

УДК 51-74; 51-72:530.145

DOI: 10.18413/2518-1092-2025-10-2-0-2

Баландин О.С.¹
Беляева И.Н.²
Чеканов Н.А.³
Чеканов А.Н.¹

**ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ МЕТОДОМ САМОСОГЛАСОВАННОГО
БАЗИСА УРАВНЕНИЙ ШРЁДИНГЕРА ИНВАРИАНТНЫХ
ОТНОСИТЕЛЬНО ПРЕОБРАЗОВАНИЙ ДИСКРЕТНЫХ C_{nv}
ГРУПП**

¹⁾ Белгородский юридический институт МВД РФ им. И.Д. Путилина,
ул. Горького, 71, г. Белгород, 30802, Россия

²⁾ Белгородский государственный национальный исследовательский университет,
ул. Победы, 85, г. Белгород, 308015, Россия

³⁾ г. Белгород, Россия

e-mail: ibelyaeva@bsuedu.ru

Аннотация

В работе так называемым методом самосогласованного базиса найдены решения трёх двумерных уравнений Шрёдингера, которые являются инвариантными относительно преобразований дискретных групп C_{nv} , $n=2,3,4$. В классическом пределе классические системы, соответствующие этим уравнениям Шрёдингера допускают существование, как регулярных, так и хаотических режимов движения.

На примере решения C_{3v} -симметричного уравнения Шрёдингера достаточно подробно и понятно последовательно изложены все этапы решения методом самосогласованного базиса. В этом методе решения уравнений Шрёдингера ищутся в виде тригонометрического ряда, в котором коэффициенты-функции находятся точным численным интегрированием исходного уравнения и потому эти коэффициенты-функции являются согласованными с видом исходного дифференциального уравнения, в частности, с поверхностью потенциальной энергии (ППЭ), которая может быть достаточно сложной. К примеру, было решено уравнение, в котором ППЭ имеет пять локальных минимумов и четыре седловины. Важной положительной особенностью метода самосогласованного базиса является возможность все его этапы, как аналитические, так и численные выполнить при помощи известных компьютерных систем символьных вычислений таких как Maple, Mathematica, Reduce, др. В настоящей работе была использована система Maple, в которой были составлены соответствующие программы, с помощью которых получены все представленные результаты. Для указанных уравнений Шрёдингера были различные уровни энергий и волновые функции, для некоторых из них были построены трехмерные изображения и изолинии. Проведено сравнение вычисленных нами значений энергии с имеющимися в литературе результатами других авторов и получено достаточно хорошее согласие. В одном случае для уравнения Шрёдингера с C_{3v} симметрией было обнаружено, что высокая точность расчета уровней энергии методом самосогласованного базиса достигается с намного меньшим объемом вычислений по сравнению с методом диагонализации. Обнаружено также, что для вычисления уровней энергии из той области энергий, где классическое движение является хаотическим требуется более тщательная подгонка имеющихся двух параметров.

Ключевые слова: двумерное уравнение Шрёдингера; дискретные группы C_{nv} , $n=2,3,4$; метод самосогласованного базиса; системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений; математическое моделирование; уровни энергий; волновые функции; система Maple

Для цитирования: Баландин О.С., Беляева И.Н., Чеканов Н.А., Чеканов А.Н. Численное решение методом самосогласованного базиса уравнений Шрёдингера инвариантных относительно преобразований дискретных C_{nv} групп // Научный результат. Информационные технологии. – Т. 10, №2, 2025. – С. 13-24. DOI: 10.18413/2518-1092-2025-10-2-0-2

Balandin O.S.¹
Belyaeva I.N.²
Chekanov N.A.³
Chekanov A.N.¹

NUMERICAL SOLUTION BY THE SELF-CONSISTENT BASIS METHOD OF SCHRÖDINGER EQUATIONS THAT ARE INVARIANT WITH RESPECT TRANSFORMATIONS OF DISCRETE C_{nv} GROUPS

¹⁾Belgorod Law Institute of the Ministry of Internal Affairs of Russian Federation named after I.D. Putilin,
71 Gorky St., Belgorod, 30802, Russia
²⁾Belgorod State National Research University,
85 Pobedy St., Belgorod, 308015, Russia
³⁾Belgorod, Russia

e-mail: e-mail: ibelyaeva@bsuedu.ru

Abstract

In this work, using the so-called self-consistent basis method, solutions to three two-dimensional Schrödinger equations are found, which are invariant under transformations of discrete groups C_{nv} , $n=2,3,4$. In the classical limit, classical systems corresponding to these Schrödinger equations allow the existence of both regular and chaotic modes of motion.

Using the example of solving the C_{3v} -symmetric Schrödinger equation, all stages of the solution by the self-consistent basis method are presented in sufficient detail and clearly. In this method, solutions to the Schrödinger equations are sought in the form of a trigonometric series in which the coefficient functions are found by exact numerical integration of the original equation and therefore these coefficient functions are consistent with the form of the original differential equation, in particular, with the potential energy surface (PES), which can be quite complex. For example, an equation was solved in which the PES has five local minima and four saddle points. An important positive feature of the self-consistent basis method is the ability to perform all its stages, both analytical and numerical, using well-known computer systems for symbolic calculations such as Maple, Mathematica, Reduce, etc. In this work, the Maple system was used, in which the corresponding programs were compiled, with the help of which all presented results were obtained. For these Schrödinger equations there were various energy levels and wave functions, for some of them three-dimensional images and isolines were constructed. We compared the energy values we calculated with the results of other authors available in the literature and obtained fairly good agreement. In one case, for the Schrödinger equation with C_{3v} symmetry, it was found that high accuracy calculations of energy levels using the self-consistent basis method were achieved with much less computation compared to the diagonalization method. It was also discovered that to calculate energy levels from the energy region where classical motion is chaotic, a more careful adjustment of the two available parameters is required.

Keywords: two-dimensional Schrödinger equation; discrete groups C_{nv} , $n=2,3,4$; self-consistent basis method; systems of linear ordinary differential equations; mathematical modeling; energy levels; wave functions; Maple system

For citation: Balandin O.S., Belyaeva I.N., Chekanov N.A., Chekanov A.N. Numerical solution by the self-consistent basis method of Schrödinger equations that are invariant with respect transformations of discrete C_{nv} groups // Research result. Information technologies. – Т. 10, №2, 2025. – P. 13-24. DOI: 10.18413/2518-1092-2025-10-2-0-2

ВВЕДЕНИЕ

В свое время для решения двумерных уравнений Шрёдингера был предложен так называемый метод самосогласованного базиса [1, 2], где были некоторые замечания о его точности по сравнению с традиционным методом диагонализации. К настоящему времени для решения уравнения Шрёдингера разработаны самые разнообразные методы его решения, из которых можно выделить, например, следующие [3-14], из которых наиболее разработанным является метод диагонализации.

В настоящей работе этот метод применяется к нескольким уравнениям Шрёдингера, которые являются инвариантными относительно преобразований, составляющих одну из групп C_{nv} ,

$n = 2, 3, 4$. Напомним, что в этом методе по одной переменной проводится точное (численное) интегрирование, а редукция выполняется по другой переменной, то есть, в общем, бесконечная система обыкновенных дифференциальных уравнений заменяется конечной. В частности, решение ищется в полярных координатах (r, φ) в виде разложения волновой функции $\psi(r, \varphi)$ в ряд Фурье

$$\sqrt{r}\psi(r, \varphi) \equiv u(r, \varphi) = \frac{1}{2}A_0(r) + \sum_{k=1}^{\infty} [A_k(r) \cdot \cos(k\varphi) + B_k(r) \cdot \sin(k\varphi)] \quad (1)$$

и для коэффициентов-функций $A_k(r)$, $B_k(r)$ получаем системы обыкновенных дифференциальных уравнений, из которой при учете граничных условий вычисляем энергетический спектр и соответствующие волновые функции исходного уравнения Шрёдингера. При этом число получаемых систем обыкновенных дифференциальных уравнений равно числу неприводимых представлений для данной конкретной группы [6, 15] и по которым проводится классификация спектров и волновых функций.

МЕТОД САМОСОГЛАСОВАННОГО БАЗИСА

Пусть функция Гамильтона задана в виде

$$H(x, y, p_x, p_y) = \frac{1}{2}(p_x^2 + p_y^2) + \frac{a}{2}(x^2 + y^2) - \frac{a'}{2}x^2 + bx^2y^2 + c(x^2 + y^2)^2, \quad (2)$$

где a, a', b, c – параметры. В этой классической системе существуют как регулярный, так и хаотический режимы движения. Это иллюстрируется сечениями Пуанкаре (см. Рис. 1 а, б).

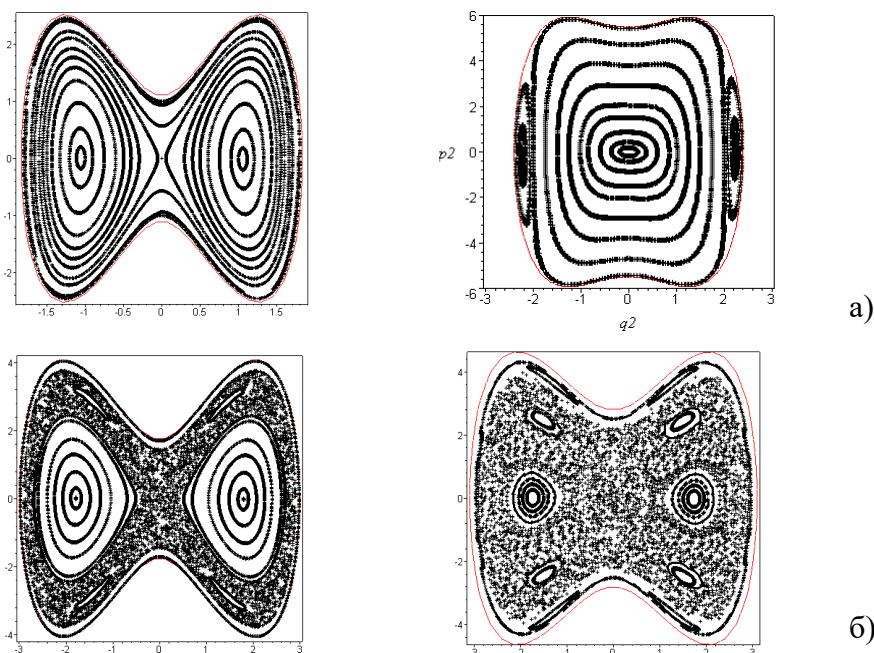


Рис. 1. а – Регулярное движение в системе (2) при следующих значениях параметров $a = 1.849; b = 0; c = 1; a' = 8.257825$ и при разных начальных условиях;
б) – Хаотическое движение в системе (2) при следующих значениях параметров $a = 1.894; b = -0.28707; c = 0.375095; a' = 8.257825$ и при разных начальных условиях

Fig. 1. a – Regular motion in the system (2) with the following parameter values $a = 1.849; b = 0; c = 1; a' = 8.257825$ and under different initial conditions;

b – Chaotic motion in the system (2) with the following parameter values $a = 1.894; b = -0.28707; c = 0.375095; a' = 8.257825$ and different initial conditions.

$$\begin{cases} B_1'' + \alpha_1 B_1 + \beta B_3 + \gamma(B_5 - B_3) = 0 \\ B_3'' + \alpha_3 B_3 + \beta(B_1 + B_5) + \gamma(B_7 - B_1) = 0 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ B_l'' + \alpha_l B_l + \beta(B_{l-2} + B_{l+2}) + \gamma(B_{l+4} + B_{l-4}) = 0 \end{cases} \quad (8)$$

$l = 1, 3, 5, 7, \dots$

В частности, разные типы волновых функций будут определяться следующими выражениями:

тип A_1 : $u_{A_1}(r, \varphi) = \frac{A_0}{2} + \sum_{l=1}^N A_{2l}(r) \cos(2l\varphi)$;

тип A_2 : $u_{A_2}(r, \varphi) = \sum_{l=1}^N B_{2l}(r) \sin(2l\varphi)$;

тип B_1 : $u_{B_1}(r, \varphi) = \frac{A_0}{2} + \sum_{l=0}^N A_{2l+1}(r) \cos[(2l+1)\varphi]$;

тип B_2 : $u_{B_2}(r, \varphi) = \sum_{l=0}^N B_{2l+1}(r) \sin[(2l+1)\varphi]$;

Для применения известной системы символьно-численных вычислений Maple все системы уравнений (5)-(8) удобно эквивалентным образом запишем в виде систем обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка для новых неизвестных функций $z_l(r)$:

A_1 -тип:

$$\begin{cases} z_1' - z_2 = 0 \\ z_2' + \alpha_0 z_1 + 2\beta z_3 + 2\gamma z_5 = 0 \\ z_3' - z_4 = 0 \\ z_4' + \alpha_2 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma(z_7 + z_3) = 0 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ z_{l+2}' + \alpha_l z_{l+1} + \beta(z_{l-1} z_{l+3}) + \gamma(z_{l-3} z_{l+5}) = 0 \end{cases} \quad (9)$$

$A_l = z_{l+1}, A_l'' = z_{l+2}, l = 0, 2, 4, 6, \dots$

A_2 -тип:

$$\begin{cases} z_1' - z_2 = 0 \\ z_2' + \alpha_2 z_1 + \beta z_3 + \gamma(z_5 - z_1) = 0 \\ z_3' - z_4 = 0 \\ z_4' + \alpha_4 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma z_7 = 0 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ z_l' + \alpha_l z_{l-1} + \beta(z_{l-3} + z_{l+1}) + \gamma(z_{l-5} + z_{l+3}) = 0 \\ B_l = z_{l-1}, B_l'' = z_l', l = 0, 2, 4, 6, \dots \end{cases} \quad (10)$$

B_1 -тип:

$$\begin{cases} z'_1 - z_2 = 0 \\ z'_2 + \alpha_1 z_1 + \beta z_3 + \gamma(z_3 + z_5) \\ z'_3 - z_4 = 0 \\ z'_4 + \alpha_3 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma z_7 = 0 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ z'_{l+1} + \alpha_l z_l + \beta(z_{l-2} + z_{l+2}) + \gamma(z_{l-4} + z_{l+4}) = 0 \end{cases} \quad (11)$$

$A_l = z_l, B_l'' = z'_{l+1}, l = 1, 3, 5, 7, \dots$

B_2 -тип:

$$\begin{cases} z'_1 - z_2 = 0 \\ z'_2 + \alpha_1 z_1 + \beta z_3 + \gamma(z_5 - z_3) = 0 \\ z'_3 - z_4 = 0 \\ z'_4 + \alpha_3 z_3 + \beta(z_1 + z_5) + \gamma(z_7 - z_1) = 0 \\ \dots \dots \dots \dots \dots \dots \dots \\ z'_{l+1} + \alpha_l z_l + \beta(z_{l-2} + z_{l+2}) + \gamma(z_{l+4} - z_{l-4}) \end{cases} \quad (12)$$

$B_l = z_l, B_l'' = z'_{l+1}, l = 1, 3, 5, 7, \dots$

РЕЗУЛЬТАТЫ ИССЛЕДОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Все описанные выше операции, как аналитические, так и численные были выполнены при помощи соответствующей программы [16] символьно-численных вычислений в компьютерной системе Maple. Ниже представим некоторые результаты для уравнения (3). Отметим, что точность численных расчетов контролировалась вариацией параметров R_{end}, N таким образом, чтобы первые семь и более знаков после десятичной точки в величине энергетического уровня не менялись.

В таблице 1 приведены низжайшие энергетические уровни E_n уравнения Шрёдингера (3) в области с регулярным классическим движением, то есть с набором параметров ($a = 1.849; b = 0; c = 1; a' = 8.257825$), а на рисунке 2 показаны вычисленные рельефы и изолинии волновых функций указанных типов.

Таблица 1

Низжайшие энергетические уровни E_n уравнения Шрёдингера (3) в области с регулярным классическим движением, то есть с набором параметров $a = 1.849; b = 0; c = 1; a' = 8.257825$

Table 1

The lowest energy levels of the Schrodinger equation (3) in a region with regular classical motion, that is, with a set of parameters $a = 1.849; b = 0; c = 1; a' = 8.257825$

n	Спектр E_n	Тип симметрии	n	Спектр E_n	Тип симметрии
0	0,22495	A_1	4	3,53045	A_2
1	0,60354	B_1	5	4,2911	B_1
2	2,56973	A_1	6	5,32398	B_2
3	2,82253	B_2	7	5,75443	A_1

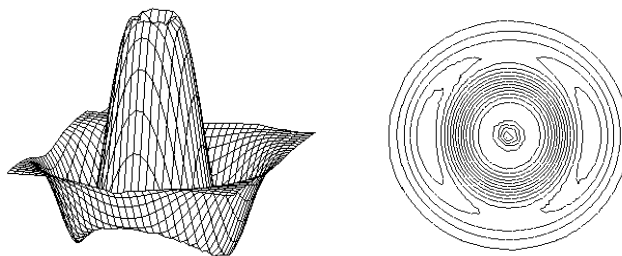


Рис. 2. Волновая функция A_1 -типа для параметров $a = 1.8494; b = 0; c = 1; a' = 8.257825$

Fig. 2. Wave function A_1 -type for parameters $a = 1.8494; b = 0; c = 1; a' = 8.257825$

В таблице 2 приведены нижайшие энергетические уровни E_n уравнения Шрёдингера (3) в области с хаотическими режимами движения, то есть с набором параметров ($a = 1.8494; b = -0,28707; c = 0,3755095; a' = 8.257825$), а на рисунке 3 приведены некоторые вычисленные рельефы и изолинии волновых функций.

Таблица 2

Энергетические уровни уравнения Шрёдингера (3) с набором параметров
($a = 1.8494; b = -0,28707; c = 0,3755095; a' = 8.257825$)

Table 2

Energy levels of the Schrodinger equation (3) with a set of parameters
($a = 1.8494; b = -0,28707; c = 0,3755095; a' = 8.257825$)

n	Спектр E_n	Тип симметрии	n	Спектр E_n	Тип симметрии
0	-3,89880	A_1	4	-0,90380	A_1
1	-3,89724	B_1	5	-0,80726	B_1
2	-1,42321	B_2	6	1,21778	A_1
3	-1,41961	A_2	7	1,34614	B_1

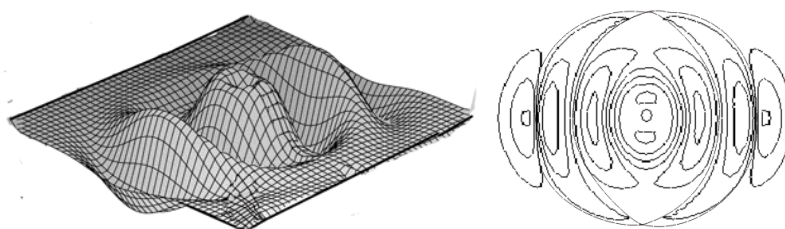


Рис. 3. Рельеф и изолинии волновой функции A_1 -типа с параметрами $a = 1.8494; b = -0,28707; c = 0,3755095; a' = 8.257825$ для уровня $E = 3,68467178$

Fig. 3. Relief and isolines of the wave function A_1 -type with parameters $a = 1.8494; b = -0,28707; c = 0,3755095; a' = 8.257825$ for the level $E = 3,68467178$

Методом самосогласованного базиса было также решено следующее уравнение Шрёдингера

$$\hat{H}\psi(x, y) = E\psi(x, y) \quad (13)$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(x, y), \quad V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + b\left(x^2y - \frac{1}{3}y^3\right) + c(x^2 + y^2)^2 \quad (14)$$

где (b, c) – положительные параметры. Эта система является обобщением известной системы Хенона-Хейлеса [17] и, в частности, описывает коллективные квадрупольные колебания поверхности сферической капли, например, из ядерного вещества [18]. В классическом пределе в этой системе существуют регулярные и хаотические режимы движения, а также в ней реализуется сложный переход: регулярность-хаос-регулярность [18]. И уравнение Шрёдингера (3) является инвариантным относительно преобразований, составляющих дискретную группу C_{3v} .

Как известно [14, 15], эта группа имеет три неприводимых представления, из которых два A_1 и A_2 являются одномерными и одно E – двумерное. В Таблицах 3 и 4 приведены уровни энергии для уравнения (13)-(14), вычисленные при двух наборах параметров, при которых в классическом пределе при наборе $b = 0,018$ и $c = 0,000018$ система имеет регулярное движение, а при втором наборе $b = 0,42$ и $c = 0,0098$ классическое движение является хаотическим.

Таблица 3

Энергетический спектр гамильтониана (14) при $b = 0.018$, $c = 0.000018$

Table 3

The energy spectrum of the Hamiltonian (14) at $b = 0.018$, $c = 0.000018$

n	E_n	Тип симметрии	n	E_n	Тип симметрии
0	1,02000	A_1	4	3,95000	A_1
1	1,94999	E	5	3,99999	A_2
2	2,95000	A_1	6	4,00000	E
3	2,99999	E	7	4,94999	A_1

Таблица 4

Нижайшие энергетические уровни гамильтониана (14) при $b = 0.42$, $c = 0.0098$

Table 4

The lowest energy levels of the Hamiltonian (14) at $b = 0.42$, $c = 0.0098$

n	E_n	Тип симметрии	n	E_n	Тип симметрии
0	0,01459	A_1	4	2,44596	A_1
1	0,97753	A_1	5	2,70727	E
2	1,44356	A_1	6	2,93225	E
3	1,91427	E	7	3,30407	E

Вычисленные значения уровней энергии были сравнены с имеющимися результатами других авторов и рассчитанных другими методами. Получено достаточно хорошее согласие. К примеру, в частности, величины энергетических уровней E -типа в работе [19] получены диагонализацией

гамильтоновой матрицы размерностью 495×495 , а в нашем методе та же точность достигается при решении системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, состоящей только из восьми уравнений. На рисунке 4 показана узловая структура волновой функции E -типа для уровня энергии $E = 6,989034$.

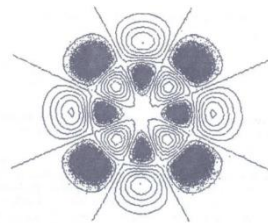


Рис. 4. Узловая структура волновой функции E -типа для уровня энергии $E = 6.989034$. Положительные значения функции – светлые области, а отрицательные значения – в затемненной области

Fig. 4. Nodal structure of the wave function E -type for the energy level $E = 6.989034$. Positive values of the function are in the light areas, and negative values are in the darkened area

Методом самосогласованного базиса найдены решения для следующего уравнения Шрёдингера:

$$\left[-\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) + V(x, y) \right] \psi(x, y) = E \psi(x, y) \quad (15)$$

$$V(x, y) = \frac{1}{2}(x^2 + y^2) + bx^2y^2 - c(x^2 + y^2)^2 + dx^2y^2(x^2 + y^2) + e(x^2 + y^2)^3. \quad (16)$$

Поверхность потенциальной энергии (16) является достаточно сложной: имеет пять локальных минимумов и четыре седловые точки. Можно проверить, что данное уравнение имеет дискретную C_{4v} симметрию. В классическом пределе рассматриваемая система является неинтегрируемой и в ней существуют, как регулярные, так и хаотические режимы движения, кроме того, в ней реализуется сложный переход: регулярность-хаос-регулярность. Из-за указанной симметрии квантовые состояния уравнения Шрёдингера классифицируются по пяти неприводимым представлениям этой группы, из которых A_1, A_2, B_1, B_2 – одномерные и одно E – двумерное. В таблице 5 приведены нижние уровни энергии, вычисленные методом самосогласованного базиса.

Энергетические уровни уравнения Шрёдингера (15)-(16) с параметрами $b = 5/12, c = 1/24$

Table 5

Energy levels of the Schrodinger equation (15)-(16) with parameters $b = 5/12, c = 1/24$

n	E_n	Тип симметрии
0	1,20867	A_1
1	2,38380	$E_1 = E_2$
2	3,56560	B_1
3	3,87241	B_2
4	3,87573	A_1

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В работе так называемым методом самосогласованного базиса были решены три двумерные уравнения Шрёдингера, которые являются инвариантными относительно преобразований, составляющих одну из дискретных групп C_{2v} , C_{3v} , и C_{4v} . На примере уравнения Шрёдингера с симметрией C_{2v} достаточно детально и понятно изложены все этапы решения методом самосогласованного базиса. В этом методе решение исходного уравнения Шрёдингера сводится к решению конечной системы обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка, из общего решения которого с учетом граничных условий на волновую функцию находятся, как уровни энергии, так и сами волновые функции определенного типа согласно известным неприводимым представлениям конкретной дискретной группы. В используемом методе по одной переменной проводится точное (численное) интегрирование, а по другой переменной, в общем, бесконечная система заменяется конечной системой обыкновенных дифференциальных уравнений первого порядка. В таком подходе коэффициенты-функции в исходном разложении в ряд Фурье будут согласованы с видом дифференциального уравнения и, в частности с видом поверхности потенциальной энергии, которая может быть очень сложной, например, иметь пять локальных минимумов и четыре седловины.

Важной положительной и существенной особенностью метода самосогласованного базиса является возможность все его этапы, как аналитические, так и численные выполнить при помощи известных компьютерных систем символьных вычислений таких как Maple, Mathematica, Reduce, др. В настоящей работе была использована система Maple, в которой были составлены соответствующие программы, с помощью которых получены все представленные результаты. Для указанных уравнений Шрёдингера были различные уровни энергий и волновые функции, для некоторых из них были построены трехмерные изображения и изолинии. Проведено сравнение вычисленных нами значений энергии с имеющимися в литературе результатами других авторов и получено достаточно хорошее согласие. В одном случае для уравнения Шрёдингера с C_{3v} симметрией было обнаружено, что высокая точность расчета уровней энергии методом самосогласованного базиса достигается с намного меньшим объемом вычислений по сравнению с методом диагонализации. Обнаружено также, что для вычисления уровней энергии из той области энергий, где классическое движение является хаотическим требуется более тщательная подгонка имеющихся двух параметров. Отметим, что используемый метод можно применить для решения различных других задач на собственные значения.

Список литературы

1. Веницкий С.И. Решение двумерного уравнения Шрёдингера в самосогласованном базисе / С.И. Веницкий, Е.В. Инопин, Н.А. Чеканов. Препринт ОИЯИ Р4-93-50, 1993. 12 с.
2. Чеканов Н.А. Численное решение стационарного уравнения Шрёдингера в приближении самосогласованного базиса / Н.А. Чеканов, Ю.А. Уколов // Материалы международного семинара «Супервычисления и математическое моделирование». Саров, ВНИИЭФ, 2004. С.101-102.
3. Беляева И.Н. Полуклассические расчеты энергетических уровней и волновых функций гамильтоновых систем с одной и несколькими степенями свободы на основе метода классических и квантовых нормальных форм / И.Н. Беляева, Н.И. Корсунов, Н.А. Чеканов, А.Н. Чеканов // Физико-химические аспекты изучения кластеров, наноструктур и наноматериалов, 2023. Вып. 15. С.255-263.
4. Уилкинсон Дж., Райнш К. Справочник алгоритмов на языке АЛГОЛ. Линейная алгебра. М.: Машиностроение, 1976. 392 с.
5. Маслов В.П., Федорюк М.В. Квазиклассические приближения для уравнений квантовой механики. М.: Наука, 1976. 292 с.
6. Фреман П.У., Фреман Н. ВКБ-приближение. М.: Мир, 1967. 168 с.
7. Борн М. Лекции по атомной механике. Харьков-Киев: ГНТИ, 1934. 312 с.
8. Ульянов В.В. Интегральные методы в квантовой механике. Харьков: Вища школа. Изд-во при Харьковском Университете, 1982. 160 с.
9. Голуб Дж., Ван Лоун Ч. Матричные вычисления. М.: Мир, 1999. 549 с.

10. Пузынин И.В. Обобщенный непрерывный аналог метода Ньютона для численного исследования некоторых нелинейных квантово-полевых моделей // ФЭЧАЯ, 1999. Т.30. Вып. 1. С. 210-265.
11. Глазунов Ю.Т. Вариационные методы. Москва-Ижевск: НИЦ «Регулярная и хаотическая динамика»: Институт компьютерных исследований, 2006. 470 с.
12. Канторович Л.В., Крылов В.И. Приближенные методы высшего анализа. Л., Физматгиз, 1962. 708 с.
13. Banerjee K. The anharmonic oscillator / K. Banerjee, S.P. Bhatnagar, V. Choudhry, S.S. Kanwal // Proc. R. Soc. Lond., 1978. A.360. P.575-586.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. Нерелятивистская теория. том III. М.: гос. Изд-во физ.-мат. лит., 1963. 704 с.
15. Хейне В. Теория групп в квантовой механике. М.: Наука, 1963. 521 с.
16. Беляева И.Н., Лукьяненко А.Н., Чеканов Н.А. Программа вычисления собственных значений и функций симметричного двумерного оператора Шрёдингера методом самосогласованного базиса. Свидетельство об отрасл. Регистрации разработки №8364. Зарегистр.в отрасл. фонде алгоритмов и программ ФГНУ 21.05.2007.
17. Henon M., Heiles C. The applicability of the third integral of motion: some numerical experiments // Astr. J., 1964. V.69. N.1. P.73-91.
18. The transition regularity – chaos – regularity and statistical properties of energy spectra / Yu.L. Bolotin, V.Yu. Gonchar, V.N. Tarasov, N.A. Chekanov // Phys. Lett. 1989. V. A135. P. 29-32.
19. Проявления стохастичности в спектрах некоторых гамильтоновых систем с дискретной симметрией / Ю.Л. Болотин, С.И. Виницкий, В.Ю. Гончар, Н.А. Чеканов. Препринт ОИЯИ Р4-89-590, 1989. 12 с.

References

1. Vinitsky S.I. Solution of the two-dimensional Schrödinger equation in a self-consistent basis / S.I. Vinitsky, E.V. Inopin, N.A. Chekanov. Preprint JINR P4-93-50. 1993. – 12 p.
2. Chekanov N.A. Numerical solution of a stationary equation Schrödinger in the self-consistent basis approximation / N.A. Chekanov, Yu.A. Ukolov // Materials of the international seminar “Supercomputing and mathematical modeling”. Sarov, VNIIEF, 2004. P. 101-102.
3. Belyaeva I.N. Semiclassical calculations of energy levels and wave functions of Hamiltonian systems with one and several degrees of freedom based on the method of classical and quantum normal forms / I.N. Belyaeva, N.I. Korsunov, N.A. Chekanov, A.N. Chekanov // Physico-chemical aspects of the study of clusters, nanostructures and nanomaterials, 2023, No. 15. P.255-263.
4. Wilkinson J. Handbook of algorithms in the ALGOL language. Linear algebra / J. Wilkinson, K. Reinsch. M.: Mechanical Engineering, 1976. 392 p.
5. Maslov V.P., Fedoryuk M.V. Semiclassical approximations for the equations of quantum mechanics. M.: Nauka, 1976. 292 p.
6. Freman P.U., Freman N. WKB approximation. M.: Mir, 1967. 168 p.
7. Born M. Lectures on atomic mechanics. Kharkov-Kyiv: GNTI, 1934. 312 p.
8. Ulyanov V.V. Integral methods in quantum mechanics. Kharkov: Vishcha school. Publishing house at Kharkov University, 1982. 160 p.
9. Golub J., Van Loon C. Matrix calculations. M.: Mir, 1999. 549 p.
10. Puzynin I.V. A generalized continuous analogue of Newton’s method for the numerical study of some nonlinear quantum field models // FECHAYA, 1999. Vol.30. No 1. P.210-265.
11. Glazunov Yu.T. Variational methods. Moscow-Izhevsk: Research Center “Regular and Chaotic Dynamics”: Institute of Computer Research, 2006. 470 p.
12. Kantorovich L.V., Krylov V.I. Approximate methods of higher analysis. L., Fizmatgiz, 1962. 708 p.
13. Banerjee K. The anharmonic oscillator / K. Banerjee, S.P. Bhatnagar, V. Choudhry, S.S. Kanwal // Proc. R. Soc. Lond., 1978. A.360. P.575-586.
14. Landau L.D., Lifshits E.M. Quantum mechanics. Non-relativistic theory. volume III. M.: state. Publishing house of physics and mathematics. lit., 1963. 704 p.
15. Heine V. Group theory in quantum mechanics. M.: Nauka, 1963. 521 p.
16. Belyaeva I.N., Lukyanenko A.N., Chekanov N.A. A program for calculating eigenvalues and functions of the symmetric two-dimensional Schrödinger operator using the self-consistent basis method. Certificate of industry Development registration No. 8364. Registered in the industry Fund of Algorithms and Programs of the Federal State Scientific University 21.05.2007.

17. Henon M., Heiles C. The application of the third integral of motion: some numerical experiments // Astr. J. 1964. V.69. N.1, P.73-91.

18. The transition regularity – chaos – regularity and statistical properties of energy spectra / Yu. L. Bolotin, V.Yu. Gonchar, V.N. Tarasov, N.A. Chekanov // Phys. Lett. 1989. V. A135. P.29-32.

19. Manifestations of stochasticity in the spectra of some Hamiltonian systems with discrete symmetry / Yu.L. Bolotin, S.I. Vinitsky, V. Yu. Gonchar, N.A. Chekanov. Preprint JINR P4-89-590, 1989. 12 p.

Баландин Олег Сергеевич, старший преподаватель кафедры огневой подготовки, Белгородский юридический институт МВД России имени И.Д. Путилина, г. Белгород, Россия

Беляева Ирина Николаевна, кандидат физико-математических наук, доцент, доцент кафедры математики, Белгородский государственный национальный исследовательский университет, г. Белгород, Россия

Чеканов Николай Александрович, доктор физико-математических наук, профессор, независимый исследователь, г. Белгород, Россия

Чеканов Александр Николаевич, старший преподаватель кафедры обеспечения безопасности на объектах транспорта, Белгородский юридический институт МВД России имени И.Д. Путилина, г. Белгород, Россия

Balandin Oleg Sergeevich, Senior Lecturer, Department of Fire Training and Shooting Preparation, Belgorod Law Institute of the Ministry of Internal Affairs of Russian Federation named after I.D. Putilin, Belgorod, Russia

Belyaeva Irina Nikolaevna, Candidate of Physical and Mathematical Sciences, Associate professor, Associate professor of the Department of Mathematics, Belgorod State National Research University, Belgorod, Russia

Chekanov Nikolay Aleksandrovich, Doctor of Physical and Mathematical Sciences, Professor, independent researcher, Belgorod, Russia

Chekanov Aleksandr Nikolaevich, Senior Lecturer, Department of Security at Transport Facilities, Belgorod Law Institute of the Ministry of Internal Affairs of Russian Federation named after I.D. Putilin, Belgorod, Russia