

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

Ashot S. Gevorkyan<sup>1,2</sup> and Misak G. Nalbandyan<sup>1</sup>

<sup>1</sup>Institute for Informatics and Automation Problems, NAS of Armenia  
<sup>2</sup>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.

## 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.

## Աղիարատիկ փոփոխվող պոտենցիալով 1D Շրեդինգերի հավասարման թվային լուծում

Ա. Գևորգյան և Մ. Նալբանդյան

## Անփոփում

Աշխատանքում ուսումնասիրված է արտաքին դաշտի առկայությամբ տարբեր երկարությամբ 1D չկարգավորված տարածական սպինային շղթաների (SUC) համույթի վիճակագրական հատկությունները՝ հաշվի առնելով ռելաքսացիոն երևույթները: Առաջին անգամ օգտագործվել է կոմպլեքս-դասական Համիլտոնիանը: Պարբերական 1D ցանցի հանգույցներում ստացվել են ռեկորենտ եռանկյունաչափական հավասարումներ, որոնք

Միլվեստրի պայմանների հետ միասին անալիտիկորեն շարունակվում են կոմպլեքս տարածության մեջ և հնարավորություն են տալիս հանգույց առ հանգույց հաշվել սպինի ուղղորդվածությունը՝ հաշվի առնելով սպինային շրթաներում ռելաքսացիոն երևույթները:

Ուսումնասիրված են նաև սպինային համայնքում 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 (внешний 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.