

Domácí úkol č. 5

Zadáno: 5.3.2018

Odevzdat do: 17.5.2018

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) nebo $S = 1$ (triplet). 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 (a tedy v tomto případě i vůči prostorové inverzi) 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, dost velké na to, abyste u jedné z křivek uviděli lokální maximum. (Na tuto podúlohu můžete potřebovat numericky spočítat patřičné sumy do dostatečně vysokého řádu.)