

ЭНЕРГЕТИЧЕСКИЕ СИСТЕМЫ И КОМПЛЕКСЫ

УДК 539.1

А.А. Басов, А.В. Кайнова, М. М. Кузьма, М. А. Субарев,
И. В. Минеев, И. С. Худяков, А.Н. Яшина

МОДЕЛИРОВАНИЕ ЗАДАЧИ О КВАНТОВОМ ОСЦИЛЛЯТОРЕ

Нижегородский государственный технический университет им. Р.Е. Алексеева

Цель: Решение задачи нахождения волновой функции, описывающей состояние квантового осциллятора, представляет значительные математические трудности.

Подход: Авторами разработана компьютерная программа вычисления полиномов Чебышева-Эрмита, являющихся решением уравнения Шрёдингера для квантового осциллятора.

Результаты: Программа позволяет графически представить волновую функцию и квадрат ее модуля (распределение плотности вероятности).

Ключевые слова: уравнение Шрёдингера, компьютерное моделирование, квантовый гармонический осциллятор, волновая функция, плотность вероятности, излучение абсолютно черного тела.

В атомной и ядерной физике задача о квантовом осцилляторе имеет большое значение. Модель линейного гармонического осциллятора позволяет описать колебания частиц в атомах, атомных ядрах, молекулах, твердых телах. В квантовой теории понятие силы теряет смысл, поскольку сила по определению является функцией состояния. Но из-за соотношения неопределенностей для микрочастиц о состоянии в классическом смысле нельзя говорить. Поэтому квантовый гармонический осциллятор определяют как поведение частицы массы m , обладающей потенциальной энергией такой же, как у классического осциллятора $U = \frac{kx^2}{2}$, где k - постоянная. По аналогии с классическим осциллятором константу k для частицы массы m можно представить как $k = m\omega^2$. Решение уравнения Шрёдингера для такой частицы позволит найти волновую функцию $\psi(x)$, определяющую ее состояние, а также спектр собственных значений энергии E .

Уравнение Шрёдингера в этом случае будет иметь вид [1, 2]:

$$\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \psi}{dx^2} + \frac{m\omega^2}{2} \left(E - \frac{m\omega^2}{2} x^2 \right) \psi = 0. \quad (1)$$

Полученные аналитическим путем результаты решения данного уравнения представляются в виде собственных функций:

$$\psi = X_0 e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi) \quad (2a)$$

$$\text{и собственных значений энергии } E_n = \hbar\omega \left(n + \frac{1}{2} \right). \quad (2б)$$

Из (2б) следует, что ω имеет смысл циклической частоты фотона, испускаемого или поглощаемого при переходе осциллятора из данного «стационарного» состояния в соседнее. В (2а) X_0 – постоянный нормирующий множитель, $H_n(\xi)$ – полином степени n , $\xi = \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} x$.

Полагая $n = 0, 1, 2, \dots$ получим следующие полиномы:

$$\begin{aligned} H_0(\xi) &= 1, \\ H_1(\xi) &= 2\xi, \\ H_2(\xi) &= 4\xi^2 - 2, \\ H_3(\xi) &= 8\xi^3 - 12\xi, \\ H_4(\xi) &= 16\xi^4 - 48\xi^2 + 12, \\ H_5(\xi) &= 32\xi^5 - 160\xi^3 + 120\xi \text{ и т.д.} \end{aligned} \quad (3)$$

Это так называемые полиномы Чебышева-Эрмита, которые можно представить в следующем обобщенном виде [3]:

$$H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n (e^{-\xi^2})}{d\xi^n}. \quad (4)$$

Необходимо заметить, что аналитический путь вычисления данных полиномов и, соответственно, вычисление собственной функции осциллятора представляется весьма громоздкой математической задачей, требующей кропотливой работы и временных затрат.

В связи с этим была разработана авторская программа для численного решения задачи. Одним из самых простых и доступных способов решения уравнения Шрёдингера является метод конечных разностей. Он представляет собой численное решение дифференциальных уравнений, основанное на замене производных разностными схемами. Именно такой подход был использован для вычисления полиномов Чебышева-Эрмита. Результаты расчетов представляются в виде графиков – собственной волновой функции $\psi(x)$ и распределения плотности вероятности $|\psi(x)|^2$. Возможны два пути задания начальных условий – через энергию E , либо циклическую частоту ω колебаний осциллятора.

Пользователю доступны следующие функции:

- 1) изменение масштаба графиков (активные области x_{\min} и x_{\max});
- 2) отображение координат точек графиков (наведение курсора на линию графика);
- 3) изменение шага расчета (активная область dx);
- 4) изменение масштаба размерной сетки графиков (активная область в правом верхнем углу диалогового окна программы);
- 5) возможность сравнения амплитуд квантового и классического осциллятора (включение чекбокса A0);
- 6) просмотр результатов расчетов с выбранным шагом;
- 7) печать результатов расчетов и диалогового окна программы;
- 8) работа в полноэкранном режиме;
- 9) краткая теоретическая справка (кнопка “Теория” в нижнем правом углу – доступна, если компьютер подключен к интернету).

Программа также производит построение графика распределения плотности вероятности для классического осциллятора (тонкая линия на рисунках).

Были использованы начальные условия: $\omega = 3 \cdot 10^{15}$ 1/с, $n = 0, 1, 2, 10, 50$. Результаты расчетов приведены на рис. 1–6.

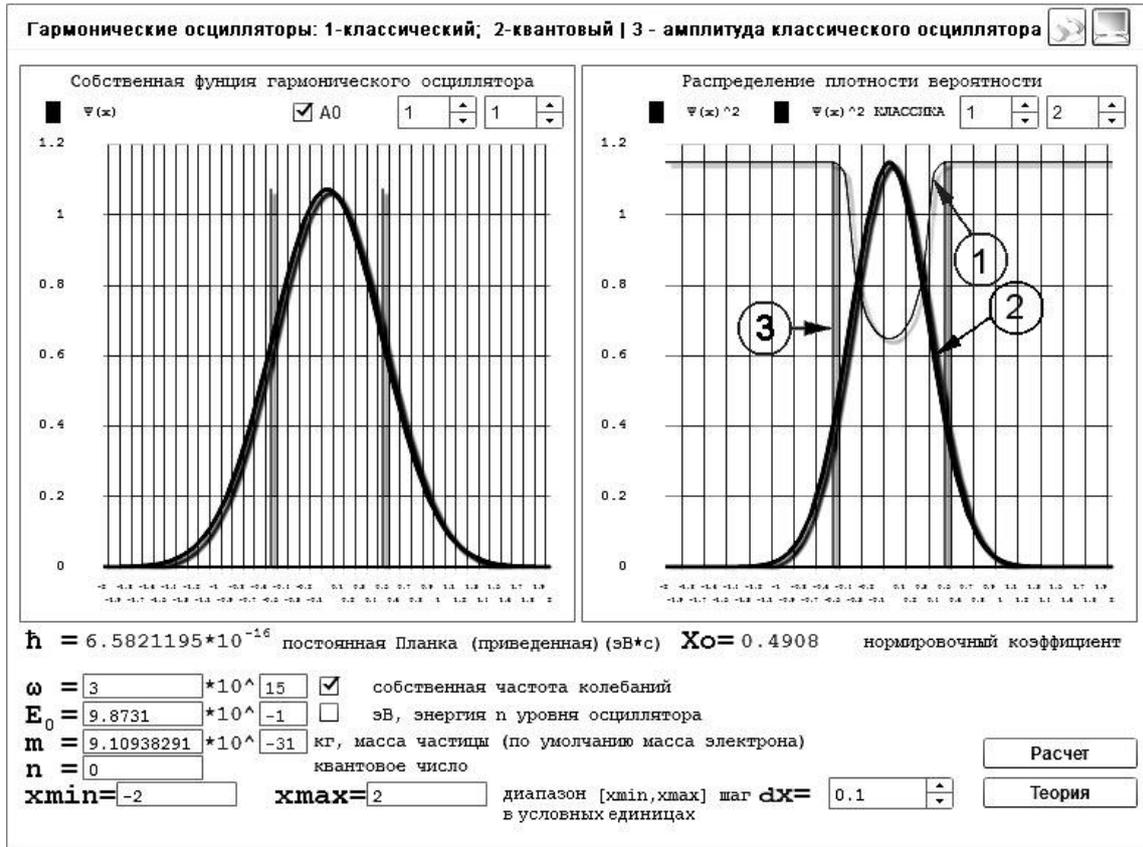


Рис. 1. Графическая иллюстрация решения уравнения Шрёдингера ($n=0$)

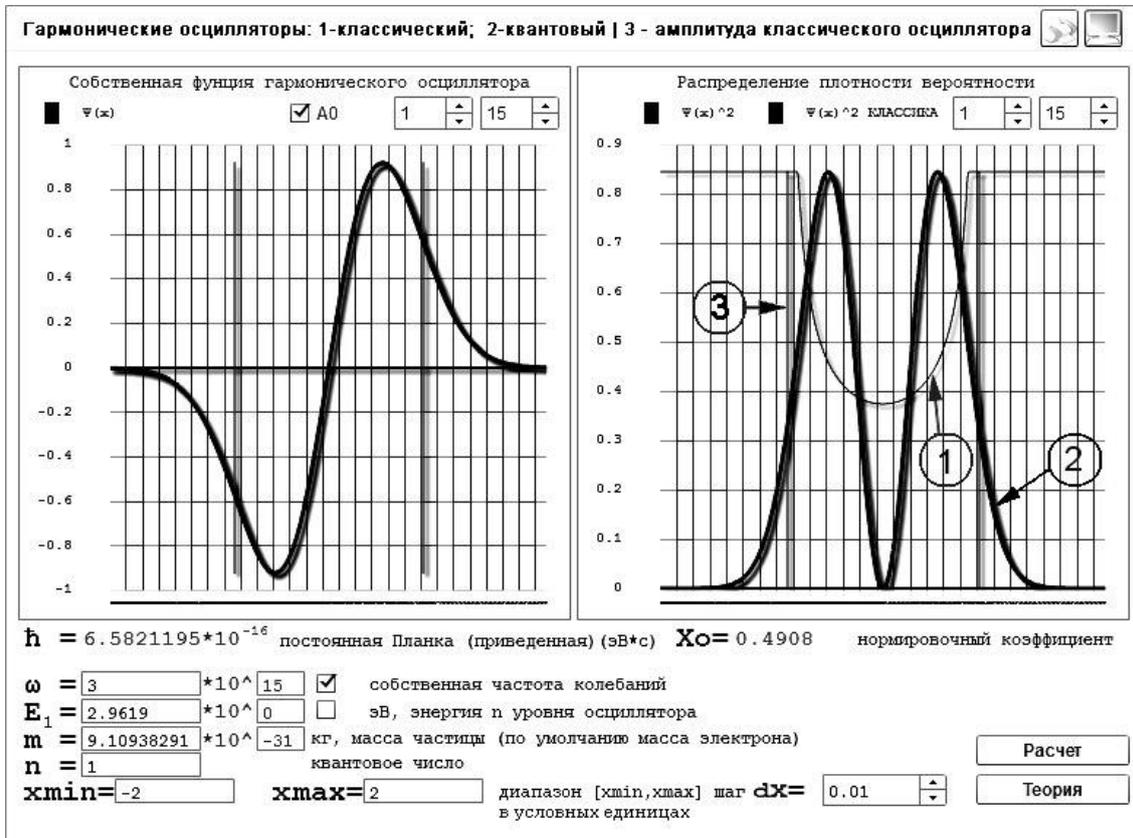


Рис. 2. Графическая иллюстрация решения уравнения Шрёдингера ($n=1$)

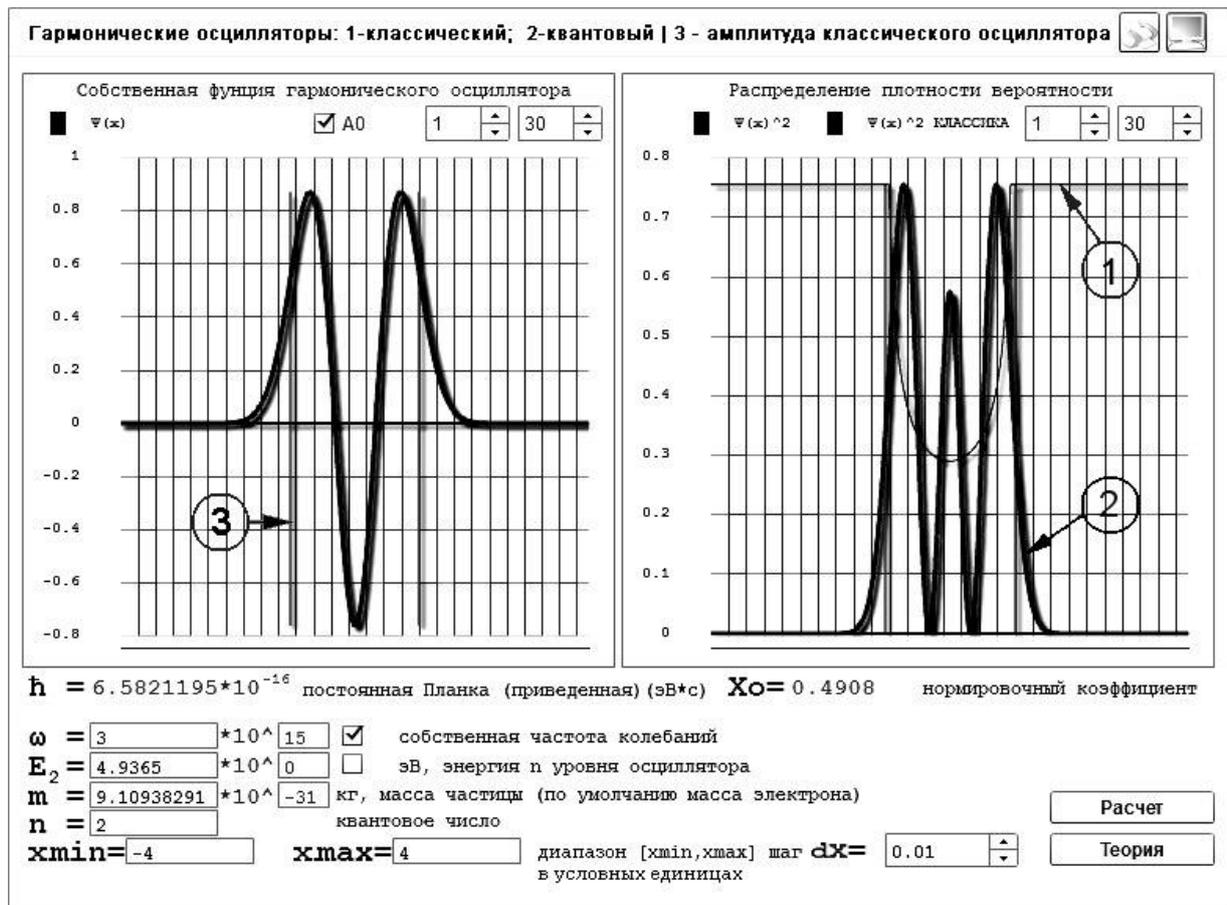


Рис. 3. Графическая иллюстрация решения уравнения Шрёдингера ($n=2$)

Полученные результаты хорошо согласуются приводимыми в литературе [3]. Таким образом, программа позволяет визуализировать сложный для восприятия результат решения уравнения Шрёдингера и получить массив данных, являющийся значениями собственной волновой функции и распределения плотности вероятности (рис. 4).

Результаты расчета

09.02.2016 21:57:55

X	-1	-0.9	-0.8	-0.7	-0.6	-0.5	-0.4	-0.3	-0.2	-0.1
f(x)	-0.679	-0.6981	-0.6991	-0.6795	-0.638	-0.5743	-0.4893	-0.3855	-0.2661	-0.1359
f(x) ²	0.461	0.4874	0.4887	0.4617	0.407	0.3298	0.2394	0.1486	0.0708	0.0185
X	0	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9
f(x)	0	0.1359	0.2661	0.3855	0.4893	0.5743	0.638	0.6795	0.6991	0.6981
f(x) ²	0	0.0185	0.0708	0.1486	0.2394	0.3298	0.407	0.4617	0.4887	0.4874
X	1									
f(x)	0.679									
f(x) ²	0.461									

Рис. 4. Результаты работы программы ($n=1$, $dx = 0,1$, $x_{min}=-1$, $x_{max}=1$)

При увеличении главного квантового числа модель квантового гармонического ос-

циллатора приближается к модели классического осциллятора, что наглядно представлено на рис. 5-6.

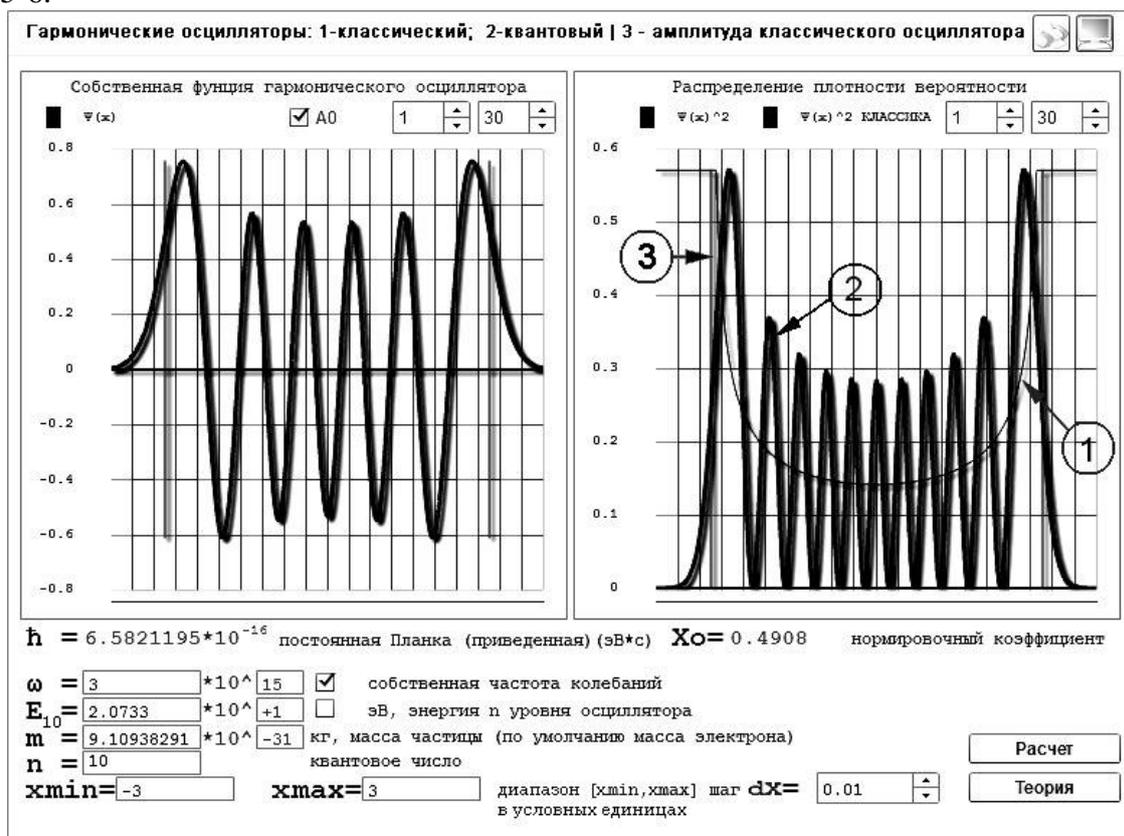


Рис. 5. Результаты расчета квантового осциллятора при больших значениях ($n=10$)

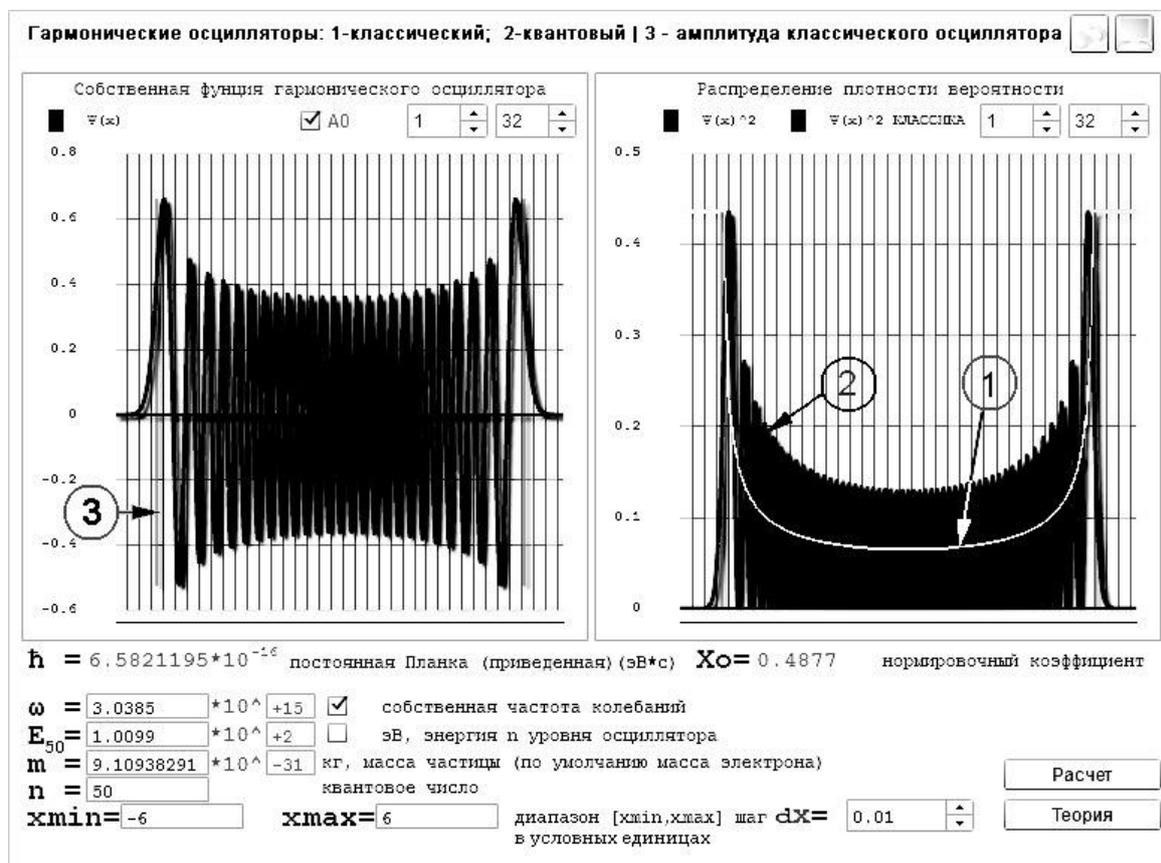


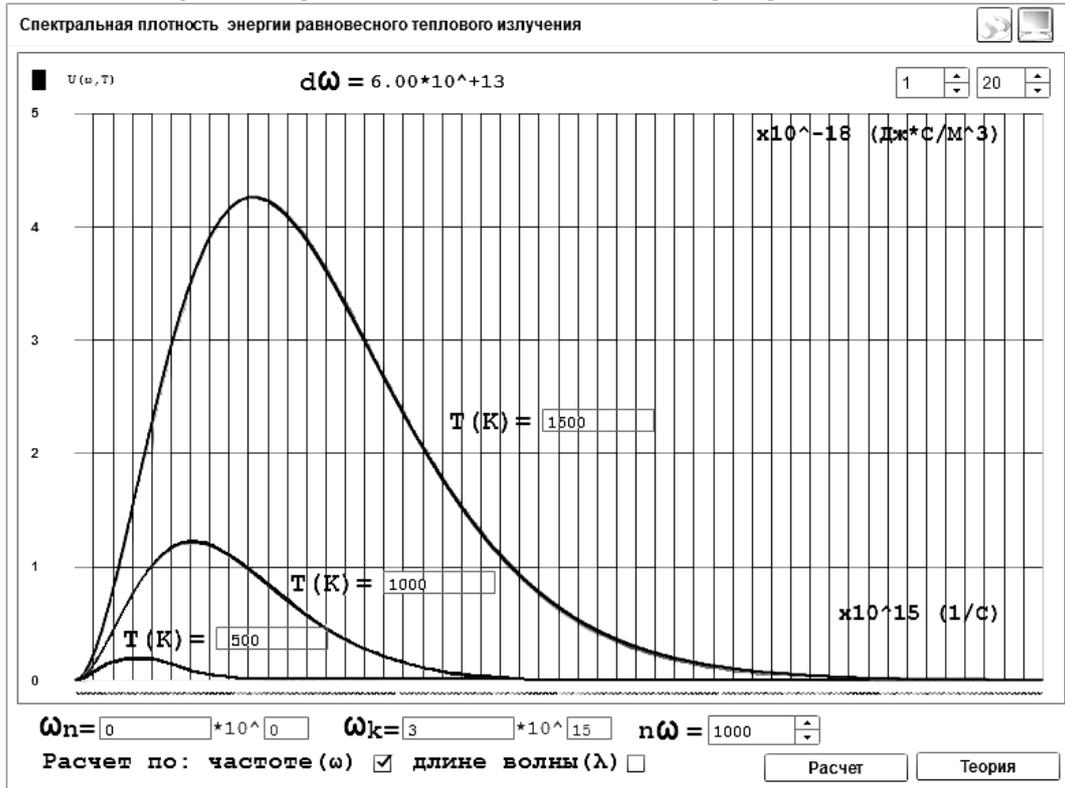
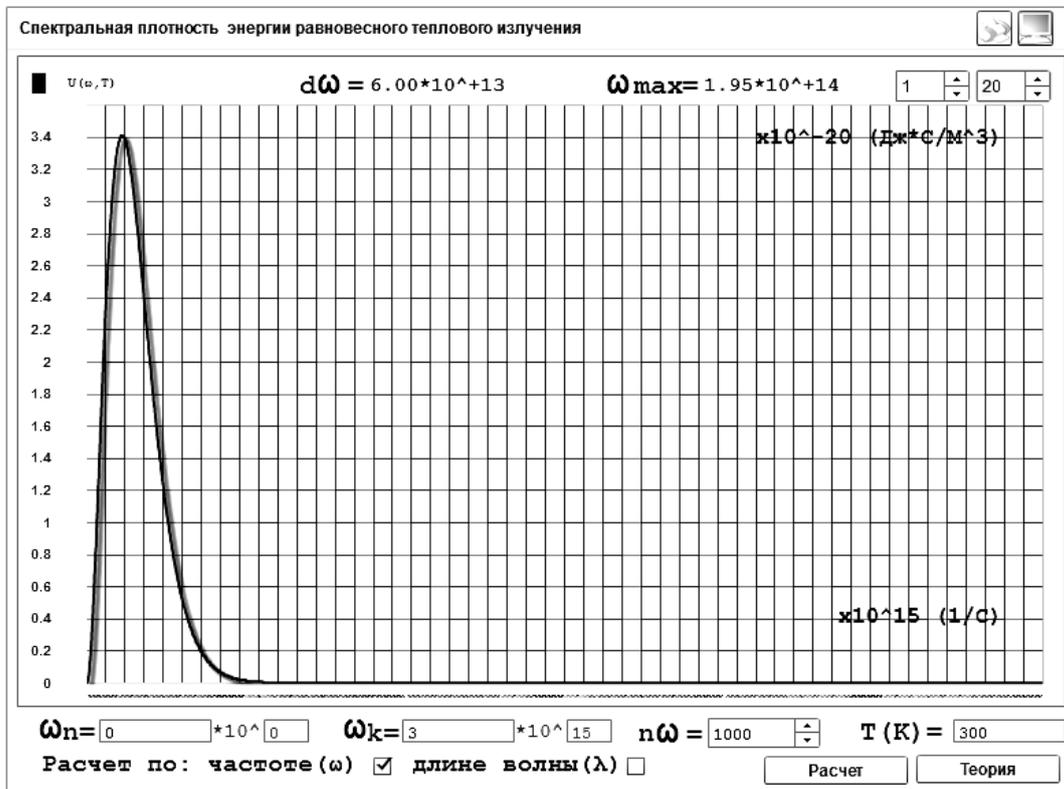
Рис. 6. Результаты расчета квантового осциллятора при больших значениях n Рис. 7. Зависимость спектральной плотности энергии абсолютно черного тела от его температуры на заданном интервале частот ($T = 500, 1000, 1500$ К)

Рис. 8. Зависимость спектральной плотности энергии абсолютно черного тела

при комнатной температуре на заданном интервале частот ($T = 300 \text{ K}$)

На базе данной программы можно создать виртуальный лабораторный практикум или выполнять расчетно-графические работы.

Представление об атомной системе как об осцилляторе, энергия которого квантована, позволило, как известно, Планку получить выражение для спектральной плотности излучающей способности абсолютно черного тела $r_{\omega T}$ [4], зависимость которой от температуры тела T и частоты излучения ω хорошо согласовывалась с экспериментальными данными:

$$r_{\omega T} = \frac{1}{4\pi^2 c^2} * \frac{\hbar \omega^3}{\exp\left(\frac{\hbar \omega}{kT}\right) - 1} \quad (5)$$

Авторами разработана программа для графического представления этой функции. Результаты, полученные для различных значений температуры T абсолютно черного тела, приведены на рис. 7-9.

Результаты расчета

02.02.2016, 22:52:49

$T(\text{K}) = 1500$

$\omega_n = 0 * 10^0 \quad \omega_k = 3 * 10^{15} \quad d\omega = 3.00 * 10^{12}$

ω	0.00e-16	3.00e+12	6.00e+12	9.00e+12	1.20e+13	1.50e+13	1.80e+13	2.10e+13	2.40e+13	2.70e+13
$U(\omega, T)$	0.00e-16	6.94e-22	2.75e-21	6.15e-21	1.08e-20	1.68e-20	2.40e-20	3.24e-20	4.20e-20	5.28e-20
ω	3.00e+13	3.30e+13	3.60e+13	3.90e+13	4.20e+13	4.50e+13	4.80e+13	5.10e+13	5.40e+13	5.70e+13
$U(\omega, T)$	6.47e-20	7.77e-20	9.17e-20	1.06e-19	1.22e-19	1.40e-19	1.58e-19	1.77e-19	1.96e-19	2.17e-19
ω	6.00e+13	6.30e+13	6.60e+13	6.90e+13	7.20e+13	7.50e+13	7.80e+13	8.10e+13	8.40e+13	8.70e+13
$U(\omega, T)$	2.39e-19	2.61e-19	2.84e-19	3.08e-19	3.33e-19	3.58e-19	3.85e-19	4.11e-19	4.39e-19	4.67e-19
ω	9.00e+13	9.30e+13	9.60e+13	9.90e+13	1.02e+14	1.05e+14	1.08e+14	1.11e+14	1.14e+14	1.17e+14
$U(\omega, T)$	4.96e-19	5.25e-19	5.55e-19	5.85e-19	6.16e-19	6.48e-19	6.79e-19	7.12e-19	7.45e-19	7.78e-19
ω	1.20e+14	1.23e+14	1.26e+14	1.29e+14	1.32e+14	1.35e+14	1.38e+14	1.41e+14	1.44e+14	1.47e+14
$U(\omega, T)$	8.11e-19	8.45e-19	8.80e-19	9.14e-19	9.49e-19	9.84e-19	1.02e-18	1.05e-18	1.09e-18	1.12e-18

Рис. 9. Результаты работы программы

Полученные кривые соответствуют экспериментальным данным [5]. Определенное из графиков значение частоты ω , на которую приходится максимум функции, отвечает закону Вина [2].

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 и энергетике. Программы являются мультиплатформенными и имеют интуитивно понятный интерфейс. Для корректной работы необходимо только наличие браузера.

Данные программы написаны с помощью языков программирования Java и ActionScripts с использованием компиляторной платформы FlashDeveloper [6].

Библиографический список

1. **Демидович, Б.П.** Математические основы квантовой механики / Б. П. Демидович. – СПб.: Лань, 2005.
2. **Ландау, Л. Д.** Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц. – М.: Физматлит, 2004.
3. **Шпольский, Э.В.** Атомная физика / Э.В. Шпольский. – СПб. Лань, 2010.
4. **Планк, М.** О законе распределения энергии в нормальном спектре. Избранные научные труды: [пер. с нем. под ред. А.П. Виноградова] / М. Планк. – М.: Наука, 1975.
5. **Цветков, Ф.Ф.** Тепломассообмен / Ф.Ф. Цветков, Б.А. Григорьев. – М.: Издательский дом МЭИ, 2006.
6. **Андерсон, Э.** MacromediaFlashMX 2004: [пер. с англ. Д.А. Латышевой] / Э. Андерсон. – М.: ИТ Пресс, 2005.

*Дата поступления
в редакцию 20.04.2016*

**A.A. Basov, A.V. Kainova, M.M. Kuzma, M.A. Sybarev, I.V. Mineev,
I.S. Khudyakov, A.N. Yashina**

MODELLING OF A QUANTUM OSCILLATOR TASK

Nizhny Novgorod state technical university n.a. R.E. Alexeyev

Purpose: The task of calculating a wave function describing the state of quantum oscillator poses considerable mathematic difficulties.

Design/ methodology/ approach: The authors developed a computer programme for counting Chebyshev-Hermite polynomials, which are the solution to Schrodinger equation for quantum oscillator.

Findings: The programme enables to represent the wave function and its squared absolute value (distribution in frequency) by a diagram.

Key words: Schrodinger equation, computer simulation, quantum harmonic oscillator, wave function, probability density, black-body radiation.