

Расчет термодинамических потенциалов ансамбля ангармонических осцилляторов

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

При рассмотрении многих задач современной теоретической физики важную роль играет разработка методов приближенного описания квантовых систем и решения описывающих их уравнений. Среди таких методов особое место занимают так называемые непертурбативные методы, которые позволяют построить аналитическое описание квантовых систем не только в предельных случаях слабой или сильной связи, но и при произвольных значениях параметров системы.

В работе рассмотрено применение операторного метода решения уравнения Шредингера для построения равномерно пригодного приближения для энергетического спектра ансамбля квантовых ангармонических осцилляторов, системы, которая часто используется для изучения свойств реальных молекулярных газов. Полученные значения энергии остаются достаточно точными (ошибка не превышает 20% уже в нулевом приближении метода) во всем диапазоне изменения параметров гамильтониана, в частности, различных констант связи и параметров ангармонизма. Учет поправок повышает точность расчетов.

После получения аналитического равномерно пригодного приближения для энергетического спектра системы проведена аппроксимация ее термодинамических характеристик. Для этого построено равномерно пригодное приближение для статистической суммы ансамбля ангармонических осцилляторов. Специфика построения такого приближения состоит в том, что статистическая сумма системы зависит не только от параметров гамильтониана, но и от температуры. При этом для вычисления статистической суммы системы необходимо провести суммирование по всем квантовым состояниям системы. Поэтому методику построения приближения для энергетического спектра ансамбля осцилляторов, основанную на операторном методе, необходимо дополнить методом приближенного суммирования по квантовым состояниям системы, в качестве которого в работе используется кумулянтное разложение, справедливое для любого экспоненциального оператора при усреднении по нормированному базису. В результате получены аналитические выражения для статистической суммы, свободной энергии и энтальпии ансамбля квантовых ангармонических осцилляторов, которые являются равномерно пригодными и в предельных случаях совпадают с известными результатами.