ОБЪЕДИНЕННЫЙ ИНСТИТУТ ЯДЕРНЫХ ИССЛЕДОВАНИЙ

5 - 12881

КАСЧИЕВ
Михаил Стефанов

ЧИСЛЕННОЕ РЕШЕНИЕ НЕКОТОРЫХ ЗАДАЧ КВАНТОВОЙ МЕХАНИКИ, ОПИСЫВАЕМЫХ НЕОДНОМЕРНЫМ УРАВНЕНИЕМ ШРЕДИНГЕРА

Специальность: 01.01.07 - вычислительная математика

Автореферат диссертации на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Дубна 1979

Работа выполнена в Лаборатории вычислительной техники и автоматизации Объединенного института ядерных исследований.

Научный руководитель:
доктор физико-математических наук
старший научный сотрудник Игорь Викторович Пузынин

Официальные оппоненты:
доктор физико-математических наук
профессор, старший научный сотрудник Василий Яковлевич Арсенин
кандидат физико-математических наук
доцент Юрий Иванович Мокин

Ведущее научно-исследовательское учреждение:
Научно-исследовательский институт физики Ленинградского государственного университета, Ленинград

Автореферат разослан " "__________1979г.
Защита диссертации состоится " "__________1979г.
в " " часов на заседании Ученого совета Лаборатории вычислительной техники и автоматизации ОИЯИ, г.Дубна, Московской области, Д047.01.04.
С диссертации можно ознакомиться в библиотеке ОИЯИ.

Ученый секретарь Совета
кандидат физико-математических наук Ивч З.М.Иванченко

ОБЩАЯ ХАРАКТЕРИСТИКА РАБОТЫ

Актуальность

Вычисление значений энергий и волновых функций связанных состояний различных квантовомеханических систем - одна из важнейших задач, к которой приводят исследования в современной физике. При этом особую актуальность имеет изучение физических процессов, описываемых многомерным уравнением Шредингера. Полное исследование таких задач аналитическими или качественными методами возможно лишь в исключительных случаях. Поэтому очень часто единственным путем решения этих спектральных задач остается их численное решение. Как правило, методы решения уравнения Шредингера используют подходы, типичные для одномерных задач, и являются узко специализированными. Таким образом, создание разностных схем, алгоритмов и программ для численного решения на ЭВМ задачи на связанные состояния для неодномерного уравнения Шредингера при весьма общих ограничениях на потенциал приобретает важное значение.

Современные проблемы физики предъявляют повышенные требования к точности численных методов. Так, например, разностные схемы должны учитывать особенности непрерывной задачи [1,2], а итерационные методы решения полученной обобщенной алгебраической проблемы собственных значений должны сохранять структуру матриц в процессе вычислений и обладать высокой скоростью сходимости [3,4]. В частности, алгоритмы и программы решения

[1].А.А.Самарский, Введение в теорию разностных схем, "Наука", М., 1971.

алгебраической проблемы должны быть универсальными, т.е. с их помощью возможно решать как многомерные, так и одномерные краевые задачи на собственные значения.

Работы, положенные в основу диссертации, выполнены в соответствии с проблемно-тематическим планом научно-исследовательских работ ОИЯИ.

<u>Цель работы</u> состоит в разработке численных методов для определения собственных чисел и собственных функций двумерного уравнения Шредингера, которое описывает широкий класс квантовомеханических систем.

Для краевой задачи, определяемой уравнением

$$L\,u(\xi,\eta)=\lambda\,u(\xi,\eta), \qquad (I)$$

где (ξ,η) – независимые переменные в вытянутых сфероидальных координатах[5], $(\xi,\eta)\in G=\{1\le\xi\le\ell,\ -1\le\eta\le1\}$, а дифференциальный оператор L имеет вид

$$L\equiv-\frac{4}{R^2(\xi^2-\eta^2)}\left\{\frac{\partial}{\partial\xi}(\xi^2-1)\frac{\partial}{\partial\xi}+\frac{\partial}{\partial\eta}(1-\eta^2)\frac{\partial}{\partial\eta}\right\}+q(\xi,\eta),$$

при условиях ограниченности собственной функции /I/

$$\lim_{\xi\to1+0}(\xi^2-1)\frac{\partial u}{\partial\xi}=0,\quad \lim_{\eta\to{-1+0 \atop 1-0}}(1-\eta^2)\frac{\partial u}{\partial\eta}=0 \qquad (2)$$

[2].А.А.Самарский,В.Б.Андреев, Разностные схемы для эллиптических уравнений, "Наука",М.,1976.

[3] K.J.Bathe,Ed.Wilson, Eigensolution of Large Stractural Systems with Small Bandwidth, J.Eng.Mech.Div., vol.90, N EM3, June, 1973, pp.467-479.

[4] K.J.Bathe,Ed.Wilson, Numerical Methods in Finite Elements Analisys, Prentice-Hall,NC, Englewood, Cliff.N.J., 1976.

[5].Ф.М.Морс,Г.Фешбах, Методы теоритической физики, т.II, ИЛ, М., 1960.

и краевое условие первого рода при

$$u(\ell,\eta)=0, \qquad (3.a)$$

или условие третьего рода

$$(\ell^2-1)\frac{\partial u(\ell,\eta)}{\partial\xi}+\varkappa(\eta)\,u(\ell,\eta)=0, \qquad (3.б)$$

исследуемая задача состоит в следующем:

Построение разностных схем, обладающих точностью аппроксимации порядка $O(|h|^2)$, и схем повышенного порядка точности.

Создание алгоритмов и программ численного решения частичной обобщенной проблемы собственных значений.

Проверка этих алгоритмов на основе численного эксперимента.

Применение разработанных разностных схем и алгоритмов к решению конкретных задач квантовой механики.

Использование созданных программ для решения задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка.

<u>Научная новизна работы</u>

I. Впервые рассмотрены условия ограниченности (2) для уравнения (I) и построена разностная схема решения задач (I)-(3.а) и (I)-(3.б), имеющая второй порядок точности относительно шага разностной сетки /I/.

2. Разработан численный алгоритм вычисления собственных значений для симметричных ленточных матриц большого порядка, имеющий асимптотически-кубическую сходимость.

3. Выведена консервативная разностная схема решения задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка /3/.

4. Построено уравнение непрерывного аналога метода Ньютона [6] в задаче о восстановлении регулярного оператора Штурма-Лиувилля по спектральным данным.

[6]. М.К.Гаврин, Нелинейные функциональные уравнения и непрерывные аналоги итеративных методов, Изв. вузов, сер. мат. 5, № 6, 18-31, 1958.

Практическая ценность

В результате выполненных исследований созданы алгоритмы и программы, позволяющие эффективно и с высокой точностью решать широкий класс задач на собственные значения для двумерного уравнения Шредингера и системы радиальных уравнений Шредингера.

Разработанные алгоритмы и программы успешно использовались для решения широкого класса практических задач, и с их помощью получен ряд ценных физических результатов.

I. Впервые вычислены, с точностью 10^{-4}–10^{-5} эВ., термы $1s\sigma$, $2p\sigma$ и $2s\sigma$ задачи двух центров с потенциалом Юкавы, описывающей одноэлектронное локальное состояние, создаваемое двумя растворенными в металле протонами.

2. С высокой точностью 10^{-3}–10^{-4} Ry, получены значения энергий и волновых функций связанных состояний атома и молекулярного иона водорода в сильном магнитном поле $\mathcal{H}$, меняющемся в широком интервале $0 \le \mathcal{H} \le 10^{14}$ Гс. Впервые получены, в зависимости от величины $\mathcal{H}$, узловые линии возбужденного состояния, отвечающего при $\mathcal{H} = 0$ 2p-состоянию атома /6/. Это имеет большое значение при изучении некоторых процессов в полупроводниках.

3. Вычислены с точностью 10^{-3} эВ. все уровни энергий μ-мезомолекул изотопов водорода в задаче трех тел с кулоновским взаимодействием в адиабатическом представлении [7] в двух-и восьмиуровневом приближениях /5/. Полученные результаты имеют важное значение для исследования сходимости решения с ростом числа уравнений этой квантовомеханической задачи.

[7]. С.И.Виницкий, Л.И.Пономарев, И.В.Пузынин, Т.П.Пузынина, Л.Н.Сомов, ОИЯИ, Р4-10336, Дубна, 1976.

4. Получены основные характеристики легких ядер /энергии связи, среднеквадратичный радиус, упругие и неупругие формфакторы/ в методе гиперсферических функций /4/. Численные результаты хорошо согласуются с экспериментальными данными.

5. Построены эффективные итерационные алгоритмы, позволяющие с абсолютной точностью 10^{-2}–10^{-3} восстановить оператор Штурма-Лиувилля по его спектральной функции.

Апробация работы

Работы, положенные в основу диссертации, докладывались на открытых научных сессиях Математического института Болгарской Академии наук, а также на семинарах ОИЯИ.

Публикации

По материалам диссертации опубликовано 6 работ, в том числе в Болгарском математическом журнале, ЯФ и сообщениях ОИЯИ.

Объем диссертации

Диссертация состоит из введения, пяти глав, заключения и содержит 110 страниц машинописного текста, 6 рисунков, 26 таблиц и список литературы, насчитывающий 79 наименований.

СОДЕРЖАНИЕ ДИССЕРТАЦИИ

В о в в е д е н и и содержится краткое описание постановки рассматриваемой задачи на собственные значения и обосновывается необходимость разработки методов ее численного решения. Указан круг физических задач, приводящих к изучению уравнения (I), и сформулированы основные требования, предъявляемые к численным методам. Дано описание структуры диссертации и перечень основных результатов.

В главе I построены и исследованы разностные схемы решения задачи (I)-(2)-(3.а) ((3.б)) по методу конечных разностей и методу конечных элементов. Предложенные схемы ориентированы на различные по быстродействию и объему оперативной памяти ЭВМ.

В §I.I дана постановка изучаемой задачи в вытянутых сфероидальных координатах. Наряду с задачами (I)-(3.а), (I)-(3.б), которые будем обозначать через $\{L,\lambda,0\}$ и $\{L,\lambda,\varkappa,0\}$, рассматривается и краевая задача, определяемая уравнением

$$Lu(\xi,\eta)=f(\xi,\eta),\quad (\xi,\eta)\in G, \tag{4}$$

с условиями ограниченности (2) на прямых $\xi=1$, $\eta=1$, $\eta=-1$, и неоднородными условиями

$$u(\ell,\eta)=\mu(\eta) \tag{5.а}$$

или

$$(\ell^2-1)\frac{\partial u(\ell,\eta)}{\partial\xi}+\varkappa(\eta)u(\ell,\eta)=g(\eta), \tag{5.б}$$

где $f(\xi,\eta)$, $\mu(\eta)$, $g(\eta)$ – заданные непрерывные функции. Эти задачи обозначаются через $\{L,f,\mu\}$ и $\{L,f,\varkappa,g\}$.

В §I.2 показано, что определенный выше оператор L является самосопряженным, получены достаточные условия его положительной определенности. Доказано, что задачи $\{L,f,\mu\}$ и $\{L,f,\varkappa,g\}$ имеют единственное решение при любых непрерывных функциях f, μ и g.

В §I.3 построены по методу баланса [I,2] конечно-разностные схемы численного решения задачи $\{L,f,\mu\}$ и $\{L,f,\varkappa,g\}$. Показано, что схемы являются консервативными, и получена оценка аппроксимации. При предположении, что решение исходных задач $u(\xi,\eta)\in C^6(G)$, величина погрешности будет $O\left(\frac{|h|^2}{\varrho(\xi,\eta)}\right)$, где $|h|^2=h_\xi^2+h_\eta^2$ – шаг разностной сетки, а $\varrho(\xi,\eta)=\frac{R^3}{8}(\xi^2-\eta^2)$.

В §I.4 на основе метода энергетических неравенств доказана однозначная разрешимость разностных схем. Для этого было необходимо вывести теоремы вложения пространств сеточных функций с разными метриками и различными размерностями. Основным результатом здесь является:

Теорема /I/. Решения y разностных схем сходятся в смысле нормы сеточного пространства W_2^1 к достаточно гладким решениям $u(\xi,\eta)$ задач $\{L,f,\mu\}$ и $\{L,f,\varkappa,g\}$, т.е.

$$\|y-u\|_{W_2^1}\le M|h|^2,$$

где константа M не зависит от шага разностной сетки.

Для задач $\{L,f,\mu\}$ и $\{L,f,\varkappa,g\}$ в §I.5 рассмотрены разностные схемы повышенного порядка точности $O(|h|^3)$, полученные по методу конечных элементов с использованием восьмиточечных биквадратичных элементов [4,8].

В §I.6 построены разностные схемы для задач $\{L,\lambda,0\}$ и $\{L,\lambda,\varkappa,0\}$, которые приводят к решению обобщенной алгебраической проблемы собственных значений для симметричных положительно-определенных матриц большого порядка, имеющих ленточную структуру.

<u>В главе II</u>, имеющей вспомогательный характер, рассмотрены некоторые методы решения частичной проблемы собственных значений для задачи

$$Ax=\lambda Bx,\quad x=(x_1,\dots,x_N). \tag{6}$$

Здесь матрицы A и B обладают указанными выше свойствами, причем матрица B может быть диагональной. В случае, когда B не является диагональной, она имеет одинаковую структуру с матрицей A. Отметим, что порядок матриц намного больше длины полуленты.

В §§2.I,2.2,2.3 сделан обзор особенностей, возникающих при численном решении задачи (6), и рассмотрены следующие методы решения:

[8]. Г.Стренг, Дж.Фикс, Теория метода конечных элементов, "Мир", М., I977.

а/ Непрерывный аналог метода Ньютона [9];

б/ Метод обратной итерации [10];

в/ Метод итераций в подпространстве [3,4].

Отметим, что последний метод позволяет одновременно вычислять первые несколько чисел и собственные векторы задачи (6).

В §2.4 на основе метода вспомогательной параболы [11] построен численный алгоритм решения характеристического уравнения задачи (6), который позволяет получить двухсторонние приближения к корню и имеет асимптотически кубическую скорость сходимости.

<u>В главе III</u> разработанные разностные схемы, алгоритмы и программы применялись для вычисления значений энергий и волновых функций конкретных квантовомеханических систем, описываемых двумерным уравнением Шредингера.

Все вычисления проведены на ЭВМ CDC-6500 ОИЯИ.

В §3.1 дана математическая постановка этих задач и указаны пути их сведения к задаче $\{L, \lambda, O\}$.

В §3.2 решена задача двух кулоновских центров, которая состоит в вычислении энергий и волновых функций электрона, находящегося в поле двух закрепленных зарядов Z_1 и Z_2, удаленных на расстояние R. В этом случае функция $q(\xi,\eta)$, входящая в (1), и которую в дальнейшем будем называть потенциалом и обозначать через V, имеет вид

$$V(\xi,\eta;R) = \frac{2}{R^2}\frac{m^2}{(\xi^2-1)(1-\eta^2)} - \frac{2}{R}\frac{(Z_1+Z_2)\xi + (Z_2-Z_1)\eta}{(\xi^2-\eta^2)}, \quad m=0,1,2,\ldots$$

Методом разделения переменных эта задача решена с большой точностью в работах [12,13,14]. В диссертации результаты этих работ использованы для проверки алгоритмов. В § 3.2 разработана также методика получения надежных численных результатов в пределах заданной точности /2/, являющейся величиной 10^{-4}-10^{-5}.

В §3.3 решена задача двух центров с потенциалом Юкавы

$$V(\xi,\eta;\alpha,R) = -\frac{4}{R}\frac{1}{\xi^2-\eta^2}\left\{(\xi-\eta)e^{-\frac{\alpha R}{2}(\xi+\eta)} + (\xi+\eta)e^{-\frac{\alpha R}{2}(\xi-\eta)}\right\} + \frac{4}{R^2}\frac{m^2}{(\xi^2-1)(1-\eta^2)},$$

которая имеет важное значение для описания некоторых процессов в квантовой химии. Существенное отличие от предыдущего примера заключается в том, что эта задача при $\alpha \neq 0$ не допускает разделения переменных. Здесь вычислены первые три термы задачи как функции от параметра α. Точность полученных значений терма основного состояния на два порядка лучше, чем в предыдущих расчетах [15]. При малых значениях величины $\alpha > 0$ впервые получены термы возбужденных состояний, что имеет большую практическую ценность.

---

[9]. И.В.Пузынин, Непрерывный аналог метода Ньютона для численного решения задач квантовой механики, ОИЯИ, 11-12016, 1978.

[10]. Дж.Х.Уилкинсон, Алгебраическая проблема собственных значений, "Наука", М., 1970.

[11]. Н.Обрешков, Върху численото пресмятане на уравненията посредством квадратни уравнения, Годишник на Софийския университет, <u>55</u>, 211-228, 1960.

[12] D.R.Bates, K.Ledsham, A.L.Stewart, Phil. Trans. Roy. Soc., London, A246, 1953, pp.215-240.

[13] D.R.Bates, T.R.Carson, Proc. Roy. Soc., London, A234, 1956, pp. 207-217.

[14] Л.И.Пономарев, Т.П.Пузынина, ОИЯИ, Р4-3405, Дубна, 1967.

[15]. В.М.Тапилин, Кинетика и катализ, <u>13</u>, вып. 1, 154-158, 1975.

В §3.4 решена задача на связанные состояния для атома и молекулярного иона водорода в сильном магнитном поле $\mathcal{H}$, которая возникает в астрофизике и в физике полупроводников. Потенциал в уравнении (I) для молекулярного иона водорода имеет вид

$$V_I(\xi,\eta;\gamma,R) = -\frac{4}{R^2}\frac{\xi}{(\xi^2-\eta^2)} + \frac{2m^2}{R^2(\xi^2-1)(1-\eta^2)} + m\gamma + \frac{R^2}{32}\gamma^2(\xi^2-1)(1-\eta^2).$$

Задачу $\{L,\lambda,0\}$ в случае атома водорода удобно записать в сферических координатах (r,θ)

$$-\frac{1}{r^2}\frac{\partial}{\partial r}r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r} - \frac{1}{r^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta} + V_a(r,\theta)\Psi(r,\theta) = E\,\Psi(r,\theta),$$

с условиями ограниченности волновой функции [I6]

$$\lim_{r\to 0+0} r^2\frac{\partial\Psi}{\partial r}=0, \quad \lim_{\theta\to 0+0,\ \pi-0}\sin\theta\frac{\partial\Psi}{\partial\theta}=0 \quad \text{и} \quad \Psi(r_m,\theta)=0,\ r_m\gg 1,$$

$$V_a(r,\theta;\gamma)=\frac{m^2}{\sin\theta}-\frac{2}{r}+m\gamma+\frac{1}{4}\gamma^2 r^2\sin^2\theta.$$

Здесь параметр γ линейно связан с величиной магнитного поля $\mathcal{H}$. Впервые численные исследования проведены в широком диапазоне изменения $\mathcal{H}$ от 0 до 10^{14}Гс. Полученные результаты точнее вариационных расчетов [I7,I8,I9], которые относятся к малым $\mathcal{H}$. Впервые получены узловые линии возбужденного состояния атома, которое при $\mathcal{H}=0$ отвечает 2p-состоянию./6/

<u>В главе IУ</u> рассмотрена задача трех тел, взаимодействую-

[I6].И.В.Фрязинов, О разностных схемах для уравнения Пуассона в полярной, цилиндрической и сферической системах координат, ЖВМ и МФ, <u>II</u>, № 5, I2I9-I228, I97I.

[I7].H.S.Brandi, Phys. Rev., A<u>II</u>, I975, p.I835.

[I8].R.K.Bhaduri, Y.Nogami, C.S.Warke, Astrophys.J., <u>2I7</u>, I977, pp.324-329.

[I9].R.R.dos Santos, H.S.Brandi, Phys. Rev.,A<u>I3</u>,I976, pp. I970-I974.

щих по закону Кулона, в адиабатическом представлении [7], которая в n-уровневом приближении описывается системой обыкновенных дифференциальных уравнений

$$-E_n\frac{d^2\bar{\chi}}{dR^2} + U_n\bar{\chi} + \frac{d}{dR}(Q_n\bar{\chi}) + Q_n\frac{d}{dR}\bar{\chi} = \lambda E_n\bar{\chi} \qquad (7)$$

и граничными условиями

$$\bar{\chi}(0)=\bar{\chi}(R_m)=0,\quad R_m\gg 1. \qquad (8)$$

Здесь E_n -единичная матрица, $U_n(R)$ и $Q_n(R)$ симметричная и антисимметричная матрицы порядка n, а $\bar{\chi}(R)=\{\chi_1(R)\dots\chi_n(R)\}$. Показано, что задача (7)-(8) симметрична, и получена консервативная разностная схема, аппроксимирующая ее с точностью порядка $O(h^2)$ / h - шаг сетки/. Вычислены все уровни энергии мезомолекул изотопов водорода при n =2,8/3/ . Результаты совпадают с выполненными ранее расчетами[7,9] и свидетельствуют о точности разностной схемы. Детально исследован метод вспомогательной параболы при вычислении слабосвязанных уровней мезомолекул $dd\mu$ и $dt\mu$. В этом случае матрица A имела порядок N=I032 и длину полуленты I5, а матрица B была диагональной. Подтверждена кубическая скорость сходимости и двухстороннее приближение метода.

В §4.3 численно решена краевая задача, определяемая уравнением Шредингера

$$\left\{\frac{d^2}{d\rho^2} - \frac{\mathcal{L}_K(\mathcal{L}_K+1)}{\rho^2} - \frac{2m}{\hbar^2}(E+W(\rho))\right\}\chi(\rho)=0$$

с граничными условиями

$$\chi(0)=\chi(\rho_m)=0,\quad \rho_m\gg 1,$$

что позволило получить энергии связи, среднеквадратичный радиус ядра, упругие и неупругие формфакторы легких ядер в методе гиперсферических функций/4/. Полученные результаты хорошо согласуются с известными экспериментальными данными.

В §§5.1,5.2 пятой главы по аналогии с [20] для задачи восстановления самосопряженного оператора Штурма-Лиувилля

$$y'' + (\lambda - q(x))y = 0, \quad 0 \le x \le \pi, \quad q(x) \in L_2(0,\pi), \tag{9}$$

$$y'(0) - h\,y(0) = 0, \quad y'(\pi) + H\,y(\pi) = 0, \quad h, H < \infty, \tag{10}$$

по его спектральной функции, построено уравнение для непрерывного аналога метода Ньютона [6]

$$v_t = -[f'(v)]^{-1}(f(v) - y^*), \quad v(0) = v_0, \quad 0 \le t < \infty, \tag{11}$$

решение $v(t,v_0)$ которого при $t \to \infty$ дает решение v^* операторного уравнения $f(v) = y^*$. Здесь $f(v)$ - нелинейный оператор /в нашем случае ставящий в соответствие задаче (9)-(10) её спектральную функцию/, $f'(v)$ - его производная Фреше, $[f'(v)]^{-1}$ - обратный к ней оператор. Здесь также построено уравнение (11) для задачи об определении оператора (9)-(10) по двум спектрам.

В §5.3 предложены итерационные методы ньютоновского типа для численного решения обратных задач в указанных выше двух постановках, сводящих по существу решение этих задач к решению на каждом шагу итерационного процесса прямой задачи на собственные значения для оператора (9)-(10), которая реализуется методами, изложенными во второй главе. Численные расчеты для ряда модельных задач показывают, что оператор восстанавливается по его спектральным данным с абсолютной точностью 10^{-2}-10^{-3}.

ОСНОВНЫЕ РЕЗУЛЬТАТЫ ДИССЕРТАЦИИ

1. При условиях ограниченности (2) для уравнения (1) построена консервативная разностная схема второго порядка точности для численного решения задач $\{L,\lambda,0\}$ и $\{L,\lambda,\varkappa,0\}$.

2. Разработан алгоритм вычисления собственных значений для симметричных ленточных матриц большого порядка, имеющий двухстороннюю асимптотически-кубическую сходимость.

[20]. Я.Визнер,Е.П.Жидков и др., ЭЧАЯ, 9,вып.3,710-768,1978.

3. Построена консервативная разностная схема численного решения задачи Штурма-Лиувилля для системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка.

4. Построено уравнение непрерывного аналога метода Ньютона в обратной задаче для регулярного оператора Штурма-Лиувилля и созданы эффективные алгоритмы численного решения этой задачи.

5. При численном решении ряда физических задач с помощью разработанных алгоритмов и программ получены новые численные результаты, важные для физических исследований.

Работы, положенные в основу диссертации:

1. М.Касчиев. Разностная схема решения смешанной задачи для эллиптического уравнения в сфероидальной системе координат. СЕРДИКА, Бълг. матем. списание, т.4, 324-329, 1978.
2. Р.Лазаров,М.Касчиев. Численное решение двумерного уравнения Шредингера, соответствующего задаче двух центров. ОИЯИ, Р11-12307, Дубна, 1979.
3. М.Касчиев,В.Касчиева. Численное решение задачи Штурма-Лиувилля для одной системы обыкновенных дифференциальных уравнений второго порядка. ОИЯИ, Р5-12382, Дубна, 1979.
4. М.Касчиев,К.В.Шитикова. О сжимаемости ядер в методе гиперсферических функций. ЯФ, 30, № 6, 1479, 1979.
5. М.Касчиев,В.С.Мележик, Вычисление уровней энергии μ-мезомолекул изотопов водорода с помощью непрерывного аналога метода Ньютона и метода обратной итерации в подпространстве, ОИЯИ, Р4-12671, Дубна, 1979.
6. С.И.Виницкий,Ф.В.Вукайлович,М.С.Касчиев, Атом и молекулярный ион водорода в сильном магнитном поле, ОИЯИ, Р4-12842. Дубна. 1979.

Рукопись поступила в издательский отдел
24 октября 1979 года.