COMPUTATIONAL SCIENCE AND TECHNIQUES
Volume 1, Number 2, 2013, 93-102

Publisher: Klaipėda University
http://journals.ku.lt/index.php/CST
Online ISSN: 2029-9966

KVANTMECHANINĖS SKLAIDOS MODELIAVIMAS TOLYDINIU NIUTONO METODO ANALOGU

Algirdas Deveikis
Taikomosios informatikos katedra, Informatikos fakultetas, Vytauto Didžiojo universitetas,
Vileikos g. 8, LT-44404, Kaunas
a.deveikis@if.vdu.lt

Anotacija. Kvantmechaninės sklaidos uždaviniai sudėtingoms sklaidomų dalelių sąveikoms dažniausiai sprendžiami skaitiniais metodais. Taikant tolydinį Niutono metodo analogą gali būti sudarytos efektyvios iteracinės schemos leidžiančios vienu metu apskaičiuoti sklaidos banginę funkciją ir sklaidos fazę. Šiame straipsnyje, taikant tolydinį Niutono metodo analogą modeliuojama potencialinė ir rezonansinė sklaida modeliniuose potencialuose. Tinkamai įskaitoma sklaidos banginės funkcijos asimptotika toliasiekiam kuloniniam potencialui. Sklaidos uždavinį aprašanti lygčių sistema sprendžiama skaitiškai, naudojant skirtuminės perkelties algoritmą. Išvystyta skaitmeninė schema taikoma tiriant sklaidos banginių funkcijų ir sklaidos fazių priklausomybę nuo sklaidos potencialų parametrų ir sklaidos energijos.

Pagrindiniai žodžiai: kvantmechaninė sklaida, tolydinis Niutono metodo analogas, kuloninis potencialas.

Įvadas

Kvantmechaninė sklaida yra viena svarbiausių tyrimo sričių kaip fundamentiniuose, taip ir taikomuosiuose tyrimuose. Branduolio fizikoje nukleonų sklaidos uždavinys sprendžiamas naudojant sudėtingus realistinius nukleonų sąveikos potencialus (Matsuda et al., 2000). Elementariųjų dalelių sklaida plačiai naudojama molekulių, atomų ir atomų branduolių struktūrai ir savybėms tirti (Salvat and Mayol, 1993). Krūvininkų pernešimas šiuolaikinėse nanostruktūrose dažnai aprašomas kvantmechanine sklaida (Vengalis ir Šliužienė, 2011).

Kvantmechaninės sklaidos modeliavimo sunkumai dažnai yra susiję su sudėtinga sklaidos potencialų forma ir aukštais reikalavimais gaunamų skaičiavimo rezultatų tikslumui. Sudėtingiems sklaidos potencialams kvantmechaninės sklaidos uždaviniai sprendžiami skaitiniais metodais. Kita vertus, modeliuojant sklaidą sudėtingiems sklaidos potencialams dažnai sunku suprasti kvantmechaninės sklaidos procesų dėsningumus, todėl sklaidos elgsenai tirti plačiai naudojami įvairūs modeliniai potencialai (Friedman and Jamieson, 1995; Los and Los, 2010). Kvantmechaninės sklaidos elgsenoje gali pasireikšti kaip potencialinė, taip ir rezonansinė sklaida, todėl sklaidą aprašantys skaitiniai modeliai turi būti universalūs ir tinkamai aprašyti įvairius sklaidos proceso metu vykstančius reiškinius.

Šio tyrimo tikslas yra sukurti universalų skaitinį kvantmechaninės dalelių sklaidos modelį potencialinei ir rezonansinei sklaidai trumpasiekiuose ir kuloniniame potencialuose.

Pritaikytas efektyvus netiesinių lygčių sistemų sprendimo metodas – tolydinis Niutono metodo analogas (Abrashkevich and Puzynin, 2004). Tolydinis Niutono metodo analogas pasižymi visa eile privalumų. Sudaromos iteracinės schemos suteikia galimybę skaitmeniškai sekti vienu metu skaičiuojamų sklaidos fazių ir banginių funkcijų evoliuciją. Atsiranda galimybė papildomai keisti taip vadinamą „laiko" žingsnį ir taip derinti sudaromų skaitinių schemų stabilumą. Sklaidos uždavinio sprendiniams iš anksto nustatoma reikiama asimptotika. Tolydinis Niutono metodo analogas buvo pritaikytas neutronų sklaidos aprašymui (Deveikis, 1999). Šiame darbe minėtas skaitinis neutronų sklaidos modelis išvystomas toliasiekiam kuloniniam potencialui ir tiriamos jo taikymo galimybės kvantmechaninės sklaidos procesų dėsningumams tirti.

1. Matematinis modelis

Sklaidos uždavinį galima suformuluoti kaip kraštinį uždavinį radialiąjai Šrėdingerio lygčiai (Newton, 1982). Jai galima suteikti tokią nedimensinę formą, kurioje ji neturėtų pirmosios išvestinės:

$$\varphi^{(1)} = \left[\frac{d^2}{dr^2} - V(r) + E\right] Y(r, E, \delta_L) = 0, \quad (1)$$

čia $Y(r,E,\delta_L)$ – ieškomoji banginė sklaidos funkcija, δ_L – ieškomoji sklaidos fazė, L – judesio kiekio momento kvantinis skaičius, r – atstumas tarp dalelės ir sklaidos centro, E – kinetinė energija masių centro atskaitos sistemoje, $V(r)$ – sklaidos potencialas. Papildysime uždavinį homogeninėmis kraštinėmis sąlygomis:

$$\varphi^{(2)} = Y(0, E, \delta_L) = 0, \quad (2)$$

$$\varphi^{(3)} = \left[c\frac{d}{dr}Y(r, E, \delta_L) + dY(r, E, \delta_L)\right]_{r=R} = 0, \quad (3)$$

kur c ir d – laisvai parenkamos konstantos (nepriklausančios nuo koordinačių), randamos iš lygties asimptotikos pakankamai dideliam R, viršijančiam trumpasiekio potencialo veikimo spindulį. Pasirinksime banginės sklaidos funkcijos normavimo sąlygą:

$$\varphi^{(4)} = \int_0^\infty Y(r, E, \delta_L)\left[\frac{d^2}{dr^2} - V_L(r) + E\right] Y(r, E, \delta_L)dr = 0. \quad (4)$$

Rezultate, (1–4) lygtys sudaro netiesinę funkcinę lygtį $F(z) = 0$, kur $F = \{\varphi^{(1)}, \varphi^{(2)}, \varphi^{(3)}, \varphi^{(4)}\}$ – netiesinė keturių komponentų funkcija, o nežinomąjį z sudaro dvejetas $z = \{\delta_L, Y(r, E, \delta_L)\}$. Taikant tolydinio Niutono metodo analogą netiesinei funkcinei lygčiai $F(z) = 0$ sudaromas Koši uždavinys:

$$\begin{cases} F_z'(z(t))\dfrac{dz(t)}{dt} = -F(z(t)), \\ z(0) = z_0. \end{cases} \quad (5)$$

Įvedamas papildomas „laiko" parametras t, nuo kurio priklauso sprendinio komponentės $z(t) = \{\delta_L(t), Y(r, E, t, \delta_L(t))\}$. Čia z_0 pradinis artinys ieškomajam sprendiniui. Trumpumo dėlei pažymėkime $Y(r) = Y(r, E, \delta_L)$. Dabar galime linearizuoti (1–4) uždavinį Niutono metodu:

$$\begin{cases} \left[\dfrac{d^2}{dr^2} - V(r) + E\right]\dfrac{dY(r)}{dt} = -\left\{\left[\dfrac{d^2}{dr^2} - V(r) + E\right]Y(r)\right\}, \\ \dfrac{dY(0)}{dt} = 0, \\ \left[c\dfrac{d}{dr} + d\right]\dfrac{dY(\infty)}{dt} + \left[\dfrac{\partial c}{\partial p}\dfrac{dp}{dt}\dfrac{d}{dr} + \dfrac{\partial d}{\partial p}\dfrac{dp}{dt}\right]Y(\infty) = -\left\{\left[c\dfrac{d}{dr} + d\right]Y(\infty)\right\}, \\ \int\limits_0^\infty \dfrac{dY(r)}{dt}\left[\dfrac{d^2}{dr^2} - V(r) + E\right]Y(r)dr + \int\limits_0^\infty Y(r)\left[\dfrac{d^2}{dr^2} - V(r) + E\right]\dfrac{dY(r)}{dt}dr = \\ -\int\limits_0^\infty Y(r)\left[\dfrac{d^2}{dr^2} - V(r) + E\right]Y(r)dr. \end{cases} \tag{6}$$

Čia įvedėme pažymėjimą $p = tg(\delta_l)$.

Dalelės sklaidos kuloniniu potencialu atveju Šrėdingerio lygtis asimptotikoje įgyja nulyje išsigimusios hipergeometrinės lygties pavidalą. Kulono sklaidos atveju sklaidos potencialas:

$$V(r) = \frac{L(L+1)}{r^2} - \frac{2q}{r}, \tag{7}$$

kur $q = +1$ traukos ir $q = -1$ stūmos potencialams. Tuomet sklaidos funkcijos asimptotiką galima išreikšti reguliariąja ir nereguliariąja kuloninėmis banginėmis funkcijomis (Abramowitz and Stegun 1965):

$$Y(r, E, \delta_L) = F_L(kr) + pG_L(kr), \tag{8}$$

čia $F_L(kr)$ ir $G_L(kr)$ – atitinkamai reguliarusis ir nereguliarusis nulyje išsigimusios hipergeometrinės lygties sprendiniai, $k = \sqrt{E}$ – bangos skaičius. Pasinaudoję asimptotika (8) ir imdami pakankamai didelį atstumą tarp dalelės ir sklaidos centro R, rasime lygties (3) konstantas c ir d bei jų išvestines:

$$c = F_L(kR) + pG_L(kR), \tag{9}$$

$$d = -k\frac{d}{dr}\left[F_L(kr) + pG_L(kr)\right]_{r=R}, \tag{10}$$

$$\frac{\partial c}{\partial p} = G_L(kR), \tag{11}$$

$$\frac{\partial d}{\partial p} = -\frac{d}{dr}\left[G_L(kr)\right]_{r=R}. \tag{12}$$

Trumpasiekių sąveikų atveju sklaidos funkcijos asimptotika yra tiesiškai nepriklausomų sprendinių superpozicija:

$$Y(r, E, \delta_L) = kr\left[j_L(kr) + pn_L(kr)\right], \tag{13}$$

kur $j_L(kr)$ ir $n_L(kr)$ – sferinės Beselio ir Noimano funkcijos. Trumpasiekių sąveikų atveju konstantos c ir d bei jų išvestinės apibrėžiamos:

$$c = kR[j_L(kR) + pn_L(kR)], \tag{14}$$

$$d = -k\frac{d}{dr}r[j_L(kr) + pn_L(kr)]_{r=R}, \tag{15}$$

$$\frac{\partial c}{\partial p} = kRn_L(kR), \tag{16}$$

$$\frac{\partial d}{\partial p} = -k\frac{d}{dr}r[n_L(kr)]_{r=R}. \tag{17}$$

Diskretinė evoliucinės lygties (6) aproksimacija pagal „laiko“ parametrą t sprendžiama Oilerio metodu.

2. Skaitinis modeliavimas

Kvantmechaninės sklaidos modeliavimo uždavinys buvo išspręstas skaitiniu baigtinių skirtumų metodu (Samarskii, 2001). Buvo sudaryta iteracinė baigtinių skirtumų schema naudojanti tolygųjį diskretųjį tinklą. Pirmąsias tris (6) lygčių sistemos lygtis aproksimuojame $O(h^2)$ eilės skirtumine schema, kurią sprendžiame skirtuminės perkelties metodu. Tuo tikslu, eidami tiesiogine eiga sprendinio ieškome pavidalu:

$$\frac{dY(i)}{dt} = \alpha_i\frac{dY(i+1)}{dt} + \delta_i, \tag{18}$$

čia i – diskrečiojo tinklo mazgo indeksas. Eidami atgaline skirtuminės perkelties eiga sprendinio ieškome pavidalu:

$$\frac{dY(i)}{dt} = \eta_i\frac{dp}{dt} + \sigma_i. \tag{19}$$

Apskaičiavę nežinomuosius η_i ir σ_i, iš skirtuminės normavimo sąlygos aproksimacijos galime rasti iteracinę k–tojo „laiko“ žingsnio $t_{k+1} = t_k + \tau$ pataisą γ ir ieškomąją išvestinę:

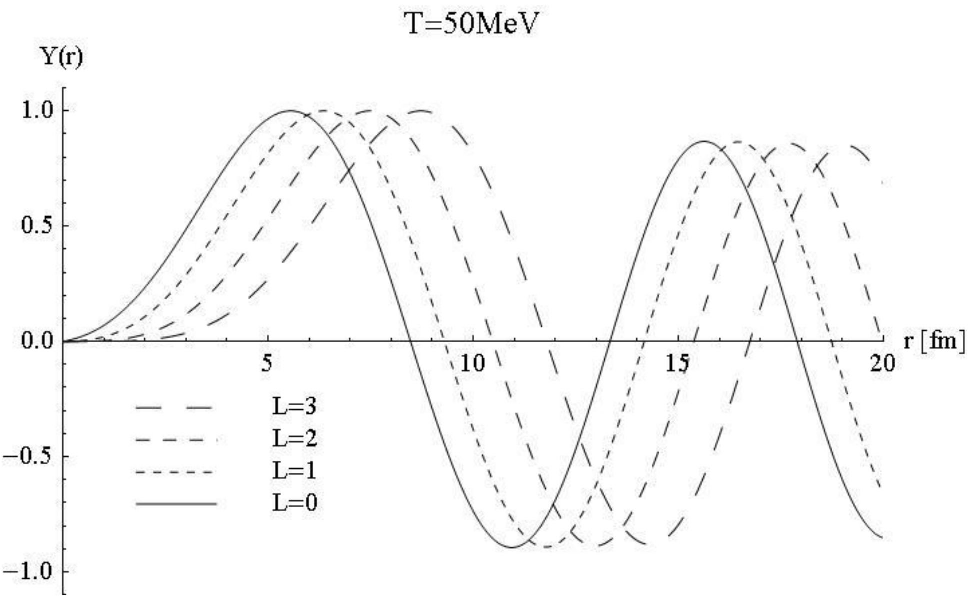
$$\frac{dp^k}{dt} = \gamma^k. \tag{20}$$

Išsprendę uždavinį k–tajam žingsniui, randame sekančio $k+1$ žingsnio artinį sprendiniui:

$$p^{k+1} = p^k + \tau\gamma^k, \tag{21}$$

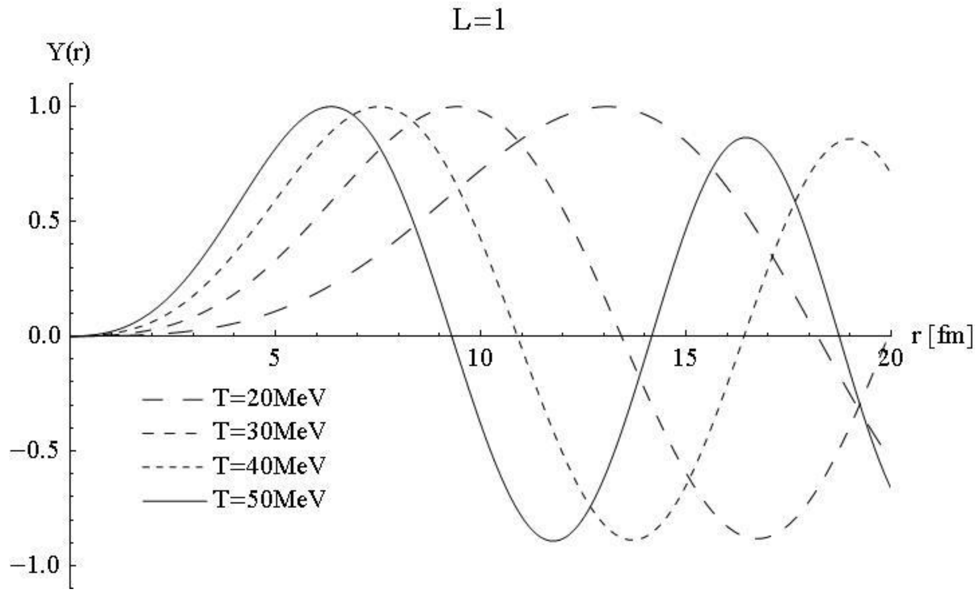
$$Y^{k+1}(i) = Y^k(i) + \tau(\eta_i^k\gamma^k + \sigma_i^k). \tag{22}$$

Iteracinio proceso konvergenciją kontroliuojame neatitikties $\Delta = \max\{\mathrm{abs}(\mu_i)\}$ dydžiu. Tam kiekviename diskrečiojo tinklo mazge randame μ_i lygią skaitinei vertei gaunamai įstačius apskaičiuotą sprendinį (21) ir (22) į skirtuminę Šrėdingerio lygties (1) ir kraštinės sąlygos (3) aproksimaciją. Iteracinis procesas tęsiamas tiek k žingsnių, kol neatitiktis Δ tampa mažesnė už mūsų užsibrėžtą tikslumą. Kompiuterinį modelį programavo autorius Fortran 90 programavimo kalba.



1 pav. Kulono sklaidos radialiosios banginės funkcijos priklausomybė nuo judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus.

Kulono sklaida buvo modeliuojama krūvį turinčioms dalelėms, kurių masė sutampa su protono mase. Kulono sklaidos modeliavimas tolydiniu Niutono metodo analogu yra gana problemiškas. Žinoma, kad skaitinė schema gaunama modeliuojant sklaidos uždavinį tolydiniu Niutono metodo analogu yra labai jautri ieškomųjų sprendinių asimptotikai (Deveikis, 1999). Kadangi kuloninis potencialas yra toliasiekis, sklaidos funkcijos asimptotikai būtina imti pakankamai tikslias reguliariąją ir nereguliariąją kulonines bangines funkcijas. Šioms funkcijoms apskaičiuoti buvo naudojama (Barnett, 1982) programa. Kulono sklaidos radialiosios banginės funkcijos priklausomybė nuo judesio kiekio momento kvantinio skaičiaus, kai sklaidomos dalelės kinetinė energija laboratorinėje atskaitos sistemoje $T = 50MeV$ pateikta 1 paveiksle. Kulono sklaidos radialiosios banginės funkcijos priklausomybė nuo krintančiosios dalelės kinetinės energijos laboratorinėje atskaitos sistemoje, kai judesio kiekio momento kvantinis skaičius $L = 1$ pateikta 2 paveiksle. Gaunamos radialiosios banginės funkcijos pasižymi geru tikslumu, artimu naudojamų kuloninių banginių funkcijų tikslumui.



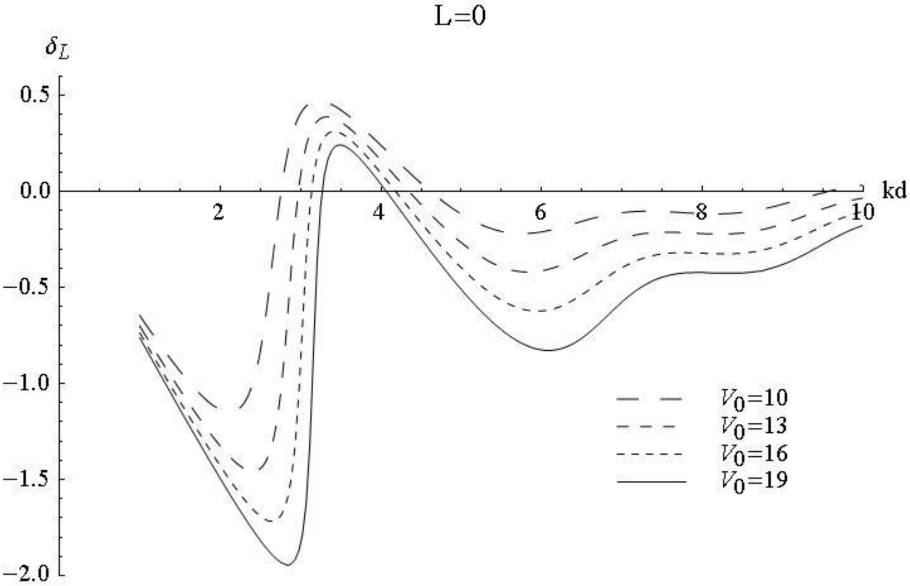
2 pav. Kulono sklaidos radialiosios banginės funkcijos priklausomybė nuo krintančiosios dalelės kinetinės energijos laboratorinėje atskaitos sistemoje.

Potencialinės ir rezonansinės sklaidos procesų dėsningumams tirti kompiuteriniame kvantmechaninės sklaidos modelyje buvo naudojami modeliniai potencialai. Modeliniais potencialais parinkti: sferinis stūmos potencialas, sudėtinis sferinės duobės ir barjero potencialas. Parinkta sudėtinio sferinės duobės ir barjero potencialo forma:

$$V(r)=\begin{cases} U_0+\dfrac{L(L+1)}{r^2}, & 0\le r\le h;\\ V_0+\dfrac{L(L+1)}{r^2}, & h\le r\le d;\\ \dfrac{L(L+1)}{r^2}, & d<r. \end{cases} \tag{23}$$

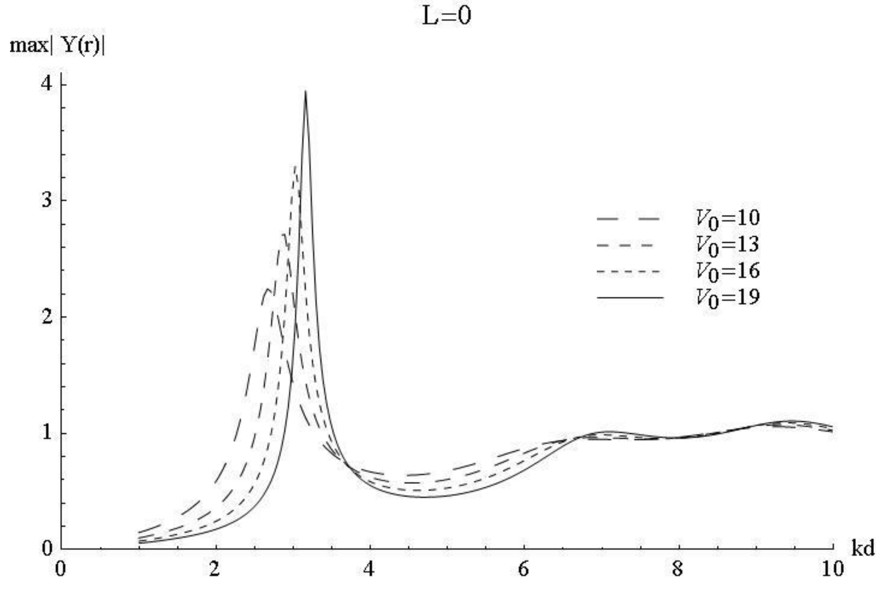
Čia d – stūmos potencialo siekis, V_0 – potencialo barjero aukštis, U_0 – potencialo duobės gylis ir h – potencialo duobės veikimo siekis.

Atliktas išsklaidytosios bangos, gaunamos sklaidant plokščiąją bangą sudėtiniame sferinės duobės ir barjero potenciale, radialiųjų funkcijų priklausomybės nuo energijos ir sklaidos potencialo parametrų tyrimas. Apskaičiuota sklaidos fazės priklausomybė nuo kd skirtingiems potencialo barjero aukščiams pateikta 3 paveiksle.



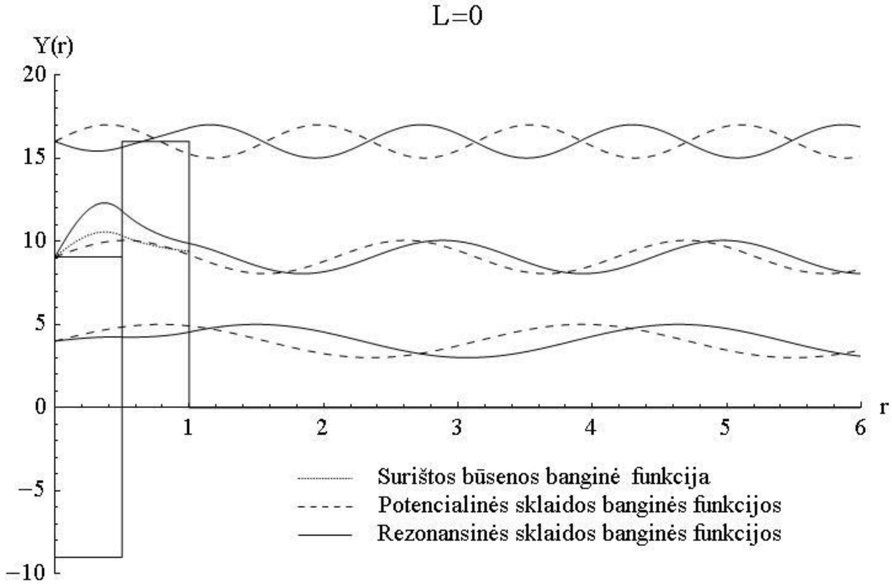
3 pav. Sklaidos fazės priklausomybė nuo kd skirtingiems potencialo barjero aukščiams.

Parinktas potencialo duobės gylis yra $U_0 = -9$ srityje $0 \le s \le h$, potencialo barjero aukštis $V_0 = 10, 13, 16, 19$ srityje $h \le s \le d$. Potencialas lygus tik išcentriniam potencialui, kai $s > d$. Potencialo duobės veikimo siekis $h = 0.5$, potencialo siekis $d = 1$.



4 pav. Radialiosios banginės funkcijos amplitudės priklausomybė nuo kd skirtingiems potencialo barjero aukščiams.

Gauti rezultatai tinkamai aprašo staigų sklaidos fazės δ_0 priklausomybės nuo kd šuolį, kai krintančiosios plokščiosios bangos energija sutampa su rezonansine ir sklaidos fazės δ_0 priklausomybę nuo potencialo barjero aukščio. Tiems patiems sklaidos potencialo parametrams buvo tirta radialiosios banginės funkcijos amplitudės priklausomybė nuo kd, gauti rezultatai pateikti 4 paveiksle. Stebimas staigus radialiosios banginės funkcijos amplitudės augimas, kai krintančiosios plokščiosios bangos energija sutampa su rezonansine parodo, kad taikomas sklaidos modelis tinkamai aprašo rezonansinę sklaidą.



5 pav. Radialiosios Šrėdingerio lygties sprendiniai potencialinei, rezonansinei sklaidai ir surištajai būsenai.

Radialiųjų funkcijų priklausomybės nuo energijos tyrimai, kai sklaidos potencialo barjero aukštis $V_0 = 16$ pateikti 5 paveiksle. Tiesių atkarpomis pavaizduotas sudėtinis sferinės duobės ir barjero potencialas $V(r)$ ir surištosios būsenos energija. Vaizduojamų radialiųjų funkcijų nulių linijos sutapatintos su atitinkamomis sklaidomos plokščiosios bangos energijos E vertėmis. Palyginimui pateikti atitinkamų sprendinių, kai sklaidos potencialas lygus nuliui, grafikai. Kartu pavaizduota atitinkamos sferinės potencialo duobės surištosios būsenos, kurios energija atitinka rezonansinę energiją, radialioji banginė funkcija. Sferinės potencialo duobės atveju potencialas:

$$V(r) = \begin{cases} U_0 + \dfrac{L(L+1)}{r^2}, & 0 \le r \le h; \\ \dfrac{L(L+1)}{r^2}, & h < r. \end{cases} \tag{24}$$

Surištųjų būsenų radialiosios banginės funkcijos ir energijos, kai judesio kiekio momentas $L = 0$ buvo apskaičiuotos programa (Deveikis ir Remeikis, 1999). Parinktai potencialo formai gauta surištosios būsenos nedimensinė energija yra -6,95 skaičiuojant nuo potencialo barjero aukščio V_0. Atlikti kvantmechaninės sklaidos tyrimai parodo tinkamą sklaidos radialiųjų funkcijų elgseną kai krintančiosios plokščiosios bangos energija kinta rezonansinės energijos srityje. Gauti kvantmechaninės sklaidos sudėtiniame sferinės duobės ir barjero potenciale bei sklaidos kulono potencialu rezultatai gerai sutampa su (Flügge, 1998).

Išvados

Šiame darbe išvystytas kvantmechaninės sklaidos modelis gali būti sėkmingai taikomas kvantmechaninės sklaidos procesų sudėtinguose sklaidos potencialuose dėsningumams tyrinėti. Modelyje tinkamai įskaitoma sklaidos banginės funkcijos asimptotika kaip trumpasiekiams taip ir toliasiekiam kuloniniam potencialui. Modelis gali būti naudojamas kaip kvantmechaninės sklaidos eksperimentų aprašymo ir optimizavimo įrankis.

Būtina pažymėti, kad Niutono metodo teorinis konvergavimo greitis (kvadratinis) ir iteracinio proceso metu pasiekiami maži neatitikties Δ dydžiai ne visuomet užtikrina mažas faktines sprendžiamų uždavinių modeliavimo paklaidas. Šiame darbe, pritaikius tolydinį Niutono metodo analogą nagrinėjamiems kvantmechaninės sklaidos uždaviniams potencialinei ir rezonansinei sklaidai trumpasiekiuose ir kuloniniame potencialuose buvo pasiektas pakankamai aukštas rezultatų tikslumas lyginant su publikuojamais duomenimis (Flügge, 1998). Kita vertus, nors tolydinis Niutono metodo analogas buvo sėkmingai pritaikytas neutronų sklaidos aprašymui sudėtinguose, realistiniuose atomo branduolio potencialuose (Deveikis, 1999), faktinių modeliavimo paklaidų įvertinimas kitiems kvantmechaninės sklaidos uždaviniams ir įvairioms bangos skaičių reikšmėms gali pareikalauti atskirų tyrimų.

Skaitinio modeliavimo rezultatai parodė, kad gaunamos sklaidos radialiosios banginės funkcijos ir sklaidos fazės pasižymi pakankamu tikslumu kvantmechaninės sklaidos eksperimentų analizei. Išvystyta skaitinė O(h2) tikslumo eilės tolydinio Niutono metodo analogo schema gali būti taikoma sudėtingoms sklaidomų dalelių sąveikoms tirti. Sukurta kompiuterinė programa gali būti lengvai pritaikoma sklaidos uždaviniui sudėtinguose sklaidos potencialuose, tiesiog pakeičiant naudojamą sklaidos potencialą. Skaitinis modelis yra efektyvus, stabilus ir nereikalauja tikslesnio pradinio artinio skaitiniam sprendiniui, nei jo žinoma asimptotika. Atlikta analizė parinktiems sklaidos potencialams parodė, jog skaitinis kvantmechaninės sklaidos modelis yra universalus ir tinkamai aprašo kvantmechaninę potencialinę ir rezonansinę sklaidą.

Literatūra

Abramowitz, M., Stegun I. (1965). Handbook of Mathematical Functions. New York: Dover Publications.

Abrashkevich, A., Puzynin, I. (2004). "CANM, a program for numerical solution of a system of nonlinear equations using the continuous analog of Newton's method," Computer Physics Communications, Vol. 156, No. 2: 154–70.

Barnett, R. (1982). "COULFG: Coulomb and Bessel functions and their derivatives, for real arguments, by Steed's method," Computer Physics Communications, Vol. 27, No. 2: 147–66.

Deveikis, A. (1999). "Iteration scheme of continuous analogue of the Newton method for the scattering problem," Lithuanian Journal of Physics, Vol. 39, No. 3: 177–84.

Deveikis, A., Remeikis, V. (1999). "Calculational scheme of continuous analogue of the Newton method for reduced Hamiltonian eigenfunctions," Lithuanian Journal of Physics, Vol. 39, No. 2: 115–22.

Flügge, S. (1998). Practical Quantum Mechanics. Berlin: Springer.

Friedman, R., Jamieson, M. (1995). "Scattering by a pair of potential energy barriers," Computer Physics Communications, Vol. 85, No. 3: 382–88.

Los, V., Los, A, (2010). "On the quantum mechanical scattering from a potential step," Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical, Vol. 43, No. 5: doi:10.1088/1751-8113/43/5/055304.

Matsuda, M., Nagata, J., Yoshino, H., Yoshino, Y. (2000). "PANN: Partial-wave analysis of nucleon-nucleon scattering in wide-energy region," Computer Physics Communications, Vol. 131, No. 3: 225–63.

Newton, R. (1982). Scattering Theory of Waves and Particles. 2nd ed. Berlin: Springer.

Salvat, F., Mayol, R. (1993). "Elastic scattering of electrons and positrons by atoms," Computer Physics Communications, Vol. 74, No. 3: 358–74.

Samarskii, A. (2001). The Theory of Difference Schemes. New York: Marcel Dekker.

Vengalis, B., Šliužienė, K. (2011). "Heterostructures Based on Thin Films of Lanthanum Manganites and Multiferroic Bismuth Ferrite," Materials Science, Vol. 17, No. 4: 352–57.

A. Deveikis nuo 2000 m. yra Vytauto Didžiojo universiteto docentas. Jo mokslinių interesų sritis yra skaitiniai lengvųjų atomų branduolių aprašymo metodai, dalyvauja kuriant atomo branduolio banginių funkcijų antisimetrizacijos ir transliacinio invariantiškumo užtikrinimo metodikas, magnetinio momento, kvadrupolinio momento ir atomo branduolio spindulių skaičiavimo metodikas, sudarant ir tiriant nuklonų sklaidos iteracinės schemas, vystant efektyvinių atomo branduolio potencialų skaičiavimo procedūras.

MODELING QUANTUM MECHANICAL SCATTERING WITH CONTINUOUS ANALOGUE OF THE NEWTON METHOD

Algirdas Deveikis

Summary

Computational modelling of potential and resonant scattering for short range and Coulomb potentials was investigated in this study. The resonant scattering problem is formulated with the short range potential composed of a spherically symmetric square well and spherically symmetric square barrier. An iteration scheme of a continuous analogue of the Newton method for continuous spectral problem with correct asymptotic in uncoupled partial waves has been developed. The nonlinear representation of the scattering problem for the normalized radial Schrödinger equation is solved numerically using the difference sweep technique. The second order accuracy scheme developed allow to find scattering phases and wave functions as well as investigate their numerical evolution. The scattering phases and wave functions dependence on the scattering problem parameters have been studied.

Key words: quantum mechanical scattering, continuous analogue of the Newton method, Coulomb potential.