psi^* \cdot \psi$  je rovna hustotě pravděpodobnosti výskytu částice v daném místě prostoru. Někdy je  $\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi|^2 dx = \infty$ , v takovém případě se vlnová funkce nedá normovat pomocí podmínky (5) a  $\varrho = |\psi(x)|^2$  pak není hustota pravděpodobnosti. Avšak i v těchto případech poměr hodnot pro různá  $x$  určuje relativní pravděpodobnost naměření příslušných hodnot souřadnice.

Následující modely umožňují interaktivním způsobem zobrazit vlnové funkce a příslušné hustoty pravděpodobnosti výskytu pro nejjednodušší typy jednorozměrných potenciálů  $U(x)$ , které se řeší na učitelském studiu fyziky. Všechny modely využívají hotová analytická řešení, odvozená v přednáškách z kvantové mechaniky pro učitelské studium. Tato řešení jsou přehledně soustředěna do speciální knihovny, která je po

načtení do editoru přístupná uživateli. Studenti si tak mohou ověřit, že zobrazované průběhy odpovídají tomu, co bylo odvozeno na přednášce nebo ve cvičení.

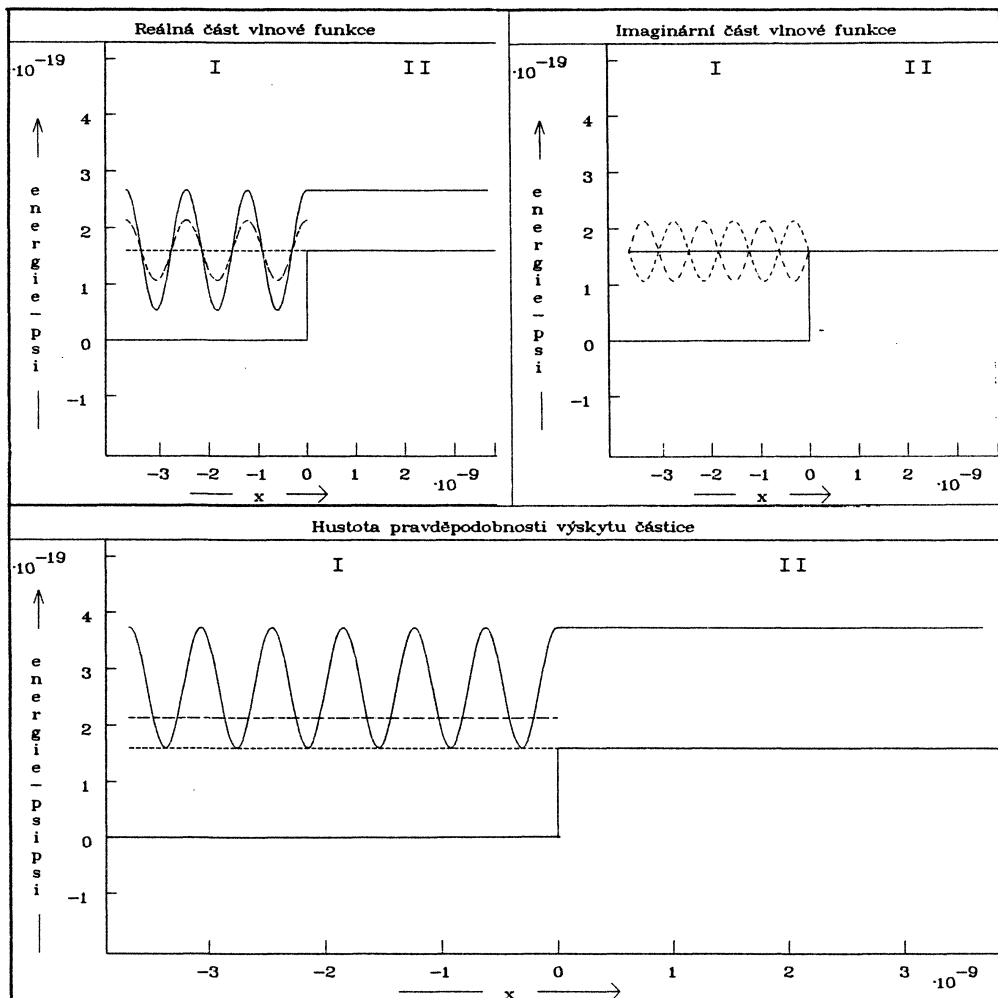
V modelech FAMULA jsme využívali možností barevného zobrazení. Pro reprodukci obrázků bylo nutné nahradit barvy různými typy čar a doplnit je příslušnou legendou, což částečně snižuje didaktickou i estetickou hodnotu modelů ve srovnání s jejich interaktivní demonstrací na počítači.

### 3. Modely, umožňující grafické znázornění kvantově-mechanických stacionárních stavů s použitím modelovacího systému Famulus 3.5.

Program se skládá ze série šesti modelů, prezentujících analytická řešení základních úloh kvantové mechaniky a jedné knihovny, do které byly soustředěny potřebné normované vlnové funkce. Pokusíme se ilustrovat na vybraných obrázcích, vytvořených našimi modely, jak lze s jejich pomocí studovat řadu zajímavých zákonitostí v chování atomárních objektů a formulovat otázky pro problémové vyučování základů kvantové mechaniky.

#### Model volné částice

V tomto modelu je zobrazeno řešení pro nejjednodušší tvar bezčasové Schrödingery rovnic (4) pro  $U = 0$ . Obecně jde o superpozici dvou postupných rovinných vln šířících se v navzájem opačných směrech. Model umožňuje nastavit hmotnost  $m$  částice v kilogramech a její energii  $E$  v joulech. Model má pouze dva vstupní reálné parametry  $A_1$  a  $A_2$ , které určují amplitudu vlny ve směru zleva doprava, resp. zprava doleva. Stavů jedné částice s ostrou hodnotou impulsu odpovídá jeden nenulový parametr (jedna rovinná vlna). Výsledky se zobrazují do tří grafů (obr. 1): v grafu č. 1 je zobrazena reálná část vlnové funkce, v grafu č. 2 imaginární část vlnové funkce a v grafu č. 3 funkce  $\rho = \psi^* \cdot \psi$  (místo názvu hustota pravděpodobnosti výskytu částice by bylo lepší mluvit o intenzitě toku částic, neboť v tomto případě nelze vlnovou funkci normovat podle podmínky (5) a můžeme srovnávat pouze relativní pravděpodobnosti výskytu částice). Tento model pomáhá studentům vytvořit si základní představu o nejjednodušší vlnové funkci kvantové mechaniky, která se později používá v různých kombinacích v dalších řešeních Schrödingery rovnic. Je nutné v této fázi studentům zdůraznit, že rovinná vlna obsahuje i časovou složku podle vztahu (3). Stacionární stav volné částice je též výchozím bodem pro tvorbu vlnového klubka. Zobrazení v reálných jednotkách na ose  $x$  (metry) a volba různých hodnot energie a hmotnosti částice pomáhá představit o hodnotách vlnové délky různých reálných hmotných objektů. Model byl zařazen z důvodů, že pojem rovinné vlny má zásadní význam v celé fyzice a činí problémy i ve vyšších ročnících studia učitelství.

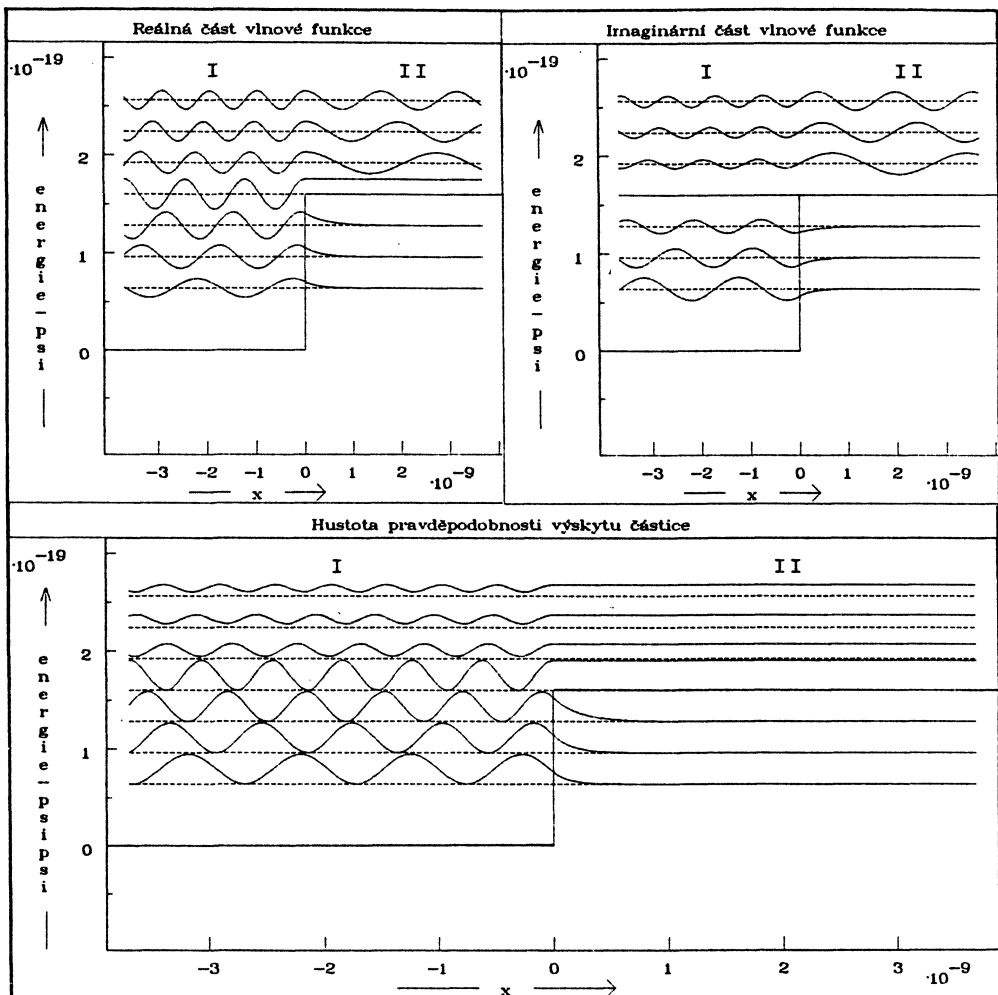


Obr. 4. Zobrazení stacionárního stavu elektronu s energií  $1,602 \times 10^{-19}$  J dopadajícího zleva na jednorozměrnou potenciálovou stěnu výšky  $1,602 \times 10^{-19}$  J. Označení stejné jako v obr. 2.

### Model jednorozměrné potenciálové stěny

Na obrázku 2 je znázorněn stacionární stav elektronu s energií  $2 \times 10^{-19}$  J dopadajícího zleva na jednorozměrnou potenciálovou stěnu výšky  $1,602 \times 10^{-19}$  J, vytvořený daným modelem. V každém okénku je zobrazen průběh potenciálu pravoúhlé stěny, na ose  $x$  je vynesena vzdálenost v m a na ose  $y$  energie v J. Do téhož grafu je v prvním okně zobrazena reálná část vlnové funkce, ve druhém imaginární část vlnové funkce a v dolním okně je zobrazen průběh funkce  $\rho = \psi^* \cdot \psi$ , která je úměrná intenzitě toku dopadajících částic. Hodnota energie elektronu je znázorněna vodorovnou úsečkou, která zároveň slouží za osu  $x$  pro graf vlnové funkce (v daném případě je energie elektronu větší, než je výška potenciálové stěny).

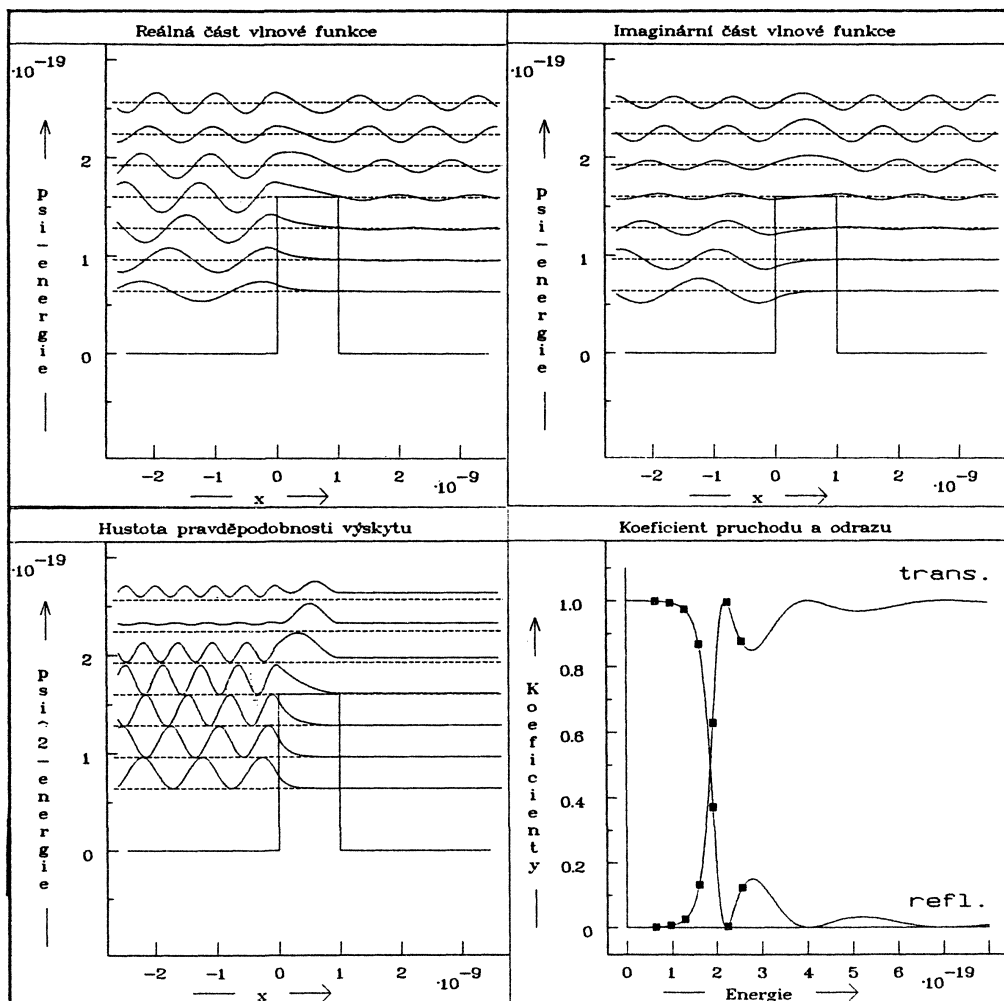




Obr. 5. Zobrazení několika stacionárních stavů elektronu dopadajícího zleva na jednorozměrnou potenciálovou stěnu výšky  $U_0 = 1,602 \times 10^{-19}$  J pro různé hodnoty jeho energie ( $1,6U_0$ ,  $1,4U_0$ ,  $1,2U_0$ ,  $U_0$ ,  $0,8U_0$ ,  $0,6U_0$ ,  $0,4U_0$ ).

Na rozdíl od většiny učebnic jsme v obrázku vynesli zvlášť funkce, odpovídající dopadajícím, odraženým a procházejícím částicím (k nimž lze dospět odvozením výrazu pro vektor hustoty toku pravděpodobnosti výskytu elektronu). V modelu jsou tyto funkce nakresleny různými barvami. Celková vlnová funkce je určena jejich součtem.

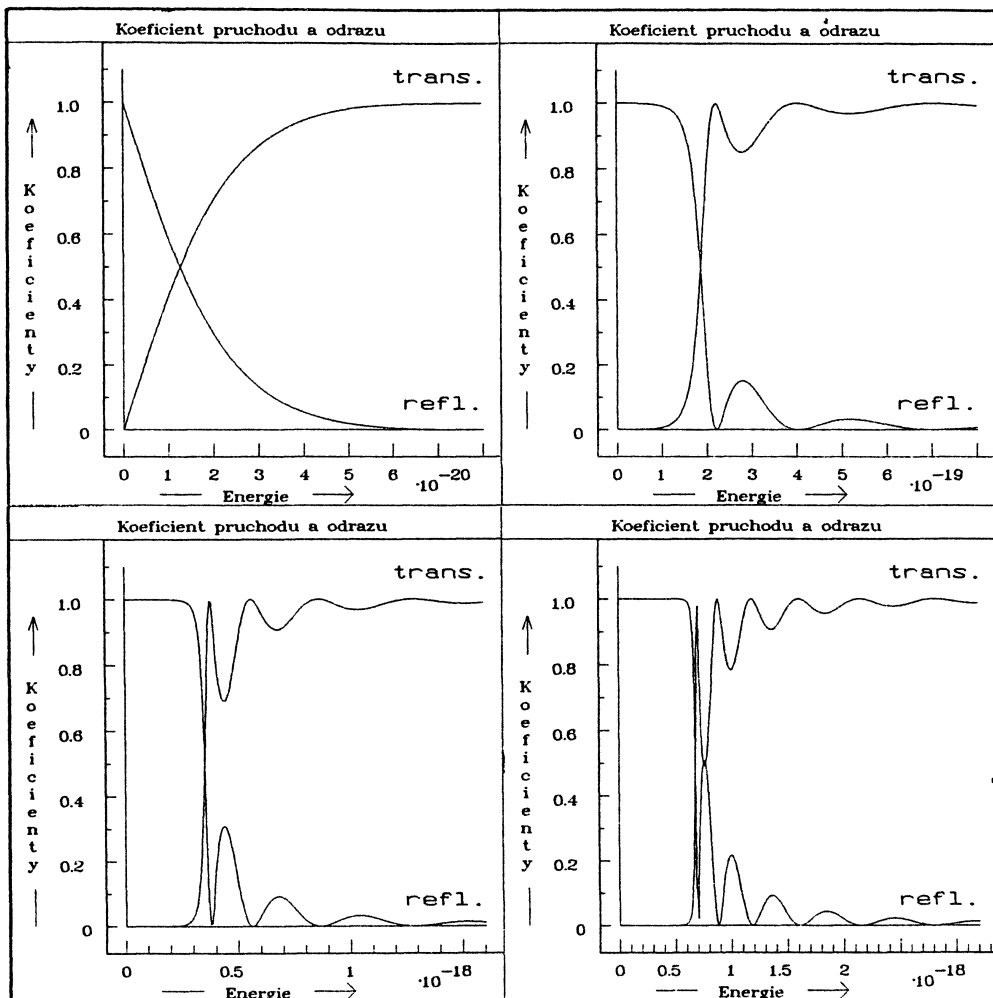
Na obrázku 3 je zobrazeno chování elektronu v poli jednorozměrné potenciálové stěny s energií menší, než je výška stěny, a na obrázku 4 je energie elektronu rovná výšce potenciálové stěny. Na obrázku 5 je znázorněno několik stacionárních stavů elektronu dopadajícího na jednorozměrnou potenciálovou stěnu pro různé hodnoty energie elektronu.



Obr. 6. Zobrazení několika stacionárních stavů elektronu dopadajícího na jednorozměrnou potenciálovou bariéru výšky  $1,602 \times 10^{-19}$  J a šířky  $10^{-9}$  m pro různé hodnoty jeho energie (stejně jako v obr. 5). V okně 4 je zobrazen průběh koeficientu odrazu a koeficientu průchodu v závislosti na energii elektronu.

Model dovoluje interaktivně měnit hmotnost a energii dopadajících částic a výšku stěny. Umožňuje tak studovat zákonitosti chování elementárních částic v poli jednorozměrné potenciálové stěny a formulovat otázky pro problémové vyučování bez uvedení analytického řešení Schrödingerovy rovnice.

Z rozboru modelu pro volnou částici studenti snadno přijmou tvar reálné a imaginární části vlnové funkce v oblasti I. Lze s nimi diskutovat průběhy vln pro dopadající a odraženou částici (jejich amplitudy i fázi). Harmonický průběh intenzity vlnové funkce v oblasti I v grafu č. 4 odpovídá superpozici dopadající a odražené



Obr. 7. Závislost koeficientu odrazu a průchodu na energii dopadajícího elektronu pro různé výšky bariéry  $U_0$ :

Okno 1 —  $U_0 = 1,602 \times 10^{-20}$  J,

Okno 2 —  $U_0 = 1,602 \times 10^{-19}$  J,

Okno 3 —  $U_0 = 3,204 \times 10^{-19}$  J,

Okno 4 —  $U_0 = 6,408 \times 10^{-19}$  J.

Šířka bariéry je  $10^{-9}$  m.

vlny a vzniku stojatého vlnění, a to i v případě, kdy energie částice je větší, než je výška stěny. V oblasti II se šíří již jen procházející postupná vlna, což odpovídá konstantní intenzitě jako v případě volné částice. Názorně lze demonstrovat průnik částice do stěny v případě, kdy její energie je nižší než je výška stěny (vlnová funkce je v oblasti II reálnou klesající exponenciální funkcí). Nejvíce diskusí však vyvolává případ, kdy energie částice je rovna výšce stěny. Dopadající a odražená vlna mají stejnou amplitudu (v obrázku 4 se překrývají), v oblasti II je nenulová pouze reálná

část vlnové funkce, která je konstantní (nejde o postupnou vlnu, což je v souladu s tím, že tok vektoru hustoty pravděpodobnosti výskytu je nulový jako v oblasti I).

Model umožňuje formulovat velké množství problémů, které pro nedostatek místa nemůžeme uvádět. Z přehledu na obrázku 5 lze názorně studovat změnu vlnové délky a amplitudy v závislosti na energii dopadající částice. Lze rovněž sledovat chování částic různých hmotností a energií dopadajících na různě vysoké stěny a rozvíjet tak kvantově-mechanické myšlení studentů.

### Model jednorozměrné potenciálové bariéry

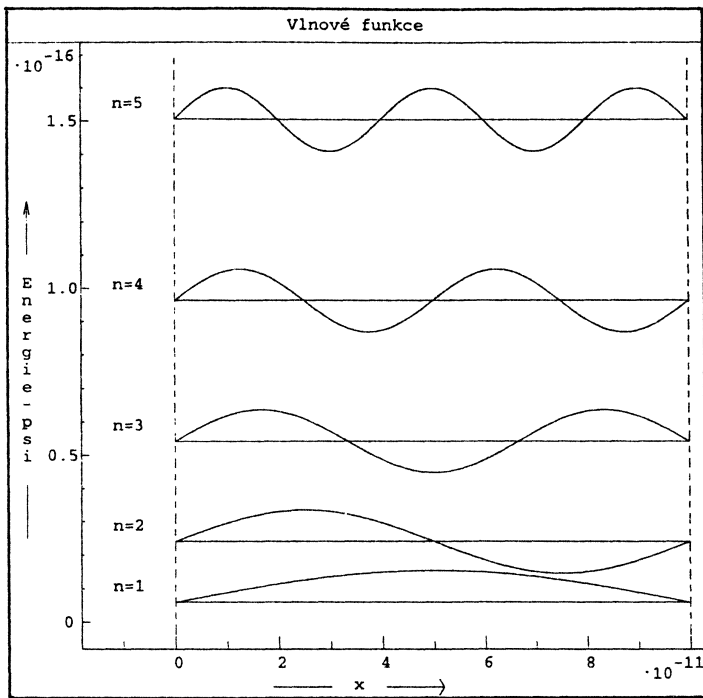
Na obrázku 6 je znázorněno několik stacionárních stavů elektronu dopadajícího na potenciálovou bariéru výšky  $1,602 \times 10^{-19}$  J pro různé hodnoty energie elektronu, vytvořených daným modelem. Ve čtvrtém okně je zobrazen průběh koeficientu průchodu a odrazu elektronu v závislosti na jeho energii. Model opět umožňuje zadávat hmotnost a energii částice i výšku a šířku potenciálové bariéry. Na obrázku 7 je například znázorněn vliv změny výšky bariéry na průběh závislosti koeficientu průchodu a odrazu elektronu na jeho energii. Model opět dovoluje formulovat řadu otázek a změnou různých parametrů hledat přímé grafické řešení.

Podobně jako model stěny dovoluje i model bariéry zobrazovat jednotlivé stavy odděleně. Zajímavé je například náhlé vymizení intenzity vlny v oblasti I pro energii částice kolem  $2,2 \times 10^{-19}$  J. Vysvětlení je v grafu č. 4, kde koeficient průchodu má pro tuto energii hodnotu téměř 1, zatímco koeficient odrazu je nulový. Na obrázku 7 jsou zobrazeny závislosti koeficientu průchodu a odrazu pro různě vysoké bariéry, demonstrující oscilující charakter těchto koeficientů.

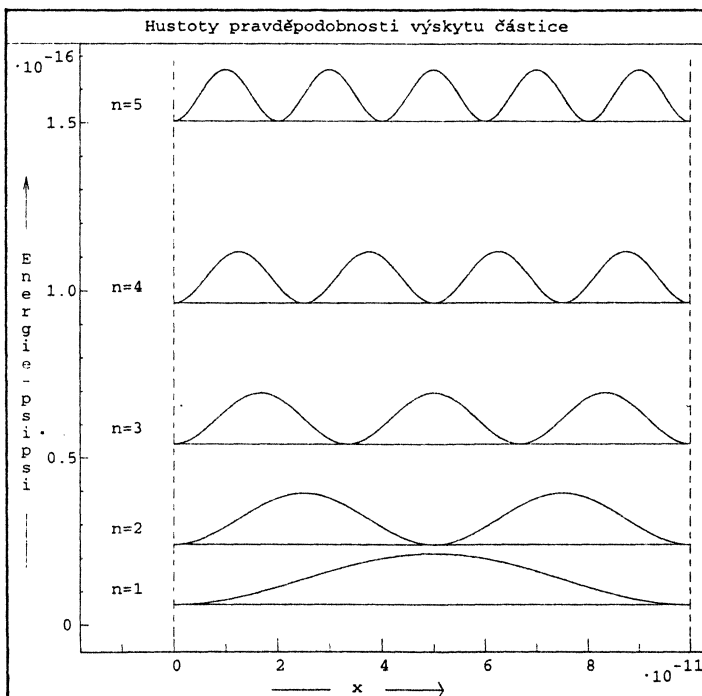
### Model nekonečně hluboké jednorozměrné potenciálové krabice

Na obrázku 8 jsou zobrazeny stacionární stavy částice v nekonečně hluboké potenciálové krabici a na obrázku 9 hustoty pravděpodobnosti výskytu částice uvnitř krabice. Model umožňuje zobrazovat tyto funkce pro jednotlivé stavy a porovnávat je mezi sebou v jednom grafu. Dovoluje též počítat pravděpodobnosti výskytu částice v zadaných intervalech uvnitř jámy pomocí integrálu z hustoty pravděpodobnosti výskytu.

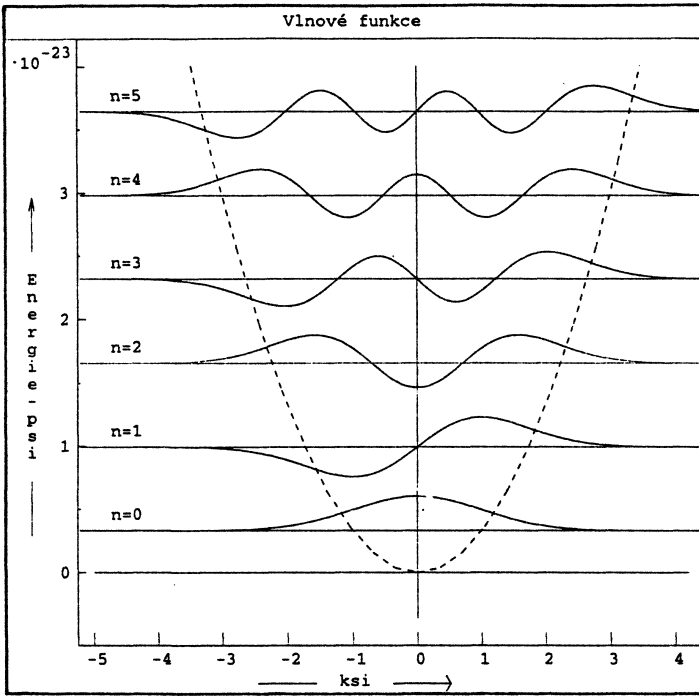
Model umožňuje hlouběji procvičit pojem hustoty pravděpodobnosti výskytu částice, neboť jde o lokalizované stavy a vlnovou funkci lze normovat. Řadu úloh z [4] lze řešit na cvičeních graficky. Popsaný model je výchozím bodem pro studium nestacionárních stavů částice v potenciálové krabici, které lze modelovat jako superpozici stacionárních stavů (takový model je v systému FAMULUS v současné době připravován). Na rozdíl od jámy konečné hloubky, kde je část spektra energií spojitá, zde máme k dispozici stavy s libovolně vysokou energií (úplný systém kvantových stavů).



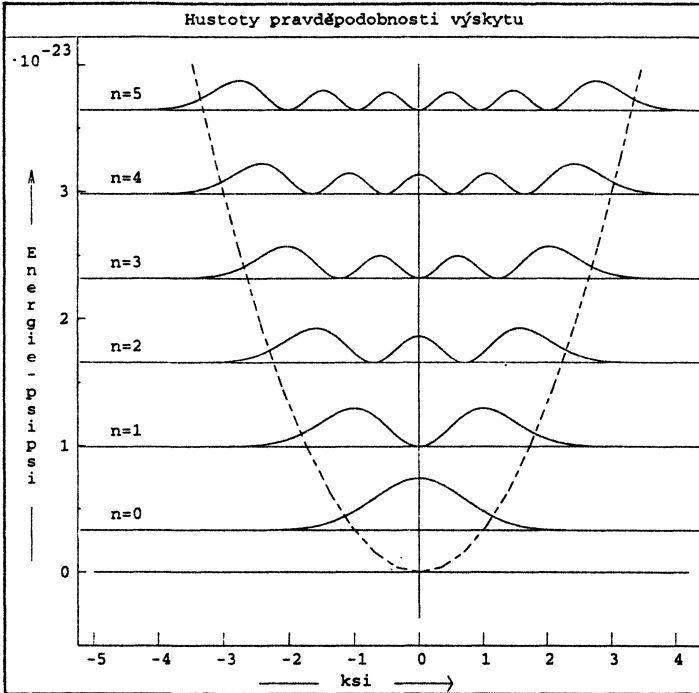
Obr. 8.  
Zobrazení vlnových funkcí stacionárních stavů elektronu v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové krabici šířky  $10^{-10}$  m pro stavy  $n = 1, 2, 3, 4$  a  $5$ . Energetické hladiny slouží zároveň za osy  $x$  pro příslušné vlnové funkce.



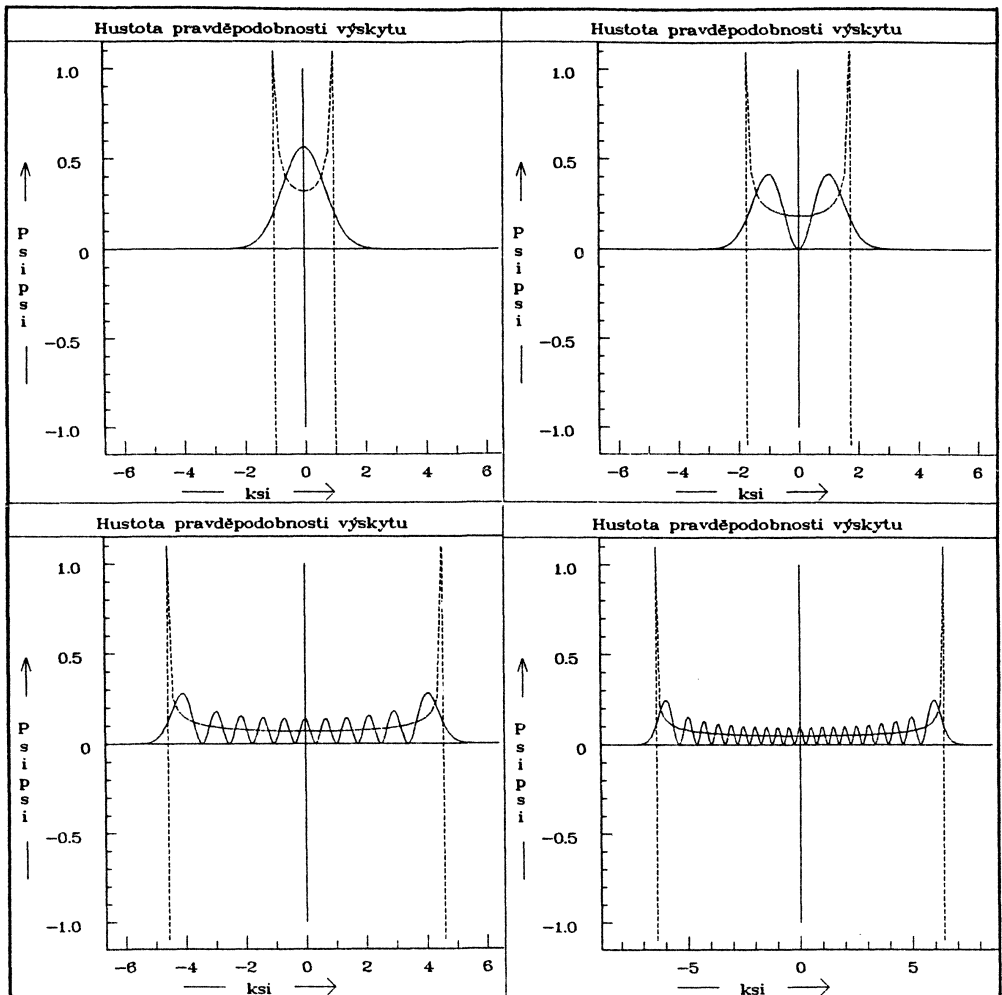
Obr. 9.  
Zobrazení hustot pravděpodobnosti výskytu elektronu v jednorozměrné nekonečně hluboké potenciálové krabici šířky  $10^{-10}$  m pro stavy  $n = 1, 2, 3, 4$  a  $5$ .



Obr. 10.  
Zobrazení stacionárních stavů lineárního harmonického oscilátoru pro stavy  $n = 0, 1, 2, 3, 4$  a 5. Na ose  $x$  je vynesena bezrozměrná průměrná  $\xi$ .



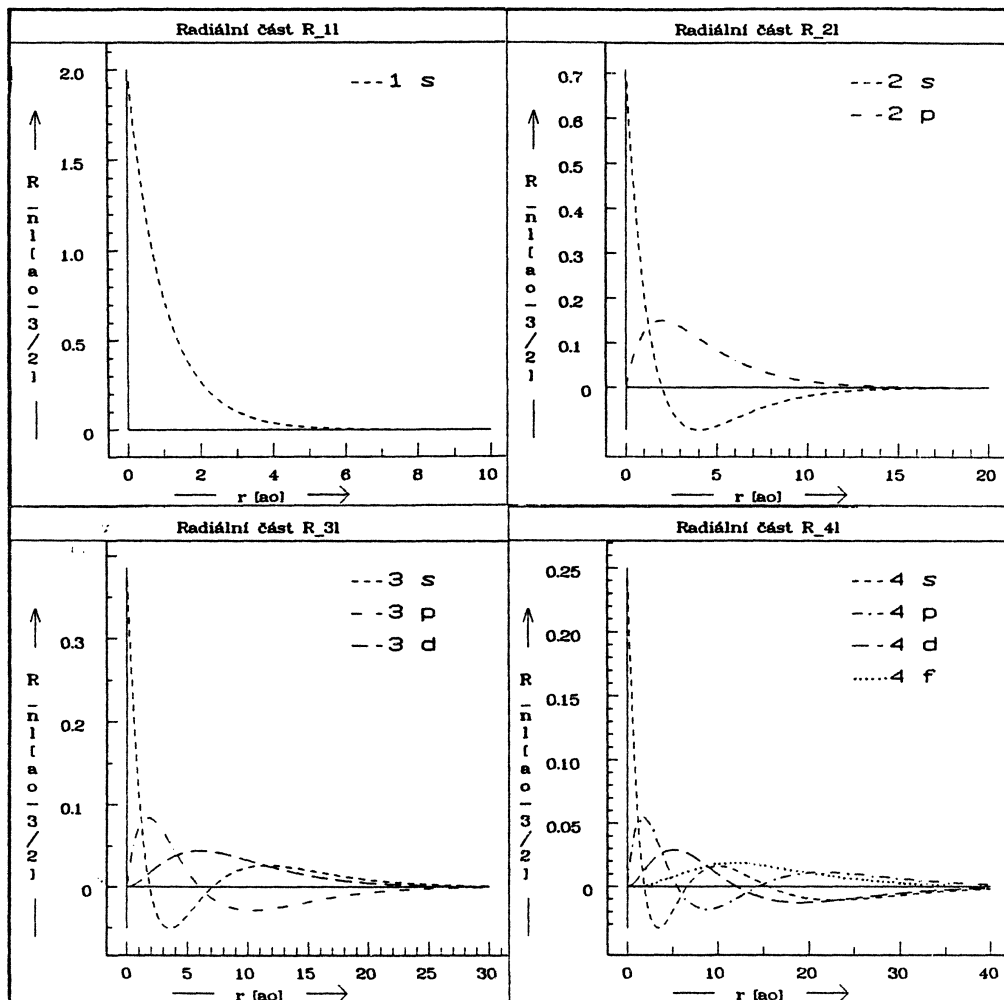
Obr. 11.  
Zobrazení hustot pravděpodobnosti výskytu lineárního harmonického oscilátoru pro stavy  $n = 0, 1, 2, 3, 4$  a 5.



Obr. 12. Srovnání hustoty pravděpodobnosti výskytu lineárního harmonického oscilátoru vypočtené kvantově-mechanicky (plná čára) a klasicky (přerušovaná čára) pro stavy  $n = 0$  (okno 1),  $n = 1$  (okno 2),  $n = 10$  (okno 3) a  $n = 20$  (okno 4).

### Model lineárního harmonického oscilátoru

Na obrázku 10 jsou zobrazeny stacionární stavy lineárního harmonického oscilátoru, to jest částice v poli o potenciálu  $U = \frac{1}{2}kx^2$ , a na obrázku 11 hustoty pravděpodobnosti výskytu oscilátoru. Čárkovanou křivkou jsou spojeny body, odpovídající klasickým mezím oscilátoru (leží na parabole). Na ose  $x$  je vynesena bezrozměrná proměnná  $\xi$ . Model umožňuje zobrazovat vlnové funkce i hustoty pravděpodobnosti výskytu částice v jednotlivých stavech a porovnávat je v témže grafu. Dovoluje rovněž počítat pravděpodobnosti výskytu v zadaných intervalech osy  $x$  pomocí příslušného



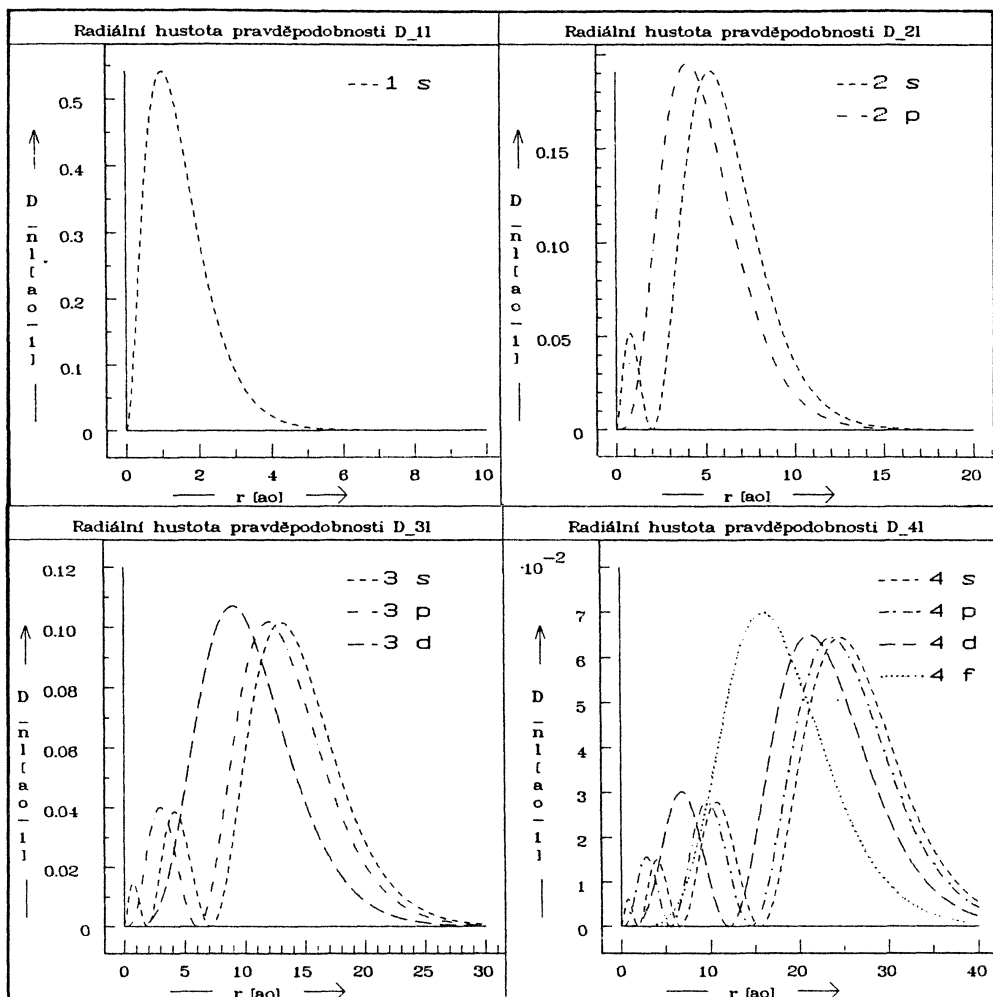
Obr. 13. Radiální části vlnových funkcí elektronu v atomu vodíku pro stavy s hlavním kvantovým číslem  $n = 1, 2, 3$  a  $4$ .  $a_0$  na ose  $x$  značí Bohrovův poloměr. Na ose  $y$  je zobrazena veličina  $R_{nl} [a_0^{-3/2}]$ .

integrálu. Interaktivně lze zadávat počet zobrazovaných stavů, nejvyšší zobrazovaný stav a frekvenci. Vliv energie stacionárního stavu na hodnotu jeho klasických mezí je demonstrován na obrázku 12. Model zobrazuje též Hermitovy polynomy až do stupně  $n = 20$ . Lze v něm graficky řešit řadu úloh ze [4], které se počítají ve cvičeních.

### Model atomu vodíku

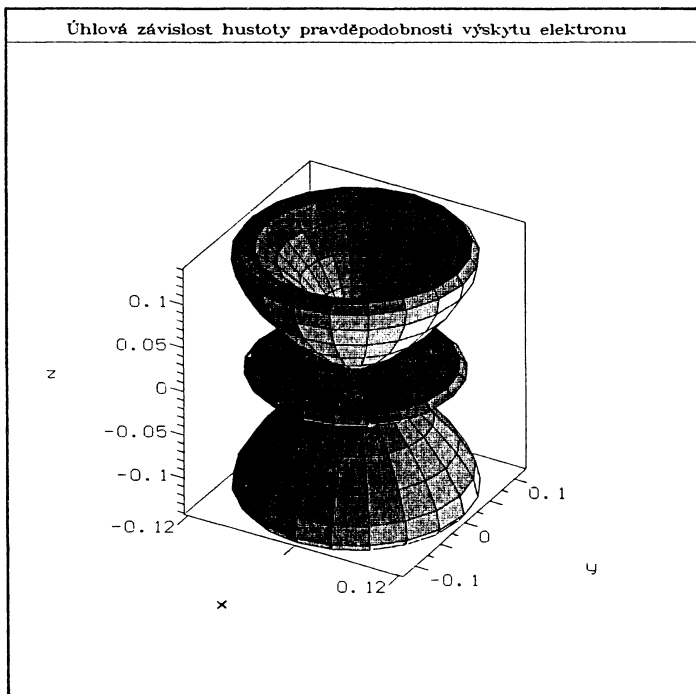
Na obrázku 13 jsou zobrazeny radiální části vlnových funkcí elektronu v atomu vodíku pro různé hodnoty hlavního kvantového čísla  $n = 1, 2, 3$  a  $4$  a vedlejšího kvantového čísla  $l = 0, 1, 2$  a  $3$ . Grafy dovolují porovnat jednotlivé stavy se stejným  $n$





Obr. 14. Radiální hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu vodíku pro stavy s hlavním kvantovým číslem  $n = 1, 2, 3$  a  $4$ .  $a_0$  na ose  $x$  značí Bohrovu poloměr. Na ose  $y$  je zobrazena veličina  $D_{nl} [a_0^{-1}]$ .

pro různá  $l$ . Model umožňuje též porovnání stavů se stejným  $l$  pro různá  $n$ . Obrázek 14 představuje radiální hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu vodíku pro různé stavy (tytéž jako v předchozím obrázku). Na obrázku 15 je zobrazena úhlová závislost hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu vodíku ve stavu s kvantovými čísly  $l = 4$  a  $m = 2$  (funkce  $|Y_{4\pm 2}|^2$ ). Model umožňuje zobrazovat a porovnávat stavy mezi sebou a prostorová zobrazení kulových funkcí a jejich reálných kombinací jsou doprovázena též zobrazením řezů. Na obrázku 16 je zobrazena reálná kombinace vlnových funkcí elektronu v atomu vodíku pro kvantová čísla  $l = 3$  a  $m = -2$  (stav  $S_3^{(-2)}$ ).



Obr. 15.  
 Prostorové znázornění úhlové závislosti hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu vodíku ve stavu s vedlejším kvantovým číslem  $l = 4$  a magnetickým kvantovým číslem  $m = 2$  (průběh funkce  $|Y_{4\pm 2}|^2$ ).

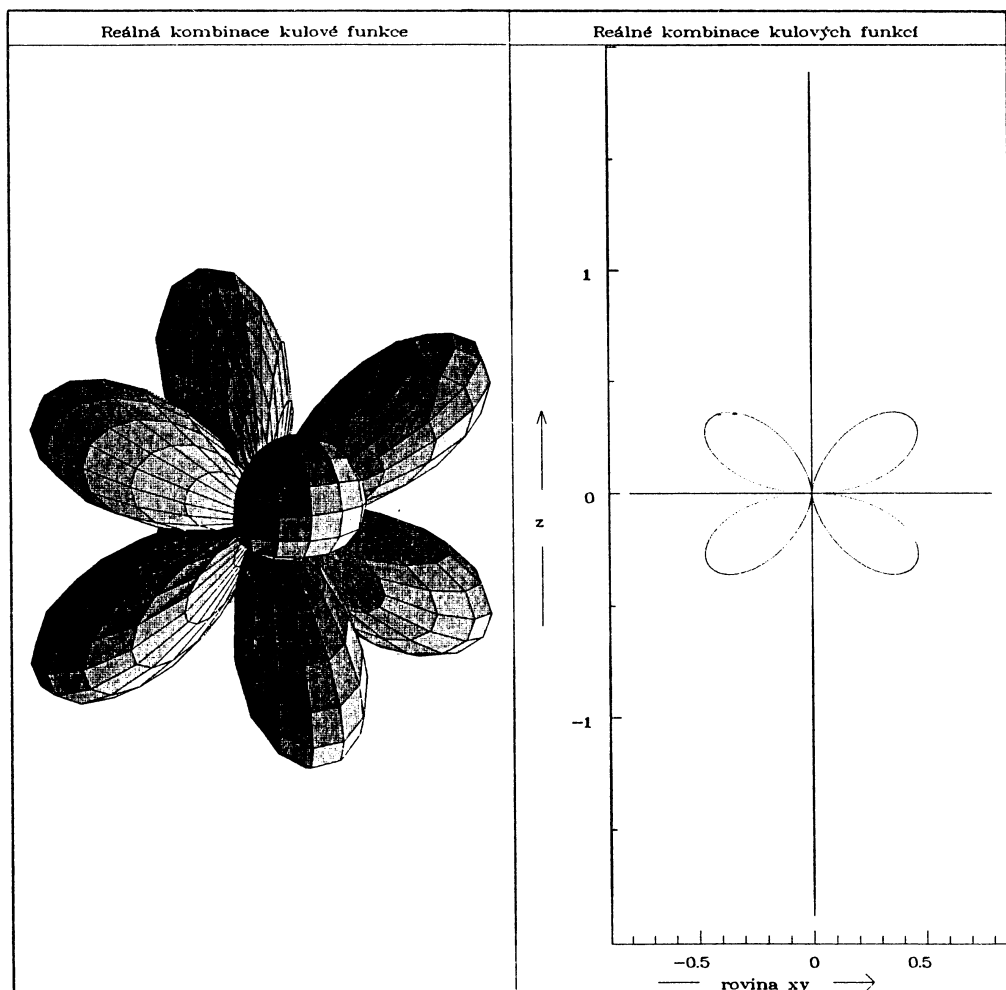
Grafickému znázornění atomu vodíku ve stacionárních stavech byl věnován před lety obsažný článek v tomto časopise [5]. Je v něm uveden mimo jiné přehled studijní literatury s upozorněním na chyby, jichž se při znázornění stavů atomu vodíku mnozí autoři dopouštějí. Předkládaná práce na článek [5] navazuje a dále jej rozvíjí s využitím grafických možností, které počítačový systém FAMULUS díky současné výpočetní technice poskytuje. Podle prvních zkušeností získaných přímo ve výuce lze očekávat, že naznačený postup přispěje k utváření správné představy studentů o prostorové závislosti hustoty pravděpodobnosti výskytu elektronu v atomu vodíku.

#### 4. Použití modelů ve výuce

Popsané modely byly vyzkoušeny na přednášce a cvičení z kvantové mechaniky, konaných ve druhém a třetím ročníku pro posluchače učitelství fyziky na střední škole. Jejich použití zvýšilo zájem studentů o pochopení zákonitostí jevů mikrosvětla a umožnilo jim snáze se orientovat v množství abstraktních pojmů a složitých výrazů.

Program byl s úspěchem prezentován na mezinárodním workshopu Famulus' 94 v Praze [6]. Přípravuje se jeho přizpůsobení pro žáky středních škol a měl by se stát součástí programového balíku, nabízeného spol. FAMULUS Etc.

Jde o první sérii modelů z kvantové mechaniky, obsahujících řešení těch nejzákladnějších úloh. V současné době jsou připravovány další modely, zobrazující numerická



Obr. 16. Prostorové znázornění úhlové závislosti reálné kombinace kulových funkcí elektronu v atomu vodíku pro stavy s kvantovými čísly  $l = 3$  a  $m = -2$  (průběh funkce  $S_3^{(-2)}$ ). Pro srovnání je zobrazen i řez vybranou rovinou.

řešení bezčasové Schrödingerovy rovnice pro libovolné průběhy potenciálů, časový vývoj nestacionárních stavů, sestrojených jako vlnová klubka ze získaných stacionárních stavů, nebo obecných řešení časové Schrödingerovy rovnice. Několik ukázek prvních verzí těchto programů na cvičeních se setkala s velkým zájmem studentů.

#### L i t e r a t u r a

- [1] DAVYDOV, A. S.: *Kvantová mechanika*. Nauka, 1973, český překlad SPN, 1976.
- [2] BRANDT, S., DAHMEN, H. D.: *The Picture Book of Quantum Mechanics*. John Wiley and Sons, New York, 1985.