

УДК 539.12

## Алгоритм расчета термодинамических характеристик газа двухатомных молекул

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

В работе представлен алгоритм расчета свободной энергии, статистической суммы и коэффициента теплового расширения газа двухатомных молекул.

Решение поставленной задачи осуществляется в два этапа: вначале проводится приближенный расчет энергетического спектра молекул, а затем приближенное суммирование по квантовым состояниям.

Для расчета спектра молекул применяется операторный метод приближенного решения уравнения Шредингера. Специфика данного метода позволяет не только рассчитывать энергетические уровни молекулы с высокой точностью, но и получить равномерно пригодное приближение для значений энергии по параметрам гамильтониана системы. Рассмотрены основные модельные гамильтонианы, отражающие свойства реальных молекулярных газов:

Термодинамические характеристики газа выражаются через его статистическую сумму, вычисление которой связано с суммированием по всем квантовым состояниям системы. Для проведения такого вычисления алгоритм приближенного вычисления энергетического спектра необходимо дополнить алгоритмом приближенного суммирования по квантовым состояниям, в качестве которого применяется кумулянтное разложение. Вторая специфика задачи состоит в том, что термодинамические характеристики зависят от температуры системы, которая при вычислениях играет роль дополнительного параметра.

Получены равномерно пригодные приближения для статистической суммы и свободной энергии газа двухатомных молекул с различными особенностями межатомного взаимодействия. Они обладают высокой точностью во всем диапазоне изменения как параметров гамильтониана, так и температуры.

На основе полученных выражений проведен расчет коэффициента теплового расширения, молярной теплоемкости и динамического коэффициента вязкости азота.