

Symbolic-numeric algorithm for evaluation of asymptotes of effective potentials for quantum tunnelling problem of diatomic molecule

L.L. Hai, (JINR & BelSU, Belgorod)

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. In polar coordinates this problem is reduced using the Kantorovich 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. Symbolic-numeric algorithm of evaluation of asymptotes of basis functions and effective potentials at large value of radial variable is presented.

Символико-числленный алгоритм вычисления асимптотик эффективных потенциалов для задачи квантового туннелирования двухатомной молекулы

Л.Л. Хай, (ОИЯИ & БелГУ, Белгород)

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 исходная задача в полярных координатах 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. Представлен символьно-числленный алгоритм вычисления асимптотик базисных функций и эффективных потенциалов при больших значениях радиальной переменной.