

Symbolic-numerical algorithm for solving quantum tunneling problem of a diatomic molecule through repulsive barriers

Luong Le Hai (LIT, JINR, Dubna)

E-mail address: luonglehai_tcl@yahoo.com.vn

The model for quantum tunneling of a diatomic molecule through repulsive barrier is formulated as a 2D boundary-value problem for the Schrödinger equation. This problem is reduced using the Kantorovich or Galerkin-type expansions to the boundary-value problem for a set of second-order ordinary differential equations with third-type boundary conditions. The coefficients of these differential equations (effective potentials) are integrals of product of the basis functions and/or their parametric derivatives. For the Morse interaction potential the results are evaluated in Cartesian and polar coordinates and compared with the direct numerical solution of 2D boundary-value problem obtained using the Numerov scheme. The algorithm of evaluation of asymptotic of matrix elements in polar coordinates is presented. The effect of quantum transparency, i.e., the resonance behavior of the transmission coefficient versus the energy of the molecule, is shown to be a manifestation of the barrier metastable states, embedded in the continuum.

Символьно-численный алгоритм решения задачи квантового туннелирования двухатомной молекулы через отталкивающие барьеры

Льонг Ле Хай (ЛИТ, ОИЯИ, Дубна)

E-mail address: luonglehai_tcl@yahoo.com.vn

Модель квантового туннелирования двухатомной молекулы через отталкивающий барьер сформулирована в виде двумерной краевой задачи для уравнения Шредингера. С помощью разложения Канторовича или Галеркинскогo типа исходная задача редуцируется к краевой задаче для системы обыкновенных дифференциальных уравнений с граничными условиями третьего рода. Коэффициенты этой системы (эффективные потенциалы) вычисляются как интегралы от произведения базисных функций и/или их производных по параметру. Для потенциала взаимодействия Морса, результаты расчётов в декартовых и полярных координатах сравниваются с прямым численным решением исходной двумерной краевой задачи с помощью схемы Нумерова. Представлен алгоритм вычисления асимптотик матричных элементов в полярных координатах. Показано, что имеет место эффект квантовой прозрачности, т.е. резонансное поведение коэффициента прохождения, что связано с существованием барьерных метастабильных состояний, вложенных в континуум.