

МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
ФАКУЛЬТЕТ ПРИКЛАДНОЙ МАТЕМАТИКИ И ИНФОРМАТИКИ

Кафедра математического моделирования и управления

Аннотация к дипломной работе

**РАСЧЕТ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА ДВУХЭЛЕКТРОННОГО
КУЛОНОВСКОГО ЦЕНТРА В ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ**

Максимов Михаил Сергеевич

Научный руководитель:
кандидат физ.-мат. наук,
доцент Л.Ф. Макаренко

Минск, 2016

РЕФЕРАТ

Дипломная работа, 64 с., 13 рис., 13 источников, 3 приложения.

Ключевые слова: УРАВНЕНИЕ ШРЕДИНГЕРА, ДВУХЭЛЕКТРОННАЯ СИСТЕМА В ПОЛУПРОСТРАНСТВЕ, УРАВНЕНИЕ ПУАССОНА, МЕТОД ХАРТРИ-ФОКА, ВАРИАЦИОННЫЙ МЕТОД, КОНЕЧНО-РАЗНОСТНЫЙ МЕТОД

Объект изучения – спектр двухэлектронной системы в полупространстве.

Цель – исследование основного состояния двухэлектронной системы в полупространстве под действием различных потенциалов.

Методы исследования – конечно-разностные методы, приближенные методы, основанные на вариационном принципе.

Результаты – написаны программы: для численного решения уравнений Хартри-Фока, для расчета интегралов вариационного метода. Исследовано основное состояние заданной системы.

РЭФЕРАТ

Дыпломная работа, 64 с., 13 мал., 13 крыніц, 3 дадатку.

РАУНАННЕ ШРОДЫНГЕРА, ДВУХЭЛЕКТРОННАЯ СІСТЭМА У ПОЛУПРАСТОРЫ, РАУНАННЕ ПУАСОНА, МЕТАД ХАРТРЫ-ФОКА, ВАРЫЯЦЫЙНЫ МЕТАД, КАНЦОВА-РОЗНАСНЫ МЕТАД

Аб'ект вывучання – спектр двухэлектроннай сістэмы ў полупрасторы.

Мэта – даследаванне асноўнага стану двухэлектроннай сістэмы ў полупрасторы пад дзеяннем розных патэнцыялаў.

Метады даследавання – канцова-рознасныя метады, прыбліжаныя метады, заснаваныя на варыяцыйным прынцыпе.

Вынікі – напісаны праграмы: для колькаснага рашэння раўнанняў Хартры-Фока, для разліку інтэгралаў варыяцыйнага метаду. Даследаван асноўны стан зададзенай сістэмы.

ABSTRACT

Diploma thesis, 64 p., 13 fig., 13 sources, 3 appendixes.

Keywords: SCHRODINGER EQUATION, TWO-ELECTRON SYSTEM IN A HALF SPACE, POISSON EQUATION, HARTREE-FOCK METHOD, VARIATIONAL METHOD, FINITE DIFFERENCE METHOD.

Object of the study – spectre of two-electron system in a half space.

Goal – studying of the ground state of two-electron system in a half space under various potentials.

Research methods – finite-difference method, approximate methods, based on the variational principle.

Results – programs for the numerical solution of Hartree-Fock equations and calculating integrals of the variational method were written, the ground state of the given system was investigated.