

Выходными данными будут следующие показатели:

- коэффициент экономии энергии топлива;
- экономическая выгода от использования установки;
- режим когенерации в зависимости от уровня потребления.

Моделирование работы когенерационной установки является актуальным в виду наличия экономической выгоды (дешевизна производимой энергии, отсутствие потерь электроэнергии в линиях электропередач) и возможности снижения уровня негативного воздействия на окружающую среду.

Литература

1. IEA, Combined Heat and Power – Evaluating the benefits of greater global investment [Электронный ресурс] // IEA. – Париж, 2008. – Режим доступа к статье: www.iea.org/publications/freepublications/publication/chp_report.pdf – Дата доступа: 10.03.2019.

2. EDUCOGEN, The European Educational Tool on Cogeneration: второе издание [Электронный ресурс] // EDUCOGEN. – 2001. – Режим доступа: nacchp.gr/wp-content/uploads/2017/03/EDUCOGEN_Tool.pdf – Дата доступа: 14.03.2019.

А.А. Веркеенко (ГГУ имени Ф. Скорины, Гомель)
Науч. рук. **Ю.А. Гришечкин**, канд. физ.-мат. наук

РЕШЕНИЕ УРАВНЕНИЯ ШРЁДИНГЕРА С СИММЕТРИЧНЫМ АНАЛОГОМ ОДНОМЕРНОГО ПОТЕНЦИАЛА ПЕШЛЯ-ТЕЛЛЕРА

Рассмотрим стационарное одномерное уравнение Шрёдингера [1]

$$-\frac{\hbar^2}{2M} \frac{d^2}{dx^2} \Psi(x) + U(x)\Psi(x) = E\Psi(x) \quad (1)$$

с потенциалом следующего вида:

$$U(x) = \frac{1}{8} U_0 \frac{2 + \sin^2 \alpha x}{\cos^2 \alpha x}, \quad U_0 = \frac{\hbar^2 \alpha^2}{M}, \quad (2)$$

где \hbar – приведенная постоянная Планка, M – масса частицы, x – её координата, $\Psi(x)$ – волновая функция, E – энергия частицы, $\alpha > 0$ – некоторый параметр, регулирующий геометрические размеры рассматриваемого потенциала.

Потенциал (2) представлен на рисунке 1 для случая $\alpha = 2\pi$.

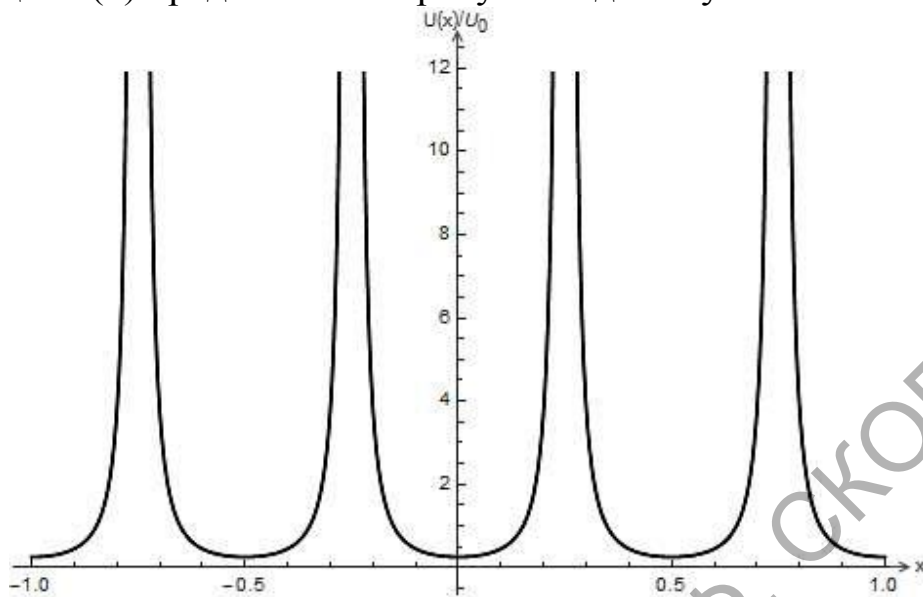


Рисунок 1 – Зависимость потенциала (2) от координаты

Рассматриваемый потенциал является периодическим. При этом выражение (2) по своему виду похоже на потенциал Пешля-Теллера [2]. Однако, в отличие от него, как видно на рисунке 1, обсуждаемый потенциал (2) является симметричным. Ограничимся поиском решений уравнения Шрёдингера с потенциалом вида (2) на отрезке $x \in [-\pi/(2\alpha); \pi/(2\alpha)]$. Так как при $x = \pm \pi/(2\alpha)$ выражение (2) обращается в бесконечность, то уместно предположить, что волновая функция удовлетворяет граничным условиям

$$\Psi(x)|_{x=\pm\pi/(2\alpha)} = 0. \quad (3)$$

Обсудим теперь процедуру решения задачи (1) – (3). После подстановки выражения (2) в уравнение (1) выполним в нём замену переменной $y = \sin \alpha x$. В результате получим следующее уравнение:

$$(1-y^2) \frac{d^2}{dy^2} \Psi(y) - y \frac{d}{dy} \Psi(y) + \beta^2 \Psi(y) - \frac{1}{4} \frac{2+y^2}{1-y^2} \Psi(y) = 0, \quad (4)$$

где введено обозначение $\beta^2 = 2ME/(\hbar^2 \alpha^2)$. Будем искать решение данного уравнения в виде

$$\Psi(y) = (1-y^2)^\mu f(y), \quad (5)$$

где $f(y)$ – неизвестная функция, μ – неизвестная постоянная величина, выбор которой определяет вид уравнения для $f(y)$.

Подстановка выражения (5) в уравнение (4) и выбор $\mu = 1/4$ приводит к присоединенному уравнению Лежандра [3]:

$$f''(y)(1-y^2) - f'(y)(2y) + f(y)\left(\beta^2 - \frac{1}{1-y^2}\right) = 0. \quad (6)$$

Решениями уравнения (6) являются присоединенные функции Лежандра $P_n^m(y)$, для которых верхний индекс m равен 1. При этом нижний индекс n связан с параметром β равенством $\beta^2 = n(n+1)$. Присоединенные функции Лежандра являются регулярными только при целых значениях n . Кроме того, индекс n должен подчиняться условию $n \geq |m|$. Таким образом, $n = 1, 2, \dots$. Учитывая введенное ранее обозначение β^2 , получим собственные значения энергии:

$$E_n = \frac{n(n+1)\hbar^2 \alpha^2}{2M}, \quad n = 1, 2, \dots \quad (7)$$

Волновые функции, соответствующие дискретным значениям энергии (7), имеют вид:

$$\Psi_n(x) = C_n \sqrt{\cos \alpha x} P_n^1(\sin \alpha x). \quad (8)$$

Для определения констант C_n необходимо использовать условие нормировки волновой функции, которое для обсуждаемого потенциала представим в форме:

$$\int_{-\pi/(2\alpha)}^{\pi/(2\alpha)} |\Psi(x)|^2 dx = 1. \quad (9)$$

Несколько первых волновых функций приведём в явном виде:

$$\begin{aligned} \Psi_1(x) &= \sqrt{3\alpha/4} \cos^{3/2} \alpha x, \\ \Psi_2(x) &= \sqrt{5\alpha/12} \cos^{3/2} \alpha x \cdot \sin \alpha x, \\ \Psi_3(x) &= \sqrt{7\alpha/24} \cos^{3/2} \alpha x (5 \sin^2 \alpha x - 1). \end{aligned} \quad (10)$$

Таким образом, в работе получен дискретный спектр энергий частицы и волновые функции в случае взаимодействия (2). При этом, как видно из формулы (7), энергетические уровни не обладают свойством эквидистантности.

В дальнейшем мы планируем рассмотреть обобщенный вариант потенциала (2), зависящий от двух параметров.

Литература

1. Блохинцев, Д. И. Основы квантовой механики: учебное пособие / Д. И. Блохинцев. – 5-е изд., перераб. – М.: Наука, 1976. – 664 с.
2. Флюгге, З. Задачи по квантовой механике: в 2 т. / З. Флюгге; пер. с англ. Б. А. Лысова. – М.: Мир, 1974. – Т. 1. – 344 с.

3. Арфкен, Г. Математические методы в физике / Г. Арфкен; пер. с англ. В. В. Чепкунова. – М.: Атомиздат, 1970. – 712 с.

С.Д. Гоголева (ГрГУ имени Я. Купалы, Гродно)
Науч. рук. **В.И. Степура**, канд. физ.-мат. наук,
ведущий научный сотрудник

ВЛИЯНИЕ ВЯЗКОСТИ РАСТВОРИТЕЛЯ НА ФЛУОРЕСЦЕНТНЫЕ СВОЙСТВА ПРОИЗВОДНЫХ ТИОФЛАВИНА Т

Флуоресцентные молекулярные ротаторы (ФМР) это молекулы, для которых наблюдается сильная зависимость квантового выхода флуоресценции Φ от вязкости растворителя (η). Ярким примером ФМР является молекула тиофлавина Т (ThT), являющаяся сенсором на амилоидные фибриллы (АФ), образующиеся при болезни Альцгеймера [1]. Разработка новых флуоресцентных зондов для детектирования АФ и измерения микровязкости требует изучения механизма чувствительности флуоресценции ФМР к вязкости среды. Целью работы является исследования флуоресцентных свойств производных ThT, а также квантово-химические расчеты поверхности потенциальной энергии (ППЭ) основного (S_0) и возбужденного (S_1) состояний для оценки влияния структуры производных ThT на скорость фотофизических процессов в состоянии S_1 .

Объектами исследования в данной работе являются производные ThT (нейтральные и катионные формы): 2-[4'-(амино)фенил]-бензтиазол (ВТА-0), 2-[4'-(метиламино)фенил]-бензтиазол (ВТА-1) и 2-[4'-(диметиламино)фенил]-бензтиазол (ВТА-2) (таблица 1). Были определены значения квантового выхода флуоресценции производных (согласно Williams и др. [2]) в ряде полярных растворителей (таблица 1). Были проведены квантово-химические расчёты ППЭ состояний S_0 и S_1 , а также силы осциллятора f перехода S_0 - S_1 с помощью пакета программ FireFly 8.0.1 [3], частично основанного на исходном коде программы GAMESS (US) [4]. Расчёты методом DFT/TDDFT (B3LYP/ 6-31G(d)) производились для молекул с фиксированным значением угла ϕ между бензтиазольным и анилиновым фрагментами в диапазоне от 0° до 180° .

Из полученных данных (таблица 1) видно, что квантовый выход флуоресценции нейтральных форм производных ThT практически не