



STATSIONAR SHREDINGER TENGLAMASINING SONLI YECHIMLARI

Nuritdinova Shahnozabonu Ravshanovna

BuxDU magistranti

sh.r.nuritdinova@buxdu.uz

Annotatsiya: *Statsionar Shredinger tenglamasi potentsial maydonlardagi mikroskopik zarrachalarning mumkin bo'lgan holatlarini tavsiflovchi kvant mexanikasining asosiy tenglamasidir. Biroq, ko'pgina real muammolarda, ko'rib chiqilayotgan tizimlarning potentsiallari va geometriyasining murakkabligi tufayli ushbu tenglamaning analitik yechimini olish doim ham mumkin emas. Shu munosabat bilan, taxminiy energiya qiymatlari va mos keladigan to'lqin funksiyalarini olishga imkon beruvchi sonli usullardan foydalanish dolzarb bo'lib qoladi.*

Kalit so'zlar: *Shredinger tenglamasi, sonli usullar, chekli ayirma usuli, Ritz usuli, Galerkin usuli, chekli elementlar usuli, matritsani parchalash usuli*

Statsionar Shredinger tenglamasini yechishning sonli usullari analitik yechimlarlar mavjud bo'lmagan kvant tizimlarining taxminiy energiya qiymatlari va to'lqin funktsiyalarini samarali topishga imkon beradi.

Statsionar Shredinger tenglamasi mikroskopik zarrachalarning energiya holatlarini tavsiflovchi kvant mexanikasining asosiy tenglamasidir. Ba'zi ideallashtirilgan potentsial funksiyalar uchun (masalan, cheksiz chuqur potentsial o'ra, garmonik ossilator, vodorodga o'xshash atom) aniq analitik yechimlarni olish mumkin. Biroq, aksariyat real fizik tizimlarda potentsiallarning murakkabligi yoki o'zaro ta'sirlarning ko'p xilli tabiati tufayli bunday yechimlarga erishib bo'lmaydi.

Bunday hollarda tenglamani taxminan yechish uchun sonli usullardan foydalaniladi. Eng keng tarqalganlarga quyidagilar kiradi:

1. Tenglamani diskret shaklga aylantiruvchi va energiyaning xos qiymatlarini sonli topish imkonini beruvchi chekli ayirma usuli: Differensial tenglama diskret panjara bilan almashtiriladi - hosilalar farq ifodalari bilan yaqinlashadi. Tenglama sonli yechish mumkin bo'lgan chiziqli algebraik tenglamalar tizimiga aylanadi (odatda xos qiymatlarni topish uchun).

Afzalligi:

Amalga oshirish qulayligi;

Bir o'lchovli muammolar uchun javob beradi;

Yupqa to'siqda yaxshi aniqlikni ta'minlaydi;

Kamchiliklari:

Ko'p o'lchovli masalalar uchun yaxshi miqyosda emas;

Chegaraviy shartlarga sezgir.

Qo'llanilishi:



Oddiy potentsial quduqlar, tunellar, kvant to'siqlari bilan bog'liq muammolar.

2. Asosiy holatni aniq baholashni ta'minlovchi variatsion yondashuv usullari (Ritz, Galerkin) - Parametrlarga bog'liq bo'lgan taxminiy to'lqin funksiyasi izlanadi. Uni energiya ifodasiga almashtirib, biz ushbu parametrlarga nisbatan funksional energiyani minimallashtiramiz. Usul asosiy holatning energiyasi mumkin bo'lgan minimal bo'lishiga asoslanadi.

Afzalligi:

Asosiy holat energiyasining yuqori chegarasini beradi;

Sinov funksiyalarining namunalari bilan yuqori aniqlik;

Ko'p qirralilik: ko'p o'lchovli va murakkab tizimlarga qo'llanilishi mumkin.

Kamchiliklari:

Sinov funksiyasini tanlashga bog'liq;

G'alayonlangan holatlar uchun foydalanish qiyinroq,

Qo'llanilishi:

Asosiy holatning yuqori aniqligi talab qilinadigan molekulalar, atomlar, kvant nuqtalarining energiyasini hisoblash.

3. Murakkab geometriya va bir xil bo'lmagan sharoitlarda qo'llaniladigan chekli elementlar usuli - Yechim sohasi kichik elementlarga (masalan, uchburchaklar, to'rtburchaklar) bo'linadi va ularning har birida oddiy funksiyalar yordamida yechim yaqinlashadi. Keyin butun tizim birlashtirilib, sonli yechilishi mumkin bo'lgan global matritsa hosil bo'ladi.

Afzalligi:

Ixtiyoriy geometriya bilan yaxshi ishlaydi;

Murakkab chegara sharoitlarini qo'llab-quvvatlaydi;

Nozik to'rda yuqori aniqlik.

Kamchiliklari:

Amalga oshirish qiyinroq;

Ko'p hisoblash resurslarini talab qiladi.

Qo'llanilishi:

Murakkab kvant tizimlari, nanostrukturalarni modellashtirish, kvant nuqtalari, to'lqin o'tkazgichlar.

4. Matritsalarini parchalash usullari, ayniqsa kvant kimyosi va atom fizikasida foydali - Shredinger tenglamasi matritsa ko'rinishiga aylantiriladi: to'lqin funksiyasi bazi funksiyalarining chiziqli birikmasi sifatida, bu asosda esa Gamiltonian (energiya operatori) matritsa sifatida ifodalanadi. Keyinchalik masala ushbu matritsaning xos qiymatlari va xos vektorlarini topishga tushadi.

Afzalligi:

Ko'p sonli holatlar bilan ishlash imkonini beradi;

Standart sonli algoritmlarni qo'llash oson (masalan QR parchalanishi, Yakobi usuli va boshqalar).



TANQIDIY NAZAR, TAHLILIY TAFAKKUR VA INNOVATSION G'UYALAR



Ayniqsa ortonormal asos bilan yaxshi ishlaydi (masalan, garmonik osilator)

Kamchiliklari:

Tizim o'lchami oshgani sayin matritsa o'lchami tez o'sib boradi;

Asosni sinchkovlik bilan tanlashni talab qiladi (aks holda aniqlik yo'qoladi).

Qo'llanilish:

Kvant kimyosi: molekulyar orbital usul;

Ko'p tanali tizimlar (atom yadrolari, molekulalardagi elektronlar);

Ortonormal asoslardan foydalanish qulayroq bo'lgan murakkab potentsial funktsiyalar (masalan, sferik harmonika, Lager funktsiyalari)

Sonli usullar keng ko'lamli amaliy masalalarni hal qilish imkonini beradi: kvant nuqtalari va ixtiyoriy shakldagi potentsial o'ralarni modellash, tunel effektlarini o'rganish, molekulalar va kristallarning spektrlarini hisoblash. Bu sonli yondashuvlarni zamonaviy fanda - kvant fizikasidan materialshunoslik va kelajak texnologiyalarigacha ajralmas qiladi.

Xulosa:

Sonli usullardan foydalanish kvant tizimlarini o'rganish imkoniyatlarini sezilarli darajada kengaytirish imkonini beradi va Shredinger tenglamasini amaliy qo'llashda ularning hayotiy rolini tasdiqlaydi. Sonli usullar tizimning murakkabligi tufayli analitik yechim imkonsiz bo'lgan hollarda statsionar Shredinger tenglamasini yechish uchun zarur vositadir. Ular kvant muammolarining keng toifasi uchun energiyaning o'ziga xos qiymatlarini va mos keladigan to'lqin funktsiyalarini taxminan topishga imkon beradi.

Chekli farq, chekli element, variatsion va matritsali yondashuvlar qattiq jismlar fizikasi, kvant kimyosi va nanostrukturani modellashtirishda qo'llaniladi. Sonli yechimlardan foydalanish kvant tizimlarini o'rganish imkoniyatlarini kengaytiradi va ularni ilmiy tadqiqotlar va amaliy ishlanmalarda ajralmas qiladi.

Foydalanilgan adabiyotlar

1. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. Том 3 / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. — 3-е изд. — М.: Наука, 1989. — 768 с.
2. Griffiths D. J. Introduction to Quantum Mechanics / David J. Griffiths. — 2nd ed. — Pearson Education, 2004. — 480 p.
3. Shankar R. Principles of Quantum Mechanics / R. Shankar. — 2nd ed. — Springer, 1994. — 676 p.
4. Thijssen J. M. Computational Physics / J. M. Thijssen. — 2nd ed. — Cambridge University Press, 2007. — 620 p.
5. Koonin S. E., Meredith D. C. Computational Physics: Fortran Version / S. E. Koonin, D. C. Meredith. — Addison-Wesley, 1990. — 494 p.