

Равномерно пригодный расчет энергетических и термодинамических характеристик ансамбля осцилляторов Морзе

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

В настоящее время круг точно решаемых нетривиальных задач в квантовой механике и статистике практически исчерпан. В этой связи особого внимания заслуживает разработка алгоритмов приближенного описания квантовых систем. С прикладной точки зрения важно, чтобы такие алгоритмы были равномерно пригодными, то есть их вычислительная схема была достаточно простой и выполнялась во всем диапазоне изменения параметров системы.

В ходе работы было получено равномерно пригодное приближение для энергетического спектра и различных термодинамических характеристик ансамбля осцилляторов Морзе, системы, которая часто используется для описания свойств реальных молекулярных газов. Для этого с помощью операторного метода решения уравнения Шредингера было получено приближение для энергетических уровней и собственных функций стационарных состояний. Важно, что уже в нулевом приближении метода количество уровней энергии конечно, что соответствует реальной ситуации.

Полученные результаты обладают достаточно высокой точностью уже в нулевом приближении для любых значений параметров гамильтониана системы.

Далее было построено равномерно пригодное приближение для статистической суммы рассматриваемой системы и ряда других ее термодинамических характеристик: свободной энергии, теплоемкости, среднего значения энергии.

Для этого статистическая сумма была представлена в виде экспоненциального оператора специального вида, к которому далее применялось кумулянтное разложение, справедливое для любых экспоненциальных операторов при усреднении по нормированному базису. Кроме нулевого приближения рассмотрены также и поправки более высоких порядков. Показано, что точность результатов возрастает при учете поправок. Проведен расчет наблюдаемой характеристики газа с межатомным потенциалом Морзе – его теплоемкости.