**Квантовая модель ангармонических колебаний двухатомной молекулы с переменной силовой константой и малым значением коэффициента ангармоничности**

***Лякишев В.К.1, Перфильев М.С.2***

*Студент, 3 курс бакалавриата*

*1Иркутский государственный университет,*

*химический факультет, Иркутск, Россия*

*2Всероссийский научно-исследовательский институт физико-технических и радиотехнических измерений, Иркутск, Россия*

*E-mail: lyakishevvladislavkonst@mail.ru*

В данной работе рассмотрены колебания двухатомной молекулы в рамках квантовой механики как ангармонического осциллятора с малыми значениями коэффициента ангармоничности. На основе общеизвестных моделей квантового гармонического осциллятора создана новая модель с переменным значением силовой константы молекулы $~$, зависящим от колебательного квантового числа n и коэффициента ангармоничности $x\_{e}$ (что являлось целью работы). Идеей работы является принятие значения силовой константы $~$ молекулы переменным, зависящим от энергетического состояния молекулы (по аналогии с классической механикой и сопротивлением материалов, где коэффициент жёсткости троса, жгута, стержня может изменяться при его деформации).

В качестве методов в работе использованы аппарат математического анализа и функция потенциальной энергии электростатического поля, предложенная американским физиком Морзе.

Математический анализ данной модели подтвердил её физическую состоятельность и соответствие необходимым физическим критериям.

Из условия максимума энергии колебательного движения найдено наибольшее возможное значение колебательного квантового числа n и с его помощью оценена энергия диссоциации молекулы.

Также найдена разность между энергиями соседних уровней и показано, что с ростом n колебательные уровни сходятся. Полученная формула разности энергий двух последовательных переходов совпадает с аналогичной общеизвестной формулой для ангармонического осциллятора.

Теоретические исследования колебательных процессов в микромире являются весьма актуальными для физической и квантовой химии, спектроскопии, молекулярной физики, квантовой механики.