

CZU 539.21:004

UTILIZAREA CALCULATORULUI LA REZOLVAREA UNOR PROBLEME DIN FIZICA CORPULUI SOLID

Virgil Cheptea, Alexandru Marușcenco

(Universitatea de Stat "A. Russo", Republica Moldova)

Se analizează trei metode de modelare a fenomenelor fizice. S-au elaborat programele respective. Eficacitatea fiecărei metode este verificată prin utilizarea lor la rezolvarea unor probleme deja studiate.

Este cunoscut faptul că primele calculatoare au fost elaborate pentru efectuarea calculelor numerice în domeniul fizicii și tehnicii (fizica atomului, aeronautica). Eficacitatea lor a determinat, în fond, dezvoltarea destul de rapidă a informaticii și pătrunderea ei în toate domeniile de activitate. Pe măsura perfecționării tehnicii de calcul, posibilitățile ei au crescut foarte mult: ea permite nu numai de a efectua calcule numerice destul de voluminoase, dar și de a obține rezultate în formă analitică, de exemplu, sub forma unei funcții care depinde de argumente. Rolul tehnicii de calcul a crescut și mai mult în legătură cu cerințele înalte față de precizia calculelor teoretice și a rezultatelor experimentale, necesare pentru înțelegerea fenomenelor din microlume. Utilizarea tehnicii de calcul a contribuit la apariția unor noi direcții de cercetare și a unor noi terminologii, cum ar fi: fizica numerică sau fizica asistată de calculator, care studiază aceleași fenomene ale fizicii, numai că metoda de cercetare este neobișnuită - ea constă în modelarea fenomenelor fizice cu ajutorul calculatorului. Deseori acest compartiment se mai numește modelarea computerizată a fenomenelor fizice (sau modelarea fenomenelor fizice asistată de calculator). În acest caz, mai întâi, se elaborează modelul fenomenului fizic, apoi, acest model se cercetează cu ajutorul calculatorului. De menționat că modelarea, ca mijloc de studiere, este pe larg folosită în fizică (modelul gazului ideal, modelul atomului, modelul nucleului, modelul gazului electronic etc.).

Însuși procedeul modelării fenomenelor fizice la calculator, convențional, poate fi divizat în patru etape: mai întâi, se elaborează modelul fizic al fenomenului ținându-se cont de tot ce este cunoscut despre el, urmează, apoi, descrierea matematică a fenomenului, utilizându-se legile fizice cunoscute (modelarea matematică). Pașii următori presupun elaborarea algoritmului pentru rezolvarea ecuațiilor matematice și a programei pentru calculator [1,2,5].

Modelarea matematică a fenomenelor fizice a fost folosită în fizică și pînă la apariția calculatoarelor. Legile lui Newton reprezintă un model matematic al mișcării mecanice, ecuațiile lui Maxwell, ecuația lui Schrödinger, de asemenea, reprezintă modele matematice. Simplitatea (ele au fost elaborate pentru cazul interacțiunii a două corpuri sau a mișcării unei particule în câmpul creat de cealaltă particulă) și precizia uimitoare cu care ele descriu fenomenele respective au permis elaborarea lor fără utilizarea tehnicii de calcul.

În cazul interacțiunii mai multor particule (generatoare cuantice, fizica corpului solid, fizica atomului și nucleului atomic etc.), ecuațiile diferențiale care le descriu sînt neliniare și necesită utilizarea tehnicii de calcul. Modelarea fenomenelor fizice se folosește pe larg și în cazul cînd rezolvarea unei careva probleme poate fi realizată nemijlocit prin metode deja cunoscute, însă:

- instalația experimentală este prea costisitoare;
- durata cercetării experimentale este destul de mare;
- există mai multe variante de rezolvare și trebuie selectată cea optimală;
- fenomenul fizic studiat decurge foarte lent sau, din contra, foarte rapid;
- fenomenul fizic studiat decurge în regiuni spațiale foarte mici sau foarte mari [3, 4].

Asemenea probleme apar, de exemplu, la descrierea comportării purtătorilor de sarcină electrică în cristale, care poate fi făcută numai în cadrul fizicii cuantice. Descrierea comportării electronilor în cristale din punct de vedere cuantic are un caracter statistic. Teoria cuantică ne permite să analizăm probabilitatea realizării fenomenului dat, adică determinarea funcției de undă proprie a particulei date și valorile proprii ale energiei ei (spectrului energetic). Pentru aceasta se cere de rezolvat ecuația lui Schrödinger cu condițiile de graniță respective. De menționat, că electronii în cristal se află într-un câmp potențial creat de celelalte particule care alcătuiesc cristalul. Rezolvarea ecuației Schrödinger, în majoritatea cazurilor, este imposibilă chiar și după unele simplificări ale ei (aproximația adiabatică, aproximația unielectronică, aproximația masei efective etc.). Însă ea poate fi analizată utilizînd metode numerice de rezolvare cum ar fi, de exemplu, metoda Monte-Carlo, sau metoda diferențelor finite, utilizînd calculatorul [6]. În lucrare se analizează trei metode de modelare, a căror eficacitate este verificată prin aplicarea lor la rezolvarea unor probleme deja studiate, cum ar fi comportarea particulelor în gropi de potențial de forme arbitrare. Deoarece funcția de undă depinde de un număr mare de variabile (coordonate), rezolvarea numerică se complică. În lucrare se precaută forma unidimensională a gropii de potențial, la care, de altfel, se reduc multe probleme din fizica corpului solid, fizica atomului, spectroscopie și altele.

1. Metode de modelare a comportării particulelor într-o groapă de potențial

Problema constă în determinarea funcțiilor de undă și a valorilor energiei pentru o particulă, care se găsește într-un câmp potențial unidimensional $U(x)$. Pentru aceasta e necesar de a rezolva ecuația staționară a lui Schrödinger:

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x)}{\partial x^2} + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1)$$

Pentru determinarea valorilor funcțiilor de undă și ale energiei în cazul cînd particula se află într-o groapă de potențial de diferite forme, pot fi folosite mai multe metode numerice cum ar fi metoda diferențelor finite, metoda Monte-Carlo variațională și metoda lui Euler.

a) *Metoda diferențelor finite.*

Pentru aplicarea metodei diferențelor finite la rezolvarea ecuației diferențiale de ordinul doi, e necesar să cunoaștem condițiile de graniță de speța întâi, adică valorile funcției de undă la capetele unui careva segment, avînd în vedere că pătratul modulului funcției de undă determină probabilitatea aflării particulei în punctul dat [7]. Deoarece particula nu poate părăsi interiorul gropii de potențial în care se află, poate fi găsit un segment $[a,b]$, care include regiunea gropii de potențial, la ale cărei capete funcția de undă este egală cu zero.

Adică

$$\Psi(a) = \Psi(b) = 0$$

Împărțim segmentul $[a,b]$ în puncte $x_0=a, x_1, x_2, \dots, x_i, x_{i+1}, \dots, x_n, x_{n+1}=b$. Notăm intervalul (pasul) între punctele x_i și x_{i+1} prin h_i :

$$h_i = x_{i+1} - x_i.$$

De obicei, intervalul între puncte se consideră constant ($h_i=h$) și calculul se simplifică. Însă funcția de undă, fiind continuă și finită, se schimbă lent în afara gropii de potențial și rapid în interiorul ei, de aceea vom lua pasul variabil. În regiunea variației lente a funcției pasul va fi mai mare; respectiv, în regiunea variației rapide, pasul va fi mai mic [8]. Această alegere mărește precizia calculului și micșorează timpul de efectuare a lui.

Notăm: $\Psi(x_i) = \Psi_i$, $\Psi'(x_i) = \Psi'_i$, $\Psi''(x_i) = \Psi''_i$, $x_{i+1/2} = x_i + h_{i/2}$, $x_{i-1/2} = x_i - h_{i-1/2}$

Prima derivată se aproximează prin relația [8]:

$$\Psi'_i \approx \frac{\Psi_{i+\frac{1}{2}} - \Psi_{i-\frac{1}{2}}}{x_{i+\frac{1}{2}} - x_{i-\frac{1}{2}}}$$

Pentru derivata a doua vom avea:

$$Y''_i = \frac{2Y_{i+1}}{h_i(h_i + h_{i-1})} + \frac{2Y_{i-1}}{h_{i-1}(h_i + h_{i-1})} - \frac{2Y_i}{h_i h_{i-1}},$$

unde $\Psi_i = \Psi(x_i)$, $\Psi''_i = \Psi''(x_i)$, $h_i = x_{i+1} - x_i$.

În acest caz ecuația lui Schrödinger (1) în diferențe finite va avea forma:

$$-\frac{\hbar^2}{2 m_i h_i (h_i + h_{i-1})} \psi_{i+1} + \left[\frac{\hbar^2}{2 m_i h_i h_{i-1}} + U_i \right] \psi_i - \frac{\hbar^2}{2 m_i h_{i-1} (h_i + h_{i-1})} \psi_{i-1} = E \cdot \psi_i, \quad (2)$$

unde $i = 1, 2, \dots, n$. Este evident că $U_i = U(x_i)$.

Observăm că (2) reprezintă un sistem de ecuații liniare, din care pot fi găsite necunoscutele Ψ_i corespunzătoare parametrului E . Sistemul de ecuații (2) nu are soluții pentru orice valori ale parametrului E , ci doar pentru cele care se numesc valori proprii ale matricei coeficienților. Evident, aceste valori proprii vor aproxima, cu careva precizie, valorile proprii ale energiei particulei pentru potențialul dat, însă soluția sistemului – vectorul cu componentele $(\Psi_1, \Psi_2, \dots, \Psi_n)$, care corespunde parametrului dat E , va reprezenta funcțiile de undă proprii ale particulelor. Se poate demonstra că valorile și funcțiile proprii vor fi mai precise, dacă ordinea sistemului n va fi mai mare [8]. Problema constă în determinarea valorilor și vectorilor proprii pentru sistemul obținut. Notăm matricea coeficienților sistemului prin A , atunci vom avea:

$$A_{i,j} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{2}{m_i h_i (h_i + h_{i-1})}, & \text{dacă } j = i+1; \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{2}{m_i h_{i-1} (h_i + h_{i-1})}, & \text{dacă } j = i-1; \\ \left[\frac{\hbar^2}{2} \frac{2}{m_i h_i h_{i-1}} + U_i \right], & \text{dacă } j = i; \\ 0, & \text{pentru orice alt } j. \end{cases}$$

Sistemul (2) poate fi scris sub forma:

$$\sum_{j=1}^n A_{i,j} Y_j = E Y_i,$$

sau sub forma de matrice:

$$A \cdot \vec{\Psi} = E \vec{\Psi}. \quad (3)$$

Matricea A este o matrice tridiagonală și, în caz general, nu este simetrică, adică $A_{i,j} \neq A_{j,i}$. Ea va fi simetrică numai în cazul când $h_i = h$ și $m_i = m$ vor fi peste tot constante (în acest caz, $A_{i,i+1} = A_{i+1,i}$). Valorile proprii ale matricei A se pot obține și în cazul matricei nesimetrice, însă metodele de determinare a lor sînt cu mult mai rapide și eficiente anume în cazul matricelor tridiagonale simetrice. De aceea, vom face unele transformări prin care problema determinării valorilor proprii pentru o matrice nesimetrică se va reduce la problema stabilirii valorilor proprii pentru o matrice tridiagonală simetrică [7]. Pentru aceasta notăm:

$$L_i^2 = \frac{(h_i + h_{i-1})m_i}{2}. \quad (4)$$

Introducem o matrice B , astfel încît $B_{i,j} = L_i^2 A_{i,j}$ sau în forma matricială:

$$B = M \times A,$$

unde M - matricea diagonală cu elemente pe diagonala principală egale cu L_i^2 . Drept rezultat, matricea B va avea forma:

$$B_{i,j} = \begin{cases} -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{h_i}, & \text{dacă } j = i+1; \\ -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{h_{i-1}}, & \text{dacă } j = i-1; \\ \frac{\hbar^2}{2} \frac{(h_i + h_{i-1})}{h_i h_{i-1}}, & \text{dacă } j = i; \\ 0, & \text{pentru orice alt } j. \end{cases} \quad (4a)$$

Din (4a) se vede că B este o matrice simetrică. Într-adevăr, $B_{i,i+1} = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{1}{h_i} = B_{i+1,i}$.

Înmulțim ecuația matricială (3) cu M la stînga:

$$MA \vec{\Psi} = B \vec{\Psi} = EM \vec{\Psi}.$$

Matricea M poate fi scrisă sub forma:

$$M = LL, \quad (5)$$

unde L este matricea diagonală cu elemente pe diagonala principală egale cu

$$L_i = \sqrt{L_i^2} = \sqrt{\frac{(h_i + h_{i-1})m_i}{2}}.$$

Menționăm, că înmulțirea unei matrice cu o matrice unitară nu duce la schimbarea acestei matrice. Ținând cont de (5), facem următoarea transformare:

$$L^{-1}BL^{-1}L\dot{\Psi} = L^{-1}LLA\dot{\Psi} = EL^{-1}LL\dot{\Psi}, \quad (6)$$

unde L^{-1} - matricea inversă matricei L . Deoarece L este matrice diagonală, L^{-1} este matrice diagonală cu elemente $1/L_i$.

$$\text{Notăm } H = L^{-1}BL^{-1}, \quad \dot{\Psi} = L^{-1}\dot{\Phi}.$$

Atunci (6) va avea forma:

$$H\dot{\Phi} = E\dot{\Phi}. \quad (7)$$

Se observă că H are aceleași valori proprii ca și matricea A , însă, deoarece H s-a obținut prin înmulțirea matricei simetrice cu o matrice diagonală, ea deasemenea este o matrice simetrică. Din (7) obținem:

$$H = L^{-1}MAL^{-1} = L^{-1}LLAL^{-1} = LAL^{-1},$$

de unde

$$H_{i,j} = \frac{L_i}{L_j} A_{i,j} = \sqrt{\frac{(h_i + h_{i-1})m_i}{(h_j + h_{j-1})m_j}} A_{i,j}.$$

În forma desfășurată, după transformările corespunzătoare, obținem:

$$H_{i,j} = \begin{cases} -\frac{h^2}{2} \frac{2}{h_i \sqrt{m_i m_{i+1}} (h_i + h_{i-1}) (h_i + h_{i+1})}, & \text{dacă } j = i + 1; \\ -\frac{h^2}{2} \frac{2}{h_{i-1} \sqrt{m_i m_{i-1}} (h_i + h_{i-1}) (h_{i-1} + h_{i-2})}, & \text{dacă } j = i - 1; \\ \frac{h^2}{2} \frac{2}{m_i h_i h_{i-1}} + U_i, & \text{dacă } j = i; \\ 0, & \text{pentru orice alt } j. \end{cases}$$

Problema s-a redus la aflarea valorilor proprii E_k ale matricei tridiagonale simetrice H . Se știe că orice matrice $n \times n$ simetrică cu elemente reale are exact n valori proprii reale (nu obligatoriu distincte). Valorile proprii ale unei matrice reprezintă rădăcinile unui polinom, numit polinom caracteristic, care se obține din determinantul $\det(H - EI)$ (unde I - este o matrice unitară, H - o matrice arbitrară, E - valorile proprii ale matriciei H). Dacă H este o matrice simetrică, atunci polinomul caracteristic ei reprezintă al n -ea polinom al lui Shturm. Polinoamele lui Shturm se definesc în felul următor:

$$p_0 \equiv 1, \quad p_1(E) = H_{i,i} - E, \quad p_i(E) = (H_{i,i} - E)p_{i-1}(E) - H_{i,i-1}^2 p_{i-2}(E), \quad i = 2, \dots, n.$$

Dacă $c(E)$ este o funcție a cărei valoare, pentru E arbitrar, este egală cu numărul de coincidență a semnelor termenilor din șirul: $1, p_1(E), p_2(E), \dots, p_n(E)$, atunci este justă următoarea teoremă: valoarea funcției $c(E)$ este egală cu numărul de rădăcini ale polinomului p_n , mai mari sau egali cu E . Folosindu-ne de această teoremă și de faptul că toate valorile proprii se găsesc în limitele intervalului $(-||H||, ||H||)$, unde $||H||$ - norma matricei H , poate fi alcătuit după algoritmul determinării valorilor proprii E_k ale matricei H cu precizia dorită. Aplicînd acum metode numerice, se rezolvă sistemul de ecuații liniare și se găsesc vectorii

$\vec{\Phi}^k$ corespunzători valorilor E_k [8]. Totalitatea componentelor fiecăruia dintre acești vectori aproximează funcția de undă corespunzătoare.

b) Metoda lui Euler.

Conform metodei lui Euler [9], valoarea funcției de undă în punctul cu coordonata x_{i+1} poate fi determinată cunoscând valoarea acestei funcții și a derivatei ei în punctul x_i ($x_{i+1} = x_i + h$):

$$\Psi_{i+1} = \Psi_i + h\Psi'_i; \Psi'_{i+1} = \Psi'_i + h\Psi''_i. \quad (8)$$

A doua derivată o stabilim din ecuația lui Schrödinger:

$$\Psi''_i = \frac{2m}{\hbar^2} (U_i - E) \Psi_i.$$

Astfel, cunoscând valoarea lui Ψ_i și Ψ'_i , putem afla Ψ_{i+1} și Ψ'_{i+1} și așa mai departe. Din (8) putem determina derivata a doua numai dacă cunoaștem valoarea proprie a energiei E . Cu cât E diferă mai mult de valoarea proprie, cu atât mai degrabă începe să diverge soluția obținută prin metoda lui Euler, invers: cu cât E se apropie de valoarea proprie, cu atât funcția de undă diverge la o distanță mai mare. Folosind aproximațiile succesive, stabilim valori proprii ale energiei și funcții de undă corespunzătoare.

c) Metoda Monte-Carlo variațională

În scopul determinării graniței de sus pentru valoarea energiei în stare de bază, se aplică principiul variațional. Principiul variațional presupune că, pentru o funcție arbitrară $\phi(x)$, ce satisface condiția:

$$\langle f | f \rangle = \int f^*(x) f(x) dx = 1, \quad (9)$$

se respectă inegalitatea:

$$\langle \hat{H} \rangle = \langle f | \hat{H} f \rangle = \int f^*(x) \hat{H} f(x) dx \geq E_0, \quad (10)$$

unde H – hamiltonianul, E_0 - energia stării de bază [6].

Inegalitatea (10) constituie baza metodei variaționale. Procedura constă în alegerea funcției de undă de probă, a cărei formă este argumentată fizic și care depinde de unul sau mai mulți parametri. Folosind numere aleatoare, se variază mărimea $\langle \hat{H} \rangle$, pînă la obținerea valorii minime a ei. Această valoare $\langle \hat{H} \rangle$ reprezintă granița de sus pentru energie [8].

Procedura Monte-Carlo constă din următoarele etape:

1. alegerea din considerente fizice rezonabile a valorilor funcției ϕ în punctele x_i ;
2. alegerea unui punct aleator x_i și modificarea valorii $\phi_i = \phi(x_i)$ cu o mărime aleatoare din intervalul $[-\delta, \delta]$;
3. calcularea variația energiei DE pentru $\langle \hat{H} \rangle$ (dacă $DE \leq 0$, atunci modificarea făcută pentru $\phi(x_i)$ se acceptă, în caz contrar nu se acceptă);
4. repetarea pașilor 2 și 3 pînă cînd $\langle \hat{H} \rangle$ devine constant.

În calitate de funcție inițială poate fi luată, de exemplu, funcția exponențială $e^{-\frac{x^2}{2}}$, care este finită, pară și descrește rapid cu îndepărtarea de la originea de coordonate [3].

2. Modelarea comportării microparticulei pentru diferite forme ale potențialului $U(x)$. Concluzii

Prezentăm rezultatele calculului prin metoda diferențelor finite pentru unele forme ale potențialului $U(x)$. Forma potențialului $U(x)$ (a gropii de potențial), valorile proprii ale funcțiilor de undă și a energiei proprii sînt prezentate în tabel și în figurile 1÷14.

Rezultatele experiențelor numerice pentru diferite forme ale potențialului $U(x)$

Nivele energetice			0	1	2	3	4
Forma potențialului.							
1. Groapa dreptunghiulară (fig.1, $a=2\text{nm}$, $U_0=0,23\text{eV}$) $U(x) = \begin{cases} U_0, & \text{dacă } x \geq a; \\ 0, & \text{onalt caz.} \end{cases}$	E, eV	analitic	0,0161778	0,0638236	0,1392387	0,2251332	
		numeric	0,0161565	0,0637388	0,1390608	0,2249691	
2. Groapa cu o perturbăție (fig. 3, $a=2\text{nm}$, $b=0,3\text{nm}$, $U_0=0,23\text{eV}$, $U_b=0,05\text{eV}$) $U(x) = \begin{cases} U_0, & \text{dacă } x \geq a; \\ 0, & \text{dacă } x \geq b; \\ U_b, & \text{onalt caz.} \end{cases}$	E, eV	analitic	Nu există				
		numeric	0,0269593	0,0643124	0,1495502	0,2259788	
3. Oscilator armonic (fig. 7, $k = 1\text{eV/nm}^2$) $U(x) = \frac{kx^2}{2}$	E, eV	analitic	0,1380301	0,4140902	0,6901503	0,9662105	1,2422706
		numeric	0,1380111	0,4140094	0,6899642	0,9658744	1,2417399
4. Oscilator anarmonic (fig.11, $k=1\text{eV/nm}^2$, $b=3\text{eV/nm}^4$) $U(x) = \frac{kx^2}{2} + bx^4$	E, eV	analitic	Nu există.				
		numeric	0,0814811	0,2694121	0,4975133	0,7527399	1,0298698
5. Oscilator anarmonic (fig. 13, $k=1\text{eV/nm}^2$, $b=3\text{eV/nm}^4$, $a=1\text{eV/nm}^3$) $U(x) = \frac{kx^2}{2} + ax^3 + bx^4$	E, eV	analitic	Nu există.				
		numeric	-5,574383	-4,478709	-3,437632	-2,459556	-1,55739
6. Potențial liniar (fig. 9, $a=2\text{nm}$, $U_0=12\text{eV}$) $U(x) = x $	E, eV	analitic	Nu există.				
		numeric	0,3425715	0,7865622	1,0925559	1,3749735	1,6210625
7. Groapa de potențial dublă (fig. 5, $a=1\text{eV/nm}^2$) $U(x) = x^4 - \alpha \cdot x^2$	E, eV	analitic	Nu există.				
		numeric	-0,064388	0,0474144	0,3833415	0,7446413	1,1726616

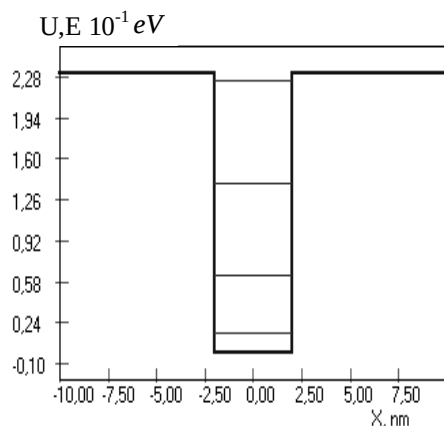


Fig. 1. Groapa de potențial dreptunghiulară cu nivele energetice.

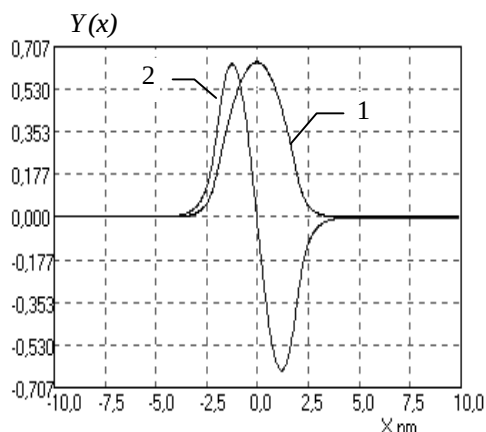


Fig. 2. Prima și a doua funcție proprie.

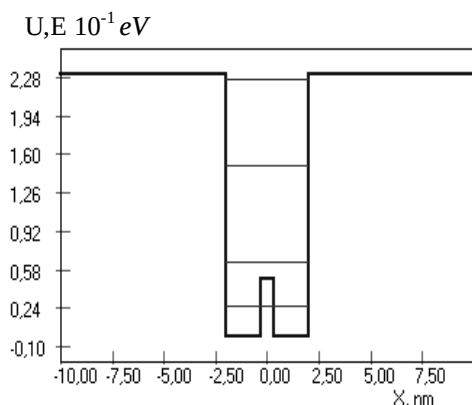


Fig. 3. Groapa de potențial cu o perturbație.

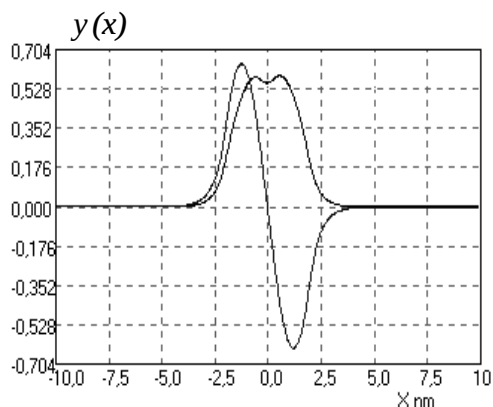


Fig. 4. I-a și II-a funcție proprie.

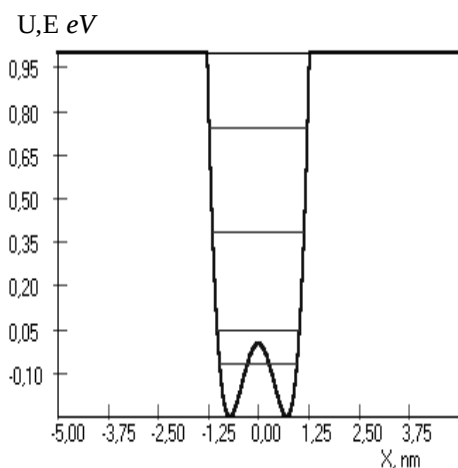


Fig. 5. Groapa de potențial dublă și nivele energetice.

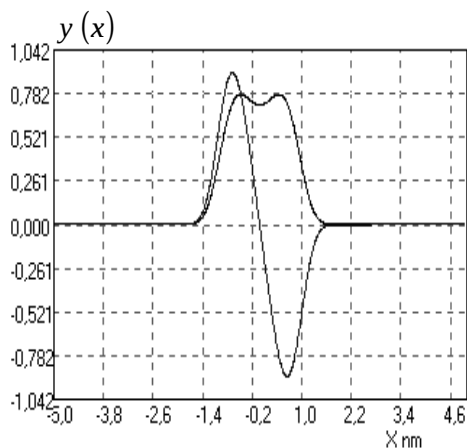


Fig. 6. Funcțiile de undă a electronului în groapa de potențial dublă.

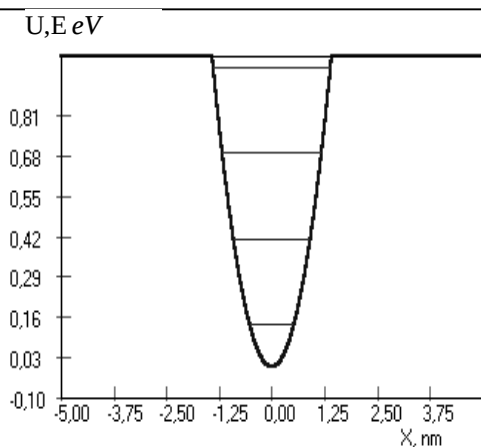


Fig. 7. Oscilator armonic și nivelele energetice corespunzătoare.

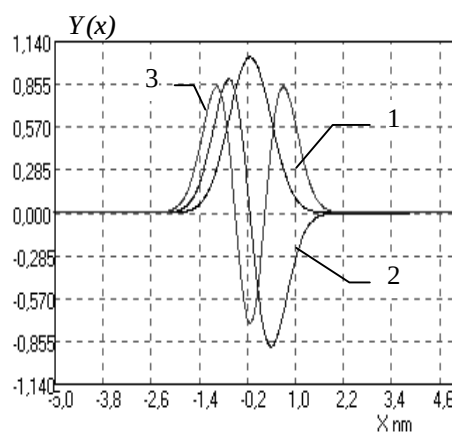


Fig. 8. Primele trei funcții proprii ale oscilatorului armonic.

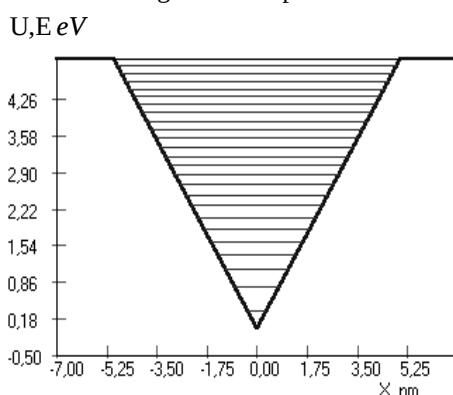


Fig. 9. Nivelele energetice pentru potențial linear.

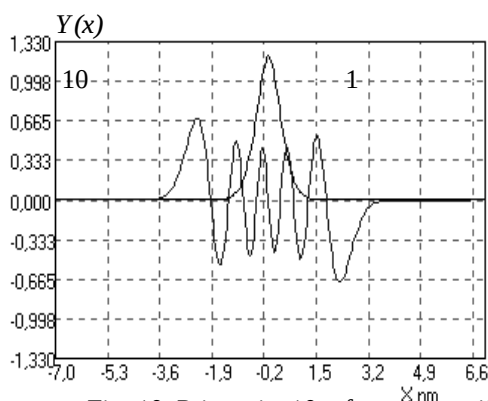


Fig. 10. Prima și a 10-a funcții proprii ale electronului.

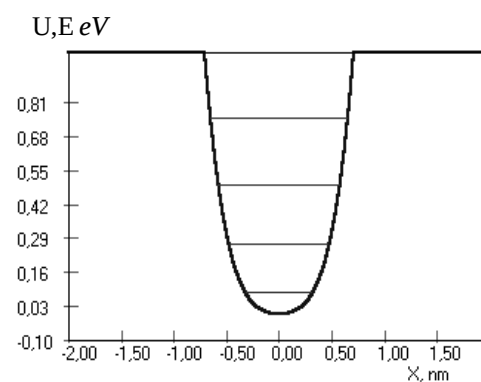
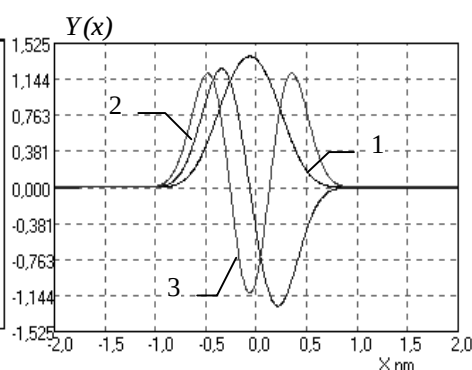

 Fig. 11. Oscilator armonic de forma $(1/2)kx^2 + bx^4$.


Fig. 12. Funcțiile de undă ale oscilatorului armonic simetric (nivelele 1,2,3).

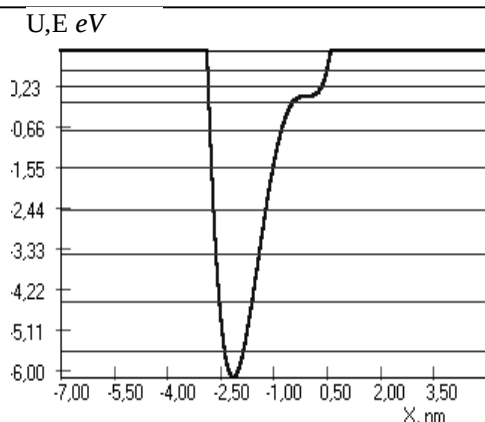


Fig. 13. Potențialul anarmonic de forma $(1/2)*k*x^2+b*x^3+c*x^4$ și nivelele energetice.

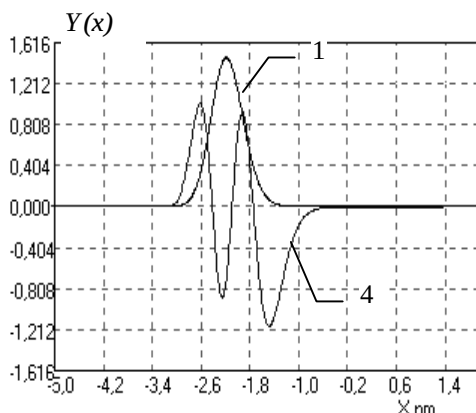


Fig. 14. Funcții proprii al oscilatorului anarmonic.

Au fost analizate șapte forme ale câmpului potențial $U(x)$. În figurile 1, 3, 5, 7, 9, 11, 13, pe axa ordonatelor sînt indicate înălțimea gropii de potențial (U) în eV și energia nivelelor energetice (E) în eV, iar pe axa absciselor dimensiunile liniare ale gropilor de potențial în nanometri. În figurile 2, 4, 6, 8, 10, 12, 14 sînt prezentate funcțiile de undă ale electronilor pe primele nivele energetice. Înălțimea gropilor de potențial varia de la 0,8 eV pînă la 2,3 eV. Dimensiunile domeniului de calcul, în nanometri, pentru care se determină $Y(x)$ și (E), se aleg suficient de lat, pentru ca funcția de undă să fie egală cu zero la marginile acestui domeniu (în afara gropii de potențial), și suficient de mic, pentru ca pasul să fie relativ mic. Valoarea optimă a acestui domeniu se determină după cîteva experiențe numerice, fixîndu-se coordonatele punctelor, unde funcția de undă devine egală cu zero.

Ținînd cont că precizia determinării valorilor proprii a energiei și funcțiilor de undă, atît în cazul metodei diferențelor finite, cît și a metodei Euler este proporțională cu numărul de diviziuni pe axa absciselor, mărimea pasului $dx = x_{i+1} - x_i$ (distanța dintre două puncte vecine pentru care se determină $\Psi(x)$ și E) se determină ca raportul lungimeii segmentului de calcul către numărul de diviziuni. Numărul total de diviziuni în ambele programe a fost limitat la 1000. Precizia determinării energiei în ambele metode este de ordinul $(0,01 \div 0,001)\%$.

În cazul metodei diferențelor finite, precizia determinării energiei va crește, dacă rezolvarea se repetă utilizîndu-se pentru vectorul propriu valoarea lui din rezolvarea precedentă. Rezultatele obținute prin această metodă corelează cu cele obținute analitic (vezi tabelul, poziția 1 și 3). Metoda diferențelor finite poate fi folosită și pentru câmpuri potențiale nesimetrice. Ea permite, de asemenea, determinarea unui număr mai mare de funcții de undă și valori proprii ale energiei. Precizia determinării energiei prin metoda Monte – Carlo, în mare măsură, depinde de faptul cît de reușit din punct de vedere fizic a fost aleasă funcția inițială și de numărul de rezolvări consecutive (aproximații), pentru care în calitate de funcție inițială servește funcția obținută în rezolvarea precedentă. Astfel, pentru câmpul potențial prezentat în fig. 5, energia nivelului de bază după prima aproximație este $E_0 = -0,0595754$ eV, iar după a 20-a aproximație $E_0 = -0,06444$ eV. Dacă folosim

metoda diferențelor finite, pentru energia aceluiași nivel energetic se obține $E_0 = -0,064388$ eV. Deși metoda Monte – Carlo poate fi aplicată numai la determinarea stării de bază, iar soluțiile obținute cu ajutorul ei nu sînt atît de precise ca în cazul diferențelor finite: ea are și anumite priorități care constau în simplitatea algoritmului de calcul, poate fi eficientă în cazul bi – și tridimensional.

Bibliografie:

1. Мелькер А.И. *Моделирование эксперимента* // Новое в жизни науки и техники, серия физика, Москва, Знание, 1991, № 2, 64 с.
2. Кондратьев А. С., Лаптев В. В. *Физика и компьютер*. Ленинград, ЛГУ, 1989, 324 с.
3. Унистон П. *Искусственный интеллект*, Москва, Мир, 1984, 325 с.
4. Зарипов Р.Х. *Машинный поиск вариантов при моделировании творческого процесса*. Москва, Наука, 1983, 225 с.
5. Дородницын А.А. *Информатика: предмет и задачи*, Природа, 1985, №2, с. 26 -30.
6. Федоров В. В. *Теория оптимального эксперимента*. Москва, Наука, 1979, 340 с.
7. Давыдов А. С. *Квантовая механика*, Москва, Физматгиз, 1963, 748 с.
8. Tan J. H., Snider G. L., Chang L. D., and Hu E. L. *A self-consistent solution of Schrödinger – Poisson equations using a nonuniform mesh* // Appl. Phys., v. 68, Nr. 8, 15 Oct. 1990, p. 4071- 4076.
9. Ортега Дж. Пул У. *Введение в численные методы решения дифференциальных уравнений*. Москва, Наука, 1986, 420 с.
10. Гульд Х., Тобочник Я. *Компьютерное моделирование в физике*, Москва, Мир, 1990, 399 с.

THE USE OF COMPUTER IN SOLVING PROBLEMS DEALING WITH THE PHYSICS OF SOLID OBJECTS

Virgil Cheptea, Alexandru Marușcenco

(State University “Alec Russo”, Republic of Moldova)

Three methods of modeling of physical processes are analyzed. Programs for each of the methods are developed. The efficiency of each method is checked by using it while solving some problems which have already been investigated.

Prezentat la redacție la 30.01.06