

соответствующие кинетические коэффициенты диффузии.

Моделирование было выполнено в области изменения концентраций компонентов от 0 до 0,95 при значении приведенной температуры $T/T_c=1,5$, выраженной в единицах критической температуры компонента A ($k_B T_c=0,567J$). Параметры взаимодействия приняты положительными и равными $J_B=1,44$, $J_{AB}=1,2$ ($J_{AB}=\sqrt{J_B}$), что соответствует межчастичному отталкиванию.

Ввиду межчастичного отталкивания интенсивнее взаимодействующие частицы сорта B более подвижны. Однако при увеличении концентрации частиц сорта A ситуация изменяется и подвижность частиц обоих сортов выравнивается. Такое поведение обусловлено взаимным распределением частиц в системе. При низких концентрациях пары частиц сорта B мало вероятны и коэффициенты диффузии определяются взаимодействием частиц разных сортов или сорта A .

Литература

1. Bokun G. S., Groda Ya.G., Uebing C., Vikhrenko V.S. // Physica A. – 2001. – V. 296.
2. Де Гроот С.Р. и Мазур П. Неравновесная термодинамика. – М.: Мир, 1974.
3. Бокун Г.С., Вихренко В.С., Гапанюк Д.В. // Труды БГТУ. Сер. физ.-мат. наук и информ. Вып. XI. -2003. -С. 63.

КОМПЛЕКСНЫЕ КВАЗИПОЛИНОМИАЛЬНЫЕ РЕШЕНИЯ УРАВНЕНИЯ ШРЕДИНГЕРА

Р.И. Гаранин, Н.Н. Кравченко

Научный руководитель – к.ф.- м.н., доцент *Ю.В. Трубников*
Витебский государственный университет им. П. Машерова

Целью исследования является нахождение комплекснозначных решений уравнения Шредингера, при этом метод разделения переменных не используется. В результате получены комплексные квазиполиномиальные решения.

Рассмотрим движение двумерного изотропного осциллятора, у которого $\omega_1 = \omega_2 = \omega$. Потенциальная энергия U такого осциллятора выражается формулой

$U = \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2)$. Уравнение Шредингера соответственно имеет вид

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E - \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) \right] \psi = 0. \quad (1)$$

Покажем, что функция

$$\psi(x, y) = (x + iy)^n e^{-a(x^2+y^2)} \quad (n = 0,1,2,\dots)$$

при $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$ является решением уравнения (1). Действительно,

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial x^2} &= n^2 (x + iy)^{n-2} e^{-a(x^2+y^2)} - n(x + iy)^{n-2} e^{-a(x^2+y^2)} - 4nax(x + iy)^{n-1} e^{-a(x^2+y^2)} - \\ &- 2a(x + iy)^n e^{-a(x^2+y^2)} + 4a^2 x^2 (x + iy)^n e^{-a(x^2+y^2)}; \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 \psi}{\partial y^2} &= -n^2 (x + iy)^{n-2} e^{-a(x^2+y^2)} + n(x + iy)^{n-2} e^{-a(x^2+y^2)} - 4inay(x + iy)^{n-1} e^{-a(x^2+y^2)} - \\ &- 2a(x + iy)^n e^{-a(x^2+y^2)} + 4a^2 y^2 (x + iy)^n e^{-a(x^2+y^2)}. \end{aligned}$$

Таким образом,

$$\Delta\psi \equiv \frac{\partial^2\psi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2\psi}{\partial y^2} = -4a[1 + n - a(x^2 + y^2)]\psi. \quad (2)$$

Переносим все слагаемые равенства (2) в левую часть и считая, что $a = \frac{m\omega}{2\hbar}$, получаем

$$\Delta\psi + \frac{2m}{\hbar^2} \left[(n+1)\omega\hbar - \frac{m\omega^2}{2}(x^2 + y^2) \right] \psi = 0. \quad (3)$$

Из последнего равенства следует, что

$$E_n = (n+1)\omega\hbar \quad (n = 0, 1, 2, \dots), \quad (4)$$

что согласуется с известными фактами ([1], с. 52).

Литература

1. Левич В.Г., Вдовин Ю.А., Мямлин В.А., Курс теоретической физики. Том 2. -М.: Наука, 1971.

ОХЛАЖДЕНИЕ В СВЕРХЗВУКОВОЙ СТРУЕ КАК МЕТОД ИССЛЕДОВАНИЯ ЭЛЕКТРОННО-КОЛЕБАТЕЛЬНОЙ СТРУКТУРЫ СЛОЖНЫХ ОРГАНИЧЕСКИХ МОЛЕКУЛ

В.Г. Гимпель

Научный руководитель – к.ф.-м.н., доцент *К.А. Саечников*

Белорусский государственный педагогический университет им. М.Танка

Метод флуоресцентной спектроскопии молекул, охлажденных в сверхзвуковой струе, позволяет получать высокоинформативные электронно-колебательные спектры изолированных сложных органических молекул и их ван-дер-ваальсовских комплексов с атомами инертных газов и простыми молекулами полярных и неполярных растворителей (вода, метанол, бензол и др.). Ван-дер-ваальсовские комплексы представляют собой удобный объект для исследования механизмов влияния межмолекулярных взаимодействий на спектроскопические характеристики сложных молекул. Получаемые результаты дают важную информацию для понимания фотофизических процессов в растворах сложных молекул.

Установка для исследования спектров возбуждения и флуоресценции сверххолодных молекул состоит из трех блоков: источника возбуждения, в качестве которого используется перестраиваемый пикосекундный лазер на красителе (область перестойки 365-385 нм); системы для формирования сверхзвуковой струи и «синтеза» ван-дер-ваальсовских комплексов; системы регистрации, работающей в режиме счета фотонов со стробированием и позволяющей получать как спектры возбуждения флуоресценции (регистрируется суммарная флуоресценция), так и спектры флуоресценции при возбуждении молекулы в определенное электронно-колебательное состояние (регистрируется оптический сигнал на выходе монохроматора).

Получены тонкоструктурные спектры возбуждения и флуоресценции при селективном лазерном возбуждении в определенные электронно-колебательные состояния молекул 3-амино-N-метилфталимида. Проведен анализ частот и интенсивностей линий в спектрах. Получены спектры ван-дер-ваальсовских комплексов 3-амино-N-метилфталимида с атомами аргона и молекулами воды. Обсуждаются особенности формирования этих спектров - сдвиги частот чисто электронного перехода, изменения колебательных частот в зависимости от пространственной структуры комплексообразования и др.