

РАСЧЕТ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ ПОТЕНЦИАЛОВ ДЛЯ СИСТЕМЫ НАГРУЖЕННЫХ АНГАРМОНИЧЕСКИХ ОСЦИЛЛЯТОРОВ

Прибылов В.А.

*Московский государственный технический университет имени Н.Э. Баумана,
г.Москва*

Ключевые слова: нагруженный ангармонический осциллятор, термодинамические потенциалы.

Аннотация. На основе известного расчета термодинамических потенциалов для системы гармонических осцилляторов были рассчитаны термодинамические потенциалы для системы нагруженных ангармонических осцилляторов. Получена зависимость теплоемкости, которая при малых силах повторяет результат, полученный в гармоническом случае.

Расчет для гармонических осцилляторов

Рассмотрим известный случай расчета термодинамических потенциалов для системы гармонических осцилляторов [1].

Вычислим сумму по состояниям для единичного гармонического осциллятора, который описывает приближенно состояние двухатомной молекулы. Энергия колебаний отсчитывается от нулевого колебательного уровня

$$E(0) = \frac{\hbar\omega}{2}.$$

Колебательная сумма по состояниям:

$$q_{\text{кол}} = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-E_n / kT) = \sum_{n=0}^{\infty} \exp(-\hbar\omega n / kT) = 1 + \exp(-\hbar\omega / kT) + \exp(-2\hbar\omega / kT) \dots$$

Видно, что в правой части – бесконечно убывающая геометрическая прогрессия, поэтому

$$q_{\text{кол}} = \frac{1}{1 - \exp(-\hbar\omega / kT)}.$$

Получим выражения колебательной составляющей для внутренней энергии. Сперва рассчитаем производную от логарифма

$$\begin{aligned} d \ln q_{\text{кол}} / dT &= - \frac{d}{dT} \ln(1 - \exp(-\hbar\omega / kT)) = \frac{\hbar\omega}{kT^2} \frac{\exp(-\hbar\omega / kT)}{(1 - \exp(-\hbar\omega / kT))}, \\ U_{\text{кол}} &= \frac{NkT^2 (d \ln q_{\text{кол}})}{dT}. \end{aligned}$$

Отсюда получим следующее выражение:

$$U_{\text{кол}} = NkT^2 \frac{\hbar\omega}{kT^2} \frac{\exp(-\hbar\omega / kT)}{(1 - \exp(-\hbar\omega / kT))} = \frac{N\hbar\omega}{\exp(\hbar\omega / kT) - 1}.$$

Колебательную составляющую теплоемкости получим продифференцировав это выражение по температуре

$$C_{V \text{ кол}} = C_{P \text{ кол}} = (dU_{\text{кол}}) / dT = N\hbar\omega \frac{\hbar\omega}{kT^2} \frac{\exp(\hbar\omega / kT)}{(1 - \exp(\hbar\omega / kT))^2}.$$

Для дальнейших вычислений так же вводится

$$\theta_{\text{кол}} = \frac{\hbar \omega}{k}.$$

В результате получим следующее выражение:

$$C_{V_{\text{кол}}} = C_{P_{\text{кол}}} = R \frac{\left(\frac{\theta_{\text{кол}}}{T}\right)^2 \exp\left(\frac{\theta_{\text{кол}}}{T}\right)}{\left(1 - \exp\left(\frac{\theta_{\text{кол}}}{T}\right)\right)^2}.$$

Из данного выражения видно, что если относительная температура стремится к нулю, то и теплоемкость стремится к нулю. Если же $\frac{\theta_{\text{кол}}}{T} \gg 1$ то теплоемкость стремится к R.

Расчет для нагруженных ангармонических осцилляторов

За основу в данной работе была взята модель ангармонического осциллятора, полученная в статье[2].

$$\varepsilon_n = 2n + 1 - \frac{F^2}{2m\omega^2} + \varphi_0 - \frac{\beta b^2 F(n + \frac{1}{2})}{m\omega^2 E_0} - \frac{\beta}{3E_0} \left(\frac{F}{m\omega^2}\right)^3.$$

Или [3,4]

$$E_n = \left(n + \frac{1}{2}\right)\hbar\omega - \frac{F^2}{2m\omega^2} - \varphi_0 - \frac{\beta b^2 F(n + \frac{1}{2})}{m\omega^2} - \frac{\beta}{3} \left(\frac{F}{m\omega^2}\right)^3 - \frac{15}{4} \left(\frac{\frac{1}{3}\beta b^3}{\hbar\omega}\right)^2 \left(n + \frac{1}{2}\right)^2 \hbar\omega - \frac{7}{16} \left(\frac{\frac{1}{3}\beta b^3}{\hbar\omega}\right)^2 \hbar\omega$$

Введем следующие обозначения:

$$a = -\frac{15}{4} \left(\left(\frac{1}{3}\beta b^3\right) / \hbar\omega\right)^2,$$

$$b = -\hbar\omega + (\beta b^2 F) / (m\omega^2),$$

$$c = \varphi_0 + F^2 / (2m\omega^2) + \frac{\beta}{3} (F / (m\omega^2))^3 + \frac{7}{16} \left(\left(\frac{1}{3}\beta b^3\right) / \hbar\omega\right)^2 \hbar\omega,$$

$$E_n = -b(n + 1/2) + a(n + 1/2)^2 - c.$$

Используя полученную формулу, можно провести те же расчеты, которые приведены выше для гармонического осциллятора. Колебательная сумма состояний рассчитана численно, так как очевидно, что ряд сходится. Результаты расчетов представлены ниже.

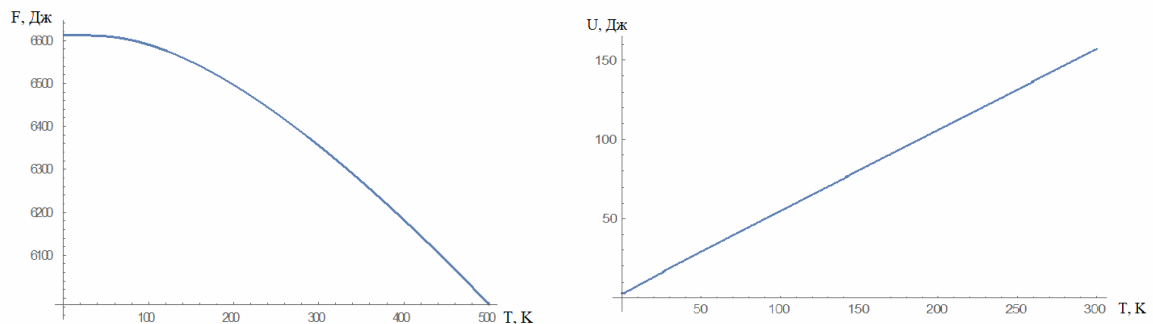


Рис. 1. Графики зависимости энергии Гельмгольца и внутренней энергии от температуры

Так же были рассчитаны теплоемкости при малых нагрузках, и результат качественно повторил результат для гармонических осцилляторов.

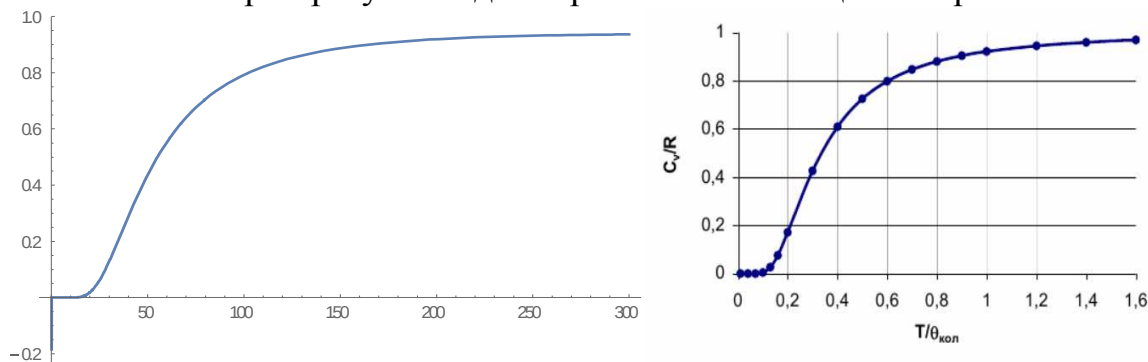


Рис. 2. Теплоемкость для ангармонических и гармонических осцилляторов соответственно

Заключение

В работе получены термодинамические потенциалы для системы нагруженных ангармонических осцилляторов на основе результатов для системы гармонических осцилляторов. Данные результаты можно использовать при расчете термодинамических, электрических, а так же механических свойств различных тел. Рассмотрения нагруженных ангармонических осцилляторов ранее не проводилось, что представляет научную новизну.

Список литературы

1. Ерквич О.С., Ведерников А.А. Спектральные свойства квантового ангармонического осциллятора, находящегося под воздействием постоянной силы // Инженерный журнал: наука и инновации. 2013. Вып. 8.
2. Леванов А.В., Антипенко Э.Е. Определение термодинамических свойств статистическими методами. Классический идеальный газ. – М., 2006.
3. Коэн-Таннуджи К. Квантовая механика. В 2 т. Т. 2.: Учебник. – М.: Ленанд, 2015. – 656 с
4. Коэн-Таннуджи К. Квантовая механика. В 2 т. Т. 1.: Учебник. – М.: Ленанд, 2015. – 976 с

Сведения об авторе:

Прибылов Владислав Алексеевич – студент МГТУ им. Н.Э. Баумана, г.Москва.

CALCULATION OF THERMODYNAMIC POTENTIALS FOR A SYSTEM LOADED ANHARMONIC OSCILLATORS

Pribylov V.A.

Keywords: loaded anharmonic oscillator, thermodynamic potentials.

Abstract. On the basis of the known calculation of thermodynamic potentials for the system of harmonic oscillators, the thermodynamic potentials for the system of loaded anharmonic oscillators were calculated. The dependence of the heat capacity, which at low forces repeats the result obtained in the harmonic case, is obtained.