

Об ангармонических колебаниях двухатомной молекулы и атомарного димера

© Умирзаков*⁺ Ихтиёр Холмаматович и Майер Эдуард Николаевич

Национальный исследовательский Новосибирский государственный университет

ул. Пирогова, 2. г. Новосибирск, 630090. Россия. Тел.: (383) 354-20-17. E-mail: tepliza@academ.org

*Ведущий направление; ⁺Поддерживающий переписку

Ключевые слова: ангармонические поправки, колебания, двухатомная молекула, димер, потенциал.

Аннотация

По современным представлениям потенциал взаимодействия как функция межатомного расстояния имеет единственный минимум, не имеет других точек экстремума и не имеет точек перегиба, где его производная равна нулю. Обычно для учета гармонических колебаний и влияния ангармонических эффектов на эти колебания потенциал взаимодействия разлагается в ряд Тейлора и оставляются квадратичный член, учитывающий гармонические колебания, и поправки третьего и четвертого порядков по отклонениям межатомного расстояния от его равновесного значения, учитывающие ангармонические эффекты. Эти три члена ряда Тейлора составляют приближенный потенциал взаимодействия. Для учета ангармонических эффектов в статистической сумме двухатомной молекулы в Больцмановском факторе выделяется экспоненциальный множитель, учитывающий ангармоническую часть указанного выше приближенного потенциала, и этот множитель разлагается в ряд Тейлора, пределы интегрирования изменяются на плюс и минус бесконечности, проводится интегрирование и оставляются первые несколько членов степенного ряда по обратной температуры. Очевидно, что приближенный потенциал, как и первоначальный потенциал, не должен иметь других точек экстремума, кроме единственного минимума, и точек перегиба, где его производная равна нулю. В настоящей работе показано, что: если коэффициент перед членом четвертого порядка в приближенном потенциале отрицателен, то приближенный потенциал имеет два ложных максимума; если он равен нулю, то имеется один ложный максимум; если он положителен, то потенциал может иметь один ложный минимум и один ложный максимум или одну точку перегиба, где его производная равна нулю. Найдены условия, накладываемые на потенциал взаимодействия, когда ангармонические эффекты в колебаниях двухатомной молекулы можно приближенно учесть поправками третьего и четвертого порядков к квадратичному гармоническому потенциалу. Показано, что это приближение можно использовать в случае взаимодействия атомов двухатомной молекулы посредством потенциала Ми-Грюнаизена и Леннарда-Джонса.