

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ
Кафедра дифференциальных уравнений и системного анализа

Аннотация к дипломной работе

**НЕКОТОРЫЕ МЕТОДЫ ЧИСЛЕННОГО РЕШЕНИЯ
СТАЦИОНАРНОГО УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА**

Егорова Анастасия Сергеевна

Научный руководитель:
кандидат физ.-мат. наук,
доцент А. Э. Малевич

В дипломной работе 37 страниц, 14 рисунков, 18 источников.

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА, ВЕКТОРЫ ВИЛЬСОНА, ГАМИЛЬТОНИАН, МЕТОД ФУРЬЕ, DVR-МЕТОД.

Целью данной работы является описание математической модели молекулы с двумя торсионными степенями свободы, исследование и описание различных методов (метод Фурье, DVR-метод) численного решения стационарного уравнения Шрёдингера с двумя торсионными степенями свободы.

В дипломной работе получены следующие результаты:

- Найдены выражения для кинетических коэффициентов для соединений с двумя торсионными углами.
- Исследован, описан и реализован метод Фурье численного решения двухмерного стационарного уравнения Шрёдингера.
- Исследован, и описан DVR метод численного решения одномерного стационарного уравнения Шрёдингера.

Все вычисления выполнены при помощи пакета Wolfram Mathematica.

Показано, что полученные значения кинетических коэффициентов совпадают со значениями соответствующих коэффициентов, полученных при помощи квантово-химического пакета программ GAUSSIAN 09.

Значения Гамильтонианов, полученных при помощи метода Фурье и DVR-метода почти совпадают (максимум относительной погрешности порядка 0.2).

Дипломная работа выполнена автором самостоятельно.

The thesis contains 37 pages, 14 drawings, 18 sources.

SCHREDINGER EQUATION, WILSON'S VECTORS, HAMILTONIAN, FOURIER METHOD, DVR-METHOD.

The aim of this work is to describe a mathematical model of a molecule with two torsional degrees of freedom and to study and describe various methods (Fourier method, DVR-method) for the numerical solution of the stationary Schrödinger equation with two torsional degrees of freedom.

In this thesis, the following results were obtained:

- Expressions for kinetic coefficients for joints with two torsion angles are supported.
- The Fourier method for the numerical solution of the two-dimensional stationary Schrödinger equation has been investigated, described and implemented.
- Researched and described DVR method for numerical solution of one-dimensional stationary Schrödinger equation.

All calculations were performed using the Wolfram Mathematica package.

It is shown that the obtained values of kinetic coefficients coincide with the values of corresponding coefficients obtained using the quantum-chemical software package Gaussian 09.

Hamiltonians obtained using the Fourier method and the DVR method almost coincide (the maximum relative error is about 0.2).

The diploma work was done by the author independently.