НАУЧНАЯ РАБОТА

Тема: Нахождение решения стационарного уравнения Шрёдингера для различных квантовых систем в системе Maple

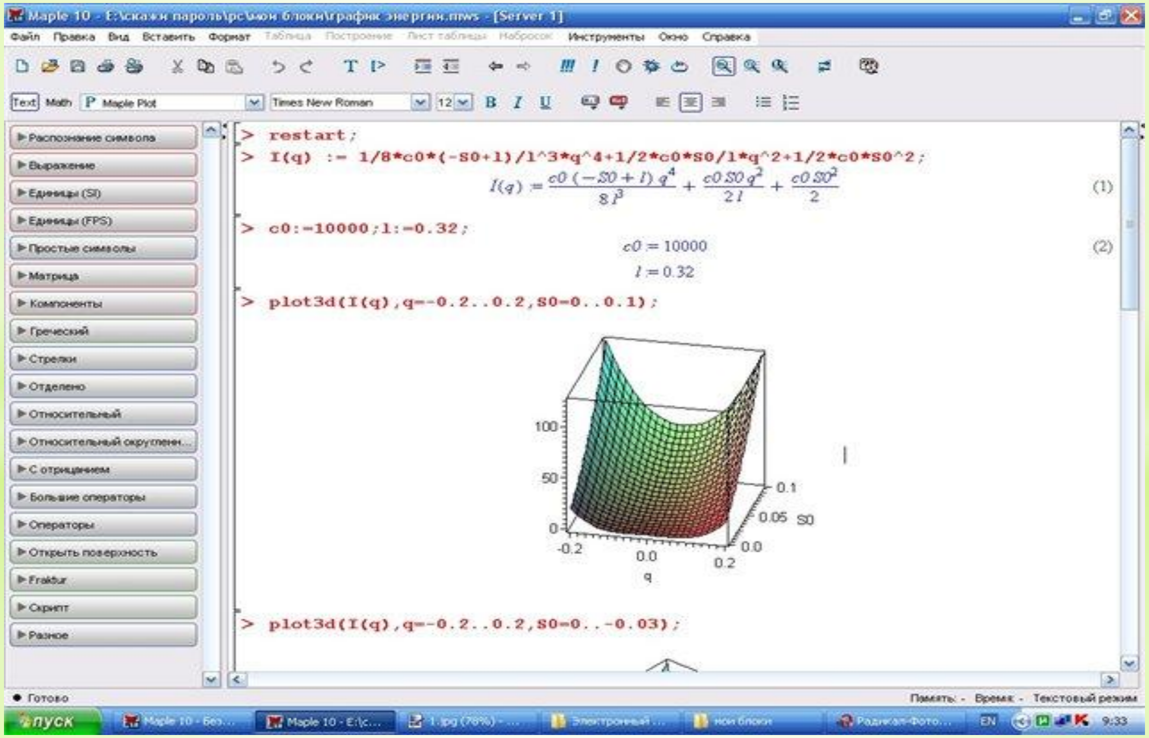
Выполнил ученик 11 «Б» класса:
Скалкин Александр

ЦЕЛЬ НАУЧНОЙ РАБОТЫ

- Разработка методов, алгоритмов и программ с использованием современных средств компьютерной алгебры MAPLE для решения задач на собственные значения для одномерных и двумерных дифференциальных операторов Шрёдингера, а также проведение с их помощью численных исследований ряда математических моделей классической и квантовой механики.

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

- **MAPLE** — программный пакет, система компьютерной алгебры (точнее, система компьютерной математики) или система, ориентированная на сложные математические вычисления, визуализацию данных и моделирование.



MAPLE

Мощный язык программирования

Современный многооконный пользовательский интерфейс

Мощную справочную систему со многими примерами

Редактор для подготовки и редактирования документов и программ

Ядро алгоритмов и правил преобразования математических выражений

Численный и символьный процессоры

Систему диагностики

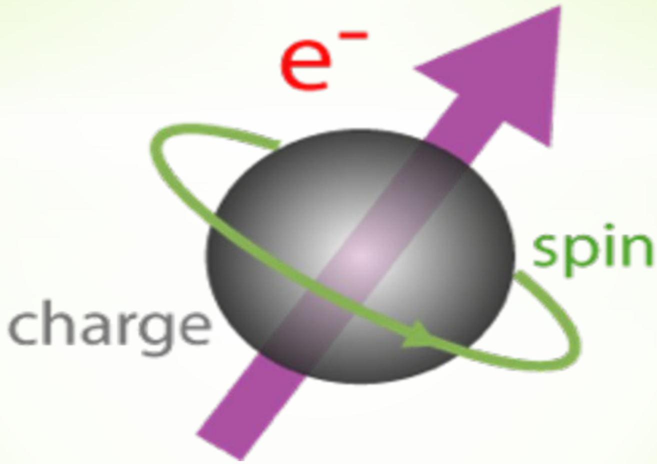
Библиотеки встроенных и дополнительных функций

Пакеты функций сторонних производителей и поддержку языков программирования

ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

История зарождения волнового уравнения Шрёдингера.

- Одной из причин неудач, постигшей Шрёдингера было то, что он не учел наличия специфического свойства электрона, известного ныне под названием спина (вращение электрона вокруг собственной оси наподобие волчка), о котором в то время было мало известно.



ТЕОРЕТИЧЕСКАЯ ЧАСТЬ

- Следующую попытку Шрёдингер предпринял в 1926 г. Скорости электронов на этот раз были выбраны им настолько малыми, что необходимость в привлечении теории относительности отпадала сама собой.

- Вторая попытка увенчалась выводом волнового уравнения Шрёдингера, дающего математическое описание материи в терминах волновой функции. Шрёдингер назвал свою теорию волновой механикой. Решения волнового уравнения находились в согласии с экспериментальными наблюдениями и оказали глубокое влияние на последующее развитие квантовой теории.

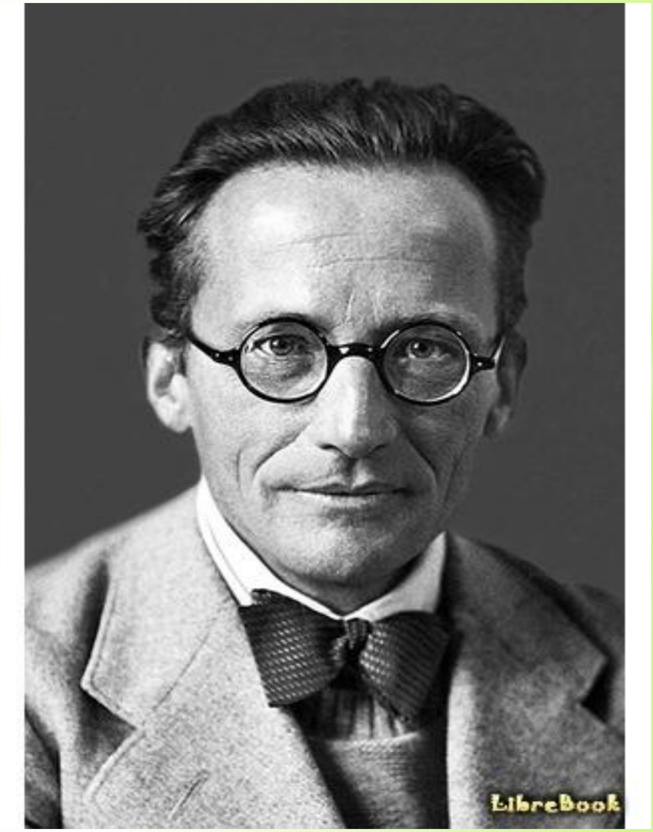
О квантово-механическом представлении движения микрочастиц

- Квантовая механика не позволяет определить местонахождение частицы в пространстве или траекторию, по которой движется частица. С помощью волновой функции можно лишь предсказать, с какой вероятностью частица может быть обнаружена в различных точках пространства.

- Квантовая механика гораздо глубже вскрывает истинное поведение микрочастиц. Она лишь не определяет того, чего нет на самом деле. В применении к микрочастицам понятия определенного местоположения и траектории вообще теряют смысл. Движение по определенной траектории несовместимо с волновыми свойствами, что становится совершенно очевидным, если проанализировать существо опытов по дифракции.

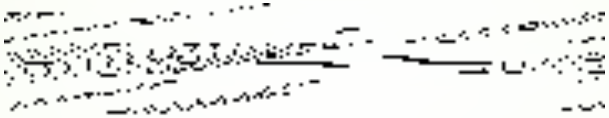
Методы численного решения стационарного уравнения Шредингера

- Современным перспективным подходом являются комбинированные или аналитически-численные методы, которые сочетают в себе аналитические преобразования исходной задачи с последующим численным решением уже преобразованной задачи. Настоящая работа посвящена разработке новых аналитически-численных методов и составлению программ, с помощью которых исследованы некоторые задачи на собственные значения.



Экспериментальная часть
Решение стационарного уравнения Шрёдингера в программе Maple

- Волновая функция ψ в соответствии с ее физическим смыслом должна быть однозначной, конечной и непрерывной во всей области изменения переменных *x*, *y* и *z*. В уравнение Шрёдингера входит в качестве параметра полная энергия частицы E. В теории дифференциальных уравнений доказывается, что уравнения такого вида, как уравнение Шрёдингера, имеют решения, удовлетворяющие условиям (т. е. однозначные, конечные и непрерывные), не при любых значениях параметра E, а лишь при некоторых избранных значениях. Эти избранные значения называются собственными значениями параметра, а соответствующие им решения уравнения – собственными функциями задачи. Эти решения определяют принцип квантования энергии.



Untitled (4)* - [Server 4] - Maple 16

File Edit View Insert Format Table Drawing Plot Spreadsheet Tools Window Help

```
> #Free
> restart;
> U := (x)->0;
```

$$U := x \to 0 \qquad (1)$$

```
> a := 1;
```

$$a := 1 \qquad (2)$$

$$> schr := diff(\mathrm{psi}(x), x, x) + \frac{2 \cdot m}{h^2} \cdot (E - U(x)) \cdot \mathrm{psi}(x) = 0;$$

$$schr := \frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + \frac{2\, m\, E\, \psi(x)}{h^2} = 0 \qquad (3)$$

```
> dsolve(schr);
```

$$\psi(x) = \_C1 \sin\left(\frac{\sqrt{2}\,\sqrt{m}\,\sqrt{E}\,x}{h}\right) + \_C2 \cos\left(\frac{\sqrt{2}\,\sqrt{m}\,\sqrt{E}\,x}{h}\right) \qquad (4)$$

$$> dsolve\left(diff(u(x), x, x) + k^2 \cdot u(x) = 0\right);$$

$$u(x) = \_C1 \sin(k x) + \_C2 \cos(k x) \qquad (5)$$

$$> u1 := (a, n, x) \to \frac{1}{\mathrm{sqrt}(a)} \cdot \sin\left(\frac{\mathrm{Pi} \cdot 2 \cdot n}{2} \cdot \frac{x}{a}\right);$$

$$u1 := (a, n, x) \to \frac{\sin\left(\frac{\pi n x}{a}\right)}{\sqrt{a}} \qquad (6)$$

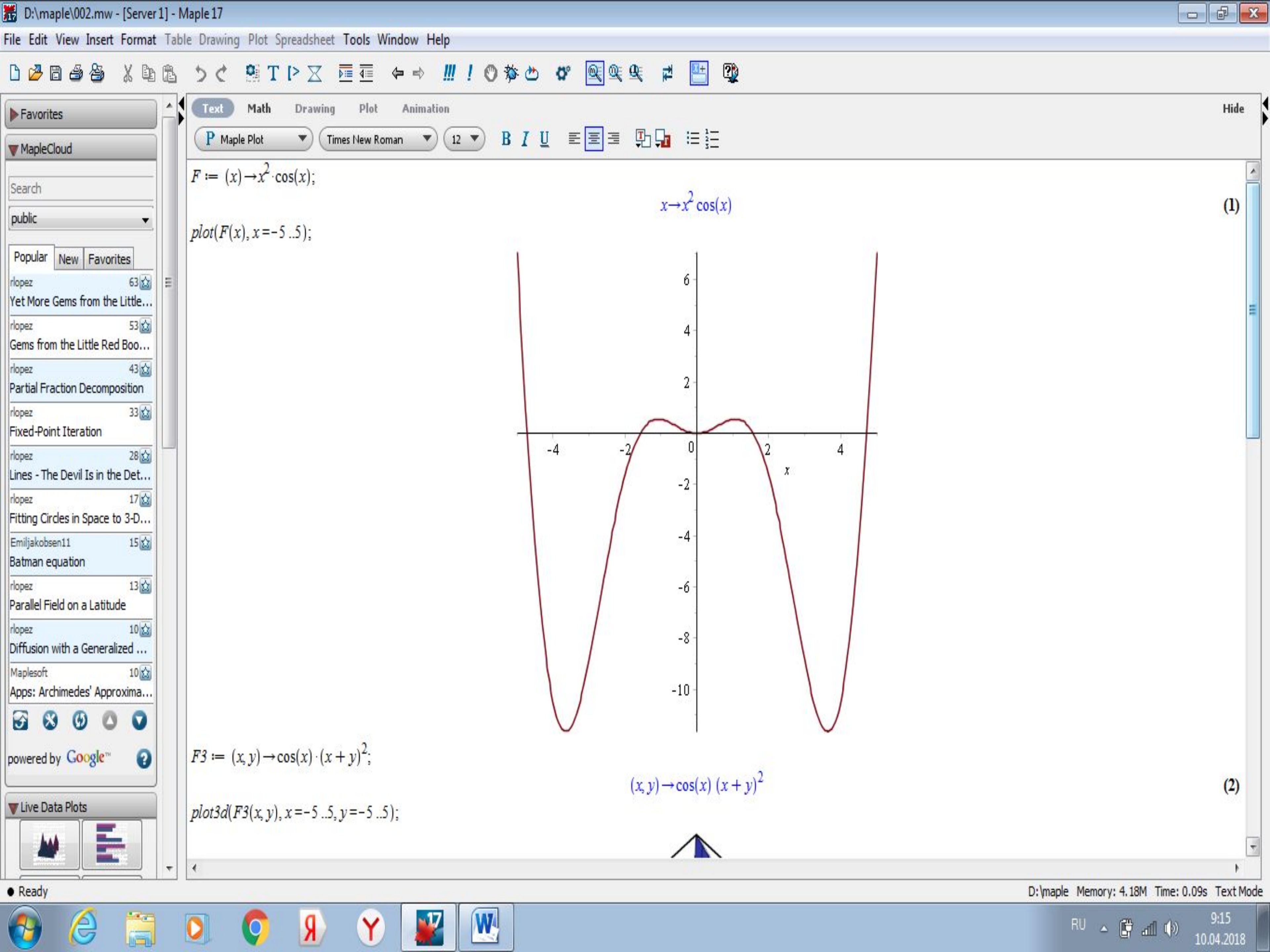
$$> u2 := (a, n, x) \to \frac{1}{\mathrm{sqrt}(a)} \cdot \cos\left(\frac{\mathrm{Pi} \cdot (2 \cdot n - 1)}{2} \cdot \frac{x}{a}\right);$$

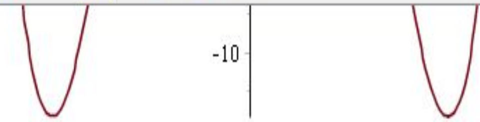
$$u2 := (a, n, x) \to \frac{\cos\left(\frac{1}{2}\,\frac{\pi (2n-1) x}{a}\right)}{\sqrt{a}} \qquad (7)$$

$$> int\left(u1(a, n, x)^2, x = -a..a\right);$$

$$-\cos(\pi n)\sin(\pi n) + \pi n$$

Ready   C:\Program Files\Maple 16\bin.win   Memory: 27.87M   Time: 0.48s   Math Mode

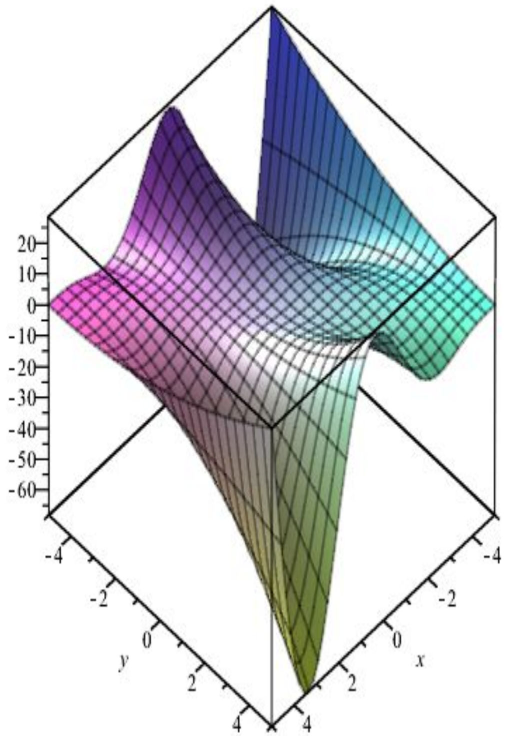

D:\maple\002.mw - [Server 1] - Maple 17
File Edit View Insert Format Table Drawing Plot Spreadsheet Tools Window Help
Text Math Drawing Plot Animation
Hide
Maple Plot
Times New Roman
12
Favorites
MapleCloud
Search
public
Popular New Favorites
rlopez 63
Yet More Gems from the Little...
rlopez 53
Gems from the Little Red Boo...
rlopez 43
Partial Fraction Decomposition
rlopez 33
Fixed-Point Iteration
rlopez 28
Lines - The Devil Is in the Det...
rlopez 17
Fitting Circles in Space to 3-D...
Emiljakobsen11 15
Batman equation
rlopez 13
Parallel Field on a Latitude
rlopez 10
Diffusion with a Generalized ...
Maplesoft 10
Apps: Archimedes' Approxima...
powered by Google
Live Data Plots
F := (x)→x^2·cos(x);
x→x^2 cos(x)
(1)
plot(F(x), x=-5..5);
6
4
2
0
-2
-4
-6
-8
-10
x
F3 := (x, y)→cos(x)·(x + y)^2;
(x, y)→cos(x) (x + y)^2
(2)
plot3d(F3(x, y), x=-5..5, y=-5..5);
Ready
D:\maple Memory: 4.18M Time: 0.09s Text Mode
RU
9:15
10.04.2018



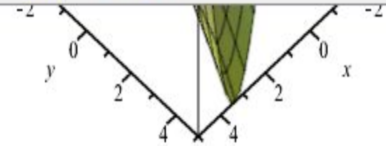
$F3 := (x, y) \rightarrow \cos(x) \cdot (x + y)^2;$

$$(x, y) \rightarrow \cos(x)\,(x + y)^2 \qquad (2)$$

$plot3d(F3(x, y), x = -5..5, y = -5..5);$



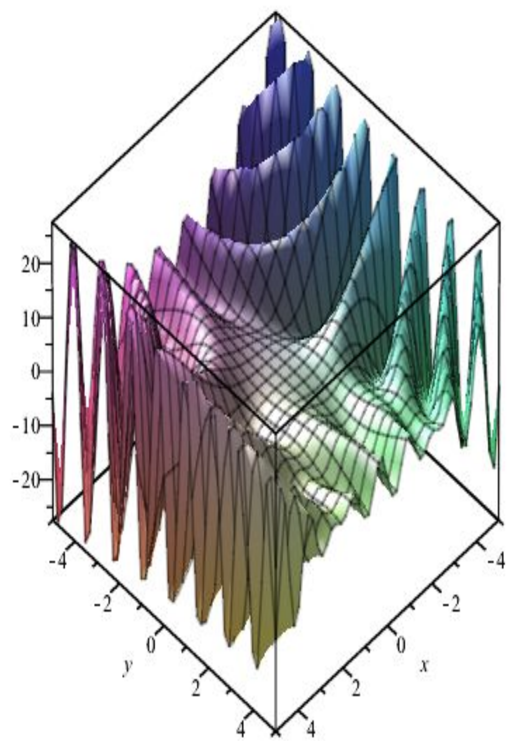
$F := (y) \rightarrow (y - x^2) \cdot \sin(x \cdot y);$



$F := (y) \rightarrow (y - x^2) \cdot \sin(x \cdot y);$

$$(-x^2 + y)\sin(xy) \qquad (3)$$

$plot3d(F(y), x = -5..5, y = -5..5);$



Заключение

В програмной среде MAPLE разработан алгоритм и составлена аналитически-численная программа, с его помощью были решены одномерные уравнения Шредингера для негармонических осцилляторов с нелинейными степенями четвертого, шестого и восьмого порядка, также симметричный негармонический осциллятор с двумя локальными минимумами.

Полученные значение энергетических уровней сравнили с имеющимися табличными данными, которые определены другими методами, и найдено полное соответствие.

СПАСИБО ЗА ВНИМАНИЕ!