Proceedings of International Educators Conference
Hosted online from Rome, Italy.
Date: 25th April, 2023
ISSN: 2835-396X **Website:** econferenceseries.com

КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЧАСТИЦЫ В ДВУМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙЯМЕ

Э. К. Мухтаров,
С. Сайфутдинова
(магистрант) Андижанский государственный университет
Тел: +99890 258 27 06 erkinmuxtarov@yahoo.com

Уравнение Шредингера имеет широкий диапазон применимости, начиная от атомных и субатомных доменов до конденсированным состоянием материи. Описание многих микроскопических систем возможно только в рамках квантовой механики. Данный подход находит применение не только в идеализированных физических системах.

Задача математического описания реальных систем достаточна сложна. Поэтому ограничимся простейшими случаями. Рассмотрим двумерную прямоугольную потенциальную яму с бесконечными стенками и поместим в туда пробную частицу с массой m. Пусть задана потенциальная энергия как функция координат от x, y. Основываясь на уравнении Шредингера, будем исследовать состояние частицы в потенциальной яме.

В квантовой механике движение нерелятивистской частицы в потенциальном поле описывается уравнением Шредингера

$$i\hbar\frac{\partial\Psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\Psi + U(x,y)\Psi \qquad (1)$$

здесь m –масса частицы, $U(x,y)$ –потенциальная энергия, $\Psi -$ волновая функция.

Стационарное уравнение Шредингера описывает состояния системы(в которых энергия принимает определенные значения):

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi + [E - U(x,y)]\psi = 0 \qquad (2)$$

Решения этого уравнения ψ_n называются собственными функциями системы, а соответствующие значения параметра E_n–собственными значениями энергии. При финитном движении частиц (в потенциальной яме) собственные значения E_n образуют дискретный спектр. Гамильтониан является эрмитовым. Поэтому его собственные значения E_n оказываются действительными

ISSN: 2835-396X **Website:** econferenceseries.com

числами, а матрица является эрмитовой матрицей. Уравнение (2)– дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных, его точные решения известны лишь для простейших симметричных потенциалов $U(x,y)$. Во многих случаях приходится прибегать к численным методам расчета [1-3].

Приведем решение уравнения Шредингера для простейшего случая двумерной прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками:

$$U(x,y)=\begin{cases}0, & M\in\Omega\\ \infty, & M\notin\Omega\end{cases}\qquad \Omega=\begin{cases}0<x<a\\ 0<y<b\end{cases}\qquad M(x,y)$$

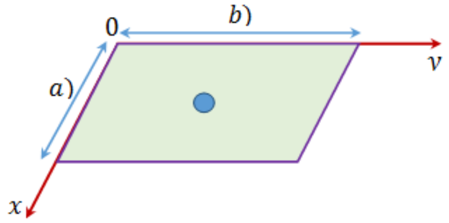

Рис.1. Общий вид двумерной потенциальной ямы

Исходя из симметричности задачи, можно представить волновую функцию в виде произведения функций одной переменной, тогда получаем:

$$\frac{d^2\psi_x}{dx^2}+k_x^2\psi_x=0 \qquad (3)$$

$$\psi_{x,n}=C_x\sin k_{x,n},\ k_{x,n}=\frac{\pi n}{a}x \qquad (4)$$

Искомая волновая функция находится следующим образом:

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y)=C\sin k_{x,n_x}\sin k_{y,n_y} \qquad (5)$$

$$k_{x,n_x}=\frac{\pi n_x}{a}x,\ k_{y,n_y}=\frac{\pi n_y}{b}y,\ n_x,n_y=1,2,3...$$

Собственные значения энергии имеет вид:

$$E_{n_x,n_y}=\frac{\hbar^2}{2m}[k^2_{x,n_x}+k^2_{y,n_y}];\ n_x,n_y=1,2,3... \qquad (6)$$

Для моделирования частиц в двумерной потенциальнойя ме разработана программа на языке Visual Basic [4,5].

ISSN: 2835-396X **Website:** econferenceseries.com

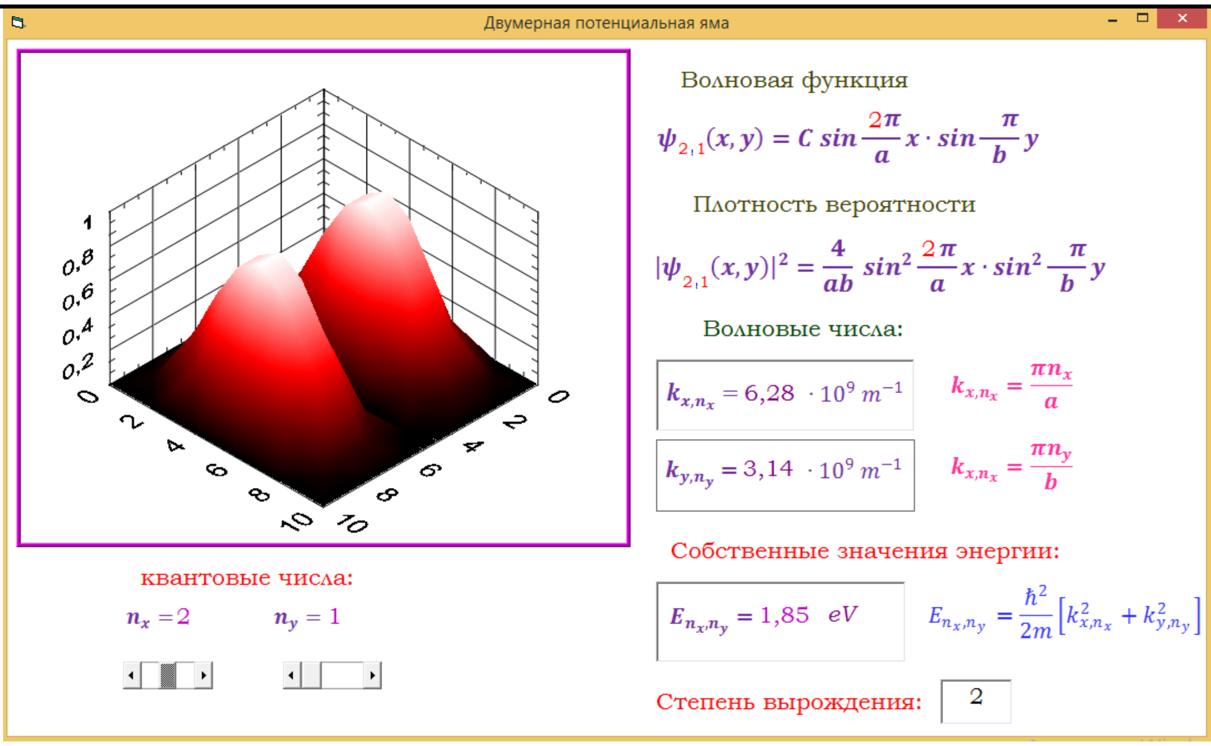

Рис. 2. Основное окно программы при выбранных параметрах задачи.

Программа может работать в двух режимах: ручном и автоматическом. В ручном режиме пользователь самостоятельно задает значение квантового числа, параметр потенциальной ямы. И на их основе программа строит графики волновой функции и плотности вероятности соответствующему значению энергии E.

Имеются специальные поля для вывода волнового числа и собственных значений энергии, соответствующих квантовым числам частиц и размерам потенциальной ямы. Здесь имеется поля, показывающее вырождение волной функции [6].

Программа позволяет изменять квантовые числа в двумерном пространстве и определить плотность вероятности обнаружение частиц, а также значение энергии частиц для разных значений квантовых чисел. Такие программы дает возможность визуализировать квантовые явления и помогают глубокому пониманию происходящих процессов. Данную программу можно использовать при преподавании теоретического материала по квантовой механике в качестве демонстративного источника.

На основе уравнения Шрёдингера с помощью программы исследовано состояние частицы, находящейся в двумерном потенциале. Был продемонстрирован быстрый и точный расчет этих вопросов. Наглядно показаны величины, рассчитывающие состояние частицы, и сформирован новый подход к изучению подобных задач в теоретической механике.

ЛИТЕРАТУРА:

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. Том III. Квантовая механика. –М.: Физматлит, 2021. –С.804.
2. Dae Mann Kim. Introduction Quantum Mechanics for Applied Nanotechno–logy. Wiley–VCH Verlag GmbH & Co, 2015.–P. 190.
3. GriffithsD.J., Introductionto Quantum Mechanics, 2nd ed. Pearson Education, Inc., 2005. –P.404.
4. КорольВ.И. Visual Basic 6.0. –М.:Кудиц–образ, 2010.–С.448.
5. Philiip Conrod. Learn Visual Basic. Kidv are Software, 2017.–P.556.
6. Мухтаров Э.К. Электронный информационно-образовательный ресурс «Двумерная потенциальная яма». Программный продукт для ЭВМ, №DGU 21510 ,09.01.2023 г.