

## **Статистика ансамбля ангармонических осцилляторов при низких температурах**

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

Целью работы является построение алгоритма расчета статистических характеристик ансамбля квантовых ангармонических осцилляторов и анализ их поведения при низких температурах.

Вначале проводится расчет энергетического спектра ангармонического осциллятора. Для этого используется операторный метод решения уравнения Шредингера. Специфика данного метода позволяет не только рассчитывать энергетические уровни осциллятора с высокой точностью, но и получить равномерно пригодное приближение для значений энергии по параметрам гамильтониана системы.

При вычислении статистических характеристик системы осцилляторов особенность расчета состоит в том, что большинство таких характеристик могут быть выражены через статистическую сумму системы, которая определяется всем энергетическим спектром целиком (в случае ангармонических осцилляторов спектр содержит бесконечное число уровней). Поэтому алгоритм приближенного вычисления энергетических характеристик необходимо дополнить алгоритмом приближенного суммирования по квантовым состояниям. В качестве такого алгоритма в работе используется кумулянтное разложение, справедливое для любого экспоненциального оператора при суммировании по нормированному базису. Вторая особенность вычисления статистических характеристик состоит в том, что они зависят от температуры системы.

Совместное применение операторного метода для приближенного расчета энергетического спектра и кумулянтного разложения для приближенного суммирования по бесконечному набору энергетических состояний позволило получить равномерно пригодное приближение для статистической суммы, свободной энергии и ряда других характеристик системы. Результаты отличаются высокой точностью во всем диапазоне изменения температуры и параметров гамильтониана.

В работе получены аналитические выражения для статистической суммы и свободной энергии ансамбля квантовых ангармонических осцилляторов в пределе низких температур, когда большинство осцилляторов занимают слабовозбужденные энергетические уровни. Данная особенность позволяет ограничиться небольшим числом слагаемых при вычислении статистической суммы.

Полученные результаты находятся в согласии с известными работами других авторов.