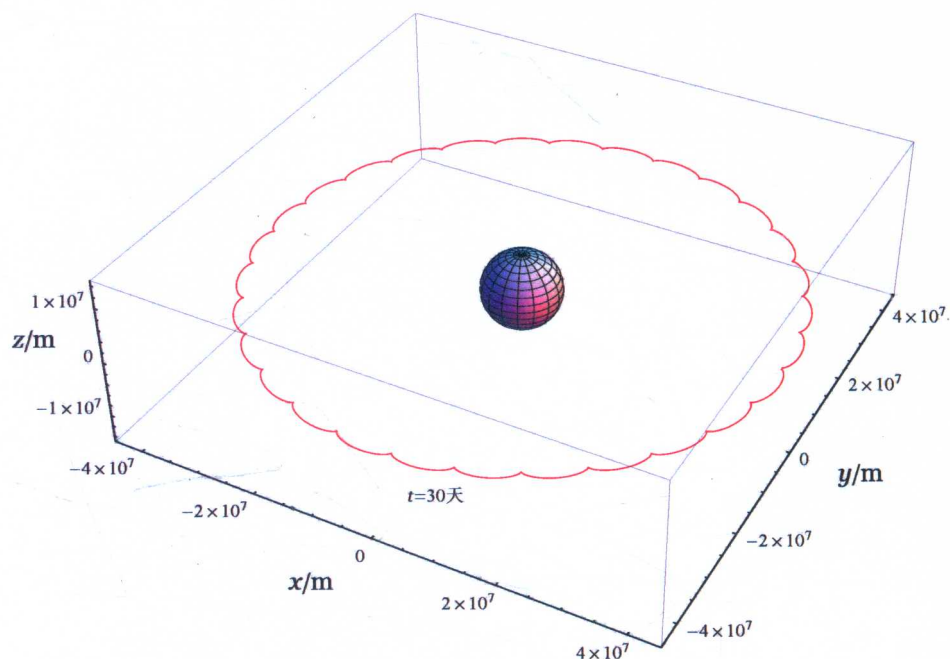


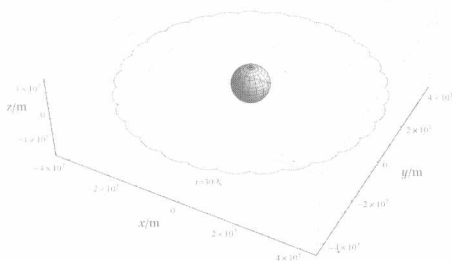


基于Mathematica的 数字化物理学

■ 江俊勤 / 著

 科学出版社

基于Mathematica的 数字化物理学



■ 江俊勤 / 著

科学出版社
北京

图书在版编目(CIP)数据

基于 Mathematica 的数字化物理学/江俊勤著. —北京: 科学出版社, 2015.11

ISBN 978-7-03-046369-2

I. ①基… II. ①江… III. ①物理学—数值计算—Mathematica 软件
IV. ①O4-39

中国版本图书馆 CIP 数据核字 (2015) 第 271290 号

责任编辑: 郭勇斌 邓新平 彭婧煜 焦惠丛 / 责任校对: 李 影
责任印制: 赵 博 / 封面设计: 黄华斌

科学出版社出版

北京东黄城根北街 16 号

邮政编码: 100717

<http://www.sciencep.com>

北京市农林印务有限公司印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015 年 12 月第 一 版 开本: 720 × 1000 1/16

2015 年 12 月第一次印刷 印张: 22 1/2 插页: 4

字数: 454 000

定价: 108.00 元

(如有印装质量问题, 我社负责调换)

前 言

数字化物理学的主要任务是利用电子计算机的快速计算和数字绘图等有利条件,用图像或动画片模拟物理学的基本原理、复杂物理现象以及相互作用过程,把抽象的物理概念形象化、复杂的物理规律数字化.数字化成果可以充实教学内容、提高课堂教学效率和质量,而且还有助于人们深入认识物理规律;具体问题的数字化研究过程能够培养学生的科学探索精神,提高科研能力,特别是能引导学生参与到具体物理实例的数字化研究过程之中——先提出初步方案和目标、编写程序,经过反复调试与运行、改进研究方案和目标,最后得到正确描述复杂物理规律的精美立体图或动画片.这样的实践活动能极大地激发学生的学习积极性,培养学生的创新意识.到目前为止,数字化物理学教材(特别是有深度的专著)很少见.鉴此,作者在多年研究的基础上,编写本书,以期起到抛砖引玉的作用.

作为数字化物理学的基础教材,本书的选题原则是既能展示数值计算的特色和优势,又不会因算法过于复杂而淹没了物理内涵.作者经过反复尝试与取舍,精选了一批在力学、电磁学和量子力学等传统教科书中无法深入讨论的重要问题(本书的选题大多数源自经典教材的重要知识点,一部分还是物理教学类期刊的热点问题),借助 Mathematica 强大的符号运算和数值计算能力以及杰出的绘图功能,图文并茂地展现各个实例的物理内涵和韵味.

第 1 章从简单的点电荷系统入手,逐步介绍 Mathematica 的各个重要功能及其在电场数值分析中的应用,对于这些有解析解的问题,Mathematica 的优越性得到了展现;到均匀带电(非导体)薄圆盘和带电导体薄圆盘的电场空间分布问题,Mathematica 的魅力就充分展现了出来,相较于传统电动力学教材复杂的勒让德级数表示法,不仅代之以直观优美的立体彩色图,而且能够展示导体圆盘为等势面与电荷密度分布函数的微妙关系.

第 2 章讨论多个重要磁场的空间分布,分别是载流圆线圈的磁场、亥姆霍兹线圈的磁场、有限长螺线管的磁场、有限长密绕螺线管的自感、充电圆平行板电容器极板电流和考虑边缘效应全电流的磁场等.这些都是传统教科书中无法深入讨论的重要问题.利用 Mathematica 强大的符号运算能力和杰出的数字绘图功能,对这些重要磁场进行数字化研究,具有积极的教学和学术意义.

第 3 章研究动力学微分方程组的数值解与运动轨迹,既有相对简单的抛体运动和橡皮筋摆,又有复杂的磁约束问题——电子在一对同向载流圆线圈的磁场中

往返运动, 这是数值积分和微分方程组数值解法有机结合的范例. 特别是, 对地球静止轨道卫星的数值模拟结果, 会让读者感到一些意外和惊喜.

第 4 章首先模拟电子圆孔衍射的动态过程, 接着讨论一维有限深双势阱和二维量子围栏的数值解、电子概率角分布和电子云的绘制, 这些讨论对于量子力学的基本概念和基本方法的教学都是有帮助的; 最后研究电磁场中氢原子高激发态能级分裂的全自动快速计算, 这是符号运算与方阵本征问题数值解法巧妙结合的范例.

在对以上物理问题进行研究的同时, 作者也力求通过各个实例向读者介绍物理问题数字化的基本方法、程序设计的基本思想以及 Mathematica 中一些重要命令的使用技巧. 书中给出各个问题的主要程序, 而对于类似的只需做一些修改就可以得到的程序, 则留给读者来完成. 有兴趣的读者可以先模仿已经给出的程序, 完成本书中未给出的程序(可以只完成感兴趣的部分), 或者做一做每章后面的习题; 积累足够的经验之后, 可以提出新的物理问题并独立进行数字化研究, 当然也可以对书中的实例进行改进或补充.

本书的编写和出版得到广东省高等学校专业综合改革试点项目的资助、广东第二师范学院校级教改项目经费资助、科学出版社的支持以及兄弟院校同行和朋友们的有益建议, 作者在此一并致以衷心感谢!

由于作者的学识所限, 书中难免会有不妥和疏漏之处, 欢迎读者批评指正.

江俊勤

2015 年 5 月 26 日于广州

目 录

前言

第 1 章 电场	1
1.1 点电荷系统电势和电场强度的空间分布	1
1.1.1 一对点电荷	1
1.1.2 点电荷与接地导体球	9
1.2 带电圆线圈电势和电场强度的空间分布	14
1.2.1 叠加原理-积分法	14
1.2.2 解拉普拉斯方程、勒让德多项式展开法	24
1.3 两个不同电势半球面产生的电场	33
1.4 带电薄圆盘(圆环片)和充-放电圆平行板电容器的电场	41
1.4.1 均匀带电薄圆盘和薄圆环片	42
1.4.2 带电导体薄圆盘	49
1.4.3 充-放电圆平行板电容器	54
1.5 用叠加原理直接计算导体球感应电荷的电场	59
1.6 带电旋转椭球的电势和电场强度	63
1.6.1 均匀带电椭球	63
1.6.2 带电导体椭球	66
练习一	68
参考文献	69
第 2 章 磁场	70
2.1 几个简单而重要的磁场	70
2.1.1 单个载流圆线圈磁场的空间分布	70
2.1.2 一对同向载流圆线圈的磁场	74
2.1.3 一对反向载流圆线圈——磁阱	81
2.1.4 三相交流电导线外的磁场	83
2.2 有限长螺线管磁场的空间分布	98
2.2.1 有限长密绕圆柱形螺线管	99
2.2.2 有限长疏绕圆柱形螺线管	104
2.3 有限长密绕螺线管的自感系数	110
2.3.1 圆柱形螺线管	111

2.3.2 圆台形螺旋管	116
2.4 充-放电圆平行板电容器的磁场	118
2.4.1 极板电流磁场的积分表达式	120
2.4.2 极板电流磁场的数值结果	122
2.4.3 忽略边缘效应的全电流磁场与位移电流磁场	125
2.4.4 考虑边缘效应的全电流磁场与位移电流磁场	128
练习二	131
参考文献	131
第3章 动力学微分方程的数值解与运动轨迹	132
3.1 弹道轨迹与弧线足球	132
3.1.1 空气阻力与弹道轨迹	132
3.1.2 最佳初射角与射击固定目标	137
3.1.3 足球的旋转与弧线球	141
3.2 弹性力作用下的质点(组)	145
3.2.1 忽略空气阻力的弹簧摆与橡皮筋摆	145
3.2.2 有空气阻力的弹簧摆与橡皮筋摆	148
3.2.3 弹簧或橡皮筋连接的多体系统	150
3.3 高速带电粒子在正交均匀电磁场中的运动	158
3.3.1 运动微分方程的推导	158
3.3.2 微分方程的数值解与运动轨迹	159
3.3.3 相图与周期	160
3.4 电子在一对同向载流圆线圈磁场中的运动、磁镜	169
3.4.1 空间磁场表达式与运动微分方程	171
3.4.2 运动微分方程的数值解与电子运动轨迹	172
3.4.3 速度与相图	179
3.5 万有引力与人造地球卫星	184
3.5.1 运动微分方程	185
3.5.2 周期、近(远)地距离、运动轨迹	187
3.5.3 偏离平方反比引力产生的影响——进动	192
3.5.4 地球自转——离心力和科里奥利力的作用	196
3.5.5 地球静止轨道卫星——漂移、调整和同步	209
练习三	230
参考文献	231
第4章 量子力学	232
4.1 波粒二象性的模拟	232

4.1.1 电子单缝衍射	232
4.1.2 电子圆孔衍射	235
4.2 Schrödinger 方程的解、束缚定态	236
4.2.1 一维有限深势阱	237
4.2.2 量子围栏	255
4.3 氢原子本征态的概率角分布和电子云	271
4.3.1 氢原子本征态的电子概率角分布	271
4.3.2 氢原子本征态的电子云	276
4.4 氢原子叠加态的概率分布	279
4.4.1 叠加态的电子概率角分布	279
4.4.2 叠加态的电子云	282
4.5 电场中的氢原子	286
4.5.1 均匀电场中的氢原子	287
4.5.2 几种能量的数量级比较	295
4.6 同向均匀电场和磁场中的氢原子、偶然简并	297
4.7 较强磁场中的氢原子	303
练习四	310
参考文献	310
附录 A Mathematica 的若干重要命令和功能	311
A.1 表达式的展开与化简	311
A.2 循环命令	314
A.3 数值积分	314
A.4 椭圆积分	318
A.5 微分方程	320
A.5.1 常微分方程的解析解	320
A.5.2 常微分方程的数值解	324
A.6 方阵的本征值和本征向量	327
附录 B 新旧版本的比较	331
B.1 字体设置	331
B.2 等值线、矢量图和密度图	332
B.3 定积分	334
B.3.1 带电圆环电场的积分计算	335
B.3.2 导体球-点电荷系统中球面感应电荷激发电场的积分计算	336
B.3.3 载流圆形线圈磁场的积分计算	338
B.3.4 有限长密绕螺线管的自感系数的积分计算	339

B.3.5	圆平行板电容器极板电流磁场中的积分计算	339
B.3.6	数值积分	340
B.4	动画制作	340
B.4.1	用 Animate 命令制作三相交流电激发磁场的动画	341
B.4.2	用 Manipulate 命令制作极地轨道卫星轨迹的动画	342
B.4.3	用 AppendTo 和 Export 命令制作电子单缝衍射的动画文件	344
B.4.4	用 SphericalPlot3D 和 Manipulate 命令制作电子概率角分布的动画片	344
B.5	运行速度	347

彩图

第 1 章 电 场

电场是物理学的重要内容之一,但许多重要问题由于无法做解析计算而不能在理论物理学中讨论,数值计算是研究复杂电场的重要手段.反过来,电场是数字化物理学试验的好案例,因此本书选择从电场的数值计算开始.本书所说的电场分布,包括电势的空间分布和电场强度(大小和方向)的空间分布.我们遵循从简单到复杂的原则,逐步展示 Mathematica 在电场数字化过程中的出色表现.

1.1 点电荷系统电势和电场强度的空间分布

1.1.1 一对点电荷

考虑一对等量同号(+ q)的点电荷,分别放在点 $(-a, 0, 0)$ 和 $(a, 0, 0)$ 上.

由于电场分布具有轴对称性,所以只需研究 $z=0$ 平面上任一点 $(x, y, 0)$ 的电场分布,它代表任何过 x 轴之平面上的电场分布情况.取 $a=1$ 和 $q/(4\pi\epsilon_0)=1$,实际上是长度单位取 a ,而电场强度单位取 $q/(4\pi\epsilon_0 a^2)$,相应的电势单位取 $q/(4\pi\epsilon_0 a)$.为了简洁和美观,本章在绘制图形时省去 U 和 E 的单位,后面的带电圆环、圆盘和椭球等也都如此处理,不再说明.

对于 y 轴上的点 $(0, y, 0)$,由叠加原理容易求得电场强度(只有 y 分量)

$$E = E_y = \frac{2y}{(1+y^2)^{3/2}} \quad (1.1)$$

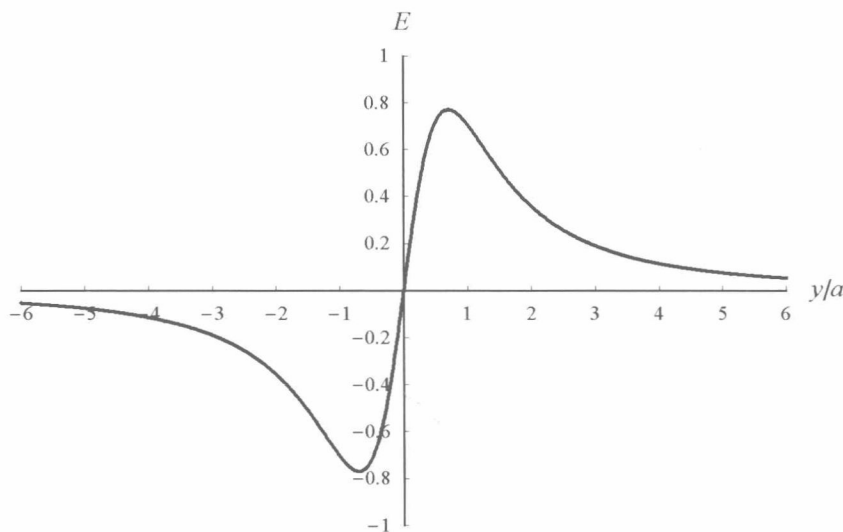
显然,在 y 等于0和趋于无穷大时,电场强度都为0,因此在 y 轴上电场强度必存在着极值点. E 对 y 的一阶和二阶导数为

$$\frac{dE}{dy} = \frac{2-4y^2}{(1+y^2)^{5/2}}, \quad \frac{d^2E}{dy^2} = \frac{6y(-3+2y^2)}{(1+y^2)^{7/2}}$$

当 $y=1/\sqrt{2}$ 时,一阶导数为0且二阶导数小于0,为唯一的极大值点;

当 $y=-1/\sqrt{2}$ 时,一阶导数为0且二阶导数大于0,为唯一的极小值点.

电场随 y 的变化规律,最直观的表达方式是吧结果绘制成图,而这正是 Mathematica 的强项之一,使用绘制平面曲线图的命令 Plot[函数, {自变量, 上限, 下限}, 其他选项],就可直接画出电场与 y 的关系曲线,如图 1.1.1 所示.

图 1.1.1 一对等量同号点电荷的电场强度在 y 轴上的分布

这条曲线形象且准确地描述了 y 轴上电场强度的变化规律. 如果不局限在 y 轴上, 则自变量就不止一个了, 需要绘制立体图.

下面讨论 $z=0$ 平面上任一点 $(x, y, 0)$ 电势的分布(从现在起, 省去 $z=0$). 电势是标量, 两个点电荷的电势直接相加即可得到总电势

$$U(x, y) = \frac{1}{\sqrt{(x+1)^2 + y^2}} + \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2 + y^2}} \quad (1.2)$$

利用画立体图的命令 `Plot3D[ ]` 及立体图转换为等高线图的命令 `Show[ContourGraphic[ ]]`, 编写简单的程序, 如程序 1.1 所示. 图 1.1.2 和图 1.1.3 分别形象地给出了电势 $U(x, y)$ 的分布图及其等值线图(等势线图).

【程序 1.1】

```
g1 = Plot3D[  $\frac{1}{\sqrt{(x+1)^2 + y^2}} + \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2 + y^2}}$ ,
  {x, -2, 2}, {y, -2, 2}, PlotPoints → 50,
  PlotRange → {0, 6}, ViewPoint → {-2, -2.2, 1},
  AspectRatio → 1,
  Ticks → {Range[-2, 2, 1], Range[-2, 2, 1],
    Range[0, 6, 1]}, AxesStyle → Thickness[0.005],
  AxesLabel → {"x/a", "y/a", "U"},
  TextStyle → {FontFamily → "Times", FontSize → 16}]
g2 = Show[ContourGraphics[g1], Contours → 55,
  FrameLabel → {"x/a", "y/a"}];
```

对程序 1.1 的注释: $\{x, -2, 2\}$ 规定自变量 x 的取值范围为 $[-2, 2]$, $\{y, -2, 2\}$ 规

定自变量 y 的取值范围为 $[-2, 2]$; $\text{PlotPoints} \rightarrow 50$ 设定 x 和 y 方向各取样 50 个点, 默认(缺省)时为 10 个点; $\text{PlotRange} \rightarrow \{0, 6\}$ 设定 U 的画图范围为 $[0, 6]$; $\text{ViewPoint} \rightarrow \{-2, -2.2, 1\}$ 设定观测点为 $(-2, -2.2, 1)$, 默认时为 $(1.3, -2.4, 2)$, 一般来说, 默认观测点就可绘制出美观的立体图; $\text{AspectRatio} \rightarrow 1$ 设定图形宽高比为 1; $\text{Ticks} \rightarrow \{ \}$ 中三组数分别用来设定 x, y, U 轴的显示范围和刻度间隔; $\text{AxesStyle} \rightarrow \text{Thickness}[]$ 的作用是设定坐标轴线条的粗细; $\text{AxesLabel} \rightarrow \{ \}$ 的作用是标出坐标轴名称(坐标轴标签); $\text{TextStyle} \rightarrow \{ \}$ 的作用是选择坐标刻度数的字体风格和大小(注: 对于较新的版本, 实现这个功能的命令可能已经改为 $\text{BaseStyle} \rightarrow \{ \}$; 其他一些命令, 也可能会因版本不同而不同, 对于这些问题见附录 B); $\text{Contours} \rightarrow 55$ 是设定等势线数目为 55 条, 默认时为 10 条; $\text{FrameLabel} \rightarrow \{ \}$ 的作用是标出等势线图形外框架(即坐标轴)的名称。

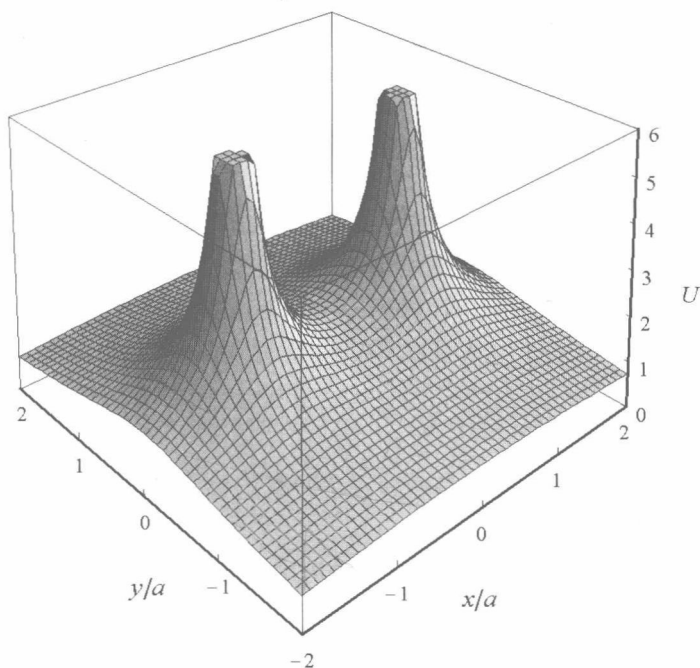


图 1.1.2 一对等量同号点电荷的电势的空间分布

对图 1.1.2 的一点说明: 当坐标点趋近点电荷时, 电势趋于无穷大, 但图形只能画出有限的值, Mathematica 系统会在所设定的范围内自动截断, 形成整齐的顶部, 这是由于采用点电荷模型造成的, 不是 Mathematica 有缺陷. 在后面计算点电荷的电场强度、线电流的磁场等问题中还会出现类似的情况。

下面研究电场强度的分布。

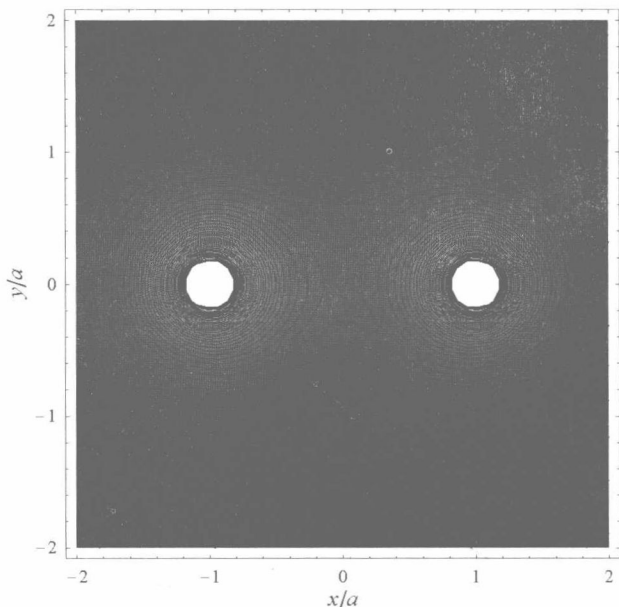


图 1.1.3 一对等量同号点电荷的等势线

电场强度是矢量, 如果直接用库仑定律和叠加原理来计算, 会比较繁琐(更复杂的情况则可能难以进行). 利用电场与电势的关系, 计算会方便得多, 由

$$\mathbf{E} = -\nabla U(x, y)$$

得

$$E_x = -\frac{\partial}{\partial x}U(x, y), \quad E_y = -\frac{\partial}{\partial y}U(x, y), \quad E = \sqrt{E_x^2 + E_y^2} \quad (1.3)$$

值得说明的是, 计算电势偏导数这样的符号运算, Mathematica 很容易做到. 怎样有效地描述电场强度?

传统的电磁学教科书首选电场线(或称为电力线)来描述电场. 那么, 什么是电场线? 它真的能有效描述电场吗?

电场线是为了直观而人为虚设的有向曲线族, 曲线上每一点的切线方向与该点电场强度方向一致. 根据电场的性质可确定电场线以下若干性质:

(1) 在静电场中, 电场线不闭合, 起于正电荷(或无穷远), 止于负电荷(或无穷远);

(2) 电场线的疏密程度代表电场强度的大小;

(3) 在没有电荷的空间里, 电场线不相交也不中断;

(4) 电场线与等势面正交.

然而, 电场线对电场的描述, 没有那么有效!

首先, 由于空间不同点处的电场强度往往相差太大, 电场线的疏密程度难以代表电场强度的大小, 要准确描述电场强度的大小, 必须计算(或画图表示)出电场强度大小 $E = \sqrt{E_x^2 + E_y^2}$ 的空间分布.

其次, 电场线是人为虚设的辅助手段, 却赋予了这么多性质, 因而在一些特殊而重要的区域内, 这一手段会显得无能为力、顾此失彼. 以本节所讨论的这对带正电的点电荷的电场为例, 坐标原点附近的电场和 y 轴上的电场都很重要, 但是在绝大多数教科书里都刻意不画出这些地方的电场线, 即“留着一片空白”(画还是不画? 这个问题曾经有过广泛的讨论, 最后还是多数人支持“留着一片空白”), 因为一旦画出了坐标原点附近的电场线或 y 轴上的电场线, 那么关于电场线性质的前三条就难以自圆其说了!

既然单独依靠电场线无法有效描写电场强度, 必须联合电场强度大小 $E = \sqrt{E_x^2 + E_y^2}$ 的计算, 那么, 本书就不采用电场线这一虚设的工具, 而是选用 Mathematica 系统内设的“绘制矢量场”的功能取代之, 其命令是

`PlotVectorField[{Ex, Ey}, {x, xmin, xmax}, {y, ymin, ymax}, 选项]`

`PlotVectorField` 的功能是, 在指定的范围内, 按“选项”规定的点数(即疏密度), 均匀地画出这些点的矢量(不是厚此薄彼, 也不刻意避开某些点), 每个箭头的方向就是该点(是箭头的起点, 不是箭头的末端点)的矢量场方向.

电场强度大小的分布加上矢量场(方向的分布), 就实现了电场的完整描述. 矢量场本来就应该这样描述, 第2章的磁场研究也同样如此.

根据式(1.2)和式(1.3), 可计算出 E_x 和 E_y 及 E , 分别为

$$E_x = \frac{x+1}{[(x+1)^2 + y^2]^{3/2}} + \frac{x-1}{[(x-1)^2 + y^2]^{3/2}}$$

$$E_y = \frac{y}{[(x+1)^2 + y^2]^{3/2}} + \frac{y}{[(x-1)^2 + y^2]^{3/2}}$$

$$E = \sqrt{E_x^2 + E_y^2}$$

当然, E_x , E_y 和 E 的计算可以交给 Mathematica 完成, 直接写入程序就可以绘制电场强度大小的分布图和电场强度方向的分布图(即矢量图).

使用 `PlotVectorField[]` 命令之前, 必须先加载绘图函数库:

Graphics`PlotField`

为了避免遗漏, 可以一开始就加载它, 如程序 1.2 所示.

【程序 1.2】

```
<< Graphics`PlotField`
U =  $\frac{1}{\sqrt{(x+1)^2 + y^2}} + \frac{1}{\sqrt{(x-1)^2 + y^2}}$ ;
Ex = -D[U, x]
```

```

Ey = -D[U, y]
f1 = Plot3D[Sqrt[Ex^2 + Ey^2], {x, -3, 3}, {y, -3, 3},
  PlotPoints -> 50, PlotRange -> {0, 10},
  AspectRatio -> 1,
  Ticks -> {Range[-3, 3, 1], Range[-3, 3, 1],
    Range[0, 10, 1]}, AxesStyle -> Thickness[0.005],
  AxesLabel -> {"x/a", "y/a", "E"},
  TextStyle -> {FontFamily -> "", FontSize -> 16}];
f2 = PlotVectorField[{Ex, Ey}, {x, -2, 2},
  {y, -2, 2}, PlotPoints -> {23, 21}, Frame -> True,
  ScaleFactor -> 0.12, ScaleFunction -> (1 &),
  HeadLength -> 0.015,
  TextStyle -> {FontFamily -> "", FontSize -> 16},
  FrameLabel -> {"x/a", "y/a"}];

```

对程序 1.2 中画矢量图选项的注释: $\text{PlotPoints} \rightarrow \{23, 21\}$ 的作用是设定 x 方向 23 个箭头而 y 方向 21 个箭头, 默认时 15 个; $\text{ScaleFactor} \rightarrow 0.12$ 的作用是定义最长箭头的长度, 数值越大就越长; $\text{ScaleFunction} \rightarrow (1 \&)$ 的作用是设每个箭头长度都相等, HeadLength 的作用是设置箭头的大小。

程序 1.2 的运行结果是先输出 E_x 和 E_y 的表达式(略), 如果不输出 E_x 和 E_y 的表达式, 可以在计算式的末尾加上分号“;”, 就像电势的计算式那样; 接着输出电场强度大小的分布图, 如图 1.1.4 所示; 最后输出电场强度方向的分布图(即矢量图), 如图 1.1.5 所示。

图 1.1.4 明确显示: 当观测点靠近点电荷时电场强度迅速增大(这是用电场线的疏密程度难以表达的), 坐标原点处电场强度为零, 形成一个“电阱”。

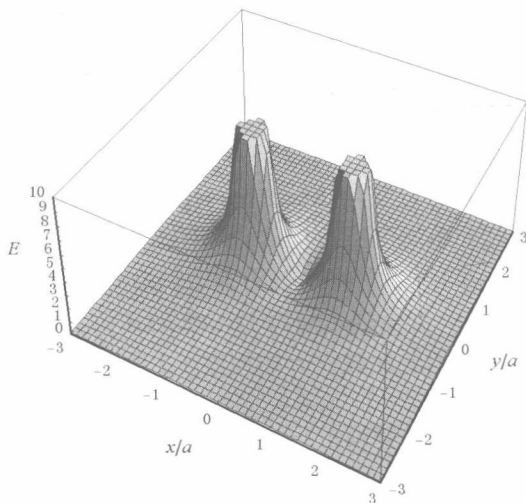


图 1.1.4 一对等量同号点电荷的电场强度大小的空间分布

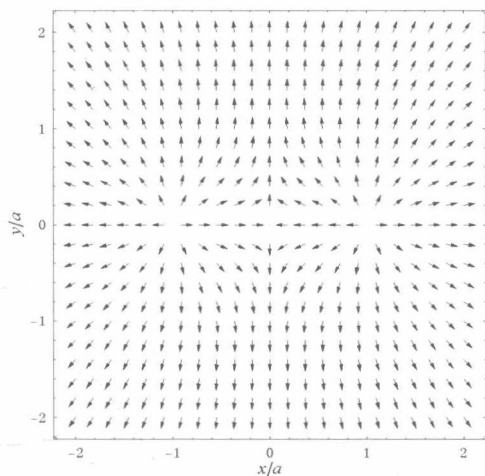


图 1.1.5 一对等量同号点电荷的电场强度方向的分布

图 1.1.5 清楚显示:坐标原点周围电场强度方向相反. 在传统物理学教科书中, 对于坐标原点周围和 y 轴上的电场线都是刻意避而不画的.

用 Show 命令把等势线图和电场强度方向分布图合并, 结果如图 1.1.6 所示. 这样, 不但用一幅图取代了两幅图, 还可以显示等势线和电场强度方向两者之间的关系. 正如所预料的, 图 1.1.6 中每个箭头都与所在点(所在点是箭头的起点, 不是终点! 下同)处的等势线相互正交!

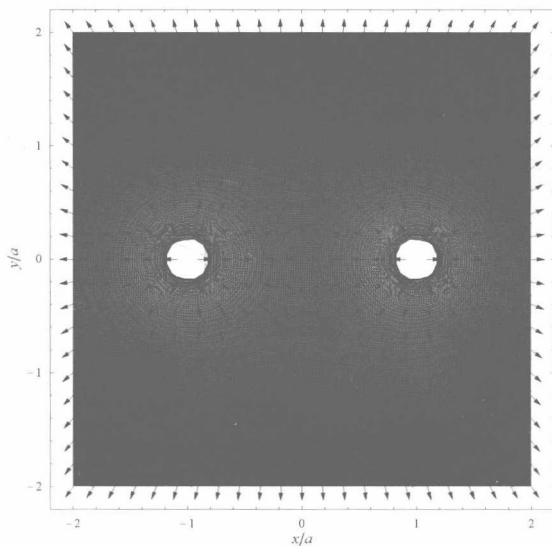


图 1.1.6 一对等量同号点电荷的等势线与电场强度方向

对于一对等量异号的点电荷, 仿照一对等量同号点电荷的做法 (只需把电势表达式 U 的两项之和改为两项之差), 可得到相应的电势、电场强度大小和电场强度方向空间分布图, 分别如图 1.1.7~图 1.1.9 所示。

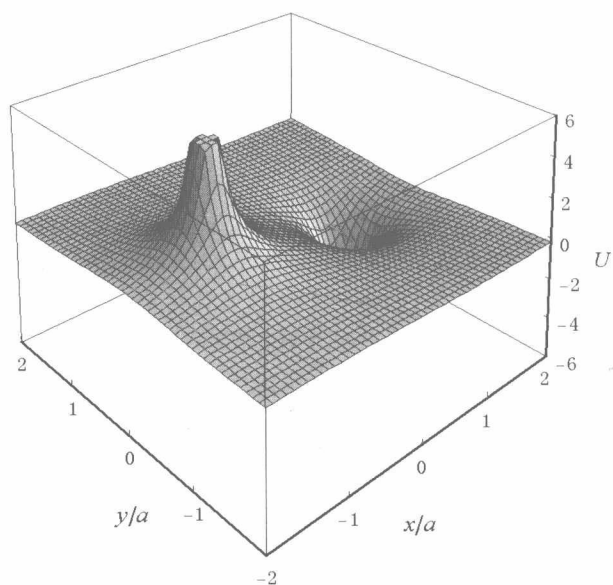


图 1.1.7 一对等量异号点电荷的电势的空间分布

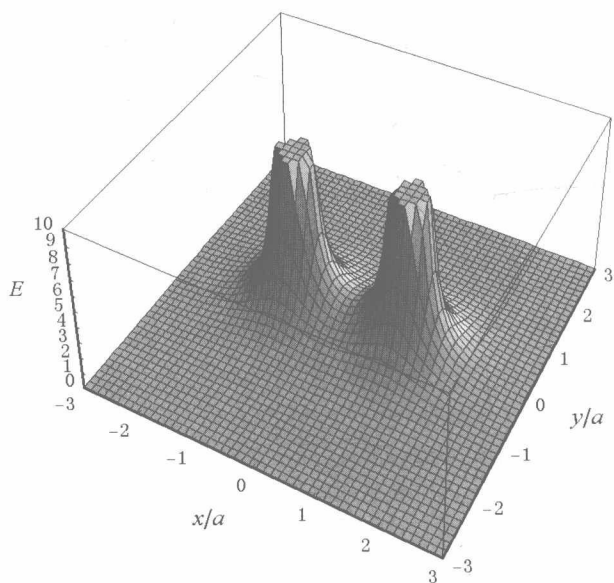


图 1.1.8 一对等量异号点电荷的电场强度大小的空间分布