

О. Чулуунбаатар¹, А.А. Гусев¹, С.И. Виноцкий², В.П. Гердт¹, В.А. Ростовцев¹,
А.Г. Абрашкевич³, В.Л. Дербов⁴, А. Гуждж⁵, П.М. Красовицкий⁶, Э.М. Казарян⁷

¹Лаборатория информационных технологий ОИЯИ

²Лаборатория теоретической физики ОИЯИ

³Лаборатория IBM, Торонто, Канада

⁴Саратовский государственный университет, Саратов, РФ

⁵Университет им. Мария Кюри-Склодовска, Люблин, Польша

⁶Институт ядерной физики, Алматы, Казахстан

⁷Российско-Армянский (Славянский) университет, Ереван, Армения

На конкурс работ ОИЯИ по разделу научно-методических и научно-технических исследований выдвигается цикл работ “**Проблемно-ориентированный комплекс программ для решения краевых задач динамики малочастичных квантовых систем**”.

Создание проблемно-ориентированного комплекса программ для решения краевых задач, описывающих динамику малочастичных квантовых систем, и включение их в библиотеки программ журнала *Computer Physics Communication* и в JINRLIB ОИЯИ являются важным достижением в разработке методов, алгоритмов и программного обеспечения для компьютерного моделирования физических процессов в низкоразмерных квантовых системах и анализа экспериментальных данных. Актуальность представленных исследований обусловлена потребностями российских и международных научных программ и проектов по изучению физических процессов в малочастичных квантовых системах: фотоионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атомов и молекул в магнито-оптических ловушках, каналирования и туннелирования ионов и кластеров, приповерхностной диффузии молекул, фотоабсорбции в электронных и примесных состояниях полупроводниковых наноструктур. Исследования выполнялись в соответствии с научно-тематическими планами научно-исследовательских работ ОИЯИ и в рамках протоколов о выполнении совместной научно-исследовательской работы с Монгольским государственным университетом (г. Улан-Батор, Монголия), с Институтом математики и информатики Болгарской Академии Наук (г. София, Болгария), Университетом им. Мария Кюри-Склодовска (г. Люблин, Польша), Институтом ядерной физики (г. Алматы, Казахстан), Российско-Армянским (Славянским) университетом (г. Ереван, Армения), Саратовским государственным университетом (г. Саратов, Россия).

В цикле работ [1–25] представлены символично-численные алгоритмы и проблемно-ориентированный комплекс программ, реализующие эффективные вычислительные схемы для численного решения краевых многомерных задач шредингеровского типа в конечной области многомерного конфигурационного пространства. В качестве базового метода применялся метод, предложенный советским математиком, нобелевским лауреатом (1975 г.) Л.В. Канторовичем в 1934 году¹ для численного решения краевых двумерных задач эллиптического типа сведением к системе обыкновенных дифференциальных уравнений (ОДУ). Суть метода состоит в разложении искомого решения по базисным функциям одной переменной, непрерывно зависящим от второй переменной как от параметра², тогда как в обычно используемых проекционных методах решения двухмерных краевых задач, базисные функции зависят только от одной переменной. Как известно, если область определения искомого решения разбивается на подобласти или имеет сложную границу, то, как правило, используются составные базисные функции с нелинейными вариационными параметрами, которые учитывают особенности искомого решения^{2,3}.

Метод Канторовича (МК) можно рассматривать как обобщение вариационного подхода⁴, в котором применяются модифицированные составные базисные функции, дополнительно

¹ Л.В. Канторович, ДАН СССР, т. 2, с. 532–536 (1934).

² З.А. Власова, Тр. МИАН СССР, т. 53, сс. 16–36 (1959).

³ Л.А. Севастьянов, А.А. Егоров, Оптика и Спектроскопия, т. 105, сс. 632–640 (2008).

⁴ Л.Э. Эльсгольд, *Дифференциальные уравнения и вариационное исчисление*. Москва, Наука, 1969.

зависящие от второй переменной как от параметра. Поэтому, МК занимает промежуточное место между точным решением задачи и другими вариационно-проекционными методами⁵, и позволяет реализовать экономичный алгоритм вычисления однопараметрических базисных функций, учитывающих вышеуказанные особенности и краевые условия исходной задачи. Кроме того, МК дает возможность построить оптимальные асимптотические разложения решений многоканальной задачи рассеяния, необходимые для переноса асимптотических краевых условий на границу конечной области в виде условий третьего рода, используя асимптотические методы (АМ), реализованные в виде символьно-численных алгоритмов. В качестве базисных функций для численного решения МК краевых многомерных задач шредингеровского типа, описывающих динамику малочастичных квантовых систем, использовались собственные функции оператора так называемой быстрой подсистемы – части исходного оператора системы. Разложение искомого решения по набору базисных функций, зависящих от медленной переменной как от параметра, составляет суть адиабатического метода, широко применяемого в различных разделах физики⁶. В результате проецирования с помощью набора таких базисных функций, исходная многомерная краевая задача сводится к задаче на связанные состояния или к многоканальной задаче рассеяния для системы (ОДУ) второго порядка по медленной переменной. Элементы матриц вещественных переменных коэффициентов (МВПК) этой системы уравнений выражаются через интегралы, содержащие базисные функции и/или их первые производные по параметру. Аналитические выражения для асимптотик МВПК самосопряженной системы ОДУ второго порядка и асимптотик искомого регулярных и иррегулярных матриц–решений, необходимые для редукции задачи на конечный интервал, вычисляют, используя АМ, реализованные в виде символьно-численных алгоритмов. Поэтому, решение МК исходной краевой задачи разбивается на последовательность нескольких краевых задач, для дискретизации которых наиболее оптимальным является метод конечных элементов (МКЭ). Для решения данного класса задач необходимо разработать эффективные стабильные вычислительные схемы, экономичные символьно-численные алгоритмы и реализующий их проблемно-ориентированный комплекс программ.

В представленном авторами цикле работ [1–25] в рамках МК, МКЭ и АМ разработаны эффективные вариационно-проекционные схемы и символьно-численные алгоритмы для численного решения с заданной точностью краевых многомерных задач шредингеровского типа с однородными краевыми условиями и анализа динамики малочастичных квантовых систем.

Создан проблемно-ориентированный комплекс программ [1–7] для численного анализа различных физических процессов в малочастичных квантовых системах. Следующий комплекс программ, представляющий интерес для широкого круга пользователей, передан в библиотеки программ журнала *Computer Physics Communication* и *JINRLIB*:

- **KANTBP** [1] - программа решения задачи на связанные состояния и многоканальной задачи рассеяния для самосопряженных систем ОДУ второго порядка с вещественными переменными коэффициентами и однородными краевыми условиями (первого и второго рода при больших и малых значениях независимой переменной и третьего рода при больших значениях независимой переменной). Программа написана на языке Fortran.
http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v1_0.html
<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/#KANTBP>
- **KANTBP 2.0** [2] - новая версия программы **KANTBP**. В данной версии программы добавлена опция для решения задачи непрерывного спектра с однородными краевыми условиями третьего рода при больших и малых значениях независимой переменной. Программа написана на языке Fortran.
http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v2_0.html
http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/#KANTBP_2.0
- **KANTBP 3.0** [3] - **KANTBP 3.0** [3] - новая версия программы **KANTBP 2.0**. В данной версии программы добавлена опция для решения задачи непрерывного спектра с

⁵ Л.В. Канторович и В.И. Крылов, *Приближенные методы высшего анализа*. Москва, Гостехиздат, 1952.

⁶ А.Б. Мигдал, В.П. Крайнов, *Приближенные методы квантовой механики*. Москва, Наука, 1966.

однородными краевыми условиями третьего рода при больших по абсолютной величине значениях независимой переменной и вычисления квадратных матриц амплитуд отражения и прохождения (используется комплексная арифметика). Программа написана на языке Fortran.

http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/ADZH_v3_0.html

http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/#KANTBP_3.0

- **KANTBP 4m** [4a] - новая версия программы **KANTBP 3.0.**, созданная на основе алгоритма МКЭ с интерполяционными полиномами Эрмита [4б], реализована в системе компьютерной алгебры Maple. В данной версии программы добавлена опция для решения задачи непрерывного спектра с однородными краевыми условиями третьего рода при больших по абсолютной величине значениях независимой переменной и вычисления квадратных и прямоугольных матриц амплитуд отражения и прохождения, соответственно, т.е. число открытых каналов многоканальной задачи рассеяния в падающей волне слева и справа могут отличаться (используется комплексная арифметика).

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp4m>

- **ODPEVP** [5] - программа вычисляет набор собственных значений и собственных функций однопараметрической самосопряженной задачи Штурма-Лиувилля с однородными краевыми условиями (первого, второго и третьего рода), и интегралы от произведения собственных функций и/или их первых производных по параметру – элементы МВПК самосопряженных систем ОДУ второго порядка. Программа **ODPEVP** используется также как подпрограмма в программах **KANTBP** при решении задач на связанные состояния и многоканальных задач рассеяния для самосопряженных систем ОДУ второго порядка. Программа написана на языке Fortran.

http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEDV_v1_0.html

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/#ODPEVP>

- **POTHEA** [6] - программа для расчета с заданной точностью собственных значений, поверхностных собственных функций и их первых производных по параметру параметрического самосопряженного двухмерного эллиптического дифференциального уравнения с однородными условиями Дирихле и/или Неймана в конечной двумерной области. Программа вычисляет также потенциальные матричные элементы – интегралы от произведения поверхностных функций и/или первых производных от поверхностных функций по параметру. Собственные значения, зависящие от параметра и матричные элементы, вычисленные программой **POTHEA**, использовались в качестве элементов МВПК самосопряженных систем ОДУ второго порядка, описывающих динамику атома гелия, для которой с помощью программ **KANTBP** решались задачи на связанные состояния и многоканальные задачи рассеяния. Программа написана на языке Fortran.

http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AESX_v1_0.html

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/#POTHEA>

- **POTNMF** [7] - программа для решения однопараметрической задачи на собственные значения для угловых сплюснутых сфероидальных функций, и вычисления первой производной по параметру от собственных функций и интегралов от произведения собственных функций и их первых производных по параметру. Собственные значения, зависящие от параметра и матричные элементы, вычисленные программой **POTNMF**, использовались в качестве элементов МВПК самосопряженной системы ОДУ второго порядка, для которой с помощью программ **KANTBP** решались задачи на связанные состояния и многоканальной задачи рассеяния, описывающих динамику атома водорода в магнитном поле. Программа **POTNMF** вычисляет также дипольные матричные элементы, необходимые для расчета оптических переходов между состояниями дискретного и непрерывного спектра. Необходимые аналитические выражения для асимптотик МВПК самосопряженной системы ОДУ и асимптотик искомым регулярных и иррегулярных матриц–решений были вычислены с помощью символьно-численных алгоритмов, реализованных в системе компьютерной алгебры MAPLE и использованы в приведенных подпрограммах. Программа написана на языке Fortran.

http://cpc.cs.qub.ac.uk/summaries/AEAA_v1_0.html

<http://wwwinfo.jinr.ru/programs/jinrlib/kantbp/#POTHMF>

Комплекс программ **KANTBP** [1-4], **ODPEVP** [5], **POTHEA** [6] и **POTHMF** [7] позволяет решать с заданной точностью краевые задачи для *двумерного, трехмерного* уравнения в частных производных эллиптического типа в рамках МК с дискретизацией последовательности краевых задач МКЭ. К этим программам было официально зарегистрировано **KANTBP** – 219, **KANTBP 2.0** – 287, **KANTBP 3.0** – 29, **POTHMF** – 195, **ODPEVP** – 134, **POTHEA** – 30 обращений пользователей библиотекой программы журнала Computer Physics Communication, соответственно, до 1 июля 2015.

Эффективность разработанных методов, алгоритмов и созданного комплекса программ **KANTBP** [1-4], **ODPEVP** [5], **POTHEA** [6] и **POTHMF** [7] подтверждена результатами теоретического и численного анализа погрешности решений краевых задач и результатами моделирования ряда физических процессов в малочастичных квантовых системах. Наиболее важными результатами являются:

1. В рамках МКЭ впервые доказаны теоретические оценки погрешности аппроксимаций первой производной по параметру от собственных значений, собственных функций задачи на собственные значения, и интегралов от произведения собственных функций и/или их первых производных по параметру – элементов МВПК для самосопряженных систем ОДУ второго порядка [5,6].
2. Проведено численно-аналитическое исследование модели резонансного механизма фотоионизации и лазерно-стимулированной рекомбинации атома водорода в однородном магнитном поле. Впервые предсказаны эффекты резонансного прохождения и полного отражения разноименно заряженных частиц в однородном магнитном поле [8–10]. Выполнен анализ скоростей радиационного распада высоковозбужденных ридберговских состояний атома водорода в магнитном поле [11].
3. Выполнено численно-аналитическое исследование модели осевого каналирования одноименно заряженных частиц в эффективном осцилляторном потенциале кристалла. Выявлен немонотонный характер зависимости коэффициента усиления скорости ядерной реакции от энергии столкновения, обусловленный впервые предсказанным эффектом полного отражения каналированных ионов [12,13].
4. Выполнено численно-аналитическое исследование модели туннелирования кластера, состоящего из пары частиц или ионов, или нескольких тождественных частиц, связанных парными короткодействующими потенциалами осцилляторного типа, через отталкивающие барьеры. Выявлен немонотонный характер зависимости коэффициентов прохождения и отражения от энергии столкновения, числа частиц и типа симметрии состояния кластера. Показано, что резонансное прохождение кластера через барьеры - эффект квантовой прозрачности, с характерным увеличением плотности вероятности состояний рассеяния в окрестности локальных минимумов потенциальной энергии по трансверсальным переменным, обусловлен образованием метастабильных состояний кластера при взаимодействии с барьерами [14-18].
5. В приближении эффективной массы выполнено численно-аналитическое исследование спектральных и оптических характеристик электронных и примесных состояний аксиально-симметричных моделей полупроводниковых квантовых проволок, квантовых ям и коэффициента фото-абсорбции ансамблей квантовых точек во внешних полях, а также квантово-размерных эффектов Зеемана и Штарка [19-23].
6. Проведен анализ эффекта квантовой прозрачности в модели квантовой диффузии двухатомных молекул бериллия⁷ на поверхности меди. Эталонный расчет был выполнен для молекулы бериллия с потенциалом Морзе. Значения параметров барьерного гауссова потенциала выбирались по экспериментальным данным о квантовой диффузии атомов водорода на поверхности меди. Показано, что квантовая прозрачность барьеров приводит к увеличению тепловых констант скорости квантового туннелирования и понижению энергии

⁷ J.M. Merritt, V.E. Bondybey and M.C. Heaven, Science 326, 1548–1551 (2009).

активации составной молекулярной системы при низких температурах ниже энергии потенциального барьера [24, 25].

За последние 15 лет членами авторского коллектива успешно защищены докторская и три кандидатские диссертации, и в настоящее время подготовлены к защите докторская и кандидатская диссертации. Полученные физические результаты доложены на 111-сессии Ученого совета ОИЯИ, 32 и 35-сессиях ППК по физике конденсированных сред, и 42-сессии ППК по ядерной физике. Работа получила частичную поддержку грантами РФФИ 08-01-00604, 11-01-00523, 14-01-00420, 13-01-00668; грантами Министерства образования и науки Республики Казахстан 2023/ГФ3, 0333/ГФ4; грантами Министерства образования и науки Монголии; грантами Болгарского фонда научных исследований и программой Боголюбов-Инфельд (ОИЯИ).

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, A.G. Abrashkevich, A. Amaya-Tapia, M.S. Kaschiev, S.Y. Larsen and S.I. Vinitzky, KANTBP: A program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach, *Comput. Phys. Commun.* 177, pp. 649–675 (2007).
2. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky and A.G. Abrashkevich, KANTBP 2.0: New version of a program for computing energy levels, reaction matrix and radial wave functions in the coupled-channel hyperspherical adiabatic approach, *Comput. Phys. Commun.* 179, pp. 685–693 (2008).
3. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky and A.G. Abrashkevich, KANTBP 3.0: New version of a program for computing energy levels, reflection and transmission matrices, and corresponding wave functions in the coupled-channel adiabatic approach, *Comput. Phys. Commun.* 185, pp. 3341–3343 (2014).
4. (a) A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, L.L. Hai, KANTBP 4.0: New version of a program for computing energy levels, reflection and transmission matrices, and corresponding wave functions in the coupled-channel adiabatic approach: using the interpolating Hermite polynomials, будет сдана в Библиотеке ОИЯИ; (б) A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky, V.L. Derbov, A. Gózdź, L.L. Hai, V.A. Rostovtsev, Symbolic-numerical solution of boundary-value problems with self-adjoint second-order differential equation using the finite element method with interpolation Hermite polynomials, *Lecture Notes in Computer Science* 8660, pp. 138–154 (2014).
5. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky and A.G. Abrashkevich, ODPEVP: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed Sturm-Liouville problem, *Comput. Phys. Commun.* 181, pp. 1358–1375 (2009).
6. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitzky and A.G. Abrashkevich, POTHEA: A program for computing eigenvalues and eigenfunctions and their first derivatives with respect to the parameter of the parametric self-adjointed 2D elliptic partial differential equation, *Comput. Phys. Commun.* 185, pp. 2636–2654 (2014).
7. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, V.P. Gerdt, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitzky, A.G. Abrashkevich, M.S. Kaschiev and V.V. Serov, POTHMF: A program for computing potential curves and matrix elements of the coupled adiabatic radial equations for a hydrogen-like atom in a homogeneous magnetic field, *Comput. Phys. Commun.* 178, pp. 301–330 (2008).
8. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, V.L. Derbov, M.S. Kaschiev, L.G. Mardoyan, V.V. Serov, T.V. Tupikova and S.I. Vinitzky, Adiabatic representation for a hydrogen atom photoionization in an uniform magnetic field, *Phys. Atom. Nucl.*, 71, pp. 844–852 (2008); *Ядерная Физика* 71, сс. 871–878 (2008).
9. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, S.I. Vinitzky, V.L. Derbov, L.A. Melnikov and V.V. Serov, Photoionization and recombination of a hydrogen atom in a magnetic field, *Phys. Rev. A* 77, pp. 034702–1–4 (2008).

10. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, V.L. Derbov, M.S. Kaschiev, L.A. Melnikov, V.V. Serov and S.I. Vinitsky, Calculation of a hydrogen atom photoionization in a strong magnetic field by using the angular oblate spheroidal functions, *J. Phys. A* 40, pp. 11485–11524 (2007).
11. A. Gusev, S. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V. Gerdt, L.L. Hai and V.A. Rostovtsev, Symbolic-numerical calculations of high $|m|$ Rydberg states and decay rates in strong magnetic fields, *Lecture Notes in Computer Science* 7442, pp. 155–171 (2012).
12. O. Chuluunbaatar, A.A. Gusev, V.L. Derbov, P.M. Krassovitskiy and S.I. Vinitsky, Channeling problem for charged particles produced by confining environment, *Phys. Atom. Nucl.* 72, pp. 768–778 (2009); *Ядерная физика* 72, сс. 811–821 (2009).
13. P.M. Krassovitskiy, S.I. Vinitsky, A.A. Gusev and O. Chuluunbaatar, The cross section of reaction of two charged particles in a channel of a crystal, *Bull. of the Russian Academy of Sci.: Physics.* 73, pp. 222–224 (2009); *Известия РАН: Серия Физическая.* 73, сс. 233–235 (2009).
14. A. Gusev, S. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V.A. Rostovtsev, L.L. Hai, V. Derbov and P. Krassovitskiy, Symbolic-numerical algorithm for generating cluster eigenfunctions: tunneling of clusters through repulsive barriers, *Lecture Notes in Computer Science* 8136, pp. 427–442 (2013).
15. A.A. Gusev, S.I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V.P. Gerdt, V.A. Rostovtsev, Symbolic-numerical algorithms to solve the quantum tunneling problem for a coupled pair of ions, *Lecture Notes in Computer Science* 6885, pp. 175–191 (2011).
16. A.A. Gusev, L. Le Hai, O. Chuluunbaatar, V. Ulziibayar, S.I. Vinitsky, V.L. Derbov, A. Gozdz, and V.A. Rostovtsev, Symbolic-numeric solution of boundary-value problems for the schrödinger equation using the finite element method: scattering problem and resonance states, *Lecture Notes in Computer Science* 9301, pp. 182–197 (2015).
17. A.A. Gusev, S.I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, A. Gózdź, V.L. Derbov, Resonance tunnelling of clusters through repulsive barriers, *Physica Scripta* 89, pp. 054011–1–7 (2014).
18. A.A. Gusev, S.I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, L.L. Hai, V.L. Derbov and P.M. Krassovitskiy, Resonant tunneling of the few bound particles through repulsive barriers, *Phys. Atom. Nucl.* 77, pp. 389–413 (2014); *Ядерная Физика* 77, сс. 414–438 (2014).
19. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitsky, K.G. Dvoyan, E.M. Kazaryan, H.A. Sarkisyan, V.L. Derbov, A.S. Klombotskaya and V.V. Serov, Adiabatic description of nonspherical quantum dot models, *Physics of Atomic Nuclei* 75 pp. 1210–1226 (2012); *Ядерная Физика* 75, сс. 1281–1297 (2012).
20. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, V.P. Gerdt, V.A. Rostovtsev, S.I. Vinitsky, V.L. Derbov, V.V. Serov, Symbolic-numeric algorithms for computer analysis of spheroidal quantum dot models, *Lecture Notes in Computer Science* 6244, pp. 106–122 (2010).
21. A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, S.I. Vinitsky, V.L. Derbov, E.M. Kazaryan, A.A. Kostanyan and H.A. Sarkisyan, Adiabatic approach to the problem of a quantum well with a hydrogen – like impurity, *Phys. Atom. Nucl.* 73, pp. 331–338 (2010); *Ядерная физика* 73, сс. 352–359 (2010).
22. S.I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V.P. Gerdt, A.A. Gusev, and V.A. Rostovtsev, Symbolic-numerical algorithms for solving parabolic quantum well problem with hydrogen-like impurity, *Lecture Notes in Computer Science* 5743, pp. 334–349 (2009).
23. A.A. Gusev, L.L. Hai, S.I. Vinitsky, O. Chuluunbaatar, V.L. Derbov, A.S. Klombotskaya, K.G. Dvoyan and H.A. Sarkisyan, Analytical and numerical calculations of spectral and optical characteristics of spheroidal quantum dots, *Phys. Atom. Nucl.* 76, pp. 1033–1055 (2013); *Ядерная Физика* 76, сс. 1090–1112 (2013).
24. S.I. Vinitsky, A.A. Gusev, O. Chuluunbaatar, L.L. Hai, V.L. Derbov, P.M. Krassovitskiy, A. Gózdź, Symbolic numerical algorithm for solving quantum tunneling problem of a diatomic molecule through repulsive barriers, *Lecture Notes in Computer Science* 8660, pp. 472–490 (2014).
25. S. Vinitsky, A. Gusev, O. Chuluunbaatar, L.L. Hai, V. Derbov, P.M. Krassovitskiy, Models of quantum tunneling of a diatomic molecule affected by laser pulses through repulsive barriers, *Proc. SPIE* 9031, pp. 90311D (2014).

Computer Physics Communications – 6, Impact factor – 3.394
Physical Review A – 1, Impact factor – 2.729
Journal of Physics A – 1, Impact factor – 1.687
Physica Scripta – 1, Impact factor – 1.296
Ядерная Физика – 6, Impact factor – 0.595
Известия РАН: Серия Физическая – 1
Lecture Notes in Computer Science – 8
Proceedings of SPIE – 1