

Представление силы или потенциала рядом Тейлора в динамических задачах

В разделе Механика общеобразовательного курса физики можно найти утверждение, что задача о движении материальной точки решается по довольно простой унифицированной схеме. Надо составить уравнение движения на основе второго закона Ньютона (пусть для простоты это одномерное движение в среде с внутренним трением)

$$\frac{d^2x}{dt^2} = \frac{1}{m} f(v)$$

и заданных начальных условий.

Если аналитический вид функции силы известен, и функция интегрируемая, то решение $x = x(t)$ находят в аналитической форме и далее легко интерпретируют. Если функция известна в аналитической форме, но неинтегрируема, то решение можно найти путем численного интегрирования. Иногда в курсах физики для инженеров поднимается вопрос о решении прикладных задач. Например, баллистической задачи. Тут возникают трудности методологического характера.

При движении точки в вязкой среде зависимость силы трения от скорости может быть очень сложной, и аналитический вид этой сложной зависимости никому толком не известен. Приходится отступать от простых и ясных схем теоретической, абстрактной физики. Приходится погружаться в трудности постановки и решения прикладных задач.

Говорим: Из математики известно, что любую гладкую функцию можно представить приближенно рядом Тейлора. Обычно члены ряда убывают по абсолютной величине с ростом номера члена в ряду. Отсюда намечается такой общеизвестный прием. Ограничимся несколькими первыми членами ряда и найдем приближенное решение задачи для ограниченного диапазона скоростей, характерного для данного приложения. А раз аналитический вид силы неизвестен, коэффициенты при степенях скорости будем искать не через производные, как советует математика, а путем постановки и решения обратной задачи, то есть подгоняя коэффициенты под данные специально поставленных экспериментов.

Не только говорим так, но и поступаем так на практике. Практика решения уже прямых задач, то есть прогнозирования движения изученных объектов в условиях, отличных от ранее проведенных экспериментов, показывает нам, насколько мы были правы, когда обрывали ряд Тейлора на члене номер такой-то.

Беда институтского курса физики в том, что в нем нет ни времени, ни сил, чтобы заняться всем этим **на практике**. Хотя бы в физпрактикуме. Я пересмотрел множество книг по физпрактикуму и не нашел никаких следов постановки и решения обратных задач в лабораторном учебном эксперименте. Зато наблюдал, как возникают самые фантастические представления о возможности представления сил и потенциалов рядами Тейлора. Эти фантастические представления распространяются довольно широко (странно, но есть закономерность – научная информация распространяется в народе очень лениво, а научная дезинформация – очень шустро). Можно обнаружить эти следы даже в деятельности профессиональных исследователей, работающих в

иных областях естествознания. А что делать, если этих исследователей готовили в вузах, где физика является общеобразовательным предметом?

Приведу пример из области квантовой химии. Это задача о колебании такой молекулярной модели, в которой необходимо учитывать ангармонизм валентных связей. Тут квантовая химия опирается на представления квантовой механики о движении частицы в ангармонической потенциальной яме. Следовательно, требуется в простейшем случае двухатомной молекулы составить и решить уравнение Шредингера, представив потенциальную энергию соответствующего одномерного осциллятора некой функцией колебательной координаты растяжения этой валентной связи. Считается, что реальной действительности вполне адекватен потенциал, записываемый в форме функции Морза.

Аналитически проинтегрировать стационарное уравнение Шредингера с функцией Морза в правой части нельзя. Численно интегрировать такое уравнение считается сложным делом. Поэтому говорят: разложим функцию Морза в ряд Тейлора, ограничимся небольшим числом первых членов ряда (не далее пятого), найдем приближенное решение уравнения и будем им пользоваться в прикладных задачах, когда надо учитывать ангармонизм.

Звучит привычно, а потому убедительно. Все так и делают. Но давайте не поленимся. Прделаем все вычисления для реалистической модели. Будем постепенно увеличивать число членов в разложении функции Морза и посмотрим, какие следствия мы будем получать.

Потенциал Морза и его приближение рядом Тейлора

Зададим реалистические данные для молекулы с параметрами H_2 . Они взяты из книги М.А.Ельяшевич, Атомная и молекулярная спектроскопия. М. УРСС, 2001.

Потенциал молекулы $U(x)$ приближенно изображается формулой Морза (Morse произносится как Морз)

$$U(x) = D[1 - \exp(-\beta(x - x_e))]^2.$$

Здесь x – текущая длина связи молекулы H_2 .

Приведенная масса $M = \frac{1}{2} AEM$,

частота колебаний $\nu = 4000 \text{ см}^{-1}$.

Параметр $D = 38000 \text{ см}^{-1}$; это энергия диссоциации (см. рис. 20. 4 на стр. 585 в указанной книге).

Тогда параметр $\beta = 2\pi\nu\sqrt{\frac{M}{2D}} = 70.91$.

$x_e = 0.7 \text{ \AA}$; это равновесное расстояние между ядрами. Вернее это расстояние, при котором $U(x) = 0$.

Получается кривая, показанная на рисунке 1.

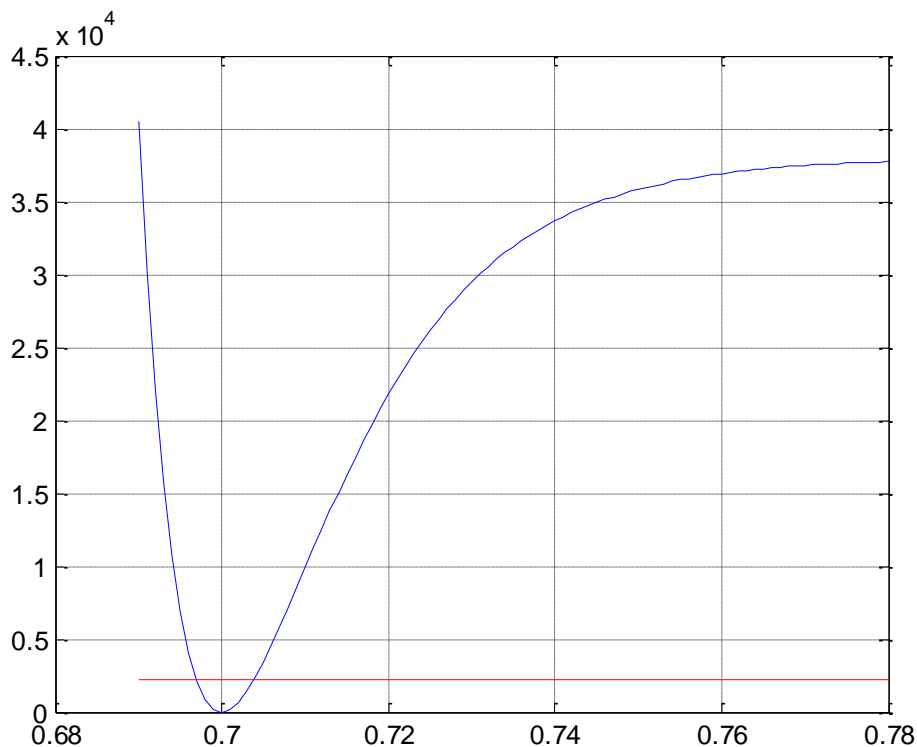


Рис. 1. Потенциал Морза для молекулы H_2 . Красным показан низший уровень колебательной энергии $\nu = 2200 \text{ см}^{-1}$.

Выводим формулы для производных от $U(x)$ и выясняем их значения при $x = x_e$, чтобы построить ряд Тейлора, ограничившись 4-м членом ряда.

Нулевой и первый члены ряда равны тождественно нулю, как и должно быть по физике.

$$U''(x) = -2D\beta^2[\exp(-\beta(x - x_e)) - \exp(-2\beta(x - x_e))];$$

$$U''(x_e) = 2D\beta^2.$$

$$U'''(x) = 2D\beta^3[\exp(-\beta(x - x_e)) - 4\exp(-2\beta(x - x_e))];$$

$$U'''(x_e) = -6D\beta^3.$$

$$U^{(4)}(x) = -2D\beta^4[\exp(-\beta(x - x_e)) - 8\exp(-2\beta(x - x_e))];$$

$$U^{(4)}(x_e) = 14D\beta^4.$$

Получаем ряд

$$U(x) = \frac{(x - x_e)^2}{2!} U''(x_e) + \frac{(x - x_e)^3}{3!} U'''(x_e) + \frac{(x - x_e)^4}{4!} U^{(4)}(x_e) =$$

$$= D\beta^2(x - x_e)^2 - D\beta^3(x - x_e)^3 + \frac{7}{12} D\beta^4(x - x_e)^4.$$

Строим график того, что дает ряд Тейлора. Поскольку значения энергии растяжения по Тейлору очень быстро растут, ограничиваем область рассмотрения.

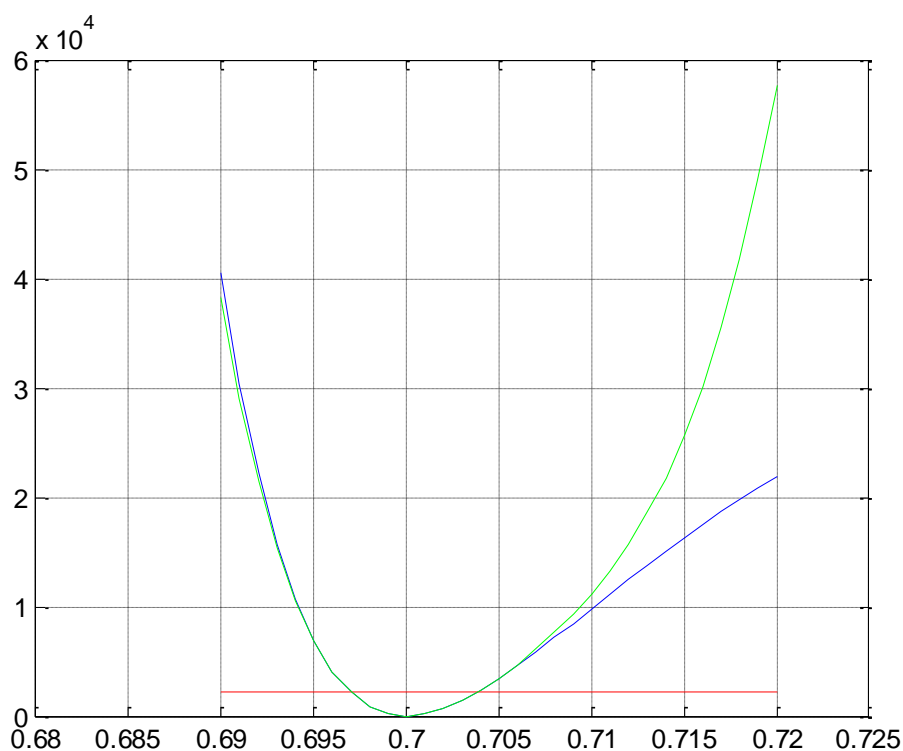


Рис. 2. На графике синим изображен потенциал Морза, а зеленым – представление потенциала рядом Тейлора, оборванным на члене четвертой степени.

Слева от равновесия кривые сливаются, справа – расходятся. Решить численно уравнение Шредингера для такого потенциала вполне возможно. Но мы не будем этого делать, поскольку и без решения уравнения ясно, что потенциальная яма получилась бесконечно глубокой. Значит, волновые колебательные функции любых стационарных состояний осциллятора будут локализованы. То есть, молекула ни при каком колебательном возбуждении не сможет диссоциировать. Это резко противоречит опыту.

Пробуем добавить пятый член разложения в ряд Тейлора.

$$U^{5'}(x) = 2D\beta^5[\exp(-\beta(x - x_e)) - 16\exp(-2\beta(x - x_e))];$$

$$U^{5'}(x_e) = -30D\beta^5.$$

9

В программе теперь строка для Ut (U by Talor) удлинилась и стала такой

```
Ut = (x - xe).^2*D*b^2 - (x - xe).^3*D*b^3 + (x -
xe).^4*D*b^4*7/12 ...
-0.25*D*b^5*(x - xe).^5;
```

И немного изменилась область наблюдения. Это видно прямо на рисунке.

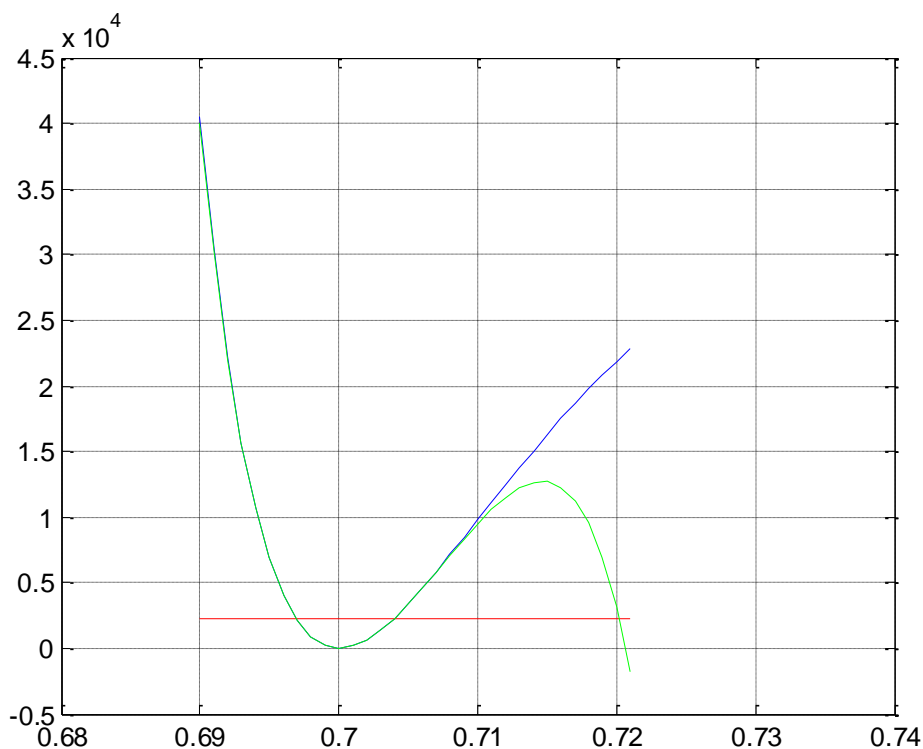


Рис. 3. На графике синим изображен потенциал Морза, зеленым – представление потенциала рядом Тейлора, оборванным на члене пятой степени.

Вот теперь (τόρα) и здесь (εδώ) она ему и сказала. Нечто невыносимое для его мужского Я (εγώ). Эта зеленая потенциальная кривая сказала – не дам возможности получить физически приемлемый результат.

Видно, что еще далеко до диссоциации справа появляется вторая, значительно более глубокая яма. Настолько глубокая, что я боюсь туда заглядывать, пока не добавлю 6-й, 7-й, ... 19-й члены ряда.

Пока опять не будем решать уравнение Шредингера с рядом Тейлора, ограниченным членом пятой степени. И без точного решения нам ясно, что при возбуждении колебания с эффективным квантовым числом 3 система свалится в глубокую пропасть справа. Это уже не яма, а именно пропасть, поскольку с ростом x потенциальная энергия осциллятора только уменьшается. Следовательно, перевалив через показанный на графике невысокий потенциальный барьер, система из двух ядер будет все более стремительно разлетаться в разные стороны. Такая картина также резко противоречит реальной действительности. Из первого графика нам ясно, что до диссоциации молекула должна добираться путем возбуждения на очень высокий энергетический уровень.

Не будем продолжать удлинять ряд Тейлора. Нам уже ясно, что будет получаться при добавлении членов более высокого порядка. Добавим член степени 6. Получим потенциал, похожий на зеленый график рисунка 2. Только резкий подъем потенциала справа начнется чуть правее по оси x . Не адекватно реальной действительности.

Добавим член степени 7. Получим потенциал, похожий на зеленый график рисунка 3. Только резкий спуск потенциала справа начнется чуть правее по оси x . Не адекватно реальной действительности.

Дальше сказку про белого бычка можно продолжать долго. Я, во всяком случае, поленился доводить ряд Тейлора до члена степени 19. Бессмысленное это занятие.

Не поленимся еще раз прочесть то, что привычно говорят в профессиональных кругах квантовых химиков:

разложим функцию Морза в ряд Тейлора, ограничимся небольшим числом первых членов ряда (не далее пятого), найдем приближенное решение уравнения и будем им пользоваться в прикладных задачах, когда надо учитывать ангармонизм.

Ясно, что в этой прикладной задаче ряд Тейлора не является палочкой-выручалочкой. Из рисунка 3 видно, что таким модельным потенциалом можно пользоваться лишь при растяжениях связи не более, чем до 0.71 \AA . Это соответствует состоянию с эффективным квантовым числом 3. Всего лишь. Дальше – враньё.

Решать проблему ангармонизма можно и нужно как-то иначе. Например, в нашей работе с Л.А. Грибовым найден простой способ учета ангармонизма при низких степенях колебательного возбуждения молекулы, когда еще далеко до выхода на предел диссоциации (Журнал структурной химии, 2007, Том 48, № 1, 22-26.). Этот способ позволяет находить энергии и колебательные функции для любых представлений ангармонического потенциала. При этом непонятно, почему лучше пользоваться длинным рядом Тейлора, а не непосредственно короткой формулой потенциала Морза, раз всё равно уравнение Шредингера нельзя решить аналитически, если только не оборвать ряд Телора на члене второй степени.

Завершим эту заметку, вернувшись к задаче из механики. Не ясно ли, что и в более простой ситуации составления и решения классического уравнения движения опираться на ряд Тейлора так же рискованно, как и в квантовой механике? За получаемыми решениями и там нужен глаз да глаз. Но об этом в системе общего физического образования никто никого не предупреждает. С вытекающими, как мы здесь видели, последствиями.

Примечание.

Кривую, показанную на рисунке 1, можно сравнить с рисунком 20. 4 на стр. 585 у Ельяшевича.

Видно, что в книге Ельяшевича кто-то неправильно подготовил рисунок. Там возможны растяжения молекулы вплоть до 2.5 \AA . У меня диссоциация наступает уже при растяжении 0.78 \AA . Но это действительно большой сдвиг – больше 10 % от равновесного расстояния. На всякий случай привожу программу, по которой строится кривая потенциала Морза для молекулы H_2 . Пользуясь этой программой, каждый читатель может проверить правильность построения графика

```
% Try Morse-Talor
```

```
D = 3.8e4;  
M = 0.5;  
niu = 4400;  
b = 2*pi*niu*sqrt(0.5*M/D);  
xe = 0.7;  
x = 0.690:0.001:0.78;  
Um = D*(1 - exp(-b*(x - xe))).^2;  
plot(x, Um);
```

```
grid
hold on
plot([x(1),x(end)], [2200, 2200], 'r')
hold off
```

А можно ничего не проверять, а скопировать не очень правильный рисунок из книги Ельяшевича в свою монографию. Дальше этот рисунок попадет в авторитетные учебники. Потом в менее авторитетные. И пошло-поехало.