УДК 53:002.6; 53:37.016

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ С ПОМОЩЬЮ СИСТЕМ КОМПЬЮТЕРНОЙ МАТЕМАТИКИ

Андреев В.В., Максименко Н.В., Дерюжкова О.М.
УО «Гомельский государственный университет имени Франциска Скорины», г. Гомель, Беларусь, vik.andreev@gsu.by, maksimenko@gsu.by, dom@gsu.by

Квантовая механика изучает законы микромира, которые невозможно описать и объяснить с помощью классической механики Ньютона. Основные объекты (частицы и волны одновременно) и понятия (наблюдаемая, состояние, вероятность, неопределенность и др.) квантовой механики довольно сложно визуально представить. Но с помощью системы компьютерной алгебры *Wolfram Mathematica* (*WM*), которая является универсальным аппаратом, как в области аналитического, так и в области численного моделирования, можно успешно решать квантово-механические задачи любой сложности. А применение компьютерной графики обеспечивает достаточную наглядность, позволяющую корректно и всесторонне изучать и анализировать поставленные задачи. Это необходимо и довольно удобно использовать на практических занятиях при решении прикладных задач квантовой механики, что позволяет разнообразить образовательный процесс. В результате повышается познавательный интерес студента к изучаемому явлению, а значит и качество получаемых знаний.

Рассмотрим систему *Wolfram Mathematica* в качестве инструмента для решения задач квантовой механики. Квантовая механика, обладая универсальным математическим аппаратом, составляет теоретическую основу решения многих практически важных задач (нанотехнологии, квантовая электроника и др.). Она имеет многочисленные физические приложения в различных областях физики микромира.

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

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

где оператор Гамильтона с потенциалом взаимодействия $U(\mathbf{r})$ в системе $\hbar = c = 1$ имеет вид:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + U(\mathbf{r}). \tag{2}$$

Уравнение Шредингера (1) с точки зрения математики – это дифференциальное уравнение в частных производных для функции, которую называют волновой. Оператор Гамильтона (2) для одномерного уравнения Шредингера представим следующим образом:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2m}\frac{d^2}{dx^2} + V(x). \tag{3}$$

Соответственно задача на собственные значения с учетом (3) запишется в виде:

$$-\frac{1}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + V(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{4}$$

Для численного решения задачи на собственные значения (4) разработан целый ряд методов: метод конечных элементов, метод конечных разностей, вариационный и другие. Для численного решения методами конечных элементов (и в других методах) выбирают область изменения аргумента $[x_{min}, x_{max}]$ с граничными условиями $\psi(x_{min}) = 0$ и $\psi(x_{max}) = 0$.

В последних версиях *Wolfram Mathematica* (*WM*) задача поиска собственных значений линейных дифференциальных операторов «автоматизирована» с помощью операторов *NDEigensystem*, *NDEigenvalues*.

Оператор $NDEigensystem[\,L\,[u[x,y,\ldots]],u,\{x,y,\ldots\}\in\Omega\,,n]$ дает n наименьших собственных значений и собственных функций для линейного дифференциального оператора L в области Ω. Имеются и другие модификации этих операторов. Рассмотрим применение этого оператора для решения одномерного уравнения (4) с потенциалом вида:

$$V(x)=|x|. \tag{5}$$

Для этого потенциала существует точное решение, которое позволит оценить возможности решать уравнения вида (4). На рисунке 1 представлен основной блок, позволяющий получить численные значения для первых четырех собственных значений E_n и соответствующих им волновых функций $\psi_n(x)$ на сетке. Как видно из рисунка 1, числовой блок достаточно простой и поэтому не требуется большого количества времени для его написания. Стоит отметить, что развитая информационная система *WM* значительно облегчает как написание программ, так и уменьшает временные затраты для создания программ.

```
(* Масса частицы *)
m = 1;
(* Потенциал *)
V[x_] := Abs[x];
         абсолютное значение
(* Левая часть уравнения Шредингера:  Дифф. ядро *)
ℒ = -u''[x] / (2 m) + V[x] * u[x];
(* Расчет 4 собственных значений   *)
nn = 4; n = Range[nn];
           диапазон
(* Область изменения x *)
xmin = -7; xmax = 7;
(* Блок расчета собственных значений vals и собственных функций funs*)
{vals, funs} = NDEigensystem[ℒ, u[x], {x, xmin, xmax}, nn,
               численные собственные функции ДУ
   Method → {"SpatialDiscretization" → {"FiniteElement", {"MeshOptions" → {MaxCellMeasure → 0.0001}}}}];
   метод                                                                   максимальная величина ячейки
```

Рисунок 1 – Вычислительный блок решения уравнения (4) с потенциалом (5)

Следующий этап – визуализация полученных результатов. *Wolfram Mathematica* обладает широким спектром средств отображения данных: табличное представление, графическое отображение и динамические изображения. На рисунке 2 представлен блок визуализации собственных значений и волновых функций, а также табличное сравнение точного решения и расчетов, полученных с помощью *WM*. Отметим, что в данном случае необходимо несколько больше временных затрат по сравнению с созданием вычислительного блока. Но этот блок не требует специальных знаний по численным методам и поэтому вполне может быть создан обычным пользователем с помощью справочной системы *WM*.

```
(* Результаты решения уравнения Шредингера с V(x)=|x| *)
(* Точное решение *)
ValsExact = {0.808617, 1.85576, 2.57810, 3.24461};
(* Сравнение точного и численного решений *)
TableForm[{vals, ValsExact},
 TableHeadings → {{Style["WM", Bold, 18], Style["Точное", Green, 18, Bold]}, {"n=1", "n=2", "n=3", "n=4"}},
 TableSpacing → {2, 2}, TableAlignments → Center]
Print[Style["Визуализация собственных значений", 18]];
Show[Plot[Evaluate[vals], {x, xmin + 1, xmax - 1},
  PlotLabels → {Style["n=1", Bold], Style["n=2", Bold], Style["n=3", Bold], Style["n=4", Bold]},
  PlotRange → {{xmin + 1, xmax - 1}, {-1, nn}}, AxesLabel → {Style[" x ", Bold, 18], Style["V(x)", Bold, 18]}],
 Plot[V[x], {x, xmin + 1, xmax - 1}, AxesLabel → {Style[" x ", Bold], Style["V(x)", Bold]},
  PlotRange → {{xmin + 1, xmax - 1}, {-1, nn}}, AxesOrigin → {-1, 0}, ImageSize → Medium]]
Print[Style["Визуализация собственных функций ψ(x)", 18, Blue]];
Plot[Evaluate[Table[funs[[i]], {i, 1, nn}]], {x, xmin, xmax},
 AxesLabel → {Style[" x ", Bold, 18, Italic], Style["ψ(x)", Bold, 18, Italic]},
 PlotLegends → {"ψ1(x)", "ψ2(x)", "ψ3(x)", "ψ4(x)"}]
```

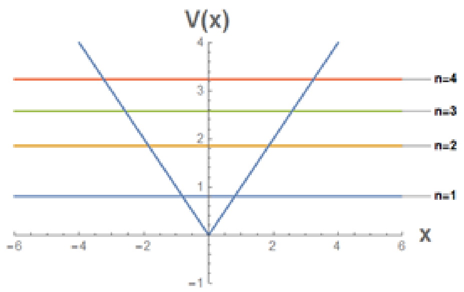
Рисунок 2 – Блок визуализации собственных значений и волновых функций, а также табличное сравнение точного и численного решений

На рисунке 3 продемонстрирован результат работы программы, представленной на рисунках 1 и 2, с использованием оператора *NDEigensystem* для потенциала $V(x)=|x|$.

Out[•]//TableForm=

	n=1	n=2	n=3	n=4
WM	0.808617	1.85576	2.5781	3.24461
Точное	0.808617	1.85576	2.5781	3.24461

Визуализация собственных значений



Визуализация собственных функций ψ(x)

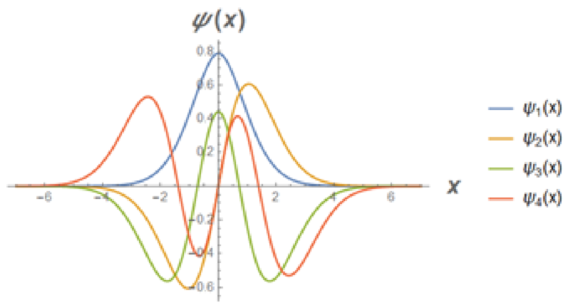


Рисунок 3 – Результат решения (4) для потенциала $V(x)=|x|$

Точное решение уравнения (1) с потенциалом (5) определяется формулами [2]:

$$E_n = -\frac{1}{2^{1/3}} \times \begin{cases} z'_n, n\text{-четное} \\ z_n, n\text{-нечетное} \end{cases}, \tag{6}$$

где z_n – нули функции Эйри $Ai(z)$, а z'_n – нули производной функции Эйри $Ai'(z)$. Численные значения точного решения (6) легко найти, используя встроенные функции *WM*.

Как следует из рисунка 3 численное решение, полученное с помощью оператора *NDEigensystem*, совпадет с точным решением с точностью до 5 знаков после запятой.

Таким образом, использование системы *Wolfram Mathematica* в учебном процессе дает возможность проведения виртуальных лекционных и семинарских занятий в реальном времени, осуществления оперативного консультационного общения, расширения доступа к учебной, методической и научной информации, а также моделирования научной и исследовательской деятельности.

Список литературы

1. Wolfram, S. The Mathematica book / S. Wolfram. – Addison-Wesley, 1999. – 359 pp.
2. Sakurai, J.J. Modern Quantum Mechanics / J.J. Sakurai, J. Napolitano. – Addison-Wesley, 2011. – 570 pp.