

# Учебный компьютерный имитационный эксперимент «Визуализация в реальном времени квантовой интерференции одиночных молекул»

*Принимая участие в организованной проектной деятельности, студенты технического университета создают виртуальные физические лаборатории. В статье приводится пример проектной разработки, связанной с имитационным компьютерным моделированием и визуализацией одного из удивительных проявлений реальности – квантовой интерференции частиц. В качестве прототипа для моделирования послужил реальный эксперимент с тяжелыми органическими молекулами флуоресцентных красителей. Студенческая программная разработка может быть использована в информационном пространстве системы открытого образования.*

**Ключевые слова:** проектная деятельность, компьютерное моделирование физических процессов, виртуальная лаборатория, квантовая интерференция.

## EDUCATIONAL COMPUTER SIMULATION EXPERIMENT «REAL-TIME SINGLE-MOLECULE IMAGING OF QUANTUM INTERFERENCE»

*Taking part in the organized project activities students of the technical University create virtual physics laboratories. The article gives an example of the student's project-computer modeling and visualization one of the most wonderful manifestations of reality-quantum interference of particles. The real experiment with heavy organic fluorescent molecules is used as a prototype for this computer simulation. The student's software product can be used in informational space of the system of open education.*

**Keywords:** project activities, computer simulation of physical processes, virtual laboratory, quantum interference.

### Введение

Внедрение информационных компьютерных технологий (ИКТ) в процесс обучения физике находит все большее распространение в практике вузов и школ [1–9]. Одним из направлений использования ИКТ являются виртуальные лаборатории, позволяющие существенно расширить дидактические возможности образовательного процесса [1–6]. Проведение вычислительных экспериментов эффективно дополняет традиционный лабораторный практикум, облегчая изучение и понимание физики [6–8]. Виртуальные лаборатории с ус-

пехом внедряются в интерактивные обучающие среды как элементы электронных учебников и в качестве отдельных электронных демонстраций [9]. В свою очередь, для создания самих виртуальных лабораторий (виртуальных физических установок) уже разрабатываются специализированные программные среды [1].

С дидактической точки зрения одним из наиболее интересных и продуктивных вариантов включения ИКТ в физический практикум является проведение обучающимися вычислительных экспериментов с использованием самостоятельно разработанных компьютерных про-

грамм, реализующих математическое моделирование физических процессов. В технических университетах такая практика вполне возможна и уже получила свое определенное развитие [2–5]. Как показывает опыт, студенты младших курсов *технического университета* могут быть вовлечены в *проектную деятельность* по проведению виртуальных физических экспериментов с *разработкой собственных программных продуктов*, которые в дальнейшем используются в открытом образовательном пространстве университетов и школ [4–6].

На кафедре общей физики *Новосибирского государственного тех-*



**Александр Викторович Баранов,**  
к.ф.-м.н., доцент кафедры общей  
физики  
Тел.: (8383) 346-06-77  
Эл. почта: baranovav@ngs.ru  
Новосибирский государственный  
технический университет  
www.nstu.ru

**Alexander V. Baranov,**  
PhD in Physical and Mathematical  
Sciences, Associate Professor of The  
Department of General physics  
Tel. : (8383) 346-06-77  
E-mail: baranovav@ngs.ru  
Novosibirsk state technical University  
www.nstu.ru



**Евгений Николаевич Волохович,**  
студент факультета прикладной  
математики и информатики  
Тел.: (8383) 346-37-54  
Эл. почта: xJhetonx@yandex.ru  
Новосибирский государственный  
технический университет  
www.nstu.ru

**Evgeny N. Volochovich,**  
Student of Faculty of Applied  
Mathematics and Computer Science  
Tel. : (8383) 346-06-77  
E-mail: xJhetonx@yandex.ru  
Novosibirsk state technical University  
www.nstu.ru

нического университета (НГТУ) организована студенческая проектная деятельность *компьютерного моделирования* при изучении курса физики [2]. На добровольных началах бригады студентов участвуют в разработке программных продуктов для проведения виртуальных экспериментов. Последние используются как демонстрации на лекциях и как дидактические средства, расширяющие возможности традиционного лабораторного практикума [4, 5].

Темы, предлагаемые для студенческих проектных разработок, весьма разнообразны и требуют для своей реализации детального изучения моделируемых физических процессов, освоения и применения различных численных методов и алгоритмов, определенных программистских приемов, использования современных средств динамической компьютерной графики [2].

Большой интерес представляют собой программные разработки, в которых моделируются и визуализируются физические процессы, характерные для малых временных и пространственных масштабов, когда, в частности, проявляются особые закономерности – квантово-механические [3]. В статье рассматривается пример проектной студенческой разработки, связанной с имитационным компьютерным моделированием и динамической визуализацией одного из удивительных проявлений реальности – *квантовой интерференции частиц*.

## 2. Проектная реализация компьютерного имитационного эксперимента

Явление квантовой интерференции частиц вещества (элементарных частиц, атомов и молекул) продемонстрировано в целом ряде замечательных физических экспериментов. Наибольшее впечатление на разработчиков произвело знакомство с работами, подтверждающими идею о том, что волновые свойства присущи *отдельно взятым частицам* [10–14] (один из первых экспериментов был

проведен в СССР в лаборатории В.А. Фабриканта [10]).

Когда прочитали сообщение о наблюдении явления интерференции одиночных *тяжелых органических молекул* [12], было принято решение создать программный продукт, позволяющий осуществлять *имитационный виртуальный эксперимент*, визуально воспроизводящий появление интерференционной картины в процессе прохождения молекул через дифракционную решетку.

В эксперименте [12], использовавшем ряд современных оригинальных технологий, наблюдалась квантовая интерференция (дифракция) для двух видов тяжелых молекул флуоресцентных красителей – фталоцианина ( $C_{32}H_{18}N_8$ ) и его производной ( $C_{48}H_{26}F_{24}N_8O_8$ ). После прохождения дифракционной решетки одиночные молекулы попадали в кварцевое окно, где на них воздействовало излучение красного лазера (длина волны 661 нм). Возникающая флуоресценция возбужденных молекул снималась с использованием объектива микроскопа и светочувствительной матрицы с электронным умножением.

Для имитационного моделирования процесса в качестве выражения, определяющего пространственную компоненту плотности распределения вероятности (квадрат волновой функции), использовалось приближение Фраунгофера для углового распределения интенсивности при дифракции плоских волн на решетке:

$$I(\alpha) = I_1(0) \frac{\sin^2\left(\frac{\pi b * \sin(\alpha)}{\lambda}\right) \sin^2\left(\frac{N\pi d * \sin(\alpha)}{\lambda}\right)}{\left(\frac{\pi b * \sin(\alpha)}{\lambda}\right)^2 \sin^2\left(\frac{\pi d * \sin(\alpha)}{\lambda}\right)},$$

где  $b$  – ширина щели,  
 $d$  – период решетки,  
 $N$  – количество щелей,  
 $\lambda$  – дебройлевская длина волны, определяемая значением импульса молекулы,  
 $\alpha$  – угол дифракции,  
 $I_1(0)$  – интенсивность центрального дифракционного максимума для одной щели.

Как продемонстрировано в [11], данное распределение хорошо соответствует результатам реальных экспериментов по диф-



**Ксения Алексеевна Медведева,**  
студент факультета прикладной  
математики и информатики  
Тел.: (8383) 346-37-54  
Эл. почта: pcheta-k@mail.ru  
Новосибирский государственный  
технический университет  
www.nstu.ru

**Kseniya A. Medvedeva,**  
Student of Faculty of Applied  
Mathematics and Computer Science  
Tel. : (8383) 346-06-77  
E-mail: pcheta-k@mail.ru  
Novosibirsk state technical University  
www.nstu.ru



**Данил Вячеславович Степин,**  
студент факультета прикладной  
математики и информатики  
Тел.: (8383) 346-37-54  
Эл. почта: stepdan94@gmail.com  
Новосибирский государственный  
технический университет  
www.nstu.ru

**Danil V. Stepin,**  
Student of Faculty of Applied  
Mathematics and Computer Science  
Tel. : (8383) 346-06-77  
E-mail: stepdan94@gmail.com  
Novosibirsk state technical University  
www.nstu.ru

ракции частиц на системе параллельных щелей.

Одна из задач, которая сразу появилась в начале работы над проектом, заключалась в создании программного механизма реализации во времени псевдослучайного процесса последовательного попадания отдельных молекул на экран после прохождения дифракционной решетки. Этот временной процесс должен, в конечном счете, приводить к требуемому пространственному распределению молекул на экране в соответствии с заданной плотностью распределения вероятности как функции угла дифракции.

В подобных случаях для организации псевдослучайного временного процесса чаще всего используется метод Монте-Карло [15,16] в сочетании со стандартными программными функциями рандомизации, генерирующими, как правило, равномерные распределения. Однако применение этого метода для большого количества событий оказывается достаточно затратным с точки зрения процессорного времени.

Поскольку конечной целью программной разработки являлась визуальная имитация временного процесса последовательной дифракции большого количества одиночных молекул (несколько тысяч), было решено использовать более экономичный алгоритм, минимизирующий время проведения виртуального эксперимента.

Такой алгоритм был разработан и программно реализован с использованием метода тасования Ричарда Дурштенфельда [17]. Являясь улучшенным вариантом известного метода Фишера-Йетса, он позволяет более эффективно осуществлять случайную перестановку элементов заданного массива. В варианте Дурштенфельда осуществляется тасование «на месте». Элементы тасуются внутри массива без создания его копии с перестановками. Такая версия алгоритма даёт существенное преимущество при тасовании больших массивов данных.

Одним из задаваемых параметров для имитационного моделирования процесса является полное

количество молекул, участвующих в виртуальном эксперименте. В программе сначала происходит заполнение элементов массива, в котором будут храниться последовательные значения координат дифрагировавших молекул на экране в каждом небольшом интервале значений угла дифракции в соответствии с заданной функцией распределения вероятности (осуществляется последовательный перебор во всем интервале предельных углов). После этого включается механизм тасования Дурштенфельда, с помощью которого образуется псевдослучайная последовательность индексов. Эта последовательность и используется далее с целью визуальной имитации временного процесса дифракции отдельных молекул в пространственном направлении, ортогональном направлению щелей решетки. В направлении, параллельном щелям, используется псевдослучайное равномерное распределение, программно генерируемое стандартной библиотечной функцией.

Для реализации проекта в качестве языка программирования был выбран язык высокого уровня C++ по следующим причинам:

- В основу языка заложены принципы объектно-ориентированного программирования.
- Имеется возможность работы с открытой графической библиотекой OpenGL.

Программная разработка происходила в среде Qt Creator. Данная среда, в частности, позволяет создавать исполняемые файлы, внутри которых подключены необходимые функции библиотек. Последнее делает возможным разработку независимых и кроссплатформенных программных продуктов.

Для реализации псевдослучайной последовательности в программе создан массив Queue [] размерности M со значениями Queue[i] = i, i = 0, ..., M - 1. К массиву применен метод тасования Дурштенфельда, в результате чего сформирована последовательность чисел, хранящаяся в массиве Queue[].

Фрагмент кода программы, реализующий алгоритм создания псевдослучайной последовательности индексов методом тасования:

```

void myglwidget::makeRandomQueue() //подпрограмма тасования
{
    int i, buf, RandomConst; // i - счетчик для циклов,
                            // buf - буферная переменная,
                            // RandomConst - случайная кон-
                            // станта

    Queue = new int [NumOfPoints]; // инициализация массива
                                    // последовательности
                                    // размерности NumOfPoints
                                    // NumOfPoints - количест-
                                    // во точек

    for(i = 0; i < NumOfPoints; i++)
        Queue[i] = i;

    for(i = NumOfPoints - 1; i >= 1; i--)
    {
        RandomConst = rand()%i + 1; // запись в RandomConst
                                    // случайного числа
        buf = Queue[i]; // меняются местами эле-
                        // менты последовательности

        Queue[i] = Queue[RandomConst];
        Queue[RandomConst] = buf;
    }
}

```

С помощью библиотечных функций создан *интерактивный графический интерфейс*, содержащий *стилизованное 3D изображение* экспериментальной установки в основном окне и набор *элементов управления*, позволяющих, в частности, осуществлять выбор типа молекул, задавать их скорость, изменять период решетки и ширину щели.

На рис. 1. представлено окно графического интерфейса. В изображении виртуальной установки отражены лишь наиболее существенные элементы для динамической визуализации процесса дифракции молекул. В качестве системы регистрации распределения молекул в виртуальном эксперименте используется *экран*. Для сравнения приведено изображение реальной установки из статьи [12].

Элементы управления интерфейса:

#### Кнопки

«Старт» – последовательный пуск одиночных молекул.

«Пауза» – прерывание процесса.

«Масс-старт» – отображение всех дифрагировавших молекул на экране.

«Очистить» – очистка экрана.

«График» – дополнительное окно для построения графика распределения.

«Выход» – завершение работы программы.

#### Флажки

«Экран» – увеличение изображения экрана.

«Сетка» – наложение сетки на экран.

«Ускорение» – увеличение визуальной скорости воспроизведения движения молекул.

#### Список молекул для выбора

$C_{32}H_{18}N_8$  или  $C_{48}H_{26}F_{24}N_8O_8$

#### Изменение значений параметров

Изменяя положение ползунков, можно задавать различные значения скорости молекул, периода дифракционной решетки и ширины щели.

Скорость молекул  $v$ : от 150 м/с до 250 м/с.

Период решетки  $d$ : от 50 нм до 150 нм.

Ширина щели  $b$ : от 25 нм до 75 нм.

После активизации исполняемого файла и выбора параметров моделирования нажатие кнопки «Старт» запускает процесс динамическая визуализация движения молекул от источника к решетке с последующим появлением изображения молекул на регистрирующем экране.

С готовым программным продуктом была проведена серия виртуальных экспериментов, позволивших сделать вывод о соответствии результатов компьютерного моделирования реальному эксперименту по дифракции отде-

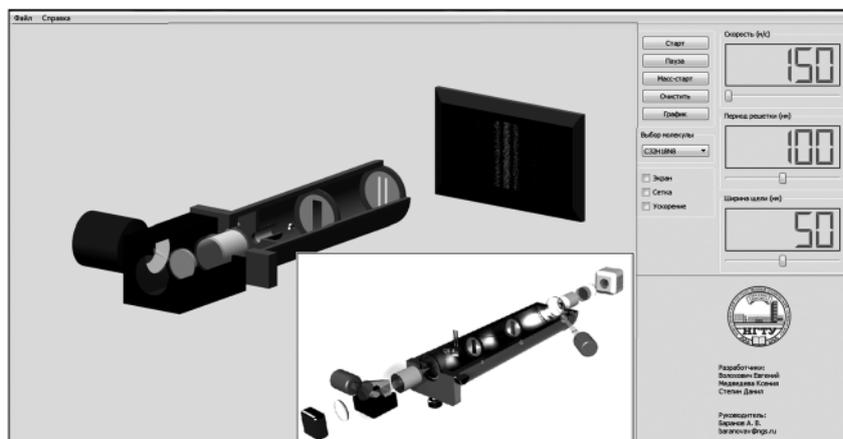


Рис. 1. Интерактивный графический интерфейс программы. В главном окне стилизованное 3D изображение установки. Справа панель с элементами управления. Внизу изображение реальной установки [12]

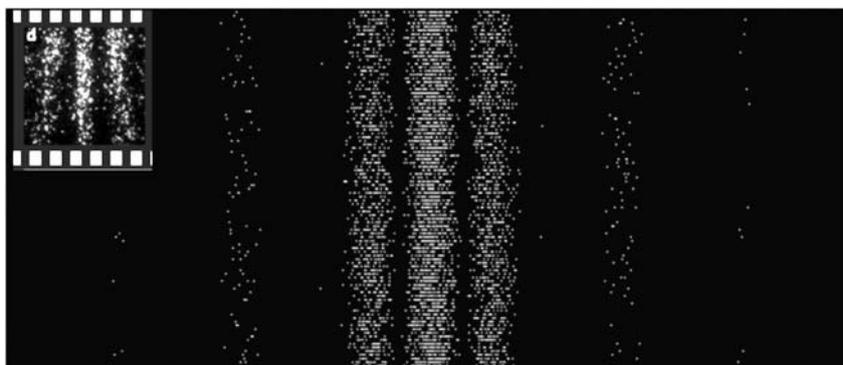


Рис. 2. Случайное распределение молекул на экране, полученное в виртуальном эксперименте, и фотография распределения в реальном эксперименте [12]

льных тяжелых органических молекул [12].

На рис. 2. изображена картина распределения молекул на экране, полученная во время выполнения одного из виртуальных экспериментов, параметры которого соответствовали реальному эксперименту [12].

Распределение в виртуальном эксперименте даже в количественном отношении хорошо согласуется с результатами реального эксперимента. Поскольку в имитационном эксперименте не учитывалось влияние гравитационного поля на распределение молекул по скоростям (оно присутствует в реальном эксперименте), то в рассчитанной дифракционной картине отсутствуют характерные изменения в вертикальном направлении, обусловленной гравитацией.

Использование данной программной разработки в лабораторном практикуме позволяет с определенной степенью наглядности визуализировать процесс дифракции молекул на решетке, ставить виртуальные эксперименты по проверке справедливости формулы де Бройля (связь длины волны с импульсом молекул), а также основных количественных соотношений для дифракционного распределения молекул.

### Заключение

Работа над реализацией данного виртуального проекта характеризуется следующими важными аспектами для образовательного процесса:

Бригада студентов (второй курс) приняла участие в комплекс-

ной межпредметной проектной деятельности, способствующей формированию их профессиональных компетенций в области программирования и компьютерного моделирования.

Разработано программное средство, позволяющее проводить учебные имитационные виртуальные эксперименты, наглядно демонстрирующие проявление квантовой реальности – интерференции одиночных молекул. Виртуальные эксперименты будут способствовать более адекватному восприятию обучающимися необычных свойств микрообъектов.

Студенческая программная разработка может быть использована в информационном пространстве системы открытого образования как дополнительное дидактическое средство при изучении физики.

### Литература

1. Андреев В.В., Ткаченко М.С., Умнов А.М. Программная среда для разработки виртуальных физических установок и проведения вычислительного эксперимента // Открытое образование. – 2009. – № 6. – С. 37–43.
2. Баранов А.В. Виртуальные проекты и проблемно-деятельностный подход при обучении физике в техническом университете // Физическое образование в вузах. – 2012. – т. 18, в. 4. – С. 90–96.
3. Баранов А.В. Метод виртуальных проектов при изучении основ квантовой механики в техническом университете // Физическое образование в вузах. – 2010. – т. 16, в. 4. – С. 26–34.
4. Баранов А.В., Борыняк Л.А., Заковряшина О.В. Виртуальные проекты студентов в физическом лабораторном практикуме профильного лица // Открытое и дистанционное образование. – 2014. – № 2 (54). – С. 40–44.
5. Баранов А.В. Проектная разработка виртуальных лабораторных работ по физике для электронной среды обучения. – Единая образовательная среда: направления и перспективы развития электронного и дистанционного обучения: материалы IX Международной научно-практической конференции-выставки (Новосибирск, 22–24 сентября 2010 г.). – Новосибирск: Изд-во НГТУ, 2010. С. 71–73.
6. Заковряшина О.В. Дидактические условия интеграции виртуального и натурального эксперимента // Физика в школе. – 2012. – № 7. – С. 23–29.
7. Бутиков Е.Н. Роль моделирования в обучении физике // Компьютерные инструменты в образовании. – 2002. – № 5. – С. 3–20.
8. Глазков В.В., Кондратьев А.С., Ляцев А.В. Математическое моделирование при изучении физики // Физическое образование в вузах. – 2007. – Т. 13. – № 4. – С. 38–52.
9. Конкин Б.Б., Сафронов В.П. Интерактивная среда – инструмент современного обучения // Открытое образование. – 2011. – № 4. – С. 11–18.
10. Биберман Л.М., Сушкин Н.Г., Фабрикант В.А. // ДАН СССР. – 1949. – т. 66, №2. – С.185.
11. Jonsson C. Electron diffraction at multiple slits // Am. J. Phys. – 1974. – V.42. – P.4–11.
12. Juffmann T., et all. Real-time single-molecule imaging of quantum interference // Nature Nanotechnology. – 2012. – V.7, No7. – P.297–300.
13. Merli P. G., Missiroli G. F., and Pozzi G. On the statistical aspect of electron interference phenomena // 1976. – Am. J. Phys. – V.44, – P. 306–307.
14. Tonomura A., Endo J., Matsuda T., Kawasaki T., and Ezawa H. Demonstration of single-electron buildup of an interference pattern // Am. J. Phys. – 1989. – V.57. – P. 117–120.
15. Ермаков С.М. Метод Монте-Карло в вычислительной математике: вводный курс / С.М.Ермаков. – СПб.: Невский Диалект; М.: БИНОМ. Лаборатория знаний, 2009. – 192 с.
16. Толстик А.М. Применение метода Монте-Карло в учебном компьютерном эксперименте по физике // Информационные технологии. – 2001. – № 9. – С. 53–55.
17. Durstenfeld R. Algorithm 235: Random permutation // Communication of the ACM. – 1964. – V.7, №7. – P. 420.