

Виртуальный лабораторный практикум для исследования квантово-механических закономерностей

А. О. Горбунов¹, А. И. Мамыкин², М. Н. Шишкина³
Санкт-Петербургский государственный электротехнический университет
«ЛЭТИ» им. В.И. Ульянова (Ленина)

¹alexandrgorbunov889@gmail.com, ²alexmamynkin@yandex.ru, ³marinash06@mail.ru

Аннотация. Рассматриваются вопросы разработки и практической реализации виртуального лабораторного практикума для исследования квантово-механических эффектов, изучаемых в курсе общей физики технических вузов.

Предложен алгоритм и разработана программа, позволяющая моделировать волновые функции, удовлетворяющие стационарному уравнению Шредингера для электрона в различных потенциальных полях, при прохождении им потенциальных барьеров.

Полученные в ходе модельного эксперимента данные могут быть использованы для наглядной демонстрации поведения волновой функции и количественной оценки энергетических характеристик элементарных частиц при изменении параметров и конфигурации потенциальных полей.

Делаются выводы о возможности применения предлагаемого виртуального лабораторного практикума не только при изучении студентами технических вузов разделов атомной и ядерной физики, но и при моделировании ряда явлений физики твердого тела.

Ключевые слова: виртуальный лабораторный практикум по физике, квантовая механика, модельный эксперимент, дистанционное обучение, квантово-механическая модель, компьютерное моделирование

I. ВВЕДЕНИЕ

Дистанционное обучение, которое широко внедряется в современный образовательный процесс открывает новые возможности организации и проведения лабораторно-практических занятий в вузе. Все чаще находят применение виртуальные лабораторные работы или работы с применением специально разработанных компьютерных программ, моделирующие те или иные физические процессы. Они служат своего рода «симуляторами» установок, к которым в данный момент отсутствует доступ.

Моделирование физических процессов используется также, когда осуществить лабораторный эксперимент на реальной установке не представляется возможным или математический аппарат студентов младших курсов вуза не достаточен для обработки полученных в ходе экспериментов данных. Моделирование обладает рядом преимуществ: позволяет легко менять начальные условия; задавать параметры экспериментальной ситуации в широких пределах; производить обработку большого объема полученных данных; отображать результаты эксперимента в разнообразных наглядных формах (таблицы, графики и т. д.).

В курсе общей физики технического университета на изучение студентами разделов атомная и ядерная физика отводится недостаточно времени и банк лабораторных

работ по данным темам не велик. Решение уравнения Шредингера вызывает у студентов младших курсов некоторые трудности. Для повышения наглядности и упрощения изучения квантово-механических закономерностей движения частицы в потенциальных полях различной конфигурации предлагается виртуальный лабораторный практикум, моделирующий волновые функции, удовлетворяющие стационарному уравнению Шредингера.

II. ОСНОВНАЯ ЧАСТЬ

В данной работе кратко обсуждается алгоритм и методика проведения лабораторного практикума для исследования квантово-механических эффектов, изучаемых в курсе общей физики технического вуза на примере движения частицы в различных одномерных потенциальных полях.

Волновая функция стационарного состояния квантово-механической системы (состояния, в котором потенциальная функция $U(x)$ не изменяется во времени) определяется решением стационарного одномерного уравнения Шредингера [1], [2]:

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

Для компьютерного моделирования решения уравнения (1) используем систему атомных единиц, в которой за единицу массы примем массу электрона, за единицу расстояния примем первый радиус Бора, так что

$$M = M_0 m_e; \quad x = b r_B; \quad r_B = \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{4\pi\epsilon_0}{e^2} \right),$$

за единицу энергии – энергию Ридберга E_R , при этом

$$E = \epsilon E_R, \quad E_R = \frac{\hbar^2}{m_e} \left(\frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \right)^2.$$

В атомных единицах уравнение (1) примет вид

$$\frac{d^2\psi}{db^2} = -M_0(\epsilon - \epsilon')\psi, \quad (2)$$

где ϵ – потенциальная энергия поля, ϵ , M_0 , b – полная энергия, масса частицы и ее координата в атомных единицах, соответственно. Для электрона $M_0 = 1$. Так как потенциальные функции удовлетворяют условию $\epsilon(b) = \epsilon(-b)$, уравнение Шредингера инвариантно относительно инверсии оси b , следовательно его решения обладают определенной четностью. При

моделировании таких задач можно исследовать только случай $b > 0$.

На рис. 1 приведен алгоритм программы, позволяющей моделировать волновые функции, удовлетворяющие решению стационарного уравнения Шредингера вида (2) для случая нахождения электрона в одномерной потенциальной яме.

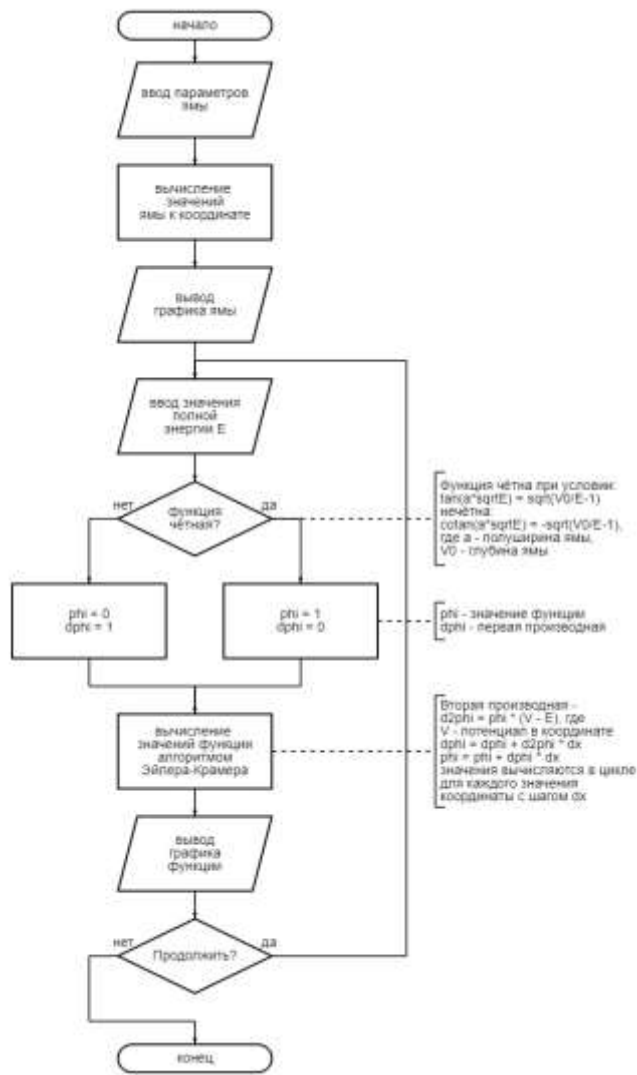


Рис. 1. Алгоритм программы моделирования квантово-механических закономерностей

Предложенная программа позволяет решать приведенное стационарное уравнение Шредингера (2) для потенциальной ямы (рис. 2) переменных ширины и высоты. Помимо того программа позволяет отображать вид волновых функций на экране ПК для дальнейшего их анализа.

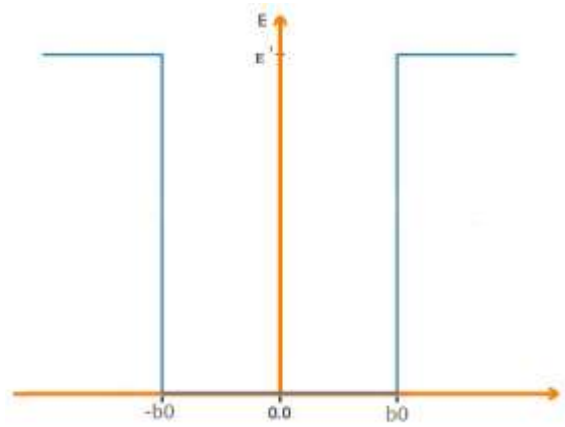


Рис. 2. Прямоугольная потенциальная яма

На рис. 3 приведены волновые функции электрона, находящегося в симметричной потенциальной яме.

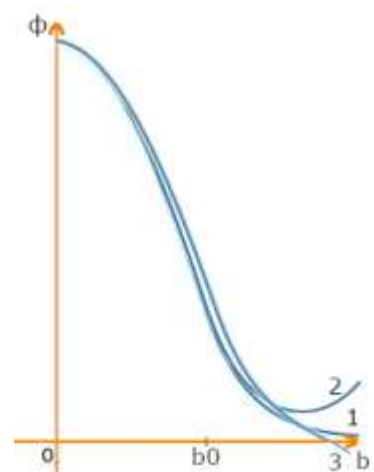


Рис. 3. Волновая функция электрона для первого энергетического уровня в симметричной потенциальной яме

Моделирование волновых функций позволяет исследовать дискретность энергетических уровней электрона в потенциальной яме, чередование уровней энергии, соответствующих четным и нечетным решениям уравнения Шредингера, устанавливать закономерности смещения уровней разрешенной энергии при изменении глубины и ширины потенциальной ямы.

Методика моделирования заключается в следующем. Для заданных значений параметров потенциальной ямы b_0 и ϵ' выбирается определенное значение энергии электрона. Если энергия электрона установлена меньше собственного значения, то кривая волновой функции, отображающая решение уравнения (2), за пределами потенциальной ямы «пойдет» вверх от нулевой линии, как показано на рис. 3 для линии 2. Если же энергия электрона выбрана больше необходимой, то на экране ПК будет отображаться кривая, сходная с линией 3 (рис. 3). Правильно подобранное значение энергии отвечает кривой 1 того же рисунка.

Описанный выше метод подбора собственного значения энергии электрона используется как для четных, так и для нечетных уровней энергии электрона. Подобная процедура моделирования позволяет также определить энергетические уровни и найти волновые функции для электрона при изменении параметров потенциальной ямы. Правильность подбора разрешенных энергий электрона в потенциальных ямах с различными параметрами можно проверить с помощью уравнений (3) и (4), приведенных для четного и нечетного уровней, соответственно.

$$\operatorname{tg} \sqrt{\varepsilon'} b_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon'}{\varepsilon} - 1} \quad (3)$$

$$\operatorname{ctg} \sqrt{\varepsilon'} b_0 = \sqrt{\frac{\varepsilon'}{\varepsilon} - 1} \quad (4)$$

Эти уравнения отображают граничные условия для волновой функции.

III. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Разработанный виртуальный лабораторный практикум для исследования квантово-механических закономерностей позволяет моделировать волновые функции частиц, удовлетворяющие решению стационарного уравнения Шредингера для различных одномерных потенциальных полей (потенциальной ямы, потенциального барьера) с различными параметрами и конфигурациями. Данный практикум может быть использован в курсе физики при изучении разделов атомной и ядерной физики, а также физики твердого тела.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

- [1] Гольдин Л.Л., Новикова Г.И. Введение в квантовую физику. М.: Наука, 1988. 328 с.
- [2] Ярив А. Введение в теорию и приложения квантовой механики. М.: Мир, 1984. 360 с.