

Ангармонический двухъямный потенциал несимметричной формы

Турьев А.В.

Сыктывкарский лесной институт (филиал) ФГБОУ ВО "Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет имени С.М. Кирова" (СЛИ), ул. Ленина, д. 39, Сыктывкар, 167982, Россия
e-mail: allaalex@mail.ru

Полециков С.М.

Сыктывкарский лесной институт (филиал) ФГБОУ ВО "Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет имени С.М. Кирова" (СЛИ), ул. Ленина, д. 39, Сыктывкар, 167982, Россия
e-mail: polsm@list.ru

Асадуллин Ф.Ф.

Сыктывкарский лесной институт (филиал) ФГБОУ ВО "Санкт-Петербургский государственный лесотехнический университет имени С.М. Кирова" (СЛИ), ул. Ленина, д. 39, Сыктывкар, 167982, Россия
e-mail: aff@sfi.komi.com

Модельный двухъямный потенциал асимметричной формы

$$U(x) = -k_2x^2 + k_3x^3 + k_4x^4$$

часто используется в задачах колебательной спектроскопии молекул и химической кинетики (инверсионные колебания пирамидальных молекул, изгибные колебания кольцевых молекул, деформационные колебания молекул в возбужденных электронных состояниях и др.) Так как волновое уравнение с ангармоническими потенциалами не допускает точных аналитических решений, то в задачах с такими потенциалами применяют различные приближенные методы (вариационный метод, теория возмущений, ВКБ-метод и др.).

При решении задачи ангармонического осциллятора нами применялись два метода. В первом способе расчетная схема приближенного решения основывалась на применении степенных рядов в области, содержащей все поворотные точки исследуемых уровней [1]. Во втором способе применялось численное интегрирование методом Рунге–Кутты. В работе проанализировано влияние коэффициентов потенциала на уровни энергии и волновые функции, которые получаются в результате решения уравнения Шредингера, содержащего двухъямный потенциал. Также приведено сравнение решений уравнения Шредингера, полученных двумя способами: с помощью степенных рядов и методом Рунге–Кутты.

Литература

1. Жирнов Н.И., Турьев А.В. «К оценке вероятностей переходов в двойной несимметричной потенциальной яме», *Опт. и спектр.*, 47, No. 5, 869–876 (1979).