

Приложение Д. Вывод уравнений (3.18)–(3.21) при помощи системы Mathematica

Из нашего вспомогательного блокнота системы Mathematica, AppendixErus.pdf [57]:

Читатель может скопировать все вводные секции этой дополнительной программы системы Mathematica, после обозначения $In[\#] :=$, из нашего PDF документа прямо в новый блокнот Математики и выполнить одну за другой, по порядку, все команды чтобы повторить наши вычисления.

Введем функцию $s(\theta) = \frac{1}{r}$ из (3.9):

$$In[1] := s[\Theta] := (1 + \epsilon \cos(\theta\omega)) / (a(1 - \epsilon^2))$$

$$In[2] := s[\Theta]$$

$$Out[2] = \frac{1 + \epsilon \cos(\theta\omega)}{a(1 - \epsilon^2)}$$

и вычислим ее производную:

$$In[3] := D[s[\Theta], \Theta]$$

$$Out[3] = -\frac{\epsilon\omega \sin(\theta\omega)}{a(1 - \epsilon^2)}$$

В правой части (3.4) оценим:

$$In[4] := (D[s[\Theta], \Theta])^2 + (s[\Theta])^2$$

$$Out[4] = \frac{(1 + \epsilon \cos(\theta\omega))^2 + \epsilon^2 \omega^2 \sin^2(\theta\omega)}{a^2(1 - \epsilon^2)^2}$$

и подставим:

$$In[5] := \% /. Sin[\Theta \omega] \rightarrow 1 - (Cos[\Theta \omega])^2$$

$$Out[5] = \frac{(1 + \epsilon \cos(\theta\omega))^2 + \epsilon^2 \omega^2 (1 - \cos^2(\theta\omega))}{a^2(1 - \epsilon^2)^2}$$

Введем S и исключим косинус:

$$In[6] := Solve[S == (1 + \epsilon Cos[\Theta \omega]) / (a(1 - \epsilon^2)), Cos[\Theta \omega]]$$

$$Out[6] = \left\{ \cos(\theta\omega) \rightarrow \frac{-1 + aS - aS\epsilon^2}{\epsilon} \right\}$$

$$In[7] := FullSimplify[\% /. Cos[\Theta \omega] \rightarrow (-1 + aS - aS\epsilon^2) / \epsilon]$$

$$Out[7] = \frac{\omega^2 + aS(-2\omega^2 - aS(-1 + \epsilon^2)(-1 + \omega^2))}{a^2(1 - \epsilon^2)}$$

В результате данное выражение записывается для переменной S следующим образом:

$$In[8] := Collect[\%, S]$$

$$Out[8] = \frac{\omega^2}{a^2(1 - \epsilon^2)} - \frac{2S\omega^2}{a(1 - \epsilon^2)} - S^2(-1 + \omega^2)$$

Уравнение (3.4), определим разницу между правой и левой частями:

$$In[9] := P = (En / (m c^2) + (Z (e^2) S) / (m c^2))^2 -$$

$$1 - ((\hbar \text{Subscript}[n, \Theta]) / (m c))^2 (\omega^2 / (a^2 (1 + \epsilon^2)) - (2 S \omega^2) / (a (1 + \epsilon^2)) - S^2 (-1 + \omega^2))$$

$$Out[9] = -1 + \left(\frac{En}{c^2 m} + \frac{e^2 S Z}{c^2 m} \right)^2 - \left(\frac{\omega^2}{a^2(1 - \epsilon^2)} - \frac{2S\omega^2}{a(1 - \epsilon^2)} - S^2(-1 + \omega^2) \right) \frac{\hbar^2 n_\theta^2}{c^2 m^2}$$

и упростим:

$$In[10] := \% /. e^2 \rightarrow \alpha \hbar c ;$$

$$In[11] := Collect[\%, S]$$

$$Out[11] = -1 + \frac{En^2}{c^4 m^2} - \frac{\omega^2 \hbar^2 n_\theta^2}{a^2 c^2 m^2 (1 - \epsilon^2)} + S \left(\frac{2EnZ\alpha\hbar}{c^3 m^2} + \frac{2\omega^2 \hbar^2 n_\theta^2}{ac^2 m^2 (1 - \epsilon^2)} \right) + S^2 \left(\frac{Z^2 \alpha^2 \hbar^2}{c^2 m^2} + \frac{(-1 + \omega^2) \hbar^2 n_\theta^2}{c^2 m^2} \right)$$

Чтобы удовлетворить (3.4), все коэффициенты этого квадратного многочлена должны быть равны нулю:

$$\begin{aligned}
 \text{In}[12] := & \{ \text{Subscript}[C, 0] = (Z^2 \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2}) / (c^2 m^2) + ((-1 + \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}) \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2}) / (c^2 m^2), \\
 & \text{Subscript}[C, 1] = (2 \text{En} Z \sqrt{[\text{Alpha}] \hbar}) / (c^3 m^2) + (2 \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}) \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2} / (a c^2 m^2 (-1 + \sqrt{[\text{Epsilon}]^2})), \\
 & \text{Subscript}[C, 2] = -1 + \text{En}^2 / (c^4 m^2) - (\sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}) \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2} / (a^2 c^2 m^2 (-1 + \sqrt{[\text{Epsilon}]^2})) \} \\
 \text{Out}[12] = & \left\{ \frac{Z^2 \alpha^2 \hbar^2}{c^2 m^2} + \frac{(-1 + \omega^2) \hbar^2 n_\theta^2}{c^2 m^2}, \frac{2 \text{En} Z \alpha \hbar}{c^3 m^2} + \frac{2 \omega^2 \hbar^2 n_\theta^2}{a c^2 m^2 (1 - \epsilon^2)}, -1 + \frac{\text{En}^2}{c^4 m^2} - \frac{\omega^2 \hbar^2 n_\theta^2}{a^2 c^2 m^2 (1 - \epsilon^2)} \right\}
 \end{aligned}$$

Из условия исчезающего главного члена выберем положительное решение:

$$\begin{aligned}
 \text{In}[13] := & \text{Solve}[\text{Subscript}[C, 0] == 0, \sqrt{[\text{Omega}]}] \\
 \text{Out}[13] = & \left\{ \omega \rightarrow -\frac{\sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2}}{n_\theta}, \omega \rightarrow \frac{\sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2}}{n_\theta} \right\}
 \end{aligned}$$

Из нулевого линейного члена найдем энергию в терминах a:

$$\begin{aligned}
 \text{In}[14] := & \text{Solve}[\text{Subscript}[C, 1] == 0, \text{En}] \\
 \text{Out}[14] = & \left\{ \text{En} \rightarrow -\frac{c \omega^2 \hbar n_\theta^2}{a Z \alpha (1 - \epsilon^2)} \right\}
 \end{aligned}$$

Или же, из (3.17):

$$\begin{aligned}
 \text{In}[15] := & \text{Solve}[(\text{En} Z \sqrt{[\text{Alpha}]}) / (\sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}) * c * \sqrt{[\text{Alpha}]} * \\
 & \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2} == 1 / (a (1 - \sqrt{[\text{Epsilon}]^2})), \text{En}] \\
 \text{Out}[15] = & \left\{ \text{En} \rightarrow -\frac{c \omega^2 \hbar n_\theta^2}{a Z \alpha (1 - \epsilon^2)} \right\}
 \end{aligned}$$

Проверим, что линейный член равен нулю:

$$\begin{aligned}
 \text{In}[16] := & \text{Subscript}[C, 1] / \text{En} \rightarrow -((c \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}) \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2}) / (a Z \sqrt{[\text{Alpha}]} (-1 + \sqrt{[\text{Epsilon}]^2})) \\
 \text{Out}[16] = & 0
 \end{aligned}$$

Постоянный член может быть упрощен ввиду (3.16):

$$\begin{aligned}
 \text{In}[17] := & \text{Subscript}[C, 2] / \\
 & 1 / (-1 + \sqrt{[\text{Epsilon}]^2}) \rightarrow -((\text{Subscript}[n, r] + \text{Sqrt}[-Z^2 \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2} + \\
 & \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}])^2 / (\sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}) \\
 \text{Out}[17] = & -1 + \frac{\text{En}^2}{c^4 m^2} + \frac{\hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2}{a^2 c^2 m^2}
 \end{aligned}$$

То же самое для линейного члена для того, чтобы исключить epsilon из выражения для энергии:

$$\begin{aligned}
 \text{In}[18] := & \text{Subscript}[C, 1] / \\
 & 1 / (-1 + \sqrt{[\text{Epsilon}]^2}) \rightarrow -((\text{Subscript}[n, r] + \text{Sqrt}[-Z^2 \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2} + \\
 & \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}])^2 / (\sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}) \\
 \text{Out}[18] = & \frac{2 \text{En} Z \alpha \hbar}{c^3 m^2} - \frac{2 \hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2}{a c^2 m^2}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{In}[19] := & \text{Solve}[\% == 0, \text{En}] \\
 \text{Out}[19] = & \left\{ \text{En} \rightarrow \frac{c \hbar (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2}{a Z \alpha} \right\}
 \end{aligned}$$

Исключим энергию из постоянного члена:

$$\begin{aligned}
 \text{In}[20] := & -1 + \text{En}^2 / (c^4 m^2) + (\sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2} (\text{Subscript}[n, r] + \text{Sqrt}[-Z^2 \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2} + \\
 & \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}])^2) / (a^2 c^2 m^2) / \\
 & \text{En} \rightarrow (c \sqrt{[\text{Alpha}]} (\text{Subscript}[n, r] + \text{Sqrt}[-Z^2 \sqrt{[\text{Alpha}]^2 \hbar^2} + \\
 & \sqrt{[\text{Omega}]^2 \hbar^2}])^2) / (a Z \sqrt{[\text{Alpha}]}) \\
 \text{Out}[20] = & -1 + \frac{\hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2}{a^2 c^2 m^2} + \frac{\hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^4}{a^2 c^2 m^2 Z^2 \alpha^2}
 \end{aligned}$$

Сейчас решим модифицированное уравнение для $A = a^2$:

```
In[21]:= Solve[(\[HBar]^2 (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2)/(
c^2 m^2) + (\[HBar]^2 (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^4)/(
c^2 m^2 Z^2 \[Alpha]^2) == A, A]
Out[21]= {A -> \frac{\hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2}{c^2 m^2} + \frac{\hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^4}{c^2 m^2 Z^2 \alpha^2}}
```

Преобразуем результат следующим образом:

```
In[22]:= Factor[(\[HBar]^2 (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2)/(
c^2 m^2) + (\[HBar]^2 (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^4)/(
c^2 m^2 Z^2 \[Alpha]^2)]
Out[22]= \frac{\hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2 (n_r^2 + n_\theta^2 + 2n_r \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})}{c^2 m^2 Z^2 \alpha^2}
```

Эквивалентное выражение:

```
In[23]:= (\[HBar]^2 (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2 * ((Subscript[n, r] +
Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2 +
Z^2 \[Alpha]^2) / (c^2 m^2 Z^2 \[Alpha]^2)
Out[23]= \frac{\hbar^2 (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2 ((n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2 + Z^2 \alpha^2)}{c^2 m^2 Z^2 \alpha^2}
```

Проверка:

```
In[24]:= Simplify[% - %]
Out[24]= 0
```

Наконец, подставим параметр a в ранее найденное выражение для энергии:

```
In[25]:= (c \[HBar] (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2) / (a Z \[Alpha]) /
a -> (\[HBar] (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\]) Sqrt[
Z^2 \[Alpha]^2 + (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2]) / (c m Z \[Alpha])
Out[25]= \frac{c^2 m (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})}{\sqrt{Z^2 \alpha^2 + (n_r + \sqrt{-Z^2 \alpha^2 + n_\theta^2})^2}}
```

Сравним квадрат этого выражения с квадратом уравнения (3.18):

```
In[26]:= Simplify[(Z^2 \[Alpha]^2 + (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2) / (Subscript[n, r] +
Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2 - (1 + (
Z^2 \[Alpha]^2) / (Subscript[n, r] + Sqrt[-Z^2 \[Alpha]^2 +
\!\(\*\SubsuperscriptBox[\(n\), \(\[Theta]\), \(\(2\)\)]\)\))^2)]
Out[26]= 0
```

Таким образом, мы вывели уравнения (3.18) – (3.21) с помощью системы компьютерной алгебры Mathematica.

Конец сессии с системой Mathematica. (Подробности можно найти в [57].)

ДАЛЬНЕЙШАЯ ПОДДЕРЖКА С СИСТЕМОЙ МАТЕМАТИКА: Дополнительно к блокноту AppendixErus.nb, представленному выше, наши компьютерные программы системы Mathematica также включают BohrAtomMathematica.nb и EllipsesAnimateAu.nb, оба на начальном уровне.

Программа EllipsesAnimateSofisticated.nb разработана для создания более сложной анимации, численного моделирования, релятивистского кеплерова движения водородо-подобных ионов по всей периодической системе элементов (детали см. в [57]).