

ИСПОЛЬЗОВАНИЕ ЧИСЛЕННЫХ МЕТОДОВ ВЫЧИСЛЕНИЯ НА ПРАКТИЧЕСКИХ ЗАНЯТИЯХ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

Насырова Нигора Каримовна

доцент кафедры Физики Бухарского государственного
университета

nigora.nasirova@mail.ru

<https://doi.org/10.5281/zenodo.19045811>

ARTICLE INFO

Qabul qilindi: 12-mart 2026 yil

Ma'qullandi: 14-mart 2026 yil

Nashr qilindi: 16-mart 2026 yil

KEY WORDS

квантовая механика, численные
методы, уравнение Шрёдингера,
компьютерное моделирование,
метод конечных разностей,
вычислительная физика,
образовательные технологии.

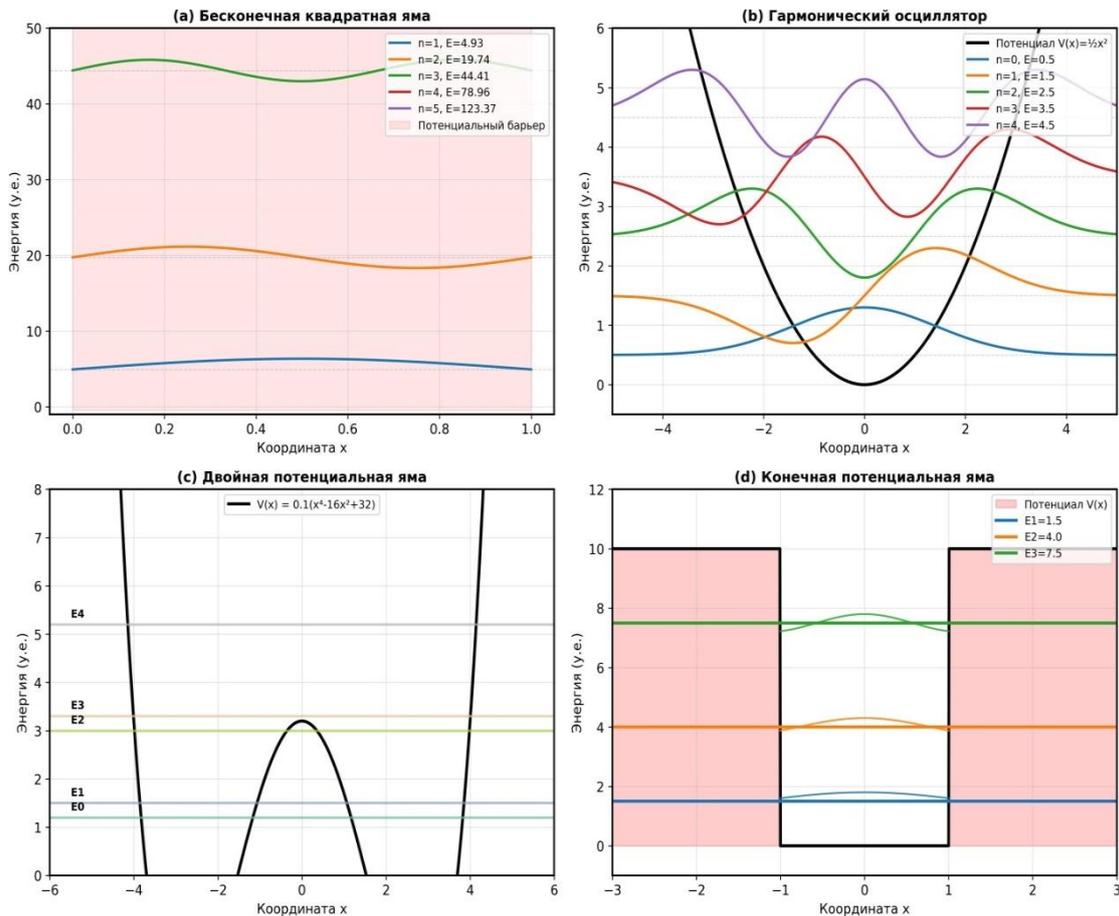
ABSTRACT

В статье рассматривается использование численных методов вычисления в процессе проведения практических занятий по квантовой механике. Показано, что применение компьютерного моделирования и современных вычислительных инструментов позволяет преодолеть ограничения аналитических методов, которые часто не позволяют исследовать сложные физические системы с произвольными потенциалами. Особое внимание уделяется применению метода конечных разностей, схемы Кранка–Николсона и специализированных программных библиотек для численного решения уравнения Шрёдингера. Подчеркивается, что интеграция вычислительных технологий в образовательный процесс способствует более глубокому пониманию квантовых явлений, таких как туннелирование, интерференция и динамика волновых пакетов. Отмечается, что использование интерактивных сред программирования и визуализации помогает студентам устанавливать связь между математическим аппаратом и физической интерпретацией результатов. В результате внедрение численных методов в учебный процесс повышает эффективность обучения и способствует формированию навыков научного моделирования, необходимых для современной теоретической и прикладной физики.

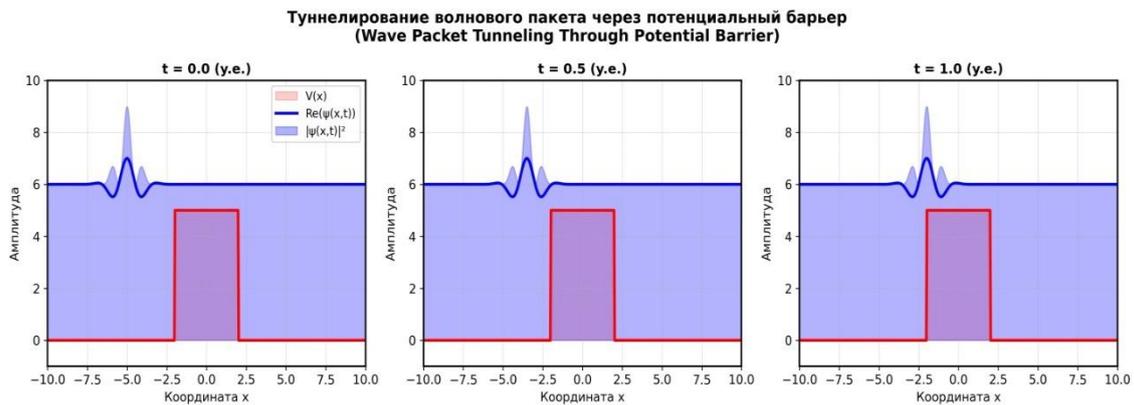
Введение

Современная методика преподавания теоретической физики сталкивается с ограниченностью аналитических подходов, которые зачастую не позволяют исследовать системы с произвольными потенциалами или многомерными взаимодействиями (1). Традиционное обучение, сфокусированное исключительно на поиске точных решений для частных задач, отвлекает студентов от глубокого анализа физических систем, смещая акцент на громоздкий математический аппарат (2).

Спектры энергий и волновые функции в квантовых системах
(Energy Spectra and Wave Functions in Quantum Systems)



Внедрение компьютерного моделирования позволяет преодолеть этот барьер, предоставляя обучающимся инструменты для визуализации энергетических спектров и поведения волновых функций в произвольных полях (3), (4), тем самым стимулируя самостоятельную разработку алгоритмов для решения стационарного уравнения Шрёдингера (5,6). Это способствует переходу от упрощенных моделей к исследованию сложных физических ситуаций, таких как туннелирование волновых пакетов через барьеры произвольной формы, что ранее было невозможно реализовать в рамках стандартных курсов (7).

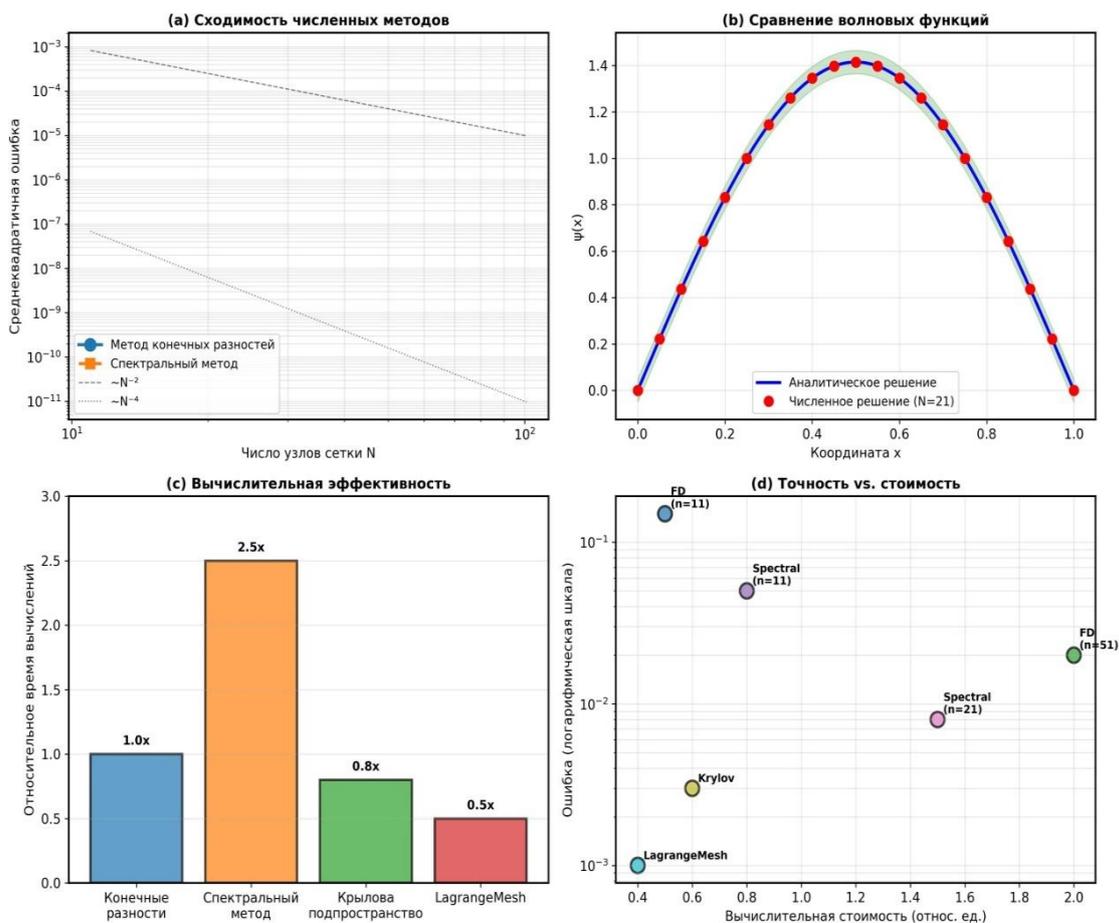


Исследования показывают, что интеграция вычислительных инструментов в учебный процесс способствует формированию ментальных моделей и позволяет анализировать системы, выходящие за рамки аналитической разрешимости (8). Применение данных технологий дает обучающимся возможность исследовать временную эволюцию состояний и многомерные конфигурации, визуализируя процессы, недоступные для стандартного аналитического аппарата (9). Такой подход не только повышает вовлеченность студентов, но и позволяет успешно дополнить традиционные лабораторные работы компьютерным моделированием процессов, которые практически невозможно наблюдать в реальном эксперименте (10). В частности, такие инструменты помогают студентам связать формализм исчисления с дискретным представлением физических величин, тем самым преодолевая трудности при решении дифференциальных уравнений (6).

Методология

Для решения задач квантовой механики на практических занятиях предлагается использование метода конечных разностей для дискретизации уравнения Шрёдингера, что позволяет свести дифференциальное уравнение к задаче на собственные значения матриц (11). В частности, применение схемы Кранка-Николсона обеспечивает высокую точность и устойчивость при расчете эволюции временных состояний квантовых систем, что особенно критично при моделировании поведения волновых пакетов (12). Также эффективным подходом является внедрение программных комплексов компьютерной алгебры, которые позволяют автоматизировать вычисление матричных элементов и решение секулярных уравнений (13). Кроме того, использование специализированных библиотек, таких как LagrangeMesh, дает возможность студентам быстро получать высокоточные спектры состояний для широкого класса потенциалов (14). Такой подход позволяет студентам экспериментировать с фундаментальными постулатами, самостоятельно визуализируя квантовые эффекты, такие как декогеренция и туннелирование, что значительно упрощает усвоение теории (15,16).

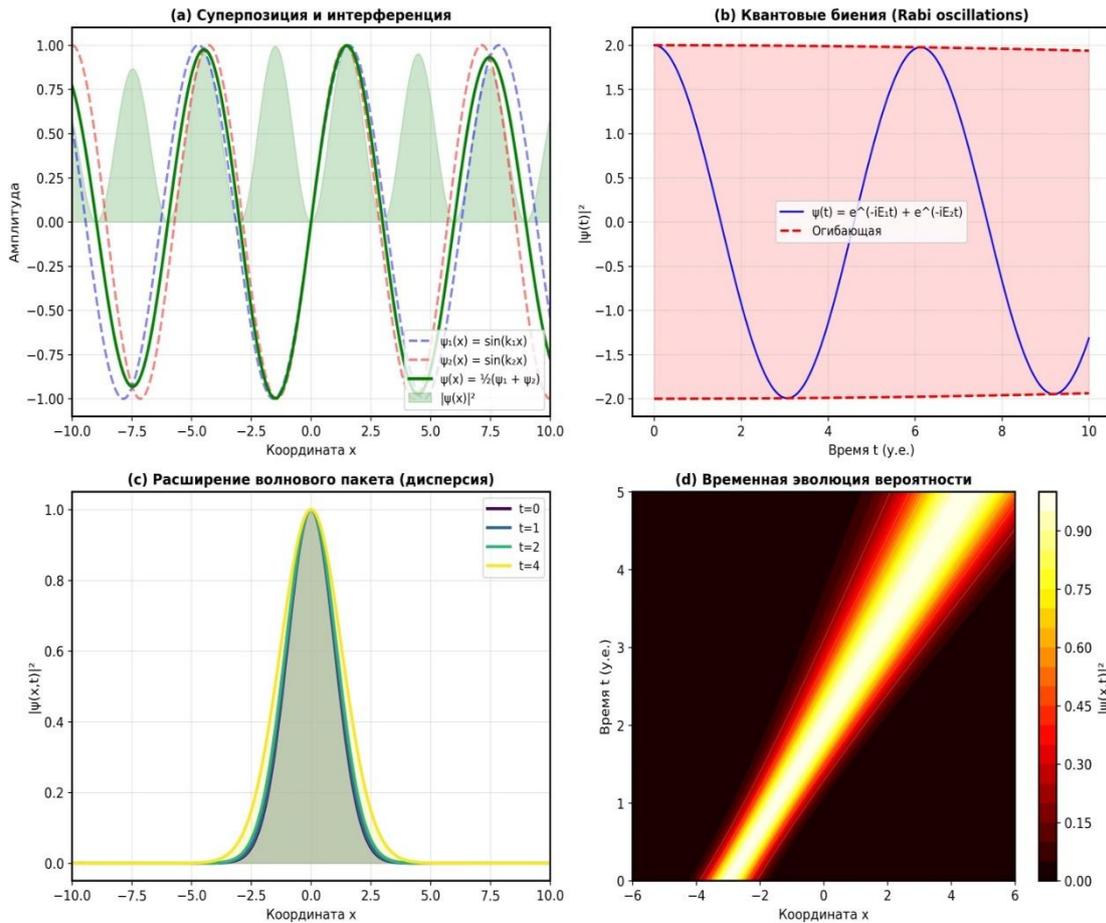
Сравнение численных методов решения уравнения Шрёдингера
(Comparison of Numerical Methods for Schrödinger Equation)



Результаты

Внедрение численных методов позволяет студентам получать точные количественные данные, подтверждающие теоретические прогнозы, и эффективно сопоставлять их с аналитическими приближениями (8).

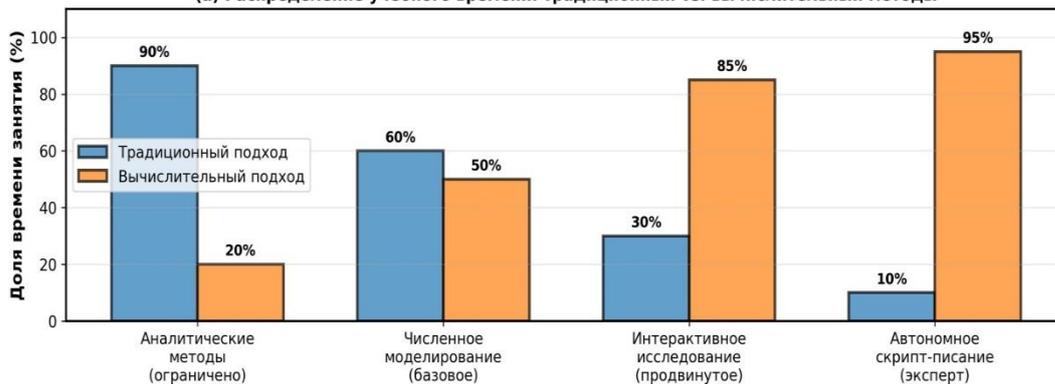
Временная эволюция и квантовые эффекты
(Time Evolution and Quantum Effects)



Подобная интеграция вычислительных подходов позволяет учащимся сосредоточиться на физической интерпретации явлений, таких как туннелирование и интерференция, без чрезмерной концентрации на вычислительной сложности (17). Более того, интерактивные платформы, такие как Jupyter-ноутбуки, способствуют развитию навыков научного поиска, позволяя обучающимся самостоятельно исследовать параметры квантовых систем и анализировать их влияние на физические характеристики (18). Такая практико-ориентированная деятельность формирует у студентов компетенции, необходимые для работы с современными технологиями моделирования и квантовыми вычислительными системами (19).

**Педагогическая трансформация: от аналитических к вычислительным методам
(Pedagogical Transformation: From Analytical to Computational Methods)**

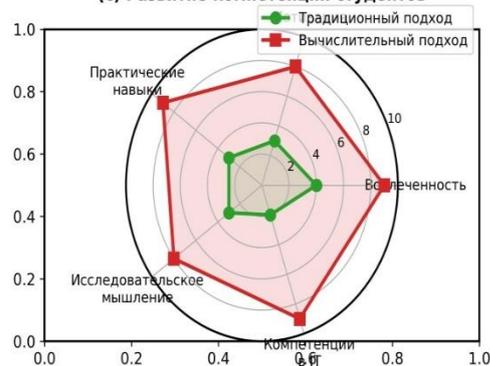
(а) Распределение учебного времени: традиционный vs. вычислительный методы



(b) Улучшение понимания концепций



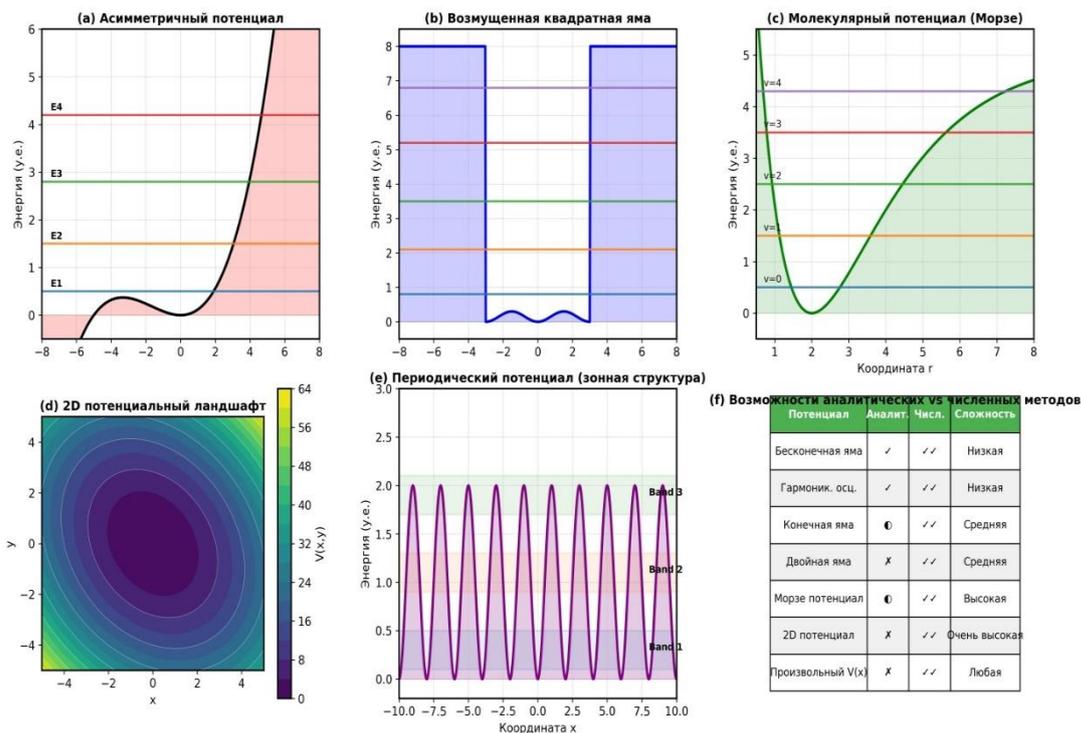
(c) Развитие компетенций студентов



Обсуждение

Ключевым преимуществом численного моделирования является преодоление когнитивного разрыва при переходе от дискретных состояний к непрерывным системам, что позволяет студентам наглядно исследовать динамику волновых функций (20). Такой подход позволяет отказаться от использования инструментов как «черных ящиков», стимулируя студентов самостоятельно реализовывать алгоритмы и глубже понимать вычислительную физику (1). Следовательно, активное участие обучающихся в проектировании и программной реализации численных моделей способствует формированию устойчивых профессиональных навыков, которые необходимы для эффективного решения прикладных задач современной теоретической физики (11,21).

Произвольные потенциальные ландшафты и спектры
(Arbitrary Potential Landscapes and Spectra)



Заключение

Применение численных методов в учебном процессе трансформирует изучение квантовой механики из теоретической дисциплины в активный исследовательский опыт, обеспечивая более глубокое понимание динамических процессов [22,23]. Интеграция подобных вычислительных инструментов повышает вовлеченность студентов и способствует формированию положительного отношения к изучению квантовой теории [24]. Данный подход не только демистифицирует внутренние механизмы квантовых расчетов, но и существенно снижает когнитивную нагрузку при изучении сложных микроскопических явлений, делая невидимые процессы наглядными и доступными для анализа [25]. В конечном итоге такой инструментарий способствует развитию навыков научного мышления, позволяя студентам устанавливать прямые связи между математическим аппаратом и визуальными моделями квантовых систем [26], [27].

Литература:

1. Srnec MN, Upadhyay S, Madura JD. A Python Program for Solving Schrödinger's Equation in Undergraduate Physical Chemistry. Journal of Chemical Education [Internet]. 2017 Apr 17 [cited 2025 Nov];94(6):813. Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.7b00003>
2. Jelic V, Marsiglio F. The double-well potential in quantum mechanics: a simple, numerically exact formulation. European Journal of Physics [Internet]. 2012 Sep 14 [cited 2025 Oct];33(6):1651. Available from: <https://doi.org/10.1088/0143-0807/33/6/1651>
3. Ahmed SZ, Jensen JHM, Weidner CA, Sørensen JJ, Mudrich M, Sherson J. Quantum composer: A programmable quantum visualization and simulation tool for education and research. American Journal of Physics [Internet]. 2021 Feb 19 [cited 2025 Oct];89(3):307. Available from: <https://doi.org/10.1119/10.0003396>

4. Jugdutt BA, Marsiglio F. Solving for three-dimensional central potentials using numerical matrix methods. *American Journal of Physics* [Internet]. 2013 Apr 16 [cited 2025 Sep];81(5):343. Available from: <https://doi.org/10.1119/1.4793594>
5. Schroeder DV. The variational-relaxation algorithm for finding quantum bound states. *American Journal of Physics* [Internet]. 2017 Aug 18 [cited 2025 Sep];85(9):698. Available from: <https://doi.org/10.1119/1.4997165>
6. Zhu G, Hu J, Du C. Assisting Tibetan Students in Learning Quantum Mechanics via Mathematica. *arXiv (Cornell University)* [Internet]. 2024 Jun 26 [cited 2025 Sep]; Available from: <http://arxiv.org/abs/2406.18810>
7. McKagan SB, Perkins KK, Wieman C. Deeper look at student learning of quantum mechanics: The case of tunneling. *Physical Review Special Topics - Physics Education Research* [Internet]. 2008 Oct 8 [cited 2025 Nov];4(2). Available from: <https://doi.org/10.1103/physrevstper.4.020103>
8. Ahmed SZ, Weidner CA, Jensen JHM, Sherson J, Lewandowski HJ. Student use of a quantum simulation and visualization tool. *European Journal of Physics* [Internet]. 2022 Sep 21 [cited 2025 Oct];43(6):65703. Available from: <https://doi.org/10.1088/1361-6404/ac93c7>
9. Ahmed SZ, Weidner CA, Jensen JHM, Sherson J, Lewandowski HJ. Student engagement and learning with Quantum Composer. *arXiv (Cornell University)* [Internet]. 2021 Apr 27 [cited 2025 Oct]; Available from: <http://arxiv.org/abs/2104.13260>
10. Proceedings of the XIX International Scientific and Practical Conference. 2022 Jun 9 [cited 2025 Jul]; Available from: <https://doi.org/10.46299/isg.2022.1.19>
11. Барахов AB, Volochovich EN, Medvedeva KA, Stepin DV. EDUCATIONAL COMPUTER SIMULATION EXPERIMENT «REAL-TIME SINGLE-MOLECULE IMAGING OF QUANTUM INTERFERENCE». *Open Education* [Internet]. 2015 Jan 1 [cited 2025 Oct];110. Available from: [https://doi.org/10.21686/1818-4243-2015-3\(110-110-114](https://doi.org/10.21686/1818-4243-2015-3(110-110-114)
12. Kabir A. Numerical Simulation of the Time-Dependent Schrodinger Equation Using the Crank-Nicolson Method. *arXiv (Cornell University)* [Internet]. 2024 Oct 13 [cited 2025 Sep]; Available from: <http://arxiv.org/abs/2410.10060>
13. Fernández FM. Variational approach to the Schrödinger equation with a delta-function potential. *European Journal of Physics* [Internet]. 2021 Dec 1 [cited 2025 Sep];43(2):25401. Available from: <https://doi.org/10.1088/1361-6404/ac3f27>
14. Valle JC del. Solving the one-dimensional time-independent Schrödinger equation with high accuracy: The LagrangeMesh Mathematica® package. *International Journal of Modern Physics C* [Internet]. 2023 May 26 [cited 2025 Nov];35(1). Available from: <https://doi.org/10.1142/s0129183124500116>
15. Passante G, Kohnle A. Enhancing student visual understanding of the time evolution of quantum systems. *Physical Review Physics Education Research* [Internet]. 2019 Feb 13 [cited 2025 Nov];15(1). Available from: <https://doi.org/10.1103/physrevphyseducres.15.010110>
16. Stippell E, Akimov AV, Prezhdo OV. PySyComp: A Symbolic Python Library for the Undergraduate Quantum Chemistry Course. *Journal of Chemical Education* [Internet]. 2023 Sep 19 [cited 2025 Nov];100(10):4077. Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.2c00974>
17. McKagan SB, Perkins KK, Dubson M, Malley C, Reid S, LeMaster R, et al. Developing and researching PhET simulations for teaching quantum mechanics. *American Journal of Physics*

- [Internet]. 2008 Mar 13 [cited 2025 Sep];76(4):406. Available from: <https://doi.org/10.1119/1.2885199>
18. Cruzeiro VWD, Gao X, Kleiman VD. Implementing New Educational Platforms in the Classroom: An Interactive Approach to the Particle in a Box Problem. *Journal of Chemical Education* [Internet]. 2019 Jul 11 [cited 2025 Nov];96(8):1663. Available from: <https://doi.org/10.1021/acs.jchemed.9b00195>
19. Lancaster JL, Allen DB. Simulating spin dynamics with quantum computers. *American Journal of Physics* [Internet]. 2024 Dec 23 [cited 2025 Sep];93(1):98. Available from: <https://doi.org/10.1119/5.0112717>
20. Solorio CD, Gire E, Roundy D. Student understandings of discrete and continuous in quantum mechanics: A thematic analysis. *Physical Review Physics Education Research* [Internet]. 2025 Nov 4 [cited 2026 Feb];21(2). Available from: <https://doi.org/10.1103/4q6g-yq88>
21. Gharibnejad H, Schneider BI, Leadingham M, Schmale HJ. Comparison of Numerical Approaches to the Time-Dependent Schrödinger Solutions in One Dimension. arXiv (Cornell University) [Internet]. 2018 Sep 24 [cited 2025 Oct]; Available from: <http://arxiv.org/abs/1809.09164>
22. Weidner CA, Ahmed SZ, Jensen JHM, Sherson J, Lewandowski HJ. Investigating student use of a flexible tool for simulating and visualizing quantum mechanics. In: 2017 Physics Education Research Conference Proceedings [Internet]. 2020 [cited 2025 Oct]. Available from: <https://doi.org/10.1119/perc.2020.pr.weidner>
23. Guttieres LAJ, Petrović MD, Freericks JK. Computational projects with the Landau-Zener problem in the quantum mechanics classroom. arXiv (Cornell University) [Internet]. 2023 Jun 21 [cited 2025 Oct]; Available from: <http://arxiv.org/abs/2306.11633>
24. Galante L. Blowing in a drinking straw: introducing quantum physics. arXiv (Cornell University) [Internet]. 2025 Jun 13 [cited 2025 Oct]; Available from: <http://arxiv.org/abs/2506.11524>
25. Sánchez LH, Garay IAB, Rosas AF, Prieto IR, Soto-Eguibar F, Moya-Cessa HM. Numerical solution of the Lindblad master equation using the Runge-Kutta method implemented in Python. arXiv (Cornell University) [Internet]. 2025 Jun 24 [cited 2025 Oct]; Available from: <http://arxiv.org/abs/2506.19238>
26. Haraldsrud A, Odden TOB. Using feedback loops from computational simulations as resources for sensemaking: a case study from physical chemistry. *Chemistry Education Research and Practice* [Internet]. 2024 Jan 1 [cited 2025 Nov];25(3):760. Available from: <https://doi.org/10.1039/d4rp00017j>
27. Kohnle A, Baily C, Hooley C, Torrance B. Optimization of Simulations and Activities for a New Introductory Quantum Mechanics Curriculum. In: 2017 Physics Education Research Conference Proceedings [Internet]. 2014 [cited 2025 Sep]. Available from: <https://doi.org/10.1119/perc.2013.pr.040>