DOI 10.37882/2223–2966.2022.09.04

МЕТОД V-ФУНКЦИИ: К МОДЕЛИРОВАНИЮ ТРАЕКТОРНО-ВОЛНОВОГО ДВИЖЕНИЯ ЭЛЕКТРОНА В ВОДОРОДОПОДОБНОМ АТОМЕ

V-FUNCTION METHOD: TO MODELING TRAJECTORY-WAVE MOTION OF AN ELECTRON IN A HYDROGEN-LIKE ATOM

N. Valishin
K. Smoylov
S. Babina

Summary. In this paper, the V-function method is considered as a possible apparatus for mathematical modeling of the trajectory-wave motion of an object (particle) in a Coulomb force field. The possibility of solving the direct and inverse problems of dynamics on the basis of this method is analyzed, in connection with which a study of the wave function for an object is carried out and its energy is determined. When modeling the motion of an electron in a Coulomb field, the method under consideration allows us to establish a rule for quantization of the energy of a hydrogen-like atom, which completely coincides with the classical results.

Keywords: trajectory-wave motion, motion modeling, wave function, wave equation, hydrogen-like atom.

Валишин Наиль Талгатович
Доцент, Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ
vnailt@yandex.ru
Смойлов Кирилл Андреевич
Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ
kvant3108@mail.ru
Бабина София Вячеславовна
Казанский национальный исследовательский технический университет им. А.Н. Туполева-КАИ
s2o5n1y7a@gmail.com

Аннотация. В данной работе рассматривается метод V-функции как возможный аппарат математического моделирования траекторно-волнового движения объекта (частицы) в кулоновском поле сил. Анализируется возможность решения прямой и обратной задачи динамики на базе данного метода, в связи с чем проводится исследование волновой функции для объекта и определяется его энергия. При моделировании движения электрона в кулоновском поле, рассматриваемый метод позволяет установить правило квантования энергии водородоподобного атома, которое полностью совпадает с классическими результатами.

Ключевые слова: траекторно-волновое движение, моделирование движения, волновая функция, волновое уравнение, водородоподобный атом.

Введение

Особое место в квантовой механике отводится корпускулярно-волновому дуализму (дуализму волны и частицы). То есть такому свойству квантового объекта, при котором он при одних условиях проявлять свойства классических волн, а при других — свойства классических частиц. Проблема корпускулярно-волнового дуализма остается актуальной и в современных исследованиях [1,2].

В данной работе рассматривается физическая реальность, в которой волновое движение объекта неразрывно связано с траекторным и наоборот. Такая постановка также рассматривается в работах [3,4]. При описании примем, что движение частицы определяется физической волной, а наличие траектории свидетельствует о существовании частицы.

Поскольку в данной статье описывается моделирование траекторно-волнового движения объекта (частицы) в кулоновском поле сил с помощью метода V-функции, перед тем, перейти непосредственно к рассмотрению, обозначим, что понимается под методом V-функции.

1. Моделирование траекторно-волнового движения объекта

Метод V-функции представляет собой математический аппарат для моделирования движения квантового объекта, траекторное движение которого сопряжено с волновым [5–8].

Моделирование траекторно-волнового движения объекта включает в себя решение прямой и обратной динамики при движении в центральном поле сил. Прямую задачу динамики в данном случае можно представить в следующем виде: по заданным дифференциальным уравнениям, описывающим траекторию движения объекта, требуется определить волновую функцию.

Для этого введем вектор фазовых координат, однозначно определяющих состояние системы, $x(t) = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T$, где $x \in R^n$, с помощью R^n обозначено n-мерное евклидово пространство, и время $t \in T$, с помощью T обозначен интервал времени. Рассмотрим систему дифференциальных уравнений, описывающих траекторию движения объекта:

$$\dot{x} = f(x)\,. \tag{1}$$

Уравнения (1) охарактеризуем как уравнения, определяющие состояние исследуемого объекта и удовлетворяющие теореме о существовании и единственности решений.

Введем однозначную, конечную, кусочно-непрерывную волновую функцию (V-функцию) $V = V(x,t)(x \in R^n, t \in T)$.

Следует отметить, что представленная выше волновая функция должна удовлетворять следующему уравнению:

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

Для определения начальных условий рассмотрим следующие теоремы:

Теорема 1. Для перехода в новое состояние необходимо и достаточно существование V-функции, удовлетворяющей условию:

$$\tilde{\Delta}\left(\frac{dV}{dt}\right) = 0. \tag{3}$$

Теорема 2. Движение объекта, описываемое системой дифференциальных уравнений (1), происходит так, что в каждый момент времени вектор фазовой скорости сонаправлен с градиентом волновой функции:

$$\frac{\partial V^T}{\partial x} f = |\lambda| |\dot{x}|\,. \tag{4}$$

Принимая в рассмотрение физику процесса, удовлетворение V-функции условиям теоремы 1, 2 и условию связанности волновой функции с траекторией движения объекта, получаем начальные условия, имеющие вид:

$$V(x = x_M, t = t_o) = 0 \tag{5}$$

$$\left.\frac{\partial V(x,t)}{\partial t}\right|_{t=t_0} = \frac{\partial V(x,t_0)}{\partial t} = const \tag{6}$$

где x_M — точка, в которой находится объект.

Граничные условия могут быть представлены в следующем виде:

$$V(x_M, t) = 0; \tag{7}$$

$$\frac{\partial V(x_M, t)}{\partial x} = k^{-1}\dot{x}(t) = k^{-1} f(x = x_M) \tag{8}$$

Обратная задача динамики представляется в виде: по заданной волновой функции определить траекторию движения объекта.

При заданной волновой функции из (4) сразу следует решение обратной задачи динамики:

$$\dot{x}_i = k\frac{\partial V}{\partial x_i} \tag{9}$$

К тому же, если выполняется условие

$$\dot{x}_j = \lambda_i \frac{\partial \dot{x}_i}{\partial x_j} \quad (i, j = \overline{1,n}),$$

тогда уравнение (2) принимает вид:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial t^2} - \vartheta^2 \nabla^2 V = 0\,, \tag{10}$$

где $\vartheta^2 = \sum_{i=1}^{n} \dot{x}_i^{\,2} = \dot{x}^T \dot{x}$ и $\nabla^2 = \sum_{i=1}^{n} \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}$

2. Моделирование движения частицы в потенциальном поле сил

Рассмотрим движение в 3-х мерном пространстве. Согласно сохранению энергии:

$$\frac{m(\dot{x}^2 + \dot{y}^2 + \dot{z}^2)}{2} + U(x,y,z) = E\,. \tag{11}$$

где m — масса объекта;
U — потенциальная энергия;
E — полная энергия.

На основе закона сохранения энергии и уравнения (10) составим систему:

$$\begin{cases} \dfrac{m\vartheta^2}{2} + U = E, \\ \dfrac{\partial^2 V}{\partial t^2} - \vartheta^2 \Delta V = 0. \end{cases} \tag{12}$$

Преобразуем систему и перейдем к уравнению:

$$\frac{\partial^2 V}{\partial t^2} - \frac{2(E-U)}{m}\Delta V = 0\,. \tag{13}$$

Проведем ряд преобразований, пользуясь методом разделения переменных$(V = V(x,y,z)T(t))$:

$$\frac{d^2T}{dt^2} + \omega^2 T = 0, \quad \frac{2(E-U)}{m}\Delta X + \omega^2 X = 0, \tag{14}$$

где $\Delta = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}$,— оператор Лапласа

Поскольку движение объекта в данной работе рассматривается в кулоновском поле сил, то потенциальная энергия может быть представлена в виде:

$$U = -\frac{Ze^2}{r}, \tag{15}$$

где Ze — заряд ядра, r — расстояние между объектом и центром сил.

В результате второе уравнение системы (14) выражено следующим образом:

$$\frac{2(E + Ze^2/r)}{m}\Delta X + \omega^2 X = 0, . \tag{16}$$

Проведем ряд преобразований и получим:

$$\left(-\beta_0^2 + \frac{\alpha}{r}\right)\Delta X + \omega^2 X = 0, \tag{17}$$

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

В ходе дальнейших преобразований перейдем к сферической системе координат и исключим из рассмотрения сферически несимметричные решения. Применим также метод разделения переменных и рассмотрим уравнение для радиальной составляющей:

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR}{dr}\right) + \frac{r^2\omega^2}{-\beta_0^2 + \frac{\alpha}{r}}R - l(l+1)R = 0 \quad . \tag{18}$$

Произведем замену: $R = \frac{u}{r}$

и разделим получившееся уравнение на r, отметим, что в данном случае u — некоторая кусочно-непрерывная, конечная функция:

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(\frac{k_0^2\alpha}{\alpha - \beta_0^2 r} - k_0^2 - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u = 0, \tag{19}$$

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

Рассмотрим решение данного уравнения.

При $l = 0$ уравнение (19) может быть решено через степенной ряд. Принимая во внимание асимптотическое решение (r → ∞), получим общее решение вида:

$$u = c_1u_-(r) + c_2u_+(r) = e^{-k_0r}f_-(r) + e^{k_0r}f_+(r). \tag{20}$$

При подстановке его в (19) при $l = 0$ получим следующие уравнения:

$$f_\pm''(r) \pm 2k_0 f_\pm'(r) + \frac{\beta_1}{r_0 - r}f_\pm(r) = 0 \tag{21}$$

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

а $r_0 = \alpha/\beta_0^2 = Ze^2/E$.

Как было сказано ранее, решение можно найти в виде степенного ряда

$$f_\pm(r) = \sum_{m=0}^{\infty} a_m^{(\pm)}(r_0 - r)^m.$$

Подставив его в уравнение (21), получим:

$$\sum_{n=0}^{\infty}[(n+1)na_{n+1}^{(\pm)} \mp 2k_0na_n^{(\pm)} + \beta_1 a_n^{(\pm)}](r_0 - r)^{n-1} = 0. \tag{22}$$

Отсюда получаем, что $a_0 = 0$, а коэффиценты $a_{n+1}^{(\pm)}$ соответствуют следующему соотношению:

$$a_{n+1}^{(\pm)} = \frac{\pm 2k_0n - \beta_1}{(n+1)n}a_n^{(\pm)}. \tag{23}$$

Ряд

$$f_+(r) = \sum_{m=1}^{\infty} a_m^{(+)}(r_0 - r)^m$$

обрывается, исходя из решения обратной задачи динамики ($a_m^{(+)} = 0$ при $m \geq n+1$), что приводит к решению:

$$u_{+,n}(r) = C\exp\{k_{0,n}r\}\sum_{m=1}^{n} a_m^{(+)}(r_{0,n} - r)^m, \tag{24}$$

где C — постоянная.

Отметим, исходя из оптико-механической аналогии [5,8] $2E = \hbar\omega$, и из равенства $\beta_1 = 2k_0 n$, которое получается из (23), следует, что энергия электрона на n уровне равна

$$E_n = -\frac{Z^2e^4m_e}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}.$$

Из чего можно сделать вывод, что уравнение (19) при $l \neq 0$ удовлетворяет тем же значениям энергии как и при $l = 0$, следовательно, решения (19) могут быть построены на основе решения этого уравнения при $l = 0$ для соответствующих значений энергии.

Проведем преобразования уравнения (19):

$$\frac{d^2u}{dr^2} + \left(\frac{k_0^2 r}{r_0 - r} - \frac{l(l+1)}{r^2}\right)u = 0 \qquad (25)$$

Далее для удобства вычислений введем $x = \frac{r}{r_0}$:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left(\frac{k_0^2 r_0^2 x}{1-x} - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)u = 0\,, \qquad (26)$$

где

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

$$= \frac{2m_e e^4}{\hbar^2 \frac{m_e e^4}{2\hbar^2}\frac{1}{n^2}} = 4n^2\,.$$

С учетом этого окончательное уравнение примет вид:

$$\frac{d^2u}{dx^2} + \left(\frac{4n^2 x}{1-x} - \frac{l(l+1)}{x^2}\right)u = 0\,. \qquad (27)$$

Его начальные условия выглядят следующим образом: $u(x = 0) = 0;\ u'(x = 0) = c$.

Таким образом, можно сделать вывод, что метод V-функции может быть использован для моделирования траекторно-волнового движения объекта (частицы) в кулоновском поле сил, а также для установления правила квантования энергии водородоподобного атома.

Заключение

В данной работе на базе метода V-функции закладываются основы траекторно-волновой динамики. Проводится моделирование траекторно-волнового движения электрона в водородоподобном атоме.

При моделировании движения электрона в кулоновском поле, с помощью метода V-функции получено правило квантования энергии водородоподобного атома, которое такое же как в классических результатах Шредингера и Бора [9,10].

ЛИТЕРАТУРА

1. H Akhsan, S Rianti, M Muslim and M Ariska. Development of digital handout on particle wave dualism material // 2021 J. Phys.: Conf. Ser. 1816 012006
2. Gino Tarozzi, Giovanni Macchia No-Thing and Causality in Realistic Non-Standard Interpretations of the Quantum Mechanical Wave Function: Ex Nihilo Aliquid? // Foundations of Science (2021)
3. Л. де Бройль. Волны и кванты. Кванты света, дифракция и интерференция. Кванты, кинетическая теория газов и принцип Ферма — Успехи физических наук, 1967. т. 93. Вып.I.
4. Родимов Б.Н. Автоколебательная квантовая механика. Физико-математическое наследие: физика (квантовая механика) М.2010 г. 416 с.
5. 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, N1, pp.70–81.
6. 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.
7. Valishin N., Moiseev S. A method of V-function: ultimate solution to the direct and inverse problems of dynamics for a hydrogen-like atom // Eastern-European Journal of Enterprise Technologies. Vol 4, № 5(88) (2017) pp.23–32
8. NT Valishin, AI Volkov, ZF Bildanova and VA Selivanova To continue the optical-mechanical analogy //Journal of Physics: Conference Series 1679 (2020) 022016
9. 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.
10. Bohr N. On the constitution of atoms and molecules.— Philosophical Magazine, 1913, v. 26, p.1–25, 476–502, 857–875.