Цымбалов Денис Сергеевич
старший преподаватель
Цымбалова Виктория Михайловна
магистрант
ФГБОУ ВО «Донской государственный
технический университет»
г. Ростов-на-Дону, Ростовская область

МОДЕЛИРОВАНИЕ СТАЦИОНАРНОГО СОСТОЯНИЯ КВАНТОВЫХ МИКРОСИСТЕМ: ГАРМОНИЧЕСКИЙ ОСЦИЛЛЯТОР

***Аннотация**: в данной статье рассмотрена актуальная в молекулярной спектроскопии квантовомеханическая задача о гармоническом осцилляторе. Для получения ее решений и их исследования применялись современные пакеты вычислительной математики. Авторами предполагается внедрить разработку в учебный процесс вуза по курсу «Теоретические основы микроэлектроники».*

***Ключевые слова**: уравнение Шредингера, краевая задача, потенциал, специальные функции, математическая физика.*

Объектом исследования выбрана микрочастица в поле с параболическим потенциалом $U(x)$. Уравнение Шредингера с таким потенциалом описывает малые колебания молекулярных связей. Соответствующая краевая задача для УШ записывается как:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\cdot\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+(E-\frac{1}{2}k\cdot x^2)\cdot\psi(x)=0,\quad -\infty\le x\le\infty\ ,\quad \psi(-\infty)=\psi(\infty)=0. \qquad (1)$$

В задаче (1) параметр k осмысливается как силовая постоянная. Чтобы решить это уравнение, предположим вид решения:

$$\psi(x)=f(x)\cdot \mathrm{e}^{-\gamma x^2/2}\ , \qquad (2)$$

где $\gamma = (m\,k)^{1/2}/\hbar$, m – масса молекулы. Подстановкой (2) в (1) получаем:

$$\left[\frac{d^2}{dx^2}-2\cdot\gamma\cdot x\cdot\frac{d}{dx}+(\frac{2mE}{\hbar^2}-\gamma)\right]f(x)=0. \qquad (3)$$

Этому уравнению удовлетворяют многочлены порядка n – 1, если выполняется условие $\frac{2mE_n}{\hbar^2\gamma}+1-2n=0$ или $E_n=\hbar\omega\cdot(n-1/2)$ при n = 1, 2, …. Здесь $\omega=\sqrt{\frac{k}{m}}$ - частота собственных колебаний. Полученные (см. рисунок 1) решения известны как многочлены Эрмита порядка n.

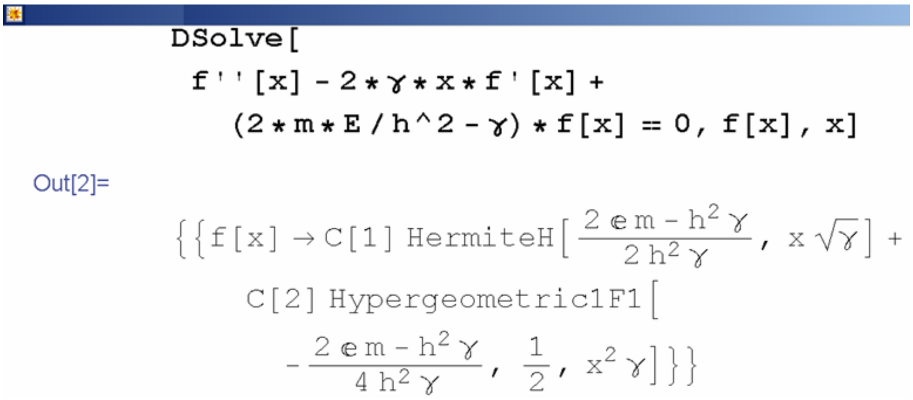

Рис. 1. Модель гамонического осциллятора в Mathematica

В общепринятых обозначениях полученное решение краевой задачи для УШ (1) имеет вид:

$$\psi_n(x)=H_{n-1}(\sqrt{\gamma}\cdot x)\cdot e^{-\gamma\cdot x^2/2},\ n=1,\ 2,\ \ldots. \qquad (4)$$

и показано на рисунке 2.

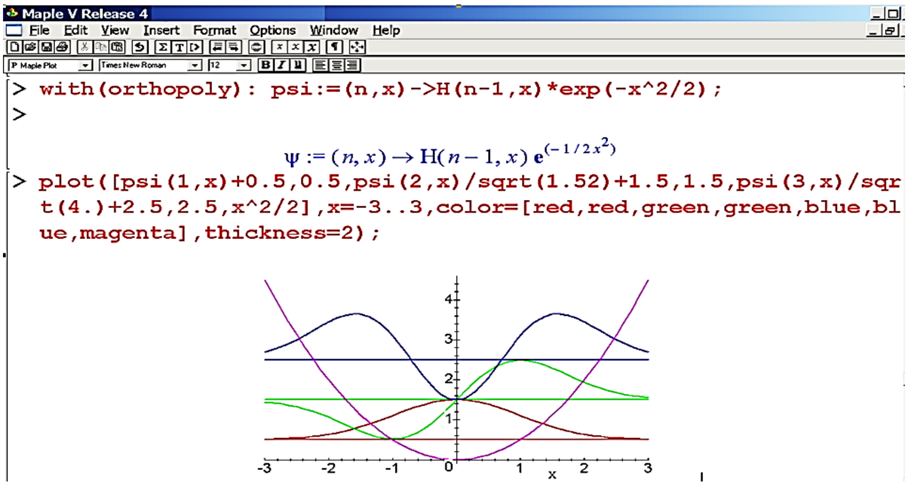

Рис. 2. Собственные значения и собственные функции

УШ для гармонического осциллятора

После важной для физиков нормировки, т. е. обеспечения $\int_{-\infty}^{\infty} |\psi_n(x)|^2 \, dx = 1$ получаем окончательное выражение для собственной функции:

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4}\sqrt{2^n n!\, x_0}} H_{n-1}\left(\frac{x}{x_0}\right) \cdot \mathrm{e}^{-x^2/(2\cdot x_0^2)}, \quad x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{m\,\omega}}\ , n = 1, 2, \ldots. \qquad (5)$$

С позиций квантовой физики модель гармонического осциллятора несовершенна, по меньшей мере, в двух отношениях: реальные молекулярные связи не бесконечно прочны, а переходы происходят не только между соседними квантовыми уровнями. Эти недостатки устраняются комбинированными потенциалами, обеспечивающими притяжение бесконечно разнесенных атомов и отталкивание близко сведенных. Соответствующая модель будет рассмотрена в следующей публикации.

Список литературы

1. Fowler M. Schrödinger’s Equation in 1-D: Some Examples [Электронный ресурс]. – Режим доступа: galileo.phys.virginia.edu/classes/751.mf1i.fall02/OneDimSchr.htm

2. Lucha W. Solving the Schroedinger equation for bound states with Mathematica 3.0 [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://library.wolfram.com/infocenter/Articles/2455

3. Майер Р.В. Использование компьютерных моделей при изучении квантовой физики [Электронный ресурс]. – Режим доступа: http://cdn.scipeople.com/materials/57195/Mayer_Komp_mod_mikcromir_ DL.pdf