

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 «Нанофизика» 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 Барсан 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 химической физики имени Н.Н.Семенова Российской академии наук», к.ф.-м.н.,

**УЧЕТ ЭФФЕКТОВ ТУННЕЛИРОВАНИЯ ПРИ ВЫЧИСЛЕНИИ
ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА**

И.Н. Беллева¹, Н.А. Чекалов¹, И.К. Кириченко², Н.Н. Чекалова³

¹ФГАОУ ВО «Белгородский государственный национальный исследовательский университет»

308015, Россия, Белгород, ул. Победы, 85

²Национальный университет гражданской защиты Украины

61023, Украина, Харьков, ул. Чернышевская, 94

³Харьковский учебно-научный институт ГВУЗ «Университет Банковского дела»,
61202, Украина, Харьков, пр. Победы, 55

chekalov@bgu.edu.ru

DOI: 10.26456/pcascm/2019.11.291

Аннотация: Изложен общий прием метода интегрирования дифференциальных уравнений второго порядка в виде степенных рядов. Приведены результаты расчетов для уравнения Шредингера с потенциалами с двумя и тремя минимумами для квантовых ангармонических осцилляторов. Необходимая точность расчетов контролируется числом членов в степенных рядах и количеством знаков в мантиссе десятичных чисел. Показана структура расположения энергетических уровней и волновые функции.

Ключевые слова: обыкновенное дифференциальное уравнение, энергетический спектр, 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].

В соответствии с этим методом для интегрирования уравнения Шредингера

$$\left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \psi(x) = E \psi(x), \quad (1)$$

где $V(x)$ – потенциальная функция, $V(+\infty) = \alpha$, $\psi(x)$ – квадратично интегрируемая функция на $(-\infty, \infty)$, $\psi(-\infty) = \psi(+\infty) = 0$, E – собственные значения, вначале решается задача Коши для дифференциального уравнения

$$y''(x) + 2[E - V(x)]y(x) = 0 \quad (2)$$

с начальными данными

$$\begin{cases} y_1(x_0, E) = a, & a \neq 0, \\ y_1'(x_0, E) = 0, \end{cases} \quad \text{и} \quad \begin{cases} y_2(x_0) = b, & b \neq 0, \\ y_2'(x_0) = 1. \end{cases} \quad (3)$$

находятся два линейно независимых решения $y_1(x, E)$ и $y_2(x, E)$ в виде явных степенных рядов, в общем, с произвольным числом N членов, и строится общее решение

$$y(x, E) = C_1 y_1(x, E) + C_2 y_2(x, E), \quad C_1, C_2 = \text{const}, \quad (4)$$

которое содержит величину E как параметр.

В общем решении (4) содержится искомая собственная функция $\psi(x)$ уравнения Шредингера, которая с учетом граничных условий удовлетворяет следующей однородной линейной системе алгебраических уравнений

$$\begin{cases} C_1 \cdot y_1(-\infty, E) + C_2 \cdot y_2(-\infty, E) = 0 \\ C_1 \cdot y_1(+\infty, E) + C_2 \cdot y_2(+\infty, E) = 0 \end{cases} \quad (5)$$

нетривиальное решение которой определяет спектр собственных значений $\{E_n\}_{n=0}^{\infty}$ и функций $\{\psi_n(x)\}_{n=0}^{\infty}$.

Разработана символьно-численная программа в среде Maple, реализующая изложенный выше метод решения уравнения Шредингера (1), и с ее помощью получены представленные результаты для следующих потенциалов

$$V(x) = \alpha(x^2 - a^2)^2 - px, \quad (6)$$

$$V(x) = Ax^2 - Bx^4 + Cx^6, \quad (7)$$

где $p, A > 0, B > 0, C > 0$ – параметры.

Для уравнения Шредингера (1) с потенциалом (6) при значениях параметров $\alpha = 0.8$ и $a = 2$ в Таблице 1 и на рис. 1 приведен энергетический спектр в зависимости от параметра асимметрии p .

На рис. 1 при тех же значениях параметров потенциала приведен график зависимости значений энергетических уровней от параметра p , из которого видны избегнутые пересечения уровней энергии. Второе слагаемое в потенциале (6) описывает внешнее возмущение, амплитуда p которого управляет положением как энергетических уровней, так и их избегнутых пересечений. На рис. 2 показана структура расположения

энергетических уровней и волновые функции при величине амплитуды внешнего возмущения $p = 1,25$.

Таблица 1. Энергетический спектр асимметричного ангармонического квантового осциллятора (1), (б) при $\alpha = 0,8$, $a = 2$ и $N = 132$

n	E_n	$p=0$	$p=0,5$	$p=1$	$p=1,5$	$p=2$	$p=2,5$	$p=3$
0	E_0	2,4755	1,5126	0,5391	-0,4444	-1,4378	-2,4406	-3,4524
1	E_1	2,4756	3,4274	4,3677	4,5380	3,6416	2,7340	1,8158
2	E_2	7,1458	6,2932	5,4221	5,2959	6,2112	7,1130	6,7854
3	E_3	7,1538	7,9906	8,8134	9,0991	8,3458	7,5735	8,0003
4	E_4	11,0875	10,5361	9,8339	9,6185	10,3954	11,1298	11,1462
5	E_5	11,3693	11,8720	12,3917	12,5787	12,2624	11,7751	11,9021
6	E_6	13,8651	13,7634	13,5367	13,4745	13,7607	14,0467	14,1609

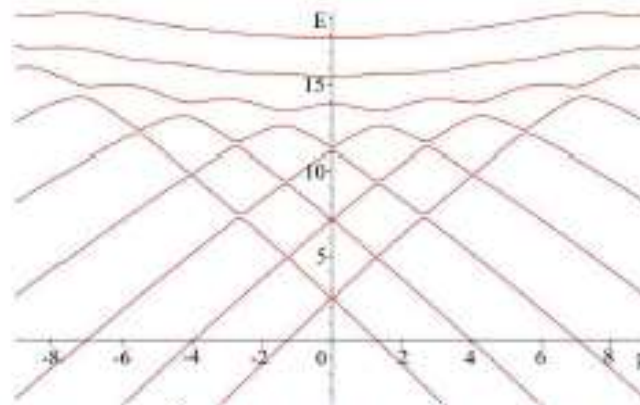


Рис. 1. Зависимость значений энергетических уровней от параметра p асимметричного ангармонического осциллятора (1), (б).

Заметим, что для симметричного потенциала с двойной ямой (б) при $p=0$ величина расщепления между уровнями энергии основного ($n=0$) и первого возбужденного ($n=1$) состояний, полученная в нашей работе, равна $\Delta E = 0,000066$, в то время как эта величина, вычисленная по формуле из работ [10, 11], равна $\Delta E = 0,000070$.

При помощи той же программы для уравнения Шредингера (1) с потенциалом (7) найдены нижняя часть энергетического спектра и волновые функции в виде степенных рядов. Конкретные вычисления были проведены при следующих параметрах: $A=16,2$, $B=10,9$, $C=B^2/4A$ при которых потенциал имеет три локальных минимума. Значения уровней

энергии приведены в Таблице 2, а структура их расположения изображена на рис. 3.

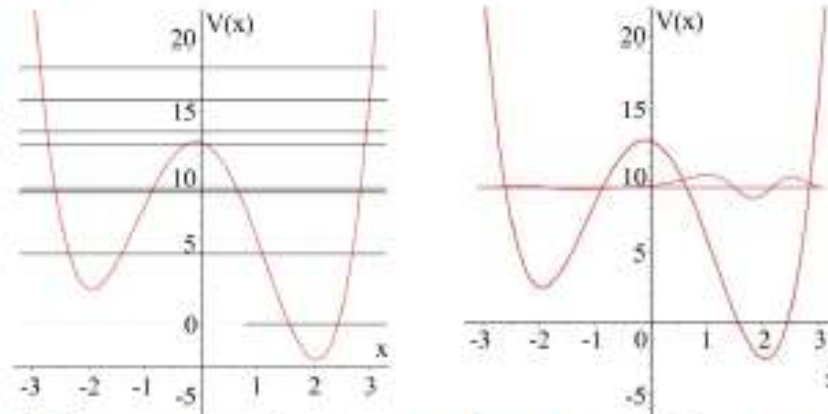


Рис. 2. Структура спектра (слева) и волновая функция пятого возбужденного уровня $E_5 = 9,4729$ (справа) для уравнения Шредингера (1) с потенциалом (6) при $p = 1,25$.

Таблица 2. Энергетический спектр симметричного агармонического осциллятора (7) при $N = 220$.

n	0	1	2	3	4	5	6
E_n	2,5278	4,9156	5,0886	7,2667	10,4400	13,1899	16,4806

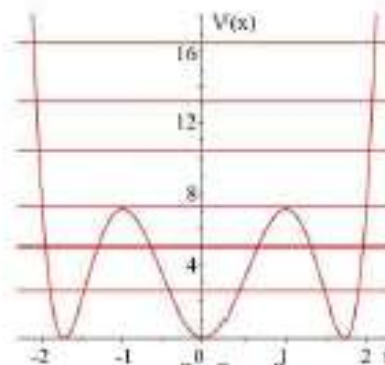


Рис. 3. Структура спектра в потенциале с тройной ямой (7).

Как видно, в симметричном потенциале с тройной ямой (7) избегнутое пересечение из-за квантового эффекта туннелирования наблюдается для первого и второго возбужденных уровней, чем существенно отличается от случая симметричного потенциала с двойной ямой, в котором избегнутое пересечение имеет место для основного и первого возбужденного состояний. В самом деле, из численных расчетов

волновых функций (см. рис. 4) следует, что избегнутое пересечение уровней случается именно для первых двух возбужденных состояний, в которых, соответственно, их волновые функции обращаются в нуль один и два раза, а волновая функция основного состояния узлов не имеет.

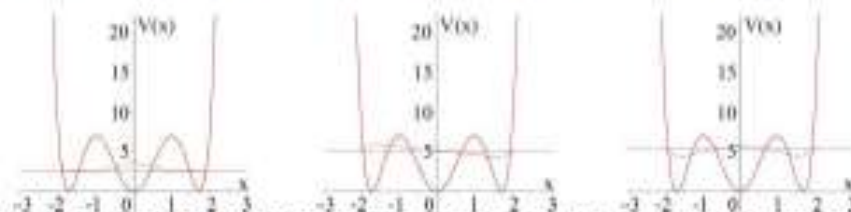


Рис. 4. Волновые функции основного, первого и второго возбужденных состояний, соответственно, с уровнями энергии $E_0 = 2,5278$, $E_1 = 4,9156$, $E_2 = 5,0886$.

Заключение

В работе описан метод символьно-численного решения одномерного уравнения Шредингера с потенциалами, имеющими два или три локальных минимума. При различных значениях параметров потенциалов вычислены уровни энергии и соответствующие волновые функции. В многоямных потенциалах, как известно, имеет место явление квантового туннелирования [12], которое приводит, в частности, к расщеплению энергетических уровней. В работе выявлена сильная зависимость поведения волновой функции от точности вычисленного уровня энергии. Обнаружено явление квазипересечений уровней (так называемых избегнутых пересечений, когда расстояния между уровнями становится порядка 10^{-6-7}) в зависимости от параметра внешнего возмущения. Вычисленное поведение квазипересечений хорошо согласуется с результатами, полученными другими авторами на основе теории и приложений уравнений класса Гойна [13]. Существенной особенностью наших расчетов является контроль высокой точности вычисления значений энергетических уровней.

Библиографический список:

1. Демитковский, В.Я. Физика квантовых низкоразмерных структур / В.Я. Демитковский. – М.: Логос, 2000. – 248 с.
2. Давыдов, А.С. Квантовая механика / А.С. Давыдов. – М.: Наука, 1973. – 704с.
3. Шредингер, Э. Избранные труды по квантовой механике / Э. Шредингер. – 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. Vinitsky // 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 Шредингера 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 Шредингера / 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. 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.
9. Чеканов, Н.А. Символьно-численные методы решения дифференциальных уравнений классической и квантовой механики / Н.А. Чеканов, И.Н. Беляева, И.К. Киргиченко, Н.Н. Чеканова. – Харьков: «ИСМА», 2019. – 420 с.
10. Khuat-duy, D. Multiresonance tunneling effect in double-well potentials / D. Khuat-duy, P. Leboeuf // Applied Physics Letters. – 1993. – V. 63. – I 14. – P. 1903-1905.
11. Альберто, С. О формулах для расщепления верхних и нижних энергетических уровней одномерного оператора Шредингера / С. Альберто, С.Ю. Доброготов, Е.С. Семенов // Теоретическая и математическая физика. – 2004 – Т. 141 – № 3. – С. 116-126.
12. Ландау, Л.Д. Теоретическая физика: Учебное пособие для вузов. В 10 т. Т. III. Квантовая механика (нерелятивистская теория) / Л.Д. Ландау, Е.М. Лифшиц. – 4-е изд., испр. – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989. – 768 с.
13. Славянов, С.Ю. Специальные функции: Единая теория, основанная на анализе особенностей / С.Ю. Славянов, В. Лай. – СПб.: Невский Диалект, 2002. – 312 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. Vinitsky // 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. Triкоми, Ф. Дифференциальные уравнения / Ф. Трикоми. – М.: Издательство иностранной литературы, 1962. – 352 352p. (In Russian).

8. 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.
9. 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).
10. Khuat-duy, D. Multiresonance tunneling effect in double-well potentials / D. Khuat-duy, P. Leboeuf // *Applied Physics Letters*. – 1993. – V. 63. – I 14. – P. 1903-1905.
11. Albeverio, S. Splitting formulas for the higher and lower energy levels of the one-dimensional Schrödinger operator / S. Albeverio, S.Yu. Dobrokhotov, E.S. Semenov // *Theoretical and Mathematical Physics*. – 2004. – V. 141. – I 1. – P. 98-106.
12. Landau, L.D. Theoretical Physics: Textbook for universities. In 10 vol. V. III: Quantum mechanics (nonrelativistic theory) / L.D. Landau, E.M. Lifshits. – 4-e izd., ispr. – M.: Nauka. Gl. red. fiz.-mat. lit., 1989. – 768 p. (In Russian).
13. Slavyanov, S.Yu. Special functions: Unified theory based on the analysis of features / S.Yu. Slavyanov, V. Laj. – SPb.: Nevskij Dialekt, 2002. – 312 p. (In Russian).

Original paper

ACCOUNTING OF TUNNELING EFFECTS WHEN CALCULATING THE ENERGY
SPECTRUM OF THE SCHRÖDINGER EQUATION

I.N. Belyaeva¹, N.A. Chekanov², I.K. Kirichenko³, N.N. Chekanova⁴

¹Belgorod National Research University, Belgorod, Russia

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

³Kharkiv Educational and Research Institute of the Higher Educational Institution

«University of Bankings», Kharkiv, Ukraine

DOI: 10.26456/pcasum/2019.11.291

Abstract: The general scheme of the method for integrating second-order differential equations in the form of power series is presented. The obtained results for the Schrödinger equation with potentials with two and three minima for quantum anharmonic oscillators are presented. The necessary accuracy of calculations is controlled by the number of terms in the power series and the number of digits in the mantissa of decimal numbers. The structure of the energy levels and wave functions are shown.

Keywords: ordinary differential equation, energy spectrum, 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»

Чеканов Николай Александрович – д.ф.-м.н., профессор, профессор кафедры дифференциальных уравнений, 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

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

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

Nikolai A. Chekanov –Dr. Sc., Professor, 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

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

Получена в редакцию/accepted: 01.09.2019; после рецензирования/revision: 12.10.2019; принят в печать/accepted: 04.11.2019.

**Физико-химические аспекты изучения кластеров,
наноструктур и наноматериалов**

<i>Белкина И.Н., Чекалов Н.А., Карповско И.К., Чекалова Н.Н.</i> Учет эффекта туннелирования при вычислении энергетического спектра уравнения Шредингера <i>Belkina I.N., Chekalov N.A., Karповско I.K., Chekalova N.N.</i> Accounting of tunneling effects when calculating the energy spectrum of the Schrodinger equation	291
<i>Еланов А.В., Гвозденко А.А., Ясная М.А., Галик А.Б., Еланова А.А., Шевченко И.М., Крумаренко В.Н.</i> Нейросетевое исследование влияния параметров синтеза на размерные характеристики наночастиц Fe ₃ O ₄ <i>Elanov A.V., Gvozdenko A.A., Yasnaya M.A., Galik A.B., Elanova A.A., Shevchenko I.M., Krumarenko V.N.</i> Effect of synthesis parameters on dimensional characteristics of Fe ₃ O ₄ nanoparticles: neural-network research	298
<i>Киселев В.М., Голованова О.А.</i> Применение теории фракталов для изучения процесса кристаллизации брусита в присутствии добавок <i>Kiselev V.M., Golovanova O.A.</i> Application of the fractal theory for studying brucite crystallization process in the presence of additives	307
<i>Кравченко С.П.</i> Зависимость теплофизических свойств ниобия от размера нанокристалла <i>Kravchenko S.P.</i> Change in the basic dependences of the thermophysical properties of a niobium nanocrystal with a change in size	315
<i>Мусская О.Н., Крутько В.К., Кулак А.И., Насан О.А., Хаслова С.С., Добыш В.А., Тарасевич В.А., Будаiko Н.Л., Сучева О.А.</i> Трёхмерные модели на основе полилактида и гидроксипатита <i>Muskaya O.N., Krutyko V.K., Kulak A.I., Nasan O.A., Haslova S.S., Dobysh V.A., Tarasovich V.A., Budaiko N.L., Sучева O.A.</i> Three-dimensional models based on polylactide and hydroxyapatite	326
<i>Нагорный Ю.Е.</i> Численное моделирование механического поведения силлимена в рамках обобщённого гармонического поля <i>Nagornyy Yu.E.</i> Numerical simulation of mechanical behavior of sillimene in a general harmonic field model	336
<i>Полудин В.А., Балакина Р.М.</i> Специфика формирования кластерных структур Фриуфа, 2D – упаковок катоме и фаз Лавеса при гидрировании сплавов титана. Кинетика водорода <i>Poludin V.A., Balakina R.M.</i> The specifics of the formation of Friuf cluster structures, 2D – packaging of the kagome and Laves phases during the hydrogenation of titanium alloys. Kinetics of hydrogen	345
<i>Рыбина С.С., Третьяков С.А.</i> Моделирование распространения светового потока в среде с рассеивающими центрами <i>Rybina S.S., Tret'yakov S.A.</i> Modeling process of distribution of light flow in the environment with diffusing centers	356
<i>Татыш И.В., Карпович А.Ю., Васильев С.А., Саисонов М.В., Саисонов В.М.</i> О фазовой диаграмме наносплавов Au-Si: молекулярно-динамическое и термодинамическое моделирование <i>Tatish I.V., Karpovich A.Yu., Vasil'yev S.A., Saishonov M.V., Saishonov V.M.</i> On phase diagram of Au-Si nanosplloy: molecular dynamics and thermodynamic simulation	364
<i>Чеснокова Н.А., Гурина А.С., Курганова Н.Н.</i> Термодинамика комплексообразования меди (II) с изоинтинамидом и кислотно-основных равновесий лиганда в водно-органических растворах <i>Chesnokova N.A., Gurina A.S., Kurganova N.N.</i> Thermodynamics of complex formation of copper (II) with isonicotinamide and acid-basic equilibrium of ligand in water-organic solutions	374

*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.