

## КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ ЭЛЕКТРОННОЙ ПЛОТНОСТИ АТОМА

Лазарев А. В., Гребёнкин М. Ф., Лобова Л. П.<sup>1</sup>

Международный университет природы, общества и человека «Дубна», филиал  
«Дмитров» Россия, 141800, Московская область, г. Дмитров, ул. Махалина, 15

МОУ Дмитровская средняя общеобразовательная школа №1 имени В. И. Кузнецова  
Россия, 141800, Московская область, г. Дмитров, ул. Школьная, д.11  
Тел.: (495)993-97-92, факс (495)993-97-92 E-mail: ladalobova@gmail.com

*Высокие технологии (Hi-Tech)*, в частности, *нанотехнологии*, во многом основаны на представлениях *квантовой механики*. Для работы в этих областях нужны соответствующие специалисты. Между тем пока нельзя утверждать, что вузовское образование вполне справляется с подготовкой таких специалистов. Ясно также, что основы такого образования должны закладываться ещё в школе [1]. Квантовая механика даёт только информацию о *вероятности* найти электрон в той или иной области в окрестности ядра. Эта вероятность даётся квадратом модуля волновой функции  $\psi$ , которую можно найти, решая уравнение Шредингера. Пространственный вид квадрата модуля волновой функции определяет характер межатомного взаимодействия и даёт важную информацию о возможных химических свойствах атома.

Помочь создать наглядный образ квадрата модуля волновой функции атома в процессе обучения школьников и студентов могла бы компьютерная трёхмерная модель. Нельзя сказать, чтобы в образовательном процессе таких компьютерных моделей до сих пор не было, см., например, CD «Открытая физика» [2]. Проблема заключается в том, чтобы компьютерная модель была адекватной, наглядной и *простой* для понимания и управления с тем, чтобы её могли использовать школьные учителя (в первую очередь) и преподаватели вузов в учебном процессе. Исходными данными в данной работе являются приведённые в учебниках по квантовой механике выражения для волновой функции  $\psi$  атома водорода и других простейших атомных объектов и квадрата её модуля  $|\psi|^2$ . Компьютерное моделирование осуществлялось на языке Delphi 7 с использованием открытой графической библиотеки Open GL. Трёхмерная модель позволяла рассматривать и анализировать плотность электронного облака для атома водорода при различных значениях квантовых чисел  $n$ ,  $l$  и  $m_z$ . Доступны профили сечения плотности электронного облака плоскостью, а также пошаговое построение этой плотности. Наглядность и простота модели вполне удовлетворительны. Компьютерная модель с успехом апробирована на занятиях по физике в школе и при изучении соответствующего раздела квантовой механики в университете.

### Литература.

1. Гребёнкин М.Ф., Лобова Л.П. Нанотехнологии и школьное образование // *Прикладная информатика*, №2(14), 2008, стр.17-23.
2. [www.phisicon.ru](http://www.phisicon.ru)