

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

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

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

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

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 ($N = 6 \div 10$), программы расчета интегралов перекрывания на орбиталях Гауссовского типа. Сделан вывод о наиболее рациональном методе расчета.

ФУНКЦИИ ГРИНА И НЕСТАНДАРТНЫЕ ЗАДАЧИ О РАССЕЯНИИ

К.П. Шилева

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