
Математическое моделирование

УДК 517.958:530.145.6

Алгоритм решения двумерной краевой задачи для модели квантового туннелирования двухатомной молекулы через отталкивающие барьеры

А. А. Гусев*, Л. Л. Хай†

* *Лаборатория информационных технологий
Объединённый институт ядерных исследований
ул. Жолио-Кюри, д. 6, г. Дубна, Московской обл., Россия, 141980*

† *Белгородский государственный национальный исследовательский университет
ул. Победы, д. 85, г. Белгород, Россия, 308015*

Представлена вычислительная схема для численного решения краевых задач, описывающих модели квантового туннелирования двухатомных молекул через отталкивающие барьеры в s -волновом приближении. Сформулированы двумерные краевые задачи и выполнена редукция к одномерным краевым задачам для систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка методами Галёркина и Канторовича. Описаны разработанные алгоритмы и вычисленные с их помощью асимптотики параметрических базисных функций, матриц переменных коэффициентных функций и фундаментальных решений систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, необходимых для решения краевых задач на конечном интервале. Краевые задачи решались разработанным комплексом программ, реализующих метод конечных элементов. Представлен анализ тестовых расчётов модели квантового туннелирования двухатомных молекул с ядрами, связанными потенциалом Морзе, через отталкивающие гауссовские барьеры и квантовой прозрачности барьеров за счёт метастабильных состояний, погруженных в непрерывный спектр ниже порога диссоциации.

Ключевые слова: квантовое туннелирование, двухатомные молекулы, отталкивающие барьеры, краевые задачи, метод Галёркина, метод Канторовича, асимптотические решения, метод конечных элементов.

1. Введение

Исследования туннелирования связанных частиц через отталкивающие барьеры [1] выявили эффект резонансной квантовой прозрачности барьеров: когда размер кластера сравним с пространственной шириной барьеров, имеют место механизмы, приводящие к большей прозрачности барьеров, подобные механизмам просветлённой оптики. Эти механизмы связаны с формированием барьерных резонансов, обусловленных тем фактом, что потенциальная энергия составной системы имеет локальные минимумы, приводящие к возникновению метастабильных состояний движущегося кластера [2]. В настоящее время этот эффект и его возможные приложения являются предметом интенсивных исследований различных квантовомеханических задач, например, квантовой диффузии молекул [3], резонансного прохождения экситонов через гетероструктурные барьеры [4], резонансное образование молекул из отдельных атомов [5], управление направлением диффузии в твёрдом теле [6], туннелирование ионов и кластеров через отталкивающие барьеры [7–9].

Для анализа подобных задач необходимо разработать модели и численно-аналитические методы, основанные на приближениях, обеспечивающих реалистическое описание взаимодействий как атомов в молекуле, так и с барьерами, и разработать эффективные алгоритмы и комплексы программ.

Статья поступила в редакцию 18 сентября 2014 г.

Авторы благодарят Л. А. Севастьянова, В. Л. Дербова, С. И. Веницкого, П. М. Красовицкого, Ф. М. Пенькова, О. Чулуунбаатара за сотрудничество и поддержку. Работа поддержана грантами РФФИ 14-01-00420 и 13-01-00668.

В настоящей работе представлена формулировка и исследование модели квантового туннелирования двухатомной молекулы с ядрами, связанными потенциалом Морзе, через гауссовские барьеры в s -волновом приближении, используя разложения Галёркина и Канторовича искомого решения. Даны формулировки двумерных краевых задач в декартовой и полярной системах координат. Используя различные базисные функции — решения вспомогательных краевых задач по поперечной переменной или по угловой переменной с параметрической зависимостью от радиальной переменной, краевая задача сводится к системе связанных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. В декартовых координатах матричные элементы убывают экспоненциально (ниже порога диссоциации), а в полярных координатах — убывают как обратные степени по независимой переменной. Поэтому в последнем случае требуется вычисление асимптотических разложений матричных элементов и фундаментальных решений системы связанных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Для их вычисления разработаны и представлены символьно-численные алгоритмы, реализованные в системе компьютерной алгебры Maple.

Дан сравнительный анализ потенциальных матричных элементов (матриц переменных коэффициентов — эффективных потенциалов систем дифференциальных уравнений), вычисленных в декартовых и полярных координатах, которые использовались для решения задачи квантового туннелирования ниже порога диссоциации. Формулировка краевых задач в двух системах координат необходима для дальнейшего самосогласованного изучения задачи выше порога диссоциации, для которой корректные и удобные для эффективного численного решения задачи краевые условия формулируются в полярной системе координат. Представлен анализ эффекта квантовой прозрачности — резонансной зависимости коэффициента прохождения от энергии налетающей на барьер молекулы.

Структура работы следующая. В разделах 2 и 3 дана формулировка двумерных краевых задач в декартовых и полярных координатах и их редукция методами Галёркина и Канторовича. В разделе 4 представлены ведущие члены асимптотических разложений матриц переменных коэффициентов и фундаментальных решений, дано описание алгоритмов их вычисления до требуемого порядка точности. В разделе 5 анализируются решения краевых задач для модели квантового туннелирования молекулы и эффект квантовой прозрачности барьеров. В заключении указаны возможные применения развитых алгоритмов и комплексов программ.

2. Модель А. Редукция краевой задачи методом Галёркина

Рассмотрим двумерную модель двух тождественных частиц с массой m , связанных парным потенциалом $\tilde{V}(x_2 - x_1)$ и взаимодействующих с внешними барьерными потенциалами $\tilde{V}^b(x_1)$ и $\tilde{V}^b(x_2)$. Выполняя замену переменных $x = x_2 - x_1$, $y = x_2 + x_1$, $y \in (-\infty, \infty)$, $x \in (-\infty, \infty)$, получаем уравнение Шрёдингера для волновой функции $\Psi(x, y)$ в s -волновом приближении

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{f_1(y)} \frac{\partial}{\partial y} f_2(y) \frac{\partial}{\partial y} - \frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{f_3(x)} \frac{\partial}{\partial x} f_4(x) \frac{\partial}{\partial x} + \tilde{V}(x, y) - \tilde{E} \right) \Psi(y, x) = 0, \quad (1)$$

где $\tilde{V}(x, y) = \tilde{V}^M(x) + \tilde{V}^b(x_1) + \tilde{V}^b(x_2)$ — потенциальная функция, \tilde{E} — полная энергия системы, \hbar — постоянная Планка.

Уравнение, описывающее молекулярную подсистему, имеет вид

$$\left(-\frac{\hbar^2}{m} \frac{1}{f_3(x)} \frac{d}{dx} f_4(x) \frac{d}{dx} + \tilde{V}^M(x) - \tilde{\varepsilon} \right) \phi(x) = 0. \quad (2)$$

Предполагается, что молекулярная подсистема имеет дискретный спектр, состоящий из конечного числа n связанных состояний с собственными функциями $\phi_j(x)$, $j = 1, n$, и собственными значениями $\tilde{\varepsilon}_j = -|\tilde{\varepsilon}_j|$, и непрерывный спектр собственных значений $\tilde{\varepsilon} \geq 0$ с соответствующими собственными функциями $\phi_{\tilde{\varepsilon}}(x)$.

Асимптотические краевые условия, налагаемые на решения двумерной краевой задачи s -волновым приближением $\Psi(y, x) = \{\Psi_j(y, x)\}_{j=1}^{N_o}$ в асимптотической области $\Omega_j^{as} = \{(x, y) ||x|/|y| \ll 1\}$, описывающей движение молекулы (ниже порога диссоциации $\tilde{E} < 0$) в направлении $v = \rightarrow$, имеют вид [9]:

$$\begin{aligned} \Psi_j(y \rightarrow -\infty, x) &\rightarrow \phi_j(x) \frac{\exp(ip_j y)}{\sqrt{p_j f_2(y)}} + \sum_{l=1}^{N_o} \phi_l(x) \frac{\exp(-ip_l y)}{\sqrt{p_l f_2(y)}} R_{lj}, \\ \Psi_j(y \rightarrow +\infty, x) &\rightarrow \sum_{l=1}^{N_o} \phi_l(x) \frac{\exp(ip_l y)}{\sqrt{p_l f_2(y)}} T_{lj}, \quad \Psi_j(y, x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0, \end{aligned} \quad (3)$$

где $f_1(y) = f_2(y) = 1$, $R_{lj}(\tilde{E})$ и $T_{lj}(\tilde{E})$ — амплитуды отражения и прохождения, $N_o \leq n$ — число открытых каналов, $p_i = \sqrt{(m/\hbar^2)(\tilde{E} - \tilde{\varepsilon}_i)} > 0$ — волновое число, $\phi_j(x)$ и $\varepsilon_j < 0$ при $j = 1, n$ — собственные функции и собственные значения краевой задачи (2).

Решение уравнения (1) ищем в виде разложения Галёркина

$$\Psi_{i_o}(y, x) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \phi_j(x) \chi_{ji_o}(y). \quad (4)$$

Здесь $\chi_{ji_o}(y)$ — неизвестные функции и $\phi_j(x)$ — ортонормированные базисные функции, определяемые как собственные функции краевой задачи для уравнения

$$\left(-\frac{1}{f_3(x)} \frac{d}{dx} f_4(x) \frac{d}{dx} + V^M(x) - \varepsilon_j \right) \phi_j(x) = 0, \quad (5)$$

на интервале $0 \leq x \leq x_{\max}$ с краевыми условиями и условиями нормировки и ортогональности

$$\phi_j(0) = \phi_j(x_{\max}) = 0, \quad \int_0^{x_{\max}} f_3(x) dx \phi_i(x) \phi_j(x) = \delta_{ij}, \quad (6)$$

где $f_3(x) = f_4(x) = 1$, $V(x) = (m/\hbar^2)\tilde{V}(x)$, $\varepsilon_j = (m/\hbar^2)\tilde{\varepsilon}_j$.

С помощью программы ODPEVP численного решения краевых задач методом конечных элементов [10] вычисляем набор n связанных состояний, состоящий из собственных функций $\phi_j(x)$ и собственных значений ε_j , $j = 1, n$, и требуемый набор псевдосостояний, состоящий из собственных функций $\phi_j(x)$ и собственных значений $\varepsilon_j \geq 0$, $j = n + 1, j_{\max}$. Набор псевдосостояний аппроксимирует набор собственных решений непрерывного спектра $\varepsilon \geq 0$ краевой задачи для уравнения (2). Система связанных уравнений в форме Галёркина имеет вид

$$\left[-\frac{1}{f_1(y)} \frac{d}{dy} f_2(y) \frac{d}{dy} + \varepsilon_i - E \right] \chi_{ii_o}(y) + \sum_{j=1}^{j_{\max}} V_{ij}^b(y) \chi_{ji_o}(y) = 0, \quad (7)$$

где эффективные потенциалы $V_{ij}(y)$ даются интегралами

$$V_{ij}^b(y) = \int_0^{x_{\max}} f_1(x) dx \phi_i(x) \left(V^b \left(\frac{x+y}{2} \right) + V^b \left(\frac{x-y}{2} \right) \right) \phi_j(x). \quad (8)$$

В результате задача рассеяния (1)–(2) с асимптотическими условиями (3) сведена к краевой задаче для системы связанных уравнений в форме Галёркина (7) для $f_1(y) = f_2(y) = 1$ с краевыми условиями при $y = y_{\min}$ и $y = y_{\max}$ [8, 11]:

$$\left. \frac{d\mathbf{F}(y)}{dy} \right|_{y=y_t} = \mathcal{R}(y_t) \mathbf{F}(y_t), \quad t = \min, \max. \quad (9)$$

Здесь $\mathcal{R}(y_{\min})$ и $\mathcal{R}(y_{\max})$ – симметричные матрицы размерностью $j_{\max} \times j_{\max}$, зависящие от энергии E , $\mathbf{F}(y) = \{\chi_{i_o}(y)\}_{i_o=1}^{N_o} = \{\{\chi_{j i_o}(y)\}_{j=1}^{j_{\max}}\}_{i_o=1}^{N_o}$ – искомая матрица решений размерностью $j_{\max} \times N_o$, где $N_o = \max_{E \geq \varepsilon_j} j \leq j_{\max}$ – число от-

крытых каналов. Эти матрицы и матрицы амплитуд отражения и прохождения \mathbf{R} и \mathbf{T} размерностью $N_o \times N_o$ вычисляются с заданной точностью с помощью программы KANTBP 3.0 [12], реализующей метод конечных элементов [13].

В качестве потенциала взаимодействия $\tilde{V}^M(x)$ был выбран потенциал Морзе

$$\tilde{V}^M(x) = D \{ \exp[-2(x - \hat{x}_{eq})\hat{\rho}] - 2 \exp[-(x - \hat{x}_{eq})\hat{\rho}] \}. \quad (10)$$

Решения дискретного спектра краевой задачи (5)–(6) с потенциалом (10), с требуемой точностью ($< 10^{-10}$ при выбранных значениях параметров) аппроксимируются известным спектром краевой задачи для уравнения (2):

$$\tilde{\varepsilon}_j = -D \left[1 - \zeta(j - 1/2) \right]^2, \quad j = 1, \dots, n = \left[\zeta^{-1} + \frac{1}{2} \right]. \quad (11)$$

Собственные функции дискретного спектра $\phi_j(x)$ (5)–(6) аппроксимируются решениями $\tilde{\phi}_j(\zeta)$ уравнения (2) по новой переменной ζ :

$$\frac{d^2 \tilde{\phi}_j(\zeta)}{d\zeta^2} + \frac{1}{\zeta} \frac{d\tilde{\phi}_j(\zeta)}{d\zeta} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{j + s_j - 1/2}{\zeta} - \frac{s_j^2}{\zeta^2} \right) \tilde{\phi}_j(\zeta) = 0,$$

где $s_j = \sqrt{-\varepsilon_j}/\hat{\rho} = \sqrt{\hat{D}}/\hat{\rho} - j + 1/2$ и $\zeta = 2\sqrt{\hat{D}} \exp[-(x - \hat{x}_{eq})\hat{\rho}]/\hat{\rho}$, при $\zeta \in (0, +\infty)$ соответствуют расширенному интервалу до всей оси $x \in (-\infty, +\infty)$ и имеют вид

$$\tilde{\phi}_j(\zeta) = N_j \exp\left(-\frac{\zeta}{2}\right) \zeta^{s_j} {}_1F_1(1-j, 2s_j+1, \zeta), \quad N_j^2 = \frac{\hat{\rho} \Gamma(2s_j+j)}{(j-1)! \Gamma(2s_j) \Gamma(2s_j+1)}. \quad (12)$$

Набор псевдосостояний с собственными функциями $\phi_j(x)$ и собственными значениями $\varepsilon_j \geq 0$, $j = \overline{n+1, j_{\max}}$, аппроксимируется набором решений непрерывного спектра $\tilde{\phi}_k(\zeta)$ при фиксированных $k = \sqrt{\varepsilon} > 0$ уравнения (2) по новой переменной ζ :

$$\frac{d^2 \tilde{\phi}_k(\zeta)}{d\zeta^2} + \frac{1}{\zeta} \frac{d\tilde{\phi}_k(\zeta)}{d\zeta} + \left(-\frac{1}{4} + \frac{\sqrt{\hat{D}}/\hat{\rho}}{\zeta} + \frac{s_k^2}{\zeta^2} \right) \tilde{\phi}_k(\zeta) = 0.$$

При фиксированном $s_k = \frac{k}{\hat{\rho}}$ эти решения имеют вид

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}_k(\zeta) = \frac{N_k \exp(-\zeta/2)}{2i} & \left(\exp(iw)\zeta^{-ik/\hat{\rho}} {}_1F_1 \left(-\frac{\sqrt{D}}{\hat{\rho}} + \frac{1}{2} - \frac{ik}{\hat{\rho}}, 1 - \frac{2ik}{\hat{\rho}}, \zeta \right) - \right. \\ & \left. - \exp(-iw)\zeta^{ik/\hat{\rho}} {}_1F_1 \left(-\frac{\sqrt{D}}{\hat{\rho}} + \frac{1}{2} + \frac{ik}{\hat{\rho}}, 1 + \frac{2ik}{\hat{\rho}}, \zeta \right) \right), \quad (13) \\ w = \arg \left(\Gamma \left(1 + \frac{2ik}{\hat{\rho}} \right) \right) & + \arg \left(\Gamma \left(-\frac{\sqrt{D}}{\hat{\rho}} + \frac{1}{2} - \frac{ik}{\hat{\rho}} \right) \right). \end{aligned}$$

Асимптотически $\tilde{\phi}_k^{as}(x \rightarrow \infty) = \sin(kx + \delta(k))$, $\delta(k) = -kx_{eq} - s_k \ln(2\sqrt{\hat{D}}/\hat{\rho}) + w$ соответствует фазе рассеяния.

Для тестовых вычислений использовались следующие параметры для молекулы Be_2 : приведённая масса $\mu = m/2 = 4,506\text{Da}$, среднее расстояние между ядрами $2,47\text{\AA}$, частота вибрационных колебаний молекулы в температурных единицах $\hbar\omega = 398,72\text{K}$, основное состояние молекулы ${}^1\Sigma_u^+$, волновое число $277,124\text{cm}^{-1}$ для наблюдаемых переходов из возбуждённого в основное состояние (использовано соотношение $1\text{K} = 0,69503476\text{cm}^{-1}$ из [14]). Зная средние размеры молекулы и учитывая расстояния между уровнями энергии, параметризуем молекулярный потенциал, фитируя наблюдаемые величины: $D = 1280\text{K}$, $\hat{x}_{eq} = 2,47\text{\AA}$, $\hat{\rho} = 2,968\text{\AA}^{-1}$ определяется из условия $(\tilde{\varepsilon}_2 - \tilde{\varepsilon}_1)/(2\pi\hbar c) = 277,124\text{cm}^{-1}$, $\zeta = \hat{\rho}\hbar/\sqrt{mD} = 0,193$ — безразмерный параметр задачи, и $\hat{D} = (\sqrt{mD}/\hbar)^2 = (\hat{\rho}/0,193)^2 = (2,968\text{\AA}^{-1}/0,193)^2 = 236,5\text{\AA}^{-2}$. Согласно (11) энергия основного состояния молекулы Be_2 равна $-\tilde{\varepsilon}_1 = -1044,88\text{K}$.

Поскольку химическая связь в молекуле Be_2 — ван-дер-вальсовского типа, то можно рассматривать каждый составляющий атом как независимо взаимодействующий с внешним барьерным потенциалом. Барьерный потенциал был выбран так, что его высота и ширина соответствует типичным барьерам в реальной кристаллической решётки. Более того, этот потенциал должен быть гладкой функцией, имеющей вторую производную, чтобы было можно применять высокоточные численные методы, такие как метод Нумерова или метод конечных элементов, при решении краевых задач для систем обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Барьерный отталкивающий потенциал был выбран в гауссовской форме:

$$\tilde{V}^b(x_i) = \tilde{V}_0 \exp\left(-\frac{x_i^2}{2\sigma}\right), \quad V^b(x_i) = \frac{m}{\hbar^2} \tilde{V}^b(x_i) = \hat{D} \exp\left(-\frac{x_i^2}{2\sigma}\right). \quad (14)$$

Здесь $\tilde{V}_0 = 1280\text{K}$, $\hat{D} = 236,510003758401\text{\AA}^{-2} = (m/\hbar^2)\tilde{V}_0$, $\sigma = 5,23 \cdot 10^{-2}\text{\AA}^2$ определялись из требования, чтобы ширина отталкивающего потенциала при кинетической энергии, равной энергии основного состояния молекулы, равнялась 1\AA , так что среднее расстояние $2,47\text{\AA}$ между атомами молекулы Be было бы меньше, чем расстояние $2,56\text{\AA}$ между атомами Cu atoms в плоскости (111) ячейки кристаллической решётки. Высота потенциального барьера \tilde{V}_0 порядка 200meV оценивалась, следуя экспериментально наблюдаемой квантовой диффузии атомов водорода на поверхности меди [15].

На рис. 1 показаны графики гауссовского барьера и потенциала Морзе в \AA^{-2} .

На рис. 2 представлены сечения полной потенциальной энергии, вычисленные собственные функции краевой задачи (5) и эффективные потенциалы $V_{ij}(y)$ из уравнения (8).



Рис. 1. Гауссов барьер $V^b(x_i) = \hat{D} \exp\left(-\frac{x_i^2}{2\sigma}\right)$,
 $\hat{D} = 236,510003758401 \text{ \AA}^{-2} = (m/\hbar^2)\tilde{V}_0 = (m/\hbar^2)D$, $\tilde{V}_0 = D = 1280 \text{ К}$, $\sigma = 5,23 \cdot 10^{-2} \text{ \AA}^2$
и двухчастичный потенциал взаимодействия
 $V^M(x) = \hat{D}\{\exp[-2(x - \hat{x}_{eq})\hat{\rho}] - 2\exp[-(x - \hat{x}_{eq})\hat{\rho}]\}$, $\hat{x}_{eq} = 2,47 \text{ \AA}$,
 $\hat{\rho} = 2,96812423381643 \text{ \AA}^{-1}$

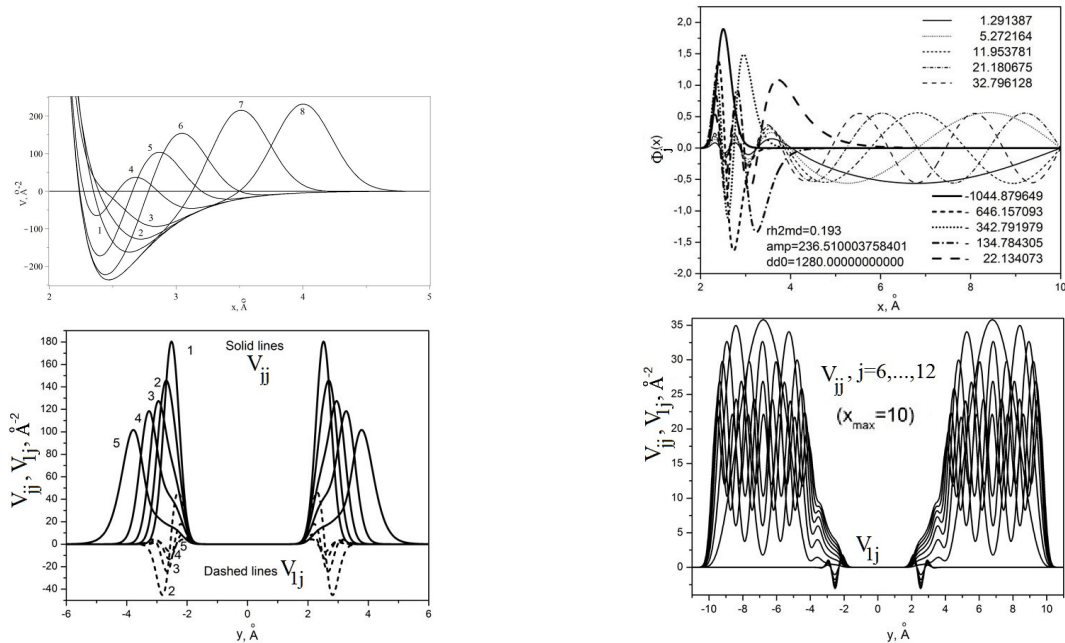


Рис. 2. Сечения полной потенциальной энергии $V(y; x) = V^M(x) + V^b(y; x)$ при $y = 2, 2; 2, 3; 2, 4; 2, 6; 2, 8; 3; 3, 5; 4$ (соответствующие кривые пронумерованы 1, ..., 8). Волновые функции $\phi_j(r)$ связанных состояний $j = 1, 5$ (непрерывные линии) и псевдосостояний $j = 6, \dots, 12$ (штриховые линии) (соответствующие собственные значения энергии даны в К). Матричные элементы $V_{jj}(y)$ (сплошные линии) и $V_{j1}(y)$ (штриховые линии)

Заметим, что волновые функции $\phi_j(x)$ и собственные значения ε_j связанных состояний $j = 1, 5$ (непрерывные линии) аппроксимируют известные аналитические результаты краевой задачи для уравнения (2) с потенциалом Морзе (10) с четырьмя и семью значащими цифрами соответственно. Эти состояния локализованы в потенциальной яме, тогда как волновые функции псевдосостояний $j = 6, \dots, 12$ аппроксимируются примерно с той же точностью, но локализованы вне потенциальной ямы. Из рисунка видно, что матричные элементы между связанными состояниями локализованы в окрестности барьеров, а матричные элементы между псевдосостояниями локализованы вне барьеров. Матричные элементы между связанными и псевдосостояниями малы. Решения краевой задачи

(5), (6) вычислялись с помощью фортрановской программы ODPEVP [10] на конечно-элементной сетке $\Omega_x = \{0(N_{elem} = 800)12\}$ с $N_{elem} = 800$ лагранжевыми элементами четвёртого порядка $p = 4$.

3. Модель Б. Редукция краевой задачи методом Канторовича

Используя замену переменных $x = \rho \sin \varphi$, $y = \rho \cos \varphi$, перепишем уравнение (1) в полярных координатах (ρ, φ) $\Omega_{\rho, \varphi} = (\rho \in (0, \infty), \varphi \in [0, \pi])$

$$\left(-\frac{1}{\rho} \frac{\partial}{\partial \rho} \rho \frac{\partial}{\partial \rho} - \frac{1}{\rho^2} \frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + V(\rho, \varphi) - E \right) \Psi(\rho, \varphi) = 0, \quad (15)$$

где потенциальная функция $V(\rho, \varphi) = V^M(\rho, \varphi) + V^b(\rho, \varphi)$ даётся формулой в терминах потенциалов (10) и (14)

$$V^M(\rho, \varphi) = V(\rho \sin \varphi), \quad V^b(\rho, \varphi) = V^b \left(\rho \frac{\sin(\varphi + \pi/4)}{\sqrt{2}} \right) + V^b \left(\rho \frac{\sin(\varphi - \pi/4)}{\sqrt{2}} \right). \quad (16)$$

Сечения потенциальной функции $V(\rho, \varphi)$ при наборе значений медленной переменной ρ показаны на рис. 3. Заметим, что при больших ρ ширина потенциальных ям убывает с ростом ρ . Следовательно, при больших ρ потенциал задачи двух центров, симметричный по отношению $\varphi = \pi/2$, трансформируется в пару одноцентровых потенциалов Морзе.

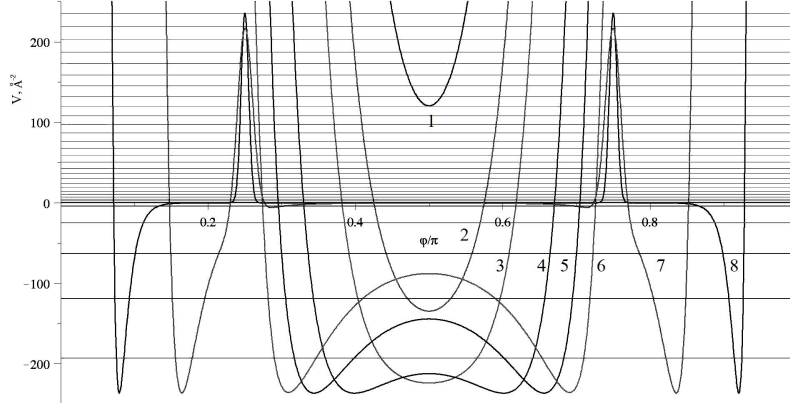


Рис. 3. Сечения полной потенциальной энергии $V(\rho; \varphi) = V^M(\rho; \varphi) + V^b(\rho; \varphi)$ в полярных координатах при $\rho = 2, 2, 2, 3, 2, 4, 2, 6, 2, 8, 3, 5, 10$ (соответствующие кривые обозначены номерами 1, ..., 8). Горизонтальные линии — энергии уровней $\varepsilon(\rho)/\rho^2$ (в Å^{-2}) при $\rho = 10$

Асимптотические краевые условия наложенные на искомое решение двумерной модели в s -волновом приближении $\Psi(\rho, \varphi) = \{\Psi_j(\rho, \varphi)\}_{j=1}^{N_o}$ в асимптотической области $\Omega_j^{as} = \{(\varphi, \rho) | \varphi/\rho \ll 1\}$ записываются в виде

$$\Psi(\rho, \varphi, \varphi_0) = \sum_{i_o=1}^{N_o} \Psi_{j i_o}(\rho, \varphi) \phi_{i_o}(-\varphi_0; \rho \rightarrow +\infty), \quad (17)$$

$$\Psi_{i_o}(\rho \rightarrow +\infty, \varphi) \rightarrow \sqrt{\frac{2}{\pi}} \sum_{j=1}^{N_o} \phi_j(\varphi; \rho) [\chi_{j i_o}^*(\rho) \delta_{j i_o} - \chi_{j i_o}(\rho) S_{j i_o}(E)], \quad (18)$$

$$\Psi_{i_o}(\rho, \phi \rightarrow 0) \rightarrow 0, \quad \Psi_{i_o}(\rho, \phi \rightarrow \pi) \rightarrow 0, \quad \chi_{j i_o}(\rho) = \frac{\exp(i(p_j \rho - \frac{\pi}{4}))}{2\sqrt{p_j \rho}},$$

где угловая переменная φ_0 определяет направление падающей волны, в частности, $\varphi_0 = 0$ соответствует $v \Rightarrow$ и $\varphi_0 = \pi$ соответствует $v \Leftarrow$. $S_{j i_o}(E)$ — элементы **S**-матрицы размерностью $N_o \times N_o$, N_o — число открытых каналов, $p_i = \sqrt{(m/\hbar^2)(\tilde{E} - \tilde{\varepsilon}_i^0)} > 0$ — волновое число. Ниже порога диссоциации $\tilde{E} < 0$, $\phi_i(\varphi, \rho \rightarrow +\infty) = \sqrt{\rho} \phi_i(x)$, и $\varepsilon_i(\rho \rightarrow \infty)/\rho^2 = \varepsilon_i^{(0)} < 0$ — собственные функции, локализованы в асимптотических областях Ω_j^{as} .

Решение уравнения (15) ищем в виде разложения Канторовича

$$\Psi_{i_o}(\rho, \varphi) = \sum_{j=1}^{j_{\max}} \phi_j(\varphi; \rho) \chi_{j i_o}(\rho). \quad (19)$$

Здесь $\chi_{j i_o}(\rho)$ — неизвестные функции и $\phi_j(\varphi; \rho)$ — ортонормированные базисные функции на интервале $\varphi \in [0, \pi]$ определяются как собственные функции краевой задачи для уравнения

$$\left(-\frac{d^2}{d\varphi^2} + \rho^2 V^M(\rho \sin \varphi) - \varepsilon_j(\rho) \right) \phi_j(\varphi; \rho) = 0, \quad (20)$$

подчинённые краевым условиям первого рода и условиям ортогональности и нормировки

$$\phi_j(0; \rho) = \phi_j(\pi; \rho) = 0, \quad \int_0^\pi d\varphi \phi_i(\varphi; \rho) \phi_j(\varphi; \rho) = \delta_{ij}. \quad (21)$$

Собственные функции $\phi_j(\varphi; \rho)$, $j = 1, 20$ показаны на рис. 4 при $\rho = 3$ и $\rho = 10$. Учитывая упомянутую симметрию потенциала $V(\varphi, \rho) = V(\pi - \varphi, \rho)$, набор собственных функций расщепляется на два поднабора, именно, чётные $\phi_j^{\sigma=1}(\varphi; \rho)$ и нечётные $\phi_j^{\sigma=-1}(\varphi; \rho)$ функции.

Чётные и нечётные решения вычислялись с помощью фортрановской программы ODREVP [10] на конечноэлементных сетках, выбираемых в зависимости от значения параметра $\varphi_3 = (8 + \hat{\rho} \hat{x}_{eq})/(\hat{\rho} \rho) > \pi/4$. Если $\varphi_3 > \pi/4$, то использовалась равномерная сетка $\Omega_\varphi = \{\varphi_1(N_{elem} = 3200)\pi/2\}$, иначе использовалась квазиравномерная сетка $\Omega_\varphi = \{\varphi_1(N_{elem} = 1200)\varphi_2(N_{elem} = 240)\varphi_4(N_{elem} = 160)\varphi_5(N_{elem} = 400)\pi/2\}$. Здесь значения угловой переменной $\varphi_1 = (-3 + \hat{\rho} \hat{x}_{eq})/(\hat{\rho} \rho)$ и $\varphi_2 = (4 + \hat{\rho} \hat{x}_{eq})/(\hat{\rho} \rho)$ определяются левой и правой границами потенциальной ямы (16), а значения $\varphi_4 = \pi/4 - 4\sqrt{\sigma}/\rho$ и $\varphi_5 = \pi/4 + 4\sqrt{\sigma}/\rho$ — левой и правой границами потенциального барьера (16).

Система связанных самосопряжённых уравнений в форме Канторовича имеет вид

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{\varepsilon_i(\rho)}{\rho^2} - E \right] \chi_{i i_o}(\rho) + \sum_{j=1}^{j_{\max}} W_{ij}(\rho) \chi_{j i_o}(\rho) = 0, \quad (22)$$

где матричный оператор $W_{ij}(\rho)$ даётся выражением

$$W_{ij}(\rho) = V_{ij}^b(\rho) + H_{ji}(\rho) + \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho Q_{ji}(\rho) + Q_{ji}(\rho) \frac{d}{d\rho}. \quad (23)$$

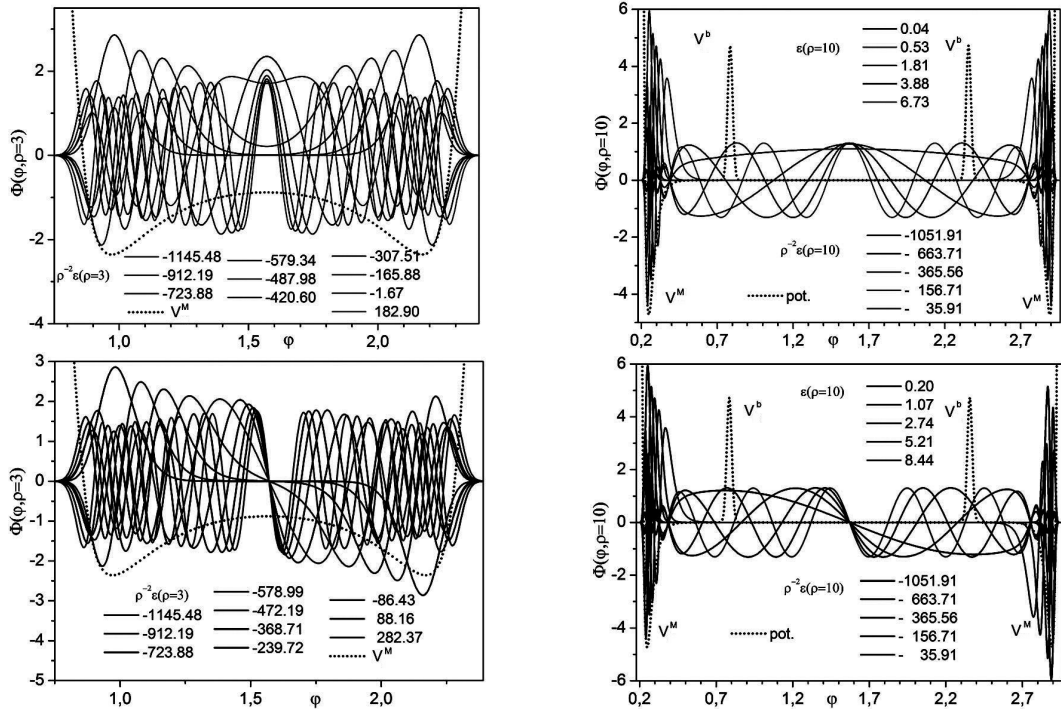


Рис. 4. Чётные и нечётные собственные функции параметрической задачи на собственные значения для быстрой подсистемы при $\rho = 3$ и $\rho = 10$ (соответствующие собственные значения энергии даны в К)

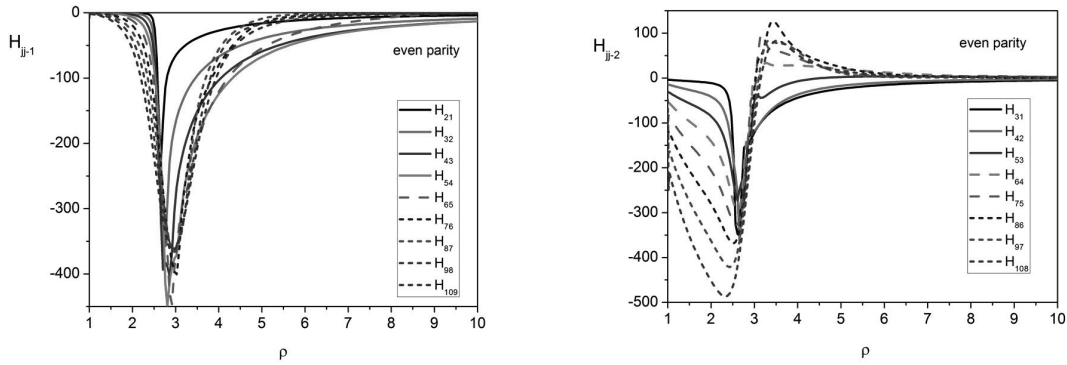


Рис. 5. Чётные эффективные потенциалы $H_{ij}(\rho)$ в зависимости от ρ (Å)

Потенциальные кривые (термы) $\varepsilon_j(\rho)$ (см. рис. 6) и эффективные потенциалы $Q_{ij}(\rho) = -Q_{ji}(\rho)$, $H_{ij}(\rho) = H_{ji}(\rho)$ и $V_{ij}^b(\rho)$ (см. рис. 7–8) даются интегралами

$$Q_{ij}(\rho) = - \int_0^\pi d\varphi \phi_i(\varphi; \rho) \frac{d\phi_j(\varphi; \rho)}{d\rho}, \quad H_{ij}(\rho) = \int_0^\pi d\varphi \frac{d\phi_i(\varphi; \rho)}{d\rho} \frac{d\phi_j(\varphi; \rho)}{d\rho}, \quad (24)$$

$$V_{ij}^b(\rho) = \int_0^\pi d\varphi \phi_i(\varphi; \rho) \left(V^b \left(\rho \frac{\sin(\varphi + \pi/4)}{\sqrt{2}} \right) + V^b \left(\rho \frac{\sin(\varphi - \pi/4)}{\sqrt{2}} \right) \right) \phi_j(\varphi; \rho).$$

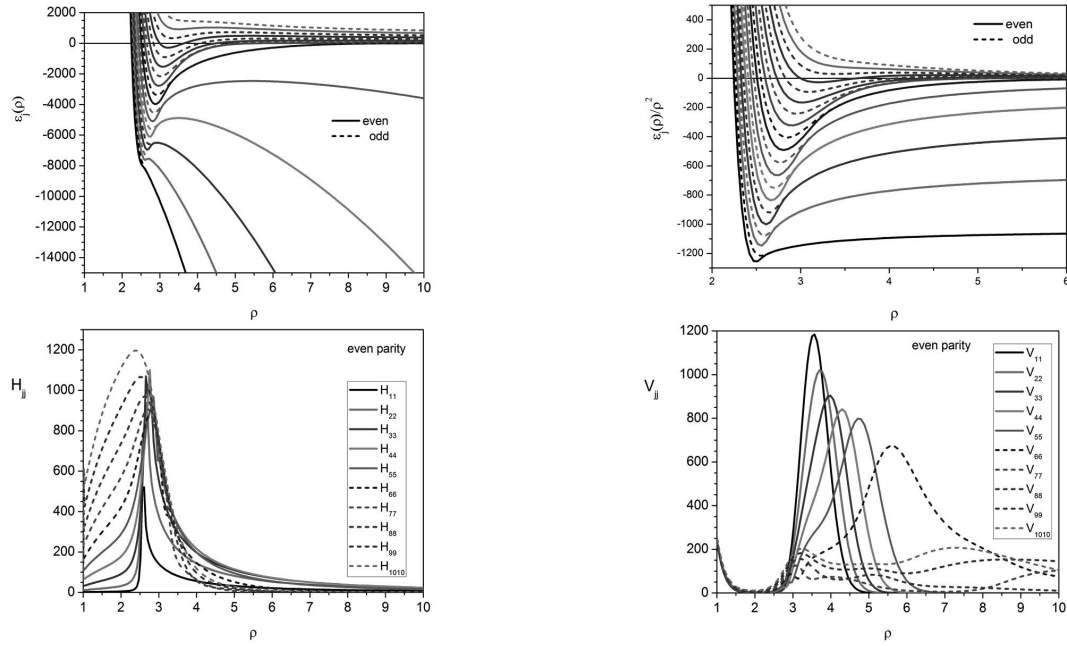


Рис. 6. Потенциальные кривые $\varepsilon_j(\rho)$ и чётные диагональные эффективные потенциалы $H_{jj}(\rho)$ и $V_{jj}^b(\rho)$ в зависимости от ρ (Å)

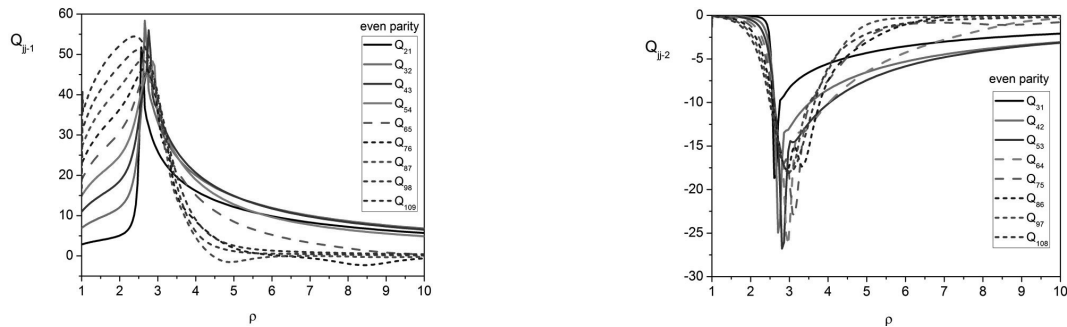


Рис. 7. Чётные эффективные потенциалы $Q_{ij}(\rho)$ в зависимости от ρ (Å)

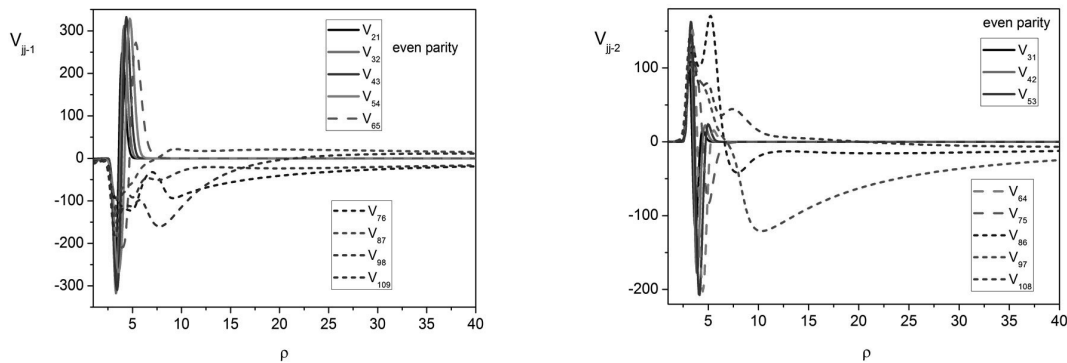


Рис. 8. Чётные эффективные потенциалы $V_{ij}(\rho)$ в зависимости от ρ (Å)

Линейные комбинации $\phi_j^{\rightarrow\leftarrow}(\varphi; \rho) = (\phi_j^{\sigma=1}(\varphi; \rho) \pm \phi_j^{\sigma=-1}(\varphi; \rho))/\sqrt{2}$ при больших ρ имеют максимумы в окрестности $\varphi = 0$ и $\varphi = \pi$ соответственно, так что

они соответствуют функциям, представленным на рис. 2. Учитывая это свойство, имеем выражения [16]

$$\check{\mathbf{T}} = (-\check{\mathbf{S}}_{+1} + \check{\mathbf{S}}_{-1})/2, \quad \check{\mathbf{R}} = (-\check{\mathbf{S}}_{+1} - \check{\mathbf{S}}_{-1})/2, \quad (25)$$

которые связывают чётные $\check{\mathbf{S}}_{+1}$ и нечётные $\check{\mathbf{S}}_{-1}$ элементы матрицы $\check{\mathbf{S}} = e^{i\pi/4} \mathbf{S} e^{i\pi/4}$ из уравнения (18) с элементами матриц амплитудами прохождения $\check{\mathbf{T}}$ и отражения $\check{\mathbf{R}}$ из асимптотик искомого решения (3).

Таким образом, задача рассеяния для уравнения (15) с асимптотическими краевыми условиями (18) сведена к краевой задаче для системы связанных уравнений в форме Канторовича (17) с краевыми условиями при $\rho = \rho_{\min}$ и $\rho = \rho_{\max}$ [11]:

$$\left. \frac{d\mathbf{F}(\rho)}{d\rho} \right|_{\rho=\rho_t} = (\mathcal{R}(\rho_t) + \mathbf{Q}(\rho_t))\mathbf{F}(\rho_t), \quad t = \min, \max \quad (26)$$

где $\mathcal{R}(\rho)$ — неизвестная $j_{\max} \times j_{\max}$ симметричная матричная функция, $\mathbf{F}(\rho) = \{\chi_{i_o}(\rho)\}_{i_o=1}^{N_o} = \{\{\chi_{j i_o}(\rho)\}_{j=1}^{j_{\max}}\}_{i_o=1}^{N_o}$ — искомое матричное решение размерностью $j_{\max} \times N_o$ вычислялись, используя фортрановскую программу KANTBP 3.0 [12].

4. Асимптотики эффективных потенциалов и решений

Алгоритм 1. При больших ρ ширина потенциальной ямы убывает с ростом ρ (см. рис. 3). Этот факт позволяет линеаризовать аргумент $\rho \sin \varphi - \hat{x}_{eq} \rightarrow \rho(\varphi - \arcsin(\hat{x}_{eq}/\rho))$ при $|x - \hat{x}_{eq}|/\rho \ll 1$ в выражении потенциальной функции $V^M(\rho \sin \varphi)$ и переписать уравнение (20) на интервале $\varphi = (0, \pi)$ в виде

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial \varphi^2} + \rho^2 V^M(\rho(\varphi - \arcsin(\hat{x}_{eq}/\rho))) - \varepsilon_j(\rho) \right) \phi_j(\varphi; \rho) = 0. \quad (27)$$

Это уравнение по форме совпадает уравнением (5), (10), учитывая переобозначения

$$\hat{D} \rightarrow \hat{D}\rho^2, \quad \hat{\rho} \rightarrow \hat{\rho}\rho, \quad \hat{x}_{eq} \rightarrow \arcsin(\hat{x}_{eq}/\rho). \quad (28)$$

В результате получаем приближенные собственные значения $\varepsilon_j(\rho)$, которые зависят от ρ как от параметра,

$$\varepsilon_j(\rho) = \rho^2 \varepsilon_j^{(0)}, \quad \varepsilon_j^{(0)} = -\hat{D} \left[1 - \frac{\hat{\rho}(j - \frac{1}{2})}{\sqrt{\hat{D}}} \right]^2, \quad j = 1, \dots, n = \left\lfloor \frac{\sqrt{\hat{D}}}{\hat{\rho}} + \frac{1}{2} \right\rfloor. \quad (29)$$

Эти собственные значения имеют правильное асимптотическое поведение $\tilde{\varepsilon}_j(\rho)/\rho^2 = \tilde{\varepsilon}_j$, описывающее нижнюю часть дискретного спектра задачи (2). В рассмотренном случае они соответствуют первым пяти ($j = 1, \dots, 5$) собственным значениям $\tilde{\varepsilon}_1, \dots, \tilde{\varepsilon}_5$. Соответствующие собственные функции $\phi_j(\varphi; \rho)$ при $j = 1, \dots, n$, параметрически зависящие от медленной переменной ρ через новую независимую переменную $\zeta = \zeta(\varphi; \rho) = 2\rho\sqrt{\hat{D}} \exp[-\hat{\rho}\rho(\varphi - \arcsin(\hat{x}_{eq}/\rho))]/\hat{\rho}$, $\zeta \in [0, +\infty)$ принимают вид

$$\tilde{\phi}_j(\zeta; \rho) = N_j(\rho) \exp\left(-\frac{\zeta}{2}\right) \zeta^{s_j} {}_1F_1(1-j, 2s_j+1, \zeta), \quad N_j^2(\rho) = \frac{\rho \hat{\rho} \Gamma(2s_j+j)}{(j-1)! \Gamma(2s_j) \Gamma(2s_j+1)},$$

где $s_j = \sqrt{\hat{D}}/\hat{\rho} - j + 1/2$ — положительный параметр. В рассмотренном случае волновая функция вне потенциальной ямы при $|x - \hat{x}_{eq}|/\rho \gg 1$ экспоненциально убывает. Этот факт позволяет интегрировать произведения функций $\tilde{\phi}_j(\zeta(\varphi; \rho); \rho)$

и/или $\partial \tilde{\phi}_j(\zeta(\varphi; \rho); \rho) / \partial \rho|_{\phi=\text{const}}$ по переменной ζ на полубесконечном интервале $\zeta \in (0, +\infty)$. Вычисленные собственные функции при $\rho = 10$ для $j = 1, \dots, 5$, показанные на рис. 4, также локализованы в потенциальной яме, что и функции связанных состояний, приведённые на рис. 2. Матричные элементы между состояниями нижней части дискретного спектра $i, j = 1, \dots, n = 5$ с собственными значениями $\varepsilon_j(\rho)/\rho^2 \approx \varepsilon_j^{(0)}$ представимы в виде асимптотических разложений по обратным степеням ρ :

$$\varepsilon_j(\rho) = \varepsilon_j^{(0)} \rho^2 + \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{\varepsilon_j^{(2k)}}{\rho^{2k}}, \quad (30)$$

$$Q_{ij}(\rho) = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{Q_{ij}^{(2k-1)}}{\rho^{2k-1}}, \quad H_{ij}(\rho) = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{H_{ij}^{(2k)}}{\rho^{2k}}, \quad V_{ij}(\rho) = O(\exp(-\rho))$$

и вычисляются до требуемого порядка k_{\max} согласно приведённому алгоритму, реализованному в системе компьютерной алгебры MAPLE. Например, вычисленные коэффициенты $Q_{ij}^{(1)}$ и $H_{ij}^{(2)}$ разложений (30) представлены в табл. 1. Там же для сравнения приведены численные значения матричных элементов $Q_{ij}(\rho)$ и $H_{ij}(\rho)$ при $\rho = 100$.

Таблица 1

Вычисленные коэффициенты $Q_{ij}^{(1)}$ $H_{ij}^{(2)}$ асимптотических разложений (30) (верхние строки) (в \AA^{-2}) и соответствующие численные значения Q_{ij} и H_{ij} при $\rho = 100$ (нижние строки)

$Q_{ij}^{(1)}$	1	2	3	4	5
1	0	10,320087	-3,817896	1,831702	-0,903311
Q_{ij}	0	0,10 322049	-0,03 818264	0,01 831845	-0,00 903906
2	-10,32008759	0	12,24187273	-5,544019175	2,689862642
Q_{ij}	-0,10 322049	0	0,12 245108	-0,05 545224	0,02 691957
3	3,817896	-12,241872	0	11,509603	-5,307448
Q_{ij}	0,03 818264	-0,12 245108	0	0,11 514688	-0,05 312602
4	-1,831702	5,544019	11,509603	0	7,994372
Q_{ij}	-0,01 831845	0,05 545224	0,11 514688	0	0,08 004568
5	0,903311	-2,689862	5,307448	-7,994372	0
Q_{ij}	0,00 903906	-0,02 691957	0,05 312602	-0,08 004571	0
$H_{ij}^{(2)}$	1	2	3	4	5
1	127,980	-67,281	-85,381	73,391	-44,488
H_{ij}	0,0128 021	-0,0067 296	-0,0085 433	0,0073 436	-0,0044 545
2	-67,281	317,555	-161,486	-40,519	46,871
H_{ij}	-0,0067 296	0,0317 675	-0,0161 528	-0,0040 598	0,0046 971
3	-85,381	-161,486	408,505	-231,090	45,251
H_{ij}	-0,0085 433	-0,0161 528	0,0408 705	-0,0231 186	0,0045 224
4	73,391	-40,519	-231,090	385,918	-215,798
H_{ij}	0,0073 436	-0,0040 598	-0,0231 186	0,0386 221	-0,0216 076
5	-44,488	46,871	45,251	-215,798	223,510
H_{ij}	-0,0044 545	0,0046 971	0,0045 224	-0,0216 076	0,0224 050

Видно, что первые ненулевые коэффициенты этих разложений дают аппроксимацию численных значений матричных элементов с тремя значащими цифрами.

Коэффициенты $\varepsilon_j^{(0)}$, $\varepsilon_j^{(2)}$, $Q_{ij}^{(1)}$, $Q_{ij}^{(3)}$, $H_{ij}^{(2)}$ и $H_{ij}^{(4)}$ разложений (30), вычисленные с помощью интерполяции численных значений $\varepsilon_j(\rho)$, $Q_{ij}(\rho)$, $H_{ij}(\rho)$ при $\rho = 50, 100, 200$, представлены в табл. 2.

Таблица 2

Коэффициенты $Q_{ij}^{(1)}$, $H_{ij}^{(2)}$, $\varepsilon_j^{(0)}$ (верхние строки) и $Q_{ij}^{(3)}$, $H_{ij}^{(4)}$, $\varepsilon_j^{(2)}$ (нижние строки) (в \AA^{-2}), вычисленные с помощью интерполяции численных значений $Q_{ij}(\rho)$, $H_{ij}(\rho)$, $\varepsilon_j(\rho)$ при $\rho = 50, 100, 200$

$Q_{ij}^{(1)}$					
$Q_{ij}^{(3)}$	1	2	3	4	5
1	0	-10,32008	3,81789	-1,83170	0,90330
	0	-19,61136	3,63249	-1,59581	6,37175
2	10,32008	0	-12,24187	5,54401	-2,68984
	19,61136	0	-32,23030	12,57078	-22,23888
3	-3,81789	12,24187	0	-11,50960	5,30742
	-3,63249	32,23031	0	-52,07881	54,16579
4	1,83170	-5,54401	11,50960	0	-7,99432
	1,59581	-12,57078	52,07881	0	-105,8683
5	-0,90330	2,68984	-5,30741	7,99432	0
	-6,37175	22,23888	-54,16577	105,8683	0
$H_{ij}^{(2)}$					
$H_{ij}^{(4)}$	1	2	3	4	5
1	127,981	-67,282	-85,381	73,391	-44,488
	414,478	-142,335	-526,512	464,741	-628,710
2	-67,282	317,556	-161,486	-40,519	46,871
	-142,335	1204,009	-420,383	-812,200	1126,996
3	-85,381	-161,486	408,505	-231,090	45,253
	-526,512	-420,383	2009,349	-948,323	-471,183
4	73,391	-40,519	-231,090	385,918	-215,798
	464,741	-812,200	-948,323	3046,143	-2608,49
5	-44,488	46,871	45,253	-215,798	223,510
	-628,710	1126,996	-471,183	-2608,49	5105,98
	1	2	3	4	5
$\varepsilon_j^{(0)}$	-193,066013	-119,392672	-63,338854	-24,904558	-4,089760
$\varepsilon_j^{(2)}$	-127,730560	-317,305630	-408,271216	-385,695053	-223,621354

Выполнение асимптотического соотношения $\varepsilon_j^{(2)} + H_{jj}^{(2)} = 1/4$ соответствует правильному асимптотическому поведению решения в координатах (x, y) в s-волновом приближении при отсутствии центробежных членов и служит критерием точности вычисления собственных функций задачи на собственные значения (20)–(21) и их производных по параметру ρ при его больших значениях.

Из табл. 2 видно, что для первых пяти состояний это соотношение при $\rho = 100$ выполняется с точностью не хуже $\sim 1\%$. Однако с увеличением номера состояния j абсолютная точность выполнения соотношения $\varepsilon_j^{(2)} + H_{jj}^{(2)} = 0,25$ ухудшается, и для $j = 1, \dots, 5$ соответственно равна: 0,0000; 0,0000; 0,0161; 0,0267; 0,3715, что приводит к необходимости увеличения числа узлов конечноэлементной сетки на подынтервале $\varphi \in (\varphi_1(\rho), \varphi_2(\rho))$.

Матричные элементы между состояниями с собственными значениями

$$\varepsilon_j(\rho \rightarrow +\infty) = (j - n)^2 > 0, \quad i, j = n + 1 = 6, 7, \dots$$

представимы в виде асимптотических разложений по обратным степеням ρ :

$$\begin{aligned} \varepsilon_j(\rho) &= (j - n)^2 + \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{\varepsilon_j^{(2k)}}{\rho^{2k}}, \\ Q_{ij}(\rho) &= \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{Q_{ij}^{(2k)}}{\rho^{2k}}, \quad H_{ij}(\rho) = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{H_{ij}^{(2k+2)}}{\rho^{2k+2}}, \quad V_{ij}(\rho) = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{V_{ij}^{(2k-1)}}{\rho^{2k-1}}. \end{aligned} \quad (31)$$

Коэффициенты $Q_{ij}^{(2)}$, $Q_{ij}^{(4)}$, $H_{ij}^{(4)}$ и $H_{ij}^{(6)}$, $V_{ij}^{(1)}$ и $V_{ij}^{(3)}$ разложений (31), вычисленные с помощью интерполяции численных значений $Q_{ij}(\rho)$, $H_{ij}(\rho)$ и $V_{ij}(\rho)$ при $\rho = 50, 100, 200$, представлены в табл. 3 и пригодны для экстраполяции с точностью ≤ 5 –10%.

Матричные элементы между состояниями с собственными значениями $\varepsilon_j(\rho) \geq 0$, $j = n + 1, \dots$ и $\varepsilon_j(\rho)/\rho^2 \approx \varepsilon_j^{(0)} < 0$, $j = 1, \dots, n = 5$ представимы в виде асимптотических разложений по обратным степеням ρ :

$$Q_{ij}(\rho) = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{Q_{ij}^{(2k+1/2)}}{\rho^{2k+1/2}}, \quad H_{ij}(\rho) = \sum_{k=1}^{k_{\max}} \frac{H_{ij}^{(2k+3/2)}}{\rho^{2k+3/2}}, \quad V_{ij}(\rho) = O(\exp(-\rho)). \quad (32)$$

Коэффициенты $Q_{ij}^{(5/2)}$, $Q_{ij}^{(9/2)}$, $H_{ij}^{(7/2)}$ и $H_{ij}^{(11/2)}$ разложений (32), вычисленные с помощью интерполяции численных значений $Q_{ij}(\rho)$, $H_{ij}(\rho)$ при $\rho = 50, 100, 200$, представлены в табл. 4 и пригодны для экстраполяции с точностью $\leq 1\%$. Корневое поведение матричных элементов объясняется тем, что амплитуда собственных функций дискретного спектра $j = 1, \dots, n$ пропорциональна $\sqrt{\rho}$, а собственных функций дискретного спектра $j = n + 1, \dots$, выходит на константу.

На рис. 9 представлены волновые чётные и нечётные функции $\phi_j(\varphi; \rho)$ краевой задачи (20), (21) с собственными значениями $\varepsilon_j(\rho) \geq 0$ при $j = n + 1 = 6, \dots, 10$. Положения нулей собственных функций, представленных на эюре рис. 9, с увеличением их номера $j > 6$ незначительно смещаются в сторону $\varphi = 0$.

Для состояний $i, j = n + 1, \dots, j_{\max}$ с собственными значениями $\varepsilon_j(\rho \rightarrow \infty)/\rho^2 = (j - n)^2/\rho^2 + O(1/\rho^4) = \varepsilon_j^{(0)}/\rho^2 + O(1/\rho^4) = k^2 + O(1/\rho^2)$, соответствующими псевдосостояниям краевой задачи (5), (6), сведённой на конечный интервал $\varphi \in (0, \pi/2)$, использовано приближение собственными функциями непрерывного спектра (см. уравнение (13) в обозначениях (28)) с помощью процедуры, реализованной в системе компьютерной алгебры MAPLE. Спектр энергии чётных и нечётных состояний вычислялся с учётом вышеуказанного поведения нулей собственных функций в окрестности минимума потенциала Морзе, соответственно подчинённых крайевым условиям

$$\left. \frac{d\tilde{\phi}_k(\varphi; \rho)}{d\varphi} \right|_{\varphi=\pi/2} = 0 \quad \text{и} \quad \tilde{\phi}_k(\pi/2; \rho) = 0.$$

Поведение вычисленных собственных функций при $\rho = 10$ для $i = 6, \dots, 10$ согласуется с численными собственными функциями, показанными на рис. 4, и качественно согласуется с поведением собственных функций псевдосостояний, показанных на рис. 2. Таким образом, базисные функции разложения Галёркина (4) соответствуют асимптотическим базисным функциям разложения Канторовича (19) при больших значениях параметра ρ .

Таблица 3

Коэффициенты $Q_{ij}^{(2)}$, $H_{ij}^{(4)}$, $V_{ij}^{(1)}$ (верхние строки) и $Q_{ij}^{(4)}$, $H_{ij}^{(6)}$, $V_{ij}^{(3)}$ (нижние строки) (в \AA^{-2}), вычисленные с помощью интерполяции численных значений $Q_{ij}(\rho)$, $H_{ij}(\rho)$, $V_{ij}(\rho)$ при $\rho = 50, 100, 200$

$Q_{ij}^{(2)}$					
$Q_{ij}^{(4)}$	6	7	8	9	10
6	0	-1,68690	0,94773	-0,65908	0,50651
	0	-301,546	-69,297	-61,462	-46,423
7	1,69497	0	-4,26270	2,37296	-1,68318
	139,529	0	257,625	218,332	-78,820
8	-0,94152	4,22617	0	-6,59009	3,59129
	-79,974	578,150	0	-640,149	888,837
9	0,65906	-2,36875	6,61712	0	-8,77460
	58,134	-286,875	-46,624	0	-3393,818
10	-0,50837	1,69196	-3,64165	8,89720	0
	-49,683	215,297	-100,580	914,186	0
$H_{ij}^{(4)}$					
$H_{ij}^{(6)}$	6	7	8	9	10
6	5,9167	-10,8673	6,8113	-6,1801	6,2733
	13052,14	-38578,53	61320,91	-85458,38	111555,5
7	-10,8673	42,8126	-47,3459	24,7308	-21,2839
	-38578,53	120399,0	-186997,1	258580,3	-334667,7
8	6,8113	-47,3459	118,1730	-107,5731	50,7212
	61320,91	-186997,1	299064,5	-432192,6	553049,6
9	-6,1801	24,7308	-107,5731	228,5693	-189,1366
	-85458,38	258580,3	-432192,6	634226,5	-833872,0
10	6,2733	-21,2839	50,7212	-189,1366	368,9474
	111555,5	-334667,7	553049,6	-833872,0	1220438,
$V_{ij}^{(1)}$					
$V_{ij}^{(3)}$	6	7	8	9	10
6	121,5746	-124,27405	-118,94685	126,9529	116,5646
	-13414,11	-53281,30	89202,5	114968,4	-175109,8
7	-124,2740	126,9742	121,6545	-129,6553	-119,2950
	-53281,30	126302,8	-29390,91	-194078,6	122761,6
8	-118,9468	121,6545	116,3012	-124,3399	-113,8856
	89202,5	-29390,91	-157521,5	-25644,41	235349,4
9	126,9529	-129,6553	-124,3399	132,3411	122,0015
	114968,4	-194078,6	-25644,41	267673,0	-74954,4
10	116,5646	-119,2950	-113,8856	122,0015	111,4203
	-175109,8	122761,6	235349,4	-74954,4	-304457,9

Диагональные и недиагональные барьерные матричные элементы $V_{ij}(\rho)$ показаны на рис. 6 и 8. Их следует сравнивать с соответствующими матричными элементами, показанными на рис. 2. Из сравнения следует, что матричные элементы $V_{ij}(\rho)$ из (24) между состояниями дискретного спектра краевой задачи (20), (21) и матричные элементы $V_{ij}(y)$ из (8) между состояниями дискретного спектра и псевдосостояниями (5), (6) демонстрируют качественное сходное поведение

Таблица 4

Коэффициенты $Q_{ij}^{(5/2)}$, $H_{ij}^{(7/2)}$ (верхние строки) и $Q_{ij}^{(9/2)}$, $H_{ij}^{(11/2)}$ (нижние строки) асимптотического разложения (в Å^{-2}), вычисленные с помощью интерполяции численных значений $Q_{ij}(\rho)$, $H_{ij}(\rho)$ при $\rho = 50, 100, 200$

$Q_{ij}^{(5/2)}$					
$Q_{ij}^{(9/2)}$	6	7	8	9	10
1	-0,61311 -191,631	1,83562 640,795	-3,07274 -747,558	4,29103 1270,066	-5,48095 -2354,089
2	1,82101 571,136	-5,45193 -1909,166	9,12628 2229,887	-12,74469 -3785,644	16,27883 7009,516
3	-3,57012 -1125,595	10,68864 3760,664	-17,89229 -4399,770	24,98625 7461,106	-31,91492 -13794,19
4	5,24449 1665,144	-15,70152 -5559,590	26,28377 6515,254	-36,70467 -11032,27	46,88247 20360,29
5	-5,85899 -1842,771	17,54104 6157,353	-29,36412 -7127,912	41,00545 12085,368	-52,37294 -22431,565
$H_{ij}^{(7/2)}$					
$H_{ij}^{(11/2)}$	6	7	8	9	10
1	32,2121 10571,20	-96,4400 -35184,13	161,4380 41714,53	-225,4437 -70159,27	287,9541 128212,5
2	-38,0069 -13296,49	113,7880 43998,75	-190,4818 -53208,53	265,9993 88399,05	-339,7444 -158710,1
3	-17,4025 -3104,68	52,1043 11140,26	-87,2089 -9918,36	121,7953 20120,33	-155,6006 -45697,38
4	121,5501 35804,24	-363,9136 -120419,4	609,1614 137603,1	-850,6939 -236753,9	1086,628 446549,4
5	-172,1671 -53709,59	515,4534 179539,0	-862,8458 -208786,7	1204,948 354333,5	-1539,080 -656920,8

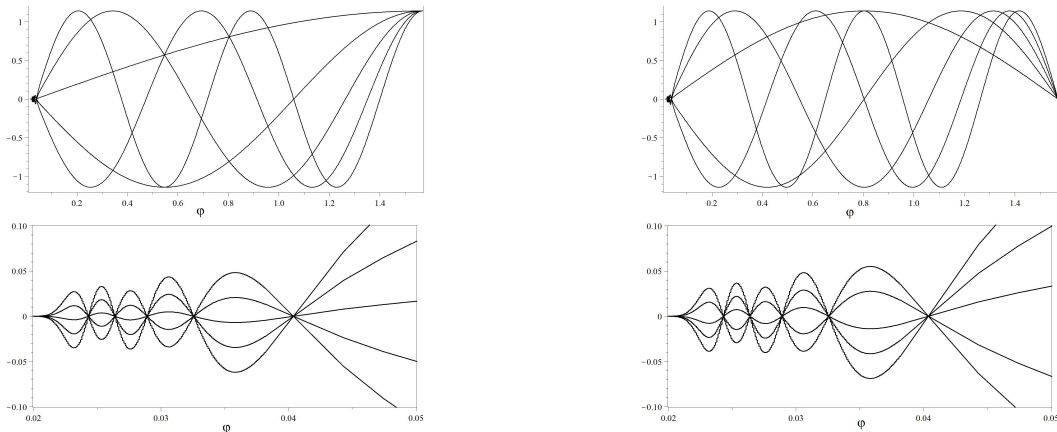


Рис. 9. Волновые функции $\phi_j(\varphi; \rho)$: чётные — левая панель, нечётные — правая панель, краевой задачи (20), (21) с собственными значениями $\varepsilon_j(\rho) \geq 0$ при $j = n + 1 = 6, \dots, 10$ и значении параметра $\rho = 100$. На нижних панелях даны эпюры на интервале $\varphi \in [0, 0,2; 0,05]$ в окрестности минимума потенциала Морзе

по переменным y и ρ . Поскольку $\rho = \sqrt{x^2 + y^2} > y$, то, очевидно, потенциалы $V_{ij}(\rho)$ сильно делокализованы по отношению к потенциалам $V_{ij}(y)$.

Благодаря медленно убывающему кинематическому поведению потенциалов $Q_{ij}(\rho)$ и $H_{ij}(\rho)$ как ρ^{-1} и ρ^{-2} соответственно, по сравнению с экспоненциальным убыванием $V_{ij}(y)$, необходимо учитывать лидирующие члены разложения их асимптотических разложений при решении краевых задач (22)–(24), генерируемых разложением Канторовича (17) при вычислении искомых величин задачи рассеяния с пятью открытыми каналами даже при энергиях ниже порога диссоциации.

5. Алгоритм вычисления асимптотик фундаментальных решений

Алгоритм 2. Вычисляем асимптотическое решение системы N обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка при больших значениях независимой переменной $\rho \gg 1$

$$\begin{aligned} \left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{\varepsilon_i(\rho)}{\rho^2} + \mathcal{H}_{ii}(\rho) - 2E \right] \chi_{ii'}(\rho) = \\ = \sum_{j=1, j \neq i}^N \left[-Q_{ij}(\rho) \frac{d}{d\rho} - \frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho Q_{ij}(\rho) - \mathcal{H}_{ij}(\rho) \right] \chi_{ji'}(\rho). \end{aligned} \quad (33)$$

Входные параметры. Коэффициенты уравнений (33), где $\mathcal{H}_{ij} = V_{ij}^b + H_{ij}$ представлены в виде разложений по обратным степеням (30).

Шаг 1. Ищем решение уравнений (33) в виде:

$$\chi_{ji'}(\rho) = \left(\phi_{ji'}(\rho) + \psi_{ji'}(\rho) \frac{d}{d\rho} \right) R_{i'}(\rho), \quad (34)$$

где $\phi_{ji'}(\rho)$ и $\psi_{ji'}(\rho)$ — неизвестные функции, $R_{i'}(\rho)$ — известная функция. Выбираем $R_{i'}(\rho)$ как решение вспомогательной задачи для эталонного уравнения:

$$\left[-\frac{1}{\rho} \frac{d}{d\rho} \rho \frac{d}{d\rho} + \frac{Z_{i'}^{(2)}}{\rho^2} - p_{i'}^2 \right] R_{i'}(\rho) = 0, \quad (35)$$

где $Z_{i'}^{(2)} = \varepsilon_{i'}^{(2)} + \mathcal{H}_{i'i'}^{(2)}$.

Шаг 2. Вычисляем коэффициенты $\phi_{i'}(\rho)$ и $\psi_{i'}(\rho)$ разложения (34) в форме усечённого разложения по обратным степеням ρ ($\phi_{ji'}^{(k' < 0)} = \psi_{ji'}^{(k' < 0)} = 0$):

$$\phi_{ji'}(\rho) = \phi_{ji'}^{(0)} + \sum_{k'=1}^{k_{\max}} \frac{\phi_{ji'}^{(k')}}{\rho^{k'}}, \quad \psi_{ji'}(\rho) = \psi_{ji'}^{(0)} + \sum_{k'=1}^{k_{\max}} \frac{\psi_{ji'}^{(k')}}{\rho^{k'}}. \quad (36)$$

После подстановки выражений (34)–(36) в уравнение (33), используя уравнение (35), получаем систему рекуррентных соотношений:

$$\begin{aligned} \left(\varepsilon_i^{(0)} - 2E + p_{i'}^2 \right) \phi_{ii'}^{(k')} - 2p_{i'}^2 (k' - 1) \psi_{ii'}^{(k'-1)} = -f_{ii'}^{(k')}, \\ \left(\varepsilon_i^{(0)} - 2E + p_{i'}^2 \right) \psi_{ii'}^{(k')} + 2(k' - 1) \phi_{ii'}^{(k'-1)} = -g_{ii'}^{(k')}, \end{aligned} \quad (37)$$

где правые части $f_{ii'}^{(k)}$ и $g_{ii'}^{(k)}$ даются соотношениями

$$\begin{aligned}
f_{ii'}^{(k')} &= -(k' - 2)^2 - Z_{i'}^{(2)} \phi_{ii'}^{(k'-2)} + \sum_{k=2}^{k'} \mathcal{H}_{ii}^{(k)} \phi_{ii'}^{(k'-k)} + \\
&+ Z_{i'}^{(2)} (2k' - 4) \psi_{ii'}^{(k'-3)} + \sum_{k=1}^{k'} \sum_{j=1, j \neq i}^N \left(2Q_{ij}^{(k)} Z_{i'}^{(2)} \psi_{ji'}^{(k'-k-2)} - \right. \\
&\quad \left. - 2p_{i'}^2 Q_{ij}^{(k)} \psi_{ji'}^{(k'-k)} + Q_{ij}^{(k)} (-2k' + k + 3) \phi_{ji'}^{(k'-k-1)} + \mathcal{H}_{ij}^{(k)} \phi_{ji'}^{(k'-k)} \right); \\
g_{ii'}^{(k)} &= -(k' - 1)^2 - Z_{i'}^{(2)} \psi_{ii'}^{(k'-2)} + \sum_{k=2}^{k'} \mathcal{H}_{ii}^{(k)} \psi_{ii'}^{(k'-k)} + \\
&+ \sum_{j=1, j \neq i}^N \sum_{k=1}^{k'} \left(2Q_{ij}^{(k)} \phi_{ji'}^{(k'-k)} - Q_{ij}^{(k)} (2k' - 1 - k) \psi_{ji'}^{(k'-k-1)} + \mathcal{H}_{ij}^{(k)} \psi_{ji'}^{(k'-k)} \right)
\end{aligned}$$

с начальными условиями $p_{i'}^2 = 2E - \varepsilon_{i'}^{(0)}$, $\phi_{ii'}^{(0)} = \delta_{ii'}$, $\psi_{ii'}^{(0)} = 0$.

Шаг 3. Из рекуррентных соотношений (37) следует рекуррентная формула вычисления коэффициентов $\phi_{ii'}^{(k')}$ и $\psi_{ii'}^{(k')}$, при $2E \neq \varepsilon_{i'}^{(0)}$, $i \neq i'$ и $k' = 2, \dots, k_{\max}$:

$$\begin{aligned}
\phi_{ii'}^{(k')} &= \left[\varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_{i'}^{(0)} \right]^{-1} \left[-f_{ii'}^{(k')} + 2p_{i'}^2 (k' - 1) \psi_{ii'}^{(k'-1)} \right], \\
\psi_{ii'}^{(k')} &= \left[\varepsilon_i^{(0)} - \varepsilon_{i'}^{(0)} \right]^{-1} \left[-g_{ii'}^{(k')} - 2(k' - 1) \phi_{ii'}^{(k'-1)} \right], \\
\phi_{i'i'}^{(k'-1)} &= -[2(k' - 1)]^{-1} g_{i'i'}^{(k)}, \quad \psi_{i'i'}^{(k'-1)} = \left[2(k' - 1) (2E - \varepsilon_{i'}^{(0)}) \right]^{-1} f_{i'i'}^{(k)}.
\end{aligned}$$

Вышеописанный алгоритм, реализованный в системе компьютерной алгебры MAPLE, генерирует подпрограммы на языке FORTRAN для вычисления искоемых коэффициентов разложения $\phi_{ii'}^{(k')}$ и $\psi_{ii'}^{(k')}$ до требуемого порядка k_{\max} .

Выбор подходящего значения ρ_{\min} и ρ_{\max} для генерации разложений линейно независимых решений при $p_{i_o} > 0$ контролировался выполнением условия на вронскиан с требуемой точностью ε_{Wr} :

$$\begin{aligned}
Wr(\mathbf{Q}(\rho); \chi^*(\rho), \chi(\rho)) &= \frac{2i}{\pi} \mathbf{I}_{oo}, \\
W(\mathbf{Q}, \chi^*, \chi) &\equiv \rho \left(\chi^{*T} \left(\frac{d\chi}{d\rho} - \mathbf{Q}\chi \right) - \chi^T \left(\frac{d\chi^*}{d\rho} - \mathbf{Q}\chi^* \right) \right). \tag{38}
\end{aligned}$$

6. Анализ модели квантового туннелирования

Решение краевых задач (7)–(14) и (22)–(26) выполнялось на конечно-элементных сетках $\Omega_y = \{-12(N_{elem} = 120)12\}$ и $\Omega_\rho = \{0(N_{elem} = 1200)120\}$ соответственно, с N_{elem} лагранжевыми элементами четвертого порядка $p = 4$ между узлами, используя фортрановскую программу КАНТВР 3.0 [12]. Разложения (4) и (19) искомого решения по построенным ортогональным базисам при ($j_{max} = 15$) только с десятью закрытыми каналами позволило вычислять приближенные решения двумерных краевых задач (1) и (15) при $E < 0$ с точностью (10^{-4}) .

Рис. 10 демонстрирует резонансное поведение полных вероятностей прохождения барьеров из первых каналов, имеющих энергии $E_1 = -1044,879649$, $E_2 =$

–646, 1570935, $E_3 = -342, 7919791$, $E_4 = -134, 7843058$, $E_5 = -22, 13407384$ (в К), с переходами во все открытые каналы, вычисленные с помощью разложений (4) и (17) в декартовых и полярных координатах.

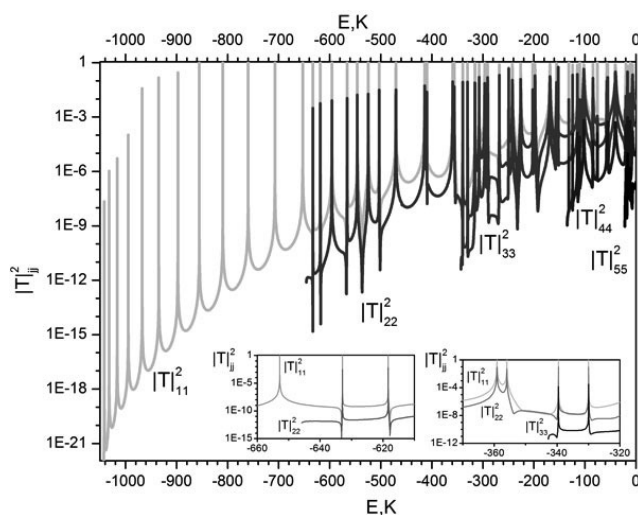


Рис. 10. Полные вероятности прохождения барьеров из открытых каналов

Полные вероятности прохождения барьеров из открытых каналов демонстрирует резонансное поведение, т.е. эффект квантовой прозрачности. С ростом энергии начальных возбуждённых состояний пики смещены в сторону больших энергий, набор положений пиков примерно тот же, что для переходов из основного состояния. Например, левый эшор показывает, что положения 13-го и 14-го пиков из первого состояния совпадают с положениями 1-го и 2-го пиков из второго состояния, тогда как правый эшор показывает, что положения 25-го и 26-го пиков из первого состояния совпадают с положениями 1-го и 2-го пиков из третьего состояния.

Из рис. 2 видно, что диагональные матричные элементы потенциала $V_{jj}^b(y)$ имеют форму двойных барьеров, а недиагональные матричные элементы $V_{ij}^b(y)$ примерно в четыре раза меньше, чем $V_{jj}^b(\rho)$ и $V_{ij}^b(\rho)$ на рис. 6 и 8. Это означает, что положение пиков соответствует вещественной части энергии метастабильных состояний, погруженных в непрерывный спектр, которые локализованы между двойными барьерами.

7. Заключение

Продемонстрирована эффективность разработанных символьно-численных алгоритмов и комплексов программ, реализующих метод конечных элементов для решения краевых задач, описывающих модели квантового туннелирования двухатомных молекул в s-волновом приближении, связанных реалистическими молекулярными потенциалами ниже порога диссоциации. Представлен сравнительный анализ базисных функций, матриц переменных коэффициентов и решений систем уравнений в форме Галёркина и Канторовича в декартовых и полярных системах координат. Выявлен эффект квантовой прозрачности при резонансном туннелировании двухатомных молекул через отталкивающие барьеры за счёт метастабильных состояний, погруженных в непрерывный спектр. Предложенная модель и разработанные алгоритмы и комплексы программ применимы для описания фрагментации лёгких ядер, подбарьерных реакций ионов и молекулярной квантовой диффузии.

Литература

1. Пеньков Ф. М. Квантовая прозрачность барьеров для структурных частиц // ЖЭТФ. — 2000. — Т. 118. — С. 806–815.
2. Pen'kov F. M. Metastable States of a Coupled Pair on a Repulsive Barrier // Physical Review A. — 2000. — Vol. 62. — P. 044701.
3. Pijper E., Fasolino A. Quantum Surface Diffusion of Vibrationally Excited Molecular Dimers // Journal of Chemical Physics. — 2007. — Vol. 126. — P. 014708.
4. Kavka J. J., Shegelski M. R. A., Hong W. P. Tunneling and Reflection of an Exciton Incident Upon a Quantum Heterostructure Barrier // Journal of Physics: Condensed Matter. — 2012. — Vol. 24. — P. 365802.
5. Shegelski M. R. A., Hnybida J., Vogt R. Formation of a Molecule by Atoms Incident Upon an External Potential // Physical Review A. — 2007. — Vol. 78. — P. 062703.
6. Bondar D. I., Liu W.-K., Ivanov M. Y. Enhancement and Suppression of Tunneling by Controlling Symmetries of a Potential Barrier // Physical Review A. — 2010. — Vol. 82. — P. 052112.
7. Symbolic-Numerical Algorithm for Generating Cluster Eigenfunctions: Tunneling of Clusters Through Repulsive Barriers / A. Gusev, S. Vinitsky, O. Chuluunbaatar et al. // Lecture Notes in Computer Science. — 2013. — Vol. 8136. — Pp. 427–442.
8. Symbolic-Numerical Algorithms to Solve the Quantum Tunneling Problem for a Coupled Pair of Ions / A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar et al. // Lecture Notes in Computer Science. — 2011. — Vol. 6885. — Pp. 175–191.
9. Гусев А. А. Модель туннелирования кластеров через отталкивающие барьеры в представлении симметризованных координат // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2014. — № 1. — С. 54–73.
10. ODPEVP: A Program for Computing Eigenvalues and Eigenfunctions and Their First Derivatives with Respect to the Parameter of the Parametric Self-Adjoined Sturm–Liouville Problem / O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, A. G. Abrashkevich // Computer Physics Communications. — 2009. — Vol. 180. — Pp. 1358–1375.
11. Gusev A. A. Algorithm for Computing Wave Functions, Reflection and Transmission Matrices of the Multichannel Scattering Problem in the Adiabatic Representation using the Finite Element Method // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2014. — № 2. — С. 93–114.
12. KANTBP 3.0: New Version of a Program for Computing Energy Levels, Reflection and Transmission Matrices, and Corresponding Wave Functions in the Coupled-Channel Adiabatic Approach / A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitsky, A. G. Abrashkevich // Вестник РУДН. Серия «Математика. Информатика. Физика». — 2014. — № 2. — С. 342–349.
13. KANTBP 2.0: New Version of a Program for Computing Energy Levels, Reaction Matrix and Radial Wave Functions in the Coupled-Channel Hyperspherical Adiabatic Approach / O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, S. I. Vinitsky, A. G. Abrashkevich // Computer Physics Communications. — 2008. — Vol. 179. — Pp. 685–693.
14. Fundamental Physical Constants. — <http://physics.nist.gov/constants>.
15. Lauhon L. J., Ho W. Direct Observation of the Quantum Tunneling of Single Hydrogen Atoms with a Scanning Tunneling Microscope // Physical Review Letters. — 2000. — Vol. 85. — Pp. 4566–4569.
16. Calculation of a Hydrogen Atom Photoionization in a Strong Magnetic Field by Using the Angular Oblate Spheroidal Functions / O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, V. L. Derbov et al. // Journal of Physics A. — 2007. — Vol. 40. — Pp. 11485–11524.

UDC 517.958:530.145.6

Algorithm for Solving the Two-Dimensional Boundary Value Problem for Model of Quantum Tunneling of a Diatomic Molecule Through Repulsive Barriers

A. A. Gusev*, L. L. Hai†

* *Laboratory of Information Technologies
Joint Institute for Nuclear Research
6, Joliot-Curie str., Dubna, Moscow region, Russia, 141980*

† *Belgorod State National Research University
85, Pobedy str., Belgorod, Russia, 308015*

Algorithm for solving the boundary value problems that describe the model of quantum tunneling of a diatomic molecule through repulsive barriers in s-wave approximation is presented. The boundary value problems are formulated and reduced to the one-dimensional ones for systems of coupled second-order differential equations by means of the Galerkin and Kantorovich methods. The description of elaborated algorithms and the calculated asymptotes of parametric basis functions, matrices of variable coefficients, and fundamental solutions of the systems of the coupled second-order differential equations needed for solving the boundary problems on a finite interval are given. The BVPs were solved by the elaborated set of programs implementing the finite element method. Analysis of benchmark calculations of quantum tunneling of a diatomic molecule model with the nuclei coupled by the Morse potential through Gaussian barriers and quantum transparency effect induced by metastable states embedded in continuous spectrum below dissociation threshold are presented.

Key words and phrases: quantum tunneling problem, diatomic molecule, repulsive barriers, boundary-value problems, Galerkin method, Kantorovich method, asymptotic solutions, finite element method.

References

1. F. Pen'kov, Quantum transmittance of barriers for composite particles, ZHETF 91 (2000) 698–705, in Russian.
2. F. M. Pen'kov, Metastable States of a Coupled Pair on a Repulsive Barrier, Physical Review A 62 (2000) 044701.
3. E. Pijper, A. Fasolino, Quantum Surface Diffusion of Vibrationally Excited Molecular Dimers, Journal of Chemical Physics 126 (2007) 014708.
4. J. J. Kavka, M. R. A. Shegelski, W. P. Hong, Tunneling and Reflection of an Exciton Incident Upon a Quantum Heterostructure Barrier, Journal of Physics: Condensed Matter 24 (2012) 365802.
5. M. R. A. Shegelski, J. Hnybida, R. Vogt, Formation of a Molecule by Atoms Incident Upon an External Potential, Physical Review A 78 (2007) 062703.
6. D. I. Bondar, W.-K. Liu, M. Y. Ivanov, Enhancement and Suppression of Tunneling by Controlling Symmetries of a Potential Barrier, Physical Review A 82 (2010) 052112.
7. A. Gusev, S. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, V. A. Rostovtsev, L. L. Hai, V. Derbov, P. Krassovitskiy, Symbolic-Numerical Algorithm for Generating Cluster Eigenfunctions: Tunneling of Clusters Through Repulsive Barriers, Lecture Notes in Computer Science 8136 (2013) 427–442.
8. A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, O. Chuluunbaatar, V. P. Gerdt, V. A. Rostovtsev, Symbolic-Numerical Algorithms to Solve the Quantum Tunneling Problem for a Coupled Pair of Ions, Lecture Notes in Computer Science 6885 (2011) 175–191.
9. A. Gusev, A. Model of tunneling of clusters through repulsive barriers in symmetrized coordinates representation, Bulletin of PFUR. Series “Mathematics. Information Sciences. Physics” (1) (2014) 54–72, in Russian.
10. O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, A. G. Abrashkevich, ODPEVP: A Program for Computing Eigenvalues and Eigenfunctions and Their First Derivatives with Respect to the Parameter of the Parametric Self-Adjoined Sturm–Liouville Problem, Computer Physics Communications 180 (2009) 1358–1375.

11. A. A. Gusev, Algorithm for Computing Wave Functions, Reflection and Transmission Matrices of the Multichannel Scattering Problem in the Adiabatic Representation using the Finite Element Method, Bulletin of PFUR. Series “Mathematics. Information Sciences. Physics” (2) (2014) 93–114.
12. A. A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S. I. Vinitzky, A. G. Abrashkevich, KANTBP 3.0: New Version of a Program for Computing Energy Levels, Reflection and Transmission Matrices, and Corresponding Wave Functions in the Coupled-Channel Adiabatic Approach, Bulletin of PFUR. Series “Mathematics. Information Sciences. Physics” (2) (2014) 342–349.
13. O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, S. I. Vinitzky, A. G. Abrashkevich, KANTBP 2.0: New Version of a Program for Computing Energy Levels, Reaction Matrix and Radial Wave Functions in the Coupled-Channel Hyperspherical Adiabatic Approach, Computer Physics Communications 179 (2008) 685–693.
14. Fundamental Physical Constants.
URL <http://physics.nist.gov/constants>
15. L. J. Lauhon, W. Ho, Direct Observation of the Quantum Tunneling of Single Hydrogen Atoms with a Scanning Tunneling Microscope, Physical Review Letters 85 (2000) 4566–4569.
16. O. Chuluunbaatar, A. A. Gusev, V. L. Derbov, M. S. Kaschiev, L. A. Melnikov, V. V. Serov, S. I. Vinitzky, Calculation of a Hydrogen Atom Photoionization in a Strong Magnetic Field by Using the Angular Oblate Spheroidal Functions, Journal of Physics A 40 (2007) 11485–11524.