

NATIONAL RESEARCH
UNIVERSITY

Майнор "Мир глазами физиков"

Весна 2019

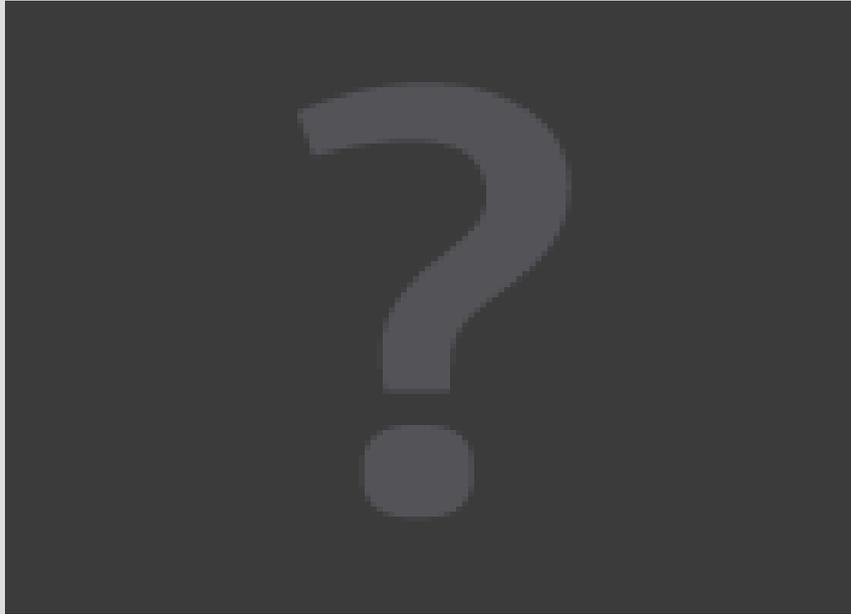
Введение в квантовую физику

Лекция 10:

Атомы и молекулы.

Часть 1. Момент импульса и спин в квантовой механике.

Момент импульса в физике



https://www.youtube.com/watch?v=_EZiw_a8B5A

$$\vec{L} = \vec{r} \times \vec{p} = \begin{pmatrix} y p_z - z p_y \\ -x p_z + z p_x \\ x p_y - y p_x \end{pmatrix}$$

$$\frac{d\vec{L}}{dt} = \vec{T} = \vec{r} \times \vec{F}$$

В замкнутой системе
момент импульса –
сохраняющаяся
величина

Специфика момента импульса в квантовой физике

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}$$

Но все компоненты импульса и
координаты нельзя одновременно
измерить!!!

Специфика момента импульса в квантовой физике

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x}$$

Но все компоненты импульса и координаты нельзя одновременно измерить!!!

$$K = \sum \frac{mV^2}{2} = \frac{1}{2} \sum mr^2 \Omega^2 = \frac{I \Omega^2}{2} = \frac{L^2}{2I}$$

Квадрат момента импульса связан с другой сохраняющейся величиной – энергией...

Специфика момента импульса в квантовой физике

$$\hat{L}_z \Psi = \hbar m \Psi$$
$$\hat{L}^2 \Psi = \hbar^2 l(l+1) \Psi$$

Можно найти такие функции (т.н. сферические функции), которые одновременно собственные функции операторов проекции момента импульса и полного квадрата момента импульса

Специфика момента импульса в квантовой физике

$$\hat{L}_z \Psi = \hbar m \Psi$$
$$\hat{L}^2 \Psi = \hbar^2 l(l+1) \Psi$$

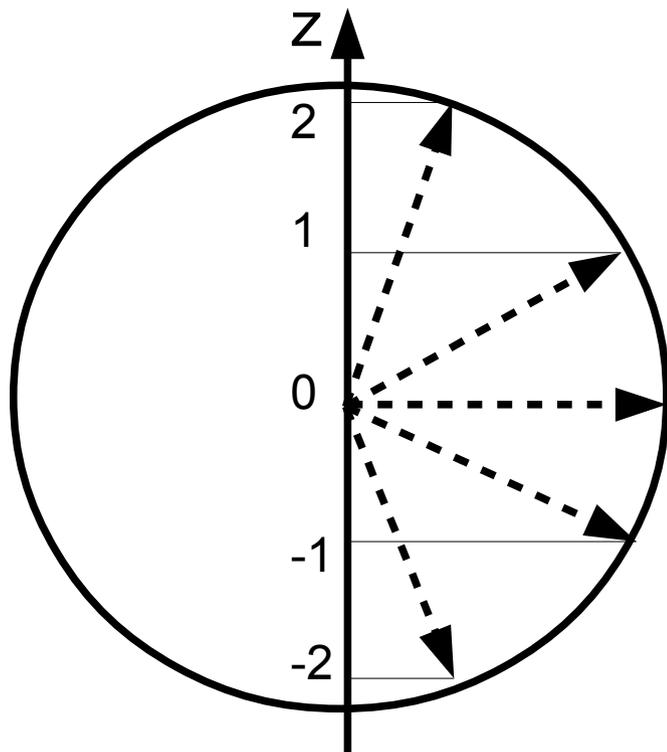
Можно найти такие функции (т.н. сферические функции), которые одновременно собственные функции операторов проекции момента импульса и полного квадрата момента импульса

- Длина вектора (под «длиной» имеется в виду максимально возможная проекция на заданное направление) момента импульса составляет целое или полуцелое число нормированных констант Планка \hbar .
- Если длина вектора момента импульса равна $N \hbar$, то проекция момента импульса на произвольное направление может принимать одно из следующих $(2N+1)$ значений: $L_z = \{-N \hbar, (-N+1) \hbar, \dots, (N-1) \hbar, N \hbar\}$.
- Если длина вектора момента импульса равна $N \hbar$, то среднее значение квадрата момента импульса $L^2 = \hbar^2 N(N+1)$ (при этом получается, что $\sqrt{L^2} > \max L_z$!)

Специфика момента импульса в квантовой физике

$$\hat{L}_z \Psi = \hbar m \Psi$$
$$\hat{L}^2 \Psi = \hbar^2 l(l+1) \Psi$$

Можно найти такие функции (т.н. сферические функции), которые одновременно собственные функции операторов проекции момента импульса и полного квадрата момента импульса

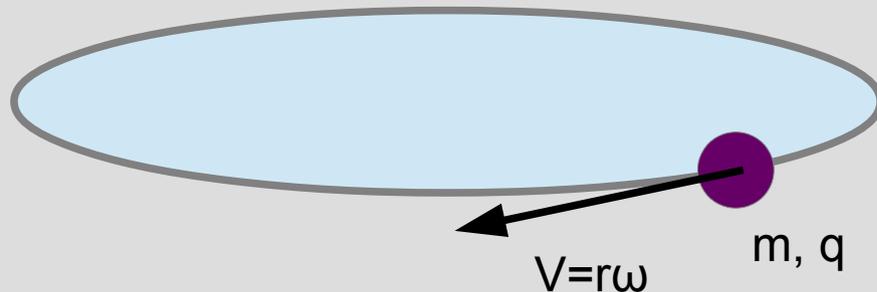


имеется в виду максимально возможная проекция на ось импульса составляет целое или полуцелое число кванта \hbar .

Если момент импульса равен $N\hbar$, то проекция момента импульса может принимать одно из следующих значений $\{ -N\hbar, \dots, (N-1)\hbar, N\hbar \}$.

Если момент импульса равен $N\hbar$, то среднее значение квадрата проекции импульса равно $(N+1)\hbar^2$ (при этом получается, что $\sqrt{\overline{L^2}} > \max L_z$!)

Гиромагнитное отношение



$$L = m \omega r^2$$

$$M = I S = q \frac{\omega}{2\pi} \pi r^2 = q \omega r^2 / 2$$

$$\gamma_0 = \frac{M}{L} = \frac{1}{2} \frac{q}{m}$$

Не зависит от
траектории!

Квантование проекции магнитного момента

$$\mu_z = g \mu_B j_z$$

$$\mu_B = \frac{e \hbar}{2 m_e} = 0.92 \times 10^{-23} \text{ Дж/Тл} \quad \text{магнетон Бора}$$

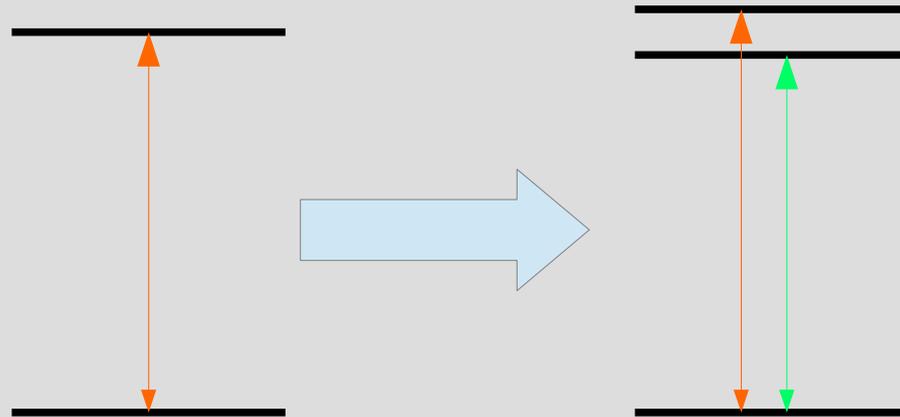
1. Если магнитный момент $\vec{\mu}$ помещён в магнитное поле \vec{B} , то энергия, связанная с ориентацией этого момента (с поворотом «стрелки компаса») равна $E = -(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$.
2. Если магнитный момент $\vec{\mu}$ направлен вдоль силовых линий магнитного поля, но находится в неоднородном магнитном поле, то возникает сила «втягивающая» магнитный момент в сильное поле, равная $F = \mu_z \frac{dB}{dz}$.

Эффект Зеемана.



$$\mu_z = g \mu_B j_z$$
$$E = -(\vec{\mu} \cdot \vec{B})$$

расщепление
уровней энергии в
магнитном поле

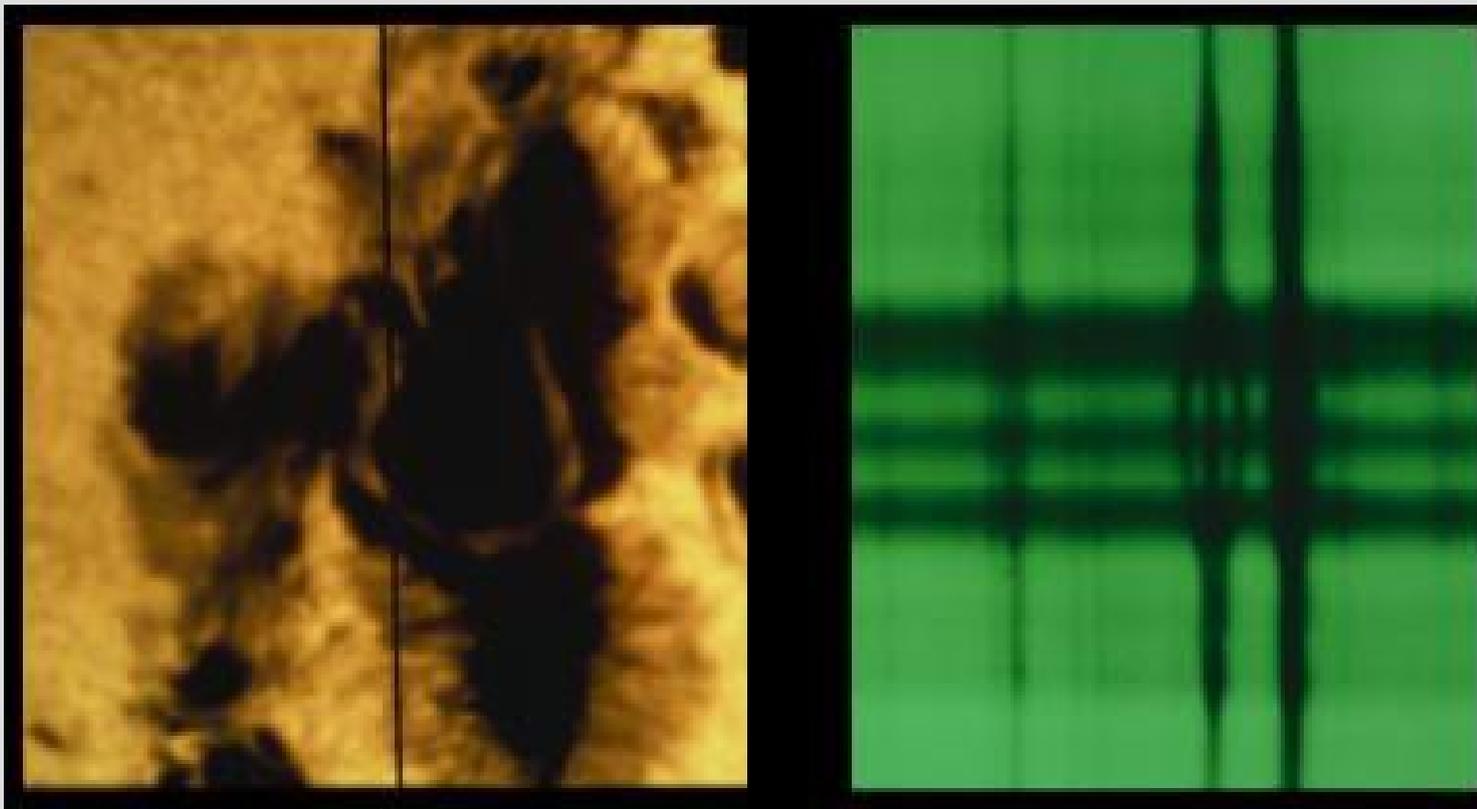


расщепление
спектральных линий



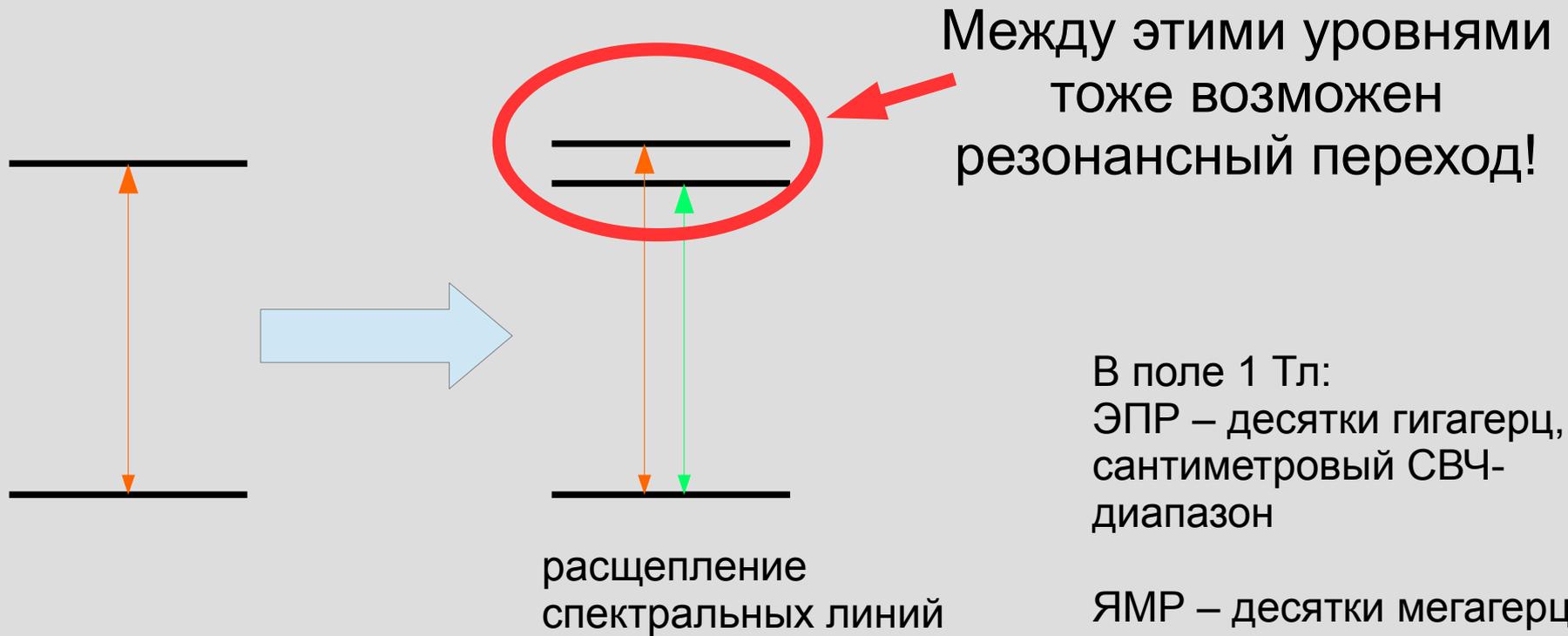
Зееман, 1902

Эффект Зеемана на Солнце



Поле в солнечном пятне примерно 0.4 Тл

ЯМР, ЭПР

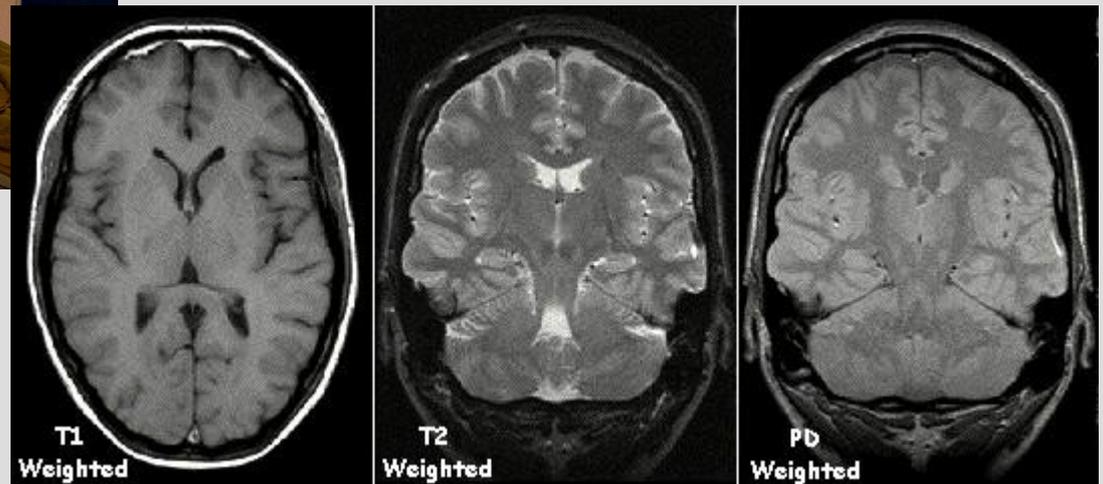


Раби, 1944

ЯМР-томография



Слева: Современный ЯМР-томограф с полем до 3 Тл. Справа: примеры ЯМР-томограмм мозга с разной обработкой сигнала.



Часть 2. Квантовая теория строения атома.

Полу-классическая модель Бора

$$2\pi r_n = n\lambda = \frac{nh}{p_n}$$

$$\frac{p_n^2}{m r_n} = k \frac{e^2}{r_n^2}$$

Применима только для “высоких” уровней, для $n=1$ говорить о почти-классических орбитах нельзя по соотношению неопределенностей

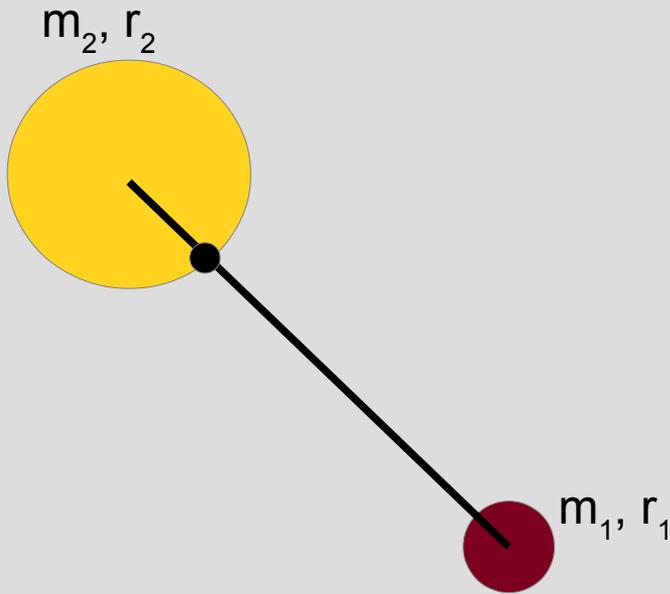
Но: правильно даёт масштабы энергий и длин и описывает серии атома водорода и характеристическое излучение

$$r_n = \frac{(n\hbar)^2}{k m e^2}$$

$$p_n = \frac{k m e^2}{n\hbar}$$

$$E_n = \frac{p_n^2}{2m} - k \frac{e^2}{r_n} = -\frac{1}{2} \frac{k m e^4}{\hbar^2} \frac{1}{n^2} = -Ry \frac{1}{n^2}$$

Приведённая масса



$$r_{1,2} = \frac{m_{2,1}}{m_1 + m_2} r$$

$$m_1 \omega^2 r_1 = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

$$m_2 \omega^2 r_2 = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

$$\frac{m_1 m_2}{m_1 + m_2} \omega^2 r = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

сведено к задаче одного тела с приведённой массой

$$\mu \omega^2 r = G \frac{m_1 m_2}{r^2}$$

Приведённая масса в квантовой задаче

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(r_1 - r_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + U(x_1 - x_2)$$

Приведённая масса в квантовой задаче

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(r_1 - r_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + U(x_1 - x_2)$$

$$X_0 = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2}$$

$$x = x_1 - x_2$$

Приведённая масса в квантовой задаче

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(r_1 - r_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + U(x_1 - x_2)$$

$$X_0 = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \quad x = x_1 - x_2$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial X_0} \times \frac{\partial X_0}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x} \times \frac{\partial x}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_0} + \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} + 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_0 \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Приведённая масса в квантовой задаче

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(r_1 - r_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + U(x_1 - x_2)$$

$$X_0 = \frac{m_1 x_1 + m_2 x_2}{m_1 + m_2} \quad x = x_1 - x_2$$

$$\frac{\partial}{\partial x_1} = \frac{\partial}{\partial X_0} \times \frac{\partial X_0}{\partial x_1} + \frac{\partial}{\partial x} \times \frac{\partial x}{\partial x_1} = \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial}{\partial X_0} + \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} + 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_0 \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} - 2 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_0 \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Приведённая масса в квантовой задаче

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\hat{p}_2^2}{2m_2} + U(r_1 - r_2) = -\frac{\hbar^2}{2m_1} \frac{\partial^2}{\partial x_1^2} - \frac{\hbar^2}{2m_2} \frac{\partial^2}{\partial x_2^2} + U(x_1 - x_2)$$

тоже сводится к свободному движению центра масс и движению частицы с приведённой массой

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2(m_1 + m_2)} \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} - \frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + U(x)$$

$$\Psi(X_0, x) = \phi(X_0) \xi(x)$$

$$\frac{\partial}{\partial X_0} + \frac{\partial}{\partial x}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_1^2} = \left(\frac{m_1}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} + 2 \frac{m_1}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_0 \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

$$\frac{\partial^2}{\partial x_2^2} = \left(\frac{m_2}{m_1 + m_2} \right)^2 \frac{\partial^2}{\partial X_0^2} - 2 \frac{m_2}{m_1 + m_2} \frac{\partial^2}{\partial X_0 \partial x} + \frac{\partial^2}{\partial x^2}$$

Уравнение Шредингера для атома водорода

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - k \frac{e^2}{r} \right] \psi = E \psi$$



приведенная масса электрона

$$m = \frac{m_e M_p}{m_e + M_p} \approx m_e \left(1 - \frac{m_e}{M_p} \right)$$

Уравнение Шредингера для атома водорода

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - k \frac{e^2}{r} \right] \psi = E \psi$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \underbrace{\left[\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial \psi}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right]}_{-\hat{l}^2} + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + k \frac{e^2}{r} \right] \psi = 0$$

Уравнение Шредингера для атома водорода

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - k \frac{e^2}{r} \right] \psi = E \psi$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial \psi}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + k \frac{e^2}{r} \right] \psi = 0$$

$-\hat{l}^2$

$$\psi(r, \Theta, \phi) = R(r) \times f(\Theta, \phi)$$

Уравнение Шредингера для атома водорода

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) - k \frac{e^2}{r} \right] \psi = E \psi$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \left[\frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left(\sin \Theta \frac{\partial \psi}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 \psi}{\partial \phi^2} \right] + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + k \frac{e^2}{r} \right] \psi = 0$$

$-\hat{l}^2$

$$\psi(r, \Theta, \phi) = R(r) \times f(\Theta, \phi)$$

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + k \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Уравнение Шредингера для атома водорода

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} \right. \right.$$

Значение энергии стационарного состояния может зависеть от орбитального квантового числа l , но точно не зависит от проекции момента .

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial \psi}{\partial r} \right)$$

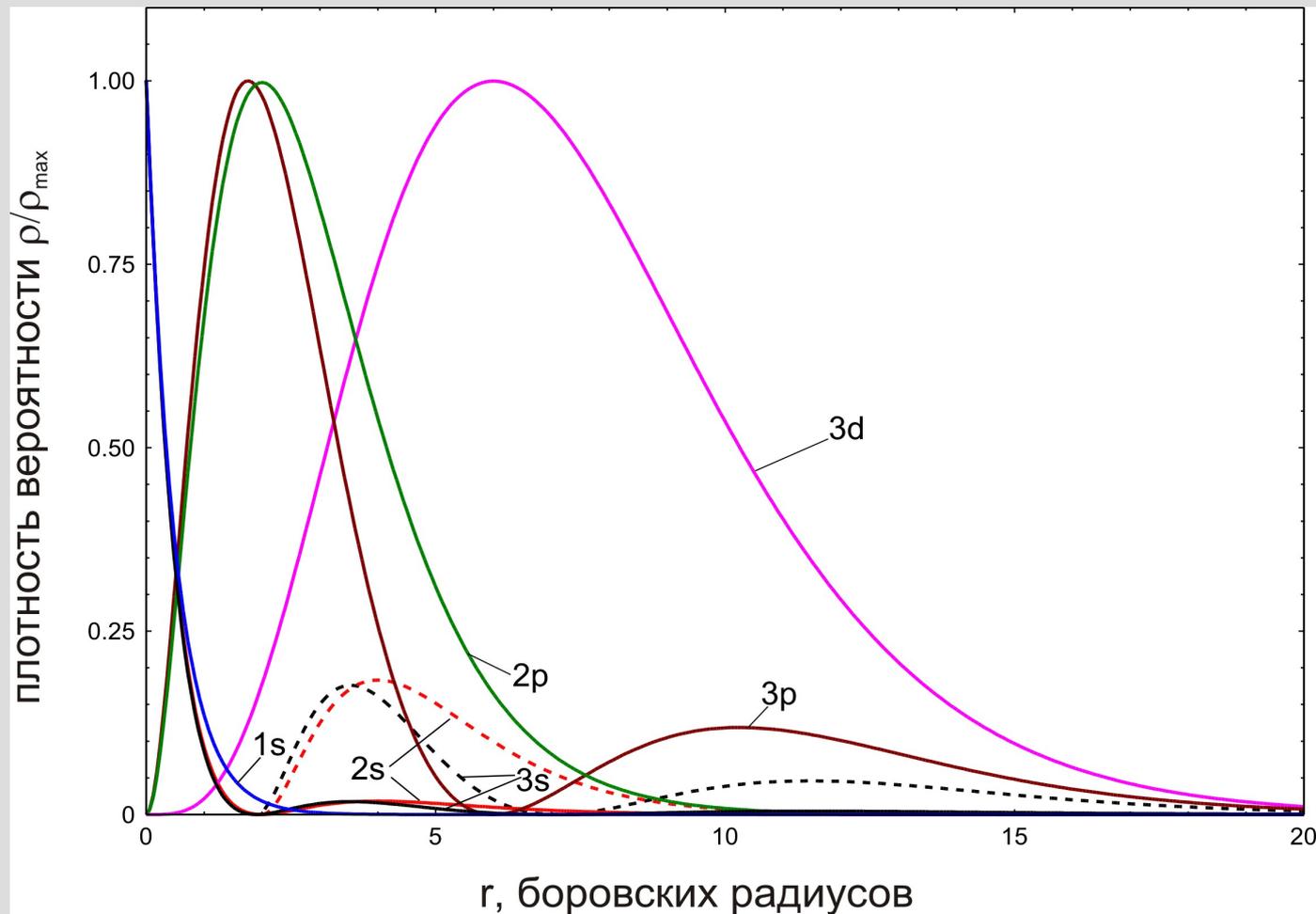
При точном решении оказывается, что энергии всех состояний в атоме водорода могут быть описаны одним-единственным главным квантовым числом n

$$\psi(r, \Theta, \phi) =$$

$$E_n = -Ry \frac{1}{n^2} \quad l \leq (n-1)$$

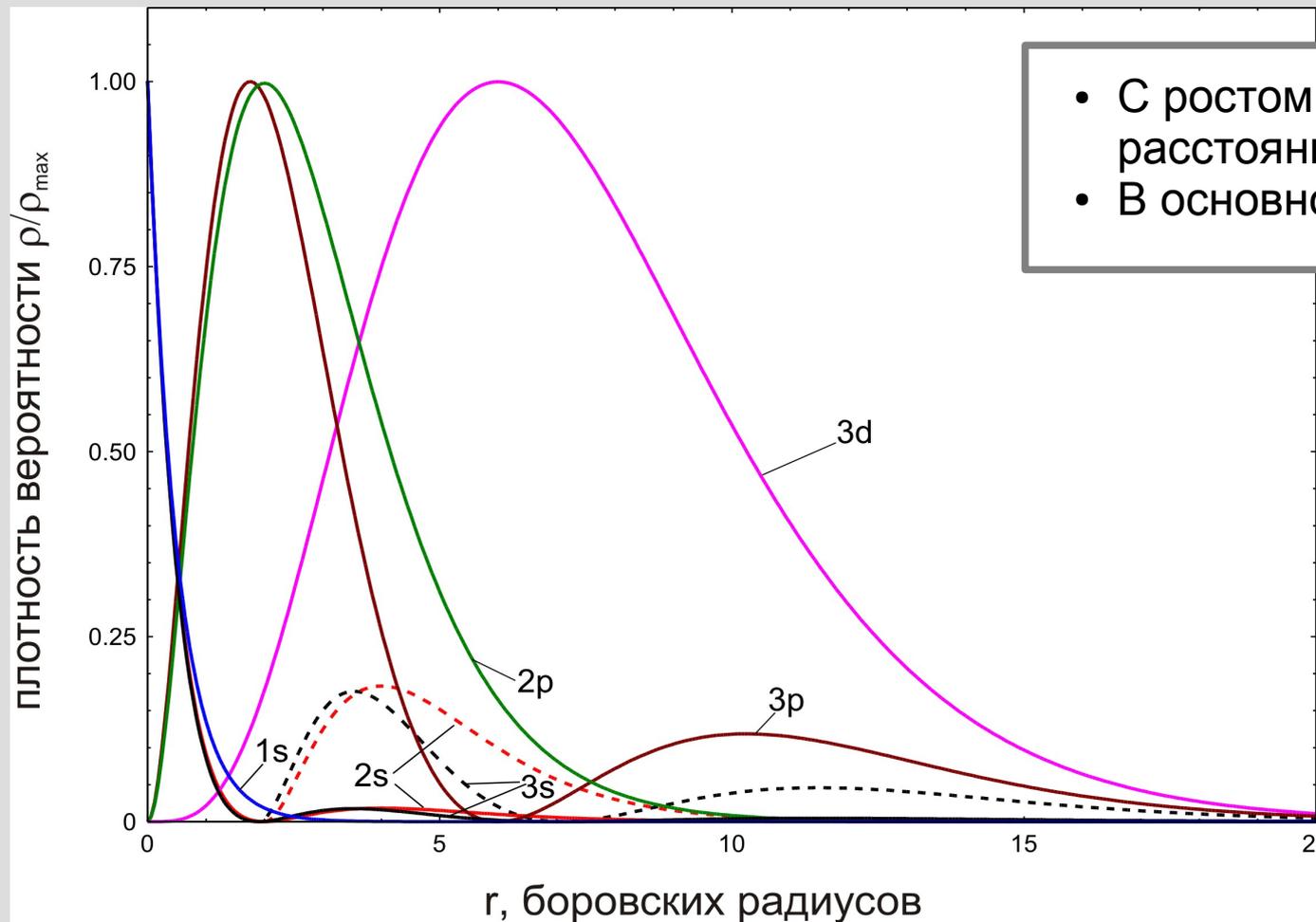
$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial R}{\partial r} \right) + \frac{2m}{\hbar^2} \left[E + k \frac{e^2}{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \frac{l(l+1)}{r^2} \right] R = 0$$

Вид волновых функций атома водорода (радиальная часть)



Зависимость плотности вероятности обнаружения электрона от расстояния до ядра в водородоподобном атоме для разных электронных состояний. Плотность вероятности на рисунке нормирована на максимальное для данного состояния значение для наглядности. Для анизотропных p и d состояний подразумевается удаление от центра по произвольному зафиксированному радиусу. Пунктирными кривыми показаны десятикратно увеличенные фрагменты графиков для $2s$ (красный) и $3s$ (чёрный) состояний. Вычисление по формулам из Ландау, Лифшиц, "Квантовая механика" (т.3 курса)

Вид волновых функций атома водорода (радиальная часть)



- С ростом n растёт “среднее расстояние” от ядра
- В основном состоянии ($1s$) $L=0$

Зависимость плотности вероятности обнаружения электрона от расстояния до ядра в водородоподобном атоме для разных электронных состояний. Плотность вероятности на рисунке нормирована на максимальное для данного состояния значение для наглядности. Для анизотропных p и d состояний подразумевается удаление от центра по произвольному зафиксированному радиусу. Пунктирными кривыми показаны десятикратно увеличенные фрагменты графиков для $2s$ (красный) и $3s$ (чёрный) состояний. Вычисление по формулам из Ландау, Лифшиц, “Квантовая механика” (т.3 курса)

Опыт Штерна-Герлаха



Расщепление пучка нейтральных атомов серебра ($4d^{10} 5s^1$) на ДВЕ компоненты: экспериментальное свидетельство того, что в s -состоянии $L=0$ (а не $L=1$ как в модели Бора), но есть собственный момент импульса (спин) электрона.



Штерн, 1943

https://en.wikipedia.org/wiki/Stern-Gerlach_experiment; [https://de.wikipedia.org/wiki/Otto_Stern_\(Physiker\)](https://de.wikipedia.org/wiki/Otto_Stern_(Physiker)); https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1943/stern-lecture.html

Вид волновых функций в атоме водорода (угловая часть)

	$s (l=0)$	$p (l=1)$			$d (l=2)$					$f (l=3)$						
	$m=0$	$m=0$	$m=\pm 1$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=0$	$m=\pm 1$		$m=\pm 2$		$m=\pm 3$	
	s	p_z	p_x	p_y	d_{z^2}	d_{xz}	d_{yz}	d_{xy}	$d_{x^2-y^2}$	f_{z^3}	f_{xz^2}	f_{yz^2}	f_{xyz}	$f_z(x^2-y^2)$	$f_x(x^2-3y^2)$	$f_y(3x^2-y^2)$
n=1																
n=2																
n=3																
n=4																
n=5									
n=6				
n=7	

Схематическое изображение пространственной симметрии волновых функций электрона в водородоподобном атоме. Цвет показывает знак волновой функции.
[wikipedia.org, Atomic orbitals, , http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital](http://en.wikipedia.org/wiki/Atomic_orbital)

Структура таблицы Менделеева

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	
↓ Period																			
1	1 H																		2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne	
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar	
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr	
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe	
6	55 Cs	56 Ba	57 La *	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn	
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac *	104 Rf *	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og	
				* 58 Ce	* 59 Pr	* 60 Nd	* 61 Pm	* 62 Sm	* 63 Eu	* 64 Gd	* 65 Tb	* 66 Dy	* 67 Ho	* 68 Er	* 69 Tm	* 70 Yb	* 71 Lu		
				* 90 Th	* 91 Pa	* 92 U	* 93 Np	* 94 Pu	* 95 Am	* 96 Cm	* 97 Bk	* 98 Cf	* 99 Es	* 100 Fm	* 101 Md	* 102 No	* 103 Lr		

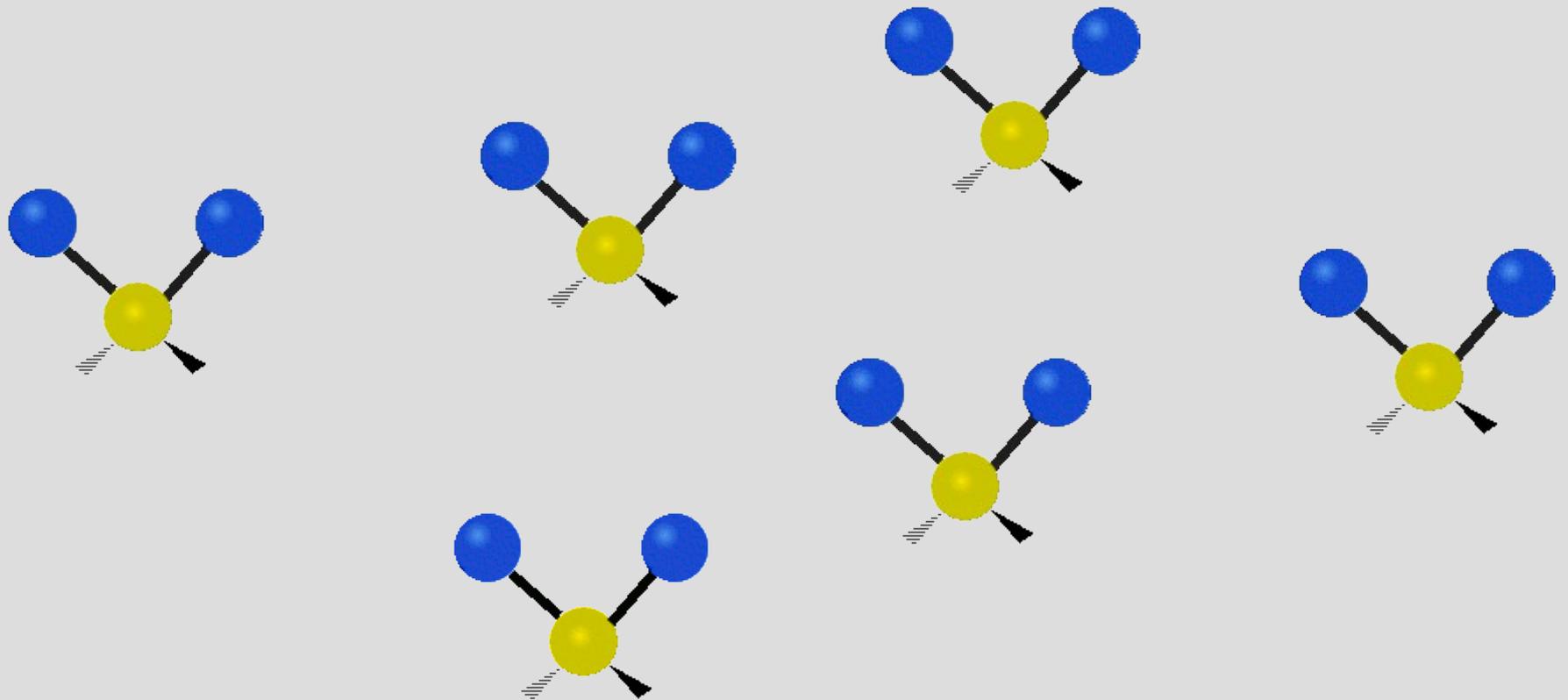
Структура таблицы Менделеева

Group →	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18
Period ↓																		
1	1 H																	2 He
2	3 Li	4 Be											5 B	6 C	7 N	8 O	9 F	10 Ne
3	11 Na	12 Mg											13 Al	14 Si	15 P	16 S	17 Cl	18 Ar
4	19 K	20 Ca	21 Sc	22 Ti	23 V	24 Cr	25 Mn	26 Fe	27 Co	28 Ni	29 Cu	30 Zn	31 Ga	32 Ge	33 As	34 Se	35 Br	36 Kr
5	37 Rb	38 Sr	39 Y	40 Zr	41 Nb	42 Mo	43 Tc	44 Ru	45 Rh	46 Pd	47 Ag	48 Cd	49 In	50 Sn	51 Sb	52 Te	53 I	54 Xe
6	55 Cs	56 Ba	57 La *	72 Hf	73 Ta	74 W	75 Re	76 Os	77 Ir	78 Pt	79 Au	80 Hg	81 Tl	82 Pb	83 Bi	84 Po	85 At	86 Rn
7	87 Fr	88 Ra	89 Ac *	104 Rf	105 Db	106 Sg	107 Bh	108 Hs	109 Mt	110 Ds	111 Rg	112 Cn	113 Nh	114 Fl	115 Mc	116 Lv	117 Ts	118 Og
				58 Ce	59 Pr	60 Nd	61 Pm	62 Sm	63 Eu	64 Gd	65 Tb	66 Dy	67 Ho	68 Er	69 Tm	70 Yb	71 Lu	
				90 Th	91 Pa	92 U	93 Np	94 Pu	95 Am	96 Cm	97 Bk	98 Cf	99 Es	100 Fm	101 Md	102 No	103 Lr	

Необычные “атомы”

- Протониум
- Антиводород
- Позитрониум
- Мюониум
- Мюонный мезоатом
- Донорная примесь в полупроводнике

Часть 3. Немного про молекулы.



Двухатомные молекулы

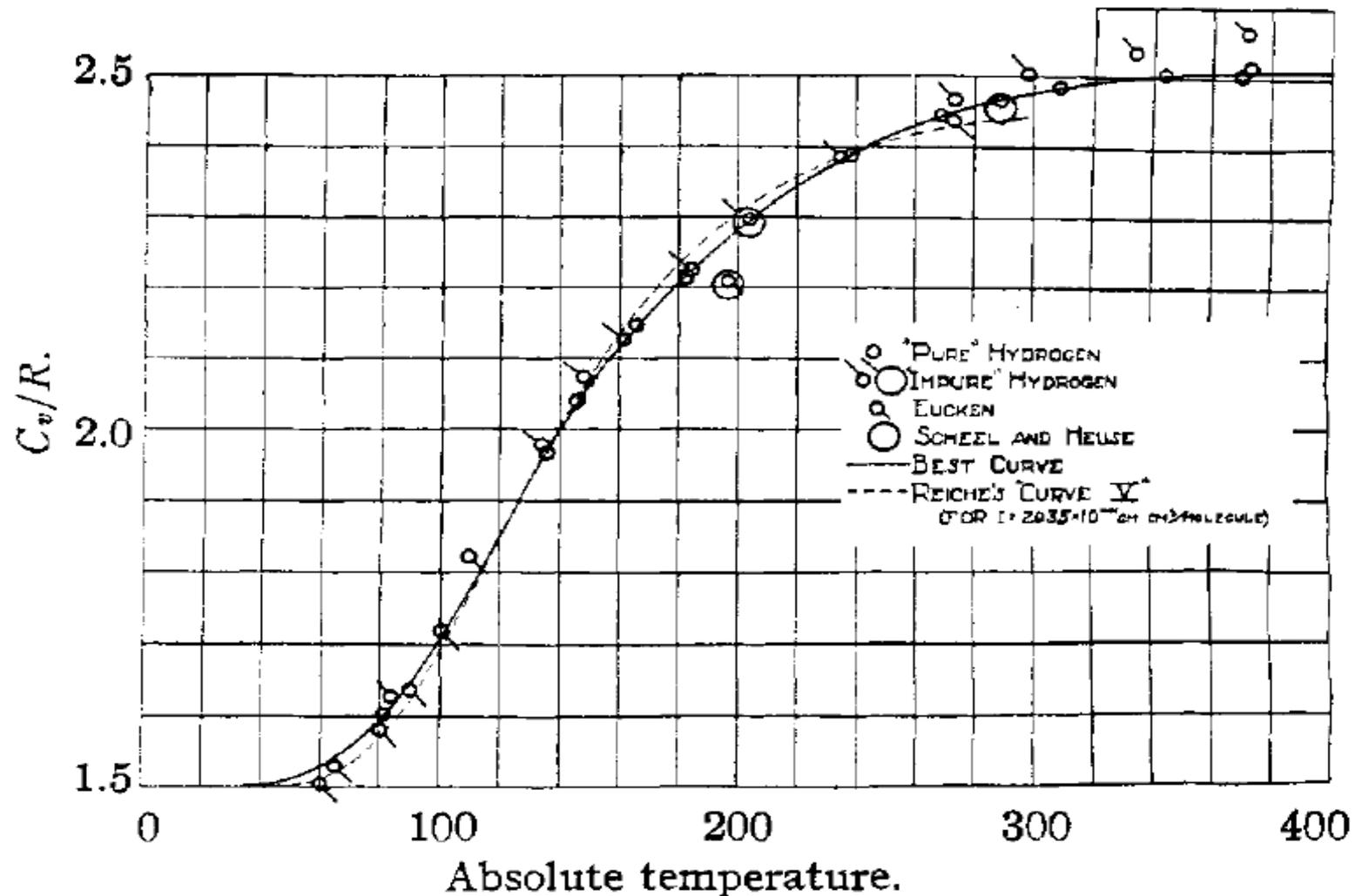


Fig. 3.—Specific heat of hydrogen.

Колебательные степени свободы

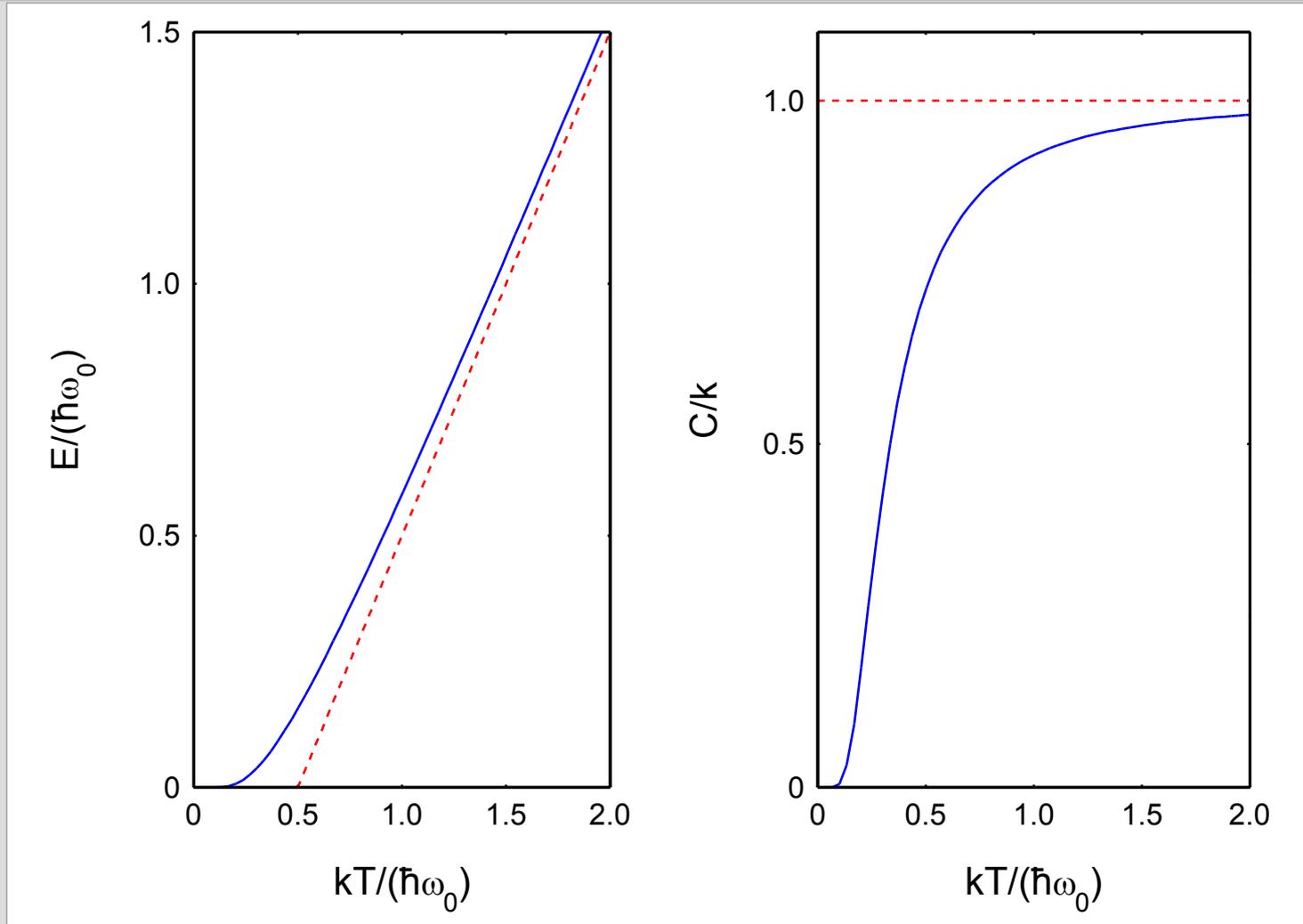
$$\begin{aligned}\bar{E} &= A \sum \hbar \omega_0 n \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0 n}{kT}\right) = -A \frac{d}{d\left(\frac{1}{kT}\right)} \sum \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0 n}{kT}\right) = \\ &= -A \frac{d}{d\left(\frac{1}{kT}\right)} \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right)} = A \hbar \omega_0 \frac{\exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right)\right)^2} = \frac{\hbar \omega_0}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right) - 1}\end{aligned}$$

Колебательные степени свободы

$$\begin{aligned}\bar{E} &= A \sum \hbar \omega_0 n \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0 n}{kT}\right) = -A \frac{d}{d\left(\frac{1}{kT}\right)} \sum \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0 n}{kT}\right) = \\ &= -A \frac{d}{d\left(\frac{1}{kT}\right)} \frac{1}{1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right)} = A \hbar \omega_0 \frac{\exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right)}{\left(1 - \exp\left(-\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right)\right)^2} = \frac{\hbar \omega_0}{\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right) - 1}\end{aligned}$$

$$C = \frac{(\hbar \omega_0)^2}{kT^2} \cdot \frac{\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right)}{\left(\exp\left(\frac{\hbar \omega_0}{kT}\right) - 1\right)^2}$$

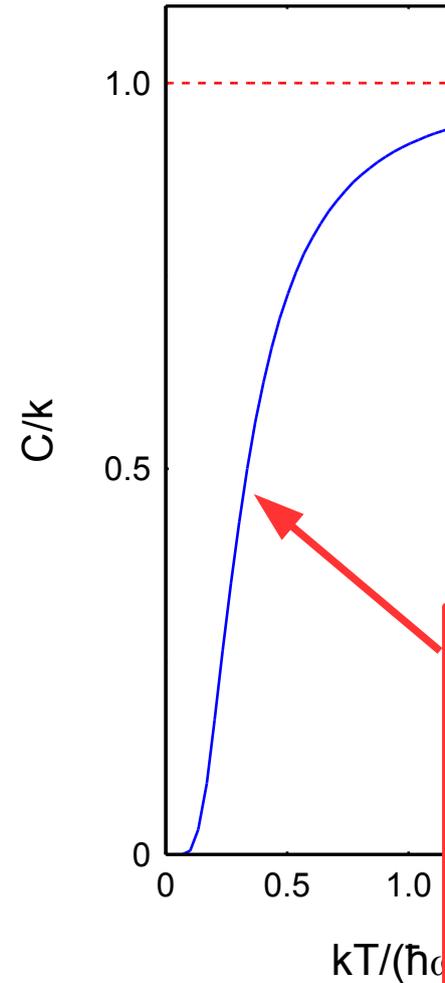
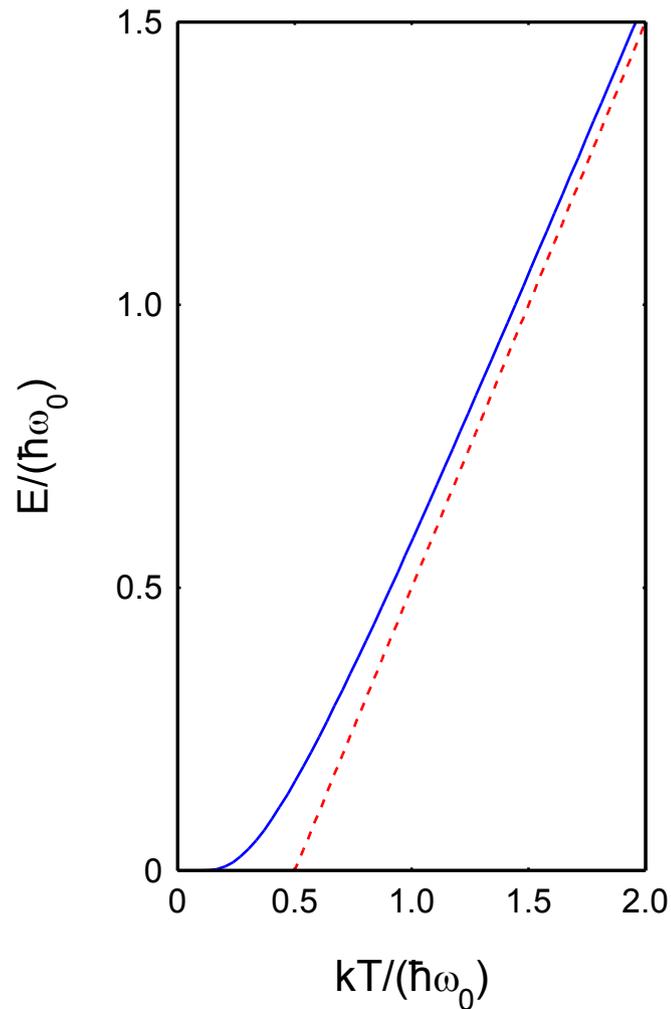
Колебательные степени свободы



Средняя энергия и теплоёмкость гармонического осциллятора как функция температуры.

Колебательные степени свободы

результат
классической
теоремы о
равнораспределении



“выключение”
колебательной
степени свободы при

$$k_B T \simeq \hbar \omega_0$$

Средняя энергия и теплоёмкость гармонического осциллятора как функция температуры.

Вращательная степень свободы

$$E = \frac{L^2}{2I}$$

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$



$$I \sim ma^2$$

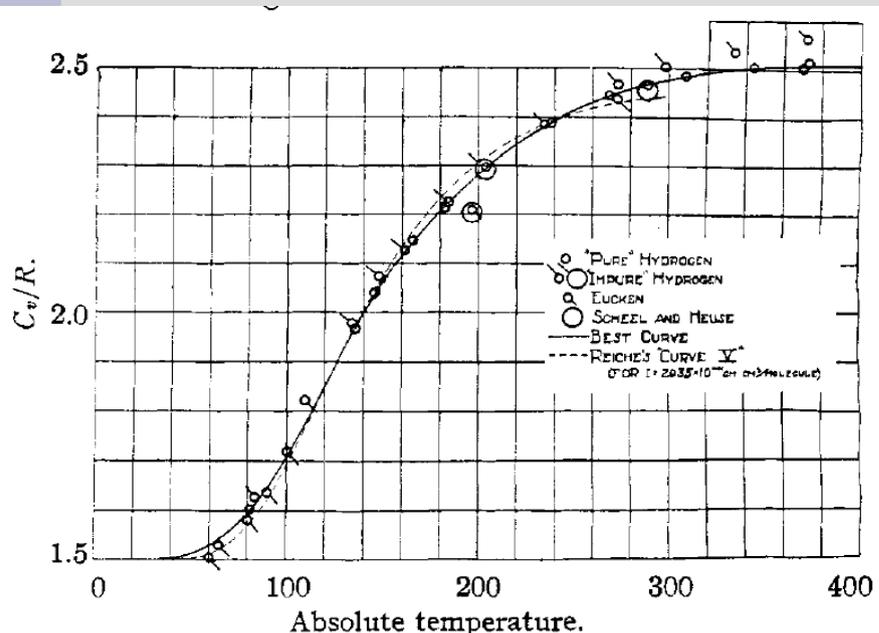


Fig. 3.—Specific heat of hydrogen.

Вращательная степень свободы

$$E = \frac{L^2}{2I}$$

$$E_l = \frac{\hbar^2}{2I} l(l+1)$$



$$I \sim ma^2$$

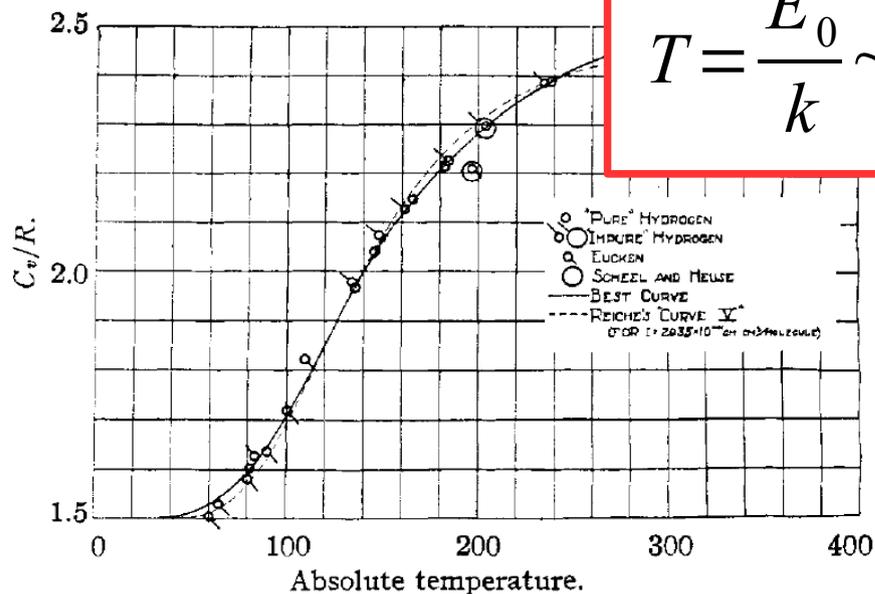


Fig. 3.—Specific heat of hydrogen.

$$T = \frac{E_0}{k} \sim \frac{\hbar^2}{kma^2} = \frac{10^{-68}}{1.38 \cdot 10^{-23} \cdot 1.7 \cdot 10^{-27} \cdot 10^{-20}} \sim 50\text{K}$$

Задачи домашнего задания

Задача 1.

Вычислите разницу энергий ионизации в атомах водорода и дейтерия?

Задача 2.

В угарном газе CO из-за возбуждения колебаний молекул наблюдается пик поглощения инфракрасного излучения на длине волны $\lambda = 4,61 \text{ мкм}$. Определите амплитуду A_0 нулевых колебаний молекулы CO.