Mathematical Problems of Computer Science 36, 140–145, 2012.

Numerical Solution of $1D$ Schrödinger Equation at Adiabatically Changing Potential

Ashot S. Gevorkyan[1,2] and Misak G. Nalbandyan[1]

[1]Institute for Informatics and Automation Problems, NAS of Armenia
[2]Joint Institute of Nuclear Research, 141980 Dubna, Moscow reg., Russia
e-mail g_ashot@sci.am, habajyan@ipia.sci.am

Abstract

We study the eigenfunction and eigenvalue problem of $1D$ Schrödinger equation with adiabatically changing along the reaction coordinate (external parameter) Mors potential. As an example the $2D$ interaction potential of the collinear reactive collision $H-H-H$ is calculated which later is fitted by the generalized $2D$ Mors potential. It is shown that the vibration state of body system are characterized by the set of five orthonormalized wavefunctions and corresponding energies which are slowly changed along the curve of the reaction coordinate. The mentioned problem is solved also with taking into account rotation motion of bodies system. It is shown that the solution of previous problem in this case is insignificantly modified.

Keywords: Bodies system, eigenfunction and eigenvalue problem of Schrödinger equation, fitting, Mors potential.

1. Formulation of the Problem

As it was shown recently [1], for definition of equation of the transition **S** matrix elements which describes the reactive scattering in the three-body system it is important to solve $1D$ Schrödinger equation along the coordinate reaction. In general case with consideration of the rotation of body-system the parametric Schrödinger equation can be written in the following form:

$$\Big\{\frac{d^2}{dv^2}+\frac{2\mu}{\hbar^2}\Big[E-U(u,v)-\frac{\hbar^2 j(j+1)}{2\mu v^2}\Big]\Big\}\Xi=0, \tag{1}$$

where u denotes the coordinate along of the curve of *reaction coordinate* (see Fig 1.). v designates coordinate of vibration motion of three bodies reduced mass $\mu=\sqrt{m_1m_2m_3/(m_1+m_2+m_3)}$, the vibration quantum numbers are denoted correspondingly by $j=0,1,2,\ldots$ The interaction potential $U(u,v)$ between three particles at the collinear collision in the general case can be represented in the form of generalized Mors potential:

$$U(u,v)=A(u)\Big[e^{-2\alpha(u)\frac{v-v_0(u)}{v_0(u)}}-2e^{-\alpha(u)\frac{v-v_0(u)}{v_0(u)}}\Big]. \tag{2}$$

Our aim is be construction in analytical form the wavefunction and the energy spectrum of $1D$ Schrödinger equation along a curve of the reaction coordinate (see Fig 1.). Recall that in fixed points $\{u_i\}$, where $i = 0, 1, ...n$ and $j = 0$ the problem (1)-(2) is solved exactly [2]. The wavefunction of reduced mass in the potential (2) has a form:

$$\Xi_n(u, v) = y^{\beta/\alpha} e^{-y/2} {}_1F_1(-n, c, y), \tag{3}$$

while the energy of bound state is defined by the form:

$$E_n(u) = -A(u) + \frac{\hbar^2}{2\mu v_0^2(u)} \left[2\alpha(u)\gamma(n+1/2) - \alpha^2(u)(n+1/2)^2\right], \tag{4}$$

where n is the vibration quantum number, in addition the following designations are made:

$$\beta(u) = \sqrt{\frac{-2\mu E_n(u) v_0^2(u)}{\hbar^2}}, \quad c(u) = 2\frac{\beta(u)}{\alpha(u)} + 1, \quad \gamma(u) = \sqrt{\frac{2\mu A(u) v_0^2(u)}{\hbar^2}},$$

$$y(u, v) = \xi(u) e^{-\alpha(u) x(u,v)}, \quad \xi(u) = \frac{2\gamma(u)}{\alpha(u)}, \quad x(u, v) = \frac{v - v_0(u)}{v_0(u)}.$$

In case $j \neq 0$ in the Schrödinger equation we should take into account the rotation energy of bodies system. Because the singularity of the rotation potential keep to outside of localization region of the quantum probability (see Fig 3.) in the interaction potential can be approximated again accurately by the generalized Mors potential (2). In this case the wavefunction has a form:

$$\Xi_{n(j)}(u, v) = \tilde{y}^{\beta_1/\alpha} e^{-\tilde{y}/2} {}_1F_1(-n, \tilde{c}, \tilde{y}) \tag{5}$$

while energy spectrum has a form:

$$\begin{aligned} E_n(u) = \frac{\hbar^2}{2\mu v_0^2}\Big[\gamma^2 + 2\alpha\gamma(n+1/2) - \alpha^2(n+1/2)^2 + j(j+1) - \\ \frac{3(\alpha-1)}{\alpha\gamma}(n+1/2)j(j+1) - \frac{9(\alpha-1)^2}{4\alpha^4\gamma^2} j^2(j+1)^2\Big]. \end{aligned} \tag{6}$$

where

$$\beta_1(u) = \sqrt{\frac{-2\mu E_n v_0^2}{\hbar^2} + j(j+1)C_0}, \qquad \tilde{c}(u) = 2\frac{\beta_1}{\alpha} + 1,$$

$$\tilde{y} = \xi_1 e^{-\alpha x}, \quad C_0(u) = 1 - \frac{3}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2}, \quad C_1(u) = -\frac{1}{\alpha} + \frac{3}{\alpha^2},$$

$$\gamma_1(u) = \sqrt{\frac{2\mu A v_0^2}{\hbar^2} + j(j+1)C_1}, \qquad \xi_1(u) = \frac{2\gamma_1}{\alpha}.$$

It is obvious that wavefunctions $\Xi_n(u, v)$ must be normalized after which they can form the orthonormal basis. The normalized wavefunctions can be represented by form:

$$\bar{\Xi}_{n(j)}(u, v) = A_1(u)\Xi_{n(j)}(u, v), \qquad A_1(u) = \frac{1}{\sqrt{\int |\Xi_n(u, v)|^2 dv}}. \tag{7}$$

For numerical calculation of an integral in second expression of (7) it is useful to use Simpson's method for which error values are not more than 10^{-3}:

$$\int_a^b f(x)dx \approx \frac{h}{3}\Big[f(x_0) + 2\sum_{j=1}^{n/2-1} f(x_{2j}) + 4\sum_{j=1}^{n/2} f(x_{2j-1}) + f(x_n)\Big]. \tag{8}$$

where $x_j = a + jh$ for $j = 0, 1, ..., n-1, n$ with $h = (b-a)/n$; in particular, $x_0 = a$ and $x_n = b$. The error is bounded by $\frac{h^4}{180}(b-a)\max|f^4(\xi)|$.

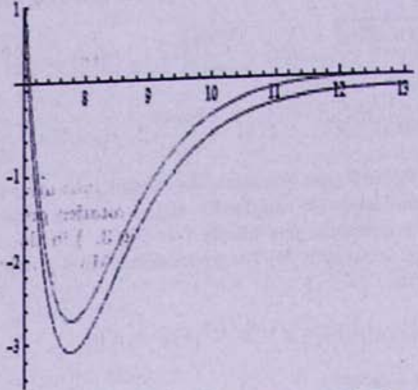

Fig 1. Mors potential including rotation energy of body system(vibration quantum number $j = 12$) in the u=2.1 point.

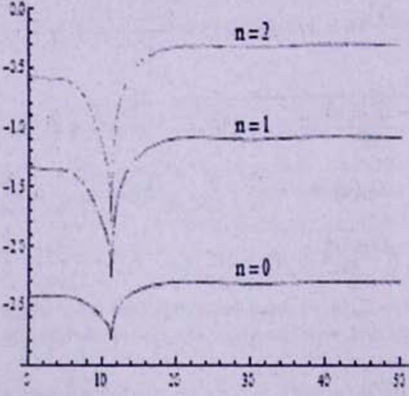

Fig2. $E_n(u)$ energy in n=0.1,2 states.

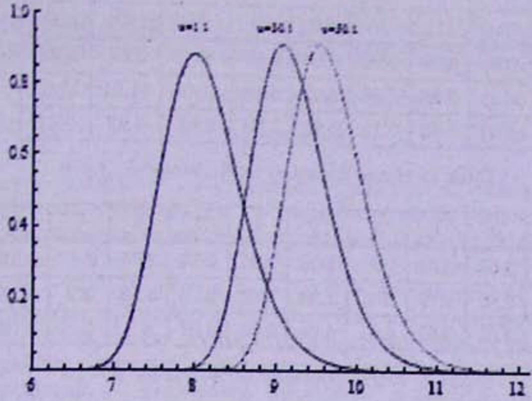

Fig. 3 Ground state wavefunction in u=1.1, 30.1 and 50.1 points.

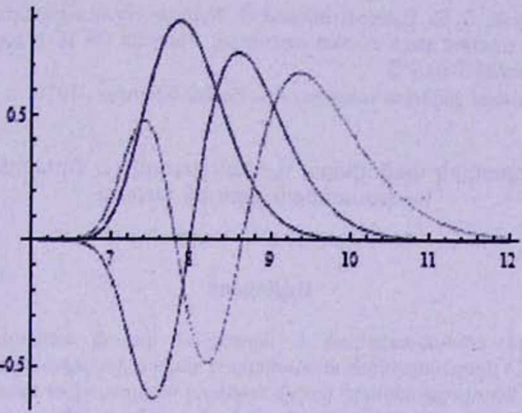

Fig. 4 Wavefunctions for n=0,1 and 2 quantum numbers at the point $u = 10.1$.

u	1	5	10	20	30	40	50
A(u)	3.09	3.07	3.06	3.07	3.08	3.08	3.08
$\alpha(u)$	8.36	7.38	2.92	9.86	11.04	11.51	11.63
$v_0(u)$	7.90	7.13	4.02	7.96	8.95	9.23	9.41

Table 1: Morse potential coeficents when $j = 0$

j	0	1	2	3	4	5	6	7	8
A	3.06	3.04	3.	2.96	2.91	2.84	2.76	2.67	2.57
α	2.92	2.79	2.8	2.84	3.03	3.08	3.13	3.2	3.28
v_0	4.02	3.99	4.01	4.04	4.05	4.07	4.1	4.12	4.16

Table 2: Morse potential coeficents for $u = 10$

References

[1] A. S. Gevorkyan, G. G. Balint-Kurti and G. Nyman: Novel algorithm for simulation of 3D quantum reactive atom-diatom scattering. Procedia CS 1(1), pp. 1195-120 , 2010. 10.1016/j.procs.2010.04.133

[2] S. Flgge, *Practical quantum mechanics I*,. Berlin, Springer , 1974.

Ադիաբատիկ փոփոխվող պոտենցիալով 1D Շրեդինգերի հավասարման թվային լուծում

Ա. Գևորգյան և Մ. Նալբանդյան

Ամփոփում

Աշխատանքում ուսումնասիրված է արտաքին դաշտի առկայությամբ տարբեր երկ:արությամբ 1D չկարգավորված տարածակս·ն սպինային շղթաների (SUՇ) համույթի վիճակագրական հատկությունները՝ հաշվի առնելով ռելաքսացիոն երևույթները: Առաջին անգամ օգտագործվել է կոմպլեքս-դասական Համիլտոնիանը: Պարբերական 1D ցանցի հանգույցներում ստացվել են ռեկուրենտ եռանկյունաչափական հավասարումներ, որոնք Սիլվեստրի պայմանների հետ միասին անալիտիկորեն շարունակվում են կոմպլեքս տարածության մեջ և հնարավորություն են տալիս հանգույց առ հանգույց հաշվել սպինի ուղղորդվածությունը՝ հաշվի առնելով սպինային շղթաներում ռելաքսացիոն երևույթները:

Ուսումնասիրված են նաև սպինային համույթում տեղի ունեցող որոշակի կրիտիկական երևույթներ, ինչպիսիք են Կլաուզիուս-Մոսսոտիի (Կ-Մ) հավասարման մեջ աղետները՝ կախված արտաքին դաշտի մեծությունից:

Առաջարկված է վիճակագրական գումարի նոր ներկայացում վերջավոր թվով ինտեգրալային արտահայտության տեսքով՝ էներգիայի և բևեռացվածության տարածությունում:

Численное решение $1D$ уравнения Шредингера с адиабатически изменяющимся потенциалом

А. Геворкян и М. Налбандян

Аннотация

Мы исследуем проблему собственных функций и собственных значений для $1D$ уравнения Шредингера с адиабатически изменяющимся вдоль координаты реакции (внешный параметр) потенциалом Морса. В качестве примера вычислен $2D$ потенциал взаимодействия коллинеарного реактивного столкновения $H-H-H$, который далее аппроксимирован обобщенным $2D$ потенциалом Морса. Показано, что колебательное состояние системы тел характеризуется множеством из пяти ортонормированных волновых функций и соответствующих энергий, которые медленно меняются вдоль кривой координаты реакции. Указанная проблема решается так же с учетом вращательного движения системы тел. Показано, что в этом случае решение предыдущей проблемы незначительно модифицируется.