

**Учет высоких порядков ангармонизма колебаний при описании термодинамических свойств двухатомных молекул**

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

Системы, описываемые гамильтонианами с полиномиальным межатомным потенциалом, часто используются для моделирования колебаний реальных двухатомных молекул. Они применяются при описании термодинамических эффектов, связанных с высоким ангармонизмом колебаний, проявляющимся при высоких температурах. Простейшая из таких систем, ангармонический осциллятор, является, уже стандартной при апробации различных приближенных методов.

Решение задачи на расчет термодинамических характеристик рассматриваемых молекулярных систем сводится к последовательному построению приближения для энергетических уровней и аппроксимации для статистических характеристик системы на базе рассчитанного энергетического спектра. В работе анализ энергетических характеристик проводится на базе операторного метода решения уравнения Шредингера, использование которого позволяет получить равномерно пригодное приближение для уровней энергии при любых значениях параметров системы и квантовых чисел. При этом точность полученного приближения при сравнении с известными результатами, полученными другими авторами при использовании других приближенных методов решения уравнения Шредингера, получается не хуже, чем 80%. Рассматриваются системы, описываемые гамильтонианами с четными степенями оператора координаты (симметричным потенциалом), с членами типа  $x^3$  и  $x^5$ , моделирующими асимметрию реального потенциала. Увеличение степени оператора координаты в потенциале соответствует возрастанию степени ангармонизма колебаний атомов.

На основе построенного приближения для энергетических уровней проводится аппроксимация для статистической суммы системы. Приближенный расчет статистической суммы основан на использовании кумулянтного разложения, справедливого для любых экспоненциальных операторов при усреднении по нормированному базису. По вычисленной статистической сумме строятся приближения для свободной энергии, энтропии, теплоемкости и других термодинамических параметров системы, которые находятся в хорошем согласии с экспериментальными данными, полученными в работах других авторов. Рассмотрение межатомного потенциала с нечетными степенями оператора координаты позволяет вычислить измеряемую характеристику газа – коэффициент теплового расширения.