PEDAGOGIKA

UDK: 533.95:539.17 **DOI: 10.56292/SJFSU/vol29_iss3/a41**

МОДЕЛИРОВАНИЕ КВАНТОВОГО СОСТОЯНИЕ ЧАСТИЦЫ В ДВУМЕРНОЙ ПОТЕНЦИАЛЬНОЙ ЯМЕ

IKKI O‘LCHAMLI POTENSIAL O‘RADAGI ZARRACHANING KVANT HOLATINI MODELLASHTIRISH

SIMULATION OF THE QUANTUM STATE OF A PARTICLE IN A TWO-DIMENSIONAL POTENTIAL WELL

Мухтаров Эркин Кобилжонович[1]

[1]**Мухтаров Эркин Кобилжонович** – Андижанский государственный университет, и.о.доцент кафедры физики

Annotatsiya

Maqolada ikki o‘lchovli potensial o‘radagi zarrachaning kvant holati ko‘rib chiqiladi. Potensial oradagi zarrachaning kvant sonlarini va o‘raning o‘lchamlarini o‘zgartirish orqali zarrachaning ehtimollik zichligi grafiklarini virtual kuzatish imkonini beruvchi obyektga yo‘naltirilgan dasturlash tilida vizualizasiya qilish uchun dastur yaratilgan.

Аннотация

В статье рассматривается квантовое состояние частицы в двумерной потенциальной яме. Создана программа симуляции на объектно-ориентированном языке программирования, которая позволяет визуально наблюдать графики плотности вероятности частиц за счет изменения квантовых чисел частиц в потенциальной яме и размеров ямы.

Abstract

The article deals with the animation of a particle in a two-dimensional potential well. The program was created by the author in an object-oriented programming language, and while the program is running, one can visually observe the particle probability density graph by changing the quantum numbers of particles in the potential well and the size of the well.

Kalit so‘zlar: *Shredinger tenglamasi, to‘lqin funksiyasi, ikki o‘lchovli potensial o‘ra, ehtimollik zichligi, kompyuterda modellashtirish.*

Ключевые слова: *уравнение Шредингера, волновая функция, двумерная потенциальная яма, плотность вероятности, компьютерное моделирование.*

Key words: *Schrodinger equation, wave function, two-dimensional potential well, probability density, computer simulation.*

ВВЕДЕНИЕ

Описание многих микроскопических систем возможно только в рамках квантовой механики. Данный подход находит применение не только в идеализированных физических системах. При этом аналитическое решение соответствующих задач встречается достаточно редко. Практическое значение этой области науки велико: основанное на компьютерных вычислениях распознавание активных центров молекул и объяснение их функций позволяют создавать новые материалы.

Целью данной статьи является изучение поведения частицы в визуально созданной потенциальной яме с заданными условиями.

ЛИТЕРАТУРА И МЕТОД

Уравнение Шредингера имеет широкий диапазон применимости, начиная от атомных и субатомных доменов до конденсированным состоянием материи [1,2].

Поведения частицы рассматриваются в данном случае с позиции учета энергии, спина и других параметров.

Задача математического описания реальных систем достаточна сложна. 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 [2,3,4,5].

Как известно, в квантовой механике движение нерелятивистской частицы в потенциальном поле описывается уравнением Шредингера в следующим виде:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi \qquad (1)$$

здесь $\hat{H}$ –гамильтониан, E –полная энергия частицы, Ψ – волновая функция.
Стационарное уравнение Шредингера описывает состояния системы:

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

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 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 [5,6].

Приведем решение уравнения Шредингера для простейшего случая двумерной прямоугольной ямы с бесконечно высокими стенками [7,8,9]:

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

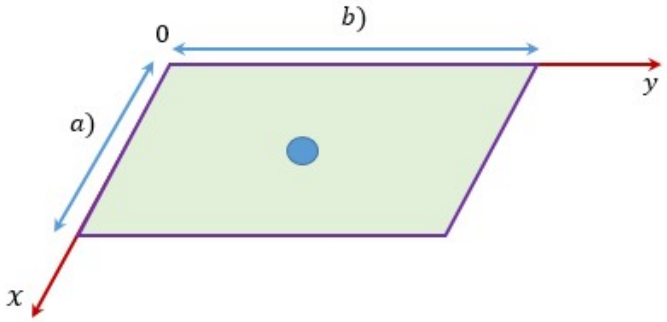


Рис. 1. Общий вид двумерной потенциальной ямы.

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

$$\psi(x,y) = \psi_x(x) \cdot \psi_y(y) \qquad (4)$$

Тогда уравнение (2) принимает вид:

$$\frac{d^2\psi_x}{dx^2} + k_x^2\psi_x = 0 \qquad (5)$$

Аналогично можно принять и для ψ_y. С учетом граничных условий $\psi_x(0) = 0, \psi_x(a) = 0,$ решение (5) можно записать как

$$\psi_{x,n} = C_x \sin k_{x,n}, \quad k_{x,n} = \frac{\pi n}{a}x \qquad (6)$$

Искомая волновая функция находится следующим образом:

$$\psi_{n_1,n_2}(x,y) = C \sin k_{x,n_x} \sin k_{y,n_y} \qquad (7)$$

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

Собственные значения энергии имеет вид:

$$E_{n_x,n_y} = \frac{\hbar^2}{2m}[k^2_{x,n_x} + k^2_{y,n_y}]; \quad n_x, n_y = 1,2,3... \qquad (8)$$

Будем использовать это решение для проверки корректности работы программы.

РЕЗУЛЬТАТЫ

Для моделирования частиц в двумерной потенциальной яме разработана программа на языке Visual Basic с подключением соответствующих библиотек, способных к симуляции поведения квантовых частиц [10,11].

1. 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 $n_x = 2, \; n_y = 2$ [12,13]

Вероятность нахождения частицы в двумерном пространстве определяется выражением:

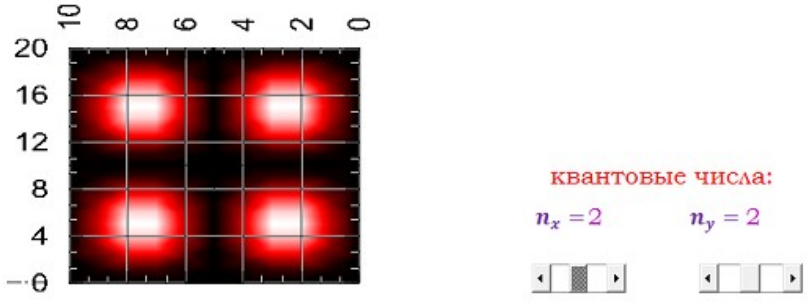
$$\omega = A^2 \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \left|\psi_{n_x,n_y}(x,y)\right|^2 dxdy \qquad (9)$$

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

$$\omega = \frac{4}{ab} \int_{x_1}^{x_2} \int_{y_1}^{y_2} \sin^2\left(\frac{\pi n_x}{a} x\right) \cdot \sin^2\left(\frac{\pi n_y}{b} y\right) dxdy \qquad (10)$$

Вычислив определенный интеграл получим:

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



а) б)

Рис.2. 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.2) [11] 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.

2. Определить точки, в которых плотность вероятности нахождения частицы в квадратной потенциальной яме максимально, для случая, когда квантовые числа частицы равны $n_x = 1$ и $n_y = 3$ [13,14].

Плотность вероятности нахождения частицы в двумерном потенциалном яме определяется выражением [4]:

$$\rho_{n_x,n_y}(x,y) = \left|\psi_{n_x,n_y}(x,y)\right|^2 = C\sin^2\left(\frac{\pi n_x}{a}x\right)\sin^2\left(\frac{\pi n_y}{b}y\right) \quad (11)$$

здесь С–нормировочный коэффициент, для двумерной потенциальной ямы $C = 4/ab$ [13], по условию задачи $a = b$.

Для того, чтобы найти максимальное значение функции $\rho_{1,3}(x,y)$, возьмем сначала производную данной функции по x, а затем по y, и после приравняем их к нулю:

$$\frac{\partial\rho_{1,3}(x,y)}{\partial x} = \frac{8\pi}{a^3}\sin\left(\frac{\pi}{a}x\right)\cdot\cos\left(\frac{\pi}{a}x\right)\cdot\sin^2\left(\frac{3\pi}{a}y\right) = 0 \quad (12)$$

$$\frac{\partial\rho_{1,3}(x,y)}{\partial y} = \frac{24\pi}{a^3}\sin^2\left(\frac{\pi}{a}x\right)\cdot\sin\left(\frac{3\pi}{a}y\right)\cdot\cos\left(\frac{3\pi}{a}y\right) = 0 \quad (13)$$

Отсюда получаем критические точки (в этих точках выполняется условие максимума функции) $\rho_{1,3}(x,y)$:

$$x_1 = \frac{a}{2},\ y_1 = \frac{a}{6};\quad x_2 = \frac{a}{2},\ y_2 = \frac{a}{2};\quad x_3 = \frac{a}{2},\ y_3 = \frac{5a}{6}.$$

Для проверки правильности задачи составили программу и выбираем значения сторон потенциальной ямы $a = b$ и квантовые числа $n_x = 1$ и $n_y = 3$ (рис.3. а). В результате отображается график плотности вероятности (рис.4. б). На рис.6. с показан график плотности вероятности в плоскости xOy.

Из рис. 3. б, с видно, что плотность вероятности частицы в квадратной потенциальной яме достигает максимального значения в точках [11]:

$$x_1 = \frac{a}{2},\ y_1 = \frac{a}{6};\quad x_2 = \frac{a}{2},\ y_2 = \frac{a}{2};\quad x_3 = \frac{a}{2},\ y_3 = \frac{5a}{6}$$ (белая область).

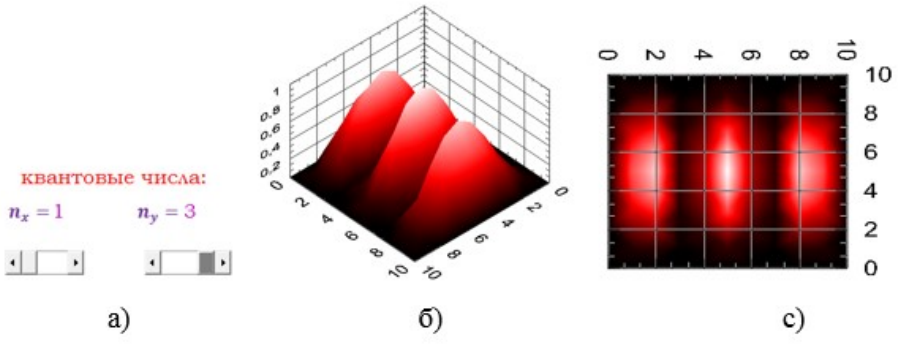


Рис.4. Общий вид результатов вычисления для заданных условий.

а–квантовые числа; б–график плотности вероятности; с–график плотности вероятности в плоскости xOy.

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

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.

ВЫВОДЫ

1. Контурные карты для решения, не зависящего от времени, где белая точка является самой высокой точкой.

2. Для других значений n_x и n_y можно визуально увидеть график функции плотности вероятности и наблюдать точки, в которых функция $\rho_{n_x,n_y}(x,y)$ достигает своего максимума.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

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. Nouredine Zettili. Quantum Mechanics: Consepts and Applications. Jons Wiley & Sons, 2009. –P.688. (N.Zettili. Kvant mexanikasi: Tushunchalar va Ilovalar. Jon Wiley & Sons, 2009, 688 c.)

2. Dae Mann Kim. Introduction Quantum Mechanics for Applied Nanotechnology. Wiley–VCH Verlag GmbH & Co, 2015. –P. 190. (Dae Man Kim. Amaliy nanotexnologiya uchun kvant mexanikasiga kirish. Wiley-VCH Verlag GmbH & Co, 2015. 190 c.)

3. Соколов А.А., Лоскутов Ю.М., Тернов И.М. Квантовая механика. –М.: Просвещение, 1985. –С.224. (Sokolov A.A., Loskutov Yu.M., Ternov I.M. Kvant mexanikasi. –M.: Prosvesheniye, 1985. 224 c.)

4. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика: учеб. пособие в 10 т. Т.3. Квантовая механика нерелятивистическая теория. –М.: Физматлит, 2004. –С.400. (Landau L.D., Lifshits E.M. Nazariy fizika: o‘quv qo‘llanma. T.3. Norelyativistik kvant mexanikasi nazariyasi. –M.: Fizmatlit, 2004. 400 c.)

5. Давыдов А.С. Квантовая механика: учеб. пособие для вузов. СПб.: БХВ–Петербург, 2011. –С.703. (Davidov A.S. Kvant mexanikasi: o‘quv qo‘llanma. St. Petersburg: BHV-Petersburg, 2011. 703 c.)

6. Демидович, Б.П. Математические основы квантовой механики. – СПб.: Лань, 2005. –С.200. (Demidovich, B.P. Kvant mexanikasining matematik asoslari. - St. Petersburg: Lan, 2005. 200 c.)

7. Шпольский, Э.В. Атомная физика – СПб.: Лань, 2010. –С.324. (Shpolsky, E.V. Atom fizikasi - St. Petersburg.: Lan, 2010. 324 c.)

8. *Савельев И.В.* Основы теоретической физики. т.2. Квантовая механика. –М.: Наука, 2018. –С.432. (Saveliev I.V. Nazariy fizika asoslari. v.2. Kvant mexanikasi. – M.: Nauka, 2018. 432 c.)

9. Балашов В.В., Долинов В.К. Курс квантовой механики. –М.: НИЦ “Регулярная и хаотическая динамика”, 2001. –С.336. (Balashov V.V., Dolinov V.K. Kvant mexanikasi kursi. –M.: NIS “Regulyarnaya i xaoticheskaya dinamika, 2001. 336 c.)

10. Philiip Conrod. Learn Visual Basic. Kidvare Software, 2012. –P. 880. (Filipp Konrod. Visual Basic dasturini o‘rganing. Kidvare Software, 2012. 880 c.)

11. Мухтаров Э.К. Электронный информационно-образовательный ресурс «Двумерная потенциальная яма». Программный продукт для ЭВМ, №DGU 21510, 09.01.2023 г. (Muxtarov E.K. "Ikki o‘lchovli potentsial o‘ra" elektron axborot–ta‘lim resursi. EHM uchun dastur, №DGU 21510, 01.09.2023 y.)

12. A. Capri. Problems and Solutions in Non-relativistic Quantum Mechanics, World Scientific, 2001. –P.520. (Kapri A. Norelativistik kvant mexanikasi masalalari va yechimlari, 2001, 520 c.)

13. K. Tamvakis. Problems and solutions in quantum mechanics. New York, Cambridge University Press, 2005. –P. 334. (K. Tamvakis. Kvant mexanikasidan masalalar va yechimlar. Nyu-York, Kembrij universiteti nashriyoti, 2005, 334 c.)

14. Ельютин П.В. Квантовая механика с задачами. –М.: Наука. 2001. –С.218. (Elyutin P.V. Kvant mexanikasidan masalalar –M.: Nauka. 2001. 218 c.)