

# КАФЕДРА ОБЩЕЙ ФИЗИКИ

## ЦИКЛ ЛЕКЦИЙ

### НЕКОТОРЫЕ ВОПРОСЫ СОВРЕМЕННОЙ ФИЗИКИ

Лекции читают сотрудники кафедры общей физики

Главная физическая аудитория. Четверг 15-30



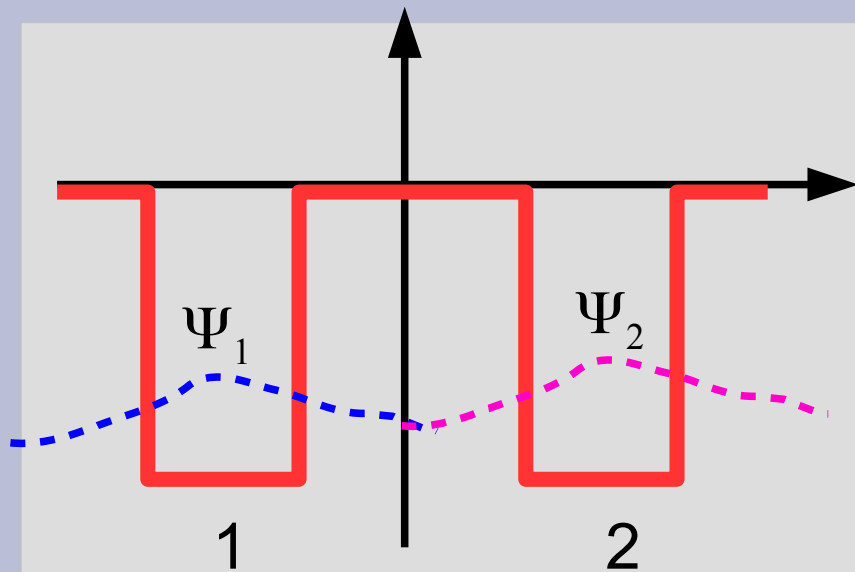
11 октября	Ядерный магнитный резонанс. Профессор А. В. Максимычев.
18 октября	Магнитные явления. Постоянные магниты. Доцент А. В. Гуденко
25 октября	Лазеры. Профессор А. И. Миланч
1 ноября	Ускорители. Доцент С. В. Виноградов
8 ноября	Приемники электромагнитного излучения ближнего инфракрасного и видимого диапазонов. Профессор О.И.Смирнова
15 ноября	Шаровые молнии. Профессор Ю. Р. Аланакян
22 ноября	Получение и применение низких температур и высоких магнитных полей в физике. Доцент В. Н. Глазков
29нояб.	Физико-технические основы современной безопасности. Профессор А.В.Кубышкин

**К лекции 5. Задача о связанных ямах: туннельное расщепление, переходы между состояниями, квантовые осцилляции.**

**Лекция 6. Момент импульса в квантовой механике. Элементарная теория атома водорода. Колебательные и вращательные уровни энергии.**

# К лекции 5

## Связанные ямы



Две одинаковые ямы, достаточно далеко друг от друга (вероятность туннелирования есть, но мала)

Без учёта туннелирования

$$\hat{H}_0 \Psi_{1,2} = E_0 \Psi_{1,2}$$

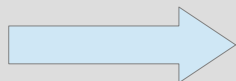
Модельный учёт туннелирования:  
оператор туннелирования

$$\hat{T} \Psi_{1,2} = \hbar T \Psi_{2,1}$$

Задача на поиск собственных функций:  $(\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi = E \Psi$

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 \pm \Psi_2)$$

туннельное расщепление  
уровня энергии



$$E^{(\pm)} = E_0 \pm \hbar T$$

$$i \hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi$$

$$\Psi(t=0) = \Psi_1$$

изначально частица  
локализована в левой яме  
(несобственное состояние!)

$$\begin{aligned} \Psi &= \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi^{(+)} e^{-iE^{(+)}t/\hbar} + \frac{1}{\sqrt{2}} \Psi^{(-)} e^{-iE^{(-)}t/\hbar} = \\ &= e^{-iE_0t/\hbar} [\Psi_1 \cos(Tt) - \Psi_2 \sin(Tt)] \end{aligned}$$

Вероятности обнаружить частицу в  
разных ямах осциллируют:

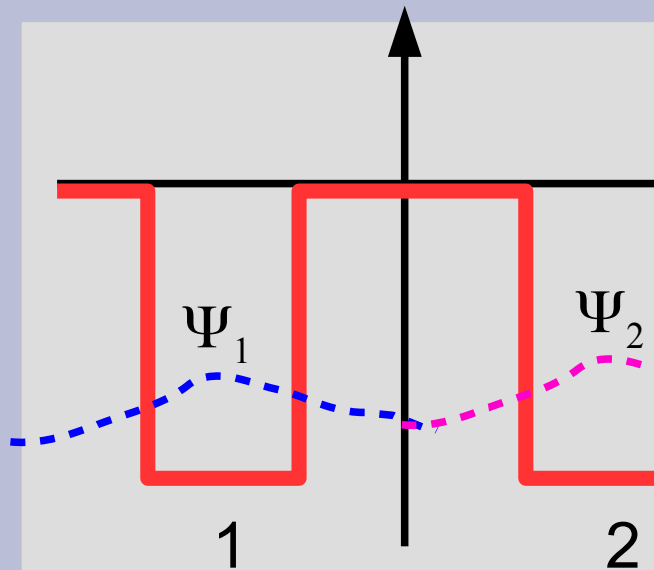
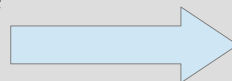
$$\begin{aligned} w_1 &= \cos^2(Tt) \\ w_2 &= \sin^2(Tt) \end{aligned}$$

Общее утверждение:  
если изначально система  
(частица) не в собственном  
состоянии, то наблюдаемое  
состояние осциллирует между  
«спутанными» состояниями

$$\Psi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}} (\Psi_1 \pm \Psi_2)$$

$$E^{(\pm)} = E_0 \pm \hbar T$$

туннельное расщепление  
уровня энергии

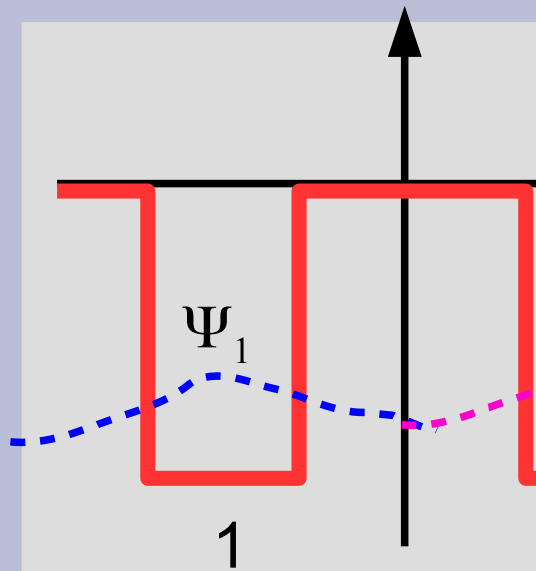


Задача на поиск собствен

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = (\hat{H}_0 + \hat{T}) \Psi$$

Общие для квантовой физики  
закономерности:

- 1) Вырождение уровней энергии **снимается** взаимодействием, «перепутывающим» вырожденные состояния
- 2) При включении взаимодействия, «перепутывающего» два состояния **возникают переходы** между этими состояниями.
- 3) Находящаяся в нестационарном состоянии частица (система) **осциллирует** между «перепутанными» состояниями



Задача на поиск соб

туннельное рас  
уровня эне

ду

# Часть 1. Момент импульса в квантовой физике



<https://www.youtube.com/watch?v=DcaJQtKHm88>

$$\hat{H}_{\text{вращ}} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$
$$\hat{L} = [\vec{r} \times \hat{p}] = \begin{pmatrix} y \hat{p}_z - z \hat{p}_y \\ -x \hat{p}_z + z \hat{p}_x \\ x \hat{p}_y - y \hat{p}_x \end{pmatrix}$$

**↑?**

$$\Delta p_x \Delta x \simeq \hbar$$

# Момент импульса в квантовой физике



фрагмент кадра из  
<https://www.youtube.com/watch?v=DcaJQtKHm88>

1) Из квантования финитного движения — квадрат момента импульса должен иметь определённые значения.

2) Из-за соотношения неопределенности одновременное измерение всех трёх компонент момента импульса невозможно

3) Размерность постоянной Планка!

$$[p][x] = \text{кг м}^2/\text{с} = (\text{кг м}^2/\text{с}^2)\text{с} = \text{Дж с}$$

Момент импульса в квантовой механике принято измерять в единицах постоянной Планка «с чертой»

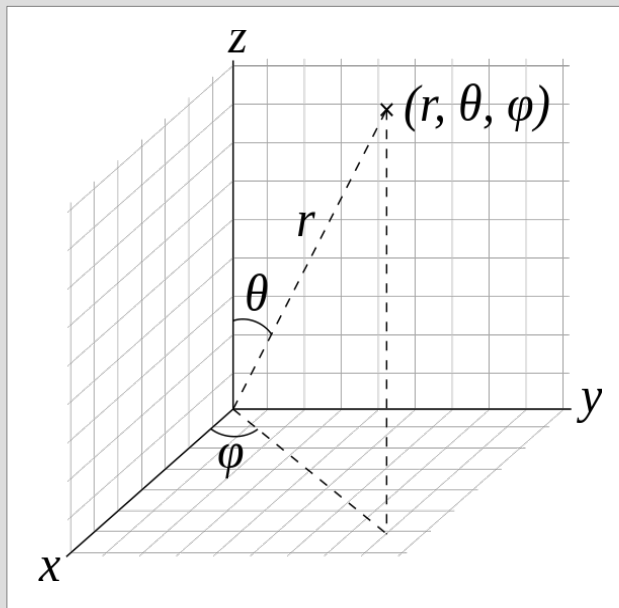
$$\hat{H}_{\text{вращ}} = \frac{\hat{L}^2}{2I}$$

$$[\hat{L}, \hat{p}] = \begin{pmatrix} y \hat{p}_z - z \hat{p}_y \\ -x \hat{p}_z + z \hat{p}_x \\ x \hat{p}_y - y \hat{p}_x \end{pmatrix}$$

$$\Delta p_x \Delta x \simeq \hbar$$



# Немного математики в сферических координатах



[https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical\\_coordinate\\_system](https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_coordinate_system)

Координаты:

$$X = r \sin \Theta \cos \phi$$

$$Y = r \sin \Theta \sin \phi$$

$$Z = r \cos \Theta$$

$$\vec{e}_r = \begin{pmatrix} \sin \Theta \cos \phi \\ \sin \Theta \sin \phi \\ \cos \Theta \end{pmatrix}, \vec{e}_\Theta = \begin{pmatrix} \cos \Theta \cos \phi \\ \cos \Theta \sin \phi \\ -\sin \Theta \end{pmatrix}, \vec{e}_\phi = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix}$$

Дифференциальные операторы:

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\Theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \Theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

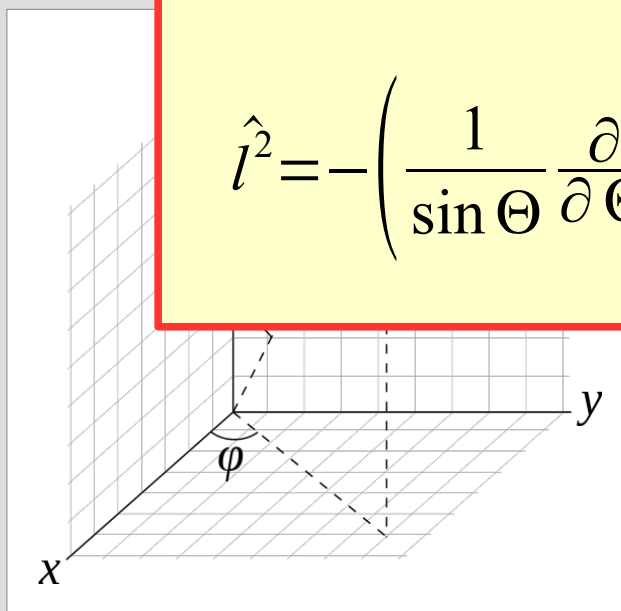
$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left( \sin \Theta \frac{\partial f}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}$$

$$\hat{L}_z = x \hat{p}_y - y \hat{p}_x = -i\hbar \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \phi}$$

«обезразмеренный» оператор

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\hat{l}^2 = - \left( \frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left( \sin \Theta \frac{\partial f}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right)$$



[https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical\\_coordinate\\_system](https://en.wikipedia.org/wiki/Spherical_coordinate_system)

$$\vec{e}_r = \begin{pmatrix} \sin \Theta \cos \phi \\ \sin \Theta \sin \phi \\ \cos \Theta \end{pmatrix}, \vec{e}_\Theta = \begin{pmatrix} \cos \Theta \cos \phi \\ \cos \Theta \sin \phi \\ -\sin \Theta \end{pmatrix}, \vec{e}_\phi = \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix}$$

Дифференциальные операторы:

$$\vec{\nabla} = \vec{e}_r \frac{\partial}{\partial r} + \vec{e}_\Theta \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial \Theta} + \vec{e}_\phi \frac{1}{r \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$\Delta f = \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial f}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2 \sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left( \sin \Theta \frac{\partial f}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2}$$

ннатах

т.е. наблюдаемые

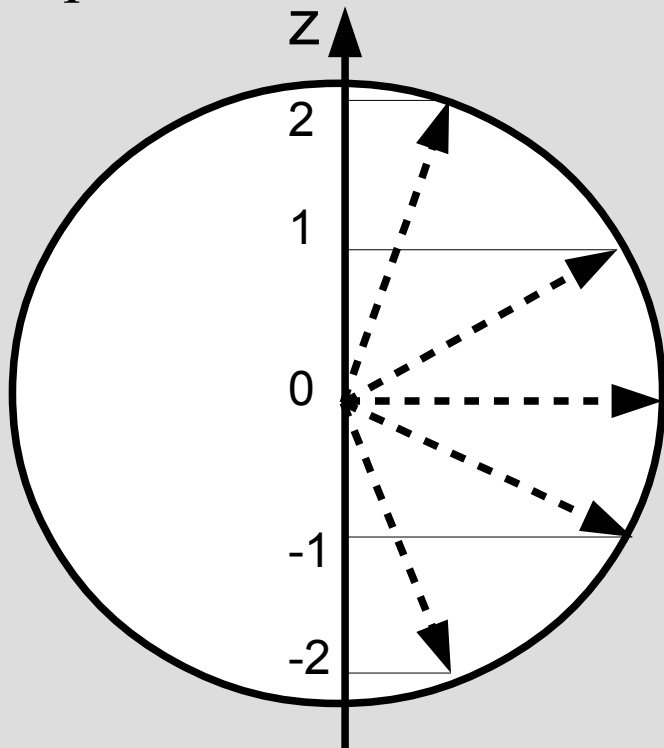
## Собственные значения проекции момента

$$\hat{l}_z = -i \frac{\partial}{\partial \phi}$$

$$-i \frac{\partial \Psi}{\partial \phi} = m \Psi$$

$$\Psi = f(r, \Theta) e^{i m \phi}$$

+ требование однозначности при повороте на  $2\pi$



$m$  — целое

возможные значения от  $-l$  до  $l$

«Векторная» модель:

- при заданной длине возможны только дискретные значения проекции на ЛЮБУЮ заданную ось
- соотношения неопределенности запрещают направление «строго вдоль  $Z$ »

## Собственные значения квадрата момента

Математика:

$$\hat{l}^2 = - \left( \frac{1}{\sin \Theta} \frac{\partial}{\partial \Theta} \left( \sin \Theta \frac{\partial f}{\partial \Theta} \right) + \frac{1}{\sin^2 \Theta} \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} \right)$$

$\hat{l}^2 \Psi = A \Psi$  решается в сферических функциях, см ЛЛ.Ш, пар.28

$$Y_{lm}(\Theta, \phi) = C_{lm} P_l^{|m|}(\cos \Theta) e^{im\phi}$$

собственные значения  $A = l(l+1)$

Понадобится

позже:

изменение при

инверсии

$$Y_{lm}(\pi - \Theta, \phi + \pi) = (-1)^l Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

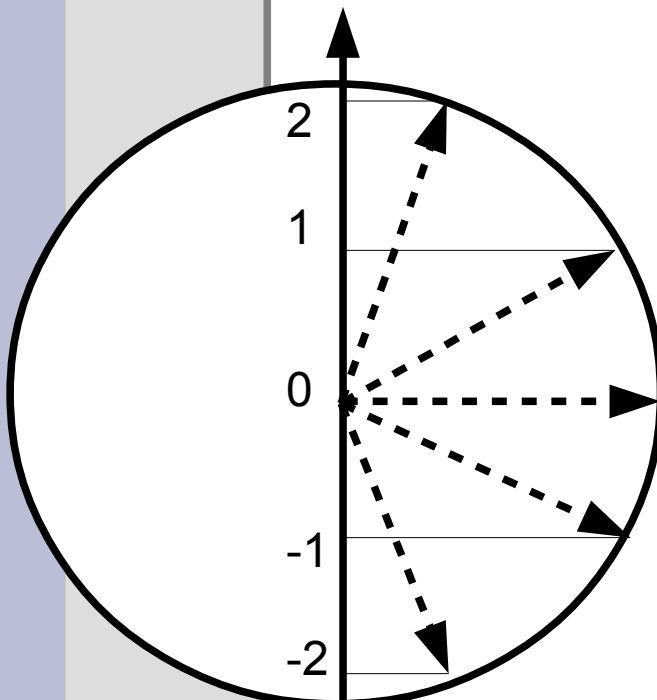
## Собственные значения квадрата момента

Мате

Физика:

в отсутствие выделенного направления все значения проекции равновероятны, все оси координат равносильны

$$\begin{aligned}\langle \hat{l}^2 \rangle &= \langle \hat{l}_x^2 + \hat{l}_y^2 + \hat{l}_z^2 \rangle = 3 \langle \hat{l}_z^2 \rangle = \\ &= 3 \times \left[ \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l m^2 \right] = \\ &= \frac{3}{2l+1} \times \frac{1}{3} l(l+1)(2l+1) = l(l+1)\end{aligned}$$



$$\sqrt{\langle \hat{l}^2 \rangle} > l$$

An orange arrow points from this equation towards the circle diagram.

## Чётность волновой функции



<http://101successdrivers.com/overcoming-that-reflection-in-the-mirror/>

Выбор системы координат — наш произвол, не должен влиять на наблюдаемые величины, в т.ч. на плотность вероятности

$$\hat{P} : \vec{r} \rightarrow -\vec{r}$$

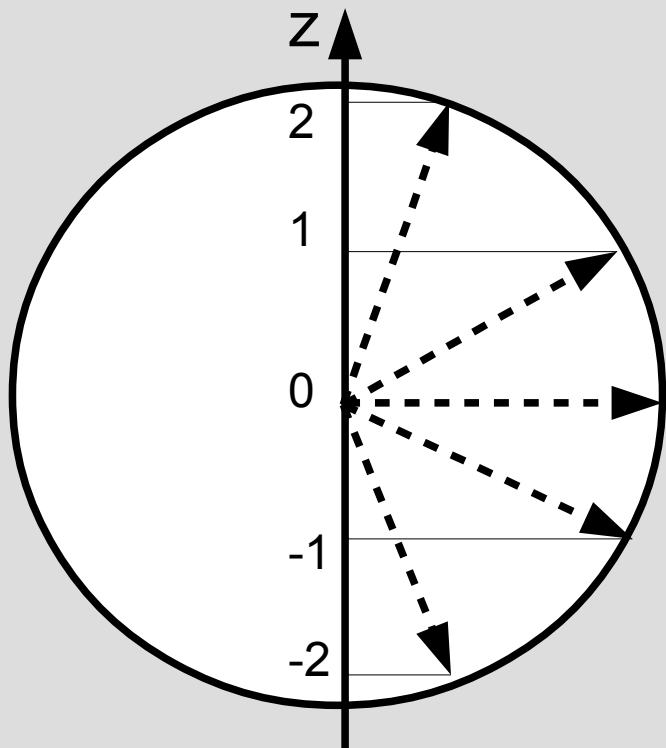
может менять только фазу волновой функции!

$$\hat{P}^2 = 1$$

либо «плюс», либо «минус»!

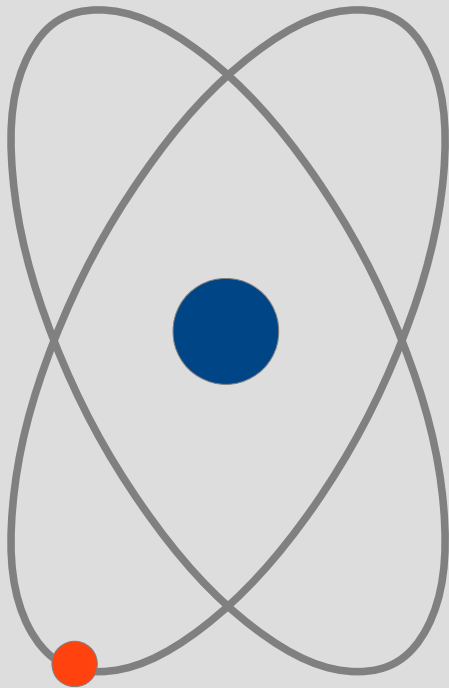
По свойствам сферических функций, для состояния с определённым моментом импульса  $l$  чётность  $P = (-1)^l$

## Правила квантования момента импульса



- одновременно могут быть измерены проекция момента на заданную (**любую**, традиционно обозначается  $Z$ ) ось и квадрат момента импульса
- собственные значения квадрата момента  $l(l+1)$ , «длиной» вектора момента импульса называют  $l$
- проекция момента импульса — целое число  $m = -l, -l+1, \dots, l-1, l$ , всего  $(2l+1)$  возможность
- чётность состояния с определённым  $l$ :  $P = (-1)^l$

## Часть 2. Элементарная теория атома водорода



Задача:

финитное движение электрона в  
кулоновском поле ядра

найти:

уровни энергии (точно),  
волновые функции (качественно)

Внимание! Задача двух тел!

*как и в классике может быть сведена к  
движению центра масс и одного тела  
приведённой массы*

(далее  $m$  — приведённая масса электрона)



## О строгом решении

движение в  
центральной поле,  
сферические  
координаты!

$$E \Psi = \hat{H} \Psi = \left( \frac{\hat{p}^2}{2m} + U(r) \right) \Psi = \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + U(r) \right) \Psi$$

угловая часть лапласиана  
похожа на оператор квадрата  
момента импульса!

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + U(r) \Psi + \frac{\hbar^2}{2m r^2} \hat{l}^2 \Psi = E \Psi$$

действует только на  
радиальную часть

действует  
только на  
угловую часть

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \xi'' + \left( U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \xi = E \xi$$

↑  
центробежная  
энергия

$$E \Psi = \hat{H} \Psi =$$

Сведена к одномерной задаче,  $r > 0$

$$\Psi(r, \Theta, \phi) = \Psi_{n_r, l, m}$$

$$E = E(n_r, l)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \Psi}{\partial r} \right) + U(r) \Psi + \frac{\hbar^2}{2m r^2} \hat{l}^2 \Psi = E \Psi$$

↑  
действует только на  
радиальную часть

↑  
действует  
только на  
угловую часть

Квантовые числа:  
 $n_r$  — радиальное  
(0, 1, 2, ...)  
 $l$  — орбитальное  
{s, p, d, f...} = {0, 1, 2, 3...}  
 $m$  — магнитное

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \xi'' + \left( U(r) + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2m r^2} \right) \xi = E \xi$$

↑  
центробежная энергия

номерной задаче,  $r > 0$

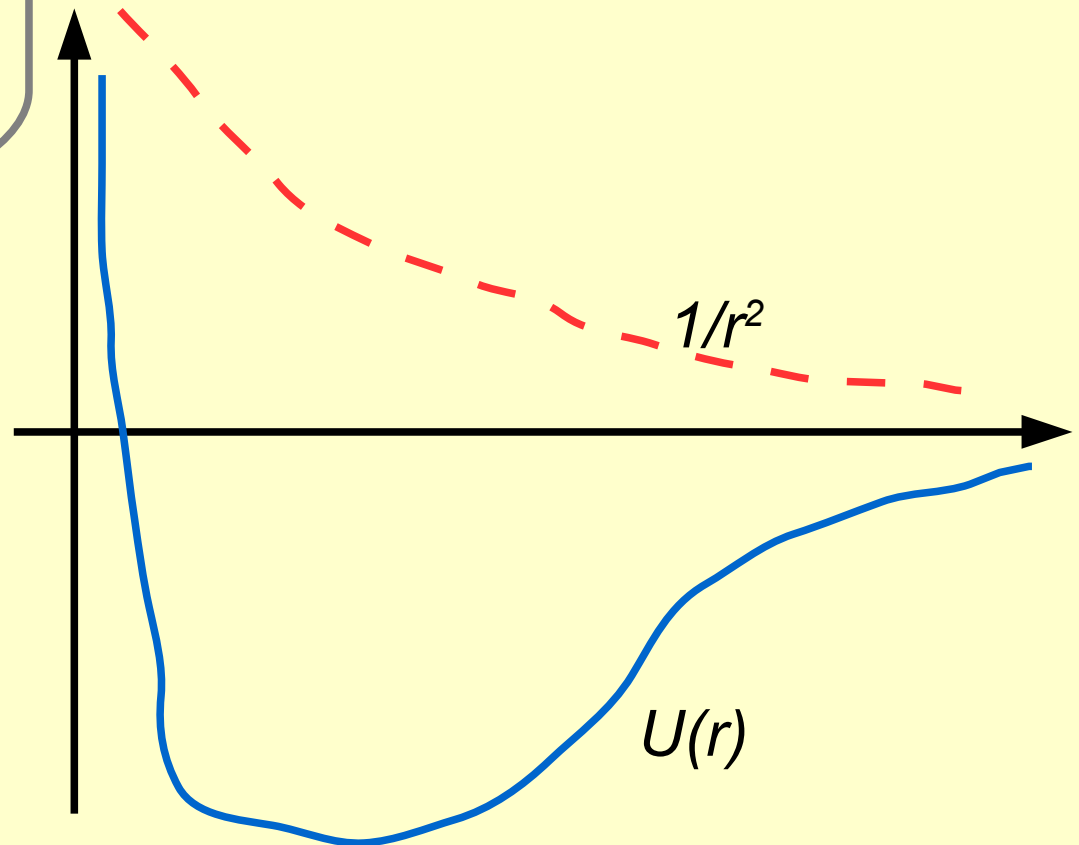
с ростом  $l$  :

- яма становится «мельче и уже» - уровни энергии «растут»
- при достаточно большом  $l$  яма может пропасть

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left( r^2 \frac{\partial \xi}{\partial r} \right)$$

↑  
действует только на радиальную часть

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r}$$



## Случай кулоновского потенциала $U(r)=-e^2/r$ . Уровни энергии.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \xi'' + \left( U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \xi = E \xi$$

Только ответы:

- 1) случайное вырождение по орбитальному квантовому числу
- 2) энергию определяет главное квантовое число  $n = n_r + l + 1$
- 3) возможные значения момента  $l = 0, 1, \dots, (n-1)$

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

↑  
13.6 эВ

Полная кратность вырождения  $n$ -ого уровня:  
 $n$  значений момента,  $(2l+1)$  значение проекции  $= n^2$

# Случай кулоновского потенциала $U(r)=-e^2/r$ . Вид некоторых волновых функций.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \xi'' + \left( U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \xi = E \xi$$

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$

$$R_{nl}(r)$$

масштаб длины —  
боровский радиус

$$r_0 = \frac{\hbar^2}{m e^2} \approx 0.53 \text{ \AA}$$

$$R_{10} = 2e^{-r}$$

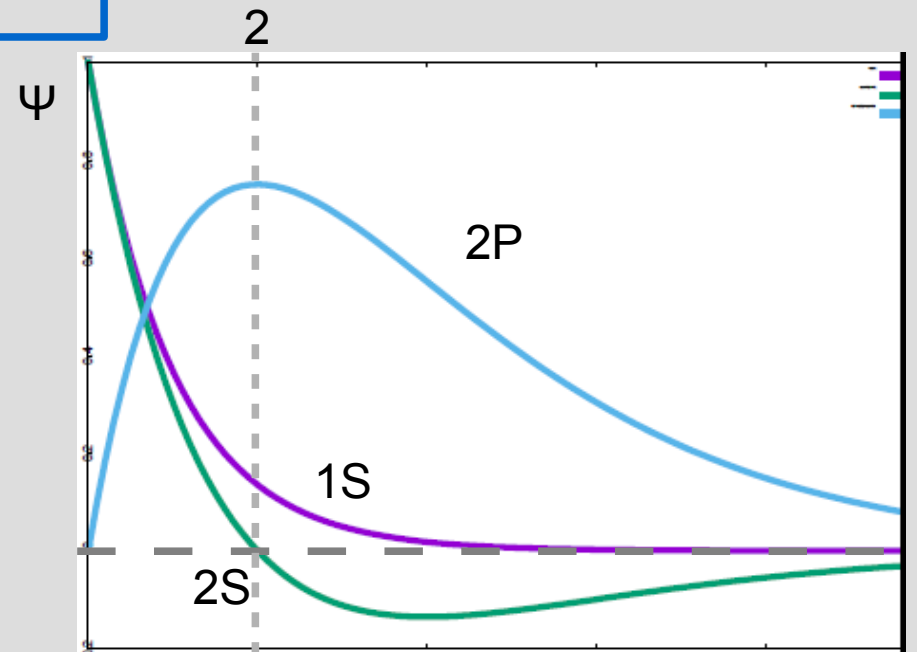
$$n=1, l=0, n_r=0$$

$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-r/2} \left( 1 - \frac{r}{2} \right)$$

$$n=2, l=0, n_r=1$$

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-r/2} r$$

$$n=2, l=1, n_r=0$$



# Случай кулоновского потенциала $U(r)=-e^2/r$ . Вид некоторых волновых функций.

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \xi'' + \left( U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \xi = E \xi$$

масштаб длины —  
боровский радиус

$r_0 =$

Для S-состояний характерен максимум волновой функции при  $r=0$ , для остальных  $\Psi(0)=0$

$$R_{10} = 2e^{-r}$$

$$n=1, l=0, n_r=0$$

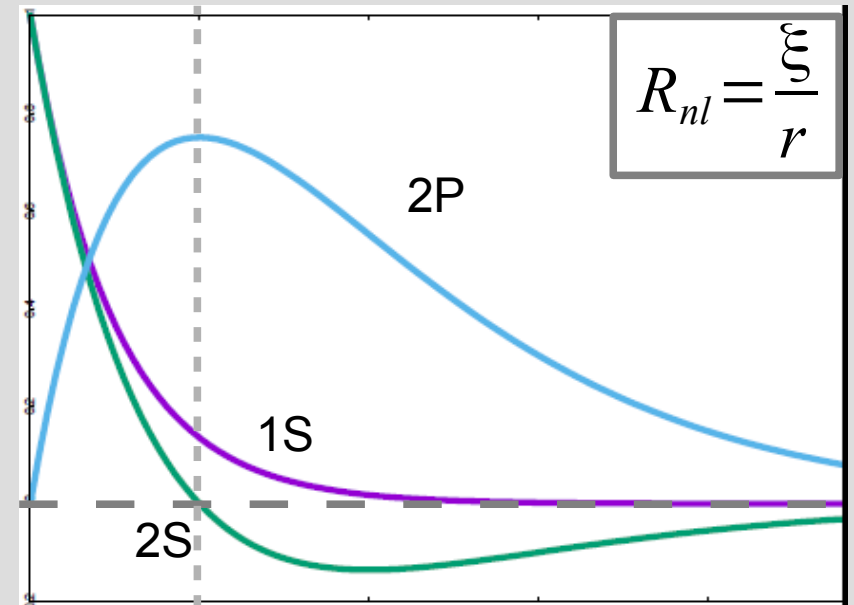
$$R_{20} = \frac{1}{\sqrt{2}} e^{-r/2} \left( 1 - \frac{r}{2} \right)$$

$$n=2, l=0, n_r=1$$

$$R_{21} = \frac{1}{2\sqrt{6}} e^{-r/2} r$$

$$n=2, l=1, n_r=0$$

$\Psi$

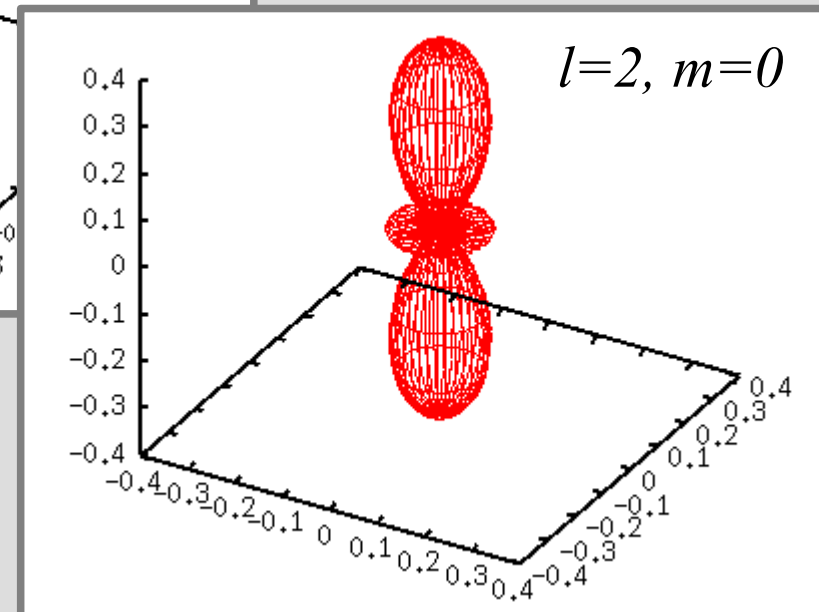
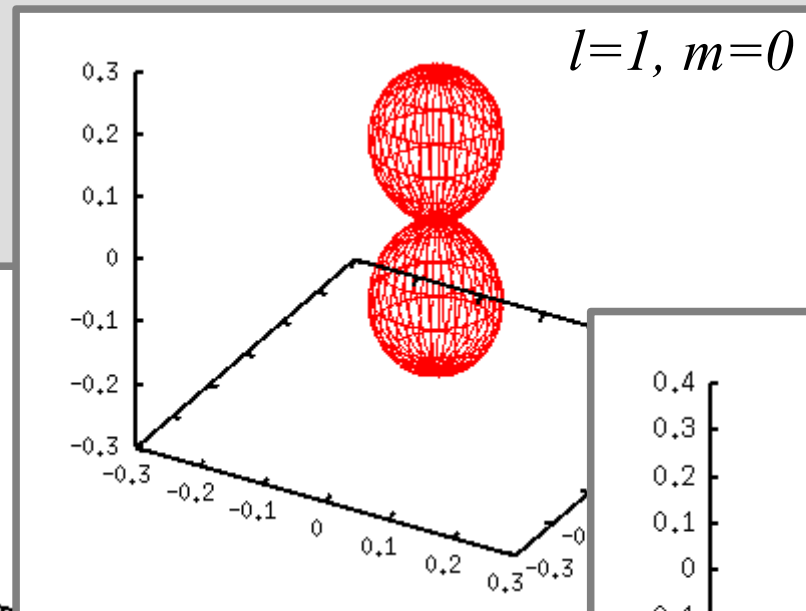
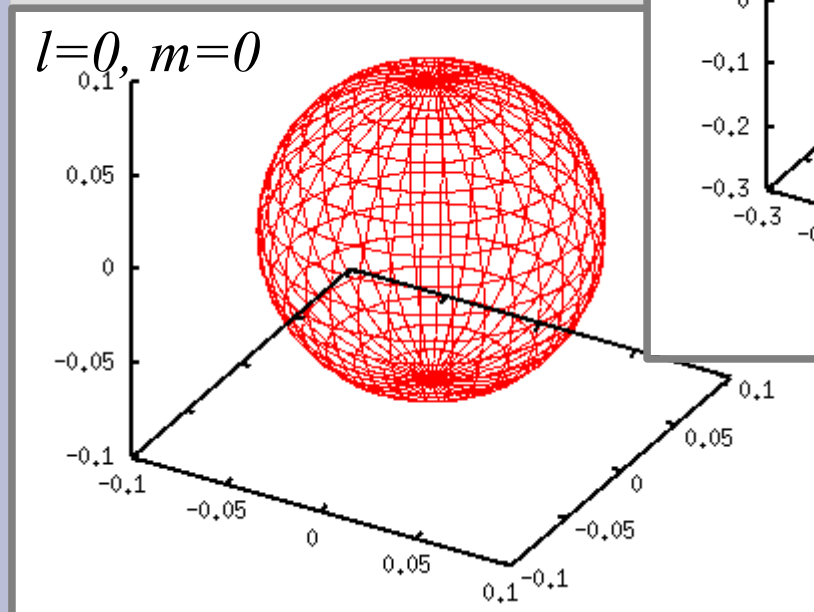


$$R_{nl} = \frac{\xi}{r}$$

# Случай кулоновского потенциала $U(r)=-e^2/r$ . Вид некоторых волновых функций (угловая часть).

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \xi'' + \left( U(r) + \frac{l(l+1)}{r^2} \right) \xi = E \xi$$

$$\Psi = \frac{\xi(r)}{r} \times Y_{lm}(\Theta, \phi)$$



## Применение модели водородоподобного атома

1) Водород, ионы с единственным электроном, атомы щелочных металлов и ионы с похожей конфигурацией

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

2) Внутренние электроны атомов

$$E_n = -\frac{m Z_{\text{эфф}}^2 e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{(n - \sigma_l)^2}$$

Дискретность уровней проявляется в линейчатых спектрах.

- Для внешних электронов энергии переходов ~эВ, оптический диапазон
- Для внутренних ~кэВ, рентгеновское характеристическое излучение



линии Бальмера  
водорода  
(с сайта wikipedia.org)

$$\hbar \omega_{mn} = Ry \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$



# Спектральные серии водорода

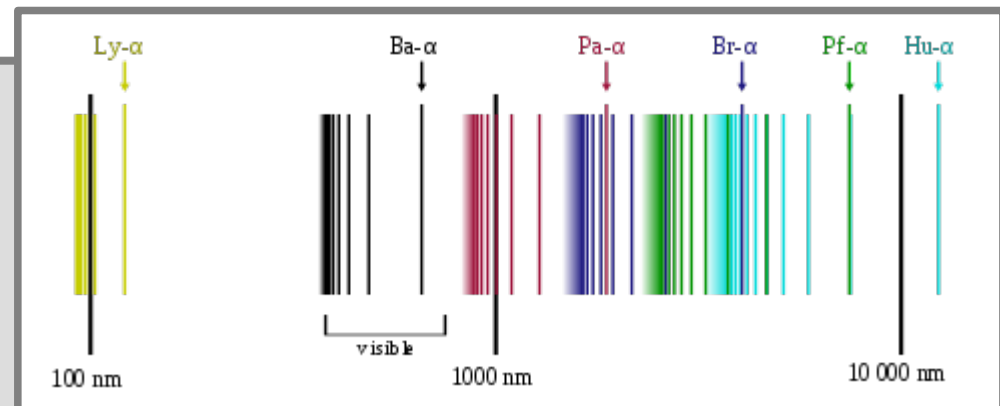
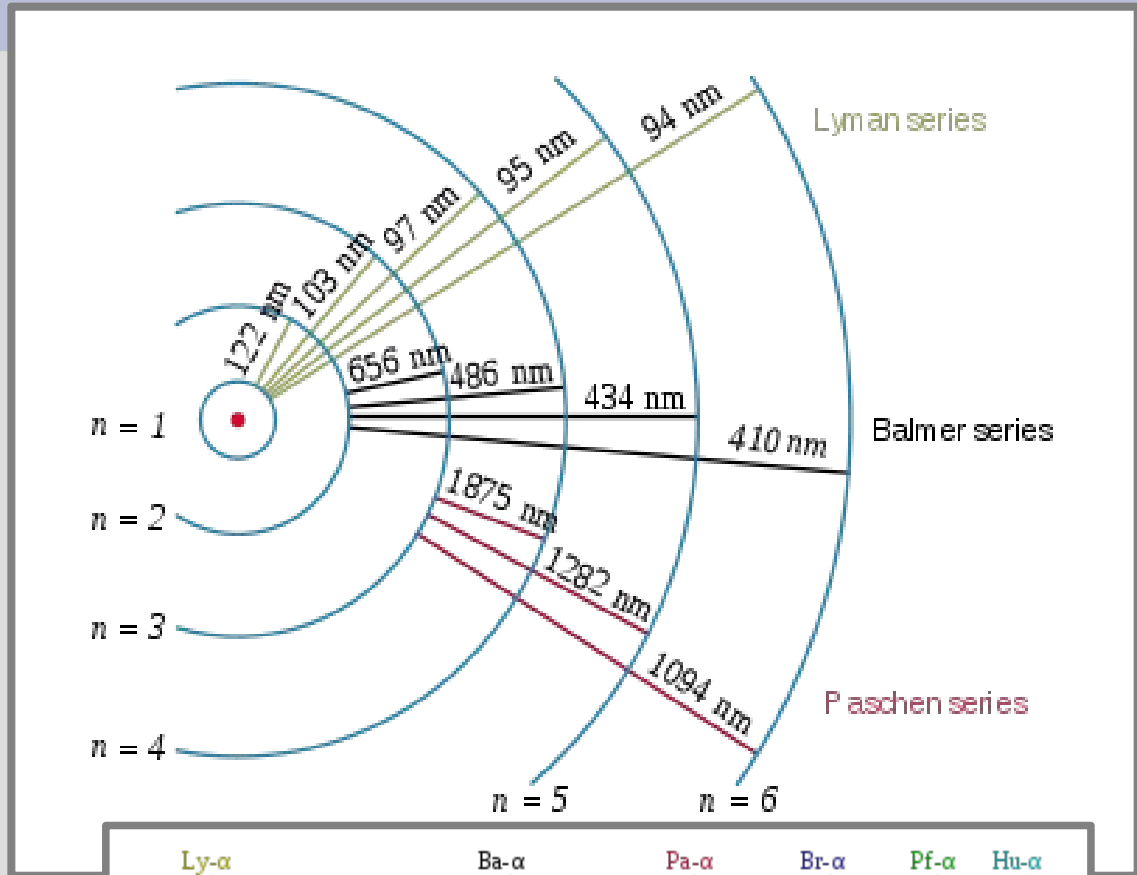
$$\hbar \omega_{mn} = Ry \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{m^2} \right)$$

$Ry = 13.6$  эВ  
 $2.5$  эВ  $\leftrightarrow$   $500$  нм

видимая серия Бальмера —  
 переходы с  $n=2$

серия Лаймана — УФ  
 серия Пашена — ИК

$\alpha$ -линия в каждой серии — с  
 максимальной длиной  
 волны



## Классический предел для излучения атома.

$$Ry = \frac{me^4}{2\hbar^2}$$

$$n \gg 1, n \rightarrow (n+1)$$

$$\hbar \omega_{n,(n+1)} = \frac{me^4}{2\hbar^2} \left( \frac{1}{n^2} - \frac{1}{(n+1)^2} \right) \approx \frac{me^4}{\hbar^2 n^3}$$

$n \gg 1$ , модель Бора-Зоммерфельда

$$p \times 2\pi r = n\hbar$$

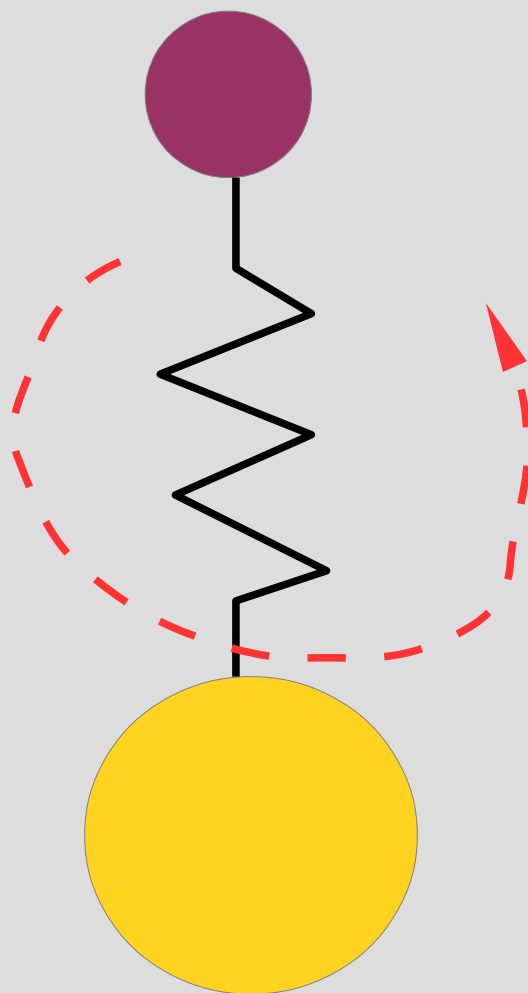
$$\frac{p^2}{mr} = \frac{e^2}{r^2}$$

$$r_n = \frac{n^2 \hbar^2}{me^2}$$

$$V_n = \frac{e^2}{n\hbar}$$

$$\omega_n = \frac{V_n}{r_n} = \frac{me^4}{\hbar^3 n^3}$$

### Часть 3. Вращательные и колебательные степени свободы молекул



## Колебания двухатомной молекулы

$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k x^2}{2} \quad \text{гармоническое приближение}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$E_n = \hbar \omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Средняя энергия  
при конечной температуре  
(вычисление делалось для АЧТ)

$$\bar{E} = \sum E_n w_n = \frac{\hbar \omega}{e^{\hbar \omega / (kT)} - 1} + \frac{\hbar \omega}{2}$$

Колебательный вклад в  
теплоёмкость

$$C = k \frac{(\hbar \omega)^2}{(kT)^2} \frac{e^{\hbar \omega / (kT)}}{(e^{\hbar \omega / (kT)} - 1)^2}$$

## Колебания двухатомной молекулы

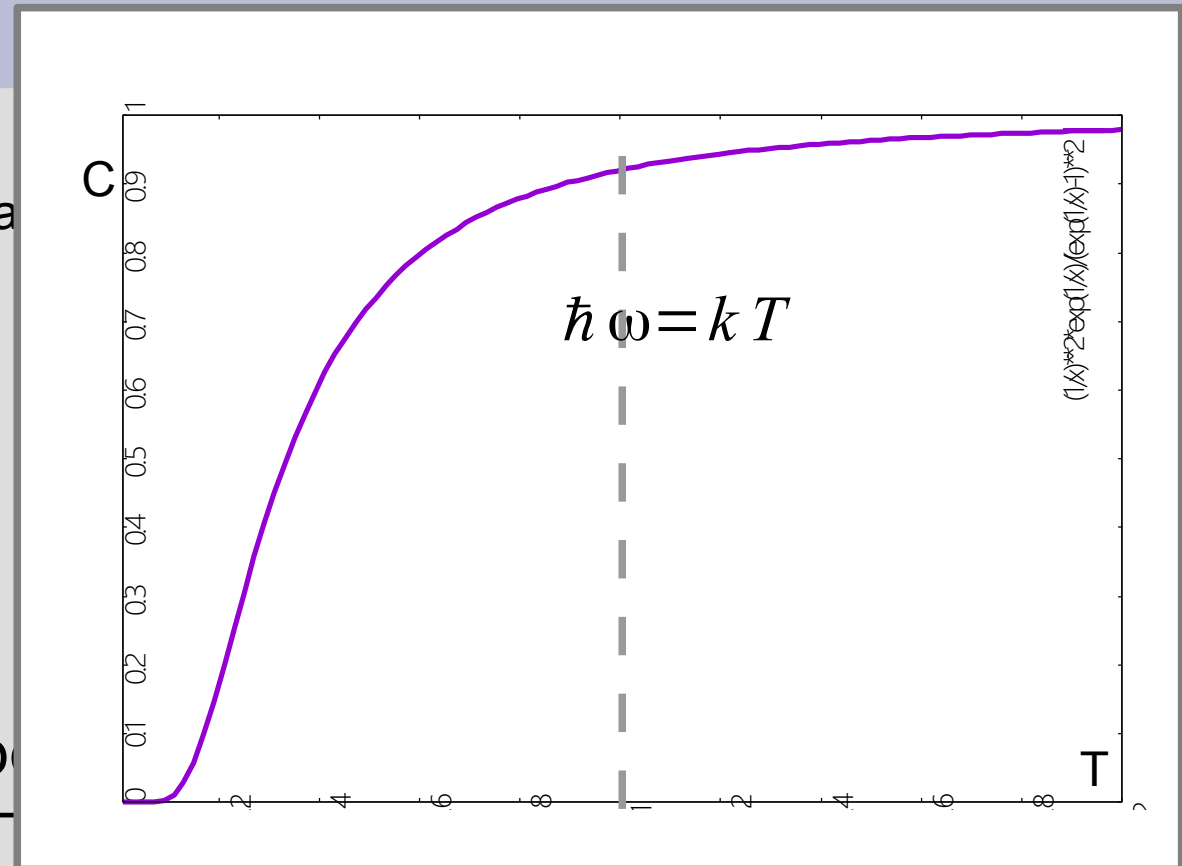
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{kx^2}{2}$$

$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

$$E_n = \hbar\omega \left( n + \frac{1}{2} \right)$$

Средняя энергия  
при конечной температуре  
(вычисление делалось дл

Колебательный вклад в  
теплоёмкость



$$C = k \frac{(\hbar\omega)^2}{(kT)^2} \frac{e^{\hbar\omega/(kT)}}{(e^{\hbar\omega/(kT)} - 1)^2}$$

## Оценка колебательного кванта

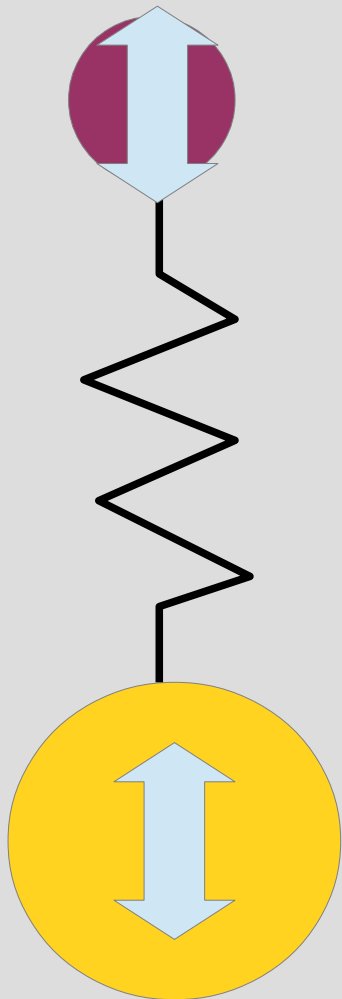
$$\hat{H} = -\frac{\hbar^2}{2\mu} \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{k x^2}{2}$$
$$\omega = \sqrt{\frac{k}{\mu}}$$

- Энергия связи — кулоновская,  $\sim Ry$
- Межатомное расстояние порядка боровского радиуса  $r_0$
- Энергия связи существенно меняется (на  $\sim Ry$ ) при изменении расстояния на  $r_0$

$$k \sim \frac{Ry}{r_0^2} \sim \frac{m e^4 / (\hbar^2)}{(\hbar^2 / (m e^2))^2} = \frac{m^3 e^8}{\hbar^6}$$
$$\hbar \omega \sim \frac{m e^4}{\hbar^2} \sqrt{\frac{m}{\mu}} = Ry \sqrt{\frac{m}{\mu}}$$

десятки мэВ, сотни и тысячи К

## «Нулевые колебания» в молекуле



В основном состоянии атомы делокализованы (соотношение неопределённостей!).  
 Классическая аналогия (наглядная, но неверная) - «дрожание» вблизи положения равновесия, **нулевые колебания.**

Оценка:  $\frac{k A_0^2}{2} = \frac{\hbar \omega}{2} = \frac{\hbar}{2} \sqrt{\frac{k}{\mu}}$

$$A_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{k \mu}} = \frac{\hbar}{\omega \mu} \sim \frac{\hbar^2}{R y \sqrt{m \mu}}$$

$$\sim \frac{(10^{-27})^2}{13.6 \times 1.6 \times 10^{-12} \times 10^{-27} \sqrt{2000 \times 16}} \text{ см}^2 \approx$$

$$\approx 2.5 \times 10^{-19} \text{ см}^2 = (5 \times 10^{-10} \text{ см})^2$$

несколько %  
от  
межатомного

Более формальное вычисление.

Волновая функция основного состояния (ЛЛ. III)

$$\Psi = \left( \frac{m\omega}{\pi\hbar} \right)^{1/4} \exp\left( -\frac{m\omega}{2\hbar} x^2 \right)$$

Среднеквадратичное отклонение

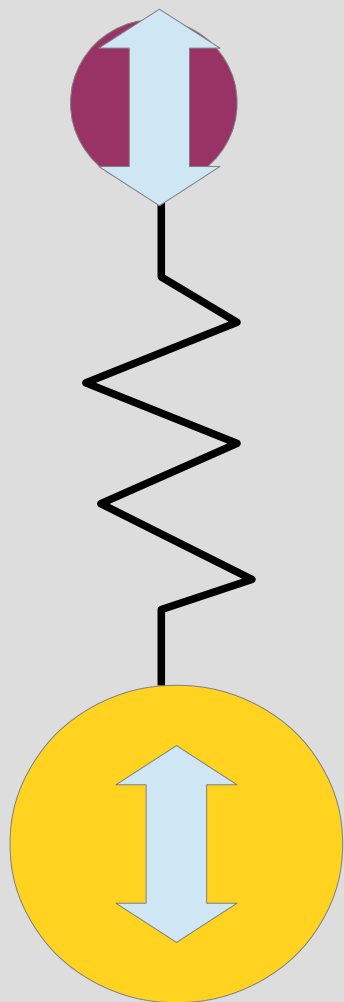
$$A_0^2 = \langle x^2 \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} x^2 \Psi^2 dx = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \frac{\hbar}{m\omega} \int_{-\infty}^{\infty} \xi^2 e^{-\xi^2} d\xi = \frac{1}{2} \frac{\hbar}{m\omega}$$

мало отличается от  
оценки

несколько %  
от  
межатомного

$$A_0^2 = \frac{\hbar}{\sqrt{k\mu}} = \frac{\hbar}{\omega\mu} \sim \frac{\hbar^2}{Ry\sqrt{m\mu}}$$

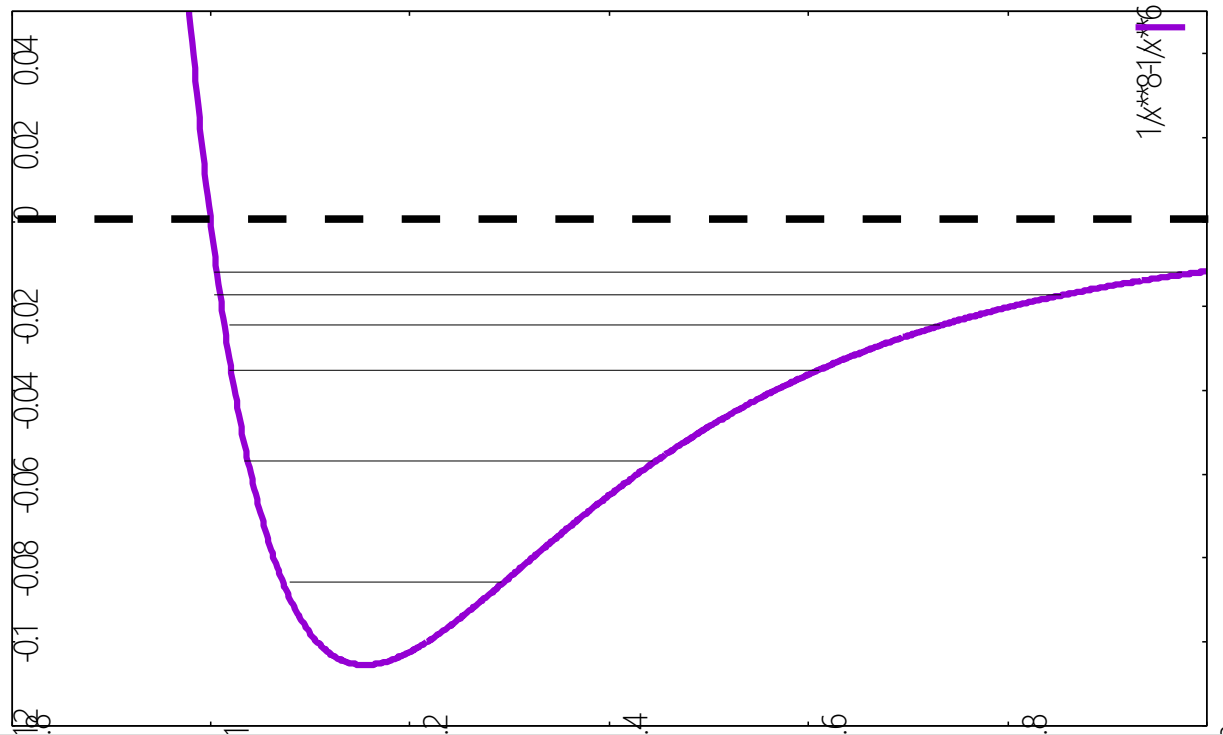
$$\sim \frac{(10^{-27})^2}{13.6 \times 1.6 \times 10^{-12} \times 10^{-27} \sqrt{2000 \times 16}} \text{ см}^2 \approx 2.5 \times 10^{-19} \text{ см}^2 = (5 \times 10^{-10} \text{ см})^2$$



«  
E  
(  
K  
-  
H  
O



# Ангармонизм в колебательных степенях свободы



U=0

$$\oint \vec{p} d\vec{l} = n h$$

$$\int_{x_{min}}^{x_{max}} \sqrt{2m(E - U(x))} dx = n h / 2$$

Из-за выполаживания потенциала расстояние между уровнями с большими  $n$  сокращается

## Вращение двухатомной молекулы

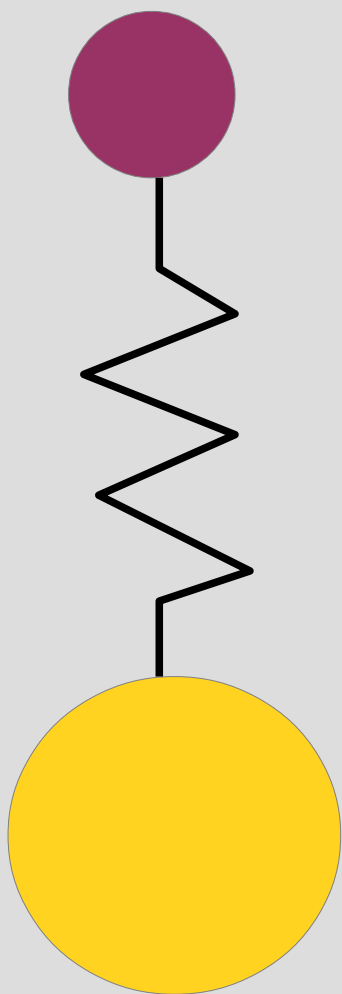
Тензор инерции

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} I & 0 & 0 \\ 0 & I & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon \end{pmatrix}$$

$$\hat{H} = \frac{\hbar^2 l_x^2}{2I_x} + \frac{\hbar^2 l_y^2}{2I_y} + \frac{\hbar^2 l_z^2}{2I_z} = \frac{\hbar^2 \hat{l}^2}{2I} + \underbrace{\left( \frac{1}{\varepsilon} - \frac{1}{I} \right) \frac{\hbar^2 l_z^2}{2}}_{m=0}$$

Набор невырожденных уровней,  
энергии уровней

$$E_l = \frac{\hbar^2 l(l+1)}{2I}, l = 0, 1, 2, \dots$$



# Теплоёмкость молекулы водорода

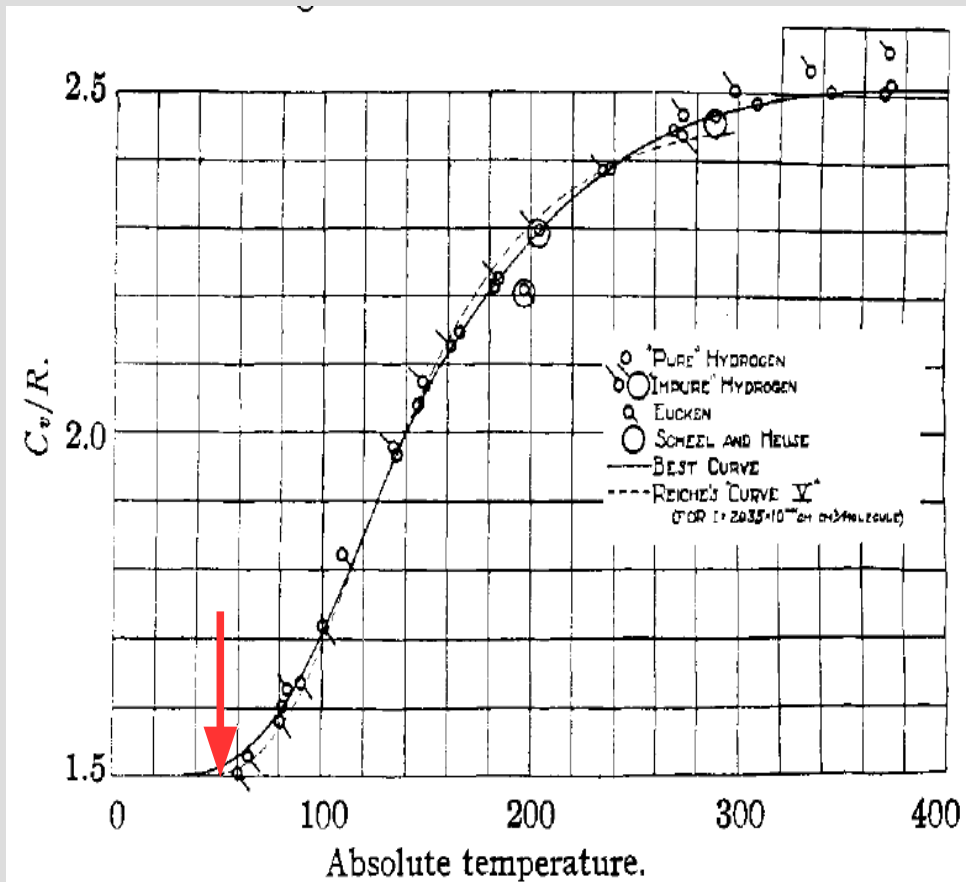


Fig. 3.—Specific heat of hydrogen.

рисунок из статьи R.E.Cornish and E.D.Eastman "The specific heat of hydrogen gas at low temperatures...", J.Am.Chem.Soc. 50, 627 (1928)

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

Точное вычисление — см. ЛЛ.V

Дискретность уровней = активационный характер теплоёмкости

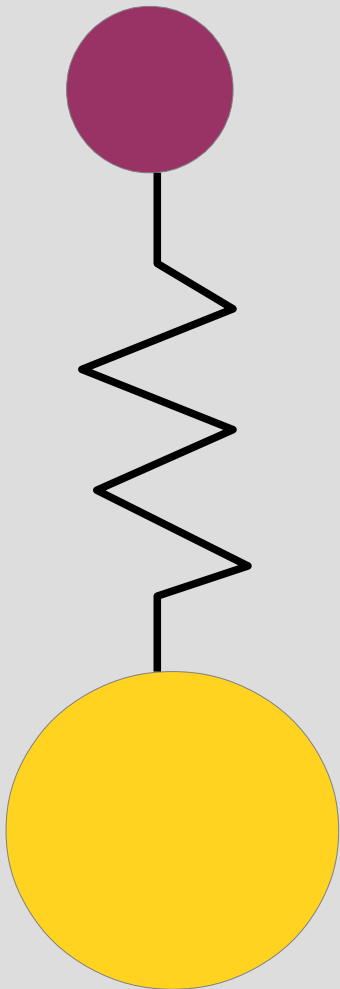
$$kT \sim \frac{\hbar^2}{I} \sim \frac{\hbar^2}{M r_0^2} \approx$$

$$\approx \frac{(10^{-27})^2}{2000 \times 10^{-27} \times 10^{-16}} = 0.5 \times 10^{-14} \text{ эрг}$$

$$T \approx 50 \text{ K}$$

## Оценка вращательного кванта энергии

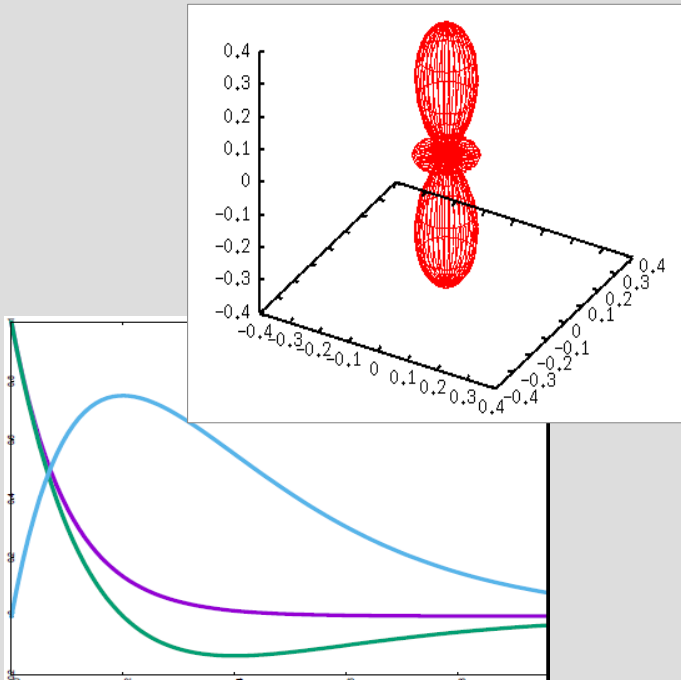
- Расстояние порядка боровского радиуса



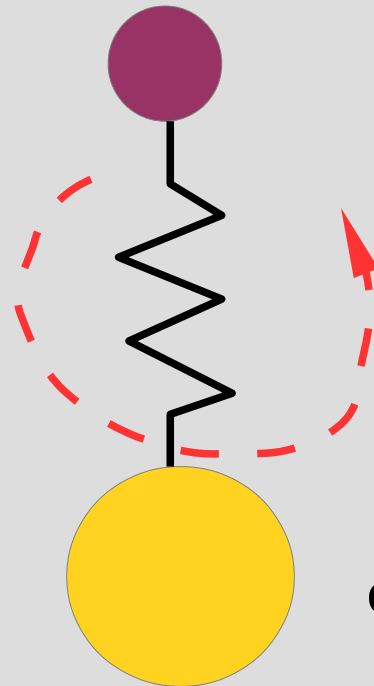
$$\hbar \omega \sim \frac{\hbar^2}{M r_0^2} = \frac{\hbar^2}{M (\hbar^2 / (m e^2))^2} = \frac{m}{M} \frac{m e^4}{\hbar^2} = \frac{m}{M} R_y$$

доли мэВ, единицы и десятки К

# Основное на лекции

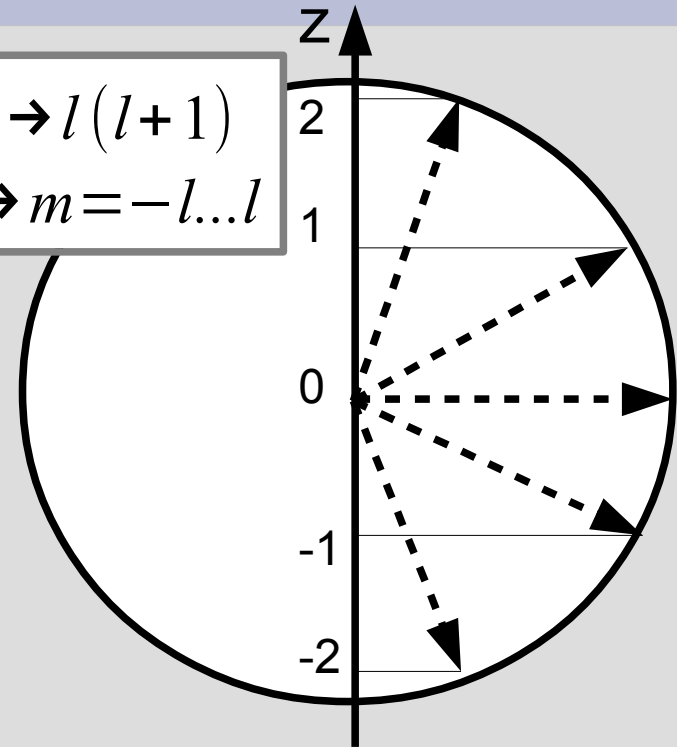


$$E_n = -\frac{m e^4}{2 \hbar^2} \frac{1}{n^2}$$



$$\hat{l}^2 \rightarrow l(l+1)$$

$$\hat{l}_z \rightarrow m = -l \dots l$$



$$\omega_e : \omega_{\text{кол}} : \omega_{\text{вращ}} = 1 : \sqrt{\frac{m}{M}} : \frac{m}{M}$$