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

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ КВАНТОВОГО ОСЦИЛЛЯТОРА

Э. К. Мухтаров
Андижанский государственный университет
Тел: +99890 258 27 06 E-mail: erkinmuxtarov@yahoo.com

Специфика изучения квантово-механических явлений и понятийного аппарата квантовой теории диктует необходимость использования имитационно-моделирующего программного обеспечения в процессе обучения основам квантовой механики. Особенности использования имитационно-моделирующего программного обеспечения в процессе обучения основам квантовой механики, прежде всего, характеризуются самой областью изучения, своеобразием и особенностями квантовой теории.

Имитационно-моделирующее программное обеспечение играет большую роль в фундаментальных исследованиях. Одной из причин расширения области применения в научных исследованиях моделирования, и численного эксперимента в частности, является быстрое развитие компьютерной техники и соответственно повышение возможностей используемого программного обеспечения. Причина использования этой модели в квантовой механике заключается в том, что, решением уравнение Шредингера, можно объяснить излучение абсолютно черного тела, теплоемкость твердых тел и многоатомных молекул и их спектры [1-3].

В квантовой механике линейный гармонический осциллятор называется квантовым осциллятором. Примером квантового осциллятора может служить атом, молекула и вообще любая микрочастица, колеблющаяся в узле кристаллической решетки.

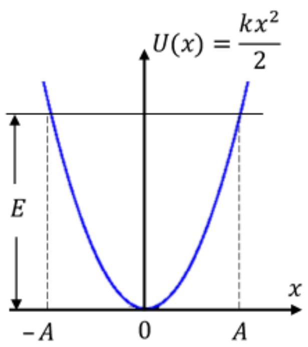

Рис.1 Общий вид графика осциллятора

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

Рассмотрим одномерный гармонический осциллятор, совершающий колебания вдоль оси x под действием квазиупругой силы $F=-kx$. Линейным гармоническим осциллятором называется система, потенциальная энергия которой квадратично зависит от координаты:

$$U(x)=\frac{m\omega_0^2x^2}{2} \qquad (1)$$

Здесь $m-$ масса частицы, а ω_0 $-$собственная частота осциллятора. На рис.1 зависимость (1) изображена графически. Кривая $U(x)$ своей крутизной и бесконечно большой высотой напоминает потенциальную яму. В случае потенциальной ямы, либо потенциального барьера, такая возможность полностью исключена, так как там потенциал меняется скачком в одной точке. Перейдём к количественному решению задачи.

Напишем одномерное уравнение Шредингера с потенциальной энергией (1):

$$\psi''(x)+\left(\frac{2mE}{\hbar^2}-\frac{m^2\omega_0^2}{\hbar^2}x^2\right)\psi(x)=0 \qquad (2)$$

У него нет естественных граничных условий. Дискретные уровни энергии получаются как следствие ограниченности волновой функции.

Другая важная особенность энергетического спектра соответствует значению квантового числа

$$E_0=\frac{1}{2}\hbar\omega_0 \qquad (3)$$

Наименьшее возможное значение энергии осциллятора равное E_0, отлично от нуля. Следовательно, неопределённость координаты $\Delta x\to\infty$, что противоречит факту нахождения частицы в яме. Экспериментально нулевая энергия E_0 наблюдается при рассеянии света кристаллом, находящимся при температуре, близкой к абсолютному нулю. При абсолютном нуле кристалл находится в основном энергетическом состоянии. Атомы совершают нулевые колебания, которые вызывают рассеяние света.

Полученные аналитическим путем результаты решения дифференциальной уравнений (3), представляются в виде собственных функций:

$$\psi_n(\xi) = exp\left(-\frac{\xi^2}{2}\right)H_n(\xi), n = 0,1,2,.... \qquad (4)$$

здесь $H_n(\xi)$ - полиномы Чебышева-Эрмита n–го порядка. Его можно представить

ISSN: 2835-396X

$$H_n(\xi) = \frac{(-1)^n}{\sqrt{2^n n! \sqrt{\pi}}} e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n}\left(e^{-\xi^2}\right) \qquad (5)$$

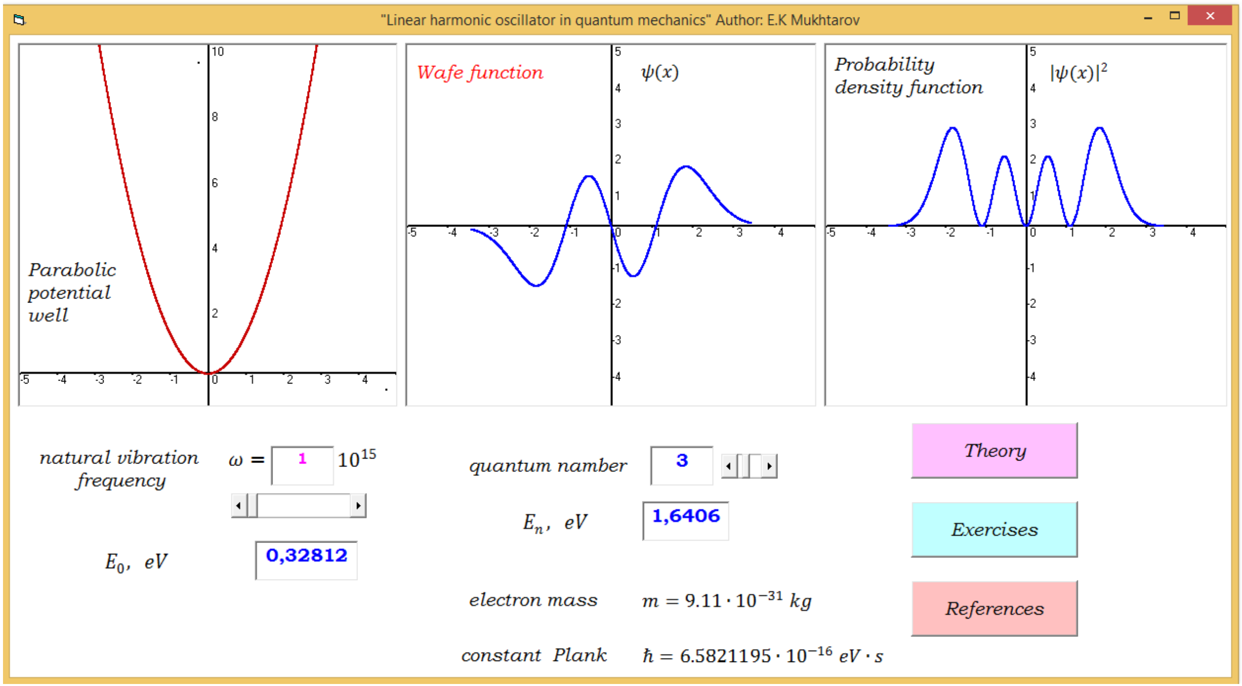

рис 2. Обший вид работы программы.

Программа также производит построение графика распределения плотности вероятности для классического осциллятора.

Достоинствами данных программ являются: высокая наглядность представляемого материала, его доступность и интерактивность, большая дифференциация и индивидуализация процесса образования, а также возможность исследовать многопараметрические задачи, используемые в атомной и ядерной физике.

Частица находится в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками. Координаты x, y частицы лежат в пределах $0 < x < a,\ 0 < y < b,$ где a и b – стороны ямы (нм). Найти вероятность нахождения частицы в области $0 < x < a/2,\ b/2 < y < b\ (b = 2a)$, при квантовых числах $n_x = 2,\ n_y = 2.$

Вероятность нахождения частицы в двумерном пространстве определяется выражением:

$$\omega = A^2 \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \left|\psi_{n_x, n_y}(x, y)\right|^2 dxdy \qquad (6)$$

Если в данную формулу вставить выражение волновой функции, получаем следующую формулу:

$$\omega = \frac{4}{ab}\int_{x_1}^{x_2}\int_{y_1}^{y_2} \sin^2\left(\frac{\pi n_x}{a}x\right)\cdot \sin^2\left(\frac{\pi n_y}{b}y\right)dxdy \qquad (7)$$

Вычислив определенный интеграл получим:

$$\omega_1 = \frac{4}{ab}\int_0^{a/2} \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}x\right)dx\cdot\int_{b/2}^{b} \sin^2\left(\frac{2\pi}{a}y\right)dy = 0{,}25.$$

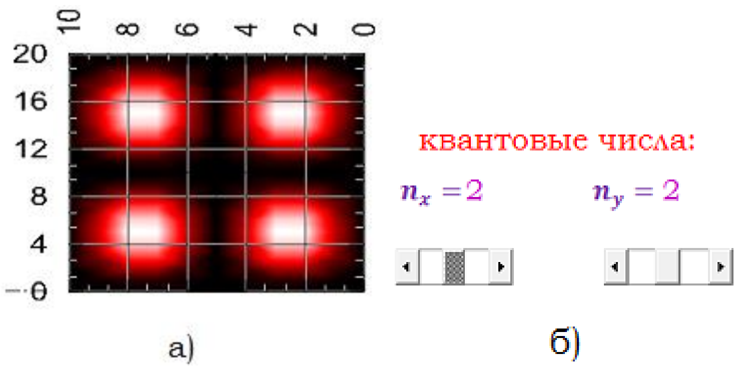

Рис.3.Общий вид результатов вычисления для заданных условий.
а–график плотности вероятности в плоскости xOy; б–квантовые числа;

По симметрии вероятность нахождения частицы в областях $0 < x < a/2$ и $0 < y < b/2$; $a/2 < x < a$ и $b/2 < y < b$; $a/2 < x < a$ и $b/2 < y < b$(рис.3) имеет значение соответственно $\omega_2 = 25\%$, $\omega_3 = 25\%$, $\omega_4 = 25\%$. Тогда вероятность нахождения частицы в областях $0 < x < a$, $0 < y < b$ в двумерной прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими стенками принимает вид:

$$\omega_1 + \omega_2 + \omega_3 + \omega_4 = 1$$

Это удовлетворяет условию конечности волновой функции [4].

Приведенные выше примеры показывают правильность созданной программы и могут быть использованы для обучения двумерной потенциальной ямы в квантовой механике.

ЛИТЕРАТУРА:

1.A. Capri. Problems and Solutions in Non-relativistic Quantum Mechanics, World Scientific, 2001. –P.520.

2.K.Tamvakis. Problems and solutions in quantum mechanics. New York, Cambridge University Press, 2005. –P. 334.

3.A. Capri. Problems and Solutions in Non-relativistic Quantum Mechanics, World Scientific, 2001. –P.520.

4.Мухтаров Э.К. Электронный информационно-образовательный ресурс «Линейный гармонический осциллятор в квантовой механике». Программный продукт для ЭВМ, №DGU 12888,03.11.2021 г.