

БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ

Факультет прикладной математики и информатики

Кафедра вычислительной математики

Аннотация к дипломной работе

**«ИСПОЛЬЗОВАНИЕ МЕТОДА ХАРТРИ-ФОКА ДЛЯ
МОДЕЛИРОВАНИЯ ЭНЕРГЕТИЧЕСКОГО СПЕКТРА
ДВУХЭЛЕКТРОННЫХ СИСТЕМ В ЦИЛИНДРИЧЕСКИ
СИММЕТРИЧНОМ ПОТЕНЦИАЛЕ»**

Одонец Лилия Алексеевна

Научные руководители: ассистент кафедры вычислительной математики
Е.А. Левчук, доцент кафедры вычислительной математики Л.Ф. Макаренко

Минск 2020

Реферат

Дипломная работа, 64 с., 22 рисунка, 7 таблиц, 10 источников, 3 приложения.

УРАВНЕНИЕ ШРЁДИНГЕРА, МЕТОД ХАРТРИ–ФОКА, ГАМИЛЬТОНИАН, КВАНТОВАЯ ТОЧКА, ПОТЕНЦИАЛЬНАЯ ЭНЕРГИЯ.

Объект исследования стационарное уравнение Шрёдингера.

Цель работы – решить уравнение Шрёдингера, описывающего движение двух электронов в цилиндрически симметричной квантовой точке.

В работе изучена постановка задачи для стационарного уравнения Шрёдингера, описывающего движение двух электронов в двумерной параболической квантовой точке.

Реализован алгоритм метода конечных разностей и метода Хартри-Фока для нахождения численного решения поставленной задачи.

В работе проведен численный эксперимент. Исследована потенциальная энергия электронов в цилиндрически симметричной квантовой точке в зависимости от различных потенциалов, построены соответствующие волновые функции.

Abstract

Graduate work, 64 pp., 22 figures, 7 tables, 10 sources, 3 applications.

SCHRÖDINGER EQUATION, HARTREE-FOCK METHOD,
HAMILTONIAN, QUANTUM DOT, POTENTIAL ENERGY.

Object of researching – is the stationary Schrödinger equation.

Purpose – solution of the Schrödinger equation, which describes the motion of electrons in cylindrically symmetric quantum dot.

In this work, we study problems for the stationary Schrödinger equations that describe the motion of two electrons in a two-dimensional parabolic quantum dot.

An algorithms of differences and Hartree-Fock methods was implemented.

A numerical experiment was carried out. Wave functions and energy were found in symmetric quantum dot depending on various potentials.