

УДК 530.145:519.22+531.19

**Вычисление коэффициента теплового расширения
молекулярного газа с кубическим межатомным
потенциалом**

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

В работе приведен алгоритм аналитического расчета коэффициента теплового расширения газа двухатомных молекул с несимметричным потенциалом межатомного взаимодействия. Для этого реальный межатомный потенциал моделируется двумя способами: добавлением в гамильтониан слагаемого, содержащего третью степень оператора координаты, и потенциалом Морзе. Для решения поставленной задачи потребовалось решить две последовательные проблемы: построить приближение для энергетического спектра рассматриваемой системы, справедливое во всем диапазоне изменения как квантовых чисел, так и параметров гамильтониана; обобщить данное приближение для вычисления термодинамических характеристик системы (статистическая сумма) и перейти к вычислению наблюдаемой характеристики газа – коэффициента теплового расширения.

Для решения первой из поставленных задач был использован операторный метод решения уравнения Шредингера, в рамках которого было получено искомое равномерно пригодное приближение для уровней энергии.

Специфика второй проблемы состоит в том, что алгоритм приближенного вычисления энергетического спектра необходимо дополнить алгоритмом приближенного суммирования по квантовым состояниям, в качестве которого в работе используется кумулянтное разложение. Совместное применение операторного метода и кумулянтного разложения позволяет построить равномерно пригодное приближение для термодинамических характеристик квантовой системы.

В результате получено аналитическое выражение для коэффициента теплового расширения молекулярного газа с модельными межатомными потенциалами, справедливое при любых значениях температуры. Численные расчеты приводят к результатам, совпадающим с другими авторами.