

анизотропного случая предпочтительным является базис гауссиан. Проведены расчеты зависимости энергетических уровней от расстояния до перегородки при различных ориентациях главных осей тензора эффективной массы.

Литература

1. Kane, B. *A silicon-based nuclear spin quantum computer* / B. Kane. // Nature. 1998. Vol. 393. P. 133.

АЛГОРИТМ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ КВАНТОВО-МЕХАНИЧЕСКИХ ЗАДАЧ ДЛЯ ОДНОМЕРНЫХ ПОТЕНЦИАЛЬНЫХ ЯМ ПРОИЗВОЛЬНОЙ ФОРМЫ

В. В. Малышиц, А. А. Сокольский, Л. Ф. Макаренко (Минск, Беларусь)

Для нахождения собственных значений энергии и собственных функций в большинстве задач квантовой механики существует необходимость решать стационарное уравнение Шредингера (УШ). При этом во многих случаях задачу удастся свести к одномерному УШ с тем или иным эффективным потенциалом [1]. В настоящем сообщении представлен алгоритм, позволяющий находить собственные значения и волновые функции для задач с потенциалом произвольной формы, имеющим один минимум (для одномерной потенциальной ямы).

Поиск собственных значений энергии и волновых функций в представляемом алгоритме проводится в два этапа:

- этап разбиения энергии на интервалы, содержащие по одному уровню в каждом;
- этап расчета собственных значений энергии с заданной точностью.

На обоих этапах решения для каждого рассматриваемого значения энергии E область значений независимой переменной x разбивается на три области (рис. 1): классически разрешенная область ($x_l < x < x_r$) и области слева ($x < x_l$) и справа ($x > x_r$) от нее. В качестве начальной точки для процесса решения УШ выбирается значение $x = x_l$, для которого задаются пробные значения функции $\psi(x_l)$ и ее первой производной $\psi'(x_l)$.

Интегрирование УШ начинается с точки $x = x_l$ в сторону убывания x при некоторых пробных значениях $E_k > U_{min}$ и $\psi'(x_l) > 0$. В течение этого процесса модуль $\psi(x)$ сначала убывает, а затем начинает возрастать до бесконечности. Изменяя начальное значение $\psi'(x_l)$, мы повторяем процесс, пока не будет найдено такое значение производной $\psi'(x_l)$, при котором $\lim_{x \rightarrow -\infty} \psi(x) = 0$.

Используя найденное значение $\psi'(x_l)$, программа начинает интегрировать УШ от точки $x = x_l$ в направлении возрастания x . В классически разрешенной области ($x_l < x < x_r$) решение имеет осциллирующий характер. Однако при продолжении процесса решения в области $x > x_r$ при произвольно взятом значении энергии E начнется быстрое возрастание модуля $\psi(x)$. В точке $x = x^*$, в которой такое возрастание началось, процесс расчета прерывается, а программа запоминает значение $Z(E_k) = \text{Sign}[\psi(x^*)]$ - знак $\psi(x)$ в точке $x = x^*$.

Затем все эти действия повторяются при $E_{k+1} = E_k + \delta E$, $\delta E > 0$ и далее выполняются итеративно. Если при некотором m значения $Z(E_{m+1})$ и $Z(E_m)$ становятся противоположными, программа отмечает, что собственное значение энергии E заключено внутри интервала $\{E_m, E_{m+1}\}$. Расчет продолжается, пока все уровни энергии не

будут локализованы.

На следующем этапе каждый из найденных интервалов энергии постепенно сужается путем их деления пополам вплоть до достижения требуемой точности.

Для повышения устойчивости и быстродействия работы программы в ней реализуются следующие методы:

- программа автоматически выбирает в качестве начального значения шага по энергии на первом этапе вычислений интервал порядка энергии нулевых колебаний;
- для гарантированного исключения возможности пропустить уровень энергии при быстром убывании расстояния между уровнями, программа подсчитывает количество узлов для каждой пробной волновой функции. Если число узлов волновой функции более чем на единицу превышает число узлов на предыдущем шаге, то программа возвращается к предыдущему значению энергии и, уменьшив шаг, продолжает расчет;
- значения $\psi'(x)$, найденные на этапе отделения уровней, затем используются как начальные при уточнении значений энергии;
- значения $\psi(x)$, найденные на этапе отделения уровней, затем используются как начальные при уточнении значений энергии;
- в конце расчета проводится нормировка полученных функций $\psi(x)$

$$\psi_{norm}(x) = \psi(x) / \sqrt{\int_{-\infty}^{+\infty} |\psi(x)|^2 dx}$$

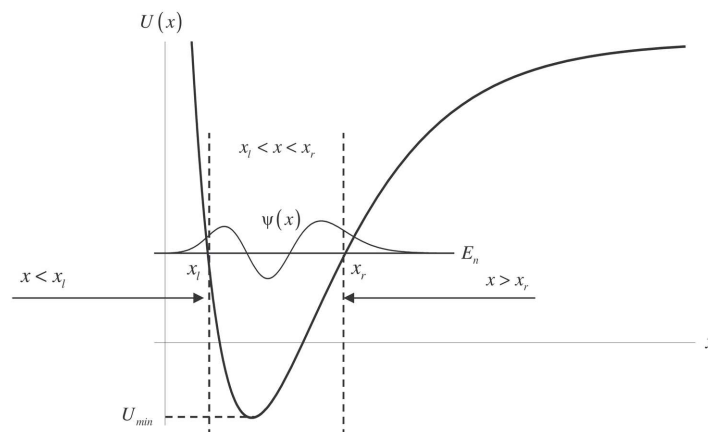


Рис. 1. Схематическое изображение потенциальной ямы и искомой волновой функции одного из стационарных состояний. Более подробные пояснения приведены в тексте

Тестирование программы, реализованной на основе представленного алгоритма, проводилось на точно решаемых квантовых задачах с симметричными (гармоническим,

Пешля-Теллера [2]) и асимметричными (Морса, Кратцера [3]) потенциалами. Тестирование показало преимущества данного алгоритма перед существующими программами [4] в отношении стабильности, надежности, точности и универсальности при сравнимой скорости работы.

Литература

1. F. Stern, S. D. Sarma. //Phys. Rev. B. 1984. Vol. 30, N 2. P. 840.
2. Ландау Л. Д., Лифшиц Е. М. *Квантовая механика: нерелятивистская теория*. М.: Наука. 1989.
3. Флюгге З. *Задачи по квантовой механике*. Т.1. М.: Мир. 1974.
4. [http://demonstrations.wolfram.com/Quantized Solutions Of The 1D Schrodinger Equation For A Harmonic Osc.](http://demonstrations.wolfram.com/QuantizedSolutionsOfThe1DSchrodingerEquationForAHarmonicOsc)

НАХОЖДЕНИЕ ПРИБЛИЖЕННЫХ АНАЛИТИЧЕСКИХ РЕШЕНИЙ ЛИНЕАРИЗОВАННОГО ПО СКОРОСТИ УРАВНЕНИЯ НАВЬЕ-СТОКСА НА ПРИМЕРЕ СТАЦИОНАРНОГО ОБТЕКАНИЯ НАГРЕТОЙ СФЕРЫ

Н. В. МАЛАЙ, А. В. ГЛУШАК (БЕЛГОРОД, РОССИЯ)

Уравнения Навье-Стокса — это система дифференциальных уравнений в частных производных, описывающая движение вязкой ньютоновской жидкости. Система состоит из уравнения движения и уравнения непрерывности. Уравнения Навье-Стокса являются одними из важнейших в гидро- и газовой динамике и применяются при описании многих природных явлений и технических задач [1]. Эти уравнения имеют и большой интерес с точки зрения математики. В частности, весьма важны доказательства существования глобального гладкого решения задачи Коши для трехмерных уравнений Навье-Стокса, нахождение общего аналитического решения системы Навье-Стокса для пространственного или плоского потока и т.д. До сих пор решения этих уравнений найдены лишь для некоторых частных случаях [2, 3]. При описании движения частиц в разнотемпературных каналах, при зондировании атмосферы лазерным излучением и т.д. средняя температура поверхности частиц может существенно отличаться от температуры окружающей среды вдали от них. Поэтому систему уравнений Навье-Стокса решают совместно с уравнениями тепло- и массопереноса. Это вызвано тем, что коэффициенты молекулярного переноса (вязкости, теплопроводности и диффузии) уже нельзя считать постоянными величинами. В результате мы получаем довольно сложную краевую задачу.

Проведенные исследования на примере стационарного обтекания неподвижной неравномерно нагретой сферы плоскопараллельным потоком газа показали, что линейризованное по скорости уравнение Навье-Стокса можно свести к однородному уравнению четвертого порядка. В нашем конкретном случае это уравнение имеет вид

$$y^4 \frac{d^4 G(y)}{dy^4} + y^3 (8 + \alpha_1 \ell(y)) \frac{d^3 G(y)}{dy^3} + y^2 (8 + \alpha_2 \ell(y) + \alpha_3 \ell^2(y)) \frac{d^2 G(y)}{dy^2} +$$

$$+ y (-8 + \alpha_4 \ell(y) + \alpha_5 \ell^2(y) + \alpha_6 \ell^3(y)) \frac{dG(y)}{dy} + (\alpha_7 \ell^2(y) + \alpha_8 \ell^3(y) + \alpha_6 \ell^4(y)) G(y) = 0,$$