моделирования наносистем типа фуллеренов, позволяющим с достаточной точностью и за относительно небольшое время проводить нужные вычисления.

Литература

1 Фуллерены и структура углерода / Елецкий А. В., Смирнов Б. М. / УФН. – 1995. – Т. 165, № 9. − С. 977–1009.

2 Дегтяренко, Н. Н. Описание программных пакетов для квантовых расчетов наносистем / Н. Н. Дегтяренко / М.: МИФИ, 2008. – 180 с.

3 Эндоэдральные структуры / Елецкий А. В. / УФН. – 2000. – Т. 165, № 2.

4 Ab initio investigation of the possibility of formation of endohedral complexes between H2 molecule and B-, N- and Si-doped C60 fullerenes / M. D. Ganji / Physica E, 2009 – V. 41. – P. 1406–1409.

УДК 539.192

Н. С. Потипко

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА С АНГАРМОНИЧЕСКИМИ ПОТЕНЦИАЛАМИ СПЕКТРАЛЬНЫМ МЕТОДОМ

Для решения уравнения Шредингера с ангармоническими потенциалами разработан универсальный блок в среде Mathcad, вычислены собственные значения и волновые функции для различных потенциалов.

Стационарное уравнение Шредингера [1,2] представляет собой дифференциальное уравнение в частных производных второго порядка со спектральным параметром

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2\psi(x)}{dx^2}+U(x)\psi(x)=E\psi(x). \tag{1}$$

При решении задачи о квантовом гармоническом осцилляторе в уравнении (1) переходят к безразмерным переменным

$$\xi^*=\sqrt{\frac{m\omega}{h}},\quad x=\frac{\xi}{\xi^*},\quad E^*=\frac{h\omega}{2},\quad \varepsilon=\frac{E}{E^*}\ , \tag{2}$$

в которых уравнение Шредингера принимает вид [2]

$$-\frac{d^2\psi}{d\xi^2}+U(\xi)\psi=\varepsilon\psi\ . \tag{3}$$

Наряду с гармоническим осциллятором, который играет важную роль в современной физике, в молекулярной физике широко используются и ангармонические потенциалы [3,4]. В отличие от потенциала гармонического осциллятора, для которого существует точное решение, для ангармонических потенциалов найти его в общем случае невозможно.

В работе [3] были рассмотрены следующие потенциалы:

$U_1(\xi) = 35\xi^2 - 12\xi^4 + \xi^6$, $U_2(\xi) = 4\xi^2 - 6\xi^4 + \xi^6$, $U_3(\xi) = 224\xi^2 - 30\xi^4 + \xi^6$. Численное решение находилось с помощью метода, основанного на дискретизации Нумерова и модифицированного метода Рунге-Кутта. Для каждого потенциала было вычислено 10 значений уровней энергии.

В данной работе реализуется численное решение уравнения Шредингера с ангармоническими потенциалами различного вида спектральным методом [5,6].

В спектральном методе волновая функция представляется в виде ряда Фурье:

$$\psi(x) = \sum_{i=1}^{2}\sum_{k=0}^{\infty} A_{k,i} g_{i,k}(x) \tag{4}$$

По базисным функциям на участке $-L \le x \le L$

$$\begin{cases} g_{1,k}(x) = \dfrac{1}{\sqrt{LR_k}}\sin\left(\dfrac{k\pi x}{L}\right) \\ g_{2,k}(x) = \dfrac{1}{\sqrt{LR_k}}\cos\left(\dfrac{k\pi x}{L}\right) \end{cases} \quad R_k = \begin{cases} 2, m = 0 \\ 1, m \ne 0 \end{cases}. \tag{5}$$

Важным свойством базисных функций является их полнота и ортогональность:

$$\int_{-L}^{L} g_{i,k}(x) g_{'i',k'}(x) dx = \delta_{kk'}\delta_{ii'} \tag{6}$$

Подставим разложение (4) в уравнение (3), используя N различных базисных функций:

$$\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \sum_{i=1}^{2}\sum_{m=0}^{N} A_{k,i} g_{i,k}(x) + \sum_{i=1}^{2}\sum_{m=0}^{N} A_{k,i} g_{i,k}(x) U(x) = \varepsilon \sum_{i=1}^{2}\sum_{m=0}^{N} A_{k,i} g_{i,k}(x) \ . \tag{7}$$

Умножая обе части (7) на $g_{'i',k'}(x)$ и интегрируя по всему пространству x, получим:

$$\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \sum_{i',m'} \int_{-L}^{L} A_{k,i} g_{i,k}(x) g_{i',m'}(x) + \sum_{i',m'} \int_{-L}^{L} A_{k,i} g_{i,k}(x) U(x) g_{i',m'}(x) = \varepsilon \sum_{i',m'} \int_{-L}^{L} A_{k,i} g_{i,k}(x) g_{i',m'}(x) \ . \tag{8}$$

Уравнение (9) принимает вид

$$\left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 A_{k,i}\delta_{kk'}\delta_{ii'} + \sum_{k',i'} A_{k',i'} \int_{-L}^{L} g_{i,k}(x) U(x) g_{i',k'}(x) dx = \varepsilon A_{k,i}\delta_{kk'}\delta_{ii'} \ . \tag{9}$$

Таким образом, приходим к стандартной задаче на собственные значения матрицы:

$$D_{k,k',i,i'} = \left(\frac{k\pi}{L}\right)^2 \delta_{kk'}\delta_{ii'} + \int_{-L}^{L} g_{i,k}(x) U(x) g_{i',k'}(x) dx \ . \tag{10}$$

Волновая функция $\psi(x)$ должна быть нормирована на 1

$$\int_{-L}^{L} |\psi(x)|^2 dx = 1. \tag{11}$$

Для реализации спектрального метода был создан универсальный программный блок в среде Mathcad. Блок представляет собой функцию, заголовок которой имеет вид: $Fun(a,b,c,d,\alpha,\beta,\gamma,\delta,L,N,nom)$, где $a,b,c,d,\alpha,\beta,\gamma,\delta$ – параметры потенциала вида

$$\mathrm{U}(a,b,c,d,\alpha,\beta,\gamma,\delta,x)=ax^{\alpha}+bx^{\beta}+cx^{\gamma}+dx^{\delta}. \tag{12}$$

Все интегралы в программном блоке брались с помощью встроенных ресурсов Mathcad.

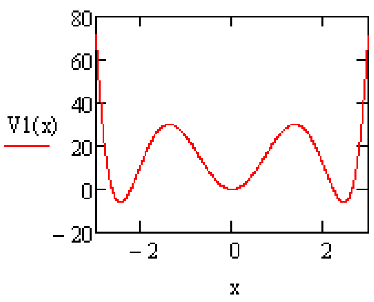
С использованием программного блока, было решено уравнение Шредингера с потенциалами ангармонического осциллятора $U_1(\xi)$, $U_2(\xi)$, $U_3(\xi)$, найдены уровни энергии и волновые функции. В отличие от [3], были вычислены уровни энергии для 30 первых состояний. Численные и графические результаты представлены в рисунке 1.

Первые 10 собственных значений сравнивались с результатами, представленными в работе [3]. Было установлено их совпадение в пределах машинной точности.

Таким образом, в работе был создан универсальный программный блок для решения уравнения Шредингера с ангармоническими потенциалами и показано, что программный блок работает корректно, а спектральный метод является эффективным инструментом для вычисления уровней энергии и волновых функций в случае запирающих потенциалов.

1. Потенциал вида

$$\mathrm{U}_1(\xi)=35\xi^2-12\xi^4+\xi^6$$

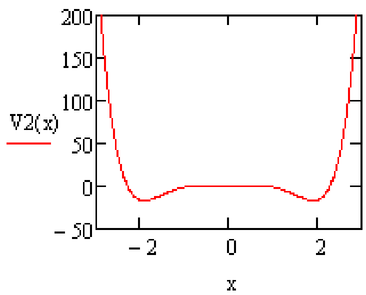


E =

	1
1	-9.001720238528309
2	-9.000000000000167
3	0.6393942628654421
4	1.9366292249261101
5	4.696413325085157
6	9.096931711180005
7	14.031494589168588
8	19.65150328517409
9	25.93970883046466
10	32.83102325075257
11	40.285826658690624
12	48.27419790119496
13	56.77060057433428
14	65.75305121161986
15	75.20236181371267
16	...

2. Потенциал вида

$$\mathrm{U}_2(\xi)=4\xi^2-6\xi^4+\xi^6$$

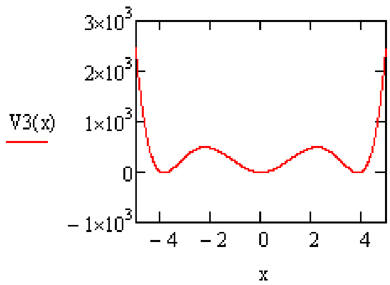


E =

	1
1	14.86514263986858
2	14.865142639869658
3	14.865142639869743
4	44.38885077972523
5	73.49328556772201
6	73.49328556772203
7	73.49328556772271
8	102.16564944128513
9	130.39193687243815
10	130.3919368724425
11	130.39193687245708
12	158.15673511452806
13	185.4429761878736
14	185.44297618799465
15	185.44297618806252
16	...

3. Потенциал вида

$$\mathrm{U}_3(\xi)=224\xi^2-30\xi^4+\xi^6$$



E =

	1
1	5.630491950244016
2	5.637988914104998
3	5.645519149838026
4	16.253439516210236
5	24.48968368797909
6	25.2000355605196
7	26.198795758890867
8	32.55552403292738
9	37.1941557815723
10	41.39905431803489
11	46.699598705989
12	52.747268453406356
13	59.20848141506131
14	66.11936731773764
15	73.48364745714474
16	...

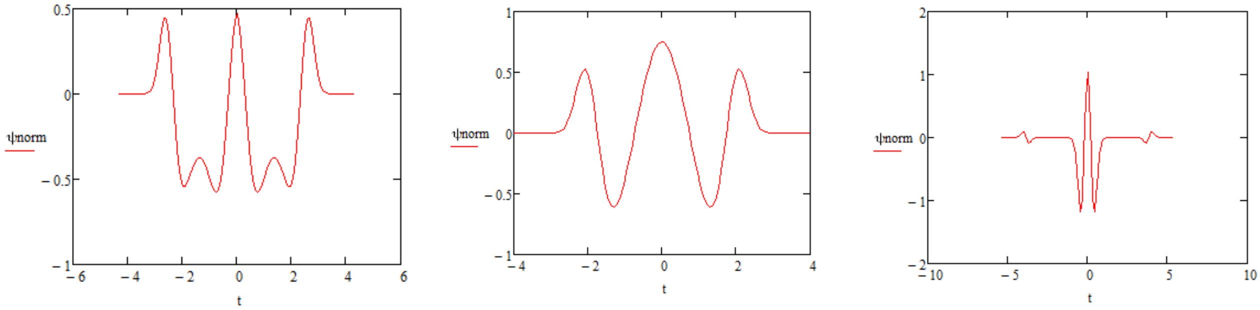


Рисунок 1 – Виды исследуемых потенциалов, массивы собственных значений, графики нормированной волновой функции для 5-го уровня энергии

Литература

1 Ландау, Л. Д. Теоретическая физика, т. 3. Квантовая механика, нерелятивистская теория / Л. Д. Ландау, Е. М. Лифшиц / М. : Наука, Гл. ред. физ.-мат. литературы, 1989. – 468 с.

2 Давыдов, А. С. Квантовая механика / А. С. Давыдов / М.: Наука, 1973. – 703 с.

3 Aquino, N. a.o. Energy eigenvalues for free and confined triple-well potentials, Revista Mexicana de fisica, 57 (1) 46–52, Febrero 2011.

4 L. C. Kwek, a.o. Analytic Expression for Exact Ground State Energy Based on an Operator Method for a Class of Anharmonic Potentials, arXiv:quant-ph/0007031v1 12 Jul 2000.

5 J. P. Boyd, Chebyshev&Fourier’Spectral Methods, Springer-Verlag, BerlinHeidelberg, 1989.

6 P. Pedram, M. Mirzaei Refined Spectral Method as an extremely accurate technique for solving time-independent Schrodinger equation //arXiv:math-ph/0611008.

УДК 004.7

Н. М. Сацура, Е. А. Ерофеева

АНАЛИЗ ПРИМЕНЕНИЯ СОВРЕМЕННЫХ КЛИЕНТ-СЕРВЕРНЫХ ТЕХНОЛОГИЙ ДЛЯ РАЗРАБОТКИ ON-LINE СЕРВИСА

В статье описывается пример применения использования современных подходов в веб-разработке для создания on-line сервиса. Дается комментарий по поводу достоинств и недостатков некоторых технологий веб-разработки. Для реализации использования Интернета через мобильные устройства использован подход «отзывчивого» дизайна, кратно описанный в статье. Показана целесообразность предложенной реализации, когда для построения качественного бизнес–решения достаточно использования доступных фреймворков, выступающих равноценной заменой дорогим CMS системам.

Веб-разработку условно можно разделить на две группы: медиа-порталы и закрытые корпоративные приложения. Первый тип веб-сайтов связан с понятием CMS (система управления контентом), с помощью которой можно легко манипулировать содержимым сайта [1]. Эти дорогие системы с целым набором дополнительных функций, которые часто не нужны заказчикам, более того они все еще вынуждены прибегать к услугам программистов для получения конечного продукта.