

ЧИСЛЕННОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ТРАЕКТОРНО-ВОЛНОВОГО ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ВОДОРОДОПОДОБНОМ АТОМЕ

SIMULATIO NUMERALIS MOTUS TRAJECTORIAE — UNDAE ELECTRONICI IN ATOMO HYDROGENII SIMILI

**N. Valishin
Ya. Karov
S. Sadriev**

Summary. In hoc opere scientifico, simulatio numeralis motus electronici in atomo hydrogenii similis exercetur. Motus electronici trajectoria et unda in atomo hydrogenii simul considerantur. Secundus ordo aequationis differentialis partialis solvitur cum limite et condicionibus initialibus oriundis ex methodo v functionis. Applicando methodum separationis variabilium et componentium radialem considerans, aequatio differentialis ordinaria secundi ordinis numero Solvitur per Methodum Runge-Kutta quarti ordinis.

Keywords: mathematica sculpturae, hydrogenii, sicut atom, trajectoriam, fluctus motus, fluctus aequatio.

Валишин Наиль Талгатович

Кандидат физико-математических наук, доцент,
Казанский национальный исследовательский
технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ
vnaillt@yandex.ru

Каров Ярослав Сергеевич

Казанский национальный исследовательский
технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ
iarik.karov@mail.ru

Садриев Самат Илхамович

Казанский национальный исследовательский
технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ
sadrievsamat4@gmail.com

Аннотация. В данной научной работе проводится численное моделирование движения электрона в водородоподобном атоме. Рассматривается одновременно и траекторное и волновое движение электрона в атоме водорода. Решается уравнение в частных производных второго порядка с заданными граничными и начальными условиями вытекающие из метода V-функции. Применяя метод разделения переменных и рассматривая радиальную составляющую, численно решается обыкновенное дифференциальное уравнение второго порядка методом Рунге-Кутты четвертого порядка.

Ключевые слова: математическое моделирование, водородоподобный атом, траекторно-волновое движение, волновое уравнение.

Согласно методу V-функции [1-3], траекторное движение объекта, которое описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений,

$$\dot{x} = f(x) \quad (1)$$

где $x(t) = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$ — вектор фазовых координат, $x \in R^n$, сопряжено волновым движением, удовлетворяющим уравнению

$$\frac{\partial^2 V}{\partial t^2} - x^T W \dot{x} = 0, \quad W = \left[\frac{\partial^2 V(x, t)}{\partial x_i \partial x_j} \right] \quad (2)$$

где $V(x, t)$ — кусочно-непрерывная, конечная, функция (V-функция) ($x \in R^n, t \in T$).

Рассмотрим движение частицы в трехмерном потенциальном поле сил в прямоугольной системе координат. При условии, что уравнения траектории объекта (1) имеют первый интеграл движения, система уравнений (1) и (2), которые полностью определяют траекторно-волновое движение объекта, преобразуются в виду:

$$\begin{cases} \frac{m\vartheta^2}{2} + U = E, \\ \frac{\partial^2 V}{\partial t^2} - \vartheta^2 \Delta V = 0. \end{cases} \quad (3)$$

В системе (3) второе уравнение с учетом первого примет вид:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial t^2} - \frac{2(E - U)}{m} \Delta V = 0, \quad (4)$$

Чтобы изучить волновые свойства движения будем решать уравнение (4) с начальными условиями $V(x, y, z, 0) = 0$; $V_t(x, y, z, 0) = \text{const}$ и граничными условиями: $V(x, y, z, t)|_M = 0$; $|\text{grad}V(x, y, z, t)|_M = \bar{C}_i V(x, y, z, t)|_M = 0$, которые следуют из метода V-функции.

Уравнение (4) позволяет разделить переменные ($V = X(x, y, z)T(t)$), в результате получаем следующие уравнения

$$\frac{d^2 T}{dt^2} + \omega^2 T = 0, \quad (5)$$

$$\frac{2(E - U)}{m} \Delta X + \omega^2 X = 0. \quad (6)$$

Если рассматривается движение частицы (электрона) в кулоновском поле сил (водородоподобный атом), в этом случае уравнение (6) принимает вид $\frac{2(E + Ze^2 / r)}{m} \Delta X + \omega^2 X = 0$, или

$$\left(-\beta_0^2 + \frac{\alpha}{r}\right) \Delta X + \omega^2 X = 0, \tag{7}$$

где $\beta_0^2 = -\frac{2E}{m}$, $\alpha = \frac{2Ze^2}{m}$.

Для удобства в уравнении (7) перейдем к сферической системе координат, ($X = R\Phi\Theta$) и будем рассматривать уравнение для радиальной составляющей:

$$\frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dR}{dr} \right) + \frac{r^2 \omega^2}{-\beta_0^2 + \frac{\alpha}{r}} R - l(l+1)R = 0. \tag{8}$$

Сделаем в уравнении (8) замену $R = u/r$, тогда имеем

$$\frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{k_0^2 \alpha}{\alpha - \beta_0^2 r} - k_0^2 - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u = 0, \tag{9}$$

где $k_0^2 = \frac{\omega^2}{\beta_0^2} = -\frac{\omega^2 m}{2E}$.

Уравнения (9) при $(r \rightarrow \infty)$ имеет асимптотическое решение, тогда его общее решение запишем в виде $u = c_1 u_-(r) + c_2 u_+(r) = e^{-k_0 r} f_-(r) + e^{k_0 r} f_+(r)$. Подставив его в (9) при $l = 0$, получим следующие уравнения:

$$f''_{\pm}(r) \pm 2k_0 f'_{\pm}(r) + \frac{\beta_1}{r_0 - r} f_{\pm}(r) = 0, \tag{10}$$

где $\beta_1 = k_0^2 \alpha / \beta_0^2 = \frac{1}{2} Ze^2 \omega^2 m_e / E^2$.

Решение уравнения (10) будем искать в виде следующего степенного ряда $f_{\pm}(r) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m^{(\pm)} (r_0 - r)^m$. Уравнение (10) после данной подстановки принимает вид

$$\sum_{n=0}^{\infty} \left[(n+1) n a_{n+1}^{(\pm)} \mp 2k_0 n a_n^{(\pm)} + \beta_1 a_n^{(\pm)} \right] (r_0 - r)^{n-1} = 0, \tag{11}$$

Для случая $f_+(r)$ степенной ряд (11) обрывается при условии $\beta_1 = 2k_0 n$. Тогда из этого равенства, учитывая связь связи частоты и энергии $2E = \hbar \omega$, вытекающего из оптико-механической аналогии [1, 3] находим значение энергии n -го состояния электрона в водородоподобном атоме

$$E_n = -\frac{Z^2 e^4 m_e}{2 \hbar^2 n^2}. \tag{12}$$

Поскольку уравнение (9) при ненулевом значении l приводит к тем же значениям энергии, что и при $l = 0$, мы можем использовать решение данного уравнения при $l = 0$ для получения решений (9) при соответствующих значениях энергии. Произведем преобразование уравнения (9) в форму, удобную для численного решения.

$$\begin{aligned} \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{k_0^2 \beta_0^2 r}{\alpha - \beta_0^2 r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u &\Rightarrow \\ \Rightarrow \frac{d^2 u}{dr^2} + \left(\frac{k_0^2 r}{r_0 - r} - \frac{l(l+1)}{r^2} \right) u &= 0, \end{aligned} \tag{13}$$

где $r_0 = \frac{\alpha}{\beta_0^2}$. Введем в уравнении (13) безразмерную величину $x = \frac{r}{r_0}$. Тогда

$$u'_r(x(r)) = u'_x x'_r \Rightarrow u'_r = \frac{u'_x}{r_0}, \quad u''_{rr} = \frac{u''_{xx}}{r_0^2}$$

и уравнение (13) принимает вид

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \left(\frac{k_0^2 r_0^2 x}{1-x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) u = 0, \tag{14}$$

где

$$k_0^2 r_0^2 = \frac{\omega^2 m_e}{2|E|} \left(\frac{e^2}{E} \right) = \left(\frac{2E}{\hbar} \right)^2 \frac{m_e e^4}{2|E^3|} = \frac{2m_e e^4}{\hbar^2} = 4n^2.$$

Тогда окончательно из (14) получим следующее уравнение

$$\frac{d^2 u}{dx^2} + \left(\frac{4n^2 x}{1-x} - \frac{l(l+1)}{x^2} \right) u = 0. \tag{15}$$

Для решения уравнения (15) с начальными условиями $u(x=0) = 0$, $u'(x=0) = c$ был использован метод Рунге-Кутты четвёртого порядка. Приближенные значения в последующих точках находились с использованием итерационной формулы, специально разработанной для данного метода: $y_{n+1} = y_n + \frac{h}{6} (k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4)$. Для вычисления нового значения функции в данном алгоритме применяются 4 стадии или этапа. Каждая стадия включает в себя необходимые вычисления для получения приращения функции и определения следующего значения. Такая последовательность стадий обеспечивает точность и надежность численного решения в рамках метода Рунге-Кутты 4-5 порядка:

$$\begin{aligned} k_1 &= f(x_n, y_n), \\ k_2 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} k_1\right), \\ k_3 &= f\left(x_n + \frac{h}{2}, y_n + \frac{h}{2} k_2\right), \\ k_4 &= f(x_n + h, y_n + h k_3). \end{aligned}$$

Параметр h представляет собой величину шага по оси x . Метод Рунге-Кутты четвёртого порядка точности, используемый в данном случае, означает, что ошибка на каждом отдельном шаге имеет порядок $O(h^5)$, а суммарная ошибка на конечном интервале интегрирования имеет порядок $O(h^4)$. Это свидетельствует о высо-

кой точности и надежности данного метода в численном решении уравнения.

С использованием алгоритма, основанного на методе Рунге-Кутты четвертого и пятого порядка точности, были численно решены все уравнения. Данный алгоритм предназначен для определения приращения функции и обладает высокой точностью. Результаты выполнения алгоритма представлены в виде графиков функций, которые наглядно демонстрируют полученные значения:

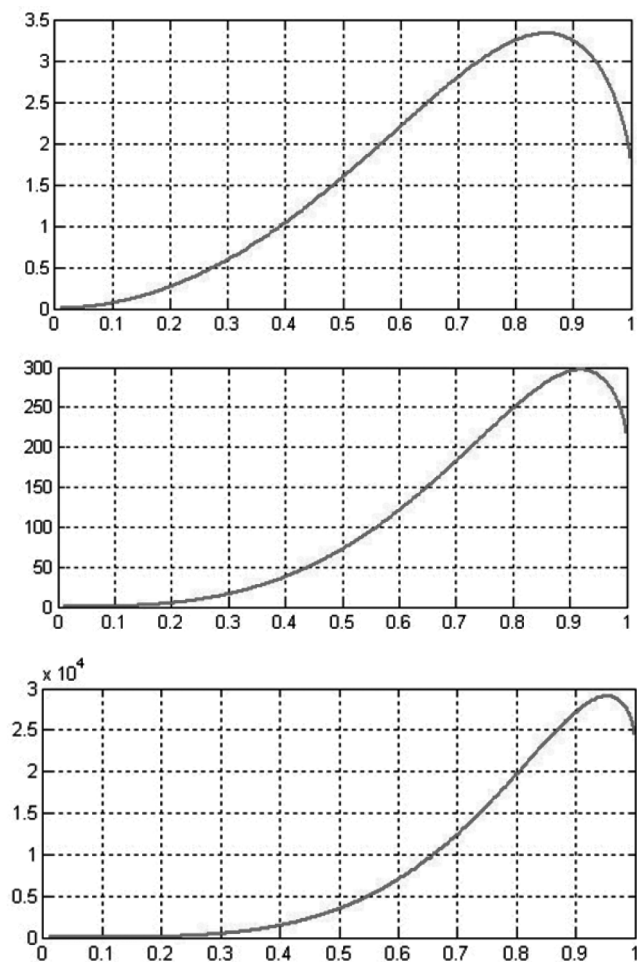


Рис. 1. Стационарное решение для волны электрона ($n = 1$). при $l = 1$. $l = 2$. $l = 3$

В процессе моделирования движения электрона в кулоновском поле сил без учета угловых координат, метод V-функции позволяет установить правила квантования энергии водородоподобного атома, которые согласуются с классическими результатами Шредингера и Бора [4, 5]. Метод V-функции, учитывая начальные и граничные условия, обеспечивает дискретность энергии, что позволяет лучше понять природу волна-частица в сравнении с волновой функцией Шредингера [4].

ЛИТЕРАТУРА

1. Valishin N.T., Valishin F.T. V-function method: some solutions of direct and inverse dynamics problems in a new statement // *Latvian Journal of Physics and Technical Sciences* 2019, N 1, pp.70–81.
2. Valishin N.T. To Physical Statement of a Controllability Problem. // *Jour of Adv Research in Dynamical & Control Systems*, Vol. 11, Special Issue-05, 2019, pp.1708–1713.
3. N.T. Valishin, A.I. Volkov, Z.F. Bildanova and V.A. Selivanova To continue the optical-mechanical analogy // *Journal of Physics: Conference Series* 1679 (2020) 022016
4. Schrödinger E., Quantisierung als Eigenwertproblem (I Mitt) *Annalen der Physik*, 1926, Bd 79, S.361–376; (II Mitt) — *Ibid.*, S.489–527; (III Mitt) — *Ibid.*, Bd 80, S.437–490; (4 Mitt) — *Ibid.*, Bd 81, S.109–139.
5. Bohr N, On the constitution of atoms and molecules. — *Philosophical Magazine*, 1913, v. 26, p.1–25, 476–502, 857–875.

© Валишин Наиль Талгатович (vnait@yandex.ru); Каров Ярослав Сергеевич (iarik.karov@mail.ru);

Садриев Самат Илхамович (sadrievamat4@gmail.com)

Журнал «Современная наука: актуальные проблемы теории и практики»