

**МИНИСТЕРСТВО ОБРАЗОВАНИЯ РЕСПУБЛИКИ БЕЛАРУСЬ  
БЕЛОРУССКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ  
МЕХАНИКО-МАТЕМАТИЧЕСКИЙ ФАКУЛЬТЕТ**

**Кафедра дифференциальных уравнений и системного анализа**

**Аннотация к дипломной работе**

**КОМПЬЮТЕРНОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ МОЛЕКУЛ С ДВУМЯ  
СТЕПЕНЯМИ СВОБОДЫ НА ЯЗЫКЕ ПРОГРАММИРОВАНИЯ JULIA**

Дыдышко Павел Александрович

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

В дипломной работе 33 страницы, 10 иллюстраций, 2 таблицы, 15 источников.

**Ключевые слова.** торсионные углы, спектры торсионных состояний, собственные значения эрмитовых матриц большого размера.

Работа посвящена исследованию состояний молекул с двумя степенями свободы с точки зрения квантовой механики. С помощью стационарного уравнения Шрёдингера согласно принципу Гамильтона рассчитываются энергии состояний потенциальной ямы и моделируются состояния, соответствующие каждой энергии. Это позволяет находить наиболее вероятные состояния молекулы для каждого уровня энергии и по этим данным предсказывать изменения физических и химических свойств соединения.

В работе приводится математическая модель молекулы с двумя торсионными степенями свободы, рассматриваются различные способы реализации составляющих модели с целью оптимизации.

Дипломная работа выполнена автором самостоятельно.

The thesis contains 33 pages, 10 illustrations, 2 tables, 15 sources.

**Key words.** Torsion angles, torsion spectrum, eigensystem of large hermitian matrices.

The thesis is about modeling molecules with two torsion degrees of freedom from the quantum mechanics point of view. With help of stationary Schrödinger equation with under Hamilton's principle the energy levels of potential well are computed and the states of molecule corresponding to each energy level are modeled. This allows finding most likely states of molecule on each energy level therefore allows to predict changes in physical or chemical properties.

In this thesis mathematical model of molecule with two torsion degrees of freedom is constructed, and considered various ways of implementing parts of this model on a computer with the aim of optimization.

The thesis was performed by the author himself.