# Моделирование движения электрона в атоме с эллипсоидным ядром

Выполнила
студентка группы 916
Габидинова А.Р

Научный руководитель:
доцент Тумаков Д.Н.

Казанский Государственный Университет, 2004г.

# Содержание

# 1 Введение

## 1.1 Строение вещества

### 1.1.1 Основы мироздания

Попытка постигнуть основы мироздания с помощью физики - наиболее естественна. Пробуют ее уже многие тысячелетия. Сначала строение вещества пытались объяснить понятием материи, затем физики пришли к мысли о том, что в основе мира лежат неделимые атомы. Атомы, как оказалось, делятся. Физики стали эксплуатировать идею, что в основе мироздания находятся элементарные частицы. У современной физики возникло серьезное опасение, что и элементарные частицы имеют сложное строение и могут делиться. Основа мира, в этой связи, снова становится призраком, и снова нет достаточно четкого и ясного ответа.[1]

### 1.1.2 Циклическая структура пространства-времени

**Планетарная модель атома** - аналогия между строением систем планеты с её спутниками и атома с его электронами. Переходя от рассмотрения макрообъектов к микрообъектам наблюдается некая цикличность. Учеными созданы теории относительно этого наблюдения. Но интересно понять, какая конкретно есть разница между данными процессами: если движение спутников по орбите планеты представить довольно легко, то движение электронов вокруг атома можно представить только по аналогии.

## 1.2 Уравнение Шрёдингера

### 1.2.1 Нерелятивистская квантовая физика

В физике существует много теорий, но в данной работе будем придерживаться законов классической нерелятивистской квантовой физики.
Движение электрона в кулоновском поле ядра описывает основное динамическое уравнение нерелятивистской квантовой механики - уравнение Шредингера.

### 1.2.2 Эрвин Шрёдингер(Schrodinger)

(12.8.1887, Вена, - 4.1.1961, там же; похоронен в Альпбахе, Тироль), австрийский физик, один из создателей квантовой механики. Окончил Венский университет (1910).
Основные труды по математической физике, теории относительности, физике атома и биофизике. К ранним работам Ш. относятся исследования по теории кристаллической решётки и создание в 1920 математической теории цвета, которая легла в основу современной колориметрии. Важнейшей заслугой Ш. является создание им волновой механики (конец 1925 - начало 1926): исходя из гипотезы Л. де Бройля о волнах материи, он показал, что стационарные состояния атомных систем могут рассматриваться как собственные колебания волнового поля, соответствующего данной системе; Ш. нашёл основное уравнение нерелятивистской квантовой механики (Шрёдингера уравнение) и дал его решение для ряда частных задач, а также общий метод его применения в теории возмущений. Установил связь волновой механики с "матричной механикой"В. Гейзенберга, М. Борна и П. Йордана и доказал их физическую тождественность. Развитый Ш. математический формализм и введённая им волновая функция y явились наиболее адекватным математическим аппаратом квантовой механики и её применений. Нобелевская премия (1933). Иностранный член АН СССР (1934).[2]

## 1.3 Моделирование строения атома

Моделирование свойств микроэлементов - составная часть общей стратегии исследований, роль которой становится все более активной. Основные причины определяются успехами развития теоретических представлений о строении веществ и фантастическими достижениями компьютерных технологий.
В разумности модели молекулы, используемой для квантово-химических построений, согласно которой анализу подлежит система ядер и электронов и ее поведение, описываемое уравнениями квантовой теории, сомнений нет. Вся совокупность экспериментальных данных, полученных разными методами, не противоречит этой модели. Трудности получения значимых результатов на ее основе связаны с тем, что она слишком обща и всеобъемлюща, так что численное решение уравнений представляет крайне сложную задачу. Приходится делать немалое число шагов на пути создания практичных алгоритмов расчетов свойств молекул, межмолекулярных комплексов и твердых тел.[3]

В данной работе будем разрабатывать алгоритм решения уравнения Шредингера для задачи движения электрона в кулоновском поле ядра. Гамильтониан (оператор набла) - квантовомеханический оператор, соответствующий функции Гамильтона в классической механике и определяющий эволюцию квантовой системы. В представлении Шрёдингера эта эволюция описывается зависимостью от времени вектора состояния $|\Psi>$ системы, который удовлетворяет уравнению Шрёдингера

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi >= H|\Psi >, \qquad (1)$$

где $H$ - гамильтониан. Если классическая функция Гамильтона не зависит явно от времени, то она является интегралом движения и значение её совпадает с энергией системы. Соответственно гамильтониан системы в этом случае является оператором энергии.[4]
Оператор Гамильтона в случае движения электрона в поле ядра будет состоять из операторов кинетической энергии электрона и взаимодействия электрона с ядром.

$$H = T + V = -\frac{h^2}{2m}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) + \left(-\frac{Ze^2}{4\pi\varepsilon_0}\frac{1}{r}\right) \qquad (2)$$

При решении этого уравнения будем использовать следующие математические операции: переход в сферические координаты; решение дифференциального уравнения второго порядка в частных производных методом разделения переменных; разложение функции в ряд по степеням $z$; полиномы Лежандра; оператор Лапласа и Гамильтона; многочлены Чебышева-Лагерра; сферические функции (гармоники); условие нормировки решения уравнения Шредингера.

## 2 Постановка задачи

Рассмотрим дифференциальное уравнение Шредингера

$$\nabla\Psi + \frac{2m_e}{h^2}\left(E - U\right)\Psi = 0. \tag{3}$$

В теоретической физике доказывается, что если потенциальная энергия определяется формулой

$$U = -\frac{e^2}{r}, \tag{4}$$

где $r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}$ и e - заряд электрона, то функция $\psi(x, y, z)$, являющаяся решением уравнения (3), характеризует движение электрона вокруг ядра, т.е. это есть волновая функция, с помощью которой определяется устойчивая, стационарная траектория движения электрона.

Уравнение (3) при условии (4) имеет вид

$$\nabla\Psi + \frac{2m_e}{h^2}\left(E + \frac{e^2}{r}\right)\Psi = 0. \tag{5}$$

Здесь $m_e$ - масса электрона, $h$ - постоянная Планка, $E$ - полная энергия электрона.

Математическая задача заключается в том, чтобы найти решение $\Psi(x, y, z)$ для уравнения (5), причем в качестве нормировки решения принимается условие

$$\int\int_{\Omega}\int |\Psi(x, y, z)|^2 dx\ dy\ dz = 1, \tag{6}$$

где $\Omega$ область определения $\Psi(x, y, z)$.

$\Psi(x, y, z)$ волновая функция прямого физического смысла не имеет. Смысл имеет квадрат модуля волновой функции $|\Psi|^2$ как плотность вероятности обнаружения частицы в точке пространства $(x, y, z)$ области определения $\Psi(x, y, z)$. Создать алгоритм для вычисления этой плотности и исследовать её.

# 3 Решение уравнения Шредингера

## 3.1 Разделение переменных

Прежде чем приступить к решению уравнения Шредингера, условимся о двух важных соглашениях. Во первых, в дальнейшем, чтобы избавится от перечисления в гамильтониане разнообразных констант, перейдем из системы единиц СИ в атомную систему единиц, в которой:

- момент: $h$ - постоянная Планка $= \mathbf{1}$
- масса: $m_e$ - масса электрона $= \mathbf{1}$
- заряд: $e$ - заряд электрона $= \mathbf{1}$
- длина: $a_0$ - атомный радиус Бора $= \mathbf{1}$

Поскольку задача о движении электрона в кулоновском поле ядра обладает сферической симметрией, то ее более естественно решать в сферических координатах $(r, \theta, \phi)$, совершив переход от декартовых согласно соотношениям:

- $x = r \sin\theta \cos\phi$
- $y = r \sin\theta \sin\phi$
- $z = r \cos\theta$
- $d\nu = dx\ dy\ dz = r^2 \sin\theta\ dr\ d\theta\ d\phi$

Пределы изменения сферических координат следующие:

Оператор Лапласа $\nabla^2$ можно преобразовать к сферической системе координат, он будет иметь вид

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} =$$

$$= \frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}. \tag{7}$$

С учетом всего вышеизложенного для атома водорода можно записать уравнение Шредингера

$$\boxed{\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}\left(r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}\right) + \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}\right) + \frac{1}{r^2\sin^2\theta}\frac{\partial^2\Psi}{\partial\phi^2} + 2\frac{1}{r}\Psi + 2E\Psi = 0,} \tag{8}$$

которое представляет собой дифференциальное уравнение второго порядка в частных производных. Уравнения такого типа решают обычно путем разделения переменных, т.е. волновую функцию $\Psi$ ищут в виде

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \tag{9}$$

где каждый из сомножителей зависит лишь от одной переменной. Подставим (9) в (8)

$$\Psi(r,\theta,\phi) = R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi), \tag{10}$$

Умножим обе части этого уравнения на $\frac{r^2}{R(r)\Theta(\theta)\Phi(\phi)}$, тогда получим

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) + 2\left(\frac{1}{r} + E\right)r^2 =$$

$$= -\frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right) - \frac{1}{\Phi(\phi)\sin^2\theta}\frac{d\Phi(\phi)}{d\phi^2}. \tag{11}$$

Легко убедиться, что левая часть равенства (11) зависит только от переменной r, а правая - от переменных $\theta$ и $\phi$. Но части равенства, зависящие от разных переменных, будут, в общем случае, равны друг другу тогда и только тогда, когда левая и правая части равны некоторой константе. Поэтому из (11) сразу же следует равенство для $R(r)$

$$\frac{d}{dr}\left(r^2\frac{dR(r)}{dr}\right) + 2\left(\frac{1}{r} + E\right)r^2R(r) - cR(r) = 0, \tag{12}$$

где с - константа. Для правой части (11) получим

$$-\frac{1}{\Theta(\theta)\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)-\frac{1}{\Phi(\phi)\sin^2\theta}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}=c \tag{13}$$

или

$$\frac{\sin\theta}{\Theta(\theta)}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)+c\sin^2\theta=-\frac{1}{\Phi(\phi)}\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}. \tag{14}$$

И в этом равенстве левая и правая части зависят от разных переменных $\theta$ и $\phi$, а поэтому они должны быть равны константе. Положим, эта константа положительна и равна $m^2$, тогда из (14) следует

$$\frac{d^2\Phi(\phi)}{d\phi^2}+m^2\Phi(\phi)=0; \tag{15}$$

$$\frac{1}{\sin\theta}\frac{d}{d\theta}\left(\sin\theta\frac{d\Theta(\theta)}{d\theta}\right)+\left(c-\frac{m^2}{\sin^2\theta}\right)\Theta(\theta)=0. \tag{16}$$

Тем самым исходное уравнение Шредингера (8), зависящее от трех переменных, свели к трем уравнениям (12), (15), (16), каждое из которых зависит лишь от одной переменной. Рассмотрим теперь эти уравнения в отдельности.[5]

## 3.2 Решение уравнения для $\phi$

Самым простым является уравнение (15), для которого решение очевидно

$$\Phi(\phi)=Ae^{\pm im\phi}, \tag{17}$$

где  - некая константа. Условие однозначности волновой функции дает

$$\Phi(0)=\Phi(2\pi) \text{ или } A=Ae^{\pm im2\pi}, e^{\pm im2\pi}=1.$$

Воспользуемся теперь формулой Эйлера для комплексных чисел, тогда $\cos(2\pi m)\pm i\sin(2\pi m)=1$, а это равенство выполняется лишь для целочисленных m: $m=0,\pm1,\pm2,...$

Константу  можно определить из условия нормировки (6), т.е.

$$\int_0^{2\pi}\Phi^*(\phi)\Phi(\phi)d\phi=A^2\int_0^{2\pi}e^{im\phi}e^{-im\phi}d\phi=A^22\pi=1 \tag{18}$$

или

$$A = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}$$

И тогда окончательно функция $\Phi(\phi)$ примет вид

$$\boxed{\Phi(\phi) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{\pm i m \phi},\ m = 0, \pm 1, \pm 2, ... \qquad (19)}$$

Так как уравнения, зависящие от переменных $\theta$ и $r$ являются вещественными (см. ниже), то для счета в уравнении $\Phi(\phi)$ понадобится только вещественная часть

$$\Phi(\phi) = \frac{\pm 1}{\sqrt{2\pi}} \cos m\phi,\ m = 0, \pm 1, \pm 2, ... \qquad (20)$$

## 3.3 Решение уравнения для $\theta$

Рассмотрим теперь уравнение (16). Оно является хорошо известным в теории дифференциальных уравнений уравнением Лежандра, и тоже допускает точное решение. Это уравнение обычно решают путем замены переменных: введем вместо $\theta$ новую переменную

$$\xi = \cos\theta,\ -1 \leq \xi \leq 1,\ d\xi = -\sin\theta\ d\theta$$

и будем рассматривать $\Theta(\theta)$ как функцию $\xi$. Тогда (16) можно записать в виде

$$(1 - \xi^2)\Theta'' - 2\xi\Theta' + \left(c - \frac{m^2}{1 - \xi^2}\right)\Theta = 0. \qquad (21)$$

Рассмотрим поведение функции $\Theta$ вблизи особых точек $\xi = \pm 1$. Обратимся сначала к точке $\xi = +1$ и введем переменную $z = \xi - 1,\ (z \to 0)$. Тогда из (21) получим

$$\Theta'' + \frac{2}{z}\frac{z+1}{z+2}\Theta' - \left[\frac{c}{z(z+2)} + \frac{m^2}{z^2(z+2)^2}\right]\Theta = 0 \qquad (22)$$

и будем искать функцию $\Theta$ в виде ряда по степеням $z$

$$\Theta = z^{\gamma}\nu,\ \nu = \alpha_0 + \alpha_1 z + \alpha_2 z^2 + \alpha_3 z^3 + ... \qquad (23)$$

Определим исходную степень $\gamma$. При $z \to 0$ из (23) следует: $\Theta = a_o z^{\gamma}$. Подставляя это решение в (22) и пренебрегая бесконечно малыми порядка меньше чем $z^{\gamma-2}$ получим

$$\left[\gamma(\gamma-1)+\gamma-\frac{m^2}{4}\right]a_0 z^{\gamma-2}=0, \tag{24}$$

откуда следует $\gamma = \pm\frac{m}{2}$. То же значение показателя $\gamma$ и для особой точки $\xi = -1$. Поэтому, чтобы функция $\Theta$ была ограниченной, необходимо, чтобы $\gamma = \frac{|m|}{2}$, т.е. для $m > 0$ $\gamma = \frac{m}{2}$, а для $m < 0$ $\gamma = -\frac{m}{2}$.

Тогда функция $\Theta$ будет иметь вид

$$\Theta = (1-\xi^2)^{\frac{|m|}{2}}\nu, \tag{25}$$

где $\nu$ - ряд по степеням $z$. Однако, для дальнейших преобразований удобнее представить $\nu$ в виде ряда по степеням $\xi$: $\nu = \sum\limits_{\eta} b_\eta \xi^\eta$. Теперь, подставив (25) в (21), получим

$$(1-\xi^2)\nu^{''}-2(|m|+1)\xi\nu^{'}+(c-|m|-m^2)\nu=0 \tag{26}$$

Если теперь в этом выражении $\nu$ представить в виде ряда по $\xi$ и приравнять коэффициенты при одинаковых степенях $\xi$, то можно получить рекуррентную формулу для расчетов коэффициентов $b_\eta$

$$(\eta+2)(\eta+1)b_{\eta+2}=\left[\eta(\eta-1)+2(|m|+1)\eta-c+|m|+m^2\right]b_\eta. \tag{27}$$

Если ряд по $\eta$ оборвать на степени $\eta = k$, то $\nu$ будет многочленом $k-$той степени и будет решением уравнения (16). Из (27) следует, что ряд может оборваться лишь в том случае, если $k(k-1)+2(l+|m|)k-c+|m|+m^2=0$ или $c=(k+|m|)(k+|m|+l)$. Вводя обозначение $k+|m|=l$, мы получаем, что решение возможно лишь в случае $c=l(l+1),\ l=0,1,2,3,...\ |m|=0,1,...,l$

Итак, решения уравнения (16) зависят от характеристических чисел $l$ и $m$. Эти числа есть ни что иное, как орбитальное и магнитное квантовые числа электрона в атоме.

**Квантовые числа** - энергетические параметры, определяющие состояние электрона и тип атомной орбитали, на которой он находится.

1. Главное квантовое число $n$ определяет общую энергию электрона и степень его удаления от ядра (номер энергетического уровня); оно принимает любые целочисленные значения, начиная с 1

$(n = 1, 2, 3, ...)$

2. Орбитальное (побочное или азимутальное) квантовое число $l$ определяет форму атомной орбитали. Оно может принимать целочисленные значения от 0 до $n-1$ ($l = 0, 1, 2, 3, ..., n-1$). Каждому значению $l$ соответствует орбиталь особой формы: $l = 0$ - s-орбитали; $l = 1$ - p-орбитали (3 типа, отличающихся магнитным квантовым числом m); $l = 2$ - d-орбитали (5 типов), $l = 3$ - f-орбитали (7 типов).

3. Магнитное квантовое число $m$ определяет ориентацию орбитали в пространстве относительно внешнего магнитного или электрического поля. Его значения изменяются от $-l$ до $+l$, включая 0. Например, при $l = 1$ число m принимает 3 значения: +1, 0, -1, поэтому существуют 3 типа $p-$АО: $p_x, p_y, p_z$.

4. Спиновое квантовое число $s$ может принимать лишь два возможных значения $\pm\frac{1}{2}$. Они соответствуют двум возможным и противоположным друг другу направлениям собственного магнитного момента электрона, называемого спином (от англ. веретено). Для обозначения электронов с различными спинами используются символы: ↑ и ↓.[6]

Вид квантовых чисел в решении уравнения следующий

$$\Theta(\theta) = P_l^{|m|}(\xi),\ \xi = \cos\theta, \tag{28}$$

где $P_l^{|m|}$ - многочлены Лежандра.

Многочлены Лежандра определяются по формуле

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \frac{1}{l!2^l}(1-\cos^2\theta)^{\frac{|m|}{2}}\frac{d^{l+|m|}}{(d\cos\theta)^{l+|m|}}(\cos^2\theta - 1)^l \tag{29}$$

или

$$P_l^{|m|}(\cos\theta) = \frac{1}{l!2^l}(\sin\theta)^{|m|}[(\cos^2\theta-1)^l]^{(l+|m|)}_{\cos\theta}. \tag{30}$$

**Сосчитаем функцию $\Theta(\theta)$ при низших значениях $l$ и $m$:**

| $m\backslash l$ | 0 | 1 | 2 | 3 | 4 |
|---|---|---|---|---|---|
| 0 | 1 | $\cos\theta$ | $\frac{1}{2}(3\cos^2\theta-1)$ | $\frac{1}{2}(5\cos^3\theta-3\cos\theta)$ | $\frac{1}{8}(35\cos^4\theta-30\cos^2\theta+3)$ |
| $\pm1$ | $-$ | $\sin\theta$ | $3\sin\theta\cos\theta$ | $\frac{3}{2}\sin\theta(5\cos^2\theta-1)$ | $\frac{5}{2}\sin\theta\cos\theta(7\cos^2\theta-3)$ |
| $\pm2$ | $-$ | $-$ | $3\sin^2\theta$ | $15\sin^2\theta\cos\theta$ | $\frac{15}{2}\sin^2\theta(7\cos^2\theta-1)$ |
| $\pm3$ | $-$ | $-$ | $-$ | $15\sin^3\theta$ | $105\sin^3\theta\cos\theta$ |
| $\pm4$ | $-$ | $-$ | $-$ | $-$ | $105\sin^4\theta$ |

## 3.4 Сферическая гармоника

Были найдены решения уравнений $\Theta(\theta)$ и $\Phi(\phi)$. Произведение этих двух функций представляет собой угловую часть волновой функции и называется сферической гармоникой $Y_{lm}(\theta,\phi)$

$$Y_{lm}(\theta,\phi) = \Theta(\theta)\Phi(\phi) = \left[\frac{1}{2\pi}\frac{(2l+1)(l-|m|)!}{2(l+|m|)!}\right]^{\frac{1}{2}} P_l^{|m|}(\cos\theta)e^{im\phi}, \qquad (31)$$

$$l = 0, 1, 2, ...; \; m = -l...0...l.$$

## 3.5 Решение радиального уравнения

Нам осталось рассмотреть уравнение (12), которое называется радиальным уравнением Шредингера. Представим его в виде
Разделим его на R и раскроем скобки

$$\frac{1}{R(r)}\frac{d}{dr}(r^2\frac{dR(r)}{dr}) + 2Er^2 + r - c.$$

Выберем постоянную в виде произведения $c = m(m+1)$.

$$r^2R^{''}(r)_2rR^{'}(r) + [2E + r - m(m+1)]R(r) = 0. \qquad (32)$$

Рассмотрим вспомогательную функцию

$$\nu_n(x) = x^m exp(-\frac{x}{2})L_n(x;a), \qquad (33)$$

где $L_n(x;a)$ - многочлены Чебышева-Лагерра.

Разрешаем равенство (33) относительно многочлена Чебышёва-Лагерра

$$L_n(x;a) = x^{-m}exp(\frac{x}{2})\nu_n(x)$$

и считаем производные

$$L_n(x;a) = -mx^{-m-1}e^{\frac{x}{2}}\nu_n(x) + \frac{1}{2}x^{-m}e^{\frac{x}{2}}\nu_n(x) +$$

$$+x^{-m}e^{\frac{x}{2}}\nu_n^{'}(x) = x^{-m}e^{\frac{x}{2}}[\nu_n^{'}(x) + \left(\frac{1}{2} - \frac{m}{x}\right)\nu_n(x)],$$

$$L_n^{''}(x;a) = x^{-m}e^{\frac{x}{2}}\{\nu_n^{''}(x) + (1 - \frac{2m}{x})\nu_n^{'}(x) + \left[\frac{m}{x^2} + \left(\frac{1}{2} - \frac{m}{x}\right)^2\right]\nu_n(x)\}$$

Пользуясь дифференциальным уравнением для многочленов Чебышёва-Лагерра, после преобразований получим

$$x^2\nu_n^{''}(x)+(\alpha+1-2m)x\nu_n^{'}(x)+[m-\frac{1}{4}x^2+m^2+(\alpha+1)(\frac{1}{2}x-m)+nx]\nu_n(x)=0. \tag{34}$$

Положим, произвольный ранее параметр $\alpha = 2m+1$.
Тогда вместо(34) получим

$$x^2\nu_n^{''}(x)+2x\nu_n^{'}(x)+[-\frac{x^2}{4}+(m+n+1)x-m(m+1)]\nu_n(x)=0. \tag{35}$$

Чтобы выразить решение уравнения (32) через решение уравнения (35) введем новое независимое переменное $x = a_n r$, где $a_n$ - пока неизвестное постоянное, а $x$ не является координатой в области определения.

$$u_n(r) = \nu_n(a_n r) = \nu_n(x)$$

вводим новую неизвестную функцию, находим её производные и переходим к новым переменным в уравнении (35)

$$u_n^{'}(r) = a_n\nu_n^{'}(a_n r), \quad u_n^{''}(r) = a_n^2\nu_n^{''}(a_n r);$$

$$r^2u_n^{''}(r)+2ru_n^{'}(r)+\left[-\frac{a_n^2r^2}{4}+(m+n+1)a_nr-m(m+1)\right]u_n(r)=0.$$

Таким образом

$$\boxed{\begin{gathered} R_{nm}(r) = u_n(r) = \nu_n(a_n r) = \left(\frac{2r}{m+n+1}\right)^m \times \\ \times exp\left(-\frac{2r}{2(m+n+1)}\right) L_n\left(\frac{2r}{m+n+1}; 2m+1\right), \end{gathered}}$$

где $m$ и $n$ - квантовые числа, а $L_n(\frac{2r}{m+n+1}; 2m+1)$ полиномы Чебышева-Лагерра[7]. Для их вычисления воспользуемся рекуррентной формулой

$$(n+1)L_{n+1}(x;a) = (a+2n+1-x)L_n(x;a)-(a+n)L_{n-1}(x;a).$$

Чтобы можно было запрограммировать счет по рекуррентной формуле, сосчитаем первые члены полинома Лагерра по формуле Родрига

$$L_n(x;a) = \frac{1}{n!}x^{-a}e^x(x^{a+n}e^{-x})^{(n)}:$$

$$L_0(x;a) = 1; \quad L_1(x;a) = a+1-x.$$

# Список литературы

[1] Ю.Н. Соколов, д.ф.н., к.х.н., профессор. Циклическая структура периодической системы химических элементов Д.И.Менделеева. http://www.sciteclibrary.ru/

[2] Л.С. Полак. Большая советская энциклопедия (БСЭ). http://www.yandex.ru

[3] А.В. Немухин. Компьютерное моделирование в химии. Статьи Соросовского Образовательного журнала, 1998. http://www.pereplet.ru/obrazovanie/stsoros/567.html

[4] А.В. Борисов. Основы квантовой механики. Физический факультет МГУ, 1998г. http://www.nature.ru - Научная сеть

[5] П.В. Аврамов. Курс лекций "Квантовая химия". Красноярск, http://kristall.lan.krasu.ru/

[6] Г.И. Дерябина, Г.В. Кантария, А.В. Соловов. Органическая химия. http://www.chemistry.ssu.samara.ru/

[7] П.К. Суетин. Классические ортогональные многочлены. Москва, издательство "Наука", 1976.

# 4 Приложения

## 4.1 Графики вероятностей при различных квантовых числах

## 4.2 Трехмерный график волновой функции при фиксированном радиусе

## 4.3 Вид орбиталей

## 4.4 Листинг программы (JScript)