

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ С СИНГУЛЯРНЫМ ПОТЕНЦИАЛОМ

Семенов С.В.

Национальный исследовательский центр "Курчатовский Институт",
Sergei_Semenov@inbox.ru

Задача об определении уровней энергии и волновой функции для связанного состояния квантовомеханической системы рассматривается при исследованиях в области атомной и ядерной физики, квантовой химии, физики элементарных частиц. Так как аналитическое решение возможно только для нескольких потенциалов, то необходимо развивать численные подходы. Наиболее эффективным методом, широко применяемом во всем мире, является трехточечный рекуррентный метод Нумерова [1]. При этом необходимо решить проблему сингулярности в начале координат, которой обладают многие потенциалы, входящие в радиальные уравнения. Например, в [2] с этой целью используется модификация схемы конечных разностей для вычисления второй производной искомой функции при нулевом радиусе. В докладе предложен способ учета сингулярности на основе полиномиальной экстраполяции. Развитый подход позволяет определить спектр масс мезонов в кварковой модели [3]. Показано, что данный способ приводит к увеличению точности и быстродействия вычислительного метода.

Литература.

1. Нумеров Б.В. Труды Центральной Астрофизической Обсерватории, 2, 188 (1933)
2. E. Buendia and R. Guardiola, J. Comput. Phys., 60, 561 (1985)
3. Семенов С.В., Хрущев В.В., Ядерная физика, т. 56, вып. 5, стр. 218 (1993)