ОПТИМАЛЬНЫЕ МЕТОДЫ РАСЧЕТА ИНТЕГРАЛОВ ПЕРЕКРЫВАНИЯ В СИСТЕМЕ «MAPLE»

А.В. Шадурский
Научный руководитель – д.ф.-м.н., профессор ***А.А. Корниенко***
Витебский государственный университет им. П.Машерова

Применение системы компьютерной алгебры «MAPLE» для компьютерного моделирования физических свойств микросистем и расчета физических свойств удобно по нескольким причинам:

а) вычисления можно выполнять в аналитическом виде,

б) простой язык программирования,

в) удобная форма представления формул.

Эти преимущества системы «MAPLE» позволяют быстро и с минимальным количеством ошибок программировать многие важные физические задачи. Именно по этой причине система «MAPLE» пользуется популярностью в студенческой и научной среде.

Однако, расчеты многоатомных и многоэлектронных систем затруднены, так как в аналитическом виде эти задачи не имеют решения, а расчеты в численном виде в системе «MAPLE» выполняются на несколько порядков медленнее, чем, например, на языке «FORTRAN». В связи с этим в данной работе в системе «MAPLE» выполнен детальный анализ применимости различных методов численного интегрирования для расчета простейших двухцентровых интегралов – интегралов перекрывания.

При моделировании многоатомной системы в качестве базисных удобно использовать функции изолированных атомов или ионов. Волновые функции многоэлектронных атомов получают при решении уравнений Хартри–Фока и записывают в виде орбиталей Слэтеровского типа

$$\Phi_{nlm}=\left[\frac{(2\varsigma)^{2n_S+1}}{(2n_S)!}\right]^{1/2} r^{n_S-1}\exp(-\varsigma r)Y_{lm}(\theta,\phi)\,.$$

Расчеты двухцентровых интегралов на орбиталях Слэтеровского типа долгое время были уникальными из-за большого объема вычислительного труда. Для сокращения вычислительных затрат часто орбитали Слэтеровского типа аппроксимировали орбиталями Гауссовского типа

$$\chi_{n_Glm}=\left(\frac{(2/\pi)^{1/2}\,2^{2n_G+1}}{(2n_G-1)!!}\right)^{1/2} r^{n_G-1}Y(\theta,\phi)\sum_{k=1}^{N}d_k\alpha_k^{(2n_G+1)/4}\exp(-\alpha_k r^2)\,,$$

на которых расчетные формулы были менее громоздкими.

В данной работе в системе «MAPLE» составлены программы для расчета интегралов перекрывания на орбиталях Слэтеровского типа, программы аппроксимации орбиталей Слэтеровского типа небольшим количеством орбиталей Гауссовского типа ($N=6\div10$), программы расчета интегралов перекрывания на орбиталях Гауссовского типа. Сделан вывод о наиболее рациональном методе расчета.

ФУНКЦИИ ГРИНА И НЕСТАНДАРТНЫЕ ЗАДАЧИ О РАССЕЯНИИ

К.П. Шиляева
Научный руководитель – к.ф.-м. н., доцент ***В.Н. Капшай***
Гомельский государственный университет им. Ф. Скорины

Стационарное дифференциальное уравнение Шредингера в случае положительных энергий можно свести к интегральному, в котором ядром будет служить функция, называемая функцией Грина (ФГ). Явный вид ФГ находится методом Фурье-преобразований. Вычисление с помощью методов ТФКП, в частности применение леммы Жордана, дает четыре разные функции Грина, имеющие вид: $G_{1,2}(x)=\mp i\exp(\pm ik|x|)/2k$, $G_{3,4}(x)=\pm i\theta(\mp x)(\exp(ikx)-\exp(-ikx))/2k$. Однако обычно в таких задачах рассматривают ФГ, соответствующую на бесконечности расходящейся волне, т. е $G_1(x)$ [1]. Целью данной работы является формулировка задач, которым соответствуют все эти функции и определение связей между этими задачами.

Интегральная задача, которой соответствует некоторая функция Грина, имеет вид

$$\Psi(x) = \varphi(x) + \int G(x-y)V(y)\Psi(y)dy, \tag{1}$$

где внеинтегральное слагаемое ϕ может быть выбрано в следующих формах: $\phi_{1,2}(x)=\exp(\pm ikx)$ и $\phi_{3,4}(x)=\exp(ikx)\pm\exp(-ikx)$.

Асимптотическое поведение решения уравнения (1) при $G(x)=G_1(x)$ и $\phi(x)=\phi_1(x)$ соответствует физическому случаю прохождения частицы через потенциальный барьер, когда волна единичной амплитуды падает слева. Такую задачу будем называть стандартной левой задачей. ФГ $G_2(x)$ с тем же $\phi_1(x)$ можно сопоставить задачу о прохождении двух частиц, падающих с противоположных сторон на потенциальный барьер, причем рассеянная волна (единичной амплитуды) «уходит» только вправо. Такую задачу будем называть нестандартной правой задачей. Однако необходимо также рассмотреть и случаи, когда $\phi(x)=\phi_2(x)$ и $\phi(x)=\phi_{3,4}(x)$. В этих случаях получаем еще по три разные задачи для каждой функции Грина. Для ФГ $G_1(x)$ и $\phi_2(x)$ получим случай прохождения частицы через потенциальный барьер, когда она падает справа. Такую задачу будем называть стандартной правой задачей. В случае $\phi(x)=\phi_3(x)$ получаем симметричную задачу, когда на потенциал падают волны с единичными коэффициентами, а расходятся волны с одинаковыми [2]. Если внеинтегральное слагаемое представлено разностью экспонент ($\phi(x)=\phi_4(x)$) то получим антисимметричные задачи для обеих ФГ. Функции Грина $G_2(x)$ и $\phi_2(x)$ соответствует прохождение частиц, падающих с противоположных сторон, через потенциальный барьер, причем волна единичной амплитуды уходит влево. Такую задачу будем называть нестандартной левой задачей. Для $\phi(x)=\phi_3(x)$ получаем симметричную задачу, когда в обе стороны расходятся волны с единичными коэффициентами, а падают волны с одинаковыми. Рассмотрим еще две другие функции Грина - $G_3(x)$ и $G_4(x)$. Для $G_3(x)$ и $\phi_1(x)$ имеем задачу о прохождении частицы через потенциальный барьер, когда волна с амплитудой, не равной единице падает слева, а вправо уходит единичная волна. Когда $\phi(x)=\phi_2(x)$ получаем задачу о прохождении двух частиц, падающих с противоположных сторон, когда слева падает волна с амплитудой, не равной единице. Случай $G_4(x)$ и $\phi_2(x)$ соответствует задаче о прохождении частицы через потенциальный барьер, нееединичная волна падает справа, а случай $\phi_1(x)$ – прохождению двух частиц через барьер, когда справа падает нееединичная волна. В случае $G_{3,4}(x)$ и $\phi_{3,4}(x)$ по обе стороны барьера присутствуют волны, распространяющиеся и в положительном и в отрицательном направлении, однако волновые функции не являются ни симметричными, ни антисимметричными.

Между всеми этими задачами существуют связи, которые можно определить, проанализировав вид волновых функций. Очевидно, что при замене x на –x левая стандартная задача переходит в правую (с V(-x)) и наоборот. Значит можно установить связь между коэффициентами прохождения и отражения для этих задач. Точно такие же соотношения имеют место и для нестандартных задач. Стандартные задачи переходят в нестандартные (и наоборот) при действии на волновые функции оператора комплексного сопряжения. То же самое можно сказать и про коэффициенты прохождения и отражения для этих задач. Для задач, соответствующих функциям Грина $G_{3,4}(x)$ получаем похожую связь. Также можно получить связь между задачами, соответствующими функциям $G_{3,4}(x)$ и задачам, соответствующими функциям $G_{1,2}(x)$. Все соотношения, полученные в общем виде, проверены нами в частных случаях для некоторых потенциалов (δ-потенциал, двойной δ-потенциал, прямоугольный и потенциал вида $u/ch^2(ax)$).

Литература

1. Тейлор Дж. Теория рассеяния.- М.: Мир, 1975.
2. Липкин Г. Квантовая механика. - М.: Мир, 1977.