ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

11-92-517

На правах рукописи

УДК 519.62.622.2+539.182

ПУЗЫНИН
Виктор Игоревич

МАТЕМАТИЧЕСКОЕ И ПРОГРАММНОЕ ОБЕСПЕЧЕНИЕ ИССЛЕДОВАНИЙ МОДЕЛЕЙ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ, СВЯЗАННЫХ С МЮ-КАТАЛИЗОМ

Специальность: 05.13.16 — применение вычислительной техники, математического моделирования и математических методов в научных исследованиях

Автореферат диссертации на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук

Дубна 1992

Работа выполнена в Институте физики высоких энергий (г. Протвино).

Научный руководитель – кандидат физико-математических наук В.В. Гусев.

Официальные оппоненты: доктор физико-математических наук, профессор П.Н. Заикин, доктор физико-математических наук С.И. Виницкий.

Ведущая организация – Институт проблем кибернетики РАН.

Защита диссертации состоится "______" ________________ 1993 г. в ______ часов на заседании специализированного Совета Д 047.01.04 при Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований, г.Дубна Московской области.

С диссертацией можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Автореферат разослан "______" ________________ 1992 г.

Ученый секретарь
специализированного Совета Д 047.01.04 З.М.Иванченко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

В диссертации рассматривается замкнутая схема численного анализа широкого круга математических моделей, приводящих к задачам на собственные значения и краевым задачам для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. Задачи такого класса возникают при исследовании дискретных и непрерывных спектров дифференциальных операторов в сингулярной задаче Штурма-Лиувилля. Разработан подход, позволяющий единообразно решать для квантово-механических систем задачу на связанные состояния и задачу рассеяния. Вычислительная схема основана на применении современных методов: дискретизации непрерывной задачи с помощью модифицированного метода конечных элементов и метода итерации подпространства для решения алгебраической обобщенной проблемы собственных значений. С помощью созданного программного обеспечения выполнены численные исследования ряда актуальных моделей квантовой механики, связанных с μ-катализом.

Постановка задач и их актуальность

Создание эффективных средств численного анализа математических моделей является одной из актуальных задач моделирования физических процессов.

Основной круг задач, решаемых в диссертации, связан с исследованием математических моделей процессов μ-катализа в рамках уравнения Шредингера.

Система трех частиц, взаимодействующих по закону Кулона, в настоящее время является основной моделью образования мезомолекул изотопов водорода и рассеяния мезоатомов, актуальность изучения которой связана с исследованиями различных характеристик мюонного катализа ядерных реакций синтеза [1, 2]. Некоторые важные для современных экспериментов параметры процессов μ-катализа выражаются через локальные характеристики волновых функций задачи трех тел. В рамках адиабатического представления можно наиболее адекватно учесть правильное асимптотическое поведение волновой функции в особых точках, что необходимо для описания образования мезомолекул и низкоэнергетического рассеяния.

Однако повышение точности расчетов в рамках традиционного адиабатического метода, заключающегося в разложении искомой волновой функции задачи трех кулоновских тел по собственным функциям оператора задачи двух кулоновских центров, имеющего непрерывный и дискретный спектры, приводит к необходимости расширения адиабатического базиса, что существенно усложняет задачу.

В настоящее время более эффективным способом исследования задачи является метод адиабатического гиперсферического (АГ) представления [3]. Здесь гамильтониан H трехчастичной системы с фиксированным угловым моментом J (после выделения угловых переменных) в гиперсферических координатах $\{\rho, \chi, \theta\}$ [4] записывается в следующем виде

$$H = H_\rho + \Lambda_\rho.$$

H_ρ является радиальной частью кинетической энергии оператора H, определяющей движение относительно гиперрадиуса ρ. Оператор

$$\Lambda_\rho = \rho^{-2} H_{\chi\theta} + V, \tag{1}$$

объединяющий угловую часть кинетической энергии оператора H и потенциал полного взаимодействия кулоновской системы V, описывает угловое поведение системы при фиксированном гиперрадиусе ρ. В диссертации рассматривается случай $J = 0$.

Собственные значения $\lambda_a(\rho)$ и соответствующие им собственные функции $\phi_a(\rho, \chi, \theta)$ оператора (1) называются АГ термами и АГ гармониками, соответственно. АГ гармоники образуют полный базис в гильбертовом пространстве L_2 квадратично интегрируемых функций, зависящих от

[1] Виницкий С.И., Пономарев Л.И. // ЭЧАЯ, т.13, вып.6, с.1336–1418, 1982.

[2] Gerstein S.S., Ponomarev L.I. // Muon Physics. Eds. V.Hughes and C.S.Wu. New York. Academic Press. 1975.

[3] Macek J. // J.Phys.B. 1968. V.1. P.831.

[4] Фок В.А. // Изв. АН СССР. Сер. физ. 1954. т.18. с.161.

угловых переменных χ, θ. В результате разложения волновой функции задачи трех тел по этому базису

$$\Psi(\rho, \chi, \theta) = \sum_a f_a(\rho) \phi_a(\rho, \chi, \theta) \tag{2}$$

уравнение Шредингера сводится к бесконечной системе обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\left(-\rho^{-5}\partial_\rho \rho^5 \partial_\rho + \lambda_a(\rho) - E\right) f_a + \sum_b \left\{ H_{ab} f_b + Q_{ab}\partial_\rho f_b + \rho^{-5}\partial_\rho\left(\rho^5 Q_{ab} f_b\right)\right\} = 0 \tag{3}$$

относительно гиперрадиуса ρ.

Основные достоинства АГ базиса вытекают из свойств оператора (1):

- спектр оператора чисто дискретный,
- учитывается дальнодействие потенциала V.

Наличие этих свойств, а также высокая скорость сходимости АГ разложения (подтверждена численными исследованиями, выполненными в диссертации) в отличие от традиционого адиабатического разложения, естественная постановка граничных условий как для проблемы на связанные состояния, так и для задачи рассеяния, позволяют считать АГ подход более перспективным для решения квантово-механической задачи трех тел.

Реализация АГ подхода осуществляется в три этапа, каждый из которых может быть рассмотрен независимо друг от друга:

- вычисление N-первых членов АГ базиса (АГ термов и АГ гармоник),
- вычисление матричных элементов H_{ab} и Q_{ab}.
- решение системы N радиальных уравнений.

Численное решение каждого из этапов представляет весьма сложную задачу. Поэтому важное значение принимает разработка эффективных алгоритмов и реализующего их программного обеспечения. Существенным моментом является создание средств контроля точности получаемых результатов.

Другой важной моделью квантовой механики, играющей фундаментальную роль в теории атомных столкновений, является система двух кулоновских центров. Расчет ее характеристик необходим для исследования проблем квантовой химии и мезоатомной физики [5]. Кроме того,

[5] Bates D.R., Poots G. // Proc. Phys. Soc. 1953. V.66. P.784.

решение задачи двух кулоновских центров является одним из этапов решения более сложных задач.

В настоящее время в связи с потребностями физики управляемого термоядерного синтеза и диагностики плазмы возникла необходимость исследования задачи двух кулоновских центров в комплексной плоскости [6]. Это требует разработки универсальных алгоритмов и программ, пригодных одновременно в дискретном и непрерывном спектрах [7].

В вытянутых сфероидальных координатах (ξ, η, φ) стационарное уравнение Шредингера, описывающее движение отрицательно заряженной частицы (электрона или мюона) в поле двух положительных зарядов Z_1 и Z_2, закрепленных на расстоянии R друг от друга, можно свести к системе обыкновенных дифференциальных уравнений для радиальной $\Pi(\xi)$ и угловой $\Xi(\eta)$ кулоновских сфероидальных функций (РКСФ и УКСФ) [8]:

$$\frac{d}{d\xi}\Big\{(\xi^2-1)\frac{d\Pi_{m,q}}{d\xi}\Big\}+\Big\{c^2(\xi^2-1)-\lambda_{m,q}+a\xi-\frac{m^2}{\xi^2-1}\Big\}\Pi_{m,q}=0, \qquad (4)$$

$$\frac{d}{d\eta}\Big\{(1-\eta^2)\frac{d\Xi_{m,q}}{d\eta}\Big\}+\Big\{c^2(1-\eta^2)+\lambda_{m,q}+b\eta-\frac{m^2}{1-\eta^2}\Big\}\Xi_{m,q}=0, \qquad (5)$$

где $a = R(Z_1+Z_2)$, $b = R(Z_2-Z_1)$, $c = kR/2$, k – импульс электрона, связанный с энергией E соотношением $E = k^2/2$, $\lambda_{m,q}$ – константа разделения, а m и q – соответственно азимутальное и радиальное квантовые числа.

В непрерывном спектре ($E > 0$) РКСФ имеет асимптотику

$$\Pi(\xi) \to \frac{N_{m,q}}{\xi} sin\Big\{c\xi + \frac{a}{2c}ln(2c\xi) - \frac{l\pi}{2} + \delta_{m,q}\Big\} + O\Big(\frac{1}{\xi^2}\Big) \text{ при } \xi \to \infty,$$

где $l = m + q$ – орбитальное квантовое число, $N_{m,q}$ и $\delta_{m,q}$ есть соответственно амплитуда и фаза радиальной функции.

В случае непрерывного спектра решение задачи двух кулоновских центров состоит в нахождении фазы рассеяния $\delta_{m,q}$ РКСФ по заданной величине E.

Для решения задачи в непрерывном спектре предложено достаточно большое количество алгоритмов и программ. Однако большинство

[6] Соловьев Е.А. Неадиабатические переходы в атомных столкновениях. Успехи физ наук, т.157. вып.3. 1989.

[7] Жанлав Т., Павлов Д.В., Пузынин И.В. — Препринт ОИЯИ. Р11-91-138. Дубна, 1991.

[8] Комаров И.В., Пономарев Л.И., Славянов С.Ю. Сфероидальные и кулоновские сфероидальные функции. -М.: Наука, 1976.

алгоритмов для решения радиального уравнения (4) требуют существенных затрат времени ЭВМ, что вызвано необходимостью интегрировать быстро осциллирующую функцию на большом интервале изменения аргумента. В настоящее время для вычисления уровней энергий связанных состояний и фаз рассеяния активно развивается подход [9], основанный на переходе от уравнения Шредингера к нелинейному уравнению Милна [10], решение которого изменяется плавно. Это позволяет эффективно использовать методы численного интегрирования с автоматическим выбором шага и существенно сократить время, необходимое на вычисления. Подход перспективен для решения задачи двух кулоновских центров как в непрерывном так и в дискретном спектре.

Исследования проведены в соответствии с проблемно-тематическим планом ИФВЭ и договором о научном сотрудничестве ОМВТ ИФВЭ и ИАЭ им. И.В.Курчатова.

Цель работы:

1. Разработать алгоритмы вычислений старших членов асимптотических разложений АГ гармоник, АГ термов и матричных элементов при малых и больших значениях гиперрадиуса.
2. Разработать эффективную вычислительную схему решения спектральной задачи для системы радиальных уравнений Шредингера (3) большой размерности.
3. Дать постановку задачи рассеяния как линейной краевой задачи для системы обыкновенных дифференциальных уравнений и разработать алгоритмы ее численного решения.
4. Выполнить программную реализацию алгоритмов в виде пакетов прикладных программ (ППП).
5. Исследовать эффективность разработанных алгоритмов и созданных на их основе ППП на примере расчетов характеристик (уровней энергий связанных состояний и соответствующих волновых функций) основных мезомолекулярных систем.
6. Разработать эффективную вычислительную схему решения квантовомеханической задачи двух центров в непрерывном спектре.

[9] Korsch H.J., Laurent H. // J. Phys. B. 1981. V.14. P.4213.

[10] Milne W.E. // Phys. Rev. 1930. V.35. P.863.

Научная новизна

1. На основе расширения конечно-элементного базиса функциями, учитывающими априорную информацию о поведении искомых решений на рассматриваемом интервале, разработаны оригинальные алгоритмы численного решения задач на собственные значения и краевых задач для систем линейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка.
2. Разработаны эффективные алгоритмы и впервые вычислены старшие члены асимптотических разложений АГ термов, АГ гармоник, матричных элементов при малых и больших значениях гиперрадиуса.
3. Предложен новый способ решения задачи рассеяния для системы радиальных уравнений Шредингера. С помощью преобразований, учитывающих асимптотические особенности искомых радиальных волновых функций при малых и больших значениях гиперрадиуса, задача рассеяния сводится к линейной однородной граничной задаче.
4. Впервые для решения квантово-механической задачи двух центров в непрерывном спектре применен подход, основанный на преобразовании радиального уравнения к уравнению Милна.

Практическая ценность

Созданный ППП, предназначенный для численного решения задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для системы радиальных уравнений, вошел составной частью в программное обеспечение для численного исследования задачи трех кулоновских тел, сформулированной в АГ подходе. Это позволило с высокой точностью и быстротой провести расчеты уровней энергии и волновых функций ряда мезомолекул.

Помимо специального назначения, ППП представляет самостоятельную практическую ценность как аппарат для численного исследования широкого круга математических моделей, приводящих к задаче на собственные значения или к краевой задаче для системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. ППП успешно применялся для численного решения некоторых актуальных задач квантовой механики.

Программы для вычисления старших членов асимптотических разложений АГ базиса и матричных элементов имеют большое значение для

проверки правильности полученных численных результатов, в дальнейших исследованиях асимптотических свойств АГ базиса, необходимы для решения многоканальной задачи рассеяния.

Программы для вычисления фаз рассеяния РКСФ непрерывного спектра задачи двух кулоновских центров позволяют провести расчеты с высокой точностью и быстротой в широком диапазоне изменения параметров задачи. По своим характеристикам программы превосходят существующие.

Апробация работы

Работы, послужившие основой диссертации, были доложены на научных семинарах ОМВТ ИФВЭ, ИАЭ им. Курчатова, на 12-ой Международной конференции по атомной физике в г. Ванкувере, Канада, 1989 г.

Публикации

Основные результаты диссертации опубликованы в 8 печатных работах, в том числе в виде препринтов ИФВЭ, в материалах 12-ой Международной конференции по атомной физике, в журнале Few Body Systems.

Структура и объем диссертации

Диссертация состоит из введения, четырех глав и заключения, содержит 35 таблиц, 10 рисунков и список цитируемой литературы (119 наименований).

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

Во введении дается краткое описание исследуемых в диссертации задач. Приводится история развития методов их численного решения. Обосновывается актуальность и необходимость развития новых подходов, а также создание единого численного метода для решения этих задач. Сформулированы основные требования, предъявляемые к вычислительным схемам. Описывается структура диссертации.

В первой главе подробно описан АГ подход для решения квантово-механической задачи трех тел. В §1 дана общая теория АГ подхода. Приводятся основные уравнения и алгоритмы вычисления АГ базиса и матричных элементов (§2), основанные на разложении АГ гармоник по множеству функций, включающему функции стандартного конечно-элементного базиса и функции нестандартного базиса. Для построения функций нестандартного базиса использовались аналитические выражения старших членов асимптотических разложений АГ гармоник при $\rho \to 0$ и $\rho \to \infty$. В §3 описывается методика решения системы радиальных уравнений (3). Исследуется сходимость АГ базиса и влияние на точность вычислений функций нестандартного базиса. Приводятся результаты вычислений уровней энергий и соответствующих им радиальных волновых функций для позитрония $e^+e^+e^-$, мезомолекул $dt\mu$ и $dd\mu$.

Во второй главе исследуются асимптотические свойства АГ базиса и матричных элементов. Здесь приводятся основные формулы для вычисления асимптотических разложений АГ термов, АГ гармоник и матричных элементов для больших (§1–2) и малых (§3) значений гиперрадиуса. В §4 представлены алгоритмы, реализованные в отдельном пакете программ и представляющие самостоятельную ценность для дальнейших исследований асимптотических свойств АГ термов, АГ гармоник, матричных элементов. Приводятся результаты вычислений нескольких главных членов асимтотических разложений АГ термов и матричных элементов для позитрония и мезомолекулы $dt\mu$ и их сравнение с расчетами.

В третьей главе рассматриваются методы и алгоритмы, реализованные в ППП, который успешно применялся для решения системы радиальных уравнений Шредингера (3) большой размерности. В §1 описывается функциональное наполнение пакета (рассматривается класс решаемых задач, метод дискретизации, методы решения алгебраической задачи). В общей постановке, задача состоит в вычислении нескольких минимальных собственных значений E системы из N обыкновенных дифференциальных уравнений

$$\mathcal{L}\Big(Y(x)\Big) = ES(x)Y(x), \qquad (6)$$

а также решения краевой задачи

$$\mathcal{L}\Big(Y(x)\Big) = F(x), \qquad (7)$$

где оператор

$$\mathcal{L} = -\frac{d}{dx}A(x)\frac{d}{dx} + V(x) * U(x) + B(x) * Q(x)\frac{d}{dx} + \frac{d}{dx}B(x) * Q(x).$$

$Y(x) = (Y_1(x), Y_2(x), \ldots, Y_N(x))$ – вектор искомых функций, а $F(x) = (F_1(x), F_2(x), \ldots, F_N(x))$ – вектор функций правой части. A, B, V, S – квадратные матрицы размерности $N \times N$, элементы которых – дифференцируемые функции на заданном интервале $[x_0, x_1]$, а Q, U – квадратные

матрицы размерности $N \times N$, удовлетворяющие условиям

$$U = U^T, \quad Q = -Q^T,$$

и элементы которых могут быть заданы таблично. Под операцией '$*$' между матрицами подразумевается $B(x) * Q(x) = \{B_{ij}Q_{ij}, \ |i, j = 1, 2, \ldots, N\}$. На концах интервала $[x_0, x_1]$ искомые функции удовлетворяют граничным условиям

$$c_i^{(1)}\frac{dY_i(x_0)}{dx} + c_i^{(2)}Y_i(x_0) = 0, \quad i = 1, 2, \ldots, N, \qquad (8)$$

$$c_i^{(3)}\frac{dY_i(x_1)}{dx} + c_i^{(4)}Y_i(x_1) = 0,$$

где $c_i^{(j)}$, $j = 1, 2, 3, 4$ – действительные числа.

Дискретизация непрерывных задач (6), (8) и (7), (8) осуществлялась методом конечных элементов [11] с расширенными возможностями: могут использоваться функции стандартного конечно-элементного базиса любого порядка; базис может быть дополнен функциями нестандартного базиса, несущими априорную информацию о поведении решения на рассматриваемом интервале. В результате дискретизации задач (6), (8) и (7), (8) получены алгебраическая обобщенная проблема собственных значений и неоднородная система линейных уравнений, соответственно. Матрицы алгебраических задач являются симметричными положительно определенными матрицами, имеющими блочно-диагональную структуру. Алгебраическая обобщенная проблема собственных значений решалась методом итерации подпространства [12], который позволяет одновременно вычислять несколько собственных значений, ближайших к некоторому заданному вещественному числу (сдвиг спектра). Решение неоднородной системы линейных уравнений сводилось к последовательному решению двух систем уравнений, полученных после LU-факторизации матрицы. Эффективность LU разложения достигается вычислением элементов матриц L и U по столбцам [13]. Программная реализация алгоритмов описана в §2. Результаты численных исследований ряда задач на собственные значения, использованных в качестве тестовых для иллюстрации

[11]Стренг Г., Фикс Дж. Теория метода конечных элементов. -М.: Мир, 1977.

[12]Парлетт Б. Симметричная проблема собственных значений. -М.: Мир, 1983.

[13]Bathe K.-J., Wilson E. // Numerical Methods in Finite Element Analisis. Printice-Hall, Inc., Englewood Cliffs., N.J. 1980.

особо полезных возможностей ППП, таких как использование функций конечно-элементного базиса высокого порядка, функций нестандартного базиса, возможность решения систем дифференциальных уравнений большой размерности и задания ее коэффициентов как в аналитическом, так и табличном виде, приводятся в §3. Здесь дан анализ точности полученных результатов, приводятся затраты ресурсов ЭВМ (время счета, требуемая оперативная память).

Четвертая глава посвящена задаче рассеяния. Для решения этой проблемы предлагается новый подход, основная идея которого заключается в том, что с помощью специальных преобразований учитывается асимптотическое поведение волновых функций как при малых, так и при больших значениях гиперрадиуса. При этом сохраняется линейность исходной задачи относительно волновых функций, достигается устойчивость численного решения. В новой постановке задача формулируется как краевая задача с однородными граничными условиями первого рода. Эффективность метода была подтверждена в результате решения ряда актуальных задач: одноканальной задачи рассеяния с вещественным (§1) и комплексным (§2) потенциалами; вычисления коэффициентов прозрачности и отражения в спектральной задаче Шредингера на прямой (§3). В §4 дается обобщение предлагаемого подхода для решения N-канальной задачи рассеяния в случае одного открытого канала, сформулированной в АГ подходе. Приводятся результаты вычислений фазы рассеяния для позитрония $e^+e^+e^-$. В §5 предлагается новый метод численного решения квантово-механической задачи двух центров в непрерывном спектре, включающий в себя два этапа – вычисление констант разделения и УКСФ (п.1), и вычисление РКСФ и, в частности, их фаз рассеяния (п.2). Константы разделения и УКСФ определяются, соответственно, как собственные значения и собственные функции углового уравнения (5) и для их вычисления успешно применялся ППП, рассматриваемый в третьей главе. Для решения второго этапа задачи применялся подход, основная идея которого состоит в том, что с помощью специального преобразования исходное линейное радиальное уравнение (4) сводится к нелинейному уравнению Милна. Решение уравнения Милна изменяется плавно в противоположность РКСФ, которая является быстро осциллирующей. Численное решение полученной задачи с высокой точностью и быстротой осуществлялось методом Рунге-Кутта пятого порядка [14] с автоматическим выбором шага интегрирования. Рассматривается программная реализация предложенных алгоритмов, приводятся результаты вычислений констант разделения и фаз рассеяния РКСФ для различных параметров задачи. Дан анализ точности полученных результатов, приведено время счета.

[14]Форсайт Дж., Малькольм М. Машинные методы математических вычислений. -М.: Мир, 1980.

В заключении диссертации сформулированы основные результаты, выносящиеся на защиту:

1. Развит единый подход к постановке задачи на связанные состояния и задачи рассеяния для системы радиальных уравнений Шредингера. Предложены преобразования, учитывающие асимптотические особенности искомых радиальных волновых функций в нуле и на бесконечности, в результате которых задача рассеяния сводится к линейной однородной граничной задаче.

2. Разработана эффективная вычислительная схема решения спектральной и краевой задачи для системы линейных обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка, основанная на применении современных методов: аппроксимации непрерывной задачи (метод конечных элементов с возможностью использования априорной информации о поведении решения с помощью функций нестандартного базиса, а также функций стандартного конечно-элементного базиса высокого порядка) и решения алгебраической обобщенной проблемы собственных значений (метод итерации подпространства).

3. Выполнена программная реализация разработанных алгоритмов в виде ППП, имеющего гибкий интерфейс с пользователем, который позволяет осуществлять выбор задачи (на собственные значения или краевую), задавать коэффициенты исходной системы дифференциальных уравнений в аналитическом и табличном виде, варьировать в широких пределах порядок функций конечно-элементного базиса и задавать функции нестандартного базиса, решать алгебраические задачи большой размерности, контролировать точность получаемых результатов.

4. Решен ряд задач, актуальных в различных разделах физики. Полученные результаты подтвердили на практике эффективность пакета. С помощью ППП были решены:

- Одноканальная задача рассеяния с вещественным и комплексным потенциалами.
- Задача о вычислении коэффициентов прозрачности и отражения в спектральной задаче Шредингера на прямой.
- Задача вычисления собственных значений (констант разделения) и соответствующих собственных функций (УКСФ) углового уравнения для системы двух кулоновских центров в непрерывном спектре.

5. В рамках решения квантово-механической задачи трех тел, сформулированной в АГ подходе, разработаны алгоритмы и выполнена их программная реализация для вычисления старших членов асимптотических разложений АГ гармоник, АГ термов и матричных элементов при малых и больших значениях гиперрадиуса.

6. Для квантово-механической задачи трех тел, сформулированной в АГ подходе, с помощью ППП решена спектральная задача и задача рассеяния в случае одного открытого канала для системы радиальных уравнений Шредингера. Получены следующие результаты:

- Проведены расчеты характеристик (уровней энергий связанных состояний и соответствующих волновых функций) мезомолекулярных систем $dt\mu$ и $dd\mu$, системы $e^+e^+e^-$.
- Проведены расчеты фазовых смещений волновых функций, являющихся решением многоканальной задачи рассеяния в случае одного открытого канала для системы $e^+e^+e^-$.

7. Предложен эффективный метод решения квантово-механической задачи двух центров в непрерывном спектре, основанный на преобразовании радиального уравнения Шредингера к нелинейному уравнению Милна. Разработаны алгоритмы и выполнена их программная реализация для вычисления РКСФ и, в частности, их фаз рассеяния.

Работы, положенные в основу диссертации

1. В.В.Гусев, В.И.Пузынин — Пакет программ для решения системы радиальных уравнений Шредингера задачи трех тел в адиабатическом представлении. Препринт ИФВЭ 89-13, Протвино, 1989.
2. V.V.Gusev, A.A.Kvitsinsky, V.V.Kostrykin, L.I.Ponomarev, V.I.Puzynin — The calculation of the energies of mesic molecule states in the hyperspherical approach. In Contributed Papers from 12-th International Conference on Few Body Problems in Physics, Vancouver, B.C., Canada, July 2-8, 1989, p. A19.
3. V.V.Gusev, A.A.Kvitsinsky, V.V.Kostrykin, V.I.Puzynin — Asymptotics of adiabatic hyperspherical harmonics and potential curves: 1. Large hyperradius limit. IHEP Preprint 89-158, Protvino, 1989.
4. В.В.Гусев, В.И.Пузынин — Одноканальная задача рассеяния как однородная граничная задача и ее решение методом конечных элементов. Препринт ИФВЭ 89-229, Протвино, 1989.

5. В.В.Гусев, В.И.Пузынин — Задача рассеяния с комплексным потенциалом как однородная граничная задача и ее решение методом конечных элементов. Препринт ИФВЭ 90-80, Протвино, 1990.
6. В.В.Гусев, В.И.Пузынин — О вычислении коэффициентов прозрачности и отражения в спектральной задаче Шредингера на прямой. Препринт ИФВЭ 90-175, Протвино, 1990.
7. V.V.Gusev, V.I.Puzynin, A.A.Kvitsinsky, V.V.Kostrykin, S.P.Merkuriev, L.I.Ponomarev — Adiabatic Hyperspherical Approach to the Coulomb Three-Body Problem: Theory and Numerical Method. Few-Body Systems 9, 1990, p.137-153.
8. В.И.Пузынин — Уравнение Милна для вычисления фаз и амплитуд волновых функций непрерывного спектра задачи двух кулоновских центров. Препринт ИФВЭ 92-119, Протвино, 1992.

Рукопись поступила в издательский отдел
10 декабря 1992 года.