

Алгоритм расчета термодинамических характеристик молекулярного азота

Иванов А.А.

Белорусский национальный технический университет

На основе совместного применения операторного метода и кумулянтного разложения в работе получены численные значения термодинамических характеристик молекулярного азота. При расчетах в качестве потенциала межатомного взаимодействия использовался потенциал Морзе $U(x) = D(1 - e^{-\alpha x})^2$. При использовании потенциала Морзе общее число энергетических уровней атома n оказывается конечным, что упрощает процедуру суммирования по квантовым состояниям. Наилучшая точность приближения в нулевом порядке метода достигается при использовании параметра ω_0 , выбираемого исходя из условия наилучшей аппроксимации для энергетического уровня с наибольшей заселенностью при данной температуре. В таблице приведены значения статистической суммы Z , молярной теплоемкости C_V , среднего отклонения атомов от равновесного состояния, связанного с ангармонизмом колебаний \bar{x} . Индекс « e » соответствует точным известным численным данным, индекс « h » - результатам, полученным при использовании гармонического приближения.

Табл. Термодинамические характеристики идеального газа молекул N_2 .

$$m = 14.008 \text{ а.е.м.}, \quad \alpha = 4.28 \times 10^7 \text{ см}^{-1}, \quad D = 79890 \text{ см}^{-1}, \quad n = 56, \quad \omega_0 = 2358 \text{ см}^{-1},$$

$$(\hbar = c = 1).$$

	$T, \text{ K}$				
	1000	2000	5000	10000	20000
Z	0.191	0.529	1.474	3.053	6.243
Z_{ex}	0.191	0.529	1.474	3.053	6.431
Z_h	0.190	0.525	1.447	2.935	5.891
C_V	0.424	0.807	1.002	1.081	1.253
$C_{V,ex}$	0.414	0.807	1.004	1.091	1.254
$C_{V,h}$	0.362	0.791	0.963	0.990	0.997
$\bar{x} \cdot 10^3 \text{ \AA}$	9.287	12.696	27.610	57.462	135.120

Данные находятся в хорошем согласии с известными результатами, полученными при использовании других приближенных методов.