

МОДЕЛИРОВАНИЕ ДВИЖЕНИЯ ЗАРЯЖЕННОЙ ЧАСТИЦЫ В КУЛОНОВСКОМ ПОЛЕ В МАТЕМАТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЕ MAPLE

Дорошко Екатерина (УО МГПУ им. И. П. Шамякина, Беларусь)

Научный руководитель – Е. М. Овсюк, канд. физ.-мат. наук, доцент

Важным случаем движения в центрально-симметричном поле является движение в кулоновском поле

$$U = \pm \frac{a}{r},$$

α – положительная постоянная. Рассмотрим случай кулоновского притяжения ($U = -\alpha/r$). Спектр отрицательных собственных значений энергии будет дискретным (с бесконечным числом уровней), а спектр положительных энергий – непрерывным.

Уравнение для радиальных функций имеет вид:

$$\frac{d^2 R}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dR}{dr} - \frac{l(l+1)}{r^2} R + 2 \left(E + \frac{1}{r} \right) R = 0.$$

Введем вместо параметра E и переменной r новые величины

$$n = \frac{1}{\sqrt{-2E}}, \quad \rho = \frac{2r}{n}.$$

Решения строим в виде:

$$R = \rho^l e^{-\rho/2} w(\rho),$$

после чего приходим к уравнению

$$\rho w + (2l + 2 - \rho) w' + (n - l - 1) w = 0$$

для вырожденной гипергеометрической функции с параметрами

$$w = F(-n + l + 1, 2l + 2, \rho).$$

Для получения полиномиальных решений необходимо положить:

$$n \geq l + 1,$$

откуда, учитывая выражение для параметра n , приходим к энергетическому спектру:

$$E = -\frac{1}{2n^2}, \quad n = 1, 2, \dots$$

Этим решается задача об определении уровней энергии дискретного спектра в кулоновском поле. Видим, что имеется бесконечное множество уровней между нормальным уровнем $E_1 = -1/2$ и нулем. Интервал между

каждыми двумя последовательными уровнями уменьшаются с увеличением n ; уровни сгущаются по мере приближения к значению $E = 0$, при котором дискретный спектр смыкается с непрерывным. В обычных единицах формула для энергетического спектра имеет вид:

$$E = -\frac{m\alpha^2}{2\hbar^2 n^2}.$$

Рассмотрим атом водорода в квантовой механике, используя систему компьютерной математики Maple. Известно, что полная волновая функция

$$\Psi_{n,l,m} = R_{n,l}(r) \Theta_{l,m}(\theta) \Phi_m(\phi)$$

разлагается на три части. С физической точки зрения интерес представляет радиальная часть волновой функции $R_{n,l}(r)$.

Определим по формуле Родрига полиномы Лаггера

```
> L:=(j, k, x) -> if j<>0 then
1/j! * exp(x) / x^k * diff(x^(j+k) * exp(-x), x$j)
else 1 fi;
```

Радиальная часть $R_{n,l}(r)$ волновой функции (присоединенная функция Лаггера) равна

```
> Ru:=(n, l, x) -> x^l * exp(-x/2) * L(n-l-1, 2*l+1, x);
```

Посмотрим, как выглядит эта функция при частных значениях параметров

```
> n:=1:l:=0:
simplify(Ru(n, l, x));
```

Зададим необходимую нормировку радиальных функций и определим стандартную подстановку аргумента $x = \frac{2r}{na}$, где r – координата и a – боровский радиус:

```
> n:='n':l:='l':r:='r':
R:=x->sqrt(4*(n-l-
1)!/(n+1)!/(a^3*n^4)) * simplify(subs(x=2*r/(n*a), Ru(n, l
, x)));
```

Посмотрим, как выглядит квадрат нормы радиальной части волновой функции для $a=1$, т. е. вероятность нахождения электрона в данной области

```
> a:=1: n:=3: l:=1:
plot((r*R(d))^2, r=0..30);
```

Посмотрим, как изменяется характер волновой функции в зависимости от энергии системы, т. е. в зависимости от числа n

```
> a:=1: l:=1: bases:= [seq(i, i=1+1..1+9)]:
S:=seq(plot((r*R(d))^2, r=0..30, title=`n = ` .n),
n=bases):
plots[display](S, insequence=true);
```

Можно видеть характерное «размазывание» функции с ростом энергии.