

#### Литература

1. Информатика: Учебник / Под ред. проф. Н. В. Макаровой. М.: Финансы и статистика, 2001.
2. Добрянский В. М., Самойлов В. Н., Чекер А. В. Принципы функционирования и технология создания автоматизированной информационной системы для моделирования сложных процессов. Дубна: ОИЯИ, 2000.
3. Самойлов В. Н. Технология моделирования сложных процессов. Дубна: ОИЯИ., 1999.
4. Самойлов В. Н. Технология информационного обеспечения поддержки сложных процессов. Р10-2000-182. Дубна: ОИЯИ. 2000.

## МЕТОДИКА ИСПОЛЬЗОВАНИЯ ПАКЕТА *MAPLE* ПРИ РЕШЕНИИ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ

*О. Ю. Тяжельникова*

Нижнетагильский государственный педагогический институт

Информационные технологии (ИТ) в настоящее время являются одним из наиболее перспективных направлений современных педагогических методов. Физика – одна из тех общеобразовательных дисциплин, в которой необходимость использования ИТ при обучении определяется содержанием учебного предмета, целями изучения и последовательностью изложения учебного материала. Как показывает проведенный нами анализ наиболее распространенными направлениями использования ИТ в обучении физике сегодня являются мультимедиа-учебники, программы для моделирования физических процессов, электронные справочные системы и т. д.

Необходимо также отметить интенсивное развитие программного обеспечения и появление на рынке прикладных программных средств большого числа интегрированных программных пакетов (Maple, MathCAD, Matlab, Mathematica), включающих в себя наборы встроенных функций, реализующих различные численные методы, а также мощные графические средства и символьные процессоры. Данное обстоятельство определяет необходимость их широкого применения в учебном процессе. Однако в основном, данные пакеты используются для компьютерного моделирования физических процессов, что, в общем, совершенно оправданно, так как использование компьютерных моделей в обучении позволяет не только повысить наглядность и интерес к предмету, но и развить творческие навыки, пробудить интерес к самостоятельной исследовательской деятельности.

В то же время упомянутые выше пакеты помимо средств численных вычислений имеют встроенные процессоры для выполнения символьных преобразований, которые на сегодняшний день при обучении физике практически не используются. Данное обстоятельство во многом обусловлено тем, что далеко не все преподаватели видят необходимость и целесообразность в их применении, а часть из них просто не знакома с данными пакетами. Еще од-

ной важной причиной является (как показывает проведенный нами анализ учебно-методической литературы) отсутствие методических разработок по использованию символьных процессоров в учебном процессе.

В преподавании физики, с нашей точки зрения, вопрос о применении пакетов символьной математики имеет особую важность, так как при решении большинства физических задач, особенно в курсах теоретической физики, приходится производить громоздкие математические преобразования, вызывающие затруднения у большинства студентов. В то же время они не являются самоцелью в физике, поэтому использование пакетов символьной математики здесь вполне оправданно. Их применение в учебном процессе позволит сократить время на трудоемкие и сложные математические вычисления в пользу физического содержания задачи.

По нашему мнению, одним из наиболее приспособленных для учебных целей перечисленных выше математических пакетов, является пакет Maple, так как

- математические выражения в пакете Maple, получаемые в результате вычислений, записываются в общепринятой нотации;

- в пакет интегрирован огромный набор математических и статистических функций для обработки данных;

- интуитивно-ясный и простой язык Maple позволяет программировать решения задач, если сам Maple не предлагает ее решения в виде встроеной или библиотечной функции;

- Maple предоставляет большие возможности по обработке и анализу табличных данных;

- пакет также имеет большие графические возможности (функции, зависящие от одной переменной; графики функций, заданных параметрически; графики поверхностей; векторные поля и т. д.);

- возможности Maple в области разработки анимационной графики позволяют наглядно показать учащимся те или иные законы движения или взаимодействия тел;

- в Maple входит специальный пакет student, который содержит большой набор функций для выполнения разнообразных математических преобразований (взятие интеграла по частям, замена переменных в определенном и неопределенном интегралах, отыскание максимума и минимума функции и т. д.);

- Maple реализован на разных платформах, среди которых Windows, Unix и Linux;

- пакет позволяет создавать полноценные электронные документы, содержащие текст, графики и таблицы.

Далее мы проиллюстрируем эффективность выбранного подхода на примере решения задачи о нахождении энергетического спектра частицы, находящейся в прямоугольной потенциальной яме с бесконечно высокими непроницаемыми стенками, расположенными в точках  $x = -a$  и  $x = +a$  (Стенки

служат идеализацией сильного отталкивания, испытываемого частицей при приближении к указанным границам). Подробно аналитическое решение данной задачи рассмотрено в [1].

Ищем решение уравнения Шредингера в виде

$$\psi(x,t) = u(x) \cdot e^{-i\frac{E}{\hbar}t}, \quad (1)$$

где  $E$  – энергия частицы.

Тогда пространственная часть волновой функции  $u(x)$  удовлетворяет уравнению Шредингера

$$u'' + k^2 u = 0, \quad (2)$$

где

$$k^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}. \quad (3)$$

В общем случае решение уравнения имеет следующий вид:

$$u(x) = Ae^{ikx} + Be^{-ikx}. \quad (4)$$

Учитывая граничные условия и условие нормировки, получаем для определения  $A$  и  $B$  систему двух линейных однородных уравнений:

$$\begin{cases} Ae^{ika} + Be^{-ika} = 0 \\ Ae^{-ika} + Be^{ika} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

Эта система имеет нетривиальное решение только в том случае, если ее определитель равен нулю:

$$\begin{vmatrix} e^{ika} & e^{-ika} \\ e^{-ika} & e^{ika} \end{vmatrix} = 0, \quad (6)$$

откуда

$$\sin 2ka = 0. \quad (7)$$

Условиям (6), (7) удовлетворяют следующие собственные значения  $k_n$ :

$$k_n = \frac{\pi}{2a} n, \quad n = \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots \quad (8)$$

Значение  $k = 0$ , также удовлетворяющее условиям, должно быть исключено, т. к. противоречит условию нормировки.

Подставляя значения для  $k_n$  в выражение (3), получаем выражение для энергии

$$E = \frac{\hbar^2 k_n^2}{2m} = \frac{\hbar^2 \pi^2}{8ma^2} n^2. \quad (9)$$

Из (8) видно, что

$$B = (-1)^{n+1} A.$$

Таким образом, если  $n$  – нечетное целое число, то  $B = A$ , а нормированные волновые функции равны

$$u_n^+(x) = a^{-\frac{1}{2}} \cos \frac{\pi nx}{2a}, \quad n = \pm 1, \pm 3, \dots,$$

если  $n$  – четное целое число, то  $B = -A$ , и мы имеем

$$u_n^-(x) = a^{-\frac{1}{2}} \sin \frac{\pi n x}{2a}, \quad n = \pm 2, \pm 4, \dots$$

Далее мы приводим последовательность команд, позволяющих найти энергетический спектр частицы:

1. Задание ДУ (2)

> eq := diff(u(x), x, x) + k^2 \* u(x);

$$eq := \left( \frac{\partial^2}{\partial x^2} u(x) \right) + k^2 u(x)$$

2. Решение ДУ

> dsolve(eq=0, u(x));

$$u(x) = \_C1 \sin(kx) + \_C2 \cos(kx)$$

3. Преобразование решения ДУ к экспоненциальному виду

> convert(%, exp);

$$u(x) = \frac{1}{2} \_C1 \left( e^{(ikx)} - \frac{1}{e^{(ikx)}} \right) + \_C2 \left( \frac{1}{2} e^{(ikx)} + \frac{1}{2} \frac{1}{e^{(ikx)}} \right)$$

(здесь % – оператор подстановки последней операции).

4. Упрощение выражения  $u(x)$

> simplify(%);

$$u(x) = \frac{1}{2} I e^{(ikx)} \_C1 + \frac{1}{2} I e^{(-ikx)} \_C1 + \frac{1}{2} e^{(ikx)} \_C2 + \frac{1}{2} e^{(-ikx)} \_C2$$

5. Подстановка в выражение  $u(x)$  ширины потенциальной ямы

> subs(x=a, %);

$$u(a) = \frac{1}{2} I e^{(ika)} \_C1 + \frac{1}{2} I e^{(-ika)} \_C1 + \frac{1}{2} e^{(ika)} \_C2 + \frac{1}{2} e^{(-ika)} \_C2$$

6. Запись решения ДУ в матричном виде

> m := array(1..2, 1..2, [[exp(I\*k\*a), exp(-I\*k\*a)], [exp(-I\*k\*a), exp(I\*k\*a)]]);

$$m := \begin{bmatrix} e^{(ika)} & e^{(-ika)} \\ e^{(-ika)} & e^{(ika)} \end{bmatrix}$$

7. Нахождение определителя матрицы  $m$  и сохранение результата в переменную  $s$

> s := linalg['det'](m);

$$s := (e^{(ika)})^2 - (e^{(-ika)})^2$$

8. Упрощение выражения  $s$  и сохранение результата в переменной  $s1$

> s1 := simplify(s);

$$s1 := 2 I \sin(2ka)$$

9. Решение уравнения (По умолчанию Maple находит решение тригонометрических уравнений на промежутке  $[\pi, \pi]$ . Для получения всех решений

требуется задать значение глобальной переменной `_EnvAllSolutions` равным true)

```
> _EnvAllSolutions:=true;
      _EnvAllSolutions := true
```

```
> solve(s1=0, k);
```

$$\frac{1}{2} \frac{\pi Z_1}{a}$$

где

$$Z_1=1, 2, 3, \dots$$

10. Задание максимального числа  $n$

```
> i:=6;
```

$$i := 6$$

11. Вычисление нормированных волновых функций  $u[n]$  и собственных значений энергии  $E[n]$

12. а)  $n$  – нечетное целое число

```
> for n from 1 to i by 2 do
```

```
  u[n]:=a^(-1/2)*cos(Pi*n*x/(2*a));
```

```
  E[n]:=h^2*Pi^2*n^2/(8*m*a^2);
```

```
  print(`n=`,n,` u=`,u[n],` E[n]=`,E[n]);
```

```
od:
```

$$n = 1, u = \frac{\cos\left(\frac{1}{2} \frac{\pi x}{a}\right)}{\sqrt{a}}, E = \frac{1}{8} \frac{h^2 \pi^2}{m a^2}$$

$$n = 3, u = \frac{\cos\left(\frac{3}{2} \frac{\pi x}{a}\right)}{\sqrt{a}}, E = \frac{9}{8} \frac{h^2 \pi^2}{m a^2}$$

$$n = 5, u = \frac{\cos\left(\frac{5}{2} \frac{\pi x}{a}\right)}{\sqrt{a}}, E = \frac{25}{8} \frac{h^2 \pi^2}{m a^2}$$

12. б)  $n$  – четное целое число

```
> for n from 2 to i by 2 do
```

```
  u[n]:=a^(-1/2)*sin(Pi*n*x/(2*a));
```

```
  E[n]:=h^2*Pi^2*n^2/(8*m*a^2);
```

```
  print(`n=`,n,` u=`,u[n],` E=`,E[n]);
```

```
od:
```

$$n = 2, u = \frac{\sin\left(\frac{\pi x}{a}\right)}{\sqrt{a}}, E = \frac{1}{2} \frac{h^2 \pi^2}{m a^2}$$

$$n = 4, u = \frac{\sin\left(2 \frac{\pi x}{a}\right)}{\sqrt{a}}, E = 2 \frac{h^2 \pi^2}{m a^2}$$

$$n = 1, 2, \dots, n, \quad u_n = \frac{\sin\left(3 \frac{\pi x}{a}\right)}{\sqrt{a}}, \quad E_n = \frac{9}{2} \frac{h^2 \pi^2}{m a^2}$$

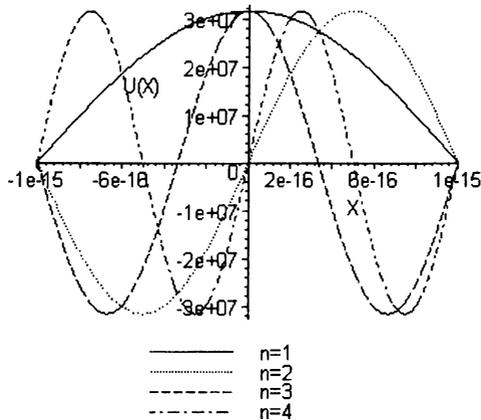
13. Задание ширины потенциальной ямы  $a$

```
> a:=0.1*10^(-14);
```

```
a := .1000000000 10-14
```

14. Построение зависимости  $u(x)$  для первых четырех собственных функций ( $x = -a..a$ )

```
> plot([u[1], u[2], u[3], u[4]],
  x=-a..a, # задание диапазона изменения x
  color=[black], # цвет кривых
  legend=[«n=1», «n=2», «n=3», «n=4»], # легенда графика
  linestyle=[1, 2, 3, 4], # задание стиля линий
  thickness=[2, 2, 2, 2], # толщина линий
  labels=[«X», «U(X)»], # подписи осей координат
  axesfont=[TIMES, ROMAN, 10], # задание шрифта подписи дан-
  ных
  labeldirections=[HORIZONTAL, HORIZONTAL], # задание на-
  правлений подписей осей координат
  labelfont=[TIMES, BOLDITALIC, 12] # определение шрифта на
  осях координат
  numpoints=50, # задание числа точек, выводимых на
  графике.
```



15. Задание постоянной Планка  $h$  и массы частицы  $m$

```
> m:=9.1*10^(-31);
```

```
h:=6.6*10^(-34);
```

```
m := .9100000000 10-30
```

```
h := .6600000000 10-33
```

16. Построение зависимости  $E(n)$ .

```
>plot([E[1], E[2], E[3], E[4], E[5], E[6], [[5, E[6]], [5, 0]], [
[- 5, E[6]], [-5, 0]]],
x=-a..a,
y=E[1]..E[6],
color=[black],
legend=[«n=1», «n=2», «n=3», «n=4», «n=5», «n=6», «a», «-a»],
linestyle=[5, 2, 3, 4, 10, 15, 1, 1],
thickness=[2],
labels=[«X», «E(n)»],
axesfont=[TIMES, ROMAN, 10],
numpoints=10,
labeldirections=[HORIZONTAL, HORIZONTAL],
labelfont=[TIMES, BOLDITALIC, 12]);
```

Таким образом, использование пакета Maple в учебном процессе позволяет большинство громоздких, но очевидных расчетов передать «машине», а использование его графических возможностей делает полученные результаты более наглядными.

Литература:

1. Флюгге К. Задачи по квантовой механике. Т. 1. М.: Мир, 1973.

## ПРИМЕНЕНИЕ КОМПЬЮТЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ В РАСЧЕТАХ ЭЛЕКТРОМАГНИТНОЙ СОВМЕСТИМОСТИ

*Н. С. Фролова*

Озерский технологический институт (филиал)

Московского инженерно-физического института (государственного университета)

Приемники электрической энергии и аппараты, присоединенные к электрическим сетям, предназначены для работы при определенных номинальных параметрах: номинальной частоте  $f_{ном}$ , номинальном напряжении  $U_{ном}$ , номинальном токе  $I_{ном}$  и т. п.

На протяжении многих лет основными режимными параметрами, определяющими качество электрической энергии, считались частота переменного тока и уровни напряжения в узлах сети. Однако по мере внедрения в технологические производственные процессы однофазных потребителей электрической энергии и электроприемников, обладающих нелинейными вольт-амперными характеристиками, все чаще приходится учитывать нарушения симметрии, синусоидальности формы кривой напряжения в трехфазных сетях и др.