JOURNAL OF SCIENTIFIC RESEARCH, MODERN VIEWS AND INNOVATIONS
Volume 1, December, 2024
https://spaceknowladge.com
==

STATSIONAR SHREDINGER TENGLAMASINING IXTIYORIY BIR O'LCHAMLI POTENTSIAL O'RA UCHUN SONLI YECHIMI

Nuritdinova Shahnozabonu Ravshanovna [1]
[1] *Buxoro Davlat Universiteti 2-kurs magistranti*
sh.r.nuritdinova@buxdu.uz

MAQOLA MA'LUMOTI

MAQOLA TARIXI:

Received: 28.12.2024
Revised: 29.12.2024
Accepted: 30.12.2024

KALIT SO`ZLAR:

Shredinger tenglamasi, to'lqin funksiya, energiya, Zeydel usuli, sonli yechim, Mathcad dasturi.

ANNOTATSIYA:

Mazkur maqolada statsionar Shredinger tenglamasing ixtiyoriy bir o'lchamli o'ra uchun sonli yechimi ko'rib chiqilgan.Tenglamaning sonli yechimni aniqlash uchun Zeydel usulidan foydalanilgan va Mathcad dasturi yordamida natija olingan.

KIRISH. Ko'pgina mikroskopik tizimlarning tavsifi faqat kvant mexanikasi doirasida tushuntirilishi mumkin. Ushbu yondashuv nafaqat ideallashtirilgan fizik masalalarda qo'llaniladi: kvant kimyosi atomlar va molekulalarning tuzilishini tavsiflash va ulardagi elektron zichligini taqsimlashni o'rganishda ham bu usul qulay sanaladi. Shu bilan birga, tegishli muammolarning analitik yechimlari juda kam uchraydi. Ushbu fan sohasining amaliy ahamiyati katta: kompyuter hisob-kitoblari asosida molekulalarning faol markazlarini tanib olish va ularning funksiyalarini tushuntirish olimlarga yangi dori vositalari va materiallar yaratish imkonini beradi.

Haqiqiy tizimlarni matematik tavsiflash muammosi juda murakkab, shuning uchun biz uning eng oddiy holatlari bilan cheklanamiz. Devorlari cheksiz bo'lgan uch o'lchamli to'rtburchak potensial o'rani ko'rib chiqamiz va unga massasi m bo'lgan sinov zarrasini joylashtiramiz. U potentsial energiya x, y, z koordinatalarining funksiyasi sifatida berilgan bo'lsin. Kvant mexanikasi tenglamalariga asoslanib, potentsial o'radagi zarracha holatlarini qidiramiz.

NAZARIYA

Kvant mexanikasidagi potentsial maydondagi relyativistik bo'lmagan zarrachaning harakati Shredinger tenglamasi bilan tavsiflanadi. Bir o'lchamli potensial o'ra masalasini ko'rib chiqayotganimiz tufayli maqoladagi barcha formulalar umumiy formulaning bir o'lchamli holi uchun qaralgan:

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t}=-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U(x)\psi \qquad (1)$$

Bu yerda m – zarrachaning massasi, U(x) – tashqi maydondagi potensial energiyasi, ψ – to‘lqin funksiyasi. [1]

Statsionar Shredinger tenglamasi energiya ma'lum qiymatlarni oladigan tizimning holatini tavsiflaydi:

$$\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+[E-U(x)]\,\psi=0 \quad (2)$$

Ushbu tenglamaning yechimlari ψ_n tizimning o'ziga xos funksiyalari deb ataladi va E_n - parametrining mos keladigan qiymatlari energiyaning xos qiymatlari deb ataladi. Ma'lumki, zarracha chekli harakat qilganda (masalan, potentsial o’rada) $E_n$ning xos qiymatlari diskret spektrni hosil qiladi. Gamiltonian (tizimning umumiy energiya operatori) ermit operatordir[1], shuning uchun uning xos qiymatlari E_n haqiqiy sonlar bo'lib chiqadi va matritsasi ermit matritsasidir. Buni keyinroq ishlatamiz.

(2) tenglama ikkinchi tartibli xususiy differensial tenglama bo'lib, uning aniq yechimlari faqat eng oddiy simmetrik potentsial U(x) uchun ma'lum. Ko'pgina amaliy muhim holatlarda (masalan, kvant kimyosida atomlar va molekulalar uchun eritmalar) sonli usullarga murojaat qilish kerak. [4]

Devorlari cheksiz baland bo'lgan bir o'lchamli yassi o’raning eng oddiy holi uchun Shredinger tenglamasining yechimini keltramiz:

$$U(x)=\begin{cases}0, & (x)\in[0,a]\\ \infty, & (x)\notin[0,a]\end{cases}$$

To'lqin funksiyasini bitta o'zgaruvchining funksiyasi hosilasi sifatida ko'rsatishimiz mumkin:

$$\psi(x) = \psi_x(x)$$

Shunda (2) tenglama quyidagi shakldagi tenglamaga aylanadi. [3]

$$\psi_x''+k_x^2\psi_x = 0 \qquad (3)$$

$$\psi_{x,n} = C_x \sin k_{x,n} x, \qquad k_{x,n} = \frac{\pi n}{a}.$$

Qidirilayotgan to'lqin funksiyasi:

$$\psi_{n_x}=C\sin(k_{x,n_x}x) \qquad (4)$$

$$k_{x,n_x}=\frac{\pi n_x}{a} \qquad (5)$$

Energiyaning xos qiymatlari:

$$E_{n_x}=\frac{\hbar^2}{2m}k_{x,n_x}^2 \qquad (6)$$

Dasturning to'g'ri ishlashini tekshirish uchun shu yechimdan foydalanamiz.

Fizik masalani chiziqli algebra masalasiga keltirish.

Yuqorida aytib o'tilganidek, statsionar Shredinger tenglamasi umumiy ko'rinishida aniq yechimga ega emas. Shuning uchun ba'zi hollarda sonli usullardan foydalanish kerak.

Tenglama

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi+U\,\psi = E\psi \qquad (7)$$

ikkinchi tartibli xususiy differensial tenglamadir, shuning uchun uning yechimini Zeydel usulida ko'rib chiqamiz.

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2\psi}{\partial x^2}+U\psi= E\psi$$

Chekli ayirmali usul formulalaridan foydalanadigan bo'lsak:[5]

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i}{\Delta x^2}+U\psi_i$$

Quyidagi belgilashni kiritsak:

$$u=-\frac{2m}{\hbar}U \qquad \varepsilon=-\frac{2m}{\hbar}E$$

$$\frac{\psi_{i+1}+\psi_{i-1}-2\psi_i}{\Delta x^2}+u\psi_i=\varepsilon\psi_i$$

$$\psi_i = \frac{\psi_{i+1}+\psi_{i-1}}{2-\Delta x^2(\varepsilon-u)} \qquad (8)$$

Hisoblash uchun boshlang'ich shartlarni kiritish.

Potensial o'ra ichida potensial energiya nolga teng va undan tashqarida esa cheksizga teng deb hisoblaymiz(a- o'raning kengligi):

$$U(x) = \begin{cases} \infty & x < 0 \\ 0 & 0 \le x \le a \\ \infty & x > a \end{cases}$$

Potensial o'radan tashqarida to'lqin funksiya mavjud emas, uning ichida esa qandaydir funksiya sifatida mavjud:

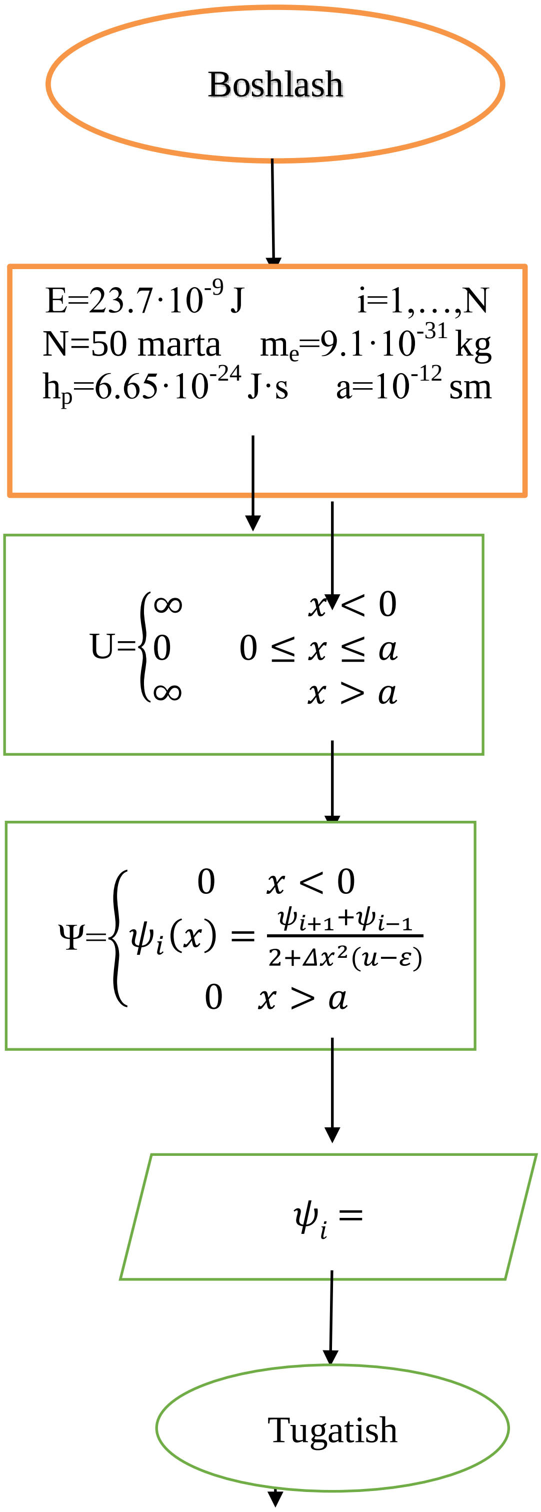
$$\psi(x) = \begin{cases} 0 & x < 0 \\ \psi(x)-? & 0 \le x \le a \\ 0 & x > a \end{cases}$$

Biz ko'rayotgan hol uchun qidirilayotgan to'lqin funksiya (8) formula ko'rinishida bo'ladi.

Zarraning to'liq energiyasi formulasi: $E_n = \frac{\pi^2\hbar^2}{2ma^2}n^2$

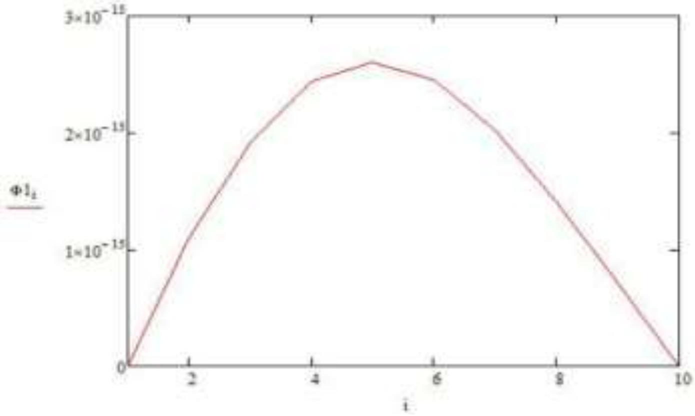
Kengligi a=10^{-12} smli bir o'lchamli potensial o'radagi elektronning (m=$9.1\cdot10^{-31}$ kg) harakatini ko'radigan bo'lsak, zarraning to'liq energiyasi birinchi sath uchun: E=$23.7\cdot10^{-9}$ J

Mathcad dasturida quyidagi algoritm orqali keltirilgan shartlar va formulalrni kiritsak kerakli natijalarni olamiz:



Olingan natijaliar

Qadamlar soni N=10 bo'lgan holat uchun:



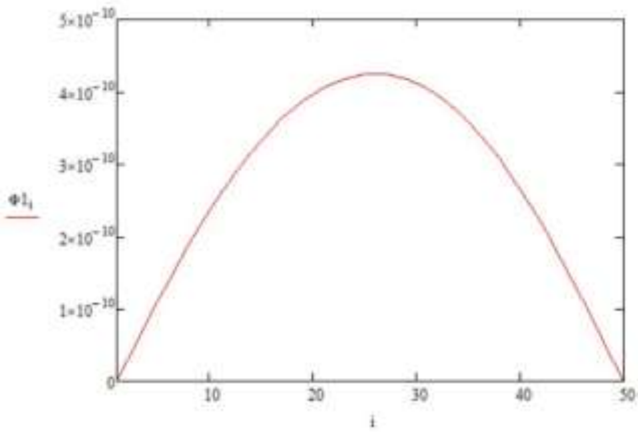
1.1-grafik. Qadamlar soni N=10 bo'lgan holat uchun to'lqin tenglamasining i ga bog'liqlik grafigi.

$\Phi 1 =$

	1
1	0
2	$1.089 \cdot 10^{-15}$
3	$1.923 \cdot 10^{-15}$
4	$2.434 \cdot 10^{-15}$
5	$2.601 \cdot 10^{-15}$
6	$2.444 \cdot 10^{-15}$
7	$2.02 \cdot 10^{-15}$
8	$1.409 \cdot 10^{-15}$
9	0
10	0

1.1-jadval. Qadamlar soni N=10 bo'lgan holat uchun to'lqin tenglamasining i ga bog'liqlik jadvali.

Qadamlar soni N=50 bo'lgan holat uchun:



1.2-grafik. Qadamlar soni N=50 bo'lgan holat uchun to'lqin tenglamasining i ga bog'liqlik grafigi.

$\Phi 1 =$

	1
1	0
2	$2.857 \cdot 10^{-11}$
3	$5.686 \cdot 10^{-11}$
4	$8.472 \cdot 10^{-11}$
5	$1.12 \cdot 10^{-10}$
6	$1.387 \cdot 10^{-10}$
7	$1.646 \cdot 10^{-10}$
8	$1.896 \cdot 10^{-10}$
9	$2.136 \cdot 10^{-10}$
10	$2.365 \cdot 10^{-10}$
11	$2.584 \cdot 10^{-10}$
12	$2.791 \cdot 10^{-10}$
13	$2.985 \cdot 10^{-10}$
14	$3.166 \cdot 10^{-10}$
15	$3.335 \cdot 10^{-10}$
16	...

1.2-jadval. Qadamlar soni N=50 bo’lgan holat uchun to’lqin tenglamasining i ga bog’liqlik jadvali.

Xulosa

Statsionar Shredinger tenglamasini sonli yechganda avvalambor albatta algebraik tenglamalar sistemasini yechishning turli xil usullariga murojaat etamiz. Ushbu maqolada algebraik tenglamalar sistemasini yechishning Zeydel usuli tanlab olindi. Keltirilgan formulalardan va olingan natijalardan shuni xulosa qilish mumkinki, to’lqin tenglamasi zarraning to’lqin energiyasiga (bu esa o’z navbatida sath soniga) bilvosita bog’liq ekanligini ko’rsatadi. Undan tashqari potensial o’ra kengligi hamda iteratsiya qadamlari soni ham to’lqin tenglamasi qiymatini o’zgartirishi mumkin ekan.

Foydalanilgan adabiyotlar:

1. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. Теоретическая физика: Квантовая механика (нерелятивистская теория). – М.: Наука, 1989.
2. Hogben, L. Handbook of linear algebra. Taylor & Francis Group, 2007.
3. Dammel J. W. Applied Numerical Linear Algebra. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1997.
4. Фларри Р. Квантовая химия. – М.: Мир, 1985.
5. Андерсон Д. Вычислительная Гидромеханика И Теплообмен Т1 1990 Мир 385с