ФЕДЕРАЛЬНОЕ ГОСУДАРСТВЕННОЕ БЮДЖЕТНОЕ ОБРАЗОВАТЕЛЬНОЕ УЧРЕЖДЕНИЕ ВЫСШЕГО ОБРАЗОВАНИЯ «МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ имени М.В.ЛОМОНОСОВА»

ФИЗИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ

КАФЕДРА КВАНТОВОЙ ТЕОРИИ И ФИЗИКИ ВЫСОКИХ ЭНЕРГИЙ

БАКАЛАВРСКАЯ РАБОТА

«ГРАНИЧНЫЕ УСЛОВИЯ И ЭФФЕКТИВНЫЕ ПОТЕНЦИАЛЫ В КВАНТОВЫХ СИСТЕМАХ»

	Выполнил студент
	408 группы:
	Эль Хадж Дау К. И.
	Научный руководитель:
	профессор Силаев П. К.
Допущена к защите	
Зав. кафедрой	

Москва

Оглавление

B	ВЕДЕНИЕ				
1	Физ	зика задачи	8		
	1.1	Постановка задачи	8		
	1.2	Уравнение Шрёдингера	8		
	1.3	Функционал энергии	10		
2	Численное решение задачи				
	2.1	Описание градиентного динамического метода	12		
В	ывс	рды	16		
3,	АКЛ	ЮЧЕНИЕ	23		
\mathbf{C}	ПИС	ОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ	24		

ВВЕДЕНИЕ

Исследование электронного взаимодействия атомов и ионов с твердой поверхностью необходимо для различного рода приложений таких как: средства анализа поверхностей, детектирование частиц, взаимодействие плазмы со стенками и катализ. Одним из способов экспериментального исследования микроскопических механизмов взаимодействия атомов с поверхностью является изучение процессов, в которых происходит перенос электронов между поверхностью и атомом. Двумя фундаментальными механизмами переноса электрона являются резонансная нейтрализация и оженейтрализация.

Оже-нейтрализация – это двухэлектронный процесс, при котором один электрон с поверхности переходит в связанное (зачастую основное состояние) атома, а энергия и импульс через электрон-электронное взаимодействие передается твердому телу, что приводит к возбуждению электрона на поверхности (появлению электрон-дырочной пары или плазмона). Будучи двухэлектронным процессом оже-нейтрализация менее эффективна, нежели резонансный перенос заряда (одноэлектронный процесс), поэтому для изучения оже-нейтрализации нам необходимо создать условия, в которых она будет являться единственным наблюдаемым процессом переноса заряда: для невырожденных состояний атома с заполненными электронными оболочками (когда резонансные процессы запрещены по энергии), что выполняется для комбинации инертный газ - поверхность. Благодаря простой электронной структуре, зачастую в качестве модельной системы для изучения оже-нейтрализации используют He-Al. Энергетическая диаграмма, иллюстрирующая взаимодействие атомов $He \ c \ Al$ плоскостью, приведена на Рис.1. Ионы медленного инертного газа падают на металлическую поверхность с большой работой выхода. В этом случае основное состояние атома будет невырожденным по отношению к заполненному электронному уровню поверхности, а возбужденные атомные уровни будут резонировать с незаполненными уровнями металла.

Большое количество экспериментальных и теоретических работ посвящено нейтрализации иона He^+ на металлических поверхностях. Слож-

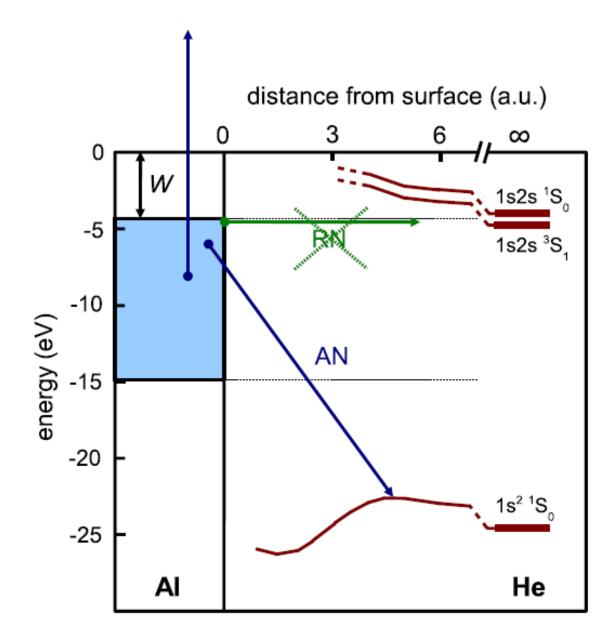


Рис. 1: Энергетическая диаграмма взаимодействия He с Al поверхностью. W: работа выхода; голубая область: заполненные уровни зоны проводимости Al; коричневые кривые: энергетические уровни He как функция расстояния от поверхности для указанных состояний. Зеленая стрела: резонансная нейтрализация(RN); синяя стрела: оже-нейтрализация(AN).

ные теоретические расчеты сдвига энергии основного состояния показали, что они отличны от классических значений и могут быть даже отрицательными вблизи к поверхности в результате химического взаимодействия с поверхностью.

Эксперимент, результаты которого изложены в [1], состоял из рассеяния атомов He^0 и ионов He^+ под скользящими углами на чистых и плос-

ких алюминиевых поверхностях. Мишени проходили несколько циклов напыления ионами Ar^+ , а затем обжигались. Во время напыления мишени вращались, чтобы избежать формирования рельефа на поверхности. Для регистрации углового распределения рассеянных частиц использовались микроканальные пластины. Схема экспериментальной установки приведена на Puc.2.

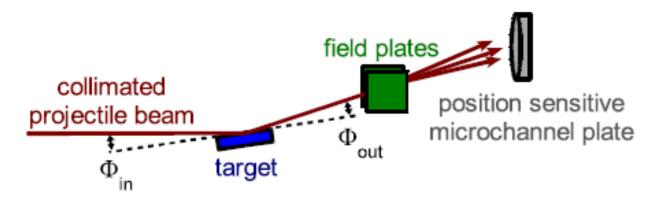


Рис. 2: Схема экспериментальной установки.

В работе [1], в итоге, был получен важный для нас результат: на расстояниях порядка 2-4 а.ед. от Al поверхности, энергия основного состояния He убывает. Графически этот результат изображен на Puc.3

В работе [2] определялись скорости оже-нейтрализации ионов He^+ на поверхностях из благородных металлов(Au,Ag) и проводилось сравнение с соответствующими значениями для металла свободных электронов (Al). В ходе данной работы была построена зависимость энергии основного уровня He от расстояния до Al поверхности: на Puc.4 приведен соответствующий график, а также нанесена зона проводимости Al и невозмущенный 1s-уровень He.

На Рис.4 также как и на Рис.3 наблюдается минимум вблизи металлической поверхности. Из сравнения скоростей оже-нейтрализации на Au и Al (Рис.5) следует, что они отличаются в 3–4 раза, в зависимости от расстояния до соответствующих поверхностей, а значит свойства поверхностей оказывают влияют на вид энергетических уровней атомов находящихся над ними.

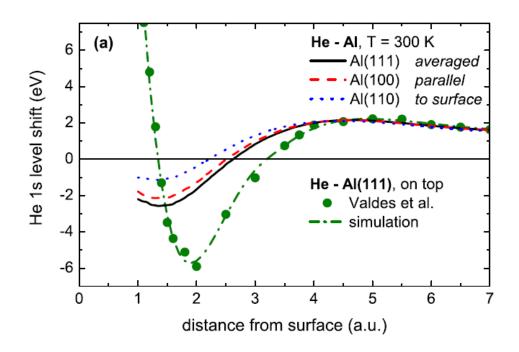


Рис. 3: Сдвиг энергии основного состояния He как функция от расстояния до Al поверхности.

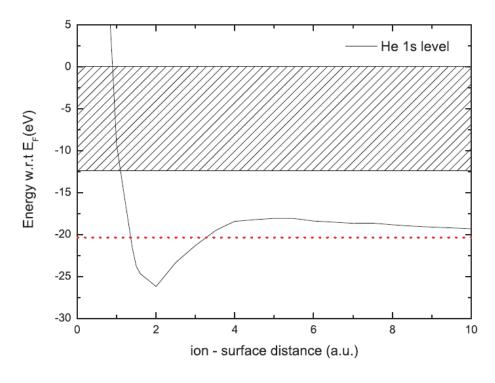


Рис. 4: Расчитанная зависимость 1s-уровня He от расстояния до Al поверхности (непрерывная черная линия). Область проводимости Al поверхности – заштрихованная часть графика. Красная прерывистая линия указывает положение невозмущенного 1s-уровня He.

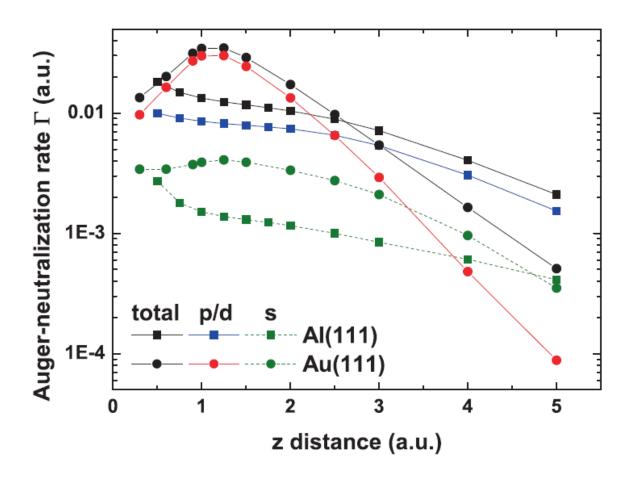


Рис. 5: Скорость оже-нейтрализации He на Au и Al как функция расстояния до соответствующих поверхностей.

1 Физика задачи

1.1 Постановка задачи

В данной работе рассматривается квантовая система, состоящая из одиночного водородоподобного атома, левитирующего над поверхностью металла. Данные рассеяния атомов H и He на металлах (Ag, Au, Al) из работ [1, 2] показывают, что потенциал взаимодействия является потенциалом притяжения, обладает минимумом и зависит от материалла, из которого изготовлена поверхность. Поверхностные эффекты представляются в виде очень узкого потенциала, который моделируется δ -функцией, а δ -функция в свою очередь соответствует граничным условиям 3-его рода, поэтому мы и будем моделировать взаимодействие электрона с поверхностью при помощи граничных условий Робена.

Для данной системы решается трёхмерное стационарное уравнение Шрёдингера с электростатическим потенциалом и линейными граничными условиями 3-его рода (задача Робена).

Нашим целями является построение эффективного потенциала рассматриваемой системы и поиск решения уравнения Шрёдингера, соответствующего основному состоянию, путем минимизации функционала энергии. Также покажем, что потенциал притяжения действительно обладает минимумом, который обеспечивает удержание атома над поверхностью. Эффект левитации атома над поверхностью потенциально может быть использован для конструирования квантовых ловушек.

1.2 Уравнение Шрёдингера

Воспользуемся сразу приближением Борна-Оппенгеймера [3] — это значительно облегчит нашу задачу. Отношение масс электрона и протона равно 1/1836, как это имеет место в случае самого легкого атома водорода. Поэтому движение ядерной подсистемы происходит много медленнее, чем электронной, и для рассматриваемой задачи положение ядра можно считать фиксированными, что позволяет нам решать только лишь уравнение Шрёдингера для электрона.

Уравнение Шредингера для стационарного состояния, когда потенциальная энергия частицы не зависит от времени, имеет вид

$$\hat{H}\psi\left(\vec{r}\right) = E\psi\left(\vec{r}\right),\tag{1}$$

где \hat{H} – оператор Гамильтона – аналог классической функции Гамильтона

$$H = \frac{p^2}{2m} + U(\vec{r}), \qquad (2)$$

в которой \vec{p} и \vec{r} заменены операторами импульса $\hat{p}_x,~\hat{p}_y,~\hat{p}_z$ и координаты $\hat{x},~\hat{y},~\hat{z}$:

$$p_x \to \hat{p}_x = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial x}, \ p_y \to \hat{p}_y = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial y}, \ p_z \to \hat{p}_z = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial z},$$

$$x \to \hat{x} = x, \ y \to \hat{x} = y, \ z \to \hat{x} = z,$$

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(x, y, z) = -\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) + U(x, y, z).$$

Уравнение (1) называют стационарным уравнением Шредингера. Для трехмерной системы с массой m в поле с потенциалом $U\left(\vec{r}\right)$ оно принимает вид:

$$-\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)\Delta\psi\left(\vec{r}\right) + U(\vec{r})\psi\left(\vec{r}\right) = E\psi\left(\vec{r}\right),\tag{3}$$

где Δ – лапласиан.

В данной работе рассматривается краевая задача с граничными условиями третьего рода, которые в общем виде записываются как:

$$\vec{\nabla}\psi + \lambda\psi = 0. \tag{4}$$

1.3 Функционал энергии

Функционал энергии имеет следующий вид:

$$E[\psi] = \frac{\langle \psi | H | \psi \rangle + \frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} |\psi|^2}{\langle \psi | \psi \rangle}.$$
 (5)

Подставляем явный вид гамильтониана:

$$E = \frac{\int d^3 \vec{r} \left[\frac{1}{2} \left(\vec{\nabla} \psi \right)^2 + U \psi^2 \right] + \frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} \, \psi^2}{\int d^3 \vec{r} \, \psi^2}.$$
 (6)

Проварьируем выражение $\frac{1}{2} \int d^3 \vec{r} \; \vec{\nabla} \psi \vec{\nabla} \psi$ по ψ

$$\delta\left(\frac{1}{2}\int d^3\vec{r}\ \vec{\nabla}\psi\vec{\nabla}\psi\right) = \frac{1}{2}\left(2\int d^3\vec{r}\ \vec{\nabla}\delta\psi\vec{\nabla}\psi\right) = \int d^3\vec{r}\left[\vec{\nabla}\left(\delta\psi\vec{\nabla}\psi\right) - \delta\psi\vec{\nabla}\vec{\nabla}\psi\right]$$
(7)

для первого слагаемого в правой части (7) используем формулу Остроградского–Гаусса, а второе перепишем воспользовавшись тем, что $\vec{\nabla}\vec{\nabla}\psi = \Delta\psi$

$$\int d^3 \vec{r} \, \vec{\nabla} \delta \psi = \int d\vec{s} \, \delta \psi \vec{\nabla} \psi - \int d^3 \vec{r} \, \delta \psi \Delta \psi. \tag{8}$$

Проварьируем выражение $\frac{\lambda}{2} \int d\vec{s} \; |\psi|^2$

$$\delta\left(\frac{\lambda}{2}\int d\vec{s} \ \psi^2\right) = \frac{\lambda}{2}\int d\vec{s} \ 2\psi\delta\psi = \lambda\int d\vec{s} \ \psi\delta\psi. \tag{9}$$

Также вычислим следующие вариации

$$\delta \left(\int d^3 \vec{r} \ U \psi^2 \right) = \int d^3 \vec{r} \ 2U \psi \delta \psi, \tag{10}$$

$$\delta \left(E \int d^3 \vec{r} \; \psi^2 \right) = \int d^3 \vec{r} \; 2E \psi \delta \psi. \tag{11}$$

Собираем второе слагаемое из (8), (10) и (11)

$$\int d^3\vec{r} \, \left(-\Delta\psi + 2U\psi - 2E\psi \right) \right) \delta\psi = -\int d^3\vec{r} \, \left(\Delta\psi + 2\left(E - U \right) \psi \right) \delta\psi, \quad (12)$$

и приходим к уравнению Шредингера

$$\psi + 2(E - U)\psi = 0.$$

Сложим первое слагаемое из (8) и (9)

$$\int d\vec{s} \, \delta\psi \vec{\nabla}\psi + \lambda \int d\vec{s} \, \psi \delta\psi = \int d\vec{s} \, \left(\vec{\nabla}\psi + \lambda\psi\right) \delta\psi. \tag{13}$$

То есть из (13) мы видим, что минимум функционала (5) автоматически удовлетворяет граничному условию Робена

$$\vec{\nabla}\psi + \lambda\psi = 0.$$

Таким образом мы убедились, что функционал энергии (5) соответствует исследуемой краевой задаче.

2 Численное решение задачи

В пункте 1.3 мы свели краевую задачу (3) - (4) к вариационной задаче с функционалом (5), то есть задача поиска волновой функции удовлетворяющей (3) - (4) заменяется поиском экстремума функционала (5).

Минимизируем функционал с помощью метода Ритца. Будем рассматривать нашу квантовую систему в цилиндрических координатах (ρ, ϕ, z) и заметим, что при таком выборе наша система обладает симметрией относительно вращения по ϕ , тогда численное интегрирование будет производится только по ρ и z, которое осуществим методом трапеции на двумерной сетке размером (N*2N).

Сам метод Ритца заключается в представлении интегралов в виде интегральных сумм и поиске минимума функционала по всем параметрам (N*2N- значениям волновой функции в узлах решетки). В качестве начального приближения волновую функцию разумно взять как e^{-r} , где $r=\sqrt{\rho^2+z^2}$, которая удовлетворяет естественным граничным условиям (убывает как экспонента на бесконечности). Тогда мы получаем (N*2N) значений в узлах сетки, которые мы будем двигать градиентным динамическим методом пока не достигнем минимума функционала с заданной точностью.

В нашей задаче эффективную бесконечность, которая определит размеры нашей сетки, положим на расстоянии 10 (см. Рис.6).

2.1 Описание градиентного динамического метода

Будем думать о нашей функции как о потенциале в n-мерном пространстве, в котором движется материальная точка. Последняя движется с трением. Градиент, взятый с обратным знаком, есть в точности сила. Ясно, что точка свалится в тот или иной локальный минимум потенциала. Следовательно, численно решая дифференциальное уравнение

$$\ddot{\vec{x}} = -\vec{\nabla}F\left(\vec{x}\right) - \gamma\dot{\vec{x}},$$

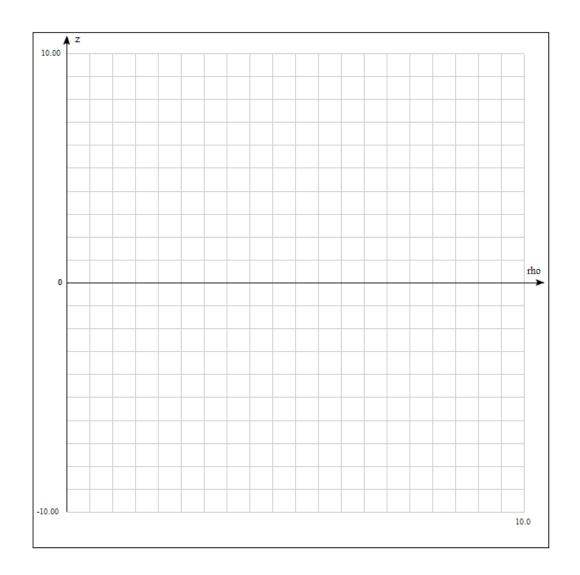


Рис. 6: Программное представление квантовой системы.

мы придем в некоторый локальным минимум.

Практически эта идея реализуется так:

Алгоритм:

выбираются два параметра — шаг по времени dt и коэффициент уменьшения скорости на каждом шаге ($\beta < 1$. Например, dt = 0.1 и ($\beta = 0.995$. Нам совершенно не нужно находить истинную траекторию движения к минимуму. Напротив, нам надо как можно скорее до него дойти, пусть и по не очень-то верной траектории. Поэтому dt надо выбирать максимально возможным, при котором процедура еще устойчива. Выбираются начальная точка \vec{x} и начальная скорость $\vec{v} = 0$.

Сдвиг по времени на dt реализуется так: $\vec{v} = \vec{v} - \vec{\nabla} F(\vec{x}) dt$. (Это изменение скорости под действием силы. Вычисле-

ние силы – это вычисление градиента в данной точке.)

 $\vec{v} = \beta \vec{v}$. (Это аналог трения. «Настоящее» трение должно было бы изображаться как $\vec{v} = \vec{v} - \gamma \vec{v} dt$, т. е. $\beta = 1 - \gamma dt$, где γ – «настоящий» коэффициент трения. Фактически, затухание определяется именно β , так что удобнее пользоваться двумя независимыми параметрами dt и β . В противном случае пришлось бы еще следить за тем, чтобы β было положительным, т. е. чтобы $dt\gamma$ было меньше единицы.) $\vec{x} = \vec{x} + \vec{v} dt$. (Это сдвиг в пространстве на новую точку \vec{x} .)

Здесь существенна правильная последовательность шагов. Именно, смещение на новую точку $\vec{x} + \vec{v}dt$ реализуется не с использованием «старой» скорости, вычисленной на предыдущем обороте, а с использованием «новой» скорости. Анализ на устойчивость показывает, что процедура с правильной последовательностью шагов гораздо устойчивее. Практически это означает, что величину dt можно выбрать гораздо большей, чем при неправильной последовательности, т.е. двигаться к минимуму мы будем гораздо быстрее.

Неприятной особенностью алгоритма является наличие настроечных параметров dt и β . Оптимальные значения существенным образом зависят от конкретной задачи, и универсальных рекомендаций по выбору параметров дать невозможно. В общем, следует брать dt максимально возможным, при котором алгоритм еще устойчив. Как правило (это эмпирический факт), максимальное dt для данной задачи почти не зависит от той точки \vec{x} , в которой мы находимся, т.е. если в начальной точке процедура устойчива, то она (как правило) останется таковой и далее.

Что касается трения, то надо понимать, что в задаче, где велика вероятность разноса, где надо плавно и аккуратно сместиться не очень далеко от начальной точки, целесообразно брать β заметно меньше единицы, например, 0.8. В то же время, если мы находимся далеко от истинного минимума, а вероятность разноса не очень велика, то с коэффициентом трения 0.8 мы будем ползти хотя и в правильном направлении, но очень медленно. Так что в этом случае разумнее выбрать $\beta = 0.995$. Разумеется, при таком маленьком трении мы, уже достигнув минимума, будем некоторое время

вокруг него колебаться, но это компенсируется тем, что мы гораздо скорее до него добежим.

В принципе, динамический метод годится для любых задач, но особенно хорош он для задач с узкими и глубокими оврагами, по крайней мере по сравнению с другими методами. Дело в том, что он (по крайней мере в среднем) ведет себя именно так, как хотелось бы, т. е. катится почти по дну оврага в сторону убывания. Это связано с тем, что в задаче с трением все высокочастотные гармоники (степени свободы поперек дна оврага) высвечиваются гораздо скорее, чем низкочастотные (потери на трение при данной амплитуде тем больше, чем больше частота). При этом на стенки мы залезаем только при поворотах дна оврага, но опять же залезаем не слишком сильно. Более того, та скорость движения вдоль дна, которая накопилась на предыдущих отрезках, как правило, при этом не теряется, поскольку небольшое залезание на стенку приводит просто к повороту скорости в сторону нового направления дна оврага.

При этом алгоритм совершенно не заботится о значениях минимизируемой функции и о величине градиента. Довольно ясно, что по ходу движения и то, и другое вполне может возрастать (например, когда мы поворачиваем вбок, наезжая на стенку оврага при повороте дна оврага). Но это не недостаток метода, а его достоинство – мы фактически ищем точку равновесия, т.е. точку, где градиент обращается в нуль. Как уже было сказано, такую точку можно найти гораздо точнее, чем точку, в которой значение функции минимально. Так что при поиске минимума энергии некоторого поля, с использованием динамического метода мы заведомо получим более точный, без высокочастотного мусора (высокочастотные гармоники высветятся), и, следовательно, более гладкий ответ, который можно будет многократно дифференцировать. Притом мы получим его гораздо быстрее, чем другими методами.

ВЫВОДЫ

Мы выполнили вычисления для значений $\lambda=0.75;\,0.5;\,0.25;\,0;\,-0.25;$ -0.5 и для каждой λ построили график зависимости $E=E(z_0)$, где z_0 – расстояние от атома до плоскости. Полученные потенциалы имеют минимумы, положения которых приведены в таблице 1. Оценка точности вычислений производилась путем изменения N и составила 10^{-4} .

λ	0.75	0.5	0.25	0	-0.25	-0.5
z_0	1.8857	0.9095	0.5801	0.4179	0.3223	0.2623
E	-0.5015	-0.5242	-0.5824	-0.6796	-0.8189	-1.0037

Таблица 1: Величина и положения минимумов потенциалов.

Объясним полученные результаты. Действительно, из уравнения Шрёдингера (3) мы видим, что $\psi'' \sim -E\psi$, а из граничного условия (4), что $\psi' = -\lambda \psi$. По определению ψ'' описывает скорость изменения ψ' . Значение $\lambda = 1$ соответствует волновой функции электрона в присутствии одного лишь ядра, которая в этом случае будет симметрична относительно начала координат. Волновая функция ψ ведет себя как e^{-r} , при $r \to \infty \Rightarrow \psi' < 0$, а, например, при $\lambda = 0$ (граничное условие Неймана) $\psi' = 0$, значит нам необходимо увеличить скорость изменения ψ' для того, чтобы удовлетворить граничному условию, что соответствует уменьшению значения энергии. При $\lambda < 0$, чтобы удовлетворить граничному условию необходимо: $\psi' > 0 \Rightarrow$ значение ψ'' должно увеличиться еще сильнее, что соответствует еще большему уменьшению значения энергии. Таким образом при уменьшении λ мы должны наблюдать все более и более глубокие минимумы энергии, а их положение должно смещаться все ближе и ближе к началу координат, что и отражено на Рис. (7 - 18).

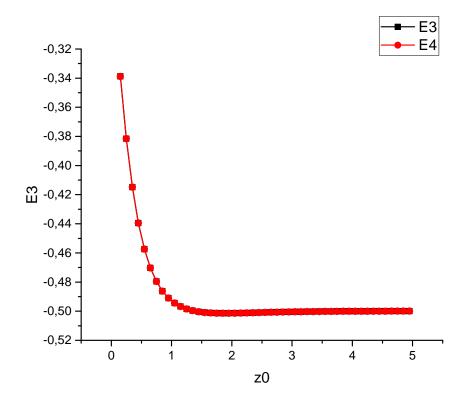


Рис. 7: $E = E(z_0)$ при $\lambda = 0.75$.

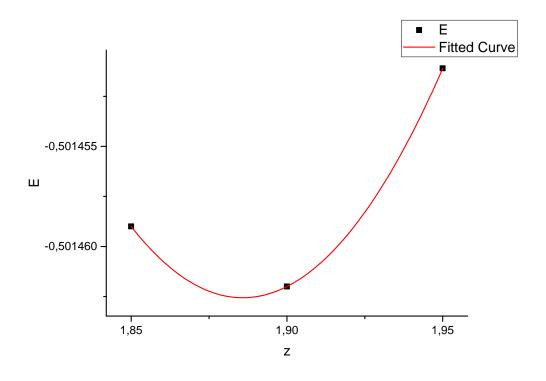


Рис. 8: Минимум $E=E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda=0.75.$

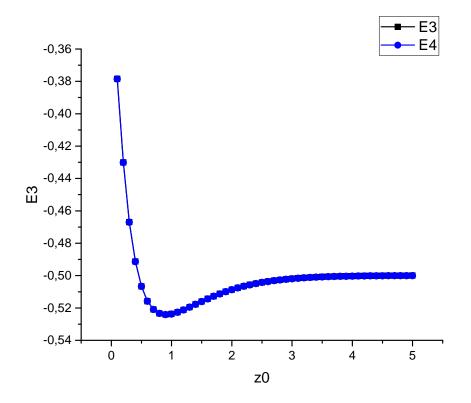


Рис. 9: $E = E(z_0)$ при $\lambda = 0.5$.

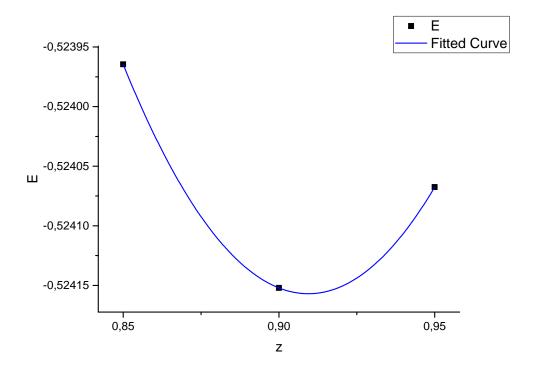


Рис. 10: Минимум $E=E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda=0.5.$

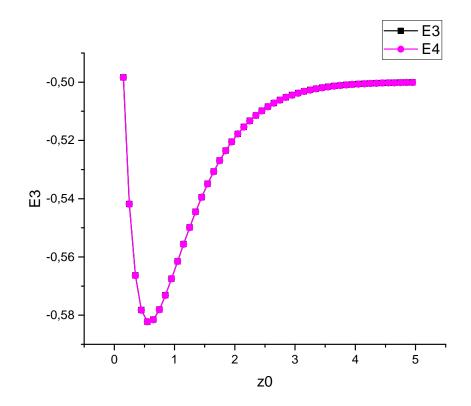


Рис. 11: $E = E(z_0)$ при $\lambda = 0.25$.

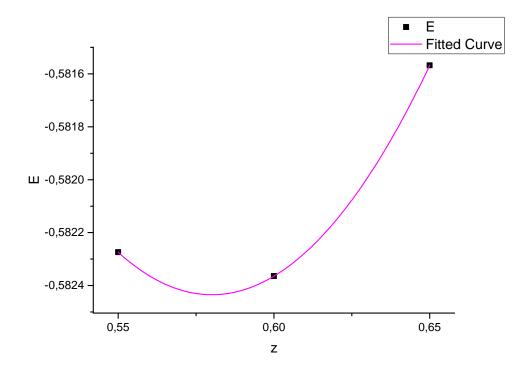


Рис. 12: Минимум $E=E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda=0.25.$

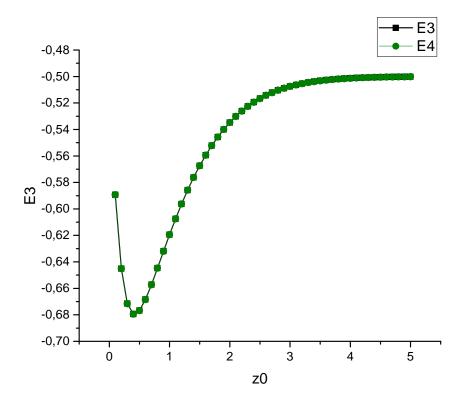


Рис. 13: $E=E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda=0.0.$

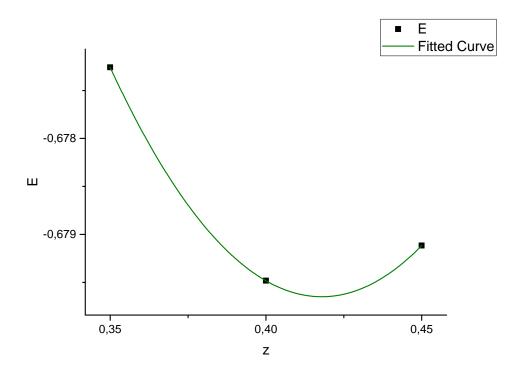


Рис. 14: Минимум $E=E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda=0.0$.

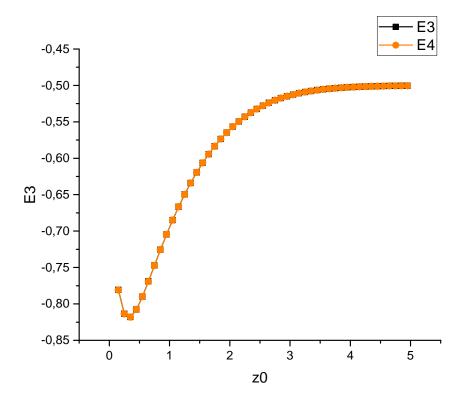


Рис. 15: $E=E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda=-0.25.$

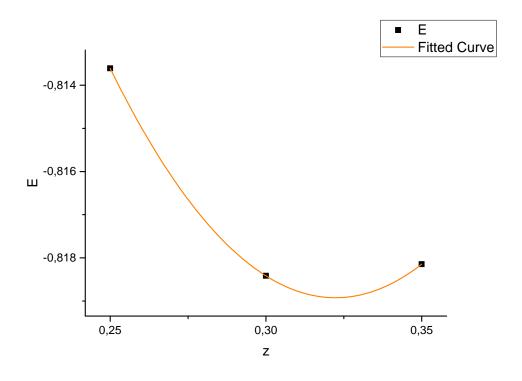


Рис. 16: Минимум $E=E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda=-0.25.$

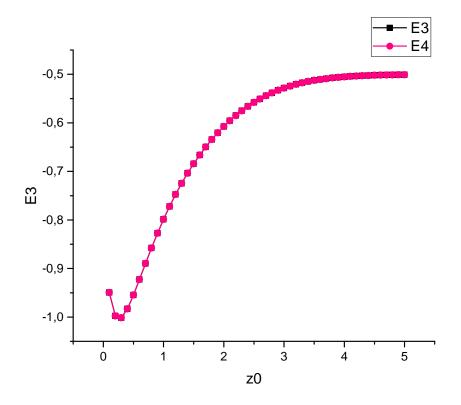


Рис. 17: $E = E\left(z_{0}\right)$ при $\lambda = -0.5$.

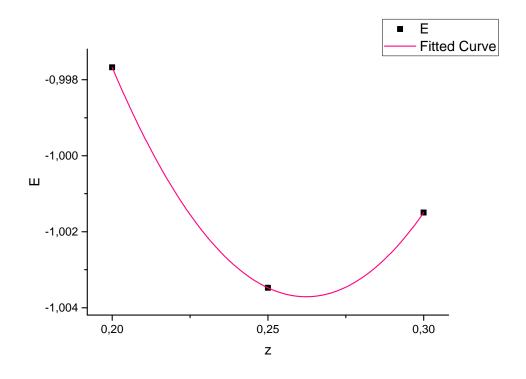


Рис. 18: Минимум $E = E(z_0)$ при $\lambda = -0.5$.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Мы получили значения потенциала для разных положений ядра $(E = E(z_0))$, нашли положения равновесия и соответствующие им энергии для разных коэффициентов λ . Установили зависимость положений и глубины минимумов потенциала от величины и знака коэффициентов λ .

Также значительный интерес представляло бы рассмотрение не одиночного атома над поверхностью, а двухатомной молекулы водорода. Будучи помещенной в наш потенциал притяжения, молекула начнет сжиматься, так как в отличие от свободного случая, когда электронные облака собираются между ядрами из-за действия лишь самих ядер, влияние поверхности приведет к дополнительному увеличению плотности вероятности, что приведет к уменьшению равновесного расстояния между ядрами. С уменьшением значения коэффициента λ , будет уменьшаться и равновесное расстояние между ядрами. Этот эффект гипотетически может быть использован для создания холодного термояда. Следует, однако, отметить, что размерность такой задачи будет на единицу больше, чем в задаче с одиночным атомом, так как пропадёт цилиндрическая симметрия, откуда следует, что задача с двухатомной молекулой потребует больших вычислительных ресурсов.

Результаты, приведенные в данной работе, свидетельствуют о наличии минимума у потенциала притяжения, что теоретически может быть использовано для конструирования квантовых ловушек без использования сильных внешних электрических и магнитных полей.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

- [1] Wethekam S. Valdes D., Monreal R.C. Winter H. Phys. Rev. B. 78:75423, 2008.
- [2] Monreal R. C. Goebl D. Primetzhofer D. Bauer P. Nucl. Instr. B. 315, p.206, 2013.
- [3] **Ландау Л. Д.**, **Лифшиц Е. М.**Квантовая механика (3 том курса "Теоретическая физика") 4-е изд., испр. -М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1989.
- [4] Киселёв В.В.
 Квантовая механика. Курс лекций: Учебное пособие. Часть 1. Протвино: ИФВЭ, 2005.
- [5] Ильина В. А., Силаев П. К. Численные методы для физиков теоретиков. Том І. — Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2003.
- [6] **Ильина В. А.**, **Силаев П. К.**Численные методы для физиков теоретиков. Том II. Москва-Ижевск: Институт компьютерных исследований, 2004.
- [7] **Тихонов Н. А., Токмачев М. Г.** Основы математического моделирования. Учебное пособие. М.: Физический факультет МГУ, 2012.
- [8] **Калиткин Н. Н.**Численные методы. М.: Наука, 1978.