

Interaktivni apleti iz kvantne mehanike - 1D i 2D beskonačna pravokutna potencijalna jama

Nađ, Viktorija

Undergraduate thesis / Završni rad

2020

Degree Grantor / Ustanova koja je dodijelila akademski / stručni stupanj: **Josip Juraj Strossmayer University of Osijek, Department of Physics / Sveučilište Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku, Odjel za fiziku**

Permanent link / Trajna poveznica: <https://urn.nsk.hr/urn:nbn:hr:160:423275>

Rights / Prava: [In copyright](#)/[Zaštićeno autorskim pravom.](#)

Download date / Datum preuzimanja: **2024-11-26**



Repository / Repozitorij:

[Repository of Department of Physics in Osijek](#)



**SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU
ODJEL ZA FIZIKU**



VIKTORIJA NAĐ

**INTERAKTIVNI APLETI IZ KVANTNE MEHANIKE-
1D I 2D BESKONAČNA PRAVOKUTNA
POTENCIJALNA JAMA**

Završni rad

Osijek, 2020.

**SVEUČILIŠTE JOSIPA JURJA STROSSMAYERA U OSIJEKU
ODJEL ZA FIZIKU**



VIKTORIJA NAĐ

**INTERAKTIVNI APLETI IZ KVANTNE MEHANIKE-
1D I 2D BESKONAČNA PRAVOKUTNA
POTENCIJALNA JAMA**

Završni rad

Predložen Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku radi stjecanja
zvanja prvostupnice fizike

Osijek, 2020.

”Ovaj završni rad izrađen je u Osijeku pod vodstvom izv.prof.dr.sc. Igora Lukačevića u sklopu Sveučilišnog preddiplomskog studija fizike na Odjelu za fiziku Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku.”

Sadržaj

1. Uvod.....	1
2. Jednodimenzionalna pravokutna potencijalna jama	2
2.1. Ovisnost o širini jame L.....	6
2.2. Ovisnost o kvantnom broju n	6
2.3. Prvi graf- prikaz gustoće vjerojatnosti kvantne čestice.....	7
2.3.1. Ovisnost o širini jame L	8
2.3.2. Ovisnost o kvantnom broju n	9
2.4. Drugi graf- energijski graf	10
2.5. Treći graf- udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti.....	12
3. Dvodimenzionalna pravokutna potencijalna jama	16
3.1. Prikaz funkcije gustoće vjerojatnosti i stacionarnih stanja	17
3.2. Prikaz projekcije valne funkcije Ψ_{n_x, n_y} ili ρ_{n_x, n_y} na ravninu x-y	21
4. Programski kod za jednodimenzionalni slučaj.....	24
5. Programski kod za dvodimenzionalni slučaj	27
6. Zaključak.....	29
7. Literatura	30
8. Životopis	31

INTERAKTIVNI APLETI IZ KVANTNE MEHANIKE- 1D I 2D BESKONAČNA PRAVOKUTNA POTENCIJALNA JAMA

Viktorija Nađ

Sažetak

Svrha kreiranja interaktivnih apleta u programskom paketu Wolfram Mathematica je olakšati svladavanje gradiva iz kolegija Uvod u kvantu mehaniku te srodnih kolegija studentima preddiplomskih studija fizike. Oni sadržavaju dijagrame koji opisuju stanja kvantne čestice koja se nalazi unutar beskonačne potencijalne jame. Taj model koristimo i kao primjer ilustriranja razlika između klasične i kvantne mehanike.

U prvom poglavlju opisujemo stanja kvantne čestice u jednodimenzionalnoj beskonačnoj pravokutnoj potencijalnoj jami. U drugom poglavlju opisujemo stanja kvantne čestice u dvodimenzionalnoj pravokutnoj potencijalnoj jami. U trećem poglavlju studenti imaju uvid u programski kod.

(31 stranica, 15 slika, 6 literaturnih navoda)

Rad je pohranjen u knjižnici Odjela za fiziku

Ključne riječi: gustoća vjerojatnosti/ stacionarna stanja/ Bohrov princip komplementarnosti/ Schrödingerova valna jednačina

Mentor: izv. prof. dr. sc. Igor Lukačević

Ocjenjivači:

Rad prihvaćen:

INTERAKTIVNI APLETI IZ KVANTNE MEHANIKE- 1D I 2D BESKONAČNA PRAVOKUTNA POTENCIJALNA JAMA

Viktorija Nađ

Abstract

The purpose of creating interactive applets in the Wolfram Mathematica software package is to facilitate the mastery of the matter in the Introduction to Quantum Mechanics course and related courses for undergraduate Physics students. They contain diagrams describing the states of a quantum particle contained within an infinite potential well. We also use this model as an example to illustrate the differences between classical and quantum mechanics.

In the first chapter we describe the states of a quantum particle in a one-dimensional infinite rectangular potential well. In the second chapter, we describe the states of a quantum particle in a two-dimensional rectangular potential well. In the third chapter, students have an insight into the program code.

(31 pages, 15 figures, 6 references)

Thesis deposited in Department of Physics library

Keywords: probability density/ stationary states/ Bohr's principle of complementarity/ Schrödinger wave equation

Associate profesor: izv. prof. dr. sc. Igor Lukačević

Reviewers:

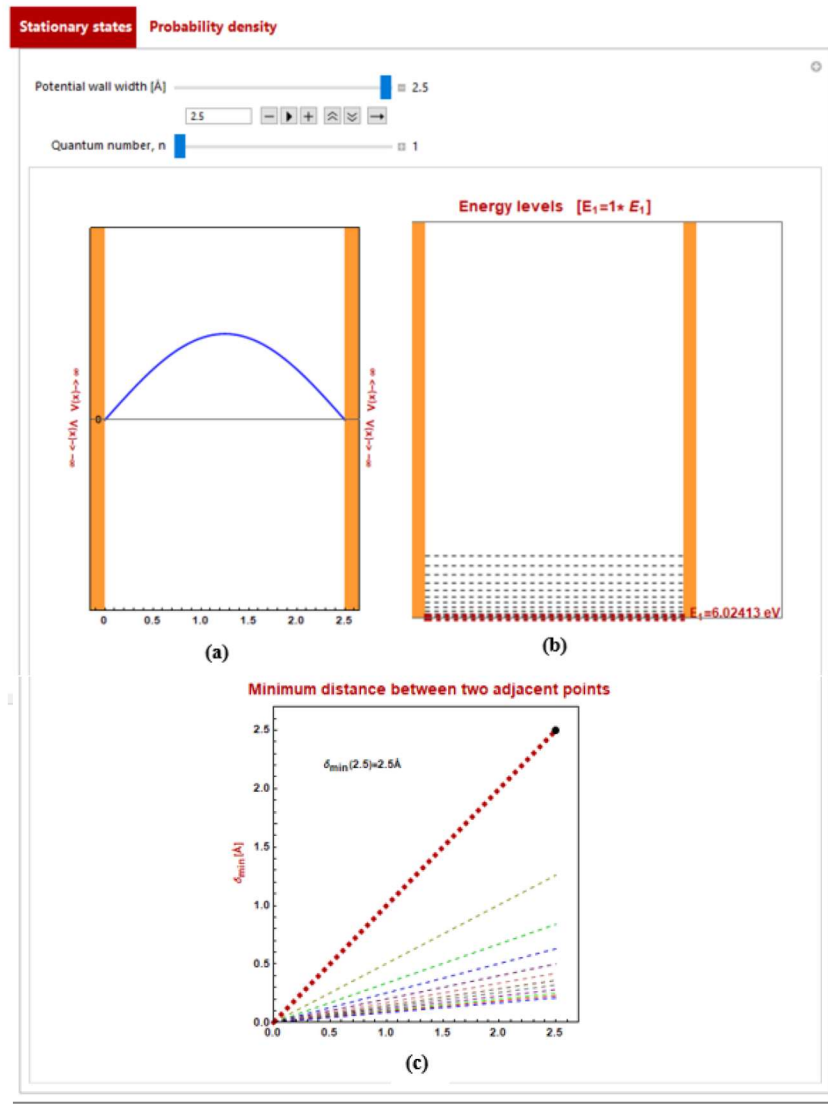
Thesis accepted:

1. Uvod

Kvantna čestica koja se nalazi unutar potencijalne jame s beskonačno visokim zidovima giba se unutar prostora koji je ograničen potencijalnim zidovima jer su ti zidovi “neprobojni”, odnosno valna funkcija koja opisuje kvantnu česticu iščezava na rubovima zidova. Model pravokutne potencijalne jame koristi se i kao primjer koji opisuje razlike između klasične i kvantne mehanike. Na primjer, u klasičnoj mehanici čestica koja se giba unutar jame može poprimiti bilo koje brzine te možemo točno znati gdje se nalazi u svakome trenutku ukoliko su nam poznati početni uvjeti. S druge strane, kvantna mehanika nam samo omogućuje da proračunamo vjerojatnost kolika će biti brzina i gdje će se čestica naći. U daljnjem izlaganju primijetit ćemo da ukoliko smanjimo prostor do nanometarskih veličina i manje, kvantni učinci postat će važni, stoga nećemo moći tvrditi da će čestica imati bilo koje vrijednosti brzina, energije i slično, nego će imati energije diskretnih vrijednosti. Zbog svoje jednostavnosti model pravokutne potencijalne jame omogućava uvid u kvantne efekte bez uporabe matematičke složenosti. Također, može poslužiti kao aproksimacija koja opisuje složenost fizikalnog sustava poput atoma vodika.

2. Jednodimenzionalna pravokutna potencijalna jama

Aplet se sastoji od tri grafa (Slika 1). Pojasnit ćemo ih opširnije u daljnjem izlaganju. Prvi graf vizualizira funkciju $\Psi_n(x)$ ili $\rho_n(x)$, što se može odabrati na vrhu apleta. Drugi je graf energijski graf. Kako bi prikazali diskretnu raspodjelu energija, u formulu za energiju uvrstili smo masu elektrona koja iznosi 9.11×10^{-31} kg. Treći graf prikazuje udaljenosti između dvaju susjednih minimuma gustoće vjerojatnosti.



Slika 1. Jednodimenzionalna pravokutna potencijalna jama: **(a)** Grafički prikaz funkcije $\Psi_n(x)$; **(b)** Grafički prikaz diskretne raspodjele energija; **(c)** Grafički prikaz udaljenosti između dvaju susjednih minimuma stacionarnih stanja.

Valna funkcija $\Psi_n(x)$ nema fizikalno značenje, no uzmemo li njezinu apsolutnu vrijednost na kvadrat $|\Psi_n(x)|^2 = \rho_n(x)$ dobivamo vrijednost koja predstavlja gustoću vjerojatnosti nalaženja kvantne čestice u toči x . Područje ispod grafa predstavlja vjerojatnost nalaženje kvantne čestice $P_n(x) = \int \rho_n(x) dx$. Rješavajući Schrödingerovu valnu jednadžbu za $V(x) = 0$ (potencijal unutar jame) [3] doći ćemo do izraza za valnu funkciju $\Psi_n(x)$.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_n(x) = E_n \Psi_n(x) \quad \left/ \cdot \left(-\frac{2m}{\hbar^2} \right) \right. \quad (1)$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_n(x) + \frac{2mE_n}{\hbar^2} \Psi_n(x) = 0 \quad (2)$$

Kako bismo pojednostavili zapis, uvodimo pokratu

$$k_n^2 = \frac{2mE_n}{\hbar^2} \quad (3)$$

Jednadžba poprima oblik

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} \Psi_n(x) + k_n^2 \Psi_n(x) = 0 \quad (4)$$

Jednadžbu (4) možemo povezati s klasičnom mehanikom u kojoj predstavlja jednadžbu harmonijskog oscilatora čije nam je rješenje poznato. U matematičkoj interpretaciji ona je homogena linearna diferencijalna jednadžba drugoga reda s konstantnim koeficijentima te ju rješavamo metodom neodređenih koeficijenata [5]. Stoga ćemo zapisati rješenje koje pri tome dobivamo te nastaviti s daljnjim rješavanjem.

$$\Psi_n(x) = A\cos(k_n x) + B\sin(k_n x) \quad (5)$$

Primjenom rubnih uvjeta $\Psi_n(0) = \Psi_n(L) = 0$ dobivamo vrijednosti za koeficijente A i B.

$$\Psi_n(0) = 0 = A \quad (6)$$

$$0 = \Psi_n(L) = A\cos(k_n L) + B\sin(k_n L) \quad (7)$$

Budući da je koeficijent A jednak 0, uvrstimo li to u (7) u konačnici dobivamo vrijednost za k_n , koja iznosi:

$$k_n = \frac{n\pi}{L} . \quad (8)$$

Ubacimo li (8) i (6) u (5) dobivamo

$$\Psi_n(x) = B\sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right) . \quad (9)$$

Kako bismo dobili vrijednost za koeficijent B, iskoristit ćemo uvjet normalizacije [3]:

$$|B|^2 \int_0^L |\Psi(x)|^2 dx = 1. \quad (10)$$

Riješimo li (10) dobivamo

$$B = \sqrt{\frac{2}{L}}. \quad (11)$$

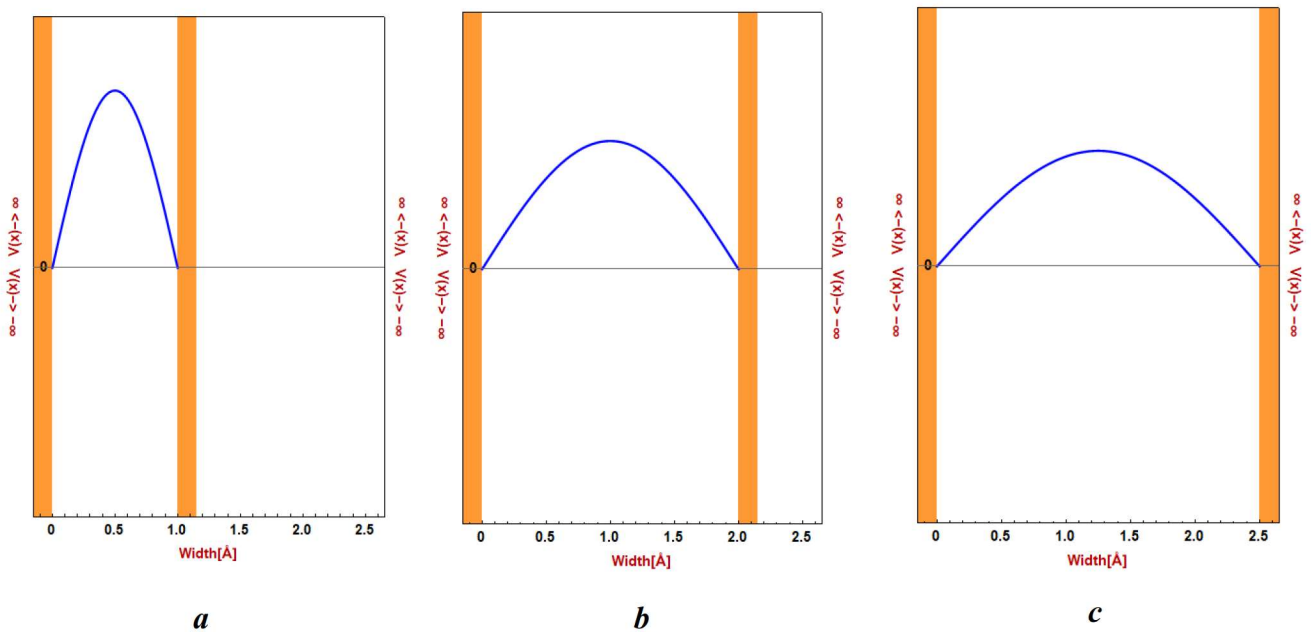
Kada (11) uvrstimo u (9) dobivamo konačno rješenje

$$\Psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right). \quad (12)$$

Iz izraza (12) je vidljivo da valna funkcija čestice u jami ovisi o širini jame, L , i kvantnom stanju čestice, određenim s kvantnim brojem n .

2.1. Ovisnost o širini jame L

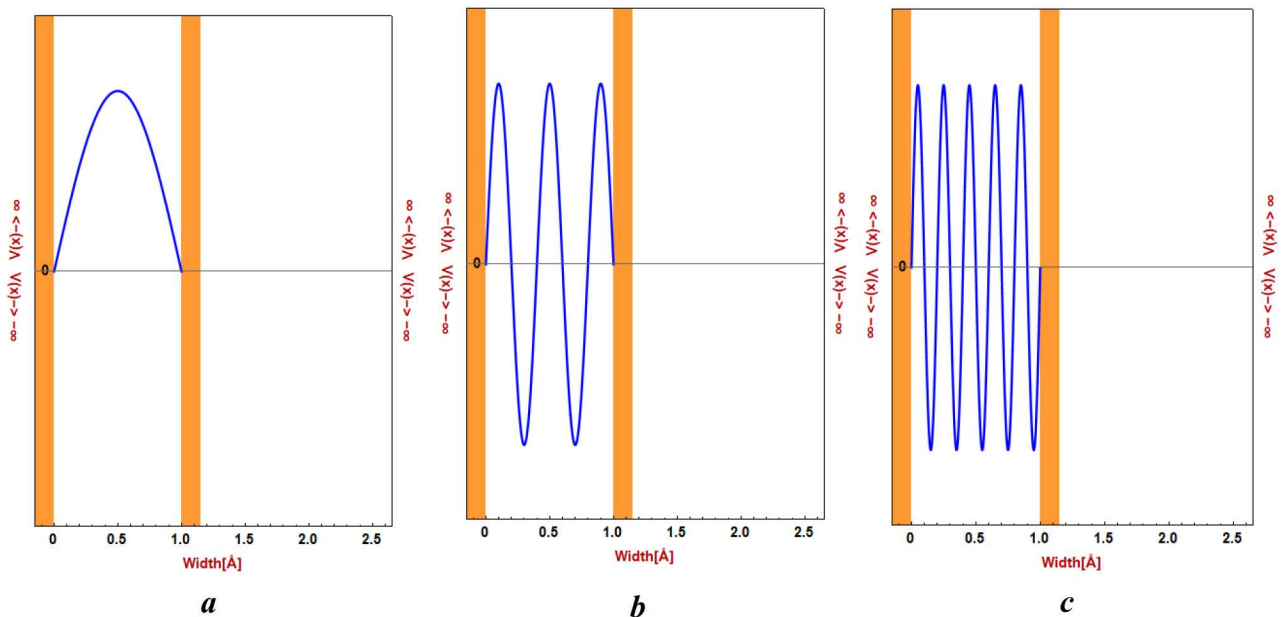
Kako povećavamo širinu jame prema (12) valna će se funkcija „širiti”, odnosno njezina valna duljina će se sve više povećavati, dok će se k_n smanjivati. Zamislimo li da širinu jame povećavamo prema beskonačnosti, vrijednost valne funkcije težit će k 0. To uočavamo sa Slike 2. Širinu potencijalne jame L možemo mijenjati i pomoću klizača iznad grafova.



Slika 2. **a)** Valna funkcija kvantne čestice u jami širine $L=1\text{Å}$; **b)** Valna funkcija kvantne čestice u jami širine $L=2\text{Å}$; **c)** Valna funkcija kvantne čestice u jami širine $L=2.5\text{Å}$.

2.2. Ovisnost o kvantnom broju n

Broj “dolova“ i “brjegovaa“ valne funkcije $\Psi_n(x)$ je jednak kvantnome broju n , a broj “čvorova“ valne funkcije $\Psi_n(x)$ je jednak kvantnome broju n uvećanoga za jedan ($n+1$). Kako povećavamo kvanti broj prema (12) njezina valna duljina sve više će se smanjivati, a k_n povećavati. To uočavamo sa Slike 3. Kvantni broj n možemo mijenjati i pomoću klizača iznad grafova.



Slika 3. a) Valna funkcija kvantne čestice u jami širine $L=1\text{Å}$ kvantnog broja $n=1$; **b)** Valna funkcija kvantne čestice u jami širine $L=1\text{Å}$ kvantnog broja $n=5$; **c)** Valna funkcija kvantne čestice u jami širine $L=1\text{Å}$ kvantnog broja $n=10$.

2.3. Prvi graf- prikaz gustoće vjerojatnosti kvantne čestice

U prethodnom smo podnaslovu napomenuli da kvadrat apsolutne vrijednosti funkcije $\Psi_n(x)$ ima fizikalno značenje. Zapravo, predstavlja gustoću vjerojatnosti nalaženja kvantne čestice u nekoj točki koja se nalazi unutar zadanoga intervala, što u našem slučaju predstavlja širinu jame, i označavamo ju s $\rho_n(x)$.

$$|\Psi_n(x)|^2 = \rho_n(x) \quad (13)$$

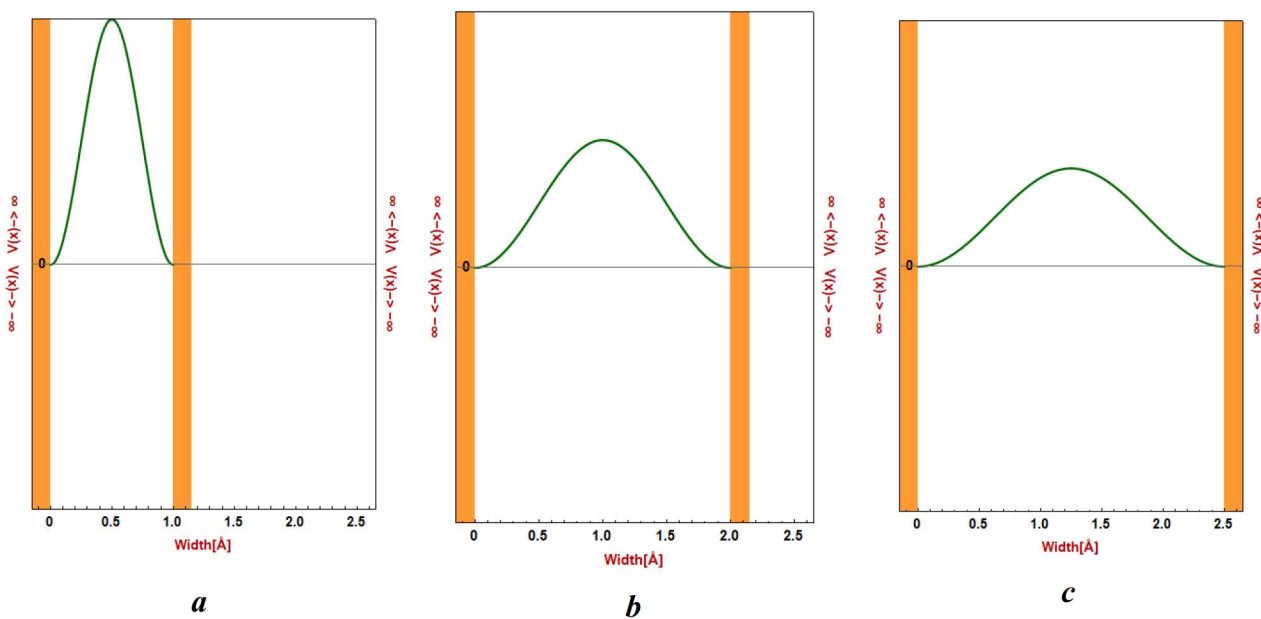
Upotrijebit ćemo izraz (13) kako bismo uveli novu fizikalnu veličinu koju ćemo označiti P_{ab} .

Tu novu fizikalnu veličinu zovemo vjerojatnost nalaženja čestice [3] i definiramo je s

$$P_{ab} = \int_a^b \rho_n(x) dx . \quad (14)$$

2.3.1. Ovisnost o širini jame L

Kako povećavamo širinu jame, vjerojatnost pronalaska čestice se smanjuje. Na Slici 4 prikazano je ponašanje gustoće vjerojatnosti.

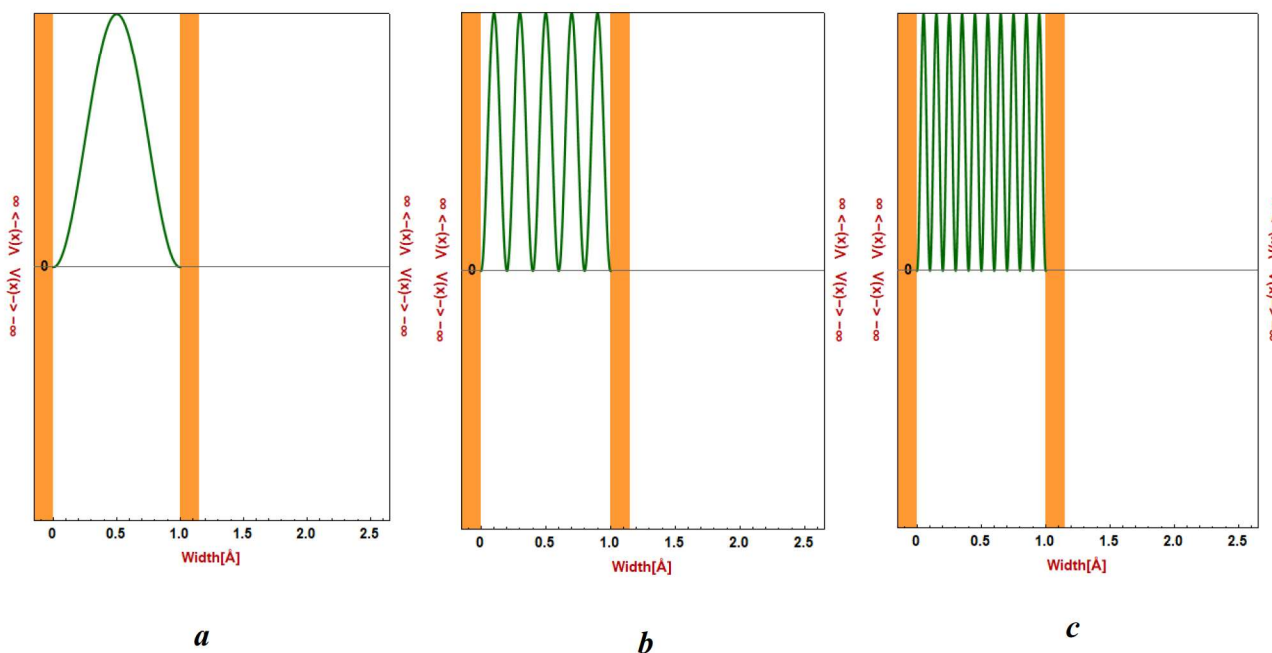


Slika 4. **a)** Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice unutar jame širine 1Å ; **b)** Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice unutar jame širine 2Å ; **c)** Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice unutar jame širine 2.5Å .

2.3.2. Ovisnost o kvantnom broju n

Broj “brjegovā” valne funkcije $\rho_n(x)$ je jednak kvantnome broju n , a broj “čvorova” valne funkcije $\rho_n(x)$ je jednak kvantnome broju n uvećanoga za jedan ($n+1$). Kako povećavamo kvantni broj n , zakoni kvantne mehanike sve bliže reproduciraju klasične rezultate, odnosno gustoća vjerojatnosti oscilira sve većim frekvencijama što u konačnici dovodi do ujednačene vrijednosti vjerojatnosti [4]. Taj princip zovemo Bohrovim principom komplementarnosti [4]. Vjerojatnost nalaženja kvantne čestice unutar zadanog intervala, koja odgovara rezultatu klasične mehanike, dana je s:

$$P = \frac{1}{L} \cdot \quad (15)$$



Slika 5. *a)* Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice unutar jame širine 1 \AA kvantnog broja $n=1$; *b)* Gustoće vjerojatnosti kvantne čestice unutar jame širine 1 \AA kvantnog broja $n=5$; *c)* Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice unutar jame širine 1 \AA kvantnog broja $n=10$.

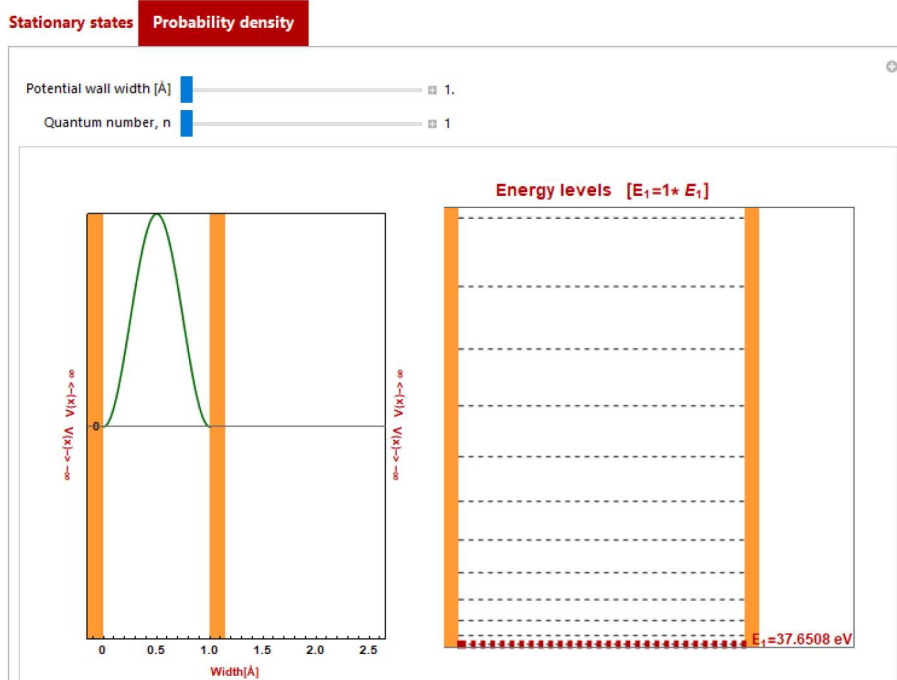
U jednadžbi (16) x_j predstavljaju točke u kojima će se gustoća vjerojatnosti “ukapljiti“, odnosno u tim točkama kvantna mehanika će reproducirati klasične rezultate, vjerojatnost (14) poprimat će konstantnu vrijednost [4].

$$x_j = \frac{2j+1}{2n} L, \quad j = 0,1,2,3\dots \quad (16)$$

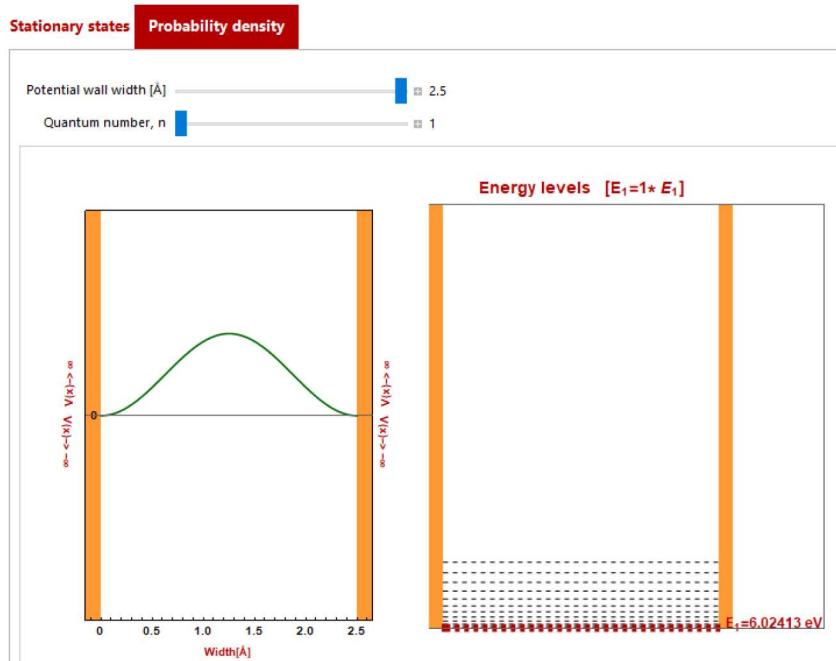
2.4. Drugi graf- energijski graf

Uvažavajući postulate klasične mehanike čestica može poprimiti bilo koju vrijednost energija što odgovara kontinuiranome energijskome spektru. Za razliku od klasične mehanike, u kvantnoj mehanici čestica u potencijalnoj jami može imati samo točno određene vrijednosti što odgovara diskretnome energijskome spektru. Ta je energija dana [3] s:

$$E_n = \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} \quad \text{ili} \quad E_n = E_1 n^2 . \quad (17)$$



Slika 6. Prikaz gustoće vjerojatnosti i energije osnovnog stanja kvantne čestice s masom elektrona ($L= 1\text{Å}$, $n=1$).



Slika 7. Prikaz gustoće vjerojatnosti i energije osnovnog stanja kvantne čestice s masom elektrona ($L= 2.5\text{Å}$, $n=1$).

Uspoređujući Sliku 6 sa Slikom 7 možemo uočiti da kad povećavamo širinu jame smanjuje se razmak između susjednih nivoa što proizlazi iz (17) jer je energija kvantne čestice obrnuto srazmjerna sa širinom jame. Ukoliko nas zanima koliki su ti razmaci možemo ih izračunati na sljedeći način:

$$\Delta E = E_{n+1} - E_n = \frac{(n+1)^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} - \frac{n^2 \hbar^2 \pi^2}{2mL^2} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} [(n+1)^2 - n^2] = \frac{\hbar^2 \pi^2}{2mL^2} (2n+1) . \quad (18)$$

2.5. Treći graf- udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti

Graf služi za iščitavanje vrijednosti udaljenosti između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti. Ta vrijednost je dana s:

$$\delta_{\min} = \frac{L}{n} . \quad (19)$$

U daljnjem izlaganju izvest ćemo (19). Izvod započinjemo traženjem ekstrema gustoće vjerojatnosti (13).

$$\rho_n(x) = \frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \quad (20)$$

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \rho_n(x) = \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{2}{L} \sin^2\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \right] = \frac{4n\pi}{L^2} \sin\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \cos\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \quad (21)$$

$$0 = \frac{4n\pi}{L^2} \sin\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \cos\left(\frac{nx\pi}{L}\right) \quad (22)$$

Primjenom formula za trigonometrijske funkcije

$$\sin(2a) = 2\sin(a)\cos(a), \quad (23)$$

dobivamo rezultat

$$0 = \sin\left(\frac{2n\pi}{L}x\right), \quad (24)$$

stoga dobivamo

$$\frac{2n}{L}x_k = k \rightarrow x_k = \frac{kL}{2n}. \quad (25)$$

Uvrstimo li (26) u (25) dobivamo

$$\sin(k\pi) = 0, k = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (26)$$

Iz izraza (27) primjećujemo ukoliko je k pozitivan cijeli broj tada će u točkama: $0, \pi, 2\pi, 3\pi, 4\pi, \dots$, gustoća vjerojatnosti biti jednaka nuli. Ako je

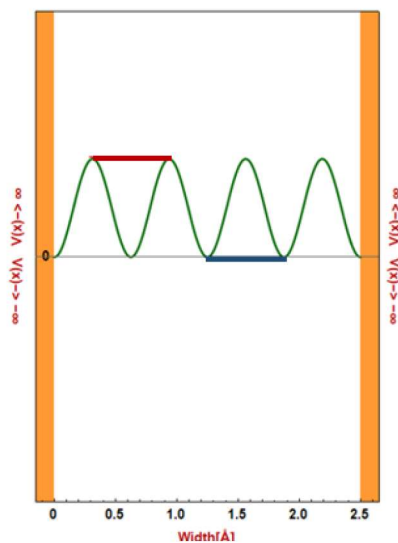
$$k = \frac{4m-3}{2}, \quad (27)$$

tada za svaki prirodan broj m (26) postiže minimum. Što znači da će u točkama: $\frac{1}{2}\pi, \frac{5}{2}\pi, \frac{9}{2}\pi, \frac{13}{2}\pi, \dots$, gustoća vjerojatnosti imati minimalnu vrijednost. Razlika dvije susjedne točke će dati udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti. Uvrstimo li (27) u (25) dobivamo:

$$x_m = \frac{L}{4n}(4m-3), m = 1, 2, 3, 4, \dots \quad (28)$$

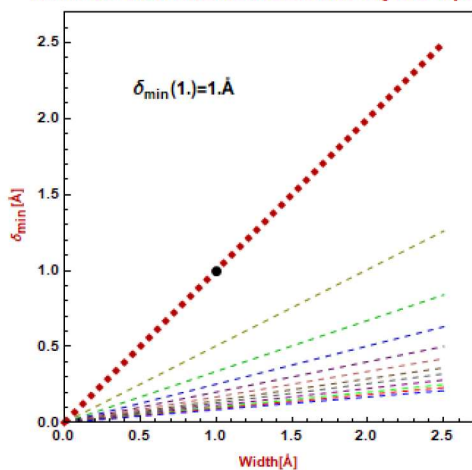
Napravimo li razliku između x_m i x_{m+1} dobit ćemo (19).

$$\delta_{\min} = x_{m+1} - x_m = \frac{L}{4n}[4(m+1)-3] - \frac{L}{4n}(4m-3) = \frac{4Lm + L + 4L - 4Lm}{4n} = \frac{4L}{4n} = \frac{L}{n} \quad (29)$$



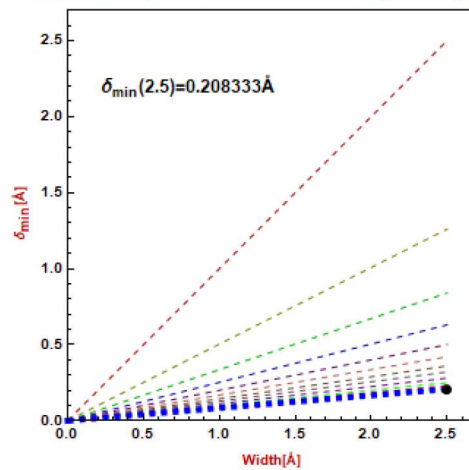
Slika 8. Gustoća vjerojatnosti za stanje $n=4$; Crvena crta povezuje dva susjedna maksimuma gustoće vjerojatnosti; Plava crta povezuje dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti.

Minimum distance between two adjacent points



a

Minimum distance between two adjacent points

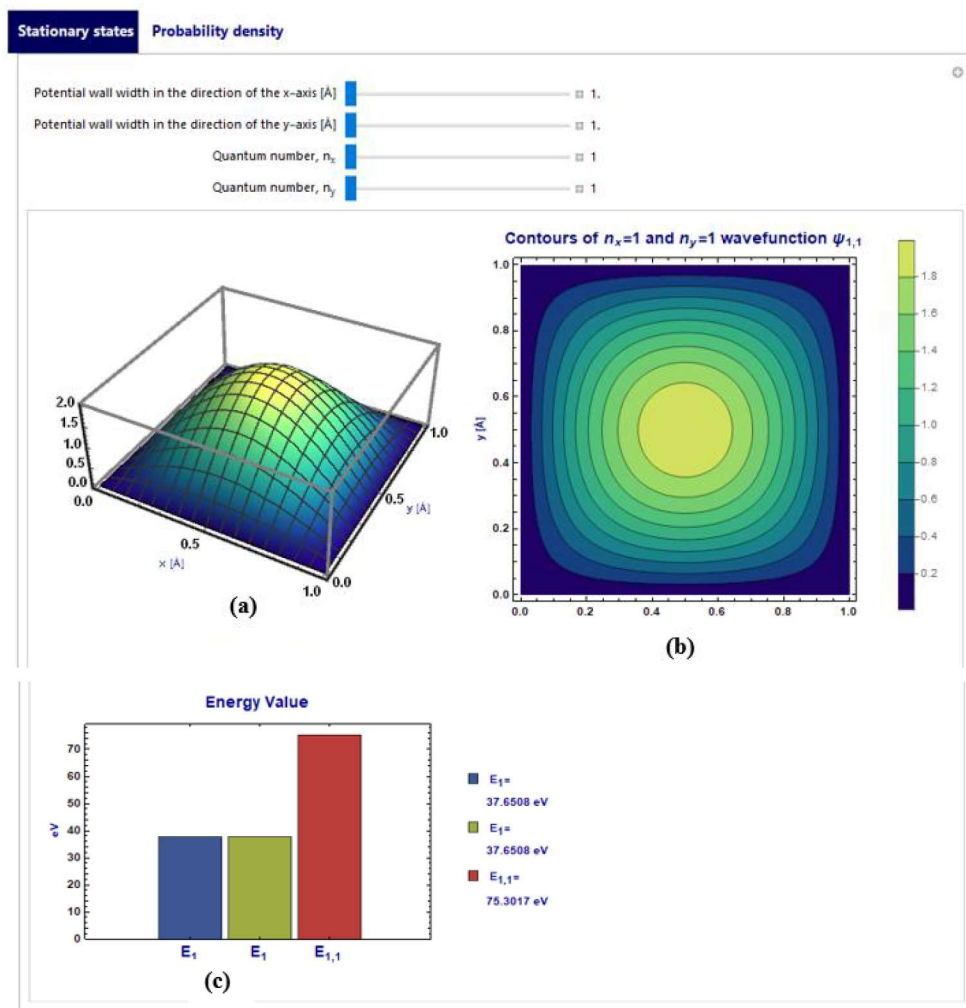


b

Slika 9. Svaki pravac na grafu predstavlja stanje kvante čestice, a crna točka predstavlja: **a)** Udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti iznosa 1Å ; **b)** Udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti iznosa 0.208333Å .

3. Dvodimenzionalna pravokutna potencijalna jama

Aplet se sastoji od tri grafa (Slika 11). Pojasnit ćemo ih opširnije u daljnjem izlaganju. Prvi graf vizualizira funkciju $\Psi_n(x, y)$ ili $\rho_n(x, y)$. Izbor se vrši pomoću izbornika na vrhu apleta. Drugi graf daje grafički prikaz projekcije valne funkcije na ravninu x-y. U našem slučaju one su vizualizirane linijama konstantnih vrijednosti $\Psi_n(x, y)$ ili $\rho_n(x, y)$ u dvodimenzionalnom sustavu. Treći graf je energijski graf iz kojeg iščitavamo vrijednosti energija koje pripadaju “gibanju čestice “ u smjeru x osi i smjeru y osi, te vrijednost zbroja njihovih energija.



Slika 10. Dvodimenzionalna pravokutna potencijalna jama: (a) Grafički prikaz $\Psi_n(x, y)$ (b) Prikaz projekcije valne funkcije $\Psi_n(x, y)$ na ravninu x-y (c) Stupčasti graf iz kojeg iščitavamo energije u x i y smjeru te zbroj njihovih energija.

3.1. Prikaz funkcije gustoće vjerojatnosti i stacionarnih stanja

Primjećujemo da je u ovome slučaju funkcija $\rho_{n_x, n_y}(x, y)$ funkcija dvije varijable [6], a ona je jednaka $\rho_n(x) = |\Psi_n(x)|^2$, stoga u obzir moramo uzeti smjer x i smjer y tijekom izvoda. Krećemo od Schrödingerove valne jednadžbe koja glasi [2].

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \Psi_{n_x, n_y}(x, y) = E \Psi_{n_x, n_y}(x, y) \quad (30)$$

Jednadžbu (30) rješavamo metodom separacije varijabli [2].

$$\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = X_{n_x}(x) Y_{n_y}(y) \quad (31)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [X_{n_x}(x)] \frac{1}{[X_{n_x}(x)]} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} [Y_{n_y}(y)] \frac{1}{[Y_{n_y}(y)]} = E = E_{n_x} + E_{n_y} \quad (32)$$

Jednadžbu (32) možemo rastaviti na dvije od kojih će jedna ovisiti samo o x smjeru, a druga o y smjeru. Te jednadžbe dane su sa:

$$\ddot{X}_{n_x}(x) + \frac{2mE_{n_x}}{\hbar^2} X_{n_x}(x) = 0 \quad , \quad (33)$$

$$\ddot{Y}_{n_y}(y) + \frac{2mE_{n_y}}{\hbar^2} Y_{n_y}(y) = 0 \quad . \quad (34)$$

Jednadžbu (33) i (34) prepoznamo kao jednadžbe harmonijskog oscilatora čija su nam rješenja poznata i dana sa:

$$X_{n_x}(x) = \sqrt{\frac{2}{a}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \quad , \quad (35)$$

$$Y_{n_y}(y) = \sqrt{\frac{2}{b}} \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \quad . \quad (36)$$

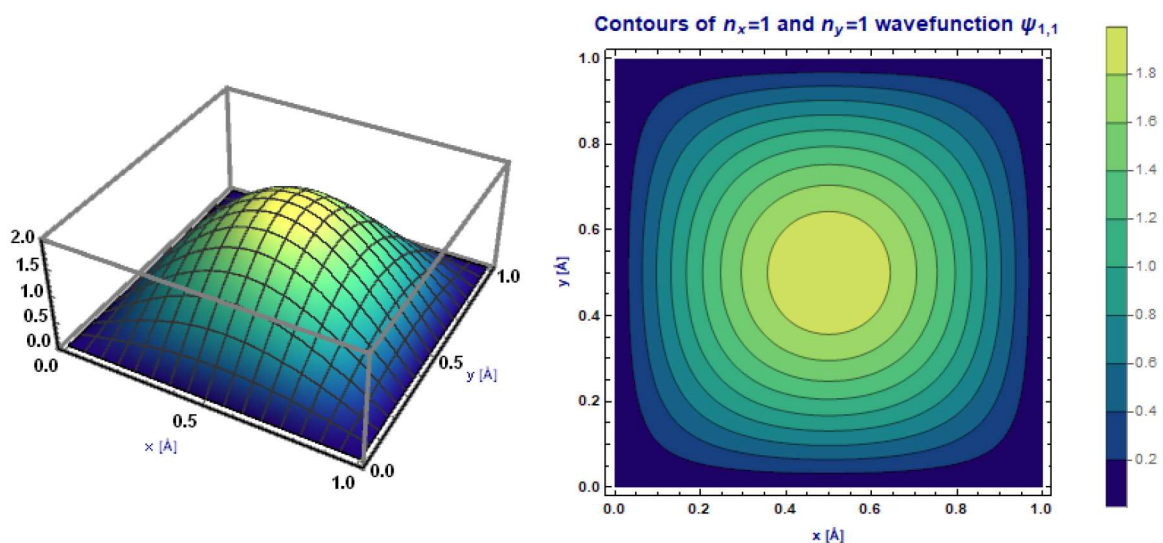
Iz jednadžbe (32) je vidljivo ukoliko uvrstimo (36) i (35) dobivamo

$$\Psi_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{2}{\sqrt{ab}} \sin\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \quad . \quad (37)$$

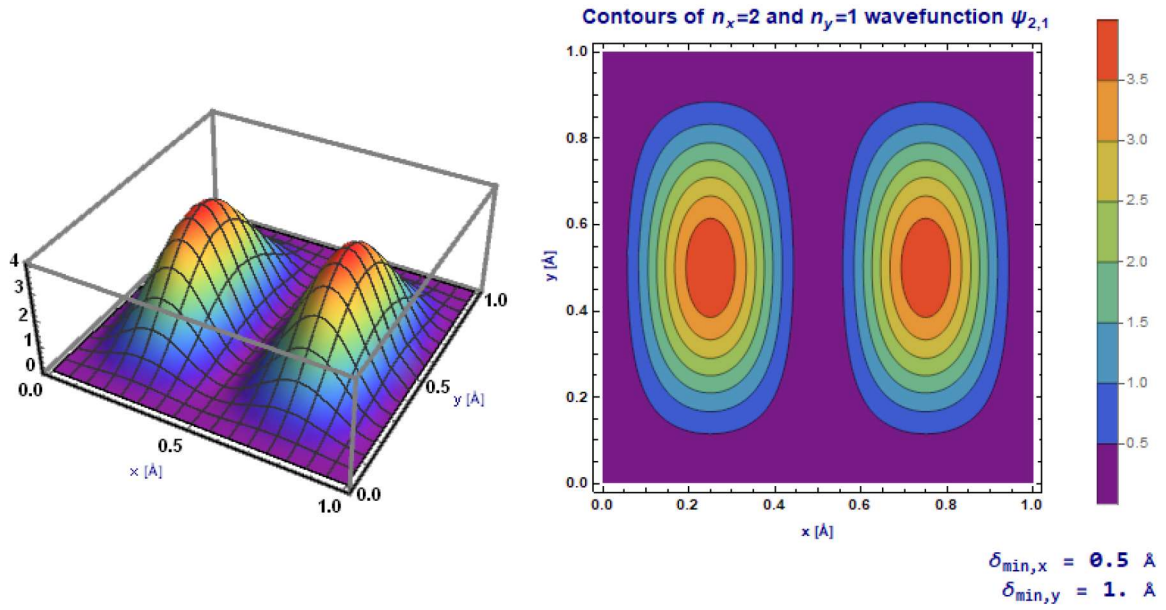
Već smo napomenuli ukoliko uzmemo apsolutnu vrijednost funkcije (37) na kvadrat da ćemo dobiti funkciju $\rho_{n_x, n_y}(x, y)$ koja predstavlja gustoću vjerojatnosti:

$$\rho_{n_x, n_y}(x, y) = \frac{4}{ab} \sin^2\left(\frac{n_x \pi x}{a}\right) \sin^2\left(\frac{n_y \pi y}{b}\right) \quad (38)$$

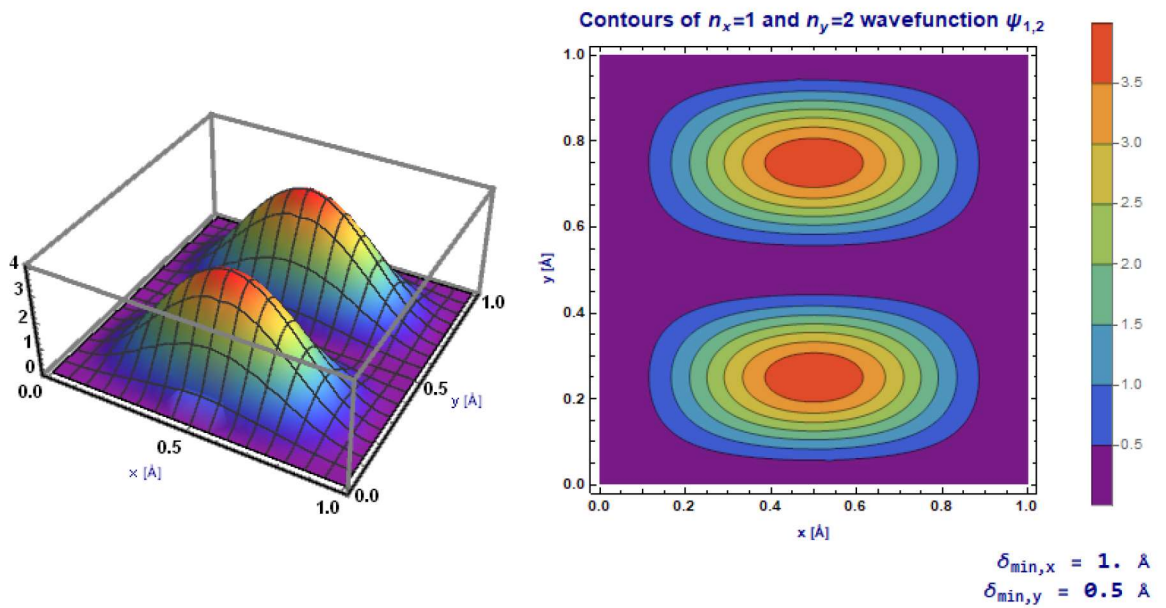
Razmatrajući jednadžbu (38) možemo zaključiti da npr. funkcije $\rho_{2,1}(x, y)$ i $\rho_{1,2}(x, y)$ nisu jednake zbog toga što predstavljaju dva različita stanja kvantne čestice koja se nalazi u jami. To primjećujemo ukoliko usporedimo Sliku 12 sa Slikom 13.



Slika 11. Stacionarno stanje kvantne čestice koja se nalazi unutar jame širine 1Å u stanju kvantnih brojeva $n_x=1$ i $n_y=1$.



Slika 12. Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice koja se nalazi unutar jame širine 1 \AA u stanju kvantnih brojeva $n_x=2$ i $n_y=1$.

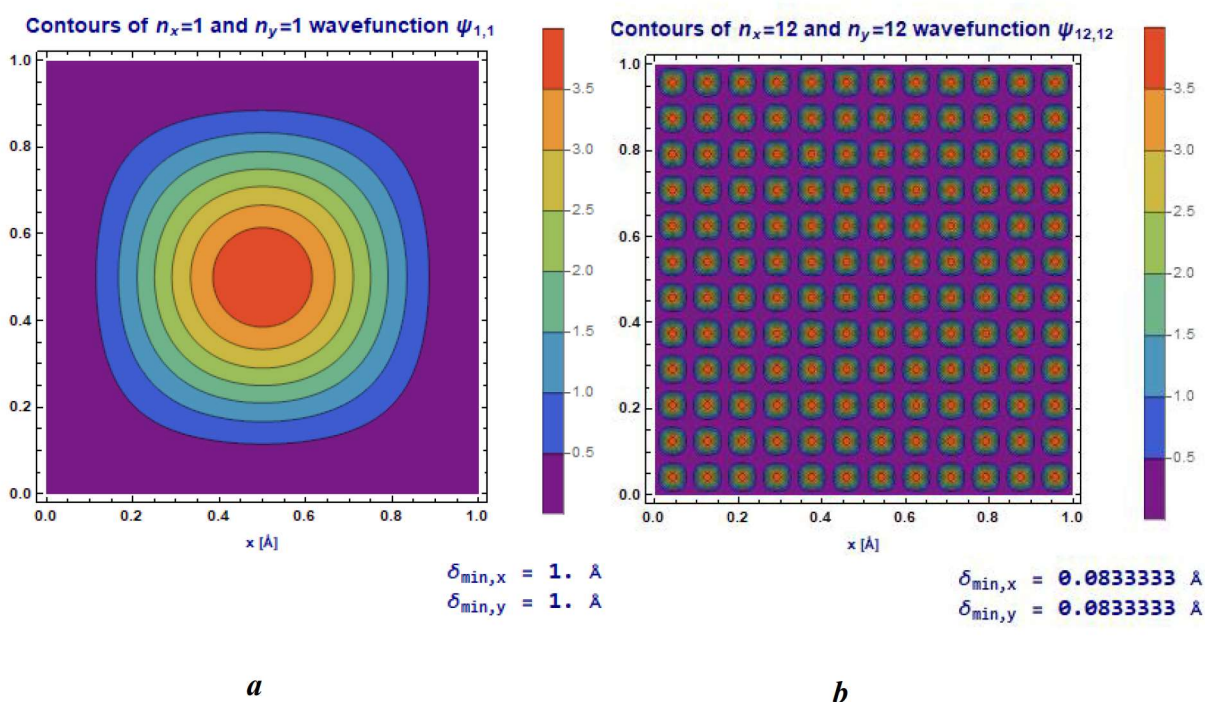


Slika 13. Gustoće vjerojatnosti kvantne čestice koja se nalazi unutar jame širine 1 \AA u stanju kvantnih brojeva $n_x=1$ i $n_y=2$.

3.2. Prikaz projekcije valne funkcije $\Psi_n(x, y)$ ili $\rho_n(x, y)$ na ravninu x-y

Drugi graf daje grafički prikaz projekcije valne funkcije na ravninu x-y. U našem slučaju one su vizualizirane linijama konstantnih vrijednosti $\Psi_n(x, y)$ ili $\rho_n(x, y)$ u dvodimenzionalnom sustavu. S desne strane toga grafa uočavamo skalu koja predstavlja vrijednosti $\Psi_n(x, y)$ ili $\rho_n(x, y)$, a ispod tog grafa uočavamo dvije vrijednosti koje predstavljaju udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti u smjeru x i smjeru y. Njih računamo prema formulama:

$$\delta_{\min,x} = \frac{a}{n} \quad \text{i} \quad \delta_{\min,y} = \frac{b}{n} \quad . \quad (39)$$



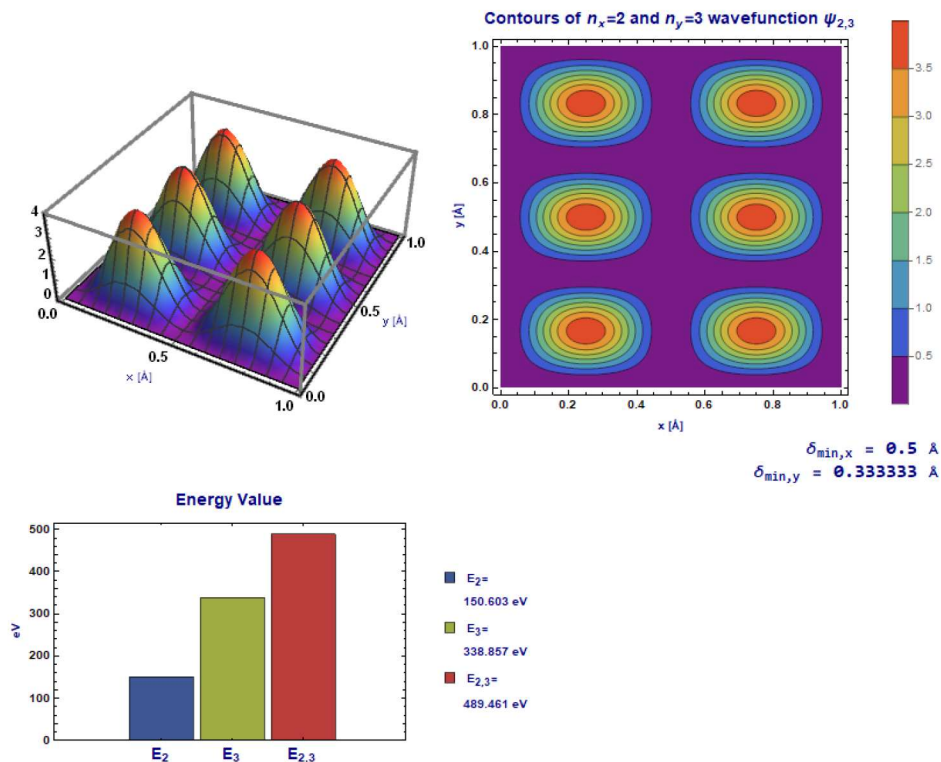
Slika 14. a) Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice koja se nalazi unutar jame širine 1 \AA u stanju opisanom kvantnim brojevima $n_x = 1$ i $n_y = 1$; minimalna udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti i u smjeru x i u smjeru y iznosi 1 \AA koja je dana ispod grafa **b)** Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice koja se nalazi unutar jame širine 1 \AA u stanju opisanom kvantnim brojevima $n_x = 12$ i $n_y = 12$; minimalna udaljenost između dva susjedna minimuma gustoće vjerojatnosti i u smjeru x i u smjeru y iznosi 0.083 \AA koja je dana ispod grafa.

Energija koja odgovara ovome slučaju dana je izrazom

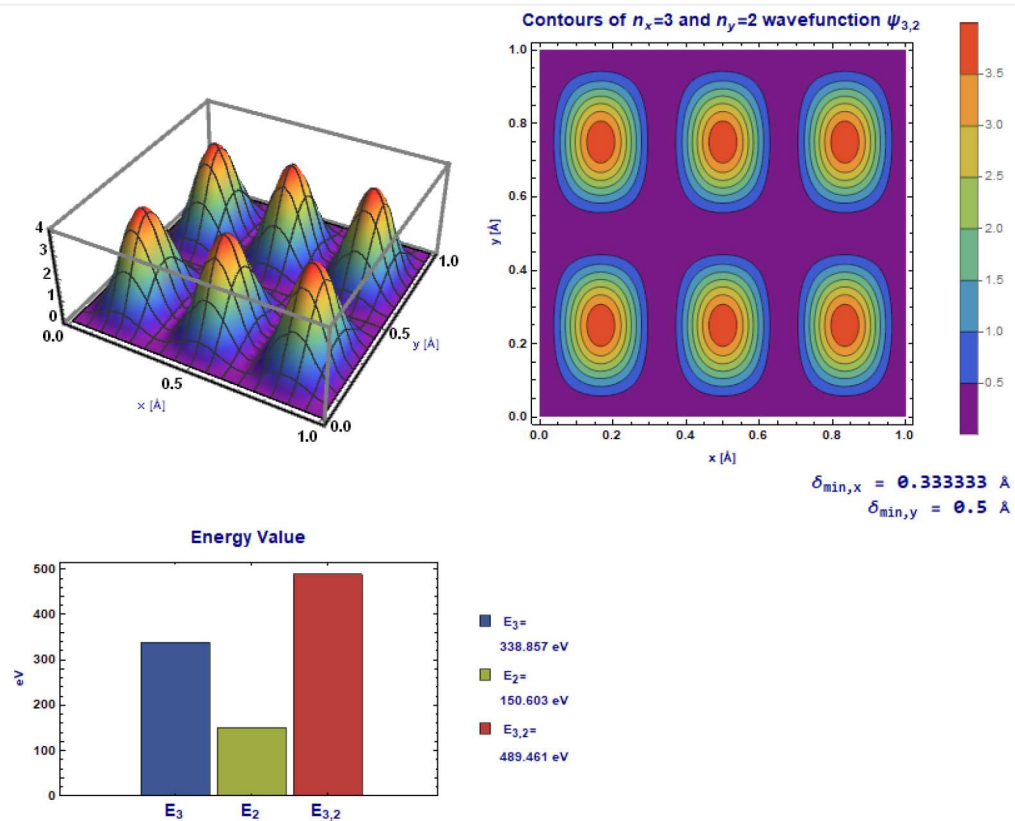
$$E_{n_x, n_y} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right) \quad (40)$$

Do formule (40) dolazimo tako što ćemo se pozvati na izraze (8) i (3).

$$E = E_{n_x} + E_{n_y} = \frac{\pi^2 n_x^2 \hbar^2}{2ma^2} + \frac{\pi^2 n_y^2 \hbar^2}{2mb^2} = \frac{\pi^2 \hbar^2}{2m} \left(\frac{n_x^2}{a^2} + \frac{n_y^2}{b^2} \right) \quad (41)$$



Slika 15. Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice koja se nalazi unutar jame širine 1 \AA u stanju opisanom kvantnim brojevima $n_x=2$ i $n_y=3$; Energija u x smjeru iznosi oko 150 eV , a u y smjeru oko 340 eV ; Ukupna energija je zbroj tih energija.



Slika 16. Gustoća vjerojatnosti kvantne čestice koja se nalazi unutar jame širine 1 \AA u stanju kvantnih brojeva $n_x=3$ i $n_y=2$; Energija u x smjeru iznosi oko 340 eV , a u y smjeru oko 150 eV ; Ukupna energija je zbroj tih energija.

Možemo primijetiti sa Slike 15 i Slike 16 da je ukupna energija kvantne čestice ista iako se nalazi u različitim stanjima. To zovemo degeneracija kvantnog stanja [3].

4. Programski kod za jednodimenzionalni slučaj

```

hbar:=((6.626*10-34)/(2 π)) (*reduced Planck's constant*)
const:=π2/(2 9.11*10-31*1.6*10-19)*1020 (*constant*)
Energy1[l_]:= (1/l)2 (hbar)2 const (*basic state energy*)
Energy2[a_,l_]:= (a/l)2 (hbar)2 const (*energy levels*)

ψ[x_,a_,l_]:=√(2/l) Sin[(a π x)/l] (*stationary states*)
ρ[x_,a_,l_]:=2/l Sin[(a π x)/l] Sin[(a π x)/l] (*probability density*)
stp[a_]:=2.5/a (* step by step levels *)

(*choices color background*)

i=1;
tab[text_pos_Integer,sel_Integer]:=Pane[text,ImageMargins->{-11,FrameMargins->12,ImageSize->Medium
,BaseStyle->If[pos===sel,{Background->Darker[Red,0.3],FontWeight->Bold,FontColor->White},{Background-
>White,FontWeight->Bold,FontColor->Darker[Red,0.3]}]]

(*plot stationary states*)
pp1:=Manipulate[Column[Row[Plot[ψ[x,a,l],{x,0,l},Prolog->{Lighter[Orange,0.2],Rectangle[{-0.15,-
2},{0,2}],Lighter[Orange,0.2],Rectangle[{l,-2},{l+0.15,2}],Inset[Style[Row[{"0"},Black,Bold,10],{-
0.06,0}],PlotRange->{{-0.15,2.5+0.15},{-2,2}},Frame->{{True,True},{True,True}},ImageSize-
>Medium,ImagePadding->40,PlotStyle->Blue,AspectRatio->Automatic,Axes->{True,False},FrameTicks-
>{{None,None},{All,None}},FrameStyle->Directive[Black,Bold,10],FrameLabel->{{Text[Style["V(x)->
∞",Darker[Red,0.3],10,Bold]]Rotate[Text[Style[" V(x)-> -∞",Darker[Red,0.3],10,Bold]],180
Degree],Text[Style["V(x)-> ∞",Darker[Red,0.3],10,Bold]] Rotate[Text[Style[" V(x)-> -
∞",Darker[Red,0.3],10,Bold]],180 Degree]},{Text[Style["Width[Å]",Darker[Red,0.3],10,Bold]],""}],
Graphics[{Lighter[Orange,0.2],Rectangle[{-181,0},{0,5550}],Lighter[Orange,
0.2],Rectangle[{3615,0},{3796,5550}],Black,Dashed,Line[{{1,1*Energy1[l]},{3614,1*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,4*Energy1[l]},{3614,4*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,9*Energy1[l]},{3614,9*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,16*Energy1[l]},{3614,16*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,25*Energy1[l]},{3614,25*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,36*Energy1[l]},{3614,36*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,49*Energy1[l]},{3614,49*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,64*Energy1[l]},{3614,64*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,81*Energy1[l]},{3614,81*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,100*Energy1[l]},{3614,100*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,121*Energy1[l]},{3614,121*Energy1[l]}],
Black,Dashed,Line[{{1,144*Energy1[l]},{3614,144*Energy1[l]}],Which[a==1,{Darker[Red,0.3],Thickness[0.02],Li
ne[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]}],Inset[Style[Row[{"E"a","="
,Energy2[a,l], " eV"}],Darker[Red,0.3],Bold,
12},{4355,Energy2[a,l]+50}],a==2,{Darker[Yellow,0.3],Thickness[0.02],Line[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]
}],Inset[Style[Row[{"E"a","="
,Energy2[a,l], " eV"}],Darker[Yellow,0.3],Bold,12},{4355,Energy2[a,l]}],a==3,
{Darker[Green,0.3],Thickness[0.02],Line[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]}],Inset[Style[Row[{"E"a","="
,Energy2[a,l], " eV"}],Darker[Green,0.3],Bold,12},{4355,Energy2[a,l]}],a==4,
{Darker[Blue,0.6],Thickness[0.02],Line[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]}],Inset[Style[Row[{"E"a","="
,Energy2[a,l], " eV"}],Darker[Blue,0.6],Bold,12},{4355,Energy2[a,l]}],a==5,
{Darker[Purple,0.3],Thickness[0.02],Line[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]}],Inset[Style[Row[{"E"a","="
,Energy2[a,l], " eV"}],Darker[Purple,0.3],Bold,12},{4355,Energy2[a,l]}],a==6,
{Darker[Pink,0.3],Thickness[0.02],Line[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]}],Inset[Style[Row[{"E"a","="
,Energy2[a,l], " eV"}],Darker[Pink,0.3],Bold,12},{4355,Energy2[a,l]}],a==7,
{Darker[Brown,0.3],Thickness[0.02],Line[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]}],Inset[Style[Row[{"E"a","="
,Energy2[a,l], " eV"}],Darker[Brown,0.3],Bold,12},{4355,Energy2[a,l]}],a==8,
{Darker[Gray,0.3],Thickness[0.02],Line[{{30,Energy2[a,l]},{3580,Energy2[a,l]}],Inset[Style[Row[{"E"a","="

```



```

,1/4, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==5, {Darker[Purple,0.3],Thickness[0.015],Line[{{0,0},{2.5,
stp[a]}]},PointSize->Large,Black, Point[1,1/5],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/5, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==6, {Darker[Pink,0.3],Thickness[0.015],Line[{{0,0},{2.5,
stp[a]}]},PointSize->Large,Black, Point[1,1/6],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/6, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==7, {Darker[Brown,0.3],Thickness[0.015],Line[{{0,0},{2.5,
stp[a]}]},PointSize->Large,Black, Point[1,1/7],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/7, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==8, {Darker[Gray,0.3],Thickness[0.015],Line[{{0,0},{2.5,
stp[a]}]},PointSize->Large,Black, Point[1,1/8],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/8, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==9, {Purple,Thickness[0.015],Line[{{0,0},{2.5, stp[a]}]},PointSize-
>Large,Black, Point[1,1/9],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/9, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==10, {Green,Thickness[0.02],Line[{{0,0},{2.5, stp[a]}]},PointSize-
>Large,Black, Point[1,1/10],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/10, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==11, {Red,Thickness[0.015],Line[{{0,0},{2.5, stp[a]}]},PointSize-
>Large,Black, Point[1,1/11],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/11, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}}, a==12, {Blue,Thickness[0.015],Line[{{0,0},{2.5, stp[a]}]},PointSize-
>Large,Black, Point[1,1/12],Inset[Style[Row[{"δmin", "(" , ")" , "="
,1/12, "Å"}, Black, Bold, 12},{0.8,2.2}]}], PlotRange->{{0,2.7},{0,2.7}}, ImageSize-
>Medium,ImagePadding->40,Frame->{{True,True},{True,True}},FrameLabel-
>{{Text[Style["δmin[Å]",Darker[Red,0.3],10,Bold]],
""},{Text[Style["Width[Å]",Darker[Red,0.3],10,Bold]],Text[Style[" Minimum distance between two adjacent
points ",Darker[Red,0.3],Bold,14]}]}, RotateLabel->True,FrameStyle->Directive[Black,Bold,10],FrameTicks-
>{{All,None},{All,None}}},Center],{1,1.0,"Potential wall width [Å]",1.0,2.5,0.01,Appearance-> "Labeled"},
{{a,1,"Quantum number, n",1,12,1, Appearance-> "Labeled"},ControlPlacement->Top]
TabView[{Dynamic@tab["Stationary states",1,i]->pp1,Dynamic@tab["Probability density",2,i]-
>pp2},Dynamic@i,Background->White]

```

5. Programski kod za dvodimenzionalni slučaj

```

hbar:= ((6.626*10-34)/(2 π)) (*reduced Planck's constant*)
const:= π2/(2 9.11*10-31*1.6*10-19)*1020 (*constant*)
ζ[x_,y_,nx_,ny_,ax_,by_]:=2√ax by Sin[(nx π x)/ax] Sin[(ny π y)/by] (*stationary states*)
η[x_,y_,nx_,ny_,ax_,by_]:=4/(ax by) Sin[(nx π x)/ax]Sin[(nx π x)/ax]Sin[(ny π y)/by]Sin[(ny π
y)/by](*probability density*)
Xenergy[nx_,ax_]:= (nx/ax)2 (hbar)2 const (*energy levels for x-axis*)
Yenergy[ny_,by_]:= (ny/by)2 (hbar)2 const (*energy levels for y-axis*)
engxy[nx_,ny_,ax_,by_]:= ((nx/ax)2 + (ny/by)2) (hbar)2 const (*energy levels for x-axis and y-axis*)
Xbenergy[ax_]:= (1/ax)2 (hbar)2 const (*basic state energy for x-axis*)
Ybenergy[by_]:= (1/by)2 (hbar)2 const (*basic state energy for y-axis*)

```

(*choices color background*)

i=1;

```

tab[text_pos_Integer,sel_Integer]:=Pane[text,ImageMargins->-11,FrameMargins->12,ImageSize-
>Medium,BaseStyle->If[pos===sel,{Background->Darker[Darker[Blue,0.5],0.3],FontWeight->Bold,
FontColor->White},{Background->White,FontWeight->Bold,FontColor->Darker[Blue,0.5]}]]

```

(*plot stationary states*)

```

pp3:=Manipulate[Column[{Row[{Plot3D[ $\zeta[x,y,n_x,n_y,ax,by]$ , {x,0,ax},{y,0,by}, PlotRange->Full,
ColorFunction->"BlueGreenYellow",AxesStyle->Directive[Black,Bold,12],BoxStyle->Directive[Thick,
Gray, Thickness[0.01]],AxesLabel->{Text[Style["x [ $\text{\AA}$ ]",Darker[Blue,0.5],10,Bold]],Text[Style["y
 $\text{\AA}$ "],Darker[Blue,0.5],10,Bold]], Null}, ImageSize->Medium, ImageMargins->10, ImagePadding-
>20],Grid[{{ContourPlot[ $\zeta[x,y,n_x,n_y,ax,by]$ ,{x,0,ax},{y,0,by},PlotLegends->Automatic, ColorFunction-
>"BlueGreenYellow",Frame->True,ImageSize->Medium,FrameStyle-
>Directive[Black,Bold,10],FrameLabel->{{Text[Style["y [ $\text{\AA}$ ]",Darker[Blue,0.5],10,Bold]], ""
},{Text[Style["x [ $\text{\AA}$ ]",Darker[Blue,0.5],10,Bold]],Style[Row[{"Contours of ", "nx", "=", nx, " and ", "ny"
,"=", ny, " wavefunction ", " $\psi_{n_x,n_y}$ "], Darker[Blue,0.5], Bold, 14}}}],Alignment-
>Right}],Row[{BarChart[{{Xenergy[nx,ax],Yenergy[ny,by],engxy[nx,ny,ax,by]}],ChartLabels-
>{Style[Row[{"E"nx }], Darker[Blue,0.5], Bold, 14],Style[Row[{"E"ny }], Darker[Blue,0.5], Bold,
14],Style[Row[{"E"nx,ny }], Darker[Blue,0.5], Bold, 14}],ChartStyle->"DarkRainbow",Frame-
>True,FrameStyle->Directive[Black,Bold,10],ChartLegends->{Style[Row[{" E"nx ,"=
",Xenergy[nx,ax], " eV" }], Darker[Blue,0.5], Bold, 10],Style[Row[{" E"ny ,"=
",Yenergy[ny,by], " eV" }], Darker[Blue,0.5], Bold, 10],Style[Row[{" E"nx,ny ,"=
",engxy[nx,ny,ax,by], " eV" }], Darker[Blue,0.5], Bold, 10}],FrameLabel-
>{{Text[Style["eV",Darker[Blue,0.5],10,Bold]],"",{"",Text[Style["Energy
Value",Darker[Blue,0.5],14,Bold]]}],ImageSize->Medium}}],{{ax,1.0,"Potential wall width in the
direction of the x-axis [ $\text{\AA}$ "]},1.0,2.0,0.025,Appearance->"Labeled"},{{by,1.0,"Potential wall width in
the direction of the y-axis [ $\text{\AA}$ "]},1.0,2.0,0.025,Appearance->"Labeled"},{{nx,1,"Quantum number,
nx"},1,12,1, Appearance->"Labeled"},{{ny,1,"Quantum number, ny"},1,12,1, Appearance->
"Labeled"}],ControlPlacement->Top]

```

(*plot probability density*)

```

pp4:=Manipulate[Column[{Row[{Plot3D[ $\eta[x,y,n_x,n_y,ax,by]$ , {x,0,ax},{y,0,by}, PlotRange->Full,
ColorFunction->"Rainbow",AxesStyle->Directive[Black,Bold,12],BoxStyle->Directive[Thick, Gray,
Thickness[0.01]],AxesLabel->{Text[Style["x [ $\text{\AA}$ ]",Darker[Blue,0.5],10,Bold]],Text[Style["y
 $\text{\AA}$ "],Darker[Blue,0.5],10,Bold]], Null}, ImageSize->Medium, ImageMargins->10, ImagePadding-
>20],Grid[{{ContourPlot[ $\eta[x,y,n_x,n_y,ax,by]$ ,{x,0,ax},{y,0,by},PlotLegends->Automatic, ColorFunction-
>"Rainbow",Frame->True,ImageSize->Medium,FrameStyle->Directive[Black,Bold,10],FrameLabel-
>{{Text[Style["y [ $\text{\AA}$ ]",Darker[Blue,0.5],10,Bold]], "" },{Text[Style["x
 $\text{\AA}$ "],Darker[Blue,0.5],10,Bold]],Style[Row[{"Contours of ", "nx", "=", nx, " and ", "ny", "=", ny, "
wavefunction ", " $\psi_{n_x,n_y}$ "], Darker[Blue,0.5], Bold, 14}}}],Style[Row[{" $\delta_{min,x}$  = ", ax/nx, "  $\text{\AA}$ "}],
Darker[Blue,0.5], Bold, 16}],Style[Row[{" $\delta_{min,y}$  = ", by/ny, "  $\text{\AA}$ "}], Darker[Blue,0.5], Bold,
16}],Alignment-
>Right}],Row[{BarChart[{{Xenergy[nx,ax],Yenergy[ny,by],engxy[nx,ny,ax,by]}],ChartLabels-
>{Style[Row[{"E"nx }], Darker[Blue,0.5], Bold, 14],Style[Row[{"E"ny }], Darker[Blue,0.5], Bold,
14],Style[Row[{"E"nx,ny }], Darker[Blue,0.5], Bold, 14}],ChartStyle->"DarkRainbow",Frame-
>True,FrameStyle->Directive[Black,Bold,10],ChartLegends->{Style[Row[{" E"nx ,"=
",Xenergy[nx,ax], " eV" }], Darker[Blue,0.5], Bold, 10],Style[Row[{" E"ny ,"=
",Yenergy[ny,by], " eV" }], Darker[Blue,0.5], Bold, 10],Style[Row[{" E"nx,ny ,"=
",engxy[nx,ny,ax,by], " eV" }], Darker[Blue,0.5], Bold, 10}],FrameLabel-
>{{Text[Style["eV",Darker[Blue,0.5],10,Bold]],"",{"",Text[Style["Energy
Value",Darker[Blue,0.5],14,Bold]]}],ImageSize->Medium}}],{{ax,1.0,"Potential wall width in the
direction of the x-axis [ $\text{\AA}$ "]},1.0,2.0,0.025,Appearance->"Labeled"},{{by,1.0,"Potential wall width in
the direction of the y-axis [ $\text{\AA}$ "]},1.0,2.0,0.025,Appearance->"Labeled"},{{nx,1,"Quantum number,
nx"},1,12,1, Appearance->"Labeled"},{{ny,1,"Quantum number, ny"},1,12,1, Appearance->
"Labeled"}],ControlPlacement->Top]
TabView[{{Dynamic@tab["Stationary states",1,i]->pp3,Dynamic@tab["Probability density",2,i]-
>pp4},Dynamic@i,Background->White]

```

6. Zaključak

Poznavanjem fundamentalnih pojmova iz kvantne mehanike kreirali smo aplete koje će studenti moći slobodno koristiti u svrhu razumijevanja gradiva koje je sadržano u kolegiju Uvod u kvantu mehaniku. Također, poznavanjem osnovnih naredbi i instrukcija u Wolframovome matematičkome paketu studenti će sami moći kreirati aplete koji će im pomoći u daljnjem obrazovanju. Svrha kreiranja apleta je prvenstveno edukativne naravi. Pošto kvantna matematika rabi matematički formalizam, brojim studentima je teško vizualizirati rješenja kvantno-mehaničkih jednadžbi te statistički obraditi dobivene rezultati što će sada moći uz pomoć kreiranih apleta.

7. Literatura

- [1] David McMahon, Quantum mehanic – A selif-teaching guide, Demystified
- [2] George B. Arfken, Hans J. Weber, Frank E. Harris, Mathematical methods for physicists, (VII. Izdanje)
- [3] David J.Griffiths, Introduction to Quantum Mechanics, (II. Izdanje)
- [4] Richard L. Liboff , Introductory Quantum Mechanics (1980.)
- [5] B.D. Demidovič, Zadaci i riješeni primjeri iz više matematike s primjenom na tehničke nauke (V. izdanje)
- [6] I.S. Bronštejn, K.A. Semendjajev, Matematički priručnik za inženjere i studente (Zagreb, 1964.)

8. Životopis

Viktorija Nađ rođena je 3. lipnja 1994. u Osijeku, u Republici Hrvatskoj. Pohađala je III. gimnaziju u Osijeku koju je završila 2013. godine kada je upisala preddiplomski studij fizike na Odjelu za fiziku, Sveučilišta Josipa Jurja Strossmayera u Osijeku. Diplomski studij nastavlja na istom Sveučilištu.