

Министерство науки и высшего образования
Российской Федерации
Федеральное государственное
бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«Тверской государственный университет»

**ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ
ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ,
НАНОСТРУКТУР
И НАНОМАТЕРИАЛОВ**

**PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS
OF THE STUDY OF CLUSTERS,
NANOSTRUCTURES AND
NANOMATERIALS**

**FIZIKO-HIMIČESKIE ASPEKTY
IZUČENIÂ KLASTEROV,
NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

выпуск 11

ТВЕРЬ 2019

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Ф50

Рецензирование статей осуществляется на основании Положения о рецензировании статей и материалов для опубликования в Межвузовском сборнике научных трудов «Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов».

Официальный сайт издания в сети Интернет:

<https://www.physchemaspects.ru>

Ф50 Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов [Текст]. – Тверь: Твер. гос. ун-т, 2019. – Вып. 11. – 680 с.

Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.

Издание составлено из оригинальных статей, кратких сообщений и обзоров теоретического и экспериментального характера, отражающих результаты исследований в области изучения физико-химических процессов с участием кластеров, наноструктур и наноматериалов физики, включая межфазные явления и нанотермодинамику. Сборник предназначен для научных и инженерно-технических работников, преподавателей ВУЗов, студентов и аспирантов. Издание подготовлено на кафедре общей физики Тверского государственного университета.

Переводное название: Physical and chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials

Транслитерация названия: Fiziko-himicheskie aspekty izučeniâ klasterov, nanostruktur i nanomaterialov

УДК 620.22:544+621.3.049.77+539.216.2:537.311.322: 530.145

ББК Ж36:Г5+В379

Print ISSN 2226-4442

Online ISSN 2658-4360

© Коллектив авторов, 2019

© Тверской государственный университет, 2019

РЕДАКЦИОННАЯ КОЛЛЕГИЯ

Самсонов Владимир Михайлович – профессор кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», профессор, д.ф.-м.н. (главный редактор), Тверь, Россия

Сдобняков Николай Юрьевич – доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», к.ф.-м.н., доцент (заместитель главного редактора, ответственный секретарь), Тверь, Россия

Альмов Михаил Иванович – директор ФГБУН «Институт структурной микродинамики и проблем материаловедения имени А.Г.Мерзлякова Российской академии наук», член-корреспондент Российской академии наук, профессор, д.т.н., Москва, Россия

Байдаков Владимир Георгиевич – профессор Департамента фундаментальной и прикладной физики ФГБУН «Институт теплофизики УрО РАН», профессор, д.ф.-м.н., Екатеринбург, Россия

Базулев Анатолий Николаевич – доцент кафедры общей физики ФГБОУ ВО «Тверской государственный университет», к.ф.-м.н., доцент, Тверь, Россия

Белов Александр Николаевич – профессор Института перспективных материалов и технологий ФГАОУ ВО «Национальный исследовательский университет «Московский институт электронной техники», д.т.н., Москва, Россия

Бродская Елена Николаевна – ведущий научный сотрудник кафедры коллоидной химии Института химии ФГБОУ ВО «Санкт-Петербургский государственный университет», профессор, д.ф.-м.н., Санкт-Петербург, Россия

Гафнер Юрий Яковлевич – и.о. заведующего кафедрой физики и информационных технологий, заведующий лабораторией «Нанопизика» ФГБОУ ВО «Хабарский государственный университет имени Н.Ф.Катанова», профессор, д.ф.-м.н., Абакан, Россия

Дулесов Александр Сергеевич – профессор кафедры информационных технологий и систем ФГБОУ ВО «Хабарский государственный университет имени Н.Ф.Катанова», доцент, д.т.н., Абакан, Россия

Иванов Виктор Александрович – доцент кафедры физики полимеров и кристаллов ФГБОУ ВО «Московский государственный университет имени М.В.Ломоносова», доцент, д.ф.-м.н., Москва, Россия

Karthy George – doctor of science, vice-director of the University of Mysore, Mysore, Hungary

Карамурзов Барсанн Сулейманович – президент ФГБОУ ВО «Кабардино-Балкарский государственный университет имени Х.М.Бербекова», академик Российской академии образования, д.т.н., профессор, Нальчик, Россия

Коваль Николай Николаевич – заведующий лабораторией плазменной эмиссионной электроники ФГБУН «Институт сильноточной электроники СО РАН», д.т.н., профессор, Томск, Россия

Комаров Павел Вячеславович – старший научный сотрудник кафедры физики полимеров и кристаллов ФГБУН «Институт элементоорганических соединений им. А.Н.Несмеянова Российской академии наук», д.ф.-м.н., профессор, Москва, Россия

Ларин Сергей Владимирович – заместитель директора по научной работе ФГБУН «Институт высокомолекулярных соединений Российской академии наук», к.ф.-м.н., Санкт-Петербург, Россия

Мазо Михаил Абрамович – старший научный сотрудник ФГБУН «Институт атомной физики имени Н.Н.Семенова Российской академии наук», к.ф.-м.н.,

ТЕОРИЯ НАНОСИСТЕМ

УДК 519.68:[519.1+519.6]. 51-72:530.145

Краткое сообщение

РЕШЕНИЕ ОДНОМЕРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА
С УЧЕТОМ ЭФФЕКТОВ ТУННЕЛИРОВАНИЯ МЕТОДОМ
КОМПЬЮТЕРНОГО РАСЧЕТА

И.Н. Белыева¹, И.К. Кириченко², О.Д. Пташный³, Н.А. Чеканов¹, Н.Н. Чеканова⁴,
Т.А. Ярко¹

¹ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный
исследовательский университет»
308013, Россия, Белгород, ул. Победы, 85

²Национальный университет гражданской защиты Украины
61023, Украина, Харьков, ул. Чернышевская, 94

³Харьковский Национальный автомобильно-дорожный университет
61002, Украина, Харьков, ул. Ярослава Мудрого, 25

⁴Харьковский учебно-научный институт ГБУЗ «Университет банковского дела»
61202, Украина, Харьков, пр. Победы, 55

ibelyeva@bgu.edu.ru, shekatov@bgu.edu.ru, okt238@rambler.ru

DOI: 10.26456/physci/2019.11.283

Аннотация: Изложена общая схема метода интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с регулярными особыми точками. Приведен алгоритм нахождения общего решения дифференциального уравнения второго порядка с регулярными особыми точками. Рассмотрено уравнение Шредингера для ангармонического осциллятора с потенциалом четвертой, шестой и восьмой степени нелинейности, найдены значения его энергетического спектра.
Ключевые слова: обыкновенное дифференциальное уравнение, ангармонический осциллятор, волновая функция, обобщенные степенные ряды.

В настоящее время объектами интенсивных экспериментальных и теоретических исследований являются, в частности, полупроводниковые наноструктуры. В них движение электронов (носителей электрического тока) ограничено и в результате существенно меняется большинство электронных свойств. Движение электронов в микроскопических полупроводниках подчиняется законам квантовой механики и описывается уравнением Шредингера с потенциалом, имеющим несколько локальных минимумов, разделенных барьерами с классически запрещенными областями движения, но возможными из-за квантового явления туннелирования [1-6].

В данной работе изложен метод интегрирования уравнения Шредингера в виде степенных рядов, предложенный ранее в работе [6], и приведены результаты расчетов для уравнения Шредингера с потенциалами с двумя и тремя минимумами для квантовых ангармонических осцилляторов. Представлен также алгоритм построения линейно независимых решений для одномерного уравнения Шредингера, с помощью которых определяется волновая функция [7, 9, 10].

1. Общая схема метода интегрирования обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка с регулярными особыми точками

Рассмотрим уравнение типа

$$y'' + \frac{p(\sigma)}{\sigma - \sigma_0} y' + \frac{q(\sigma)}{(\sigma - \sigma_0)^2} y = 0, \quad (1)$$

где $p(\sigma) = \sum_{k=0}^n p_k (\sigma - \sigma_0)^k$, $q(\sigma) = \sum_{k=0}^m q_k (\sigma - \sigma_0)^k$, сходящиеся степенные ряды, σ_0 – особая регулярная точка. Находим два линейно независимых решения $y_1(x)$ и $y_2(x)$ задачи Коши (1) со следующими начальными условиями

$$\begin{cases} y_1(x_0) = 1, \\ y_1'(x_0) = 0, \end{cases} \quad \text{и} \quad \begin{cases} y_2(x_0) = 0, \\ y_2'(x_0) = 1. \end{cases}$$

Решение уравнения (1) ищем в виде обобщенного ряда

$$y = (\sigma - \sigma_0)^\rho \sum_{k=0}^{\infty} a_k (\sigma - \sigma_0)^k,$$

где показатель ρ есть некоторое постоянное число, которое находится из так называемого определяющего уравнения

$$\rho(\rho - 1) + p_0 \rho + q_0 = 0.$$

Если корни определяющего уравнения различны и $\rho_1 \neq \rho_2$, а их разность $\rho_1 - \rho_2$ не равна целому положительному числу, то два линейно независимых решения имеют вид

$$y_1 = x^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k, \quad y_2 = x^{\rho_2} \sum_{k=0}^{\infty} a_k' x^k.$$

Если $\rho_1 - \rho_2$ есть целое положительное число, то одно решение, соответствующее корню ρ_1 , по-прежнему имеет вид

$$y_1 = x^{\rho_1} \sum_{k=0}^{\infty} a_k x^k,$$

а второе линейно независимое решение можно найти по формуле Остроградского-Лиувилля

$$y_2 = y_1 \left[C \int \frac{e^{-\rho_1 x}}{y_1^2} dx + C' \right],$$

где $C, C' = const$, и оно может содержать логарифмические члены, а если $\rho_1 - \rho_2 = 0$, то решение обязательно содержит логарифмический член [7].

2. Алгоритм нахождения общего решения дифференциального уравнения второго порядка с регулярными особыми точками

1. Ввод начальных данных: n, σ_0 – максимальный порядок степенных рядов

и особая точка.

2. Разложение функций $p(x)$, $q(x)$ в степенной ряд.
3. Вычисление коэффициентов разложения $p(x)$, $q(x)$.
4. Вычисление корней определяющего уравнения и нахождение соответствующих корней ρ_1, ρ_2 .
5. Оценка значений корней ρ_1, ρ_2 определяющего уравнения.
6. Построение первого решения W_1 в зависимости от полученных значений ρ_1, ρ_2 .
7. Вычисление второго линейно-независимого решения W_2 по формуле Остроградского-Лиувилля.
8. Составление общего решения обыкновенного дифференциального уравнения.
9. Сравнение полученных результатов с результатами, полученными при помощи рекуррентных соотношений.

3. Одномерное уравнение Шредингера для ангармонического осциллятора в случае одного минимума

Рассмотрим одномерное уравнение Шредингера для ангармонического осциллятора с потенциалом четвертой, шестой и восьмой степенями нелинейности:

$$\hat{H}_\mu \psi(x) = E \psi(x), \quad (2)$$

$$\hat{H}_\mu \equiv -\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2} x^2 + \alpha x^\mu, \quad (3)$$

где x – пространственная координата, $\mu = 4, 6, 8$ – степень нелинейности, α – параметр, $\psi(x)$ – волновая функция и E – спектр оператора (3). Требуется найти спектр оператора (3), т.е. все значения постоянной E , удовлетворяющие уравнению (2). Энергетический спектр задачи (2)-(3) можно рассчитать с помощью степенных рядов. Очевидно, что задача (2)-(3) эквивалентна следующей краевой задаче

$$\psi''(x) + 2(E - V(x))\psi(x) = 0, \quad \psi(\pm\infty) = 0, \quad (4)$$

в которой потенциал $V(x) \equiv (1/2)x^2 + \alpha x^\mu$ ($\mu = 4, 6, 8$), $\psi''(x) \equiv d^2\psi/dx^2$.

Будем искать фундаментальную систему решений (ψ_1, ψ_2) задачи (4) в виде рядов

$$\psi_1(x, E) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k, \quad \psi_2(x, E) = x + \sum_{k=1}^{\infty} b_k x^k, \quad (5)$$

где неизвестные коэффициенты a_k и b_k зависят от энергии E и находятся подстановкой рядов (5) в уравнение (4). Первые члены разложения

линейно независимых решений (4) $\psi_1(x, E)$ и $\psi_2(x, E)$ имеют вид:

$$\begin{aligned} \mu = 4: \psi_1(x, E) &= 1 - Ex^3 + \left(\frac{E^2}{6} + \frac{1}{12}\right)x^4 + \left(-\frac{E^3}{90} - \frac{7E}{180} + \frac{\alpha}{15}\right)x^5 + \\ &+ \left(\frac{E^4}{2520} + \frac{11E^2}{2520} - \frac{4\alpha E}{105} + \frac{1}{672}\right)x^6 + \left(-\frac{E^5}{113400} - \frac{E^3}{4536} + \frac{43\alpha E^2}{9450} + \frac{7\alpha}{2700} - \frac{211E}{453600}\right)x^7 + \dots, \\ \psi_2(x, E) &= x - \frac{E}{3}x^2 + \left(\frac{E^2}{30} + \frac{1}{20}\right)x^3 + \left(-\frac{E^3}{630} - \frac{13E}{1260} + \frac{\alpha}{21}\right)x^4 + \\ &+ \left(\frac{E^4}{22680} + \frac{17E^2}{22680} - \frac{2\alpha E}{189} + \frac{1}{1440}\right)x^5 + \left(-\frac{E^5}{1247400} - \frac{E^3}{35640} + \frac{83\alpha E^2}{103950} - \frac{59E}{554400} + \frac{31\alpha}{23100}\right)x^6 + \dots \\ \mu = 6: \psi_1(x, E) &= 1 - Ex^3 + \left(\frac{E^2}{6} + \frac{1}{12}\right)x^4 - \left(\frac{E^3}{90} + \frac{7E}{180}\right)x^5 + \left(\frac{E^4}{2520} + \frac{11E^2}{2520} + \frac{\alpha}{28} + \frac{1}{672}\right)x^6 - \\ &- \left(\frac{E^5}{113400} + \frac{E^3}{4536} + \frac{211E}{453600} + \frac{29\alpha E}{1260}\right)x^7 + \dots, \\ \psi_2(x, E) &= x - \frac{E}{3}x^2 + \left(\frac{E^2}{30} + \frac{1}{20}\right)x^3 - \left(\frac{E^3}{630} + \frac{13E}{1260}\right)x^4 + \left(\frac{E^4}{22680} + \frac{17E^2}{22680} + \frac{\alpha}{36} + \frac{1}{1440}\right)x^5 - \\ &- \left(\frac{E^5}{1247400} + \frac{E^3}{35640} + \frac{59E}{554400} + \frac{13\alpha E}{1980}\right)x^6 + \dots, \\ \mu = 8: \psi_1(x, E) &= 1 - Ex^3 + \left(\frac{E^2}{6} + \frac{1}{12}\right)x^4 - \left(\frac{E^3}{90} + \frac{7E}{180}\right)x^5 + \left(\frac{E^4}{2520} + \frac{11E^2}{2520} + \frac{1}{672}\right)x^6 - \\ &- \left(\frac{E^5}{113400} + \frac{E^3}{4536} + \frac{211E}{453600} + \frac{\alpha}{45}\right)x^7 + \dots, \\ \psi_2(x, E) &= x - \frac{E}{3}x^2 + \left(\frac{E^2}{30} + \frac{1}{20}\right)x^3 - \left(\frac{E^3}{630} + \frac{13E}{1260}\right)x^4 + \\ &+ \left(\frac{E^4}{22680} + \frac{17E^2}{22680} + \frac{1}{1440}\right)x^5 - \left(\frac{E^5}{1247400} + \frac{E^3}{35640} + \frac{59E}{554400} - \frac{\alpha}{55}\right)x^6 + \dots \end{aligned}$$

Следуя общей теории решения дифференциальных уравнений, общее решение задачи (4) запишем в виде

$$\psi(x) = C_1\psi_1(x) + C_2\psi_2(x),$$

где C_1 и C_2 – произвольные постоянные. Для того чтобы общее решение $\psi(x)$ удовлетворяло начальным условиям $\psi(\pm\infty) = 0$, необходимо выбрать произвольные постоянные C_1 и C_2 таким образом, чтобы система

$$\begin{cases} C_1\psi_1(-R, E) + C_2\psi_2(-R, E) = 0, \\ C_1\psi_1(R, E) + C_2\psi_2(R, E) = 0 \end{cases} \quad (6)$$

имела нетривиальные решения. В системе (6) параметр R играет роль

бесконечности. Подбирая его значения, необходимо получить совпадение собственных значений в наибольшем количестве первых десятичных знаков, в частности, для нижних уровней энергии в наших расчетах $R \in (4,10; 4,15]$. Приравняв к нулю определитель системы (6), получим уравнение относительно E , корни которого являются спектром задачи (2)-(3). Для каждого вычисленного корня E_n система (6) имеет единственное решение $C_1^{(n)}$ и $C_2^{(n)}$, поэтому волновая функция n -го энергетического уровня имеет вид

$$\psi_n(x) = C_1^{(n)}\psi_1(x) + C_2^{(n)}\psi_2(x).$$

Таким образом, данный метод позволяет не только вычислить собственные значения рассматриваемого оператора, но и позволяет рассчитать его волновые функции.

4. Значения энергетического спектра уравнения Шредингера для ангармонических осцилляторов

Для получения уровней энергии и волновых функций гамильтониана (3) описанным выше методом составлена программа в среде Maple 11.

Таблица 1. Сравнение собственных значений оператора (3), полученных различными методами при различных μ, α

$\mu = 4, \alpha = 10^{-3}$			
n	Спектр E_{μ}	Спектр $E_{\mu, \alpha}$ [49с]	ε
0	1,000748	1,000748	$3 \cdot 10^{-4}$
1	3,00374	3,00373	$2 \cdot 10^{-4}$
2	5,0098	5,0097	$2 \cdot 10^{-4}$
3	7,019	7,0186	0,017
4	9,045	9,0305	0,165
$\mu = 6, \alpha = 10^{-4}$			
0	1,00018	1,00018	0
1	3,0013	3,0013	0
2	5,0047	5,0046	$9 \cdot 10^{-4}$
3	7,012	7,011	0,014
4	9,033	9,023	0,1
$\mu = 8, \alpha = 10^{-3}$			
0	1,00006	1,00006	0
1	3,00059	3,00058	$3 \cdot 10^{-4}$
2	5,0027	5,0026	$2 \cdot 10^{-4}$
3	7,0095	7,0083	0,016
4	9,03	9,02	0,12

Здесь через n обозначен номер уровня, E_{μ} – значения энергии, полученные при помощи степенных рядов, $E_{\mu, \alpha}$ – значения энергии [8], ε – относительные отклонения уровней энергии от значений [8].

В Таблице 1 приведены сравнения значений энергетического спектра оператора Шредингера, вычисленных с помощью упомянутой программы, с результатами работы [8], в которой приведены наиболее достоверные значения спектров ангармонических осцилляторов. Как видно из Таблицы 1, имеется хорошее согласие результатов при данных значениях параметров.

5. Одномерное уравнение Шредингера в случае двухявного потенциала

Рассмотрена исходная задача решения дифференциального уравнения (2)-(3) с двухявным потенциалом [9]

$$V(x) \equiv \alpha(x^2 - a^2)^2.$$

Данная задача представлена в виде решения уравнения вида

$$\psi'(x) + 2(E - V(x))\psi(x) = 0, \quad \psi(\pm\infty) = 0, \quad (7)$$

для которого найдена фундаментальная система решений в виде степенных рядов

$$\psi_1(x, E) = 1 + \sum_{k=1}^{\infty} a_k x^k, \quad \psi_2(x, E) = x + \sum_{k=1}^{\infty} b_k x^k,$$

где неизвестные коэффициенты a_k и b_k зависят от энергии. Вычисления были проведены с использованием математического пакета Maple 11.

Первые члены ряда (5) имеют вид

$$\begin{aligned} & 1 + (-E + 16\alpha)x^2 + \left(\frac{1}{6}E^2 - \frac{16}{3}E\alpha + \frac{128}{3}\alpha^2 - \frac{4}{3}\alpha\right)x^4 + \\ & + \left(-\frac{1}{90}E^3 + \frac{8}{15}E^2\alpha - \frac{128}{15}E\alpha^2 + \frac{28}{45}E\alpha + \frac{2048}{45}\alpha^3 - \frac{448}{45}\alpha^2 + \frac{1}{15}\alpha\right)x^6 + \\ & x + \left(-\frac{1}{3}E + \frac{16}{3}\alpha\right)x^3 + \left(\frac{1}{30}E^2 - \frac{16}{15}E\alpha + \frac{128}{15}\alpha^2 - \frac{4}{5}\alpha\right)x^5 + \\ & + \left(-\frac{1}{630}E^3 + \frac{8}{105}E^2\alpha + \frac{52}{315}E\alpha - \frac{128}{105}E\alpha^2 + \frac{2048}{315}\alpha^3 - \frac{832}{315}\alpha^2 + \frac{1}{21}\alpha\right)x^7. \end{aligned}$$

Общее число членов в рядах (5) (number of members) в вычислениях (при $\alpha = 0,5$) варьировалось от 195 и до 198 в зависимости от высоты энергетического уровня. Причем для построения волновых функций низких уровней приходилось удерживать больше слагаемых, т.к. точность значительно падает при увеличении толщины потенциального барьера.

Библиографический список:

1. Демитовский, В.Я. Физика квантовых низкоразмерных структур / В.Я. Демитовский. – М.: Логос, 2000. – 248 с.
2. Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 704 с.

3. Шрёдингер, Э. Избранные труды по квантовой механике / Э. Шрёдингер – М.: Наука, 1976. – 422 с.
4. Belyaeva, I.N. A symbolic-numeric approach for solving the eigenvalue problem for the one-dimensional Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov, A.A. Gusev, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitzky // In: Computer Algebra in Scientific Computing, CASC 2006. Lecture Notes in Computer Science; ed. by V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2006. – V. 4194. – P. 23-32.
5. Беляева, И.Н. Метод решения одномерного уравнения Шрёдингера при помощи степенных рядов / И.Н. Беляева, Н.А. Чеканов // Вестник Тамбовского государственного университета. – 2006. – Т. 11. – Вып. 2. – С. 168-171.
6. Беляева, И.Н. Аналитическо-численный метод решения краевой задачи уравнения Шрёдингера / И.Н. Беляева, И.А. Кузнецова, Н.А. Чеканов // Вестник Херсонского университета. – 2006. – Вып. 2(25) – С. 40-46.
7. Трикоми, Ф. Дифференциальные уравнения / Ф. Трикоми. – М.: Издательство иностранной литературы, 1962. – 352 с.
8. Banerjee, K. The anharmonic oscillator / K. Banerjee, S. P. Bhatnagar, V. Choudhry and S. S. Kamal // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering Sciences. – 1978. – V. 360. – I. 1703. – P. 575-586.
9. Van der Straeten, E. The quantum double-well anharmonic oscillator in external field / E. Van der Straeten, J. Naudts // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2006. – V. 39. – № 4. – P. 933-940.
10. Чеканов, Н.А. Символьно-численные методы решения дифференциальных уравнений классической и квантовой механики / Н.А. Чеканов, И.Н. Беляева, И.К. Кыргаченко, Н.Н. Чеканова. – Харьков: «ИСМА», 2019. – 420 с.

References:

1. Demikhovskij, V.Ya. Physics of quantum low-dimensional structures / V.Ya. Demikhovskij. – M.: Logos, 2000. – 248 p. (In Russian).
2. Davydov, A.S. Quantum mechanics / A.S. Davydov. – M.: Nauka, 1973. – 704 p. (In Russian).
3. Schrödinger, E. Selected works on quantum mechanics / E. Schrödinger. – M.: Nauka, 1976. – 422 p. (In Russian).
4. Belyaeva, I.N. A symbolic-numeric approach for solving the eigenvalue problem for the one-dimensional Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov, A.A. Gusev, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitzky // In: Computer Algebra in Scientific Computing, CASC 2006. Lecture Notes in Computer Science; ed. by V.G. Ganzha, E.W. Mayr, E.V. Vorozhtsov. – Springer, Berlin, Heidelberg, 2006. – V. 4194. – P. 23-32.
5. Belyaeva, I.N. Method for solving the one-dimensional Schrödinger equation using power series / I.N. Belyaeva, N.A. Chekanov // Vestnik Tambovskogo gosudarstvennogo universiteta. – 2006. – V. 11. – I. 2. – P. 168-171. (In Russian).
6. Belyaeva, I.N. Analytical-numerical method for solving the boundary value problem of the Schrödinger equation / I.N. Belyaeva, I.A. Kuznetsova, N.A. Chekanov // Vestnik Khersonskogo universiteta. – 2006. – I. 2(25) – P. 40-46. (In Russian).
7. Tricomi, F. Differential equations / F. Tricomi. – M.: Izdatel'stvo inostranoj literatury, 1962. – 352 352p. (In Russian).
8. Banerjee, K. The anharmonic oscillator / K. Banerjee, S. P. Bhatnagar, V. Choudhry and S. S. Kamal // Proceedings of the Royal Society A: Mathematical, Physical and Engineering

Sciences. – 1978. – V. 360. – I. 1703. – P. 575-586.

9. Van der Straeten, E. The quantum double-well anharmonic oscillator in external field / E. Van der Straeten, J. Naudts // Journal of Physics A: Mathematical and General. – 2006. – V. 39. – № 4. – P. 933-940.

10. Chekanov, N.A. Symbol-numerical methods for solving differential equations of classical and quantum mechanics / N.A. Chekanov, I.N. Belyaeva, I.K. Kirichenko, N.N. Chekanova. – Kharkiv: «ISMA», 2019. – 420 p. (In Russian).

Short communication

**THE COMPUTER – ASSISTED SOLUTION OF THE ONE – DIMENSIONAL
SCHRÖDINGER EQUATION TAKING INTO ACCOUNT TUNNELING EFFECTS**

I.N. Belyaeva¹, I.K. Kirichenko², O.D. Ptashnyi³, N.N. Chekanova⁴, N.A. Chekanov⁵, T.A. Yarkho⁶

¹Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

²National University of Civil Defence of Ukraine, Kharkiv, Ukraine

³Kharkiv National Automobile and Highway University, Kharkiv, Ukraine

⁴Kharkiv Educational and Research Institute of the Higher Educational Institution

«University of Banking», Kharkiv, Ukraine

DOI: 10.26456/pcasium/2019.11.283

Abstract: The general scheme of the method of integration of the second order ordinary differential equations with regular singular points is outlined. The algorithm of finding a general solution of the second order differential equation with regular singular points is given. The Schrödinger equation for anharmonic oscillator with the potential of the fourth, sixth and eighth degrees of non-linearity is considered, the values of its energy spectrum are found.

Keywords: ordinary differential equation, anharmonic oscillator, wave function, generalized power series.

Беляева Ирина Николаевна – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры информатики, естественнонаучных дисциплин и методики преподавания, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»

Кириченко Игорь Константинович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры физико-математических дисциплин Национального университета гражданской защиты Украины

Пташный Олег Дмитриевич – к.м.н., доцент, доцент кафедры высшей математики Харьковского национального автомобильно-дорожного университета

Чеканова Наталья Николаевна – к.ф.-м.н., доцент, доцент кафедры информационных технологий Харьковского учебного-научного института ГВУЗ «Университет банковского дела»

Чеканов Николай Александрович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры дифференциальных уравнений, ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»

Ярко Татьяна Александровна – д.м.н., доцент, заведующий кафедрой высшей математики Харьковского национального автомобильно-дорожного университета

Irina N. Belyaeva – Ph. D, Docent, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University

Igor K. Kirichenko – Dr. Sc., Professor, Department of physical and mathematical sciences, National University of Civil Defence of Ukraine

Oleg D. Ptashnyi – Ph. D, Docent, Department of Higher Mathematics, Kharkiv National Automobile and Highway University

Natalia N. Chekanova – Ph. D, Docent, Department of Information Technology Kharkiv Educational and Research Institute of the Higher Educational Institution «University of Banking»

Nikolai A. Chekanov – Dr. Sc., Professor, Department of Computer Science, Natural Sciences and Teaching Methods, Belgorod National Research University

Tatyana A. Yarkho – Dr. Sc., Docent, Department of Higher Mathematics, Kharkiv National Automobile and Highway University

Получена в редакцию/accepted: 10.10.2019, после рецензирования/revision: 19.10.2019, принята/accepted 04.11.2019.

Междувузовский сборник научных трудов
Выпуск 11, 2019

Малышenko В.В., Малышenko Т.И. Особенности дислокационной динамики в приповерхностной зонеобласти кристалла <i>Malashenko V.V., Malashenko T.I.</i> Features of dislocation dynamics in near-surface zoneoblasti of crystal	192
Малышenko О.В., Теслякова Е.С., Малышenko Н.Е., Иванова А.И. Структурные особенности керамики ниобата натрия-лития <i>Malashenko O.V., Teslyakova E.S., Malashenko N.E., Ivanova A.I.</i> Structural features of sodium - lithium niobate ceramics	198
Милехин Ю.М., Корсиков А.А., Корсиков И.А., Рогозина А.А. Кинетика термического разложения энергетического композиционного материала на инертном связующем <i>Milekhin Yu.M., Korsikov A.A., Korsikov I.A., Rogozina A.A.</i> Thermal decomposition kinetics of an energy composite material on the basis of inert binding	206
Остроушко А.А., Русских О.В., Гагарин Н.Д., Филонова Е.А. Изучение генерирования зарядов при синтезе наноразмерных слоистых оксидов в реакциях горения органико-неорганических прекурсоров <i>Ostroushko A.A., Russkikh O.V., Gagarin N.D., Filonova E.A.</i> Study of the charge generation in the synthesis of nanosized complex oxides in the combustion reactions of organo-inorganic precursors	215
Сидоров Н.В., Теслякова Н.А., Титов Р.А., Палашиков М.Н. Влияние бора на структурные особенности и фоторефрактивные свойства монокристалла $LiNbO_3$ <i>Sidorov N.V., Teslyakova N.A., Titov R.A., Palashikov M.N.</i> Influence of boron on structural features and photorefractive properties of $LiNbO_3$ single crystals	223
Сародуб О.Р., Воскресенский В.М., Сидоров Н.В., Палашиков М.Н. Анализ кластерообразования в монокристаллах ниобата лития <i>Sarodub O.R., Voskresenskiy V.M., Sidorov N.V., Palashikov M.N.</i> Analysis of cluster formation in modeled lithium niobate crystals	232
Теслякова Н.А., Сидоров Н.В., Палашиков М.Н. Фоторефрактивные свойства и оптическая однородность кристаллов $LiNbO_3$ (6,0 вес. % K_2O) <i>Teslyakova N.A., Sidorov N.V., Palashikov M.N.</i> Photorefractive properties and optical uniformity of crystals $LiNbO_3$ (6,0 wt. % K_2O)	241
Халико С.Д., Рогозин М.Н., Макарова Р.А., Семенова Р.Г. Использование метода дилатационной релаксии для анализа свойств наноразмерных систем <i>KhaliKo S.D., Rogozin M.I., Makarova R.A., Semanova R.G.</i> Using the dilatational rheology method for analysis of nanosized systems	249
Хубатов Е.М., Подшивов В.П. Особенности электродонного эффекта в слоистых оксидах переходных металлов <i>Khubatov E.M., Podshivov V.P.</i> Features of the electrodonium effect in complex transition metal oxides	259
Шибалин А.В., Шибалина А.В. Некоторые особенности высокотемпературных фазовых равновесий в наночастицах системы $Ni_3 - Ge_{1-x}$ <i>Shibalin A.V., Shibalina A.V.</i> Several peculiarities of high-temperature phase equilibria in nanoparticles of the $Ni_3 - Ge_{1-x}$ system	268
Шомаков З.В., Милошанов О.А., Кармолов А.М. О некоторых аспектах исследования электропроводности в специальных стеклах электронной оптики <i>Shomakhov Z.V., Miloshanov O.A., Karmolov A.M.</i> On special features of studying electric conductivity in special electron optics glasses	277
ТЕОРИЯ НАНОСИСТЕМ	
Белков И.Н., Кириченко И.К., Пташский О.Д., Чекалова Н.А., Чекалов Н.Н., Ярко Т.А. Решение одномерного уравнения Шредингера с учетом эффектов туннелирования методом компьютерного расчета <i>Belkov I.N., Kirichenko I.K., Ptashkiy O.D., Chekalova N.N., Chekalov N.N., Yarko T.A.</i> The computer - assisted solution of the one - dimensional Schrödinger equation taking into account tunneling effects	283

*Межвузовский сборник научных трудов
Выпуск 11, 2019*

Учредитель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет»

Научное издание

ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ АСПЕКТЫ ИЗУЧЕНИЯ КЛАСТЕРОВ, НАНОСТРУКТУР И НАНОМАТЕРИАЛОВ

**ПЕРЕВОДНОЕ НАЗВАНИЕ: PHYSICAL AND CHEMICAL ASPECTS OF THE
STUDY OF CLUSTERS, NANOSTRUCTURES AND NANOMATERIALS**

**ТРАНСЛИТЕРАЦИЯ НАЗВАНИЯ: FIZIKO-KHIMICHESKIE ASPEKTY IZUČENIA
KLASTEROV, NANOSTRUKTUR I NANOMATERIALOV**

Самсонов Владимир Михайлович – главный редактор;

Сдобняков Николай Юрьевич – заместитель главного редактора, ответственный секретарь.

Адрес редакции: 170002, Россия, г. Тверь, Саловый пер., д. 35, ауд. 217.

МЕЖВУЗОВСКИЙ СБОРНИК НАУЧНЫХ ТРУДОВ

*Зарегистрирован Федеральной службой по надзору в сфере связи, информационных технологий и массовых коммуникаций, свидетельство о регистрации СМИ
ПИ № ФС 7747789 от 13.12.2011.*

Индекс издания в каталоге «Издания органов научно-технической информации» – 57378.
Каталожная цена – 5500 рублей.

выпуск 11

Дата выхода в свет 15.12.2019

Печатается с оригиналов авторов

Подписано в печать 19.11.2019. Формат 60 × 84 1/16.

Усл. печ. л. 42,5. Тираж 500 экз. Заказ № 465.

Издатель – Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение высшего образования «Тверской государственный университет».

Адрес: Россия, 170100, г. Тверь, ул. Желязова, д. 33.

Отпечатано в редакционно-издательском управлении
Тверского государственного университета.

Адрес: Россия, 170100, г. Тверь, Студенческий пер., д. 12, корпус Б.
Тел. РИУ: 8 (4822) 35-60-63.