**В. В. Андреев, О. М. Дерюжкова, Н. В. Максименко**
Гомельский государственный университет имени Ф. Скорины

# ИНТЕРАКТИВНОЕ РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Компьютер уже давно и прочно внедрился в жизнь современных студентов, которые должны быть не простыми пользователями, а осознанно участвовать в технологизации образования. Применение вычислительной техники и телекоммуникационных средств в образовательном процессе предусматривает взаимосвязанную

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЫ

деятельность преподавателя и студентов с целью продуктивной и обдуманной работы с доступной информацией для эффективной реализации человеческого потенциала и технических возможностей. При этом важно учитывать, что преимущества внедрения информационно-коммуникационных технологий проявятся только при соблюдении определенных правил или требований к их применению. Наукоемкость, результативность и эффективность информационно-коммуникационных технологий возможна, если четко определить цель, роль, место, назначение и время их использования.

Нельзя забывать про дифференциацию и индивидуальный подход в обучении при одновременном представлении обучения как коллективного процесса с организационной ролью преподавателя при проведении занятий.

Такой подход подразумевает наличие надежной обратной связи, а также диагностических мероприятий, которые включают критерии, показатели и инструменты оценки результатов деятельности студента. Рост творческой активности студента, безграничное пополнение и обогащение образования новым содержанием возможно только при применении таких средств, которые действительно гарантируют качество обучения. К ним относятся современные системы компьютерной математики, позволяющие провести исследование проблемы, анализ данных, моделирование, тестирование, проверку существования решения, оптимизацию, интерпретацию, документирование и оформление результатов.

Рассмотрим работу одной из таких систем: интерактивной системы компьютерной математики Mathematica в качестве инструмента для решения задач квантовой механики [1].

Квантовая механика составляет теоретическую основу решения многих важных задач из различных областей физики: атомная физика, квантовая электроника и др.

Центральное место в расчетах занимает решение стационарного уравнения Шредингера (уравнение движения квантовой частицы):

$$\hat{H}\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (1)$$

где оператор Гамильтона с потенциалом взаимодействия в системе имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(\mathbf{r}). \quad (2)$$

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЫ

Уравнение Шредингера (1) с точки зрения математики представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных для волновой функции ψ(r). Однако необходимо помнить, что физические величины являются размерными. Это факт необходимо учитывать при решении задачи.

Оператор Гамильтона (2) для одномерного уравнения Шредингера можно записать в виде:

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \ . \qquad (3)$$

Соответственно, задача на собственные значения с учетом (3) для осцилляторного потенциала

$$V(x) = \frac{1}{2}m^2\omega^2x^2. \qquad (4)$$

сводится к уравнению

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + \frac{1}{2}m^2\omega^2x^2\psi(x) = E\psi(x) \ . \qquad (5)$$

Рассмотрим возможности системы Wolfram Mathematica на примере решения задачи о нахождении квантово-механической частицы в поле с осцилляторным потенциалом (4) [2].

Первый этап решения этой задачи состоит в указании физических размерностей величин, входящих в уравнение (5).

В Wolfram Mathematica имеется возможность определения размерных физических величин и констант с помощью операторов: **QuantityVariable, Quantity, UnitConvert, UnitSystem** и другие. На рисунке 1 отображен блок, который позволяет перечислить физические величины, входящие в уравнение (5).

Второй этап состоит в получении безразмерного уравнения (5) с помощью функции **NondimensionalizationTransform**. Этот оператор проводит замену переменных с целью получения нового упрощенного уравнения.

В атомной физике широко используется естественная для масштабов микромира система единиц Лоренца-Хевисайда. Поэтому далее введем именно эту систему единиц с помощью опции оператора **NondimensionalizationTransform**: **UnitSystem→ «LorentzHeavisideNaturalUnits».**

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЫ

```
x = QuantityVariable["x", "Length"]; ψ = QuantityVariable["ψ", 1/√"Length"];
    размерная переменная                   размерная переменная
En = QuantityVariable["En", "Energy"]; ℏ = Quantity["ReducedPlanckConstant"];
     размерная переменная                   размерная величина
m = QuantityVariable["m", "Mass"]; ω = QuantityVariable["ω", "Frequency"];
    размерная переменная               размерная переменная
(* Уравнение Шредингера с V(x) = 1/2 m ω^2 x^2 *)
eq = 1 / 2 m ω^2 x^2 ψ[x] - ℏ^2/2 D[ψ[x], {x, 2}]/m - En ψ[x]
```

Рисунок 1 – Блок определения размерных переменных уравнения (5)

На рисунке 2 показан блок, дающий правила перехода к безразмерным величинам в уравнении с осцилляторным потенциалом (5).

```
step1a = NondimensionalizationTransform[eq, {ψ, x, En, m, ω}, {φ, ξ, ϵ, m0, ω0}, "NondimensionalizationRules",
         переход к безразмерным
  UnitSystem → "LorentzHeavisideNaturalUnits"] // PowerExpand
  система единиц измерений                        раскрыть степени
step1b = NondimensionalizationTransform[eq, {ψ, x, En, m, ω}, {φ, ξ, ϵ, m0, ω0}, "DimensionalizationRules",
         переход к безразмерным
  UnitSystem → "LorentzHeavisideNaturalUnits"] // PowerExpand
  система единиц измерений                        раскрыть степени

Out[211]= {ψ''[x] → (1 eV^(5/2)/(ℏ^(5/2) c^(5/2))) φ''[ξ], ψ[x] → (1 √eV/(√ℏ √c)) φ[ξ],
  ψ → φ (1 √eV/(√ℏ √c)), x → ξ (1 ℏ c/eV), En → ϵ (1 eV), m → m0 (1 eV/c^2), ω → ω0 (1 eV/ℏ)}

Out[212]= {φ''[ξ] → (1 ℏ^(5/2) c^(5/2)/eV^(5/2)) ψ''[x], φ[ξ] → (1 √ℏ √c/√eV) ψ[x],
  φ → (1 √ℏ √c/√eV) ψ, ξ → (1 eV/(ℏ c)) x, ϵ → (1 /eV) En, m0 → (1 c^2/eV) m, ω0 → (1 ℏ/eV) ω}
```

Рисунок 2 – Блок нахождения замен для преобразования уравнения (5) к безразмерному виду

Следующий шаг, состоящий в замене переменных и решении уравнения (5), приводит к результату, отображенному на рисунке 3. По данной схеме можно решить уравнение Шредингера с любым, произвольно выбранным потенциалом.

Рутинная процедура заменяется интеллектуальной, творческой деятельностью, способствующей развитию умений и навыков самостоятельного приобретения и усвоения новых знаний.

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЫ

Таким образом, использование системы Mathematica при решении задач квантовой механики расширяет рамки стандартного образовательного процесса, устраняя монотонность и однообразие, повышает его практическую направленность и значимость.

```
step2 = eq/ (1/2 eV^(3/2)/(Sqrt[ℏ] Sqrt[c])) //. step1a // Simplify;
                                                          упростить

yr = DSolve[step2 == 0, φ[ξ], ξ][[1, 1, 2]] //. {c2 → 0} // FunctionExpand;
     решить дифференциальные уравнения                        функционально разложить

ψos[z_, n_] = yr //. Solve[(2 ϵ - ω0)/(2 ω0) == n, ϵ][[1]] //. {ξ → 1/(Sqrt[m0] Sqrt[ω0]) z} //. step1a // Simplify;
                     решить уравнения                                                            упростить

Print[Style["Ненормированная волновая функция ψ[x] = ", Bold, 18],
печа… стиль                                              жирный шрифт
 Style[ψos[x, n], Bold, 18, Blue]]
 стиль           жирный ш…  синий

a = Solve[(2 ϵ - ω0)/(2 ω0) - n == 0, ϵ][[1, 1, 2]] 1 eV //. step1b // Simplify;
    решить уравнения                                             упростить

b = Solve[(2 ϵ - ω0)/(2 ω0) - n == 0, ϵ][[1, 1, 1]] 1 eV //. step1b // Simplify;
    решить уравнения                                             упростить

Print[Style["Энергия осциллятора ", Bold, 18], Style[b, Bold, 18], " = ",
печа… стиль                         жирный шр…  стиль   жирный шрифт
 Style[a, Bold, 18, Blue]]
 стиль    жирный …  синий
```

**Ненормированная волновая функция** $\psi[x]$ **=** $2^{-n/2} e^{-\frac{x^2}{2}} c_1$ HermiteH[n, x]

**Энергия осциллятора** En = $(1 + 2n)\left(\frac{1}{2}\hbar\right)\omega$

Рисунок 3 – Блок определения собственных значений энергии и волновых функций осциллятора

РЕПОЗИТОРИЙ ГГУ ИМЕНИ Ф. СКОРИНЫ

У студентов появляется осознанная мотивация к саморазвитию, что, несомненно, создает условия для успешной самореализации в будущем. Т.е. применение информационно-коммуникационных технологий в преподавании является неотъемлемой частью организации современного образовательного процесса.

## Список использованной литературы

1. Zimmerman, R.L. Mathematica for Physics / R.L. Zimmerman, F.I. Olness. – Second edition edition. – Addison-Wesley, 2002. – 646 pp.

2. Wolfram, S. The Mathematica book / S. Wolfram. – Addison-Wesley, 1999. – 359 pp.