

# Domácí úkol č. 5

Zadáno: 3.5.2019      Odevzdat do: 23.5.2019

*Úkol je samozřejmě možné odevzdat i dříve – platí obzvláště v případě zájmu skládat zkoušku v prvním týdnu zkouškového termínu, aby bylo možné včas udělit zápočet.*

## Vodíková molekula

Uvažujme řídký plyn vodíkových molekul při nízké teplotě. Při dostatečně nízkých teplotách se z vnitřních stupňů volnosti projevují jenom rotační a tedy příspěvek vibračních stupňů volnosti je zanedbatelný. Další zjednodušení plyne z toho, že elektrony jsou mnohem lehčí než protony, tudíž jejich příspěvek k rotační energii je taktéž zanedbatelný. Dále budeme molekulu vodíku považovat za systém dvou protonů v konstantní vzdálenosti od sebe. Protony jsou fermiony se spinem  $1/2$ , a proto velikost celkového spinu molekuly může být buď  $S = 0$  (singlet, para-vodík) nebo  $S = 1$  (triplet, ortho-vodík). Vlnová funkce popisující celou molekulu je pak direktním součinem prostorové části (v bázi charakterizované orbitálním impulsmomentem  $L$ ) a spinové části. Vlnová funkce molekuly vodíku s orbitálním impulsmomentem  $L$  a celkovým spinem  $S$  má paritu  $(-1)^{L+S-1}$ . Podmínka antisymetrie vlnové funkce vůči záměně protonů vyžaduje, aby stav s celkovým spinem  $S = 0$  měl sudý orbitální impulsmoment  $L$  a naopak.

- Spočítejte poměr zastoupení singletního a tripletního stavu. Napište obecný výraz a ten explicitně vyhodnoťte pro nízké a vysoké teploty.
- Spočítejte tepelnou kapacitu jedné molekuly v jednotlivých stavech celkového spinu ( $S = 0$  a  $S = 1$ ) a vykreslete jejich grafy v nízkoteplotní oblasti. Rozsah však zvolte dostatečně velký na to, abyste u jedné z křivek uviděli lokální maximum. Na tuto podúlohu můžete potřebovat numericky spočítat patřičné sumy do dostatečně vysokého řádu.
- *Bonus:* Vykreslete teplotní závislost tepelné kapacity pro rovnovážnou směs para- a ortho-vodíku.