

6. *D. Ardouin and the CODALEMA Collaboration* // arXiv: 0901.4502 [astro-ph], 2009.
7. *Apel W.D. et al.* LOPES Collaboration // arXiv: 0910.4866v1 [astro-ph], 2009.
8. *Corstanje A. et al.* LOFAR Collaboration // arXiv: 1109.5800v1 [astro-ph], 2009.
9. *Аскарьян Г.А.* Избыточный отрицательный заряд электрон-фотонного ливня и когерентное излучение от него // ЖЭТФ. – 1961. – 41, №2(8). – С. 616–618.
10. *Chairman W.N.* Atmospheric Electric Field as a Possible Cause of Radio Pulse from EAS // Nature 215 497 (1967).
11. *Chairman W.N. and Jelley J.V.* The atmospheric electric field as a source of RF emission from EAS, and some notes on bremsstrahlung // Phys. 46 216 (1968).
12. *Sivaprasad K.*, in 15th Cosmic Ray Conf., Plovdiv, Bulgaria, 1977: Conf. Papers (Eds C Ya Christov et al.) Vol. 8 (Sofia: Institute for Nucl. Res. And Nucl. Energy, Bulgarian Acad. Of Sci., 1978) P. 484.
13. *Tompkins D.R. (Jr)* Phys. Rev. D 10 136 (1974).
14. *Вернов С.Н., Абросимов А.Т., Воловик В.Д. и др.* // Радиоизлучение ШАЛ космических лучей // Письма ЖЭТФ. – 1966. – С. 157–162.
15. *Петров З.Е., Борщевский Д.С., Кнуренко С.П. и др.* Исследование радиоизлучения на частоте 32 МГц на Якутской установке широких атмосферных ливней // Вестник СВФУ (в печати).
16. *Huege T., Ulrich R., Engel R.* // arXiv: 0806.1161v2 [astro-ph], 2008.

Поступила в редакцию 15.12.2011

УДК 378.147

Методика использования пакета Maple для решения задач квантовой механики

Е.П. Шарин, Ю.М. Григорьев, С.Н. Еремеев, Б.В. Яковлев

Решения многих задач квантовой механики сопряжены с трудностями использования сложного математического аппарата. Пакет Maple является удобным инструментом для решения таких задач. Показана методика использования пакета Maple на персональном компьютере для решения задач квантовой механики с использованием специальных функций.

Ключевые слова: Maple, квантовая механика, специальные функции, линейный гармонический осциллятор.

Solutions of many quantum mechanics problems tend to be obscured in the profusion of mathematics. Interactive software for computer algebra, Maple can assist educator and students to overcome the obstacle of mathematical difficulties. Methods of using Maple for quantum mechanics problems solutions on a personal computer with special functions are presented.

Key words: Maple, quantum mechanics, special functions, linear harmonic oscillator.

Введение

Характер развития современного общества, происходящие в нем глобальные социально-экономические и научно-технические процессы активизируют применение инновационных подходов к процессу обучения, гармонично дополняющих традиционные. В последние годы интерес к данной проблеме приобрел особую значи-

мость, что связано с информатизацией системы образования и, как следствие, внедрением новых информационных технологий в учебный процесс.

Квантовая механика является одним из важных разделов физики, занимающимся исследованием явлений и процессов в микромире, недоступном непосредственному восприятию человека. Изучение квантовой механики сопряжено с рядом трудностей, а именно, использованием сложного математического аппарата, невозможностью проведения эксперимента из-за низкой технической оснащенности лабораторий, их несоответствием требованиям безопасности и др. Это затрудняет понимание абстрактно-логических понятий и закономерностей, снижа-

ШАРИН Егор Петрович – к.ф.-м.н., доцент ФТИ СВФУ, esharin@yandex.ru; ГРИГОРЬЕВ Юрий Михайлович – д.ф.-м.н., ФТИ СВФУ, акад. АН РС(Я); ЕРЕМЕЕВ Степан Николаевич – к.ф.-м.н., доцент ФТИ СВФУ, 8 (4112) 49-68-62; ЯКОВЛЕВ Борис Васильевич – д.ф.-м.н., ФТИ СВФУ, 8 (4112) 49-68-62.

ет возможности наглядности и тем самым приводит к снижению качества знаний студентов. В работах [1–5] показано, что внедрение систем компьютерной математики (СКМ) в практику обучения физике и основам квантовой механики, в частности, является одной из форм повышения эффективности обучения.

СКМ Maple предлагает широчайший набор мощных математических инструментов как для ученых, так и для студентов. Графические возможности современных СКМ позволяют достигать заметных упрощений при решении сложных физических задач. Сочетание традиционных подходов к решению задач с визуализацией подготовительных, промежуточных и результирующих этапов анализа дает студенту дополнительную информацию, способствующую снижению априорной неопределенности и достижению обоснованных результатов.

На занятиях по квантовой теории особое место занимают задачи с применением специальных функций. С одной стороны, трудность в понимании самой квантовой теории, с другой – использование специальных функций усложняют решение таких задач студентами. Специальные математические функции обычно являются решениями линейных дифференциальных уравнений различного типа и выражаются в виде интегралов, не представимых через элементарные функции. Пакет Maple имеет практически полный набор таких функций. Их представления можно найти в справочной литературе, а также в справочной базе данных Maple [2, 3]. Математические пакеты эффективно применяются в научных исследованиях с использованием математического моделирования [6, 7].

В настоящей работе рассмотрены задачи, решения которых выражаются через специальные функции, и показано, как использование пакета Maple облегчает решение таких задач.

1. Свободное падение частицы в однородном поле над земной поверхностью

Пусть частица движется в однородном гравитационном поле над поверхностью земли, которая предполагается абсолютно упругой. Исследуем эту задачу с точки зрения квантовой механики. Пусть через x обозначим высоту над поверхностью земли, тогда гравитационный потенциал имеет вид

$$U(x) = mgx.$$

В области $x > 0$ уравнение Шредингера для частицы можно записать в виде

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2\psi(x)}{dx^2} + (mgx - E)\psi(x) = 0. \quad (1.1)$$

Предположение об абсолютно упругом характере отражения при $x = 0$ приводит к граничному условию

$$\psi(0) = 0. \quad (1.2)$$

Кроме того воспользуемся условием ограниченности волновой функции, а именно

$$\psi(\infty) \rightarrow 0. \quad (1.3)$$

Введем следующие обозначения

$$\frac{2m^2g}{\hbar^2} = \frac{1}{l^3}, \quad \frac{2mT}{\hbar^2} = \frac{\lambda}{l^2}$$

и безразмерную переменную

$$\xi = \frac{x}{l} - \lambda,$$

где l – характерная длина, то уравнение (1.1) и граничные условия (1.2), (1.3) будут иметь вид

$$\frac{d^2\psi(\xi)}{d\xi^2} + \xi\psi(\xi) = 0$$

и

$$\psi(-\lambda) = 0, \quad \psi(\infty) \rightarrow 0. \quad (1.4)$$

Классически разрешенная область движения заключена между точками поворота $\xi = -\lambda$ и $\xi = 0$ (рис.1), т.е. ей соответствуют исключительно отрицательные значения переменной ξ . Решение, удовлетворяющее граничному условию $\psi(\infty) \rightarrow 0$, представляет собой функцию Эйри

$$\psi(\xi) = CAi(\xi).$$

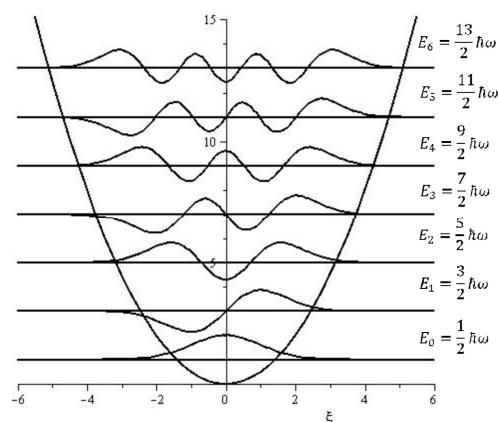


Рис. 1. Энергетические уровни в гравитационном поле над поверхностью земли. По оси абсцисс отложены расстояния в безразмерных единицах

Для положительных значений ξ , т.е. правее точки поворота ξ ($\xi = \lambda l$), эту функцию можно выразить через модифицированную функцию Ханкеля [8]. В классической области, т.е. для отрицательных значений ξ , функция Эйри выражается линейной комбинацией функций Бесселя [8]. В силу второго граничного условия (1.4) решение должно обращаться в нуль при $\xi = -\lambda$. Так как величина λ при подходящем выборе единиц представляет собой энергию, то отсюда для определения допустимых значений энергии получаем

$$Ai(-\lambda) = 0. \quad (1.5)$$

Далее решаем задачу в СКМ Maple. В начале задаем уравнение и вычисляем его:

```
> restart;
> Eq1:=diff(psi(xi),xi$2)-xi*psi(xi)=0;
> sol1:=dsolve(Eq1,psi(xi)).
```

Далее, используя уравнение (1.5), определяем первые четыре значения энергии частицы, находящейся в гравитационном поле:

```
> E_0:=fsolve(AiryAi(-xi),xi=0..3);
> E_1:=fsolve(AiryAi(-xi),xi=3..5);
> E_2:=fsolve(AiryAi(-xi),xi=5..7);
> E_3:=fsolve(AiryAi(-xi),xi=7..8).
```

Следующая последовательность операторов рисует графики уровней энергий и соответствующие этим уровням волновые функции:

```
> q2:=plot([AiryAi(x-E_0)+E_0,E_0,x],x=0..10);
> with(plots):
> display(q2);
> q3:=plot([AiryAi(x-E_1)+E_1,E_1,x],x=0..10);
> with(plots):
> display(q3);
> q4:=plot([AiryAi(x-E_2)+E_2,E_2,x],x=0..10);
> with(plots):
> display(q4);
```

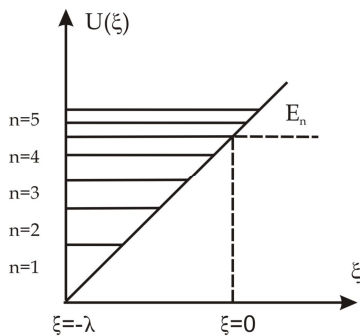


Рис. 2. Уровни энергии и соответствующие им волновые функции частицы, движущейся в однородном гравитационном поле. Значения ξ заданы в безразмерных единицах

```
> q5:=plot([AiryAi(x-E_3)+E_3,E_3,x],x=0..10);
> with(plots):
> display(q5).
```

На рис.2 представлены уровни энергии и графики волновых функций частицы, движущейся вблизи земной поверхности.

2. Линейный гармонический осциллятор

Рассмотрим стационарные состояния квантовой частицы с массой m , движущейся в поле с потенциальной энергией вида

$$U(x) = \frac{1}{2} kx^2 = \frac{m\omega^2 x^2}{2},$$

где k – коэффициент квазиупругой силы; ω – собственная частота осциллятора.

Уравнение Шредингера в данном случае выглядит следующим образом:

$$\frac{d^2 \psi(x)}{dx^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left(E - \frac{m\omega^2 x^2}{2} \right) \psi(x) = 0.$$

Чтобы упростить вид уравнения, перейдем к безразмерным величинам

$$\xi = x \sqrt{\frac{m\omega}{\hbar}} \quad \text{и} \quad \varepsilon = \frac{2E}{\hbar\omega}.$$

В результате получим дифференциальное уравнение

$$\frac{d^2 \psi(\xi)}{d\xi^2} + (\varepsilon - \xi^2) \psi(\xi) = 0. \quad (2.1)$$

При очень больших ξ величиной ε можно пренебречь по сравнению с ξ^2 . Тогда уравнение упрощается следующим образом:

$$\frac{d^2 \psi_\infty(\xi)}{d\xi^2} - \xi^2 \psi_\infty(\xi) = 0.$$

Решение этого уравнения при $\xi \rightarrow \infty$ имеет вид

$$\psi_\infty(\xi) = e^{\pm \frac{\xi^2}{2}}.$$

Из-за требования конечности волновой функции экспонента со знаком плюс должна быть отброшена. Тогда общее решение уравнения (2.1) ищем в виде

$$\psi(\xi) = \varphi(\xi) e^{-\frac{\xi^2}{2}}. \quad (2.2)$$

Подстановка выражения (2.2) в уравнение (2.1) приводит к следующему дифференциальному уравнению для $\varphi(\xi)$

$$\varphi''(\xi) - 2\xi\varphi'(\xi) + (\varepsilon - 1)\varphi(\xi) = 0.$$

Решения этого уравнения хорошо известны и даются полиномами Чебышева–Эрмита:

$$\varphi_n(\xi) = H_n(\xi) = (-1)^n e^{\xi^2} \frac{d^n}{d\xi^n} (e^{-\xi^2}), n = 0, 1, 2, \dots$$

и при этом

$$E_n = \hbar \omega \left(n + \frac{1}{2} \right).$$

Собственные функции осциллятора

$$\psi_n(\xi) = A_n e^{-\frac{\xi^2}{2}} H_n(\xi).$$

Коэффициент A_n должен быть определен из условия нормировки

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi^* \psi d(\xi) = A_n^2 \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\xi^2} H_n^2(\xi) d\xi = 1.$$

Отсюда

$$A_n^2 n! 2^n \sqrt{\pi} = 1, \quad A_n = 1 / (n! 2^n \sqrt{\pi})^{1/2}.$$

Далее приведем текст программы, вычисляющей уровни энергии и соответствующие им волновые функции для гармонического осциллятора:

```
> restart;
> psi:=(n,xi)->(2^n*factorial(n))^(1/2)*
  exp(-xi^2/2)*HermiteH(n,xi);
> expand(psi(0,xi));
> plot([psi(0,xi)+1,1,xi^2/2],xi=-6..6,0..3);
> expand(psi(1,xi));
> plot([psi(1,xi)+2,2,xi^2/2],xi=-6..6,0..3);
> expand(psi(2,xi));
> plot([psi(2,xi)+3,3,xi^2/2],xi=-6..6,0..4);
> expand(psi(3,xi));
> plot([psi(3,xi)+4,4,xi^2/2],xi=-6..6,0..5);
> expand(psi(4,xi));
> plot([psi(4,xi)+5,5,xi^2/2],xi=-6..6,0..6);
```

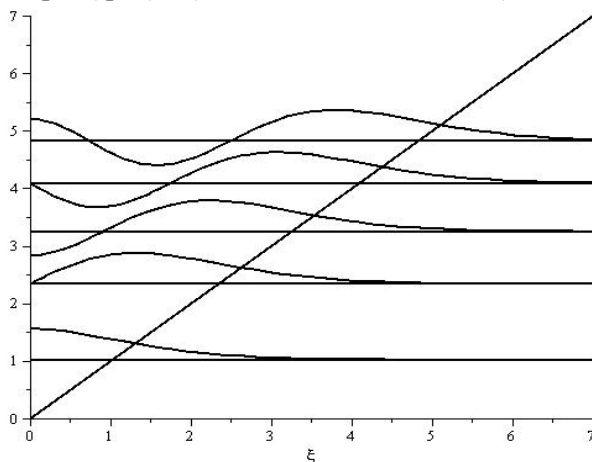


Рис. 3. Уровни энергии и соответствующие им волновые функции гармонического осциллятора. Значения ξ заданы в безразмерных единицах

```
> expand(psi(5,xi));
> plot([psi(5,xi)+6,6,xi^2/2],xi=-6..6,0..7);
> expand(psi(6,xi));
> plot([psi(6,xi)+7,7,xi^2/2],xi=-6..6,0..9).
```

На рис. 3 представлены потенциал, уровни энергии и графики волновых функций гармонического осциллятора.

Заключение

Можно отметить следующее значение использования СКМ в образовательном процессе:

- активизация познавательной деятельности студентов;
- формирование умений и навыков самостоятельно осмысливать и усваивать новый материал;
- контроль с обратной связью, с диагностикой ошибок (появление на компьютере соответствующих комментариев) по результатам деятельности и оценкой результатов;
- тренировка в процессе усвоения учебного материала;
- высвобождение учебного времени за счет выполнения на компьютере трудоемких вычислительных работ;
- усиление мотивации обучения.

Литература

1. Поршнев С.В. Компьютерное моделирование физических процессов в пакете Matlab. – М.: Горячая линия – телеком, 2003. – 592 с.
2. Дьяконов В.П. Maple 9.5/10 в математике, физике и образовании. – М.: Солон – Пресс, 2006. – 720 с.
3. Матросов А. Maple 6. Решение задач высшей математики и механики. – СПб.: БХВ-Петербург, 2001.
4. Григорьев Ю.М., Михайлова В.И., Еремеев С.Н., Сивцев В.И. и др. Maple как средство повышения эффективности обучения по квантовой теории // Вестник ЯГУ. – 2009. – Т.6, № 4. – С.24–28.
5. Яковлев Б.В., Михайлова В.И., Григорьев Ю.М., Еремеев С.Н. и др. Разработка методики использования специализированного компьютерного пакета MathCad при изучении электродинамики // Наука и образование. – 2009. – №4. – С.98–101.
6. Григорьев Ю.М., Скрыбина О.Е. Математическое моделирование относительной динамики твердого и жидкого ядер Земли // Вестник СибГАУ. – 2008. – №4(21). – С. 68–72.
7. Григорьев Ю.М., Орлова М.Н. Математическая модель волны тока и напряжения в линии передачи // Вестник Поморского университета. Серия «Естественные науки». – 2010. – №1. – С.81–87.
8. Флюгге З. Задачи по квантовой механике. Т.1 – М.: Мир, 1974. – 341 с.

Поступила в редакцию 08.04.2011