ПРИЛОЖЕНИЕ I
Справочный материал по физике

1. Физические константы

$N_A = 6.02 \cdot 10^{23}$ моль$^{-1}$ – число Авагадро;
$h \cong 6.63 \cdot 10^{-34}$ Дж/с – постоянная Планка,
$\hbar \equiv \dfrac{h}{2\pi} \cong 1.055 \cdot 10^{-34}$ Дж·с – приведенная постоянная Планка;
$k_B \cong 1.38 \cdot 10^{-23}$ Дж/К – константа Больцмана;
$c \cong 3 \cdot 10^{8}$ м/с – скорость света;
$e \cong 1.6 \cdot 10^{-19}$ Кл – заряд электрона и протона;
1 а.е.м. $\cong 1.66 \cdot 10^{-27}$ кг – атомная единица массы;
$m_e \cong 9.1 \cdot 10^{-31}$ кг – масса электрона;
$m_p \cong 1.67 \cdot 10^{-27}$ кг – масса протона;
$\varepsilon_0 = \dfrac{10^7}{4\pi \cdot c^2} \dfrac{\text{Ф}}{\text{м}} = \dfrac{1}{4\pi \cdot 9 \cdot 10^9} \dfrac{Ф}{м} \cong 8.85 \cdot 10^{-12} \dfrac{\text{Ф}}{\text{м}}$ – электрическая постоянная;
$\mu_0 = 4\pi \cdot 10^{-7} \dfrac{\text{Гн}}{\text{м}} \cong 12.6 \cdot 10^{-7} \dfrac{\text{Гн}}{\text{м}}$ – магнитная постоянная;
$a_0(\text{SI}) = \left[\dfrac{4\pi}{\mu_0 c^2}\right] \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2} = [4\pi\varepsilon_0] \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2} = a_0(\text{CGS}) = \dfrac{\hbar^2}{m_e e^2} \cong 0.529$ Å – Боровский радиус;
$R = 1.10 \cdot 10^{7}$ м$^{-1}$ – постоянная Ридберга, $Rhc \cong 13.6$ эВ;
$\mu_B \equiv \dfrac{e\hbar}{2m_e c}(\text{CGS}) = \dfrac{e\hbar}{2m_e}(\text{SI}) \cong 9.27 \cdot 10^{-24}$ Дж/Тл – магнетон Бора;
$\mu_n \equiv \dfrac{e\hbar}{2m_p c}(\text{CGS}) = \dfrac{e\hbar}{2m_p}(\text{SI}) \cong 5.05 \cdot 10^{-27}$ Дж/Тл – ядерный магнетон.

2. Взаимосвязь единиц измерения физических величин

1 эВ $\cong 1.6 \cdot 10^{-19}$ Дж – атомная единица энергии;
1 кал $\cong 4.19$ Дж;
1 ккал $\cong 0.0434$ эВ;
1 Бк = 1 расп./с;
1 Ки = $3.7 \cdot 10^{10}$ Бк = $3.7 \cdot 10^{10}$ расп./с;
1 б (барн) = 10^{-24} см^2 = 10^{-28} м^2.

3. Оболочечная модель ядра

Предполагается, что нуклоны движутся практически независимо друг от друга в некотором среднем самосогласованном потенциальном поле, создаваемом всеми остальными нуклонами. Потенциал этого поля имеет форму ямы, и нуклоны занимают в ней определенные энергетические уровни. Группа близких по энергии уровней образует ядерную оболочку. Чтобы перевести нуклон из одной оболочки в другую, требуется значительно большая энергия, чем для переходов с одного уровня на другой внутри оболочки. Поэтому ядра с заполненными оболочками обладают повышенной устойчивостью. В ядрах с магическим числом протонов или нейтронов (2, 8, 20, 50, 82, 126) происходит заполнение ядерной оболочки.

Теория не дает способа вычисления потенциала самосогласованного поля и поэтому его приходится подбирать. Сферически симметричный потенциал обычно берется в виде

$$V = V(r) + U(r) \cdot \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{l},$$

где $\boldsymbol{s}$ и $\boldsymbol{l}$ – спин и орбитальный момент нуклона, r – расстояние нуклона от центра масс ядра. Кроме статического потенциала центрального поля $V(r)$ добавляется потенциал, обусловленный спин-орбитальным взаимодействием $U(r) \cdot \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{l}$, где $U(r)$ – функция от расстояния нуклона до центра ядра. В случае протона необходимо учесть еще потенциал кулоновского взаимодействия. Из сравнения результатов расчетов уровней ядер с результатами опытов следует, что потенциал $V(r)$ имеет форму ямы с плоским дном и размытым краем. При этом предполагается, что второе слагаемое $U(r) \cdot \boldsymbol{s} \cdot \boldsymbol{l}$ является достаточно сильным.

В сферически симметричном поле ядра с рассмотренным потенциалом состояния нуклонов не зависят друг от друга и характеризуются квантовыми числами n, l, j и m. Здесь n = 1, 2, ... – главное квантовое число (связано с числом узлов радиальной волновой функции); l, j и m – квантовые числа соответственно орбитального момента, полного момента и проекции полного момента нуклона на некоторую ось квантования ($-j \le m \le j$). В отличие от атомной спектроскопии, существуют уровни с l = 1, 2, 3, 4, ... = s, p, d, f, ... для всех n (значения l не ограничены значениями n). Нейтрон и протон имеет спин s = 1/2 и в соответствии с принципом Паули при заданном l квантовое число полного момента j принимает два значения j = $1 \pm 1/2$, соответственно параллельной и антипараллельной ориентациям орбитального и спинового моментов нуклона. Следовательно, в каждом состоянии nl может быть не больше, чем два нейтрона и два протона, т.е. четыре нуклона.

В отсутствие внешних по отношению к ядру полей энергия уровня нуклона зависит от квантовых чисел n, l и j при этом энергия уровня возрастает как с увеличением n, так и с увеличением l. Учет спин-

орбитального взаимодействия приводит к расщеплению уровней с $l \neq 0$ на два подуровня с разным j, при этом экспериментально установлено, что ниже лежит подуровень с $j = 1 + 1/2$. Расстояние между подуровнями возрастает с увеличением l приблизительно как $(2l + 1)$. На каждом протонном (нейтронном) уровне с n, l и j может находиться $2j + 1$ нейтронов (протонов) с различными значениями m.

Заполнение нейтронных и протонных оболочек происходит независимо по мере возрастания энергии уровня и в соответствии с принципом Паули. Состояние ядра определяется заполнением различных одночастичных состояний. Свойства ядер (спектр состояний, спины и четности, магнитные и квадрупольные моменты, вероятности электромагнитных переходов и т.д.) определяются числом содержащихся в нем нейтронов N и протонов Z и тем, как они заполняют одночастичные уровни.

Простейший вариант оболочечной модели ядра – одночастичная модель оболочек, в которой ядро рассматривается как четно-четный (как по нейтронам, так и по протонам) устойчивый остов с нулевым спином и нечетные нуклоны (если они есть), обуславливающие все основные свойства основного и возбужденных состояний, лежащих ниже энергии возбуждения остова. Среди этих свойств такие, как спин, четность, электрический квадрупольный и магнитный дипольный моменты основных и возбужденных уровней энергии и вероятности переходов.

4. Взаимосвязь коэффициентов Эйнштейна, формула Планка

Пусть атомарный газ (вещество) находится в термодинамическом равновесии с тепловым излучением при температуре T. Между атомами и полем теплового излучения осуществляется постоянный обмен энергией и импульсами – атомы излучают и поглощают фотоны, переходя из одних состояний в другие. Между атомами газа также происходит обмен импульсами и энергией при их столкновении между собой. Однако ни один из этих процессов не нарушает термодинамического равновесия системы в целом и соответствующего ему распределения атомов по энергиям и скоростям, равно как и распределения энергии излучения по частотам.

В соответствии с **принципом детального (локального) термодинамического равновесия** мощность излучения, поглощаемая газом при переходах $m \to n$, равна мощности, излучаемой при вынужденных и спонтанных переходах $n \to m$. Выполнение этого условия обеспечивает неизменность и спектральной объемной плотности энергии излучения $u(\omega_{nm})$, и среднего числа атомов N_n и N_m в состояниях n и m (заселенностей уровней n и m). Таким образом

$$P_{mn}^{\text{п}} = P_{nm}^{\text{си}} + P_{nm}^{\text{ви}},$$

$$B_{mn}N_m u(\omega_{nm}) = A_{nm}N_n + B_{nm}N_n u(\omega_{nm}),$$

и для спектральной объемной плотности энергии индуцирующего излучения получим:

$$u(\omega_{nm}) = \frac{A_{nm}/B_{nm}}{B_{mn}N_m/B_{nm}N_n - 1}.$$

В состоянии термодинамического равновесия при температуре T[1] заселенности уровней определяются **распределением Больцмана** (**каноническим распределением Гиббса**):

$$N_m = N\frac{g_m}{Z}e^{-\frac{W_m}{kT}},\ N_n = N\frac{g_n}{Z}e^{-\frac{W_n}{kT}},$$

$$\frac{N_m}{N_n} = \frac{g_m}{g_n}e^{-\frac{W_m - W_n}{kT}} = \frac{g_m}{g_n}e^{\frac{\hbar\omega_{nm}}{kT}},$$

где $Z = \sum_i e^{\frac{W_i}{kT}}$ – **статистическая сумма** по всем микросостояниям системы, g_m и g_n – **кратности** или **статистические веса** (число микросостояний, соответствующих одному макросостоянию с определенной энергией) **макроскопических состояний** m и n, соответственно. Следовательно:

$$u(\omega_{nm}) = \frac{A_{nm}/B_{nm}}{\left(B_{mn}g_m/B_{nm}g_n\right)e^{\frac{\hbar\omega_{nm}}{kT}} - 1}.$$

Рассмотрим предельные случаи.

1. При $T \to \infty$ спектральная объемная плотность энергии теплового излучения должна неограниченно возрастать в соответствии с формулой Рэлея–Джинса – $u(\omega_{nm}, T) = \frac{\omega_{nm}^2}{\pi^2 c^3}kT \to \infty$, следовательно:

$$u(\omega_{nm}) = \frac{A_{nm}/B_{nm}}{e^{\frac{\hbar\omega_{nm}}{kT}} - 1},$$

$$B_{mn}g_m = B_{nm}g_n.$$

2. При $kT >> \hbar\omega_{\text{nm}}$ квантовая структура излучения не проявляется и для спектральной плотности теплового излучения справедлива классическая формула Рэлея-Джинса. Следовательно:

$$u(\omega_{nm}) = \frac{A_{nm}/B_{nm}}{e^{\frac{\hbar\omega_{nm}}{kT}} - 1} \to \frac{A_{nm}}{B_{nm}} \cdot \frac{kT}{\hbar\omega_{nm}} = \frac{\omega_{nm}^2}{\pi^2 c^3}kT,$$

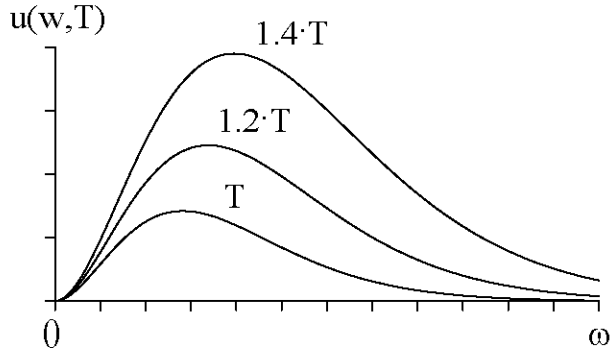
---

[1] Случай **канонической системы** – статистической системы, имеющей контакт с термостатом и находящейся с ним в равновесии.

$$\frac{A_{nm}}{B_{nm}} = \frac{\hbar\omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3}.$$

Заметим, что полученные формулы для коэффициентов Эйнштейна имеют общий характер и применимы к любым переходам для любых квантовых систем – атомов, молекул, ионов и т.д. Эти соотношения подтверждаются без всяких исключений. В результате для спектральной объемной плотности энергии теплового излучения получаем:

$$u(\omega_{nm},T) = \frac{\hbar\omega_{nm}^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega_{nm}}{kT}} - 1}.$$

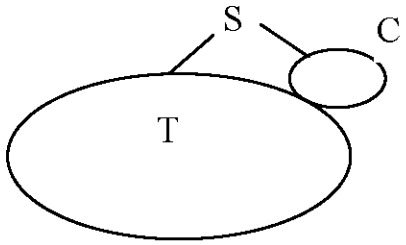


Поскольку проведенные рассуждения применимы к любому переходу, то частоту перехода ω_{nm} можно сменить на произвольное значение ω, после чего получим интерполяционную **формулу Планка** (см. рис.):

$$u(\omega,T) = \frac{\hbar\omega^3}{\pi^2 c^3} \cdot \frac{1}{e^{\frac{\hbar\omega}{kT}} - 1}.$$

5. Каноническое распределение Гиббса

Термостат – термодинамическая система T, макроскопическое состояние которой практически не зависит от состояния взаимодействующих с ней статистических систем С. Это означает, что число частиц и энергия термостата T должны быть гораздо больше числа частиц и энергии системы С – $N^{\mathrm{T}} >> N^{\mathrm{C}}, E^{\mathrm{T}} >> E^{\mathrm{C}}$.



Будем считать, что связь между системой С и термостатом Т слабая – энергия взаимодействия между этими системами гораздо меньше энергий термостата Т и системы С – $E^{\mathrm{TC}} << E^{\mathrm{T}}, E^{\mathrm{C}}$. В этом случае суммарная энергия двух систем S (см. рис.) практически не зависит от их взаимодействия – $E^{\mathrm{S}} \cong E^{\mathrm{T}} + E^{\mathrm{C}} - \mathrm{const}$.

Каноническая система – статистическая система, имеющая контакт с термостатом и находящаяся с ним в тепловом равновесии.

Каноническое распределение Гиббса – вероятность того, что каноническая система находится в одном из микросостояний i с энергией E_i:

$$P(E_i) = C \cdot e^{-\frac{E_i}{kT}} = \frac{e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{k_B T}}} = \frac{1}{Z} \cdot e^{-\frac{E_i}{kT}}.$$

Здесь $C = \frac{1}{Z}$, $Z \equiv \sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}$ – **статистическая сумма**.

Вычисление средних значений физической величины F, зависящей от микросостояния канонической системы, можно найти по формуле:

$$< F > = \frac{1}{Z} \sum_i F_i e^{-\frac{E_i}{kT}},$$

где F_i – значение физической величины F, соответствующее микросостоянию i канонической системы с энергией E_i. В частности, среднее значение энергии E системы равно:

$$< E > = \frac{\sum_i E_i e^{-\frac{E_i}{kT}}}{\sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}} = -\frac{\partial \ln \sum_i e^{-\beta E_i}}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta},$$

где $\beta \equiv \frac{1}{kT}$.

Вероятность того, что каноническая система находится в любом из микросостояний с энергией E_α, т.е. в макросостоянии α, равна

$$P(E_\alpha) = \Gamma(E_\alpha) \cdot C \cdot e^{-\frac{E_\alpha}{kT}},$$

где $\Gamma(E_\alpha)$ – число микросостояний, соответствующих макросостоянию α.

Распределение Максвелла.

Рассмотрим статистическую систему, состоящую из одной частицы (материальной точки, молекулы), находящейся в выделенном объеме V. В соответствии с квантово-механическими соотношениями неопределенностей (см. п. 8)

$$\Delta p_x \cdot \Delta x \geq \hbar/2, \Delta p_y \cdot \Delta y \geq \hbar/2, \Delta p_z \cdot \Delta z \geq \hbar/2$$

можно считать, что одному микросостоянию одной частицы соответствует (одна частица занимает) в 6-мерном фазовом пространстве $\{x, y, z, p_x, p_y, p_z\}$ объем $(\hbar/2)^3$. Нельзя указать место нахождения частицы внутри объема $(\hbar/2)^3$. Таким образом, число микросостояний для одной частицы в некотором физически малом фазовом объеме $\{dx, dy, dz, dp_x, dp_y, dp_z\}$ (в элементе фазового пространства) будет равно

$$\mathrm{d}\Gamma = \frac{1}{(\hbar/2)^3}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z .$$

Следовательно, вероятность нахождения частицы с энергией E в физически малом фазовом объеме $\{\mathrm{d}x, \mathrm{d}y, \mathrm{d}z, \mathrm{d}p_x, \mathrm{d}p_y, \mathrm{d}p_z\}$ –

$$\mathrm{d}p(x,y,z,p_x,p_y,p_z) = \mathrm{d}\Gamma C\ell^{-\beta\cdot E} = Ce^{-\beta\cdot E(x,y,z,p_x,p_y,p_z)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z .$$

Здесь C находится из условия нормировки:

$$\iiint\limits_{x,y,z}\iiint\limits_{p_x,p_y,p_z}\mathrm{d}p(x,y,z,p_x,p_y,p_z) =$$

$$= \iiint\limits_{x,y,z}\iiint\limits_{p_x,p_y,p_z} Ce^{-\beta\cdot E(x,y,z,p_x,p_y,p_z)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z = 1 .$$

Для одной частицы механическая энергия E равна сумме кинетической E_k и потенциальной E_p энергий: $E(x,y,z,p_x,p_y,p_z) = E_k(p_x,p_y,p_z) + E_p(x,y,z)$. В результате получим <u>распределение Максвелла-Больцмана</u> (каноническое распределение для одной молекулы).

$$\mathrm{d}p(x,y,z,p_x,p_y,p_z) = Ce^{-\beta\cdot(E_k+E_p)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z =$$

$$= C\ell^{-\beta\cdot E_k(p_x,p_y,p_z)}e^{-\beta\cdot E_p(x,y,z)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z =$$

$$= Ce^{-\beta\cdot E_k(p_x,p_y,p_z)}\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z e^{-\beta\cdot E_p(x,y,z)}\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z =$$

$$= \mathrm{d}p_M(\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z)\mathrm{d}p_B(\mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z)$$

<u>Распределение Максвелла</u> – вероятность того, что частица обладает импульсом $\boldsymbol{p}$, проекции которого лежат в интервалах (p_x, p_x+dp_x), (p_y, p_y+dp_y) и (p_z, p_z+dp_z), вне зависимости от своего места нахождения:

$$\mathrm{d}p_M(p_x,p_y,p_z) = \iiint\limits_{x,y,z}\mathrm{d}p(x,y,z,p_x,p_y,p_z) = Ce^{-\frac{E_k(p_x,p_y,p_z)}{kT}}\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z .$$

Вероятность того, что частица обладает скоростью $\boldsymbol{\upsilon}$, проекции которой лежат в интервалах $(\upsilon_x, \upsilon_x+d\upsilon_x)$, $(\upsilon_y, \upsilon_y+d\upsilon_y)$ и $(\upsilon_z, \upsilon_z+d\upsilon_z)$, вне зависимости от своего места нахождения:

$$\mathrm{d}p_M(\upsilon_x,\upsilon_y,\upsilon_z) = \iiint\limits_{x,y,z}\mathrm{d}p(x,y,z,p_x,p_y,p_z) = Cm^{3\cdot}e^{-\frac{E_k(v_x,v_y,v_z)}{kT}}\mathrm{d}\upsilon_x\mathrm{d}\upsilon_y\mathrm{d}\upsilon_z .$$

<u>Справочный материал.</u>

$$\int\limits_0^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a}}\cdot x^{2n}\mathrm{d}x = \frac{\sqrt{\pi a}}{2}\cdot\frac{(2n)!}{n!\cdot 2^{2n}}\cdot a^n, n = 0, 1, 2, \ldots ,$$

$$\int\limits_0^{+\infty} e^{-\frac{x^2}{a}}\cdot x^{2n+1}\mathrm{d}x = \frac{n!}{2}\cdot a^{n+1},\ n = 0, 1, 2, \ldots .$$

Воспользуемся нормировкой функции плотности вероятностей для нахождения константы C:

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}p_M(p_x,p_y,p_z) = \int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty}\int_{-\infty}^{+\infty} Ce^{-\frac{mv_x^2+mv_y^2+mv_z^2}{2kT}}\mathrm{d}p_x\mathrm{d}p_y\mathrm{d}p_z =$$

$$= Cm^3\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}}\mathrm{d}\upsilon_x \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{mv_y^2}{2kT}}\mathrm{d}\upsilon_y \cdot \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{mv_z^2}{2kT}}\mathrm{d}\upsilon_z =$$

$$= Cm^3\left(2\int_0^{+\infty} e^{-\frac{mv_x^2}{2kT}}\mathrm{d}\upsilon_x\right)^3 = Cm^3\left(2\frac{1}{2}\sqrt{\pi\frac{2kT}{m}}\right)^3 = Cm^3\left(\frac{2\pi kT}{m}\right)^{3/2} = 1.$$

<u>Распределение Максвелла по проекциям скорости:</u>

$$\mathrm{d}p_M(\upsilon_x,\upsilon_y,\upsilon_z) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m\upsilon_x^2+m\upsilon_y^2+m\upsilon_z^2}{2kT}}\mathrm{d}\upsilon_x\mathrm{d}\upsilon_y\mathrm{d}\upsilon_z.$$

<u>Распределение Максвелла по проекции скорости ($-\infty < \upsilon_x < +\infty$):</u>

$$\mathrm{d}p_M(\upsilon_x) = \iint_{v_y,v_z}\mathrm{d}p_M(\upsilon_x,\upsilon_y,\upsilon_z) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{1/2} e^{-\frac{m\upsilon_x^2}{2kT}}\mathrm{d}\upsilon_x.$$

<u>Распределение Максвелла по величине скорости и направлению</u> – вероятность того, что частица обладает величиной скорости в интервале значений (υ, υ+dυ) и направлением скорости, задаваемом углами φ и ϑ (в сферической системе координат), лежащими в интервалах (φ, φ+dφ), (ϑ, ϑ+dϑ), вне зависимости от своего места нахождения:

$$\mathrm{d}p_M(\upsilon,\varphi,\vartheta) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m\upsilon^2}{2kT}}\upsilon^2\sin\vartheta\mathrm{d}\upsilon\mathrm{d}\varphi\mathrm{d}\vartheta.$$

<u>Распределение Максвелла по величине скорости</u> – вероятность того, что частица обладает величиной скорости в интервале значений (υ, υ+dυ) вне зависимости от направления скорости и своего места нахождения:

$$\mathrm{d}p_M(\upsilon) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{m\upsilon^2}{2kT}}4\pi\upsilon^2\mathrm{d}\upsilon.$$

<u>Распределение Максвелла по величине кинетической энергии</u> – вероятность того, что частица обладает кинетической энергией E_k в интервале значений (E_k, E_k+dE_k) вне зависимости от направления скорости и своего места нахождения:

$$\mathrm{d}p_M(E_k) = \left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{E_k}{kT}}4\pi\left(\frac{2E_k}{m^3}\right)^{1/2}\mathrm{d}E_k.$$

Среднеквадратичная скорость – $\sqrt{\overline{\upsilon^2}}$:

$$\overline{\upsilon^2} \equiv \int_0^{+\infty}\upsilon^2\mathrm{d}p(\upsilon) = \int_0^{+\infty}\upsilon^2\left(\frac{m}{2\pi kT}\right)^{3/2} e^{-\frac{mv^2}{2kT}}4\pi\upsilon^2\mathrm{d}\upsilon = \frac{3kT}{m},$$

$$\sqrt{\overline{\upsilon^2}} \equiv \sqrt{\frac{3kT}{m}} \cong 1.73\sqrt{\frac{RT}{\mu}}.$$

6. Вероятность эффекта Мессбауэра

В рамках сделанных предположений (см. §4 в Главе I) получим вероятность эффекта Мессбауэра (фактор Мессбауэра) f. Гамильтониан системы из n взаимодействующих с γ-квантами нуклонов, составляющих ядро, в нерелятивистском приближении имеет вид [22]:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2m_i}\left(\hat{\boldsymbol{p}}_i - e_i\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r}_i)\right)^2,$$

где m_i, $\hat{\boldsymbol{p}}_i$, e_i и $\boldsymbol{r}_i$ – соответственно масса, оператор импульса, заряд и радиус-вектор i-го нуклона, а $\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r}_i)$ – оператор вектор-потенциала электромагнитного поля. Возведем разность операторов в квадрат:

$$\hat{H}(\vec{r},\vec{p}) = \sum_{i=1}^{n} \frac{1}{2m_i}\left(\hat{\boldsymbol{p}}_i^2 - \left(e_i\hat{\boldsymbol{p}}_i \cdot \hat{\boldsymbol{A}} + e_i\hat{\boldsymbol{A}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}_i\right) + e_i^2\hat{\boldsymbol{A}}^2\right).$$

Оператор вектор-потенциала в общем случае может быть представлен в виде разложения по плоским волнам:

$$\hat{\boldsymbol{A}}(\boldsymbol{r}_i) = \sum_{\vec{k}_\gamma,\vec{e}} \left(\hat{A}(\boldsymbol{k}_\gamma,\boldsymbol{e}) \cdot e^{i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{r}} + \hat{A}^*(\boldsymbol{k}_\gamma,\boldsymbol{e}) \cdot e^{-i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{r}}\right),$$

где $\hat{A}^*(\boldsymbol{k}_\gamma,\boldsymbol{e})$ и $\hat{A}(\boldsymbol{k}_\gamma,\boldsymbol{e})$ – операторы испускания и поглощения γ-квантов с волновым вектором $\boldsymbol{k}_\gamma$ и поляризацией $\boldsymbol{e}$. Матричные элементы этих операторов отличны от нуля только в тех случаях, когда число фотонов данного типа изменяется на единицу.

Взаимодействие нуклонов с полем рассмотрим как возмущение, вызывающее электромагнитный переход ядра. Процесс испускания одного γ-кванта с волновым вектором $\boldsymbol{k}_\gamma$ и поляризацией $\boldsymbol{e}$ определяется только одним членом из суммы и описывается оператором взаимодействия

$$\hat{H}'(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) = -\sum_{i=1}^{n} \frac{e_i}{2m_i}\left(\hat{\boldsymbol{p}}_i \cdot \hat{A}^*(\boldsymbol{k}_\gamma,\boldsymbol{e}) \cdot e^{-i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{r}} + \hat{A}(\boldsymbol{k}_\gamma,\boldsymbol{e}) \cdot e^{-i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{r}} \cdot \hat{\boldsymbol{p}}_i\right).$$

Выразим теперь радиус-векторы нуклонов $\boldsymbol{r}_i$ через внутриядерные радиус-векторы $\boldsymbol{r}_i'$ (относительно центра масс ядра) и радиус-вектор центра масс ядра $\boldsymbol{u}$:

$$\boldsymbol{r}_i = \boldsymbol{r}_i' + \boldsymbol{u}.$$

Для гамильтониана, описывающего процесс испускания γ-кванта, получим (с учетом того, что величина импульса движения нуклона вместе с ядром гораздо меньше величины импульса внутреннего движения нуклона $P << p_i$)

$$\hat{H}'(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{p}) = \ell^{-i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{u}} \cdot \hat{H}'(\boldsymbol{r}_i', \boldsymbol{p}').$$

Как видим, этот оператор представлен в виде произведения двух множителей, один из которых зависит только от координат центра тяжести ядра, а второй – от внутренних координат и импульсов нуклонов.

Если считать внутреннее движение нуклонов и движение ядра как целого независимыми, то волновую функцию системы можно представить в виде произведения волновой функции ядра, зависящей от внутренних ядерных координат нуклонов $\boldsymbol{r}'$, и волновой функции, зависящей от координаты центра масс ядра $\boldsymbol{u}$:

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(\boldsymbol{r}')\varphi(\boldsymbol{u}).$$

Такое разделение переменных позволяет представить матричный элемент оператора перехода системы из начального состояния (a) в конечное состояние (b) в виде произведения двух факторов:

$$\left\langle \psi_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{r}) \middle| \hat{H}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{p}) \middle| \psi_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r}) \right\rangle = \left\langle \psi_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{r}') \middle| \hat{H}'(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{p}') \middle| \psi_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{r}') \right\rangle \cdot \left\langle \varphi_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{u}) \middle| \ell^{-i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{u}} \middle| \varphi_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{u}) \right\rangle.$$

Первый фактор зависит только от структуры ядра и является постоянной величиной для данного γ-перехода. Относительная вероятность w_{ab} перехода колебательной системы из состояния a в состояние b будет определяться выражением

$$w_{\mathrm{ab}} = \left| \left\langle \varphi_{\mathrm{b}}(\boldsymbol{u}) \middle| e^{-i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{u}} \middle| \varphi_{\mathrm{a}}(\boldsymbol{u}) \right\rangle \right|^2,$$

зависящим от положения центра тяжести ядра, причем сумма вероятностей переходов во все возможные конечные состояния равна

$$\sum_{\mathrm{b}} w_{\mathrm{ab}} = 1.$$

В частности, когда нет изменения состояния колебательной системы (нет передачи энергии γ-квантом твердому телу), вероятность эффекта Мессбауэра равна

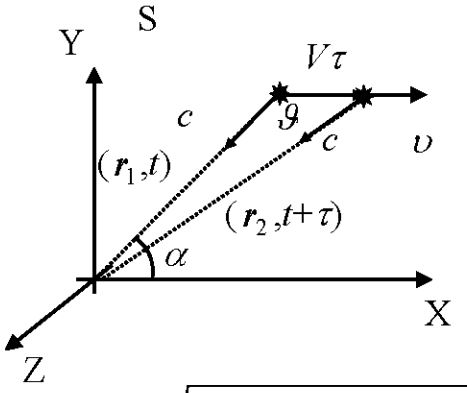
$$\mathrm{f} = w_{\mathrm{aa}} = \left| \left\langle \varphi_{\mathrm{a}} \middle| \ell^{-i\boldsymbol{k}_\gamma \cdot \boldsymbol{u}} \middle| \varphi_{\mathrm{a}} \right\rangle \right|^2.$$

Здесь $\langle \varphi_{\mathrm{a}} |$ – волновая функция начального и конечного колебательных состояний твердого тела.

7. Эффект Доплера

Пусть источник электромагнитных колебаний с известными периодом T_0 и частотой ν_0 движется относительно инерциальной системы S со скоростью υ вдоль оси X (см. рис.). Найдем период T и частоту ν излучения относительно неподвижного приемника, находящегося в начале системы отсчета S.

Воспользуемся так называемым эффектом замедления времени. Если T_0 – собственный период колебаний источника, а τ – период колебаний по часам "неподвижной" системы S, то



$$\tau = \gamma T_0 = \frac{1}{\sqrt{1-(\upsilon/c)^2}} T_0 .$$

Период колебаний T, воспринимаемый приемником, расположенным в начале системы отсчета S, будет равен

$$T = \left(\tau + \frac{r_2}{c}\right) - \left(0 + \frac{r_1}{c}\right) = \tau + \frac{r_2 - r_1}{c} =$$

$$= \tau + \frac{\sqrt{(x_1+\upsilon\tau)^2 + y_1^2 + z_1^2} - \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}}{c} .$$

В случае далекого источника излучения – $r_1 = \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2} >> \upsilon\tau$:

$$\sqrt{(x_1+\nu\tau)^2 + y_1^2 + z_1^2} \cong \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2} + \frac{2x_1}{2\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}}\upsilon\tau ,$$

$$T = \tau + \frac{x_1}{c\sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2}}\upsilon\tau = \tau\left(1 + \frac{\upsilon}{c}\cos\alpha\right) = T_0 \frac{1 + \frac{\upsilon}{c}\cos\alpha}{\sqrt{1-(\upsilon/c)^2}} .$$

Соответственно для частот

$$\nu = \nu_0 \frac{\sqrt{1-(\upsilon/c)^2}}{1 + \frac{\upsilon}{c}\cos\alpha} \text{ или } \nu = \nu_0 \frac{\sqrt{1-(\upsilon/c)^2}}{1 - \frac{\upsilon}{c}\cos\vartheta} ,$$

где угол ϑ – угол между направлениями движения источника и вылета γ-кванта. В случае нерелятивистских скоростей движения источника $\upsilon << c$:

$$\nu = \nu_0 \frac{\sqrt{1-(\upsilon/c)^2}}{1 - \frac{\upsilon}{c}\cos\vartheta} \cong \nu_0\left(1 + \frac{\upsilon}{c}\cos\vartheta\right).$$

Продольный эффект Доплера (красное смещение) – $\vartheta = 0$ ($\alpha = \pi$):

$$\nu = \nu_0 \frac{\sqrt{1-(\upsilon/c)^2}}{1-\upsilon/c} = \nu_0\sqrt{\frac{1+\upsilon/c}{1-\upsilon/c}} \cong \nu_0\left(1 + \frac{\upsilon}{c}\right).$$

Поперечный эффект Доплера – $\vartheta = \pi/2$ ($\alpha = \pi/2$):

$$\nu = \nu_0\sqrt{1-(\upsilon/c)^2} \cong \nu_0\left(1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\upsilon}{c}\right)^2\right).$$

8. Динамика атомов в твердом теле

Рассмотрим динамику атомов в случае произвольного твердого тела и в случае регулярного (периодического) кристалла.

8.1. Произвольное твердое тело

Пусть $\boldsymbol{u}_k$ – смещение k-го атома из положения равновесия. Разложим потенциальную энергию твердого тела $V(\{\boldsymbol{u}_k\})$, состоящего из N атомов (k = 1, 2, ..., N), в ряд по координатам смещений его атомов из положения равновесия $\boldsymbol{u}_k$ вдоль трех взаимно перпендикулярных направлений j = 1, 2, 3 (X, Y, Z):

$$V(\{\boldsymbol{u}_k\}) = V_0 + \sum_{k=1}^{N}\sum_{j=1}^{3}\left(\frac{\partial V}{\partial u_k^j}\right)_0 u_k^j + \frac{1}{2}\sum_{k,k'=1}^{N}\sum_{j,j'=1}^{3}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_k^j \partial u_{k'}^{j'}}\right)_0 u_k^j u_{k'}^{j'} + \ldots.$$

Постоянное слагаемое в разложении благодаря нормировке потенциальной энергии можно положить равным нулю. Так как положение атомов в равновесии отвечает устойчивому равновесию линейный член должен быть равен нулю. По этой же причине квадратичная форма по смещениям положительно определена.

Таким образом, первый существенный член разложения квадратичен по смещениям и называется **гармоническим членом**, а само приближение – **гармоническим приближением** (случай малых смещений атомов из положений равновесия):

$$V(\{\boldsymbol{u}_k\}) \cong \frac{1}{2}\sum_{k,k'=1}^{N}\sum_{j,j'=1}^{3}\left(\frac{\partial^2 V}{\partial u_k^j \partial u_{k'}^{j'}}\right)_0 u_k^j u_{k'}^{j'} = \frac{1}{2}\sum_{k,k'=1}^{N}\sum_{j,j'=1}^{3} G_{kk'}^{jj'} u_k^j u_{k'}^{j'}. \qquad (1)$$

Здесь $G_{kk'}^{jj'}$ – так называемая **силовая матрица** (**тензор**). Заметим, что силовая матрица $G_{kk'}^{jj'}$ симметрична и вещественна, а значит, она является **эрмитовой**. Кроме того, эта матрица соответствует положительно определенной квадратичной форме (1).

Запишем теперь уравнения движения атомов в твердом теле в проекциях на оси координат j:

$$m_k \ddot{u}_k^j(t) = F_k^j(t) = -\frac{\partial V(t)}{\partial u_k^j} = -\sum_{k'=1}^{N}\sum_{j'=1}^{3} G_{kk'}^{jj'} u_{k'}^{j'}(t), \qquad (2)$$

где m_k – масса k-го атома.

Будем искать решение полученной системы $3N$ дифференциальных уравнений в гармоническом виде

$$u_k^j(t) = u_k^j e^{\mathrm{i}\omega t}, \qquad (3)$$

где u_k^j – комплексная амплитуда. Тогда:

$$\omega^2 m_k u_k^j = \sum_{k'=1}^{N}\sum_{j'=1}^{3} G_{kk'}^{jj'} u_{k'}^{j'}, \tag{4}$$

$$\sum_{k'=1}^{N}\sum_{j'=1}^{3}\left(G_{kk'}^{jj'} - \delta_{kk'}\delta^{jj'}\omega^2 m_k\right)u_{k'}^{j'} = 0. \tag{5}$$

Таким образом, мы получили систему $3N$ линейных уравнений (5), связывающих смещения атомов в различных точках. Эта система справедлива для любого твердого тела вне зависимости от его структурного состояния. Полученная система линейных уравнений является однородной, следовательно, решение этой системы будет нетривиальным при условии, если будет равен нулю ее определитель:

$$\left|G_{kk'}^{jj'} - \delta_{kk'}\delta^{jj'}\omega^2 m_k\right| = 0. \tag{6}$$

Так как силовая матрица $G_{kk'}^{jj'}$ эрмитова, то ее собственные значения вещественны. Собственные значения силовой матрицы являются решениями задачи (6). Другими словами, если привести эту эрмитову матрицу к диагональному виду, то получим на диагонали вещественные значения, которым будут равны $\omega_\alpha^2 m_k$, где $\alpha = 1, 2, .., 3N$ – номер решения.

Поскольку силовая матрица $G_{kk'}^{jj'}$ соответствует положительно определенной квадратичной форме (см. (1)), то главные миноры этой матрицы должны быть положительны. Главные миноры – это поочередно вырезанные определители.

Если матрица диагонализирована, и все ее не равные нулю элементы лежат на диагонали, то первый определитель – это просто одно из значений величины $\omega^2 m_k$ (например, $\omega_1^2 m_k$), второй – произведение двух таких величин и т.д. Но первая величина положительна и последующие тоже, следовательно, мы получим не только вещественные, но и положительные значения $\omega_\alpha^2 m_k$, а значит и вещественные значения частот ω_α. Полученный в результате решения (6) набор $\{\omega_\alpha\}$ из $3N$ значений частот в соответствии с определением (см. §1) являются **нормальными частотами**.

8.2. Регулярный кристалл

Волновой вектор и дисперсионная зависимость. В случае **регулярного (периодического) кристалла** существует трансляционная симметрия в расположении атомов, и каждый атом характеризуется вместо одного ($k = 1, 2, .., N$) двумя индексами: $l = 1, 2, ..., n$ – номером элементарной ячейки (всего n ячеек) и $t = 1, 2, ..., r$ – номером атома в элементарной ячейке (всего r атомов в ячейке). При этом очевидно $N = nr$.

Уравнения движения атомов в регулярном кристалле в гармоническом приближении для комплексных амплитуд u_{tl}^j будут иметь вид:

$$\omega^2 m_t u_{tl}^j = F_{tl}^j = \sum_{t'=1}^{r}\sum_{l'=1}^{n}\sum_{j'=1}^{3} G_{tltl'}^{jj'} u_{t'l'}^{j'} . \qquad (7)$$

Воспользуемся **трансляционной симметрией кристалла**. Можно утверждать, что силовая матрица $G_{tltl'}^{jj'}$ зависит только от относительного расположения элементарных ячеек в решетке кристалла. Зададим положение элементарной ячейки с номером l вектором $\boldsymbol{l}$, тогда вектор $\boldsymbol{h} \equiv \boldsymbol{l}' - \boldsymbol{l}$ будет определять относительное положение ячеек с номерами l' и l:

$$G_{tltl'}^{jj'} = G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h}). \qquad (8)$$

Будем искать решение в виде упругих плоских волн:

$$u_{tl}^j = u_t^j e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{l}}, \qquad (9)$$

где $\boldsymbol{q}$ – волновой вектор плоской волны, задающий направление ее распространения и длину волны λ ($\lambda = 2\pi/q$). По существу выражение (9) означает, что мы будем искать решение, для которого амплитуда (все еще комплексная) колебания атомов u_t^j одинакова в различных элементарных ячейках, положение каждой из которых задается либо номером l, либо вектором $\boldsymbol{l}$. Уравнения движения (7) при этом примут вид:

$$\omega^2 m_t u_t^j e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{l}} = \sum_{t'=1}^{r}\sum_{l'=1}^{n}\sum_{j'=1}^{3} G_{tlt'l'}^{jj'} u_{t'}^{j'} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{l}'} ,$$

$$\omega^2 m_t u_t^j = \sum_{t'=1}^{r}\sum_{l'=1}^{n}\sum_{j'=1}^{3} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{l}'-\boldsymbol{l}) u_{t'}^{j'} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot(\boldsymbol{l}'-\boldsymbol{l})} . \qquad (10)$$

Так как в (10) входит только разность векторов $\boldsymbol{h} \equiv \boldsymbol{l}' - \boldsymbol{l}$, то всегда можно перейти от суммирования по l' к суммированию по $\boldsymbol{h}$ (поскольку выбор точки отсчета не играет никакой роли), т.е. можно ввести в рассмотрение матрицу, зависящую от волнового вектора $\boldsymbol{q}$:

$$G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q}) \equiv \sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h}) e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{h}} . \qquad (11)$$

Эта матрица вообще не зависит от номера (положения) элементарной ячейки так же, как и амплитуда колебаний t-го атома вдоль направления j – u_t^j, а зависит от волнового вектора $\boldsymbol{q}$, номера атома в элементарной ячейке и аргументов декартовой системы координат (j и j'). Теперь уравнения движения атомов примут окончательный простой вид:

$$\omega^2 m_t u_t^j = \sum_{t'=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}}\sum_{j'=1}^{3} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h}) u_{t'}^{j'} e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{h}} = \sum_{j'=1}^{3}\sum_{t'=1}^{r} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q}) u_{t'}^{j'} ,$$

$$\sum_{t'=1}^{r}\sum_{j'=1}^{3}\left(G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q}) - \delta_{tt'}\delta^{jj'}\omega^2 m_t\right) u_{t'}^{j'} = 0 . \qquad (12)$$

В итоге, мы получили систему уравнений порядка $3r$ (12) для комплексных амплитуд $u_{t'}^{j'}$ при данном волновом векторе $\boldsymbol{q}$.

Рассмотрим свойства матрицы $G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q})$. Так как силовая матрица $G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h})$ симметрична и вещественна, то

$$\left(G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q})\right)^* = \sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h}) e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{h}} = \sum_{\boldsymbol{h}} G_{t't}^{j'j}(-\boldsymbol{h}) e^{-i\boldsymbol{q}\cdot(-\boldsymbol{h})} = G_{t't}^{j'j}(\boldsymbol{q}), \qquad (13)$$

откуда видно, что матрица $G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q})$ с комплексными элементами эрмитова, а значит, имеет вещественные собственные значения.

Таким образом, речь идет о решении системы уравнений (12) относительно $u_{t'}^{j'}$ для данного волнового вектора $\boldsymbol{q}$. Нетривиальное решение этих уравнений получится при равенстве нулю соответствующего определителя:

$$\left|G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q}) - \delta_{tt'}\delta^{jj'}\omega^2 m_t\right| = 0. \qquad (14)$$

Это и есть уравнение для определения квадрата частот нормальных колебаний $\omega^2(\boldsymbol{q})$ при заданном волновом векторе $\boldsymbol{q}$ в любом периодическом кристалле. Порядок этого определителя равен $3r$ и гораздо меньше порядка $3N$ определителя (6) в случае произвольного твердого тела, не обладающего трансляционной симметрией.

Поскольку квадрат частоты зависит кроме волнового вектора $\boldsymbol{q}$ от номера решения $\alpha = 1, 2, 3, ..., 3r$ – $\omega_\alpha^2(\boldsymbol{q})$, то говорят о ветвях колебаний. **Ветвь колебания** – это конкретная **дисперсионная зависимость** частоты колебания ω от волнового вектора $\boldsymbol{q}$ – $\omega_\alpha(\boldsymbol{q})$, которая соответствует определенному номеру α решения уравнения движения. Данному волновому вектору (данной длине волны и направлению ее распространения) соответствует в кристалле в общем случае $3r$ различных нормальных колебаний, число которых равно числу степеней свободы атомов в элементарной ячейке.

Определим, какие значения пробегает величина волнового вектора $\boldsymbol{q}$. Обратим внимание на то, что в случае трансляционной симметрии волновой вектор $\boldsymbol{q} + 2\pi\boldsymbol{g}$, где $\boldsymbol{g} = n_1\boldsymbol{b}_1 + n_2\boldsymbol{b}_2 + n_3\boldsymbol{b}_3$ – любой вектор обратной решетки с тройкой базисных векторов $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$ и $\boldsymbol{b}_3$ (о свойствах векторов обратной решетки см. п. 8 в Приложении I), и вектор $\boldsymbol{q}$ <u>физически эквивалентны</u>. Действительно, эти волновые вектора определяют одинаковые значения для комплексной амплитуды u_{tl}^j, матрицы $G_{tt'}^{jj'}$ и, следовательно, в соответствии с (14) квадрата нормальных частот ω_α^2:

$$u_{tl}^j(\boldsymbol{q} + 2\pi\boldsymbol{g}) = u_t^j e^{-i(\boldsymbol{q}+2\pi\boldsymbol{g})\cdot\boldsymbol{l}} = u_t^j e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{l}} = u_{tl}^j(\boldsymbol{q}),$$

$$G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q} + 2\pi\boldsymbol{g}) = \sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(h) e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{h}} e^{-i2\pi\boldsymbol{g}\cdot\boldsymbol{h}} = \sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(h) e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{h}} = G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q}). \qquad (15)$$

Как видим, все физически неэквивалентные волновые вектора $\boldsymbol{q}$ лежат внутри зоны Бриллюена – ячейки Вигнера-Зейца, построенной на векторах обратной решетки $2\pi\boldsymbol{b}_1$, $2\pi\boldsymbol{b}_2$ и $2\pi\boldsymbol{b}_3$ (см. п. 8 в Приложении I). При этом частота для каждой из ветвей является периодической функцией волнового вектора:

$$\omega_\alpha^2(\boldsymbol{q}+2\pi\boldsymbol{g})=\omega_\alpha^2(\boldsymbol{q}). \tag{16}$$

Кроме того, квадрат частоты является четной функцией волнового вектора, поскольку, взяв комплексное сопряжение от обеих частей уравнений движения (11) и заменив $\boldsymbol{q}$ на $-\boldsymbol{q}$, мы получим:

$$\left(G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q})\right)^*=\sum_{\boldsymbol{h}}G_{tt'}^{jj'}(h)e^{-i(-\boldsymbol{q})\cdot\boldsymbol{h}}=G_{tt'}^{jj'}(-\boldsymbol{q}),$$

$$\omega^2(\boldsymbol{q})m_t\left(u_t^j\right)^*=\left(\omega^2(\boldsymbol{q})m_tu_t^j\right)^*=\sum_{j'=1}^{3}\sum_{t'=1}^{r}\left(G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q})\right)^*\left(u_{t'}^{j'}\right)^*=$$

$$=\sum_{j'=1}^{3}\sum_{t'=1}^{r}G_{tt'}^{jj'}(-\boldsymbol{q})\left(u_{t'}^{j'}\right)^*=\omega^2(-\boldsymbol{q})m_t\left(u_t^j\right)^*,$$

$$\omega_\alpha^2(-\boldsymbol{q})=\omega_\alpha^2(\boldsymbol{q}). \tag{17}$$

В случае достаточно толстого кристалла (кристалл, размер которого гораздо больше интересующих нас длин упругих волн) истинные граничные условия на поверхности кристалла не играют роли. Учет истинных граничных условий – это поверхностный эффект по отношению к объему (существуют поверхностные волны, которые затухают вглубь кристалла). Поэтому всегда можно выбрать такие граничные условия, которые удобны. Выберем **периодические граничные условия**, то есть принудительно заставим атомы, расположенные на противоположных гранях кристалла, иметь одинаковые смещения. При этих граничных условиях

$$u_{tl}^j(\boldsymbol{L}_i)=u_t^je^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{L}_i}=u_{tl}^j(0)=u_t^j,\ e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{L}_i}=1, \tag{18}$$

где $\boldsymbol{L}_i=L_i\boldsymbol{i}$ $\left(\boldsymbol{i}=\boldsymbol{i}_x,\boldsymbol{i}_y,\boldsymbol{i}_z\right)$; $L_i=L_x,L_y,L_z$ – линейные размеры кристалла. Следовательно, должно быть

$$q_iL_i=2\pi n_i,$$

где $n_i=0, 1, 2, \ldots$ и

$$\Delta q_i=\frac{2\pi}{L_i}\Delta n_i=\frac{2\pi}{L_i}. \tag{19}$$

Как видим, при выбранных граничных условиях проекции волнового вектора принимают эквидистантные дискретные значения, равномерно заполняя пространство волновых векторов. Из (19) следует, что на каждое волновое **состояние** приходится в обратном пространстве объем $(2\pi)^3/V$, где V – объем кристалла. Соответствующие волновые вектора $\boldsymbol{q}$ равномерно заполняют первую ячейку обратной решетки с плотностью $V/(2\pi)^3$.

Таким образом, общее число состояний с физически различными волновыми векторами в элементе объема d^3q равно $\mathrm{d}N = V/(2\pi)^3 \mathrm{d}^3q$, а полное число состояний с физически различными волновыми векторами для кристалла с размерами L_x, L_y и L_z равно полному числу элементарных ячеек в кристалле:

$$\frac{V_\mathrm{B}}{(2\pi)^3/V} = \frac{(2\pi)^3/\upsilon}{(2\pi)^3/V} = n. \tag{20}$$

Здесь $V_\mathrm{B} = \dfrac{(2\pi)^3}{\upsilon}$ – объем зоны Бриллюена, а υ – объем элементарной ячейки.

С другой стороны существует всего $3r$ в общем случае различных ветвей, следовательно, полное число физически разных колебательных состояний (упругих волн) равно $3rn = 3N$ – полному числу степеней свободы кристалла.

Акустические и оптические ветви колебаний. Если все атомы сдвинуть одинаково на $u^k \neq 0$ в произвольном направлении $\boldsymbol{k}$, то между атомами не должны возникнуть никакие силы взаимодействия (кристалл свободен), следовательно, согласно (7):

$$F_{tl}^j = -\sum_{t'=1}^{r}\sum_{l'=1}^{n}\sum_{j'=1}^{3} G_{tlt'l'}^{jj'} u_{t'l'}^{j'} = -u^k \sum_{t'=1}^{r}\sum_{l'=1}^{n} G_{tlt'l'}^{jk} = -u^k \sum_{t'=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jk}(\boldsymbol{h}) = 0,$$

$$\sum_{t'=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jk}(\boldsymbol{h}) = 0.$$

Матрица $G_{tt'}^{jk}(\boldsymbol{h})$ в силу ее симметричности, произвольности направлений j и k и обозначения индексов суммирования t и t', а также независимости суммирования по t и $\boldsymbol{h}$ должна удовлетворять условию:

$$\sum_{t'=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jk}(\boldsymbol{h}) = \sum_{t'=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{t't}^{kj}(-\boldsymbol{h}) = \sum_{t=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h}) = 0. \tag{21}$$

Рассмотрим теперь свойства упругих волн при $|\boldsymbol{q}| \equiv q \to 0$ ($\lambda \to \infty$, длина волны велика по сравнению с межатомным расстоянием). Просуммируем обе части уравнений движения (10) по всем атомам в элементарной ячейке

$$\sum_{t=1}^{r} \omega^2(\boldsymbol{q}) m_t u_t^j = \sum_{j'=1}^{3}\sum_{tt'=1}^{r} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{q}) u_{t'}^{j'} = \sum_{j'=1}^{3}\sum_{t,t'=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h}) e^{-i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{h}} u_{t'}^{j'}$$

и учтем, что при $q \to 0$ также реализуется соотношение (21):

$$\omega^2(q \to 0)\sum_{t=1}^{r} m_t u_t^j(q \to 0) = \sum_{j'=1}^{3}\sum_{t,t'=1}^{r}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h}) u_{t'}^{j'}(q \to 0),$$

$$\omega^2(q\to 0)\sum_{t=1}^{r} m_t u_t^j(q\to 0)=\sum_{j'=1}^{3}\sum_{t'=1}^{r} u_{t'}^{j'}(q\to 0)\sum_{t=1}^{n}\sum_{\boldsymbol{h}} G_{tt'}^{jj'}(\boldsymbol{h})=0\,. \qquad (22)$$

Из полученного уравнения следует, что возможны два случая.

1. В первом случае решение соответствует частоте, равной нулю $\omega^2(q\to 0)=0$, и смещению центра масс элементарной ячейки (постоянному смещению атомов в элементарной ячейке при $\lambda >> \{a_i\}$). Такие колебания называют **акустическими (звуковыми)**. Акустических колебаний может быть три, поскольку независимые одинаковые смещения атомов в элементарной ячейке мы можем взять по трем направлениям (различная поляризация упругой волны при одном волновом векторе $\boldsymbol{q}$).

При малом волновом векторе $\boldsymbol{q}=q\boldsymbol{i}$ вдоль произвольного направления $\boldsymbol{i}$ (например, оси декартовой системы координат) для каждой из ветвей акустических колебаний можно записать:

$$\omega_\alpha^2(\boldsymbol{q})=\omega_\alpha^2(0)+\frac{\partial\omega_\alpha^2}{\partial q}q+\frac{1}{2}\cdot\frac{\partial^2\omega_\alpha^2}{\partial q^2}q^2=c_\alpha^2(\boldsymbol{i})q^2\,. \qquad (23)$$

Здесь линейный член отсутствует, поскольку функция $\omega_\alpha^2(\boldsymbol{q})$ четная, а коэффициент $c_\alpha^2(\boldsymbol{i})$ положителен и зависит только от направления волнового вектора. Для нормальной частоты акустических колебаний можно записать:

$$\omega_\alpha(\boldsymbol{q})=c_\alpha(\boldsymbol{i})q\,. \qquad (24)$$

Как видим, в случае акустических колебаний при $q\to 0$ частота пропорциональна волновому числу q. При этом **фазовая скорость волны** $\dfrac{\omega_\alpha(\boldsymbol{q})}{q}=c_\alpha(\boldsymbol{i})$ конечна и в общем случае анизотропного кристалла зависит от направления распространения волны. **Групповая скорость волны** оказывается равной фазовой – $\dfrac{\partial\omega_\alpha(\boldsymbol{q})}{\partial q}=c_\alpha(\boldsymbol{i})$.

2. Во втором случае частота не обращается в нуль при стремлении волнового вектора к нулю – $\omega^2(q\to 0)\neq 0$, а $\sum_{t=1}^{r} m_t u_t^j(q\to 0)=0$. При этом центр масс элементарной ячейки покоится:

$$\Delta\boldsymbol{r}_{цм}=\frac{\sum_{t=1}^{r} m_t\boldsymbol{u}_t}{\sum_{t=1}^{r} m_t}=\frac{\sum_{t=1}^{r} m_t\sum_{j=1}^{3} u_t^j\boldsymbol{j}}{\sum_{t=1}^{r} m_t}=\frac{\sum_{j=1}^{3}\boldsymbol{j}\sum_{t=1}^{r} m_t u_t^j}{\sum_{t=1}^{r} m_t}=0$$

и атомы колеблются относительно центра масс. Колебания происходят во всех элементарных ячейках одинаково. Такие колебания называют **оптическими**.

При малом волновом векторе $\boldsymbol{q} = q\boldsymbol{i}$ вдоль произвольного направления $\boldsymbol{i}$ для каждой из ветвей оптических колебаний можно записать:

$$\omega_\alpha^2(\boldsymbol{q}) = \omega_\alpha^2(0) + \frac{\partial \omega_\alpha^2}{\partial q} q + \frac{1}{2} \cdot \frac{\partial^2 \omega_\alpha^2}{\partial q^2} q^2 = \omega_\alpha^2(0) + c_\alpha^2(\boldsymbol{i}) q^2 . \qquad (25)$$

Как видим, в случае оптических колебаний при $q \to 0$ частота стремится к постоянной величине $\omega_\alpha^2(0)$. При этом фазовая скорость волны стремится к бесконечности – $\frac{\omega_\alpha(\boldsymbol{q})}{q} \to \infty$, а групповая – к нулю – $\frac{\partial \omega_\alpha(\boldsymbol{q})}{\partial q} \to c_\alpha^2(\boldsymbol{i}) \frac{q}{\omega_\alpha(\boldsymbol{q})} \to 0$.

Как видим, в решетке кристалла, имеющего более одного атома в элементарной ячейке, существуют так называемые акустические и оптические ветви колебаний. Акустическим ветвям в длинноволновом приближении соответствуют совместные колебания всех r атомов элементарной ячейки как целого. Спектр этих колебаний простирается от нуля до некоторой максимальной частоты ω_m, которая соответствует минимальной длине волны звуковых колебаний (определяемая дискретностью среды), распространяющихся в твердом теле.

Оптические колебания соответствуют смещению атомов одного сорта относительно атомов другого сорта в элементарной ячейке, при этом центр масс всей элементарной ячейки остается неподвижным. Спектр этих колебаний начинается с некоторой граничной частоты ω_o.

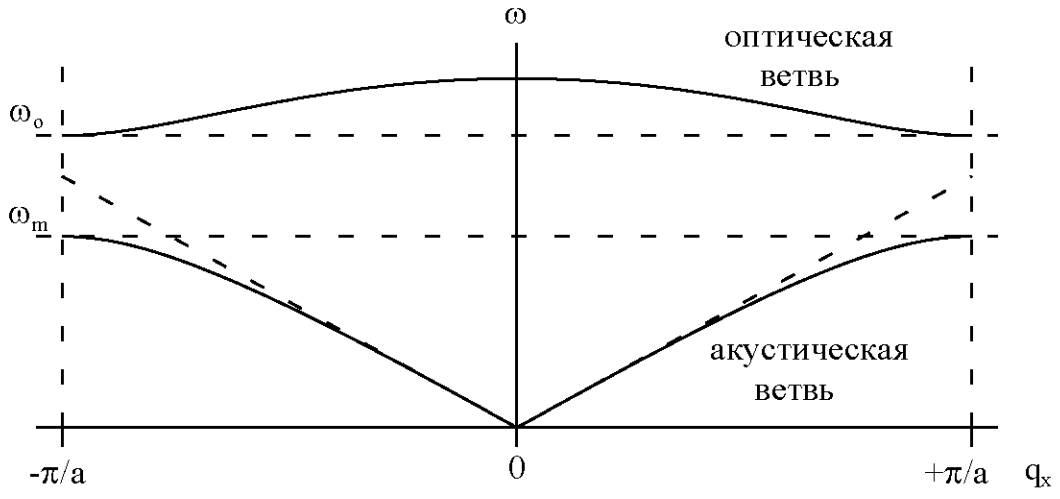


Рис. Дисперсионные кривые для акустических и оптических колебаний в двухатомной одномерной линейной цепочке атомов

Акустические колебания состоят всегда из трех ветвей (продольной и двух поперечных), а число оптических ветвей колебаний равно числу степеней свободы атомов в элементарной ячейке $3r$ без числа степеней свободы элементарной ячейки как целой: $3r–3 = 3(r–1)$, где r – число атомов в элементарной ячейке.

В качестве примера на рисунке приведены дисперсионные кривые (ветви колебаний) для акустических и оптических колебаний в двухатомной одномерной линейной цепочке атомов.

9. Прямая и обратная решетки

Трансляционная симметрия. Существуют три **базисных вектора (параметры элементарной ячейки)** – $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ и $\boldsymbol{a}_3$, таких, что атомная структура остается неизменной при параллельных переносах (трансляциях) на любой вектор, представляющий собой линейную комбинацию этих трех векторов с целочисленными коэффициентами

$$\boldsymbol{l} = l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3.$$

Периодические функции. Условие трансляционной симметрии – функция должна быть периодической функцией трех переменных.

$$f(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{l}) = f(\boldsymbol{r}).$$

Это равенство выполняется во всех точках пространства

Напомним, что любую периодическую функцию $f(x)$ с периодом а можно разложить в ряд Фурье

$$f(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} A_n \cdot e^{2\pi i \cdot n \cdot \frac{x}{a}},$$

$$A_n = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{+a/2} f(x) e^{-2\pi i \cdot n \cdot \frac{x}{a}} \mathrm{d}x = \frac{1}{a}\int_0^a f(x) e^{-2\pi i \cdot n \cdot \frac{x}{a}} \mathrm{d}x.$$

Распространим разложение на случай периодичности функции $f(\boldsymbol{r}) \equiv f(x\boldsymbol{i} + y\boldsymbol{j} + z\boldsymbol{k})$ вдоль трех некомпланарных осей, задаваемых базисными векторами, $\boldsymbol{a}_1$, $\boldsymbol{a}_2$ и $\boldsymbol{a}_3$, последовательно представляя функцию $f(\boldsymbol{r})$ в виде ряда Фурье по координатам x, y и z:

$$f(\boldsymbol{r}) = \sum_{n_1,n_2,n_3=-\infty}^{\infty} A_{n_1 n_2 n_3} \cdot e^{2\pi i \cdot \left(n_1 \cdot \frac{x}{a_1} + n_2 \cdot \frac{y}{a_2} + n_3 \cdot \frac{z}{a_3}\right)}.$$

Введем в рассмотрение **тройку базисных векторов обратной решетки (параметры обратной решетки)** $\boldsymbol{b}_1$, $\boldsymbol{b}_2$ и $\boldsymbol{b}_3$:

$$\boldsymbol{b}_1 \equiv \frac{1}{\upsilon}[\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{a}_3],\ \boldsymbol{b}_2 \equiv \frac{1}{\upsilon}[\boldsymbol{a}_3\boldsymbol{a}_1],\ \boldsymbol{b}_3 \equiv \frac{1}{\upsilon}[\boldsymbol{a}_1\boldsymbol{a}_2],$$

где $\upsilon \equiv (\boldsymbol{a}_1[\boldsymbol{a}_2\boldsymbol{a}_3])$ – объем элементарной ячейки.

Так как $\boldsymbol{b}_i \cdot \boldsymbol{a}_j = \delta_{ij}$, то легко показать, что

$$f(\boldsymbol{r}) = \sum_g A_g \cdot e^{2\pi i \cdot \left(n_1 \frac{x}{a_1} + n_2 \frac{y}{a_2} + n_3 \frac{z}{a_3} \right)} = \sum_g A_g \cdot e^{2\pi i \cdot \boldsymbol{g} \cdot \vec{r}},$$

$$A_g = \frac{1}{v} \int_v f(\boldsymbol{r}) \cdot e^{-2\pi i \cdot \boldsymbol{g} \cdot \boldsymbol{r}} \mathrm{d}x\mathrm{d}y\mathrm{d}z,$$

где $\boldsymbol{g} = n_1\boldsymbol{b}_1 + n_2\boldsymbol{b}_2 + n_3\boldsymbol{b}_3$ – векторы обратной решетки; интегрирование ведется по элементарной ячейке.

Свойства обратной решетки.

1. Каждый вектор обратной решетки перпендикулярен некоторой совокупности параллельных атомных плоскостей прямой решетки.

2. Если компоненты вектора обратной решетки $\boldsymbol{g}$ не имеют общего множителя, то абсолютная величина этого вектора обратно пропорциональна расстоянию между плоскостями решетки, перпендикулярными вектору $\boldsymbol{g}$.

3. Объем элементарной ячейки обратной решетки обратно пропорционален объему элементарной ячейки прямой решетки.

4. Прямая решетка является обратной по отношению к своей обратной решетке.

5. Скалярное произведение произвольных векторов прямой $\boldsymbol{l} = l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3$ и обратной $\boldsymbol{g} = n_1\boldsymbol{b}_1 + n_2\boldsymbol{b}_2 + n_3\boldsymbol{b}_3$ решеток равно целому числу:

$$\boldsymbol{l} \cdot \boldsymbol{g} = (l_1\boldsymbol{a}_1 + l_2\boldsymbol{a}_2 + l_3\boldsymbol{a}_3) \cdot (n_1\boldsymbol{b}_1 + n_2\boldsymbol{b}_2 + n_3\boldsymbol{b}_3) = l_1n_1 + l_2n_2 + l_3n_3,$$

поскольку $\boldsymbol{a}_j \cdot \boldsymbol{b}_j = 1$ и $\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = 0$ при $i \neq j$.

Ячейка Вигнера-Зейца - область пространства, ограниченная плоскостями, проходящими через середину векторов трансляций и перпендикулярными этим векторам.

Зона Бриллюэна - ячейка Вигнера-Зейца в обратной решетке с векторами трансляций $-2\pi\boldsymbol{b}_1$, $2\pi\boldsymbol{b}_2$ и $2\pi\boldsymbol{b}_3$.

10. Основные положения квантовой механики

10.1. Введение

Линейный оператор $\hat{F}$:

$$\hat{F}(\alpha\varphi + \beta\psi) = \alpha\hat{F}(\varphi) + \beta\hat{F}(\psi).$$

Произведение операторов:

$$(\hat{F}\hat{G})\psi \equiv \hat{F}(\hat{G}\psi).$$

Коммутатор операторов:

$$[\hat{F},\hat{G}] \equiv \hat{F}\hat{G} - \hat{G}\hat{F}.$$

Коммутирующие операторы F и G:

$$[\hat{F},\hat{G}] = 0,\ \hat{F}\hat{G} = \hat{G}\hat{F}.$$

Единичный оператор $\hat{I}$ для любой функции ψ:

$$\hat{I}\psi = \psi.$$

Обратный оператор $\hat{F}^{-1}$:

$$\hat{F}^{-1}\hat{F} = \hat{F}\hat{F}^{-1} = \hat{I}.$$

Если $\hat{H} = \hat{F}\hat{G}$, то $\hat{H}^{-1} = \hat{G}^{-1}\hat{F}^{-1}$.

Для непрерывных функций:

$$\hat{F}\psi = \int F(x,y)\psi(y)\mathrm{d}y.$$

Здесь $F(x,y)$ – ядро интегрального оператора.

Ядро единичного оператора – функция Дирака $\delta(x-y)$.

Для дискретных функций:

$$\hat{F}\psi = \sum_n F_{mn}\psi_n.$$

Здесь F_{mn} – матрица оператора.

Матрица единичного оператора – символ Кронекера δ_{mn}.

Скалярное произведение функций φ и ψ:

для непрерывных функций: $(\varphi,\psi) \equiv \langle\varphi|\psi\rangle \equiv \int \varphi^*(x)\psi(x)\mathrm{d}x$,

для дискретных функций: $(\varphi,\psi) \equiv \langle\varphi|\psi\rangle \equiv \sum_n \varphi_n^*\psi_n$.

Заметим, что $(\varphi,\psi)^* \equiv \langle\varphi|\psi\rangle^* = (\psi,\varphi) \equiv \langle\psi|\varphi\rangle$.

Норма функции $\|\psi\| \equiv (\langle\Psi|\Psi\rangle)^{1/2}$.

Сопряженный оператор $\hat{F}^+$: $\langle\varphi|\hat{F}|\psi\rangle = \langle\psi|\hat{F}^+|\varphi\rangle^*$. Свойства:

$$\left(\hat{F}^+\right)^+ = \hat{F},\ \left(\hat{F}\hat{G}\right)^+ = \hat{G}^+\cdot\hat{F}^+,\ \left(\alpha\hat{G}\right)^+ = \alpha^*\hat{G}^+.$$

Для ядер операторов: $F^+(x,y) = F^*(y,x)$.

Для матриц операторов: $F_{mn}^+ = F_{nm}^*$.

Эрмитов оператор: $\hat{F}^+ = \hat{F}$.

Произведение эрмитовых операторов будет эрмитовым, если эти операторы коммутируют – $\left(\hat{F}\hat{G}\right)^{+} = \hat{G}^{+} \cdot \hat{F}^{+} = \hat{G} \cdot \hat{F} = \hat{F} \cdot \hat{G}$.

Если для оператора выполняется соотношение

$$\hat{F}\psi = \lambda\psi,$$

то λ – собственное значение оператора, а ψ – собственная функция.

Собственные значения эрмитового оператора действительны.

Собственные функции эрмитового оператора, относящиеся к различным собственным значениям, ортогональны.

10.2. Основные физические положения

1. Состояние физической системы описывается волновой функцией ψ.

2. Каждой физической величине сопоставляется линейный Эрмитов оператор $\hat{F}$.

3. Физическая величина F может принимать только собственные значения оператора $\hat{F}$.

4. Математическое ожидание $\bar{F}$ (наблюдаемое значение) величины F в состоянии ψ определяется **диагональным матричным элементом**

$$\langle\psi|\hat{F}|\psi\rangle = \int \psi^{*}(x)\hat{F}\psi(x)\mathrm{d}x = \iint \psi^{*}(x)F(x,y)\psi(y)\mathrm{d}y\mathrm{d}x.$$

5. Оператором пространственной координаты частицы $\hat{\boldsymbol{r}} = \left\{\hat{x}_i\right\}$ (в координатном представлении) является оператор умножения на $\{x_i\}$:

$$\hat{\boldsymbol{r}} = \left\{\hat{x}_i\right\} = \boldsymbol{r} = \{x_i\}.$$

6. Оператором импульса частицы является оператор

$$\hat{\boldsymbol{p}} = \left\{\hat{p}_i\right\} = -i\hbar\nabla = -i\hbar\left\{\frac{\partial}{\partial x_i}\right\}.$$

7. Физической величине $G(F)$, которая является функцией другой физической величины F, сопоставляется оператор

$$\hat{G} = \frac{1}{2}\left\{G(\hat{F}) + (G(\hat{F}))^{+}\right\}.$$

8. Время в квантовой механике является не оператором (наблюдаемой величиной), а параметром.

9. Оператор полной энергии системы называется гамильтонианом.

10.3. Собственные значения операторов

Оператор момента:

$$\hat{\boldsymbol{I}} \equiv \frac{1}{\hbar}\left[\hat{\boldsymbol{r}}\,\hat{\boldsymbol{p}}\right] = \frac{1}{\hbar}\left(\hat{\boldsymbol{r}}\cdot\hat{\boldsymbol{p}} - \hat{\boldsymbol{p}}\cdot\hat{\boldsymbol{r}}\right) = -i\left[\hat{\boldsymbol{r}}\nabla\right].$$

Оператор квадрата момента:

$$\hat{\boldsymbol{I}}^2 \equiv \hat{\boldsymbol{I}}^2 = \hat{I}_x^2 + \hat{I}_y^2 + \hat{I}_z^2 = -\Delta_{\vartheta,\varphi} = -\frac{1}{\sin\vartheta}\left(\frac{\partial}{\partial\vartheta}\left(\sin\vartheta\frac{\partial}{\partial\vartheta}\right) + \frac{1}{\sin\vartheta}\frac{\partial^2}{\partial\varphi^2}\right),$$

где $\Delta_{\vartheta,\varphi}$ – угловая часть оператора Лапласа.

$$\hat{\boldsymbol{I}}^2\psi_{I,m_I} = I(I+1)\cdot\psi_{I,m_I},\ I = 0,1,2,3,\ldots,\ m_I = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm(I-1),\pm I.$$

Оператор проекции момента:

$$\hat{I}_z \equiv \frac{1}{\hbar}\left(\hat{x}\,\hat{p}_y - \hat{y}\,\hat{p}_x\right).$$

$$\left[\hat{\boldsymbol{I}}^2\,\hat{I}_z\right] = 0;\ \left[\hat{I}_i\,\hat{I}_j\right] \neq 0 \text{ при } i \neq j.$$

$$\hat{\boldsymbol{I}}^2 = \sum_{i=1}^{3}\hat{I}_i^2.$$

$$\hat{I}_z\psi_{I,m_I} = m_I\cdot\psi_{I,m_I},\ m_I = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm(I-1),\pm I.$$

Операторы повышения и понижения:

$$\hat{I}_+ = \hat{I}_x + i\cdot\hat{I}_y;\ \hat{I}_- = \hat{I}_x - i\cdot\hat{I}_y.$$

$$\hat{I}_+\psi_{I,m_I} = \left((I-m_I)\cdot(I+m_I+1)\right)^{1/2}\psi_{I,m_I+1},$$

$$\hat{I}_-\psi_{I,m_I} = \left((I+m_I)\cdot(I-m_I+1)\right)^{1/2}\psi_{I,m_I-1}.$$

10.4. Соотношения неопределенностей

Соотношения неопределенностей устанавливает предел точности одновременного определения канонически сопряженных динамических переменных, характеризующих квантовую систему.

<u>Координата-импульс</u>:

$$\Delta x\cdot\Delta p_x \geq \frac{\hbar}{2} \text{ или } \Delta x^2\cdot\Delta p_x^2 \geq \frac{\hbar^2}{4},$$

где Δx и Δp_x – неопределенности значений координаты x и сопряженной ей компоненты импульса p_x; Δx^2 и Δp_x^2 - среднеквадратичные отклонения:

$$\Delta x^2 = \overline{(\hat{x}-\overline{x})},\ \Delta p_x^2 = \overline{(\hat{p}_x - \overline{p}_x)}.$$

При этом чертой обозначены средние от операторов (наблюдаемые значения):

$\overline{F} = \int \psi^* \hat{F} \psi \mathrm{d}V$.

Энергия-время:

$\Delta E \cdot \Delta t \geq \hbar$.

Трактовка 1: невозможно точно определить энергию квантовой системы за ограниченный интервал времени.

Трактовка 2: ΔE – неопределенность в значении энергии изменяющейся во времени замкнутой квантовой системы (в нестационарном состоянии), Δt – интервал времени, характеризующий существенное изменение энергии E. Для возбужденных квантовых систем (ядер, атомов, молекул) с помощью этого соотношения минимальная неопределенность энергии состояния (естественная ширина уровня) $\Gamma = \min(\Delta E)$ непосредственно связана с его временем жизни $\tau - \Gamma \cdot \tau = \hbar$.

11. Сродство к электрону и электроотрицательность

Сродство к электрону η – способность нейтральных атомов, молекул и свободных радикалов присоединять добавочные электроны, превращаясь в отрицательные ионы. Мера этой способности – **сродство к электрону η** – положительная энергия, равная разности энергии нейтрального атома (молекулы) в основном состоянии и энергии основного состояния отрицательного иона, образовавшегося после присоединения электрона.

$\eta(O^-) = 1.461$ эВ, $\eta(S^-) = 2.077$ эВ, $\eta(F^-) = 3.399$ эВ.

Электроотрицательность χ – величина, характеризующая способность атома к поляризации ковалентных связей. Если в двухатомной молекуле А-В образующие связь электроны притягиваются к атому В сильнее, чем к атому А, то атом В считается более электроотрицательным, чем атом А.

По Р.С. Малликену **электроотрицательность χ** – величина, равная полусумме его сродства к электрону и потенциала ионизации.

Л.К. Полинг (1932г.) предложил использовать термохимические данные об **энергии связей** А-А, В-В и А-В – E_{AA}, E_{BB}, E_{AB}. Энергия гипотетической чисто **ковалентной связи** $E_{ков}$ атомов А и В принимается равной среднеарифметическому значению величин E_{AA} и E_{BB}. Если электроотрицательности атомов А и В различны, то связь перестает быть чисто ковалентной и энергия связи E_{AB} станет больше $E_{ков}$ на величину Δ_{AB}:

$\Delta_{AB} = E_{AB} - E_{ков} = E_{AB} - 1/2(E_{AA} + E_{BB})$.

Чем больше различие электроотрицательностей χ атомов, тем больше величина Δ_{AB}. Используя эмпирическую формулу

$0.208 \cdot \sqrt{\Delta_{AB}} = |\chi_A - \chi_B|$,

где численный множитель возникает при переводе значений энергии из ккал/моль в эВ, и принимая для атома водорода произвольное значение χ_H

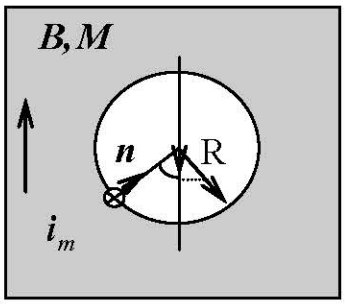
= 2.1, Л.К. Полинг получил удобную шкалу относительных числовых значений электроотрицательностей (см. табл.).

Табл. Электроотрицательности для ряда атомов по Л.К. Полингую

H	F	O	S	Fe^{2+}	Fe^{3+}	Sn
2.1	4.0	3.5	2.5	1.8	1.9	1.8

12. Поле Лоренца

Рассмотрим полость – физически бесконечно малый шар.



Убираем шаровую часть однородно намагниченного магнетика. Пусть шар имеет физически бесконечно малые размеры, так, что намагниченность окружающего его однородного магнетика останется однородной.

Посчитаем (в системе SI) магнитную индукцию $\boldsymbol{B}_m$ поля в центре однородно намагниченного шара от распределенных по поверхности токов намагничивания с линейной плотностью $\boldsymbol{i}_m = -[\boldsymbol{nM}]$, где $\boldsymbol{n}$ – внутренняя нормаль к поверхности шара, $\boldsymbol{M}$ – вектор намагниченности магнетика.

$$\mathrm{d}J_m = i_m \mathrm{d}l = i_m R \mathrm{d}\vartheta = MR\sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta .$$

$$\mathrm{d}B_m = \frac{\mu_0}{4\pi}\frac{2\pi r \mathrm{d}J}{R^2}\sin\vartheta = \frac{\mu_0}{2}\frac{R\sin\vartheta MR\sin\vartheta \mathrm{d}\vartheta}{R^2}\sin\vartheta = \frac{\mu_0}{2}M\sin^3\vartheta \mathrm{d}\vartheta .$$

$$B_m = \int_0^{\pi/2}\frac{\mu_0}{2}M\sin^3\vartheta \mathrm{d}\vartheta = -\frac{\mu_0}{2}M\int_1^{-1}(1-z^2)\mathrm{d}z = \frac{\mu_0}{2}M\left(z-\frac{z^3}{3}\right)\Bigg|_{-1}^{1} = \frac{2}{3}\mu_0 M .$$

Для магнитной индукции

$$B_{\text{шар}} = B - B_m = \mu_0(H+M) - \frac{2}{3}\mu_0 M = \mu_0\left(H + \frac{1}{3}M\right),$$

и для напряженности поля

$$H_{\text{шар}} = H + \frac{M}{3} = H + H_{\text{Lor}},\ \boldsymbol{H}_{\text{Lor}} = \frac{1}{3}\boldsymbol{M} .$$

В системе CGS

$$\boldsymbol{H}_{\text{Lor}} = \frac{4\pi}{3}\boldsymbol{M} .$$

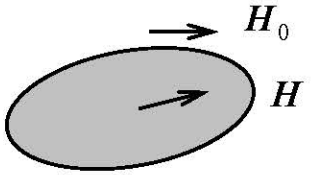
13. Фактор формы магнетика

Намагниченность магнетика и магнитная индукция поля связаны с напряженностью поля в магнетике материальными уравнениями (в системе SI):

$\boldsymbol{M} = \chi \boldsymbol{H}$ и $\boldsymbol{B} = \mu_0 \mu \boldsymbol{H}$.

Однако, напряженность поля в магнетике не равна напряженности внешнего по отношению к магнетику поля $\boldsymbol{H}_0$. Она зависит от формы магнетика и его ориентации относительно внешнего поля.

Рассмотрим ограниченный в пространстве магнетик.



В этом магнетике по сравнению с физически бесконечно длинном магнетике отсутствуют "торцевые" части, по поверхности которых текли токи намагниченности.

Эти токи участвовали в образовании магнитной индукции внутри длинного магнетика. Таким образом, в ограниченном магнетике магнитная индукция будет меньше $B < B_{\text{цил}}$, а это означает, что и намагниченность поля в ограниченном магнетике будет меньше, чем в неограниченном, которая равна напряженности внешнего поля. Запишем этот факт

$$\boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_0 - \boldsymbol{H}_{\text{разм}},$$

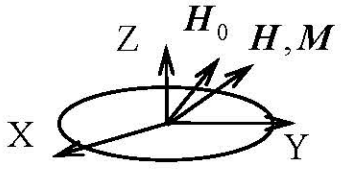
где $\boldsymbol{H}_{\text{разм}}$ – так называемое **размагничивающее поле**. Никакого реального размагничивающего поля не существует. Оно отражает лишь факт, что поле внутри какого-либо тела зависит от формы тела и что оно меньше, чем поле внутри длинного цилиндра.

Так как действие отсутствующих торцевых частей длинного магнетика пропорционально намагниченности данного вещества, то можно положить

$$\boldsymbol{H}_{\text{разм}} = \beta \boldsymbol{M} \text{ и } \boldsymbol{H} = \boldsymbol{H}_0 - \beta \boldsymbol{M},$$

где β – **размагничивающий фактор (фактор формы)**, зависящий от формы и размеров тела.

В общем случае даже для однородного изотропного магнетика **размагничивающий фактор является тензором** и размагничивающее поле не коллинеарно намагниченности. Более того, поле внутри магнетика оказывается **неоднородным.**



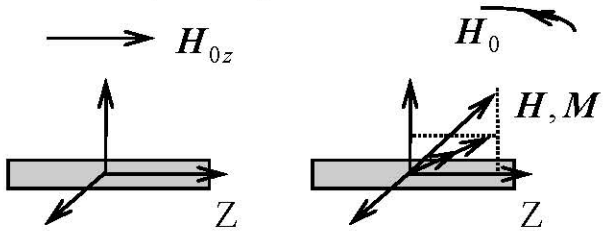
Расчеты показывают, что **в однородном поле однородно намагничивается эллипсоид из изотропного и однородного магнетика**. При этом у него три размагничивающих фактора (фактора формы) – β_x, β_y, β_z и в собственных осях эллипсоида

$$H_x = H_{0x} - \beta_x M_x,\ H_y = H_{0y} - \beta_y M_y,\ H_z = H_{0z} - \beta_z M_z.$$

Здесь β_x, β_y, β_z – факторы формы, причем $\beta_x + \beta_y + \beta_z = 1$.

Итак, **из граничных условий и соображений симметрии получим следующее**.

А. Цилиндр.



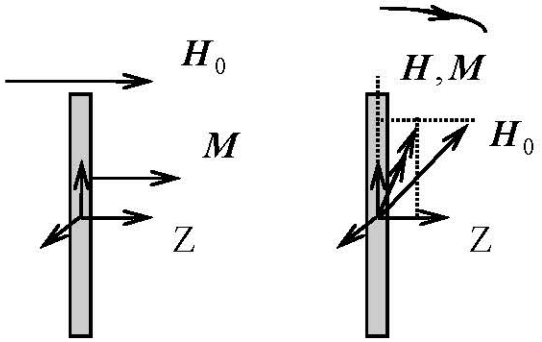
Так как $H_z = H_{0z}$, то:

$$\beta_z = 0,\ \beta_x = \beta_y = \frac{1}{2},$$

$$H_x = H_{0x} - \frac{1}{2}M_x,$$

$$H_y = H_{0y} - \frac{1}{2}M_y.$$

Б. Диск.

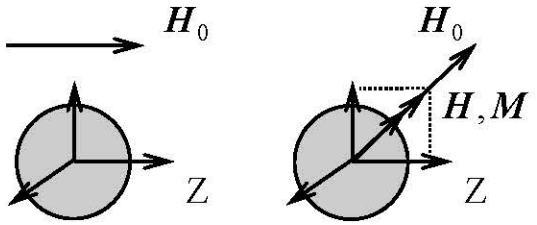


Так как $H_z = H_{0z} - M_z$, то:

$$\beta_z = 1,\ \beta_x = \beta_y = 0,$$

$$H_x = H_{0x},\ H_y = H_{0y}.$$

В. Шар.



Только из соображений симметрии

$$\beta_x = \beta_y = \beta_z = \frac{1}{3},$$

$$H_x = H_{0x} - \frac{1}{3}M_x,$$

$$H_y = H_{0y} - \frac{1}{3}M_y.$$

$$H_z = H_{0z} - \frac{1}{3}M_z.$$

Вывод: сильный магнетик ориентируется вдоль поля тем направлением, которое имеет наименьший фактор формы !!!

Свяжем характеристики поля в магнетике с напряженностью внешнего поля. В случае однородного изотропного эллипсоида:

для напряженности поля $H_i = H_{0i} - \beta_i M_i = H_{0i} - \beta_i \chi H_i$ и

$$H_i = \frac{1}{1+\beta_i \chi} H_{0i};$$

для магнитной индукции

$$B_i = \frac{\mu_0 \mu}{(1+\beta_i \chi)} H_{0i}.$$

для намагниченности

$$I_i = \frac{\chi}{(1+\beta_i \chi)} H_{0i}.$$

По **чувствительности к своей форме** магнетики разделяют на две группы.

1) **Слабые магнетики** (диа- и парамагнетики): при $\chi \sim 10^{-2} \div 10^{-6}$ $|\beta\chi| << 1$ и форма не существенна:

$$B_i = \mu_0 \mu H_{0i},\ M_i = \chi H_{0i}.$$

2) **Сильные магнетики** (ферромагнетики): при $\chi \sim 10^{2} \div 10^{6}$ $|\beta\chi| >> 1$ и все определяет форма магнетика (величина, обратная фактору формы по каждому из направлений), при этом восприимчивость выпадает:

$$B_i = \mu_0 \frac{1}{\beta_i} H_{0i},\ M_i = \frac{1}{\beta_i} H_{0i}.$$

В общем случае намагниченность ограниченного в пространстве ферромагнетика не совпадает по направлению с внешним полем! За исключением случаев, когда внешнее поле направлено вдоль одной из осей эллипсоида.

ПРИЛОЖЕНИЕ II
Справочный материал по математике

1. Фурье-преобразование

Сопряженные переменные – x и z.

Прямое преобразование Фурье (Фурье-браз) функции $f(x)$:

$$\boldsymbol{F}(f(x)) \equiv f(iz) = \int_{-\infty}^{\infty} f(x) e^{-izx} \mathrm{d}x .$$

Обратное преобразование Фурье:

$$\boldsymbol{F}^{-1}(f(iz)) \equiv f(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} f(iz) e^{izx} \mathrm{d}z .$$

Примеры преобразования Фурье.

1. Функция Лоренца:

$$W_{\mathrm{L}}(x, \Gamma_{\mathrm{L}}) = \frac{2}{\pi \Gamma_{\mathrm{L}}} \cdot \frac{1}{1 + \left(\dfrac{x}{\Gamma_{\mathrm{L}}/2} \right)^2},$$

$$\boldsymbol{F}\left(W_{\mathrm{L}}(x, \Gamma_{\mathrm{L}})\right) = \ell^{-\frac{\Gamma_{\mathrm{L}}}{2}|z|},$$

где Γ_{L} – ширина на половине высоты.

2. Функция Гаусса:

$$W_{\mathrm{G}}(x, \Gamma_{\mathrm{G}}) = \frac{2}{\Gamma_{\mathrm{G}}} \sqrt{\frac{\ln 2}{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{\Gamma_{\mathrm{G}}/2} \right)^2 \ln 2} = \frac{1}{G\sqrt{\pi}} e^{-\left(\frac{x}{G} \right)^2},$$

$$\boldsymbol{F}\left(W_{\mathrm{G}}(x, \Gamma_{\mathrm{G}})\right) = \ell^{-\left(\frac{\Gamma_{\mathrm{G}}}{2} \right)^2 \frac{z^2}{4\ln 2}} = e^{-\left(\frac{G}{2} \right)^2 z^2},$$

где $\Gamma_{\mathrm{G}} = G \cdot 2\sqrt{\ln 2}$ – ширина на половине высоты.

2. Интеграла-свертки и его фурье-преобразование

В соответствии с определением интеграл свертки двух функций $f_1(x)$ и $f_2(x)$ равен

$$f(x) = \int_{-\infty}^{\infty} f_1(y - x) f_2(y) \mathrm{d}y \equiv f_1(x) * f_2(x) .$$

Фурье-образ интеграла свертки двух (и более) функций равен произведению фурье-образов этих функций:

$$\boldsymbol{F}\left(f(x)\right) = \boldsymbol{F}\left(f_1(x) * f_2(x)\right) = \int_{-\infty}^{\infty} \int_{-\infty}^{\infty} f_1(y - x) f_2(y) dy e^{-ixz} \mathrm{d}x =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\infty} f_1(y-x)e^{-ixz}dx\right)f_2(y)\mathrm{d}y =$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty}\left(\int_{-\infty}^{\infty} f_1(y-x)e^{-i(x-y)z}\mathrm{d}x\right)f_2(y)e^{-iyz}\mathrm{d}y = \boldsymbol{F}(f_1)\boldsymbol{F}(f_2).$$

Результат свертки функций Лоренца и Гаусса есть функция Фойгта, фурье-образ которой равен произведению фурье-образов функций Лоренца и Гаусса:

$$W_{\mathrm{V}}(x) = W_{\mathrm{L}}(x) * W_{\mathrm{G}}(x);\ \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{V}}(x)) = \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}})\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}}).$$

С учетом вида Фурье-образа функций Лоренца и Гаусса получим следующее.

1. Свертка двух (и более) лоренцевских функций даст функцию Лоренца с шириной на половине высоты, равной сумме ширин исходных функций:

$$W_{\mathrm{L}}(x) = W_{\mathrm{L}_1}(x) * W_{\mathrm{L}_2}(x);$$

$$\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}}(x)) = \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}_1}(x))\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}_1}(x)) = e^{-\frac{\Gamma_{\mathrm{L}_1}}{2}|z|}\cdot e^{-\frac{\Gamma_{\mathrm{L}_2}}{2}|z|} = e^{-\frac{\Gamma_{\mathrm{L}}}{2}|z|},$$

$$\Gamma_{\mathrm{L}} = \Gamma_{\mathrm{L}_1} + \Gamma_{\mathrm{L}_2}.$$

2. Свертка двух (и более) гауссовских функций даст функцию Гаусса с шириной на половине высоты, равной корню квадратному из суммы квадратов ширин исходных функций:

$$W_{\mathrm{G}}(x) = W_{\mathrm{G}_1}(x) * W_{\mathrm{G}_2}(x);$$

$$\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}}(x)) = \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}_1}(x))\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}_1}(x)) = e^{-\Gamma_{\mathrm{G}_1}^2\frac{z^2}{16\ln 2}}\cdot e^{-\Gamma_{\mathrm{G}_2}^2\frac{z^2}{16\ln 2}} = e^{-\Gamma_{\mathrm{G}}^2\frac{z^2}{16\ln 2}},$$

$$\Gamma_{\mathrm{G}} = \sqrt{\Gamma_{\mathrm{G}_1}^2 + \Gamma_{\mathrm{G}_2}^2}.$$

3. Последовательная свертка любого числа лоренцевских и гауссовских линий дает функцию Фойгта поскольку сворачивая сначала, например, функции Лоренца, а затем Гаусса, получим:

$$\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}}(x)) = \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}_1}(x))\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}_1}(x)),\ \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}}(x)) = \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}_1}(x))\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}_1}(x)),$$

$$\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{V}}(x)) = \boldsymbol{F}(W_{\mathrm{L}}(x))\boldsymbol{F}(W_{\mathrm{G}}(x)).$$

3. Биномиальное распределение и распределения Пуассона и Гаусса

Биномиальное распределение – распределение вероятностей $P_n(m)$ событий $\mathrm{A}_n(m)$, заключающихся в том, что при n последовательных независимых испытаниях $m = 0, 1, 2, \ldots$, n раз произойдет событие а, вероятность которого при одном испытании равна p (вероятность противоположного ему события $\bar{\mathrm{a}} - q = 1 - p$). Поскольку последовательные события независимы и последовательность реализации события а не важна, то

$$P_n(m)=C_n^m \cdot p^m(1-p)^{n-m}=\frac{n!}{m!(n-m)!}\cdot p^m(1-p)^{n-m}.$$

При этом среднее значение $<m>$ и дисперсия S_m^2, будут равны:

$$<m>=np;\ S_m^2 \equiv <(x-<x>)^2>=npq.$$

Распределение Пуассона – вероятность небольшого по сравнению с полным числом испытаний n числа испытаний $m << n$, при которых произойдет событие а с малой вероятностью $p << 1$. (Обнаружение небольшого числа объектов в большом числе наблюдений при малой вероятности появления этих объектов.)

Распределение Пуассона – это предельный случай биномиального распределения. При $n \to \infty$ ($n >> 1$) и $<m> = np$ – const ($p \to 0$):

$$P(m)=\lim_{\substack{n\to\infty \\ <m>-\text{const}}} P_n(m)=\frac{<m>^m}{m!}e^{-<m>}.$$

Это дискретное распределение определяется только средним значением $<m> << n$. При этом $S_m^2=npq=<m>$ и $S_m=\sqrt{<m>}$.

Распределение Гаусса (нормальное распределение) – это также предельный случай биномиального распределения, но при $n\to\infty$ ($n >> 1$) и p – const ($<m> = np\to\infty$, $<m> >> 1$):

$$P(m)=\lim_{\substack{n\to\infty \\ p-\text{const}}} P_n(m)=\frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_m}\ell^{-\frac{(m-<m>)^2}{2\sigma_m^2}}.$$

При этом $S_m^2=npq>> 1$ (Δm) и $1 << (S_m, <m>) << n$. Распределение квазинепрерывное!

4. Суммирование бесконечных рядов

А. Геометрическая прогрессия – $\{a_i\}$, $i = 0, 1, 2, 3, ..., \infty$; $a_i = a_{i-1}\cdot q$, $q <1$ – знаменатель геометрической прогрессии, $a_i = a_0\cdot q^i$.

$$S\equiv\sum_{i=0}^{\infty}a_i,\ S\cdot q\equiv\sum_{i=0}^{\infty}a_i\cdot q=\sum_{i=0}^{\infty}a_{i+1}=S-a_0,$$

$$S=a_0\frac{1}{1-q}.$$

Б. Ряд – $\{i\cdot a_i\}$, $i = 0, 1, 2, 3,..., \infty$; $a_i = a_{i-1}\cdot q$ ($q < 1$), $a_i = a_0\cdot q^i$.

$$S_a\cdot q\equiv\sum_{i=0}^{\infty}i\cdot a_i\cdot q=\sum_{i=0}^{\infty}i\cdot a_{i+1}+S-S=S_a+a_0-S,$$

$$S_a=\frac{S-a_0}{1-q}=a_0\frac{1-1+q}{(1-q)^2},$$

$$S_a = a_0 \frac{q}{(1-q)^2}. \quad \frac{S_a}{S} = \frac{q}{1-q}.$$

5. Гиперболические функции

Гиперболические

синус $\quad - \operatorname{sh}(x) \equiv \dfrac{e^x - e^{-x}}{2}.$

косинус $\quad - \operatorname{ch}(x) \equiv \dfrac{e^x + e^{-x}}{2}.$

тангенс $\quad - \operatorname{th}(x) \equiv \dfrac{\operatorname{sh}(x)}{\operatorname{ch}(x)} = \dfrac{e^x - e^{-x}}{e^x + e^{-x}}.$

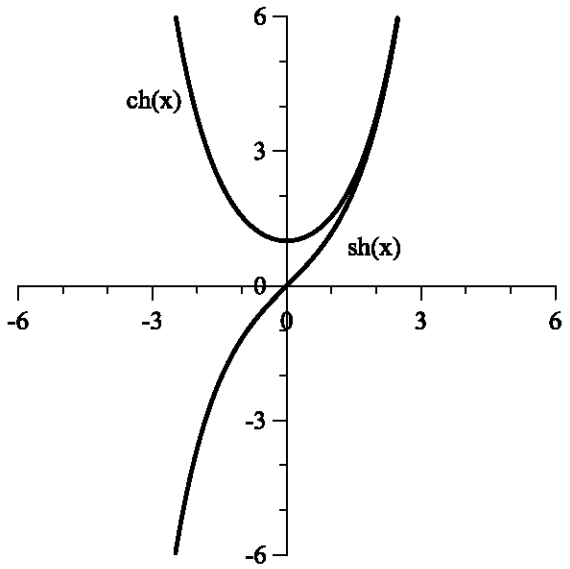
котангенс $\quad - \operatorname{cth}(x) \equiv \dfrac{\operatorname{ch}(x)}{\operatorname{sh}(x)} = \dfrac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}}.$

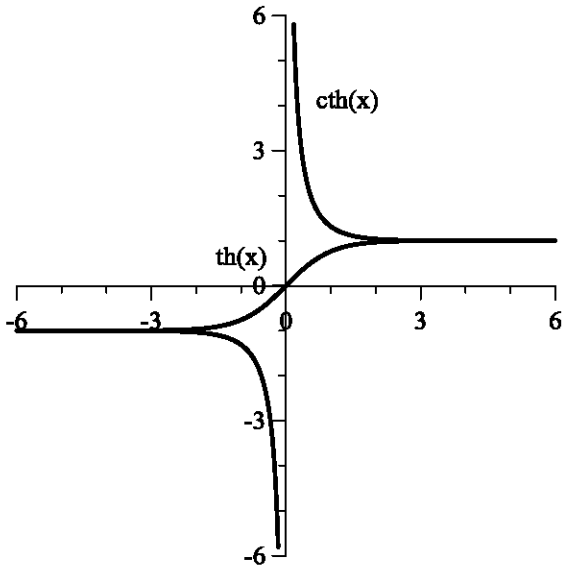
Соотношения между гиперболическими функциями:

$$\operatorname{sh}'(x) = \operatorname{ch}(x),\ \operatorname{ch}'(x) = \operatorname{sh}(x),\ \operatorname{th}'(x) = \frac{1}{\operatorname{ch}^2(x)},\ \operatorname{cth}'(x) = -\frac{1}{\operatorname{sh}^2(x)}.$$

Асимптотические свойства гиперболического котангенса:

$$\operatorname{cth}(x \to 0) \to \frac{1}{x},\ \operatorname{cth}(x \to \infty) \to 1.$$





ПРИЛОЖЕНИЕ III. Значения параметров мессбауэровского спектра ядер ^{57}Fe и ^{119}Sn в дебаевском приближении

^{57}Fe, ϑ_D = 50 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,6810	0	0,5061	1	-0,0137	0
50	2,7991	2,7241	0,0609	0,0656	-0,0383	-0,0365
100	5,4860	5,4483	0,0041	0,0043	-0,0739	-0,0730
150	8,1976	8,1724	0,0003	0,0003	-0,1101	-0,1095
200	10,9154	10,8965	0	0	-0,1464	-0,1460
250	13,6358	13,6207	0	0	-0,1828	-0,1825
300	16,3574	16,3448	0	0	-0,2193	-0,2190
350	19,0797	19,0689	0	0	-0,2557	-0,2554
400	21,8025	21,7930	0	0	-0,2922	-0,2919
450	24,5256	24,5172	0	0	-0,3286	-0,3284
500	27,2489	27,2413	0	0	-0,3651	-0,3649
550	29,9723	29,9654	0	0	-0,4016	-0,4014
600	32,6959	32,6896	0	0	-0,4381	-0,4379
650	35,4195	35,4137	0	0	-0,4745	-0,4744
700	38,1432	38,1378	0	0	-0,5110	-0,5109
750	40,8670	40,8620	0	0	-0,5475	-0,5474
800	43,5908	43,5861	0	0	-0,5840	-0,5839
850	46,3147	46,3102	0	0	-0,6205	-0,6204
900	49,0386	49,0344	0	0	-0,6570	-0,6569
950	51,7625	51,7585	0	0	-0,6934	-0,6933
1000	54,4864	54,4826	0	0	-0,7299	-0,7298
1050	57,2104	57,2068	0	0	-0,7664	-0,7663
1100	59,9343	59,9309	0	0	-0,8029	-0,8028
1150	62,6583	62,6550	0	0	-0,8394	-0,8393
1200	65,3823	65,3791	0	0	-0,8759	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 100 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,3405	0	0,7114	1	-0,0274	0
50	0,7539	0,6810	0,4705	0,5061	-0,0435	-0,0365
100	1,3995	1,3621	0,2467	0,2561	-0,0766	-0,0730
150	2,0682	2,0431	0,1264	0,1296	-0,1119	-0,1095
200	2,7430	2,7241	0,0644	0,0656	-0,1478	-0,1460
250	3,4203	3,4052	0,0327	0,0332	-0,1839	-0,1825
300	4,0988	4,0862	0,0166	0,0168	-0,2202	-0,2190
350	4,7780	4,7672	0,0084	0,0085	-0,2565	-0,2554
400	5,4577	5,4483	0,0043	0,0043	-0,2928	-0,2919
450	6,1377	6,1293	0,0022	0,0022	-0,3292	-0,3284
500	6,8179	6,8103	0,0011	0,0011	-0,3656	-0,3649
550	7,4982	7,4914	0,0006	0,0006	-0,4021	-0,4014
600	8,1787	8,1724	0,0003	0,0003	-0,4385	-0,4379
650	8,8592	8,8534	0,0001	0,0001	-0,4750	-0,4744
700	9,5399	9,5345	0,0001	0,0001	-0,5114	-0,5109
750	10,2205	10,2155	0	0	-0,5479	-0,5474
800	10,9013	10,8965	0	0	-0,5843	-0,5839
850	11,5820	11,5776	0	0	-0,6208	-0,6204
900	12,2628	12,2586	0	0	-0,6573	-0,6569
950	12,9436	12,9396	0	0	-0,6937	-0,6933
1000	13,6244	13,6207	0	0	-0,7302	-0,7298
1050	14,3053	14,3017	0	0	-0,7667	-0,7663
1100	14,9862	14,9827	0	0	-0,8032	-0,8028
1150	15,6670	15,6638	0	0	-0,8396	-0,8393
1200	16,3479	16,3448	0	0	-0,8761	-0,8758

Fe, ϑ_D = 150 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,2270	0	0,7969	1	-0,0411	0
50	0,3724	0,3027	0,6891	0,7388	-0,0514	-0,0365
100	0,6424	0,6054	0,5260	0,5459	-0,0810	-0,0730
150	0,9330	0,9080	0,3934	0,4033	-0,1149	-0,1095
200	1,2295	1,2107	0,2924	0,2980	-0,1500	-0,1460
250	1,5285	1,5134	0,2169	0,2202	-0,1857	-0,1825
300	1,8287	1,8161	0,1606	0,1627	-0,2217	-0,2190
350	2,1296	2,1188	0,1189	0,1202	-0,2578	-0,2554
400	2,4309	2,4214	0,0880	0,0888	-0,2940	-0,2919
450	2,7325	2,7241	0,0651	0,0656	-0,3302	-0,3284
500	3,0344	3,0268	0,0481	0,0485	-0,3666	-0,3649
550	3,3364	3,3295	0,0356	0,0358	-0,4029	-0,4014
600	3,6385	3,6322	0,0263	0,0265	-0,4393	-0,4379
650	3,9407	3,9349	0,0194	0,0195	-0,4757	-0,4744
700	4,2429	4,2375	0,0144	0,0144	-0,5121	-0,5109
750	4,5453	4,5402	0,0106	0,0107	-0,5485	-0,5474
800	4,8476	4,8429	0,0078	0,0079	-0,5849	-0,5839
850	5,1500	5,1456	0,0058	0,0058	-0,6213	-0,6204
900	5,4525	5,4483	0,0043	0,0043	-0,6578	-0,6569
950	5,7549	5,7509	0,0032	0,0032	-0,6942	-0,6933
1000	6,0574	6,0536	0,0023	0,0023	-0,7307	-0,7298
1050	6,3599	6,3563	0,0017	0,0017	-0,7671	-0,7663
1100	6,6624	6,6590	0,0013	0,0013	-0,8036	-0,8028
1150	6,9650	6,9617	0,0009	0,0009	-0,8400	-0,8393
1200	7,2675	7,2643	0,0007	0,0007	-0,8765	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 200 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,1703	0	0,8434	1	-0,0547	0
50	0,2363	0,1703	0,7895	0,8434	-0,0614	-0,0365
100	0,3769	0,3405	0,6860	0,7114	-0,0869	-0,0730
150	0,5356	0,5108	0,5853	0,6000	-0,1190	-0,1095
200	0,6998	0,6810	0,4967	0,5061	-0,1532	-0,1460
250	0,8663	0,8513	0,4205	0,4269	-0,1883	-0,1825
300	1,0341	1,0215	0,3555	0,3600	-0,2238	-0,2190
350	1,2026	1,1918	0,3004	0,3037	-0,2596	-0,2554
400	1,3715	1,3621	0,2537	0,2561	-0,2956	-0,2919
450	1,5407	1,5323	0,2142	0,2160	-0,3317	-0,3284
500	1,7101	1,7026	0,1808	0,1822	-0,3678	-0,3649
550	1,8797	1,8728	0,1526	0,1537	-0,4041	-0,4014
600	2,0494	2,0431	0,1288	0,1296	-0,4403	-0,4379
650	2,2192	2,2134	0,1087	0,1093	-0,4766	-0,4744
700	2,3890	2,3836	0,0917	0,0922	-0,5130	-0,5109
750	2,5589	2,5539	0,0774	0,0778	-0,5493	-0,5474
800	2,7289	2,7241	0,0653	0,0656	-0,5857	-0,5839
850	2,8988	2,8944	0,0551	0,0553	-0,6221	-0,6204
900	3,0688	3,0646	0,0465	0,0467	-0,6585	-0,6569
950	3,2389	3,2349	0,0392	0,0394	-0,6949	-0,6933
1000	3,4089	3,4052	0,0331	0,0332	-0,7313	-0,7298
1050	3,5790	3,5754	0,0279	0,0280	-0,7677	-0,7663
1100	3,7491	3,7457	0,0235	0,0236	-0,8041	-0,8028
1150	3,9192	3,9159	0,0199	0,0199	-0,8406	-0,8393
1200	4,0893	4,0862	0,0168	0,0168	-0,8770	-0,8758

^{7}Fe, ϑ_D = 250 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,1362	0	0,8727	1	-0,0684	0
50	0,1712	0,1090	0,8427	0,8968	-0,0727	-0,0365
100	0,2536	0,2179	0,7760	0,8042	-0,0943	-0,0730
150	0,3514	0,3269	0,7037	0,7212	-0,1242	-0,1095
200	0,4545	0,4359	0,6348	0,6467	-0,1572	-0,1460
250	0,5598	0,5448	0,5713	0,5799	-0,1915	-0,1825
300	0,6663	0,6538	0,5136	0,5201	-0,2265	-0,2190
350	0,7735	0,7628	0,4614	0,4664	-0,2619	-0,2554
400	0,8811	0,8717	0,4143	0,4182	-0,2976	-0,2919
450	0,9891	0,9807	0,3719	0,3751	-0,3335	-0,3284
500	1,0972	1,0897	0,3338	0,3363	-0,3695	-0,3649
550	1,2055	1,1986	0,2995	0,3016	-0,4055	-0,4014
600	1,3139	1,3076	0,2688	0,2705	-0,4417	-0,4379
650	1,4224	1,4165	0,2411	0,2425	-0,4779	-0,4744
700	1,5309	1,5255	0,2163	0,2175	-0,5141	-0,5109
750	1,6395	1,6345	0,1941	0,1951	-0,5504	-0,5474
800	1,7482	1,7434	0,1741	0,1749	-0,5867	-0,5839
850	1,8569	1,8524	0,1562	0,1569	-0,6230	-0,6204
900	1,9656	1,9614	0,1401	0,1407	-0,6594	-0,6569
950	2,0743	2,0703	0,1256	0,1261	-0,6957	-0,6933
1000	2,1831	2,1793	0,1127	0,1131	-0,7321	-0,7298
1050	2,2919	2,2883	0,1011	0,1014	-0,7685	-0,7663
1100	2,4007	2,3972	0,0907	0,0910	-0,8049	-0,8028
1150	2,5095	2,5062	0,0813	0,0816	-0,8413	-0,8393
1200	2,6183	2,6152	0,0729	0,0732	-0,8777	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 300 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,1135	0	0,8927	1	-0,0821	0
50	0,1340	0,0757	0,8746	0,9271	-0,0849	-0,0365
100	0,1862	0,1513	0,8301	0,8596	-0,1028	-0,0730
150	0,2513	0,2270	0,7778	0,7969	-0,1304	-0,1095
200	0,3212	0,3027	0,7253	0,7388	-0,1620	-0,146
250	0,3933	0,3784	0,6748	0,6850	-0,1954	-0,1825
300	0,4665	0,4540	0,6272	0,6351	-0,2298	-0,2190
350	0,5404	0,5297	0,5825	0,5888	-0,2647	-0,2554
400	0,6148	0,6054	0,5408	0,5459	-0,3001	-0,2919
450	0,6894	0,6810	0,5019	0,5061	-0,3357	-0,3284
500	0,7642	0,7567	0,4657	0,4692	-0,3715	-0,3649
550	0,8392	0,8324	0,4320	0,4350	-0,4074	-0,4014
600	0,9143	0,9080	0,4008	0,4033	-0,4434	-0,4379
650	0,9895	0,9837	0,3718	0,3739	-0,4794	-0,4744
700	1,0648	1,0594	0,3448	0,3467	-0,5156	-0,5109
750	1,1401	1,1351	0,3198	0,3214	-0,5517	-0,5474
800	1,2154	1,2107	0,2966	0,2980	-0,5880	-0,5839
850	1,2908	1,2864	0,2750	0,2763	-0,6242	-0,6204
900	1,3663	1,3621	0,2551	0,2561	-0,6605	-0,6569
950	1,4417	1,4377	0,2365	0,2375	-0,6968	-0,6933
1000	1,5172	1,5134	0,2193	0,2202	-0,7331	-0,7298
1050	1,5927	1,5891	0,2034	0,2041	-0,7695	-0,7663
1100	1,6682	1,6647	0,1886	0,1892	-0,8058	-0,8028
1150	1,7437	1,7404	0,1749	0,1754	-0,8422	-0,8393
1200	1,8192	1,8161	0,1621	0,1627	-0,8785	-0,8758

^{7}Fe, ϑ_D = 350 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0973	0	0,9073	1	-0,0958	0
50	0,1103	0,0556	0,8956	0,9459	-0,0977	-0,0365
100	0,1452	0,1112	0,8649	0,8948	-0,1124	-0,0730
150	0,1907	0,1668	0,8263	0,8464	-0,1375	-0,1095
200	0,2407	0,2224	0,7860	0,8006	-0,1675	-0,1460
250	0,2928	0,2780	0,7462	0,7573	-0,1999	-0,1825
300	0,3460	0,3336	0,7075	0,7164	-0,2336	-0,2190
350	0,3999	0,3892	0,6704	0,6776	-0,2681	-0,2554
400	0,4541	0,4448	0,635	0,6410	-0,3030	-0,2919
450	0,5087	0,5004	0,6013	0,6063	-0,3383	-0,3284
500	0,5635	0,5559	0,5692	0,5735	-0,3738	-0,3649
550	0,6184	0,6115	0,5388	0,5425	-0,4095	-0,4014
600	0,6734	0,6671	0,5100	0,5132	-0,4453	-0,4379
650	0,7285	0,7227	0,4826	0,4854	-0,4812	-0,4744
700	0,7837	0,7783	0,4567	0,4592	-0,5173	-0,5109
750	0,8390	0,8339	0,4322	0,4343	-0,5533	-0,5474
800	0,8942	0,8895	0,4089	0,4109	-0,5894	-0,5839
850	0,9496	0,9451	0,3869	0,3886	-0,6256	-0,6204
900	1,0049	1,0007	0,3661	0,3676	-0,6618	-0,6569
950	1,0603	1,0563	0,3464	0,3477	-0,6980	-0,6933
1000	1,1157	1,1119	0,3277	0,3289	-0,7343	-0,7298
1050	1,1711	1,1675	0,3100	0,3111	-0,7706	-0,7663
1100	1,2265	1,2231	0,2933	0,2943	-0,8069	-0,8028
1150	1,2820	1,2787	0,2775	0,2784	-0,8432	-0,8393
1200	1,3374	1,3343	0,2625	0,2634	-0,8795	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 400 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0851	0	0,9184	1	-0,1095	0
50	0,0939	0,0426	0,9104	0,9583	-0,1108	-0,0365
100	0,1182	0,0851	0,8885	0,9184	-0,1227	-0,0730
150	0,1513	0,1277	0,8596	0,8801	-0,1455	-0,1095
200	0,1885	0,1703	0,8282	0,8434	-0,1739	-0,1460
250	0,2276	0,2128	0,7965	0,8083	-0,2051	-0,1825
300	0,2678	0,2554	0,7651	0,7746	-0,2380	-0,2190
350	0,3086	0,2980	0,7345	0,7423	-0,2719	-0,2554
400	0,3499	0,3405	0,7048	0,7114	-0,3064	-0,2919
450	0,3914	0,3831	0,6761	0,6818	-0,3413	-0,3284
500	0,4332	0,4256	0,6485	0,6533	-0,3765	-0,3649
550	0,4751	0,4682	0,6219	0,6261	-0,4120	-0,4014
600	0,5171	0,5108	0,5963	0,6000	-0,4476	-0,4379
650	0,5591	0,5533	0,5717	0,5750	-0,4833	-0,4744
700	0,6013	0,5959	0,5481	0,5511	-0,5192	-0,5109
750	0,6435	0,6385	0,5255	0,5281	-0,5551	-0,5474
800	0,6858	0,6810	0,5037	0,5061	-0,5911	-0,5839
850	0,7280	0,7236	0,4829	0,4850	-0,6272	-0,6204
900	0,7704	0,7662	0,4628	0,4648	-0,6633	-0,6569
950	0,8127	0,8087	0,4437	0,4454	-0,6995	-0,6933
1000	0,8551	0,8513	0,4253	0,4269	-0,7357	-0,7298
1050	0,8975	0,8939	0,4076	0,4091	-0,7719	-0,7663
1100	0,9399	0,9364	0,3907	0,3920	-0,8081	-0,8028
1150	0,9823	0,9790	0,3745	0,3757	-0,8444	-0,8393
1200	1,0247	1,0215	0,3589	0,3600	-0,8807	-0,8758

^{7}Fe, ϑ_D = 450 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0757	0	0,9271	1	-0,1232	0
50	0,0818	0,0336	0,9214	0,9669	-0,1241	-0,0365
100	0,0993	0,0673	0,9054	0,9349	-0,1338	-0,0730
150	0,1241	0,1009	0,8833	0,9040	-0,1542	-0,1095
200	0,1526	0,1345	0,8585	0,8741	-0,1809	-0,1460
250	0,1828	0,1682	0,8329	0,8452	-0,2109	-0,1825
300	0,2141	0,2018	0,8072	0,8173	-0,2430	-0,2190
350	0,2461	0,2354	0,7819	0,7902	-0,2762	-0,2554
400	0,2784	0,2690	0,7570	0,7641	-0,3101	-0,2919
450	0,3110	0,3027	0,7327	0,7388	-0,3447	-0,3284
500	0,3438	0,3363	0,7091	0,7144	-0,3796	-0,3649
550	0,3768	0,3699	0,6861	0,6908	-0,4147	-0,4014
600	0,4098	0,4036	0,6638	0,6679	-0,4501	-0,4379
650	0,4430	0,4372	0,6421	0,6458	-0,4857	-0,4744
700	0,4762	0,4708	0,6211	0,6245	-0,5214	-0,5109
750	0,5095	0,5045	0,6008	0,6038	-0,5572	-0,5474
800	0,5428	0,5381	0,5811	0,5839	-0,5931	-0,5839
850	0,5762	0,5717	0,5620	0,5645	-0,6290	-0,6204
900	0,6096	0,6054	0,5436	0,5459	-0,6650	-0,6569
950	0,6430	0,6390	0,5257	0,5278	-0,7011	-0,6933
1000	0,6764	0,6726	0,5084	0,5104	-0,7372	-0,7298
1050	0,7099	0,7063	0,4917	0,4935	-0,7734	-0,7663
1100	0,7433	0,7399	0,4755	0,4772	-0,8095	-0,8028
1150	0,7768	0,7735	0,4599	0,4614	-0,8457	-0,8393
1200	0,8103	0,8071	0,4447	0,4461	-0,8820	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 500 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0681	0	0,9342	1	-0,1368	0
50	0,0726	0,0272	0,9300	0,9731	-0,1375	-0,0365
100	0,0856	0,0545	0,9180	0,9470	-0,1454	-0,0730
150	0,1046	0,0817	0,9007	0,9215	-0,1636	-0,1095
200	0,1268	0,1090	0,8809	0,8968	-0,1885	-0,1460
250	0,1508	0,1362	0,8600	0,8727	-0,2173	-0,1825
300	0,1757	0,1634	0,8388	0,8492	-0,2484	-0,2190
350	0,2013	0,1907	0,8177	0,8264	-0,2809	-0,2554
400	0,2272	0,2179	0,7967	0,8042	-0,3143	-0,2919
450	0,2535	0,2452	0,7761	0,7826	-0,3484	-0,3284
500	0,2799	0,2724	0,7559	0,7615	-0,3830	-0,3649
550	0,3065	0,2997	0,7360	0,7411	-0,4178	-0,4014
600	0,3332	0,3269	0,7167	0,7212	-0,4530	-0,4379
650	0,3599	0,3541	0,6977	0,7018	-0,4883	-0,4744
700	0,3868	0,3814	0,6793	0,6829	-0,5238	-0,5109
750	0,4136	0,4086	0,6612	0,6646	-0,5595	-0,5474
800	0,4406	0,4359	0,6437	0,6467	-0,5952	-0,5839
850	0,4675	0,4631	0,6265	0,6293	-0,6311	-0,6204
900	0,4945	0,4903	0,6099	0,6124	-0,6670	-0,6569
950	0,5216	0,5176	0,5936	0,5960	-0,7029	-0,6933
1000	0,5486	0,5448	0,5778	0,5799	-0,7389	-0,7298
1050	0,5757	0,5721	0,5623	0,5644	-0,7750	-0,7663
1100	0,6027	0,5993	0,5473	0,5492	-0,8111	-0,8028
1150	0,6298	0,6266	0,5327	0,5344	-0,8472	-0,8393
1200	0,6569	0,6538	0,5184	0,5201	-0,8834	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 550 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0619	0	0,94	1	-0,1505	0
50	0,0653	0,0225	0,9368	0,9777	-0,1511	-0,0365
100	0,0752	0,0450	0,9276	0,9560	-0,1575	-0,0730
150	0,0900	0,0675	0,9139	0,9347	-0,1736	-0,1095
200	0,1077	0,0901	0,8979	0,9139	-0,1968	-0,1460
250	0,1270	0,1126	0,8807	0,8935	-0,2243	-0,1825
300	0,1473	0,1351	0,8630	0,8736	-0,2544	-0,2190
350	0,1681	0,1576	0,8452	0,8542	-0,2861	-0,2554
400	0,1894	0,1801	0,8275	0,8352	-0,3189	-0,2919
450	0,2109	0,2026	0,8098	0,8166	-0,3525	-0,3284
500	0,2326	0,2251	0,7925	0,7984	-0,3867	-0,3649
550	0,2545	0,2476	0,7753	0,7806	-0,4212	-0,4014
600	0,2764	0,2702	0,7585	0,7633	-0,4561	-0,4379
650	0,2985	0,2927	0,7420	0,7463	-0,4912	-0,4744
700	0,3206	0,3152	0,7257	0,7297	-0,5265	-0,5109
750	0,3427	0,3377	0,7098	0,7134	-0,5620	-0,5474
800	0,3649	0,3602	0,6943	0,6975	-0,5976	-0,5839
850	0,3872	0,3827	0,6790	0,6820	-0,6333	-0,6204
900	0,4094	0,4052	0,6640	0,6668	-0,6691	-0,6569
950	0,4317	0,4278	0,6494	0,6520	-0,7049	-0,6933
1000	0,4540	0,4503	0,6351	0,6375	-0,7408	-0,7298
1050	0,4764	0,4728	0,6210	0,6233	-0,7768	-0,7663
1100	0,4987	0,4953	0,6073	0,6094	-0,8128	-0,8028
1150	0,5211	0,5178	0,5939	0,5958	-0,8489	-0,8393
1200	0,5435	0,5403	0,5807	0,5826	-0,8850	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 600 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0.0568	0	0.9448	1	-0.1642	0
50	0.0593	0.0189	0.9424	0.9813	-0.1646	-0.0365
100	0.0670	0.0378	0.9352	0.9629	-0.1699	-0.0730
150	0.0788	0.0568	0.9242	0.9448	-0.1841	-0.1095
200	0.0931	0.0757	0.9111	0.9271	-0.2056	-0.1460
250	0.1089	0.0946	0.8968	0.9097	-0.2317	-0.1825
300	0.1256	0.1135	0.8819	0.8927	-0.2608	-0.2190
350	0.1429	0.1324	0.8668	0.8760	-0.2917	-0.2554
400	0.1606	0.1513	0.8516	0.8596	-0.3239	-0.2919
450	0.1785	0.1703	0.8365	0.8434	-0.3570	-0.3284
500	0.1966	0.1892	0.8215	0.8276	-0.3908	-0.3649
550	0.2149	0.2081	0.8066	0.8121	-0.4250	-0.4014
600	0.2333	0.2270	0.7920	0.7969	-0.4595	-0.4379
650	0.2517	0.2459	0.7775	0.7820	-0.4944	-0.4744
700	0.2702	0.2648	0.7632	0.7673	-0.5295	-0.5109
750	0.2888	0.2838	0.7492	0.7529	-0.5648	-0.5474
800	0.3074	0.3027	0.7354	0.7388	-0.6002	-0.5839
850	0.3260	0.3216	0.7218	0.7250	-0.6357	-0.6204
900	0.3447	0.3405	0.7084	0.7114	-0.6714	-0.6569
950	0.3634	0.3594	0.6953	0.6981	-0.7071	-0.6933
1000	0.3821	0.3784	0.6824	0.6850	-0.7429	-0.7298
1050	0.4009	0.3973	0.6697	0.6722	-0.7788	-0.7663
1100	0.4196	0.4162	0.6573	0.6596	-0.8147	-0.8028
1150	0.4384	0.4351	0.6451	0.6472	-0.8507	-0.8393
1200	0.4572	0.4540	0.6331	0.6351	-0.8867	-0.8758

^{57}Fe, ϑ_D = 650 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0524	0	0,9490	1	-0,1779	0
50	0,0544	0,0161	0,9470	0,9840	-0,1782	-0,0365
100	0,0605	0,0322	0,9413	0,9683	-0,1825	-0,0730
150	0,0700	0,0484	0,9324	0,9528	-0,1951	-0,1095
200	0,0817	0,0645	0,9216	0,9376	-0,2149	-0,1460
250	0,0948	0,0806	0,9095	0,9226	-0,2397	-0,1825
300	0,1088	0,0967	0,8969	0,9078	-0,2677	-0,2190
350	0,1233	0,1128	0,8840	0,8933	-0,2978	-0,2554
400	0,1382	0,1290	0,8709	0,8790	-0,3293	-0,2919
450	0,1533	0,1451	0,8579	0,8650	-0,3619	-0,3284
500	0,1686	0,1612	0,8448	0,8511	-0,3952	-0,3649
550	0,1841	0,1773	0,8319	0,8375	-0,4290	-0,4014
600	0,1997	0,1934	0,8190	0,8241	-0,4632	-0,4379
650	0,2153	0,2095	0,8063	0,8110	-0,4978	-0,4744
700	0,2310	0,2257	0,7937	0,7980	-0,5327	-0,5109
750	0,2468	0,2418	0,7813	0,7852	-0,5678	-0,5474
800	0,2626	0,2579	0,7690	0,7727	-0,6030	-0,5839
850	0,2785	0,2740	0,7570	0,7603	-0,6384	-0,6204
900	0,2943	0,2901	0,7450	0,7482	-0,6739	-0,6569
950	0,3102	0,3063	0,7333	0,7362	-0,7095	-0,6933
1000	0,3261	0,3224	0,7217	0,7244	-0,7452	-0,7298
1050	0,3421	0,3385	0,7103	0,7128	-0,7809	-0,7663
1100	0,3580	0,3546	0,6990	0,7014	-0,8168	-0,8028
1150	0,3740	0,3707	0,6880	0,6902	-0,8527	-0,8393
1200	0,3900	0,3869	0,6771	0,6792	-0,8886	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 700 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0486	0	0,9525	1	-0,1916	0
50	0,0503	0,0139	0,9510	0,9862	-0,1918	-0,0365
100	0,0551	0,0278	0,9463	0,9726	-0,1954	-0,0730
150	0,0629	0,0417	0,9391	0,9592	-0,2064	-0,1095
200	0,0726	0,0556	0,9300	0,9459	-0,2247	-0,1460
250	0,0836	0,0695	0,9198	0,9329	-0,2481	-0,1825
300	0,0954	0,0834	0,9090	0,9200	-0,2750	-0,2190
350	0,1077	0,0973	0,8979	0,9073	-0,3043	-0,2554
400	0,1204	0,1112	0,8866	0,8948	-0,3351	-0,2919
450	0,1333	0,1251	0,8752	0,8824	-0,3671	-0,3284
500	0,1464	0,1390	0,8638	0,8702	-0,3999	-0,3649
550	0,1597	0,1529	0,8524	0,8582	-0,4333	-0,4014
600	0,1730	0,1668	0,8411	0,8464	-0,4672	-0,4379
650	0,1864	0,1807	0,8299	0,8347	-0,5015	-0,4744
700	0,1999	0,1946	0,8188	0,8232	-0,5361	-0,5109
750	0,2135	0,2085	0,8078	0,8118	-0,5710	-0,5474
800	0,2271	0,2224	0,7969	0,8006	-0,6060	-0,5839
850	0,2407	0,2363	0,7861	0,7896	-0,6412	-0,6204
900	0,2544	0,2502	0,7754	0,7787	-0,6766	-0,6569
950	0,2680	0,2641	0,7649	0,7679	-0,7120	-0,6933
1000	0,2817	0,2780	0,7545	0,7573	-0,7476	-0,7298
1050	0,2955	0,2919	0,7442	0,7469	-0,7833	-0,7663
1100	0,3092	0,3058	0,7340	0,7366	-0,8190	-0,8028
1150	0,3229	0,3197	0,7240	0,7264	-0,8548	-0,8393
1200	0,3367	0,3336	0,7141	0,7164	-0,8906	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 750 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0454	0	0,9556	1	-0,2053	0
50	0,0467	0,0121	0,9543	0,9880	-0,2055	-0,0365
100	0,0507	0,0242	0,9506	0,9761	-0,2085	-0,0730
150	0,0571	0,0363	0,9445	0,9643	-0,2181	-0,1095
200	0,0652	0,0484	0,9369	0,9527	-0,2349	-0,1460
250	0,0745	0,0605	0,9282	0,9413	-0,2570	-0,1825
300	0,0845	0,0726	0,9189	0,9299	-0,2828	-0,2190
350	0,0951	0,0848	0,9093	0,9187	-0,3111	-0,2554
400	0,1060	0,0969	0,8994	0,9077	-0,3412	-0,2919
450	0,1171	0,1090	0,8895	0,8968	-0,3726	-0,3284
500	0,1285	0,1211	0,8794	0,8860	-0,4049	-0,3649
550	0,1399	0,1332	0,8694	0,8753	-0,4379	-0,4014
600	0,1515	0,1453	0,8594	0,8648	-0,4715	-0,4379
650	0,1631	0,1574	0,8495	0,8544	-0,5055	-0,4744
700	0,1748	0,1695	0,8396	0,8441	-0,5398	-0,5109
750	0,1866	0,1816	0,8298	0,8339	-0,5744	-0,5474
800	0,1984	0,1937	0,8200	0,8239	-0,6093	-0,5839
850	0,2102	0,2058	0,8104	0,8140	-0,6443	-0,6204
900	0,2221	0,2179	0,8008	0,8042	-0,6795	-0,6569
950	0,2340	0,2300	0,7914	0,7945	-0,7148	-0,6933
1000	0,2459	0,2421	0,7820	0,7849	-0,7502	-0,7298
1050	0,2578	0,2543	0,7727	0,7755	-0,7858	-0,7663
1100	0,2698	0,2664	0,7635	0,7662	-0,8214	-0,8028
1150	0,2817	0,2785	0,7545	0,7569	-0,8571	-0,8393
1200	0,2937	0,2906	0,7455	0,7478	-0,8928	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 800 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0426	0	0,9583	1	-0,2190	0
50	0,0437	0,0106	0,9573	0,9894	-0,2191	-0,0365
100	0,0469	0,0213	0,9542	0,9789	-0,2216	-0,0730
150	0,0522	0,0319	0,9491	0,9686	-0,2301	-0,1095
200	0,0591	0,0426	0,9426	0,9583	-0,2455	-0,1460
250	0,0670	0,0532	0,9352	0,9482	-0,2663	-0,1825
300	0,0757	0,0638	0,9271	0,9381	-0,2910	-0,2190
350	0,0848	0,0745	0,9187	0,9282	-0,3184	-0,2554
400	0,0942	0,0851	0,9101	0,9184	-0,3477	-0,2919
450	0,1039	0,0958	0,9013	0,9087	-0,3785	-0,3284
500	0,1138	0,1064	0,8924	0,8991	-0,4103	-0,3649
550	0,1238	0,1171	0,8836	0,8895	-0,4428	-0,4014
600	0,1339	0,1277	0,8747	0,8801	-0,4760	-0,4379
650	0,1441	0,1383	0,8658	0,8708	-0,5097	-0,4744
700	0,1543	0,1490	0,8570	0,8616	-0,5437	-0,5109
750	0,1646	0,1596	0,8482	0,8525	-0,5781	-0,5474
800	0,1749	0,1703	0,8395	0,8434	-0,6127	-0,5839
850	0,1853	0,1809	0,8308	0,8345	-0,6476	-0,6204
900	0,1957	0,1915	0,8222	0,8257	-0,6826	-0,6569
950	0,2061	0,2022	0,8137	0,8169	-0,7177	-0,6933
1000	0,2166	0,2128	0,8053	0,8083	-0,7530	-0,7298
1050	0,2270	0,2235	0,7969	0,7997	-0,7884	-0,7663
1100	0,2375	0,2341	0,7886	0,7913	-0,8239	-0,8028
1150	0,2480	0,2447	0,7803	0,7829	-0,8595	-0,8393
1200	0,2585	0,2554	0,7722	0,7746	-0,8952	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 850 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0401	0	0,9607	1	-0,2326	0
50	0,0410	0,0094	0,9599	0,9906	-0,2328	-0,0365
100	0,0437	0,0189	0,9572	0,9813	-0,2349	-0,0730
150	0,0482	0,0283	0,9530	0,9721	-0,2424	-0,1095
200	0,0540	0,0377	0,9474	0,9630	-0,2564	-0,1460
250	0,0608	0,0471	0,9410	0,9540	-0,2759	-0,1825
300	0,0683	0,0566	0,9340	0,9450	-0,2995	-0,2190
350	0,0762	0,0660	0,9266	0,9361	-0,3260	-0,2554
400	0,0845	0,0754	0,9190	0,9274	-0,3546	-0,2919
450	0,0930	0,0848	0,9112	0,9187	-0,3847	-0,3284
500	0,1016	0,0943	0,9034	0,9100	-0,4159	-0,3649
550	0,1104	0,1037	0,8955	0,9015	-0,4480	-0,4014
600	0,1193	0,1131	0,8875	0,8931	-0,4808	-0,4379
650	0,1283	0,1225	0,8796	0,8847	-0,5142	-0,4744
700	0,1373	0,1320	0,8717	0,8764	-0,5479	-0,5109
750	0,1464	0,1414	0,8638	0,8681	-0,5820	-0,5474
800	0,1555	0,1508	0,8560	0,8600	-0,6164	-0,5839
850	0,1647	0,1602	0,8482	0,8519	-0,6510	-0,6204
900	0,1738	0,1697	0,8404	0,8439	-0,6858	-0,6569
950	0,1830	0,1791	0,8327	0,8360	-0,7208	-0,6933
1000	0,1923	0,1885	0,8251	0,8282	-0,7560	-0,7298
1050	0,2015	0,1979	0,8175	0,8204	-0,7912	-0,7663
1100	0,2108	0,2074	0,8099	0,8127	-0,8266	-0,8028
1150	0,2201	0,2168	0,8025	0,8051	-0,8621	-0,8393
1200	0,2294	0,2262	0,7950	0,7975	-0,8976	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 900 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0378	0	0,9629	1	-0,2463	0
50	0,0386	0,0084	0,9621	0,9916	-0,2464	-0,0365
100	0,0409	0,0168	0,9599	0,9833	-0,2482	-0,0730
150	0,0447	0,0252	0,9563	0,9751	-0,2548	-0,1095
200	0,0497	0,0336	0,9515	0,9669	-0,2676	-0,1460
250	0,0556	0,0420	0,9460	0,9588	-0,2859	-0,1825
300	0,0621	0,0504	0,9398	0,9508	-0,3084	-0,2190
350	0,0690	0,0589	0,9333	0,9428	-0,3340	-0,2554
400	0,0763	0,0673	0,9266	0,9349	-0,3618	-0,2919
450	0,0838	0,0757	0,9196	0,9271	-0,3912	-0,3284
500	0,0914	0,0841	0,9126	0,9194	-0,4219	-0,3649
550	0,0992	0,0925	0,9056	0,9117	-0,4535	-0,4014
600	0,1071	0,1009	0,8985	0,9040	-0,4859	-0,4379
650	0,1150	0,1093	0,8914	0,8965	-0,5189	-0,4744
700	0,1230	0,1177	0,8842	0,8890	-0,5523	-0,5109
750	0,1311	0,1261	0,8771	0,8815	-0,5861	-0,5474
800	0,1392	0,1345	0,8701	0,8741	-0,6203	-0,5839
850	0,1473	0,1429	0,8630	0,8668	-0,6547	-0,6204
900	0,1555	0,1513	0,8560	0,8596	-0,6893	-0,6569
950	0,1637	0,1597	0,8490	0,8524	-0,7241	-0,6933
1000	0,1719	0,1682	0,8421	0,8452	-0,7591	-0,7298
1050	0,1801	0,1766	0,8352	0,8381	-0,7942	-0,7663
1100	0,1884	0,1850	0,8283	0,8311	-0,8295	-0,8028
1150	0,1966	0,1934	0,8215	0,8242	-0,8648	-0,8393
1200	0,2049	0,2018	0,8147	0,8173	-0,9003	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 950 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0358	0	0,9648	1	-0,26	0
50	0,0365	0,0075	0,9642	0,9925	-0,2601	-0,0365
100	0,0385	0,0151	0,9623	0,9850	-0,2616	-0,0730
150	0,0417	0,0226	0,9592	0,9776	-0,2674	-0,1095
200	0,0460	0,0302	0,9551	0,9703	-0,2791	-0,1460
250	0,0511	0,0377	0,9502	0,9630	-0,2962	-0,1825
300	0,0568	0,0453	0,9448	0,9557	-0,3176	-0,2190
350	0,0629	0,0528	0,9390	0,9485	-0,3423	-0,2554
400	0,0693	0,0604	0,9330	0,9414	-0,3693	-0,2919
450	0,0760	0,0679	0,9268	0,9343	-0,3980	-0,3284
500	0,0828	0,0755	0,9206	0,9273	-0,4281	-0,3649
550	0,0897	0,0830	0,9142	0,9203	-0,4593	-0,4014
600	0,0967	0,0906	0,9078	0,9134	-0,4912	-0,4379
650	0,1038	0,0981	0,9014	0,9066	-0,5238	-0,4744
700	0,1110	0,1056	0,8950	0,8997	-0,5569	-0,5109
750	0,1182	0,1132	0,8886	0,8930	-0,5905	-0,5474
800	0,1254	0,1207	0,8821	0,8863	-0,6244	-0,5839
850	0,1327	0,1283	0,8757	0,8796	-0,6585	-0,6204
900	0,1400	0,1358	0,8694	0,8730	-0,6930	-0,6569
950	0,1473	0,1434	0,8630	0,8664	-0,7276	-0,6933
1000	0,1547	0,1509	0,8567	0,8599	-0,7624	-0,7298
1050	0,1620	0,1585	0,8504	0,8535	-0,7974	-0,7663
1100	0,1694	0,1660	0,8441	0,8470	-0,8325	-0,8028
1150	0,1768	0,1736	0,8379	0,8407	-0,8677	-0,8393
1200	0,1842	0,1811	0,8317	0,8343	-0,9030	-0,8758

^{57}Fe, ϑ_D = 1000 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0341	0	0,9665	1	-0,2737	0
50	0,0346	0,0068	0,9660	0,9932	-0,2738	-0,0365
100	0,0363	0,0136	0,9644	0,9865	-0,2751	-0,0730
150	0,0391	0,0204	0,9617	0,9798	-0,2802	-0,1095
200	0,0428	0,0272	0,9581	0,9731	-0,2909	-0,1460
250	0,0473	0,0341	0,9538	0,9665	-0,3068	-0,1825
300	0,0523	0,0409	0,9491	0,9600	-0,3272	-0,2190
350	0,0577	0,0477	0,9439	0,9534	-0,3509	-0,2554
400	0,0634	0,0545	0,9386	0,9470	-0,3771	-0,2919
450	0,0693	0,0613	0,9330	0,9405	-0,4051	-0,3284
500	0,0754	0,0681	0,9274	0,9342	-0,4347	-0,3649
550	0,0816	0,0749	0,9217	0,9278	-0,4653	-0,4014
600	0,0879	0,0817	0,9159	0,9215	-0,4968	-0,4379
650	0,0942	0,0885	0,9101	0,9153	-0,5290	-0,4744
700	0,1006	0,0953	0,9043	0,9091	-0,5618	-0,5109
750	0,1071	0,1022	0,8984	0,9029	-0,5950	-0,5474
800	0,1136	0,1090	0,8926	0,8968	-0,6287	-0,5839
850	0,1202	0,1158	0,8868	0,8907	-0,6626	-0,6204
900	0,1267	0,1226	0,8810	0,8846	-0,6968	-0,6569
950	0,1333	0,1294	0,8752	0,8786	-0,7313	-0,6933
1000	0,1400	0,1362	0,8694	0,8727	-0,7659	-0,7298
1050	0,1466	0,1430	0,8636	0,8667	-0,8007	-0,7663
1100	0,1532	0,1498	0,8579	0,8609	-0,8357	-0,8028
1150	0,1599	0,1566	0,8522	0,8550	-0,8708	-0,8393
1200	0,1666	0,1634	0,8466	0,8492	-0,9060	-0,8758

^{119}Sn, ϑ_D = 50 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,8948	0	0,4087	1	-0,0066	0
50	3,6777	3,5792	0,0253	0,0279	-0,0183	-0,0175
100	7,2080	7,1584	0,0007	0,0008	-0,0354	-0,0350
150	10,7708	10,7377	0	0	-0,0527	-0,0524
200	14,3417	14,3169	0	0	-0,0701	-0,0699
250	17,9160	17,8961	0	0	-0,0876	-0,0874
300	21,4919	21,4753	0	0	-0,1050	-0,1049
350	25,0687	25,0545	0	0	-0,1225	-0,1224
400	28,6462	28,6338	0	0	-0,1399	-0,1398
450	32,2240	32,2130	0	0	-0,1574	-0,1573
500	35,8021	35,7922	0	0	-0,1749	-0,1748
550	39,3805	39,3714	0	0	-0,1924	-0,1923
600	42,9589	42,9506	0	0	-0,2098	-0,2098
650	46,5375	46,5299	0	0	-0,2273	-0,2272
700	50,1162	50,1091	0	0	-0,2448	-0,2447
750	53,6949	53,6883	0	0	-0,2622	-0,2622
800	57,2737	57,2675	0	0	-0,2797	-0,2797
850	60,8526	60,8467	0	0	-0,2972	-0,2971
900	64,4315	64,4259	0	0	-0,3147	-0,3146
950	68,0104	68,0052	0	0	-0,3322	-0,3321
1000	71,5894	71,5844	0	0	-0,3496	-0,3496
1050	75,1683	75,1636	0	0	-0,3671	-0,3671
1100	78,7474	78,7428	0	0	-0,3846	-0,3845
1150	82,3264	82,3221	0	0	-0,4021	-0,4020
1200	85,9054	85,9013	0	0	-0,4195	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 100 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,4474	0	0,6393	1	-0,0131	0
50	0,9905	0,8948	0,3714	0,4087	-0,0208	-0,0175
100	1,8388	1,7896	0,1590	0,1670	-0,0367	-0,0350
150	2,7174	2,6844	0,0660	0,0683	-0,0536	-0,0524
200	3,6040	3,5792	0,0272	0,0279	-0,0708	-0,0699
250	4,4939	4,4740	0,0112	0,0114	-0,0881	-0,0874
300	5,3854	5,3688	0,0046	0,0047	-0,1055	-0,1049
350	6,2778	6,2636	0,0019	0,0019	-0,1229	-0,1224
400	7,1709	7,1584	0,0008	0,0008	-0,1403	-0,1398
450	8,0643	8,0532	0,0003	0,0003	-0,1577	-0,1573
500	8,9580	8,9480	0,0001	0,0001	-0,1751	-0,1748
550	9,8519	9,8429	0,0001	0,0001	-0,1926	-0,1923
600	10,7459	10,7377	0	0	-0,2100	-0,2098
650	11,6401	11,6325	0	0	-0,2275	-0,2272
700	12,5344	12,5273	0	0	-0,2450	-0,2447
750	13,4287	13,4221	0	0	-0,2624	-0,2622
800	14,3231	14,3169	0	0	-0,2799	-0,2797
850	15,2175	15,2117	0	0	-0,2974	-0,2971
900	16,1120	16,1065	0	0	-0,3148	-0,3146
950	17,0065	17,0013	0	0	-0,3323	-0,3321
1000	17,9011	17,8961	0	0	-0,3498	-0,3496
1050	18,7956	18,7909	0	0	-0,3672	-0,3671
1100	19,6902	19,6857	0	0	-0,3847	-0,3845
1150	20,5848	20,5805	0	0	-0,4022	-0,4020
1200	21,4795	21,4753	0	0	-0,4196	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 150 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,2983	0	0,7421	1	-0,0197	0
50	0,4893	0,3977	0,6130	0,6719	-0,0246	-0,0175
100	0,8440	0,7954	0,4300	0,4514	-0,0388	-0,0350
150	1,2259	1,1931	0,2935	0,3033	-0,0550	-0,0524
200	1,6155	1,5908	0,1988	0,2038	-0,0719	-0,0699
250	2,0083	1,9885	0,1342	0,1369	-0,0890	-0,0874
300	2,4027	2,3861	0,0905	0,0920	-0,1062	-0,1049
350	2,7980	2,7838	0,0609	0,0618	-0,1235	-0,1224
400	3,1939	3,1815	0,0410	0,0415	-0,1408	-0,1398
450	3,5903	3,5792	0,0276	0,0279	-0,1582	-0,1573
500	3,9868	3,9769	0,0186	0,0187	-0,1756	-0,1748
550	4,3836	4,3746	0,0125	0,0126	-0,1930	-0,1923
600	4,7806	4,7723	0,0084	0,0085	-0,2104	-0,2098
650	5,1776	5,1700	0,0056	0,0057	-0,2278	-0,2272
700	5,5748	5,5677	0,0038	0,0038	-0,2453	-0,2447
750	5,9720	5,9654	0,0025	0,0026	-0,2627	-0,2622
800	6,3693	6,3631	0,0017	0,0017	-0,2802	-0,2797
850	6,7666	6,7607	0,0012	0,0012	-0,2976	-0,2971
900	7,1640	7,1584	0,0008	0,0008	-0,3151	-0,3146
950	7,5614	7,5561	0,0005	0,0005	-0,3325	-0,3321
1000	7,9588	7,9538	0,0003	0,0004	-0,3500	-0,3496
1050	8,3562	8,3515	0,0002	0,0002	-0,3674	-0,3671
1100	8,7537	8,7492	0,0002	0,0002	-0,3849	-0,3845
1150	9,1512	9,1469	0,0001	0,0001	-0,4024	-0,4020
1200	9,5487	9,5446	0,0001	0,0001	-0,4198	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 200 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,2237	0	0,7996	1	-0,0262	0
50	0,3105	0,2237	0,7331	0,7996	-0,0294	-0,0175
100	0,4953	0,4474	0,6094	0,6393	-0,0416	-0,0350
150	0,7037	0,6711	0,4948	0,5111	-0,0570	-0,0524
200	0,9194	0,8948	0,3988	0,4087	-0,0734	-0,0699
250	1,1383	1,1185	0,3204	0,3268	-0,0902	-0,0874
300	1,3587	1,3422	0,2570	0,2613	-0,1072	-0,1049
350	1,5801	1,5659	0,2060	0,2089	-0,1243	-0,1224
400	1,8020	1,7896	0,1650	0,1670	-0,1416	-0,1398
450	2,0243	2,0133	0,1321	0,1335	-0,1589	-0,1573
500	2,2469	2,2370	0,1057	0,1068	-0,1762	-0,1748
550	2,4697	2,4607	0,0846	0,0854	-0,1935	-0,1923
600	2,6927	2,6844	0,0677	0,0683	-0,2109	-0,2098
650	2,9158	2,9081	0,0542	0,0546	-0,2283	-0,2272
700	3,1389	3,1318	0,0433	0,0436	-0,2457	-0,2447
750	3,3621	3,3555	0,0347	0,0349	-0,2631	-0,2622
800	3,5854	3,5792	0,0277	0,0279	-0,2805	-0,2797
850	3,8088	3,8029	0,0222	0,0223	-0,2980	-0,2971
900	4,0321	4,0266	0,0177	0,0178	-0,3154	-0,3146
950	4,2556	4,2503	0,0142	0,0143	-0,3328	-0,3321
1000	4,4790	4,4740	0,0113	0,0114	-0,3503	-0,3496
1050	4,7025	4,6977	0,0091	0,0091	-0,3677	-0,3671
1100	4,9259	4,9214	0,0073	0,0073	-0,3852	-0,3845
1150	5,1494	5,1451	0,0058	0,0058	-0,4026	-0,4020
1200	5,3730	5,3688	0,0046	0,0047	-0,4201	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 250 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,179	0	0,8361	1	-0,0328	0
50	0,2249	0,1432	0,7986	0,8666	-0,0348	-0,0175
100	0,3332	0,2863	0,7166	0,7510	-0,0452	-0,0350
150	0,4618	0,4295	0,6302	0,6508	-0,0595	-0,0524
200	0,5972	0,5727	0,5504	0,5640	-0,0753	-0,0699
250	0,7355	0,7158	0,4793	0,4888	-0,0917	-0,0874
300	0,8755	0,8590	0,4167	0,4236	-0,1085	-0,1049
350	1,0163	1,0022	0,3619	0,3671	-0,1255	-0,1224
400	1,1577	1,1454	0,3142	0,3181	-0,1426	-0,1398
450	1,2995	1,2885	0,2727	0,2757	-0,1597	-0,1573
500	1,4416	1,4317	0,2365	0,2389	-0,1770	-0,1748
550	1,5839	1,5749	0,2052	0,2070	-0,1943	-0,1923
600	1,7263	1,7180	0,1779	0,1794	-0,2116	-0,2098
650	1,8688	1,8612	0,1543	0,1555	-0,2289	-0,2272
700	2,0115	2,0044	0,1338	0,1347	-0,2463	-0,2447
750	2,1542	2,1475	0,1160	0,1168	-0,2636	-0,2622
800	2,2969	2,2907	0,1006	0,1012	-0,2810	-0,2797
850	2,4397	2,4339	0,0872	0,0877	-0,2984	-0,2971
900	2,5826	2,5770	0,0756	0,0760	-0,3158	-0,3146
950	2,7254	2,7202	0,0655	0,0659	-0,3333	-0,3321
1000	2,8683	2,8634	0,0568	0,0571	-0,3507	-0,3496
1050	3,0113	3,0065	0,0492	0,0495	-0,3681	-0,3671
1100	3,1542	3,1497	0,0427	0,0429	-0,3855	-0,3845
1150	3,2972	3,2929	0,0370	0,0371	-0,4030	-0,4020
1200	3,4402	3,4361	0,0321	0,0322	-0,4204	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 300 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,1491	0	0,8615	1	-0,0393	0
50	0,1761	0,0994	0,8385	0,9054	-0,0407	-0,0175
100	0,2447	0,1988	0,7830	0,8197	-0,0492	-0,0350
150	0,3302	0,2983	0,7188	0,7421	-0,0625	-0,0524
200	0,4220	0,3977	0,6557	0,6719	-0,0776	-0,0699
250	0,5167	0,4971	0,5965	0,6083	-0,0936	-0,0874
300	0,6129	0,5965	0,5418	0,5507	-0,1101	-0,1049
350	0,7101	0,6960	0,4916	0,4986	-0,1268	-0,1224
400	0,8077	0,7954	0,4459	0,4514	-0,1437	-0,1398
450	0,9058	0,8948	0,4042	0,4087	-0,1608	-0,1573
500	1,0041	0,9942	0,3664	0,3700	-0,1779	-0,1748
550	1,1027	1,0937	0,3320	0,3350	-0,1951	-0,1923
600	1,2013	1,1931	0,3008	0,3033	-0,2124	-0,2098
650	1,3001	1,2925	0,2725	0,2746	-0,2296	-0,2272
700	1,3990	1,3919	0,2468	0,2486	-0,2470	-0,2447
750	1,4980	1,4913	0,2236	0,2251	-0,2643	-0,2622
800	1,5970	1,5908	0,2025	0,2038	-0,2816	-0,2797
850	1,6960	1,6902	0,1834	0,1845	-0,2990	-0,2971
900	1,7951	1,7896	0,1661	0,1670	-0,3164	-0,3146
950	1,8943	1,8890	0,1504	0,1512	-0,3338	-0,3321
1000	1,9934	1,9885	0,1362	0,1369	-0,3512	-0,3496
1050	2,0926	2,0879	0,1234	0,1239	-0,3686	-0,3671
1100	2,1918	2,1873	0,1117	0,1122	-0,3860	-0,3845
1150	2,2910	2,2867	0,1012	0,1016	-0,4034	-0,4020
1200	2,3903	2,3861	0,0916	0,0920	-0,4208	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 350 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,1278	0	0,88	1	-0,0459	0
50	0,1449	0,0730	0,8651	0,9296	-0,0468	-0,0175
100	0,1907	0,1461	0,8263	0,8641	-0,0538	-0,0350
150	0,2506	0,2191	0,7783	0,8032	-0,0659	-0,0524
200	0,3163	0,2922	0,7288	0,7466	-0,0803	-0,0699
250	0,3847	0,3652	0,6806	0,6940	-0,0958	-0,0874
300	0,4546	0,4383	0,6347	0,6452	-0,1119	-0,1049
350	0,5254	0,5113	0,5913	0,5997	-0,1284	-0,1224
400	0,5967	0,5844	0,5506	0,5575	-0,1451	-0,1398
450	0,6684	0,6574	0,5125	0,5182	-0,1620	-0,1573
500	0,7403	0,7305	0,4769	0,4817	-0,1791	-0,1748
550	0,8125	0,8035	0,4437	0,4478	-0,1961	-0,1923
600	0,8848	0,8765	0,4128	0,4162	-0,2133	-0,2098
650	0,9572	0,9496	0,3840	0,3869	-0,2305	-0,2272
700	1,0297	1,0226	0,3571	0,3596	-0,2478	-0,2447
750	1,1023	1,0957	0,3321	0,3343	-0,2650	-0,2622
800	1,1749	1,1687	0,3088	0,3108	-0,2823	-0,2797
850	1,2476	1,2418	0,2872	0,2889	-0,2997	-0,2971
900	1,3203	1,3148	0,2670	0,2685	-0,3170	-0,3146
950	1,3931	1,3879	0,2483	0,2496	-0,3344	-0,3321
1000	1,4659	1,4609	0,2309	0,2320	-0,3517	-0,3496
1050	1,5387	1,5340	0,2147	0,2157	-0,3691	-0,3671
1100	1,6115	1,6070	0,1996	0,2005	-0,3865	-0,3845
1150	1,6844	1,6800	0,1856	0,1864	-0,4039	-0,4020
1200	1,7572	1,7531	0,1725	0,1732	-0,4213	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 400 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,1119	0	0,8942	1	-0,0524	0
50	0,1233	0,0559	0,8840	0,9456	-0,0531	-0,0175
100	0,1553	0,1119	0,8562	0,8942	-0,0588	-0,0350
150	0,1988	0,1678	0,8197	0,8455	-0,0697	-0,0524
200	0,2476	0,2237	0,7807	0,7996	-0,0833	-0,0699
250	0,2990	0,2796	0,7415	0,7561	-0,0983	-0,0874
300	0,3518	0,3356	0,7034	0,7149	-0,1140	-0,1049
350	0,4055	0,3915	0,6666	0,6761	-0,1302	-0,1224
400	0,4597	0,4474	0,6315	0,6393	-0,1467	-0,1398
450	0,5143	0,5033	0,5979	0,6045	-0,1635	-0,1573
500	0,5691	0,5593	0,5660	0,5716	-0,1803	-0,1748
550	0,6242	0,6152	0,5357	0,5405	-0,1973	-0,1923
600	0,6794	0,6711	0,5069	0,5111	-0,2144	-0,2098
650	0,7346	0,7270	0,4797	0,4833	-0,2315	-0,2272
700	0,7900	0,7830	0,4538	0,4571	-0,2487	-0,2447
750	0,8455	0,8389	0,4293	0,4322	-0,2659	-0,2622
800	0,9010	0,8948	0,4062	0,4087	-0,2832	-0,2797
850	0,9566	0,9507	0,3842	0,3865	-0,3004	-0,2971
900	1,0122	1,0067	0,3634	0,3654	-0,3177	-0,3146
950	1,0678	1,0626	0,3438	0,3456	-0,3350	-0,3321
1000	1,1235	1,1185	0,3251	0,3268	-0,3524	-0,3496
1050	1,1792	1,1744	0,3075	0,3090	-0,3697	-0,3671
1100	1,2349	1,2304	0,2909	0,2922	-0,3871	-0,3845
1150	1,2906	1,2863	0,2751	0,2763	-0,4045	-0,4020
1200	1,3463	1,3422	0,2602	0,2613	-0,4218	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 450 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0994	0	0,9054	1	-0,059	0
50	0,1075	0,0442	0,8981	0,9568	-0,0595	-0,0175
100	0,1305	0,0884	0,8776	0,9154	-0,0641	-0,0350
150	0,1631	0,1326	0,8495	0,8758	-0,0739	-0,0524
200	0,2004	0,1768	0,8184	0,8380	-0,0866	-0,0699
250	0,2402	0,2209	0,7865	0,8018	-0,1010	-0,0874
300	0,2813	0,2651	0,7548	0,7671	-0,1164	-0,1049
350	0,3233	0,3093	0,7238	0,7339	-0,1323	-0,1224
400	0,3658	0,3535	0,6937	0,7022	-0,1486	-0,1398
450	0,4086	0,3977	0,6646	0,6719	-0,1651	-0,1573
500	0,4517	0,4419	0,6365	0,6428	-0,1818	-0,1748
550	0,4950	0,4861	0,6095	0,615	-0,1987	-0,1923
600	0,5385	0,5303	0,5836	0,5885	-0,2156	-0,2098
650	0,5821	0,5744	0,5587	0,5630	-0,2326	-0,2272
700	0,6257	0,6186	0,5349	0,5387	-0,2497	-0,2447
750	0,6694	0,6628	0,5120	0,5154	-0,2669	-0,2622
800	0,7132	0,7070	0,4901	0,4931	-0,2841	-0,2797
850	0,7570	0,7512	0,4691	0,4718	-0,3013	-0,2971
900	0,8009	0,7954	0,4489	0,4514	-0,3185	-0,3146
950	0,8448	0,8396	0,4296	0,4319	-0,3358	-0,3321
1000	0,8887	0,8838	0,4112	0,4132	-0,3531	-0,3496
1050	0,9327	0,9279	0,3935	0,3954	-0,3704	-0,3671
1100	0,9766	0,9721	0,3766	0,3783	-0,3878	-0,3845
1150	1,0206	1,0163	0,3604	0,3619	-0,4051	-0,4020
1200	1,0646	1,0605	0,3448	0,3463	-0,4224	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 500 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0895	0	0,9144	1	-0,0655	0
50	0,0954	0,0358	0,909	0,9648	-0,0659	-0,0175
100	0,1125	0,0716	0,8936	0,9309	-0,0697	-0,0350
150	0,1374	0,1074	0,8716	0,8982	-0,0784	-0,0524
200	0,1666	0,1432	0,8465	0,8666	-0,0903	-0,0699
250	0,1981	0,1790	0,8203	0,8361	-0,1041	-0,0874
300	0,2309	0,2148	0,7938	0,8067	-0,1190	-0,1049
350	0,2645	0,2505	0,7676	0,7784	-0,1345	-0,1224
400	0,2986	0,2863	0,7419	0,7510	-0,1506	-0,1398
450	0,3330	0,3221	0,7167	0,7246	-0,1669	-0,1573
500	0,3678	0,3579	0,6923	0,6991	-0,1834	-0,1748
550	0,4027	0,3937	0,6685	0,6745	-0,2001	-0,1923
600	0,4377	0,4295	0,6455	0,6508	-0,2170	-0,2098
650	0,4729	0,4653	0,6232	0,6279	-0,2339	-0,2272
700	0,5082	0,5011	0,6016	0,6059	-0,2509	-0,2447
750	0,5435	0,5369	0,5807	0,5846	-0,2680	-0,2622
800	0,5789	0,5727	0,5605	0,5640	-0,2851	-0,2797
850	0,6143	0,6085	0,5410	0,5442	-0,3023	-0,2971
900	0,6498	0,6443	0,5222	0,5251	-0,3195	-0,3146
950	0,6853	0,6801	0,5040	0,5066	-0,3367	-0,3321
1000	0,7208	0,7158	0,4864	0,4888	-0,3539	-0,3496
1050	0,7564	0,7516	0,4694	0,4716	-0,3712	-0,3671
1100	0,7919	0,7874	0,4530	0,4550	-0,3885	-0,3845
1150	0,8275	0,8232	0,4371	0,4390	-0,4058	-0,4020
1200	0,8631	0,8590	0,4218	0,4236	-0,4231	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 550 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,0813	0	0,9219	1	-0,0721	0
50	0,0858	0,0296	0,9178	0,9709	-0,0724	-0,0175
100	0,0988	0,0592	0,9060	0,9426	-0,0754	-0,035
150	0,1182	0,0887	0,8885	0,9151	-0,0832	-0,0524
200	0,1415	0,1183	0,8680	0,8884	-0,0943	-0,0699
250	0,1669	0,1479	0,8463	0,8625	-0,1074	-0,0874
300	0,1935	0,1775	0,8240	0,8374	-0,1218	-0,1049
350	0,2209	0,2071	0,8018	0,8130	-0,137	-0,1224
400	0,2488	0,2366	0,7797	0,7893	-0,1528	-0,1398
450	0,2771	0,2662	0,7580	0,7663	-0,1689	-0,1573
500	0,3056	0,2958	0,7367	0,7439	-0,1852	-0,1748
550	0,3343	0,3254	0,7158	0,7223	-0,2018	-0,1923
600	0,3632	0,3550	0,6955	0,7012	-0,2185	-0,2098
650	0,3921	0,3845	0,6756	0,6808	-0,2353	-0,2272
700	0,4212	0,4141	0,6563	0,6609	-0,2522	-0,2447
750	0,4503	0,4437	0,6374	0,6417	-0,2692	-0,2622
800	0,4795	0,4733	0,6191	0,6230	-0,2862	-0,2797
850	0,5087	0,5029	0,6013	0,6048	-0,3033	-0,2971
900	0,5379	0,5324	0,5839	0,5872	-0,3205	-0,3146
950	0,5672	0,5620	0,5671	0,5701	-0,3377	-0,3321
1000	0,5966	0,5916	0,5507	0,5534	-0,3549	-0,3496
1050	0,6259	0,6212	0,5348	0,5373	-0,3721	-0,3671
1100	0,6553	0,6508	0,5193	0,5216	-0,3893	-0,3845
1150	0,6847	0,6803	0,5043	0,5064	-0,4066	-0,402
1200	0,7141	0,7099	0,4897	0,4917	-0,4239	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 600 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,0746	0	0,9281	1	-0,0787	0
50	0,0780	0,0249	0,9250	0,9755	-0,0789	-0,0175
100	0,0881	0,0497	0,9157	0,9515	-0,0814	-0,0350
150	0,1035	0,0746	0,9017	0,9281	-0,0882	-0,0524
200	0,1223	0,0994	0,8849	0,9054	-0,0985	-0,0699
250	0,1431	0,1243	0,8667	0,8831	-0,1110	-0,0874
300	0,1651	0,1491	0,8478	0,8615	-0,1249	-0,1049
350	0,1878	0,1740	0,8288	0,8403	-0,1397	-0,1224
400	0,2110	0,1988	0,8098	0,8197	-0,1552	-0,1398
450	0,2346	0,2237	0,7909	0,7996	-0,1710	-0,1573
500	0,2584	0,2486	0,7723	0,7799	-0,1872	-0,1748
550	0,2823	0,2734	0,7540	0,7608	-0,2036	-0,1923
600	0,3065	0,2983	0,7360	0,7421	-0,2201	-0,2098
650	0,3307	0,3231	0,7184	0,7239	-0,2368	-0,2272
700	0,3550	0,3480	0,7012	0,7061	-0,2536	-0,2447
750	0,3794	0,3728	0,6843	0,6888	-0,2705	-0,2622
800	0,4039	0,3977	0,6677	0,6719	-0,2875	-0,2797
850	0,4284	0,4225	0,6516	0,6554	-0,3045	-0,2971
900	0,4529	0,4474	0,6358	0,6393	-0,3216	-0,3146
950	0,4775	0,4723	0,6204	0,6236	-0,3387	-0,3321
1000	0,5021	0,4971	0,6053	0,6083	-0,3559	-0,3496
1050	0,5267	0,5220	0,5906	0,5934	-0,3730	-0,3671
1100	0,5513	0,5468	0,5762	0,5788	-0,3902	-0,3845
1150	0,5760	0,5717	0,5621	0,5646	-0,4075	-0,4020
1200	0,6007	0,5965	0,5484	0,5507	-0,4247	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 650 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,0688	0	0,9335	1	-0,0852	0
50	0,0715	0,0212	0,9310	0,9790	-0,0854	-0,0175
100	0,0795	0,0424	0,9236	0,9585	-0,0874	-0,0350
150	0,0919	0,0635	0,9122	0,9384	-0,0934	-0,0524
200	0,1073	0,0847	0,8982	0,9188	-0,1029	-0,0699
250	0,1246	0,1059	0,8829	0,8995	-0,1148	-0,0874
300	0,1429	0,1271	0,8668	0,8807	-0,1282	-0,1049
350	0,1620	0,1483	0,8504	0,8622	-0,1426	-0,1224
400	0,1815	0,1694	0,8340	0,8441	-0,1577	-0,1398
450	0,2014	0,1906	0,8176	0,8265	-0,1733	-0,1573
500	0,2216	0,2118	0,8013	0,8091	-0,1893	-0,1748
550	0,2419	0,2330	0,7851	0,7922	-0,2055	-0,1923
600	0,2623	0,2541	0,7693	0,7756	-0,2219	-0,2098
650	0,2829	0,2753	0,7536	0,7593	-0,2385	-0,2272
700	0,3035	0,2965	0,7382	0,7434	-0,2552	-0,2447
750	0,3243	0,3177	0,7231	0,7278	-0,2719	-0,2622
800	0,3450	0,3389	0,7082	0,7126	-0,2888	-0,2797
850	0,3659	0,3600	0,6936	0,6976	-0,3058	-0,2971
900	0,3867	0,3812	0,6793	0,6830	-0,3228	-0,3146
950	0,4076	0,4024	0,6652	0,6687	-0,3398	-0,3321
1000	0,4285	0,4236	0,6515	0,6547	-0,3569	-0,3496
1050	0,4495	0,4448	0,6380	0,6410	-0,3741	-0,3671
1100	0,4704	0,4659	0,6247	0,6275	-0,3912	-0,3845
1150	0,4914	0,4871	0,6118	0,6144	-0,4084	-0,4020
1200	0,5124	0,5083	0,5990	0,6015	-0,4256	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 700 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,0639	0	0,9381	1	-0,0918	0
50	0,0661	0,0183	0,9361	0,9819	-0,0919	-0,0175
100	0,0725	0,0365	0,9301	0,9641	-0,0936	-0,0350
150	0,0826	0,0548	0,9207	0,9467	-0,0989	-0,0524
200	0,0954	0,0730	0,9090	0,9296	-0,1076	-0,0699
250	0,1098	0,0913	0,8960	0,9127	-0,1189	-0,0874
300	0,1253	0,1096	0,8822	0,8962	-0,1317	-0,1049
350	0,1415	0,1278	0,8681	0,8800	-0,1457	-0,1224
400	0,1582	0,1461	0,8537	0,8641	-0,1605	-0,1398
450	0,1751	0,1644	0,8393	0,8484	-0,1758	-0,1573
500	0,1924	0,1826	0,8250	0,8331	-0,1915	-0,1748
550	0,2098	0,2009	0,8108	0,8180	-0,2076	-0,1923
600	0,2273	0,2191	0,7967	0,8032	-0,2238	-0,2098
650	0,2450	0,2374	0,7827	0,7887	-0,2402	-0,2272
700	0,2627	0,2557	0,7690	0,7744	-0,2568	-0,2447
750	0,2805	0,2739	0,7554	0,7604	-0,2735	-0,2622
800	0,2983	0,2922	0,7420	0,7466	-0,2903	-0,2797
850	0,3163	0,3104	0,7289	0,7331	-0,3071	-0,2971
900	0,3342	0,3287	0,7159	0,7199	-0,3241	-0,3146
950	0,3522	0,3470	0,7032	0,7068	-0,3411	-0,3321
1000	0,3702	0,3652	0,6906	0,6940	-0,3581	-0,3496
1050	0,3882	0,3835	0,6783	0,6815	-0,3752	-0,3671
1100	0,4063	0,4017	0,6661	0,6691	-0,3923	-0,3845
1150	0,4243	0,4200	0,6542	0,6570	-0,4094	-0,4020
1200	0,4424	0,4383	0,6425	0,6452	-0,4266	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 750 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,0597	0	0,9421	1	-0,0983	0
50	0,0614	0,0159	0,9404	0,9842	-0,0984	-0,0175
100	0,0666	0,0318	0,9356	0,9687	-0,0998	-0,0350
150	0,0750	0,0477	0,9278	0,9534	-0,1045	-0,0524
200	0,0856	0,0636	0,9179	0,9384	-0,1125	-0,0699
250	0,0979	0,0795	0,9068	0,9235	-0,1231	-0,0874
300	0,1111	0,0954	0,8949	0,9090	-0,1355	-0,1049
350	0,1250	0,1114	0,8825	0,8946	-0,1490	-0,1224
400	0,1393	0,1273	0,8700	0,8805	-0,1634	-0,1398
450	0,1539	0,1432	0,8573	0,8666	-0,1785	-0,1573
500	0,1688	0,1591	0,8447	0,8529	-0,1940	-0,1748
550	0,1839	0,1750	0,8321	0,8395	-0,2098	-0,1923
600	0,1991	0,1909	0,8195	0,8262	-0,2258	-0,2098
650	0,2143	0,2068	0,8071	0,8132	-0,2421	-0,2272
700	0,2297	0,2227	0,7947	0,8003	-0,2586	-0,2447
750	0,2452	0,2386	0,7826	0,7877	-0,2751	-0,2622
800	0,2607	0,2545	0,7705	0,7753	-0,2918	-0,2797
850	0,2762	0,2704	0,7586	0,7631	-0,3086	-0,2971
900	0,2918	0,2863	0,7469	0,7510	-0,3255	-0,3146
950	0,3074	0,3022	0,7353	0,7392	-0,3424	-0,3321
1000	0,3231	0,3182	0,7239	0,7275	-0,3594	-0,3496
1050	0,3388	0,3341	0,7126	0,7160	-0,3764	-0,3671
1100	0,3545	0,3500	0,7015	0,7047	-0,3934	-0,3845
1150	0,3702	0,3659	0,6906	0,6936	-0,4105	-0,4020
1200	0,3859	0,3818	0,6798	0,6826	-0,4277	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 800 K

T, K	$2W$	$2W^e$	f	f^e	δ_T	δ_T^e
0	0,0559	0	0,9456	1	-0,1049	0
50	0,0574	0,0140	0,9443	0,9861	-0,1050	-0,0175
100	0,0617	0,0280	0,9402	0,9724	-0,1062	-0,0350
150	0,0686	0,0419	0,9337	0,9589	-0,1102	-0,0524
200	0,0776	0,0559	0,9253	0,9456	-0,1176	-0,0699
250	0,0881	0,0699	0,9157	0,9325	-0,1275	-0,0874
300	0,0994	0,0839	0,9054	0,9195	-0,1394	-0,1049
350	0,1114	0,0979	0,8946	0,9068	-0,1525	-0,1224
400	0,1238	0,1119	0,8835	0,8942	-0,1666	-0,1398
450	0,1365	0,1258	0,8724	0,8818	-0,1813	-0,1573
500	0,1495	0,1398	0,8611	0,8695	-0,1965	-0,1748
550	0,1626	0,1538	0,8499	0,8574	-0,2121	-0,1923
600	0,1759	0,1678	0,8387	0,8455	-0,2280	-0,2098
650	0,1893	0,1818	0,8275	0,8338	-0,2441	-0,2272
700	0,2027	0,1957	0,8165	0,8222	-0,2604	-0,2447
750	0,2163	0,2097	0,8055	0,8108	-0,2769	-0,2622
800	0,2299	0,2237	0,7946	0,7996	-0,2935	-0,2797
850	0,2435	0,2377	0,7839	0,7885	-0,3102	-0,2971
900	0,2571	0,2517	0,7733	0,7775	-0,3269	-0,3146
950	0,2708	0,2656	0,7627	0,7667	-0,3438	-0,3321
1000	0,2846	0,2796	0,7523	0,7561	-0,3607	-0,3496
1050	0,2983	0,2936	0,7421	0,7456	-0,3776	-0,3671
1100	0,3121	0,3076	0,7319	0,7352	-0,3947	-0,3845
1150	0,3259	0,3216	0,7219	0,7250	-0,4117	-0,4020
1200	0,3397	0,3356	0,7120	0,7149	-0,4288	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 850 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0526	0	0,9487	1	-0,1114	0
50	0,0538	0,0124	0,9476	0,9877	-0,1115	-0,0175
100	0,0574	0,0248	0,9442	0,9755	-0,1125	-0,0350
150	0,0633	0,0372	0,9387	0,9635	-0,1161	-0,0524
200	0,0709	0,0495	0,9315	0,9517	-0,1228	-0,0699
250	0,0799	0,0619	0,9232	0,9400	-0,1322	-0,0874
300	0,0897	0,0743	0,9142	0,9284	-0,1435	-0,1049
350	0,1001	0,0867	0,9047	0,9170	-0,1562	-0,1224
400	0,1110	0,0991	0,8950	0,9057	-0,1698	-0,1398
450	0,1221	0,1115	0,8850	0,8945	-0,1843	-0,1573
500	0,1335	0,1238	0,8750	0,8835	-0,1992	-0,1748
550	0,1451	0,1362	0,8650	0,8726	-0,2146	-0,1923
600	0,1567	0,1486	0,8549	0,8619	-0,2303	-0,2098
650	0,1685	0,1610	0,8449	0,8513	-0,2463	-0,2272
700	0,1804	0,1734	0,8349	0,8408	-0,2624	-0,2447
750	0,1923	0,1858	0,8250	0,8305	-0,2788	-0,2622
800	0,2043	0,1982	0,8152	0,8202	-0,2952	-0,2797
850	0,2163	0,2105	0,8055	0,8101	-0,3118	-0,2971
900	0,2284	0,2229	0,7958	0,8002	-0,3285	-0,3146
950	0,2405	0,2353	0,7862	0,7903	-0,3453	-0,3321
1000	0,2526	0,2477	0,7768	0,7806	-0,3621	-0,3496
1050	0,2648	0,2601	0,7674	0,7710	-0,3790	-0,3671
1100	0,2770	0,2725	0,7581	0,7615	-0,3959	-0,3845
1150	0,2892	0,2849	0,7489	0,7521	-0,4129	-0,4020
1200	0,3014	0,2972	0,7398	0,7429	-0,4300	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 900 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0497	0	0,9515	1	-0,1180	0
50	0,0507	0,0110	0,9505	0,9890	-0,1180	-0,0175
100	0,0537	0,0221	0,9477	0,9781	-0,1189	-0,0350
150	0,0587	0,0331	0,9430	0,9674	-0,1221	-0,0524
200	0,0653	0,0442	0,9368	0,9568	-0,1282	-0,0699
250	0,0730	0,0552	0,9296	0,9463	-0,1370	-0,0874
300	0,0816	0,0663	0,9217	0,9359	-0,1477	-0,1049
350	0,0907	0,0773	0,9133	0,9256	-0,1600	-0,1224
400	0,1002	0,0884	0,9046	0,9154	-0,1733	-0,1398
450	0,1101	0,0994	0,8958	0,9054	-0,1874	-0,1573
500	0,1201	0,1105	0,8868	0,8954	-0,2021	-0,1748
550	0,1303	0,1215	0,8778	0,8856	-0,2172	-0,1923
600	0,1407	0,1326	0,8688	0,8758	-0,2327	-0,2098
650	0,1511	0,1436	0,8597	0,8662	-0,2485	-0,2272
700	0,1616	0,1547	0,8507	0,8567	-0,2646	-0,2447
750	0,1722	0,1657	0,8418	0,8473	-0,2808	-0,2622
800	0,1829	0,1768	0,8329	0,8380	-0,2971	-0,2797
850	0,1936	0,1878	0,8240	0,8288	-0,3136	-0,2971
900	0,2043	0,1988	0,8152	0,8197	-0,3302	-0,3146
950	0,2151	0,2099	0,8065	0,8107	-0,3469	-0,3321
1000	0,2259	0,2209	0,7978	0,8018	-0,3636	-0,3496
1050	0,2367	0,2320	0,7892	0,7930	-0,3804	-0,3671
1100	0,2475	0,2430	0,7807	0,7842	-0,3973	-0,3845
1150	0,2584	0,2541	0,7723	0,7756	-0,4142	-0,4020
1200	0,2692	0,2651	0,7640	0,7671	-0,4312	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 950 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0471	0	0,9540	1	-0,1245	0
50	0,0480	0,0099	0,9532	0,9901	-0,1246	-0,0175
100	0,0505	0,0198	0,9507	0,9804	-0,1253	-0,0350
150	0,0548	0,0297	0,9467	0,9707	-0,1281	-0,0524
200	0,0604	0,0397	0,9414	0,9611	-0,1337	-0,0699
250	0,0671	0,0496	0,9351	0,9516	-0,1419	-0,0874
300	0,0746	0,0595	0,9281	0,9422	-0,1522	-0,1049
350	0,0827	0,0694	0,9207	0,9330	-0,1639	-0,1224
400	0,0911	0,0793	0,9129	0,9237	-0,1769	-0,1398
450	0,0998	0,0892	0,9050	0,9146	-0,1907	-0,1573
500	0,1088	0,0991	0,8970	0,9056	-0,2051	-0,1748
550	0,1178	0,1091	0,8888	0,8967	-0,2200	-0,1923
600	0,1271	0,1190	0,8807	0,8878	-0,2353	-0,2098
650	0,1364	0,1289	0,8725	0,8791	-0,2509	-0,2272
700	0,1458	0,1388	0,8643	0,8704	-0,2668	-0,2447
750	0,1552	0,1487	0,8562	0,8618	-0,2828	-0,2622
800	0,1648	0,1586	0,8481	0,8533	-0,2991	-0,2797
850	0,1743	0,1686	0,8400	0,8449	-0,3154	-0,2971
900	0,1839	0,1785	0,8320	0,8366	-0,3319	-0,3146
950	0,1936	0,1884	0,8240	0,8283	-0,3485	-0,3321
1000	0,2032	0,1983	0,8161	0,8201	-0,3652	-0,3496
1050	0,2129	0,2082	0,8082	0,8120	-0,3819	-0,3671
1100	0,2226	0,2181	0,8004	0,8040	-0,3988	-0,3845
1150	0,2323	0,2280	0,7927	0,7961	-0,4156	-0,4020
1200	0,2421	0,2380	0,7850	0,7882	-0,4326	-0,4195

^{119}Sn, ϑ_D = 1000 K

T, K	$2W$	$2W^c$	f	f^c	δ_T	δ_T^c
0	0,0447	0	0,9562	1	-0,1311	0
50	0,0455	0,0089	0,9555	0,9911	-0,1311	-0,0175
100	0,0477	0,0179	0,9534	0,9823	-0,1318	-0,0350
150	0,0513	0,0268	0,9500	0,9735	-0,1342	-0,0524
200	0,0562	0,0358	0,9453	0,9648	-0,1393	-0,0699
250	0,0621	0,0447	0,9398	0,9562	-0,1470	-0,0874
300	0,0687	0,0537	0,9336	0,9477	-0,1567	-0,1049
350	0,0758	0,0626	0,9270	0,9393	-0,1681	-0,1224
400	0,0833	0,0716	0,9201	0,9309	-0,1806	-0,1398
450	0,0911	0,0805	0,9129	0,9226	-0,1941	-0,1573
500	0,0991	0,0895	0,9057	0,9144	-0,2082	-0,1748
550	0,1072	0,0984	0,8984	0,9063	-0,2229	-0,1923
600	0,1154	0,1074	0,8910	0,8982	-0,2380	-0,2098
650	0,1238	0,1163	0,8836	0,8902	-0,2534	-0,2272
700	0,1322	0,1253	0,8761	0,8823	-0,2691	-0,2447
750	0,1407	0,1342	0,8687	0,8744	-0,2850	-0,2622
800	0,1493	0,1432	0,8613	0,8666	-0,3011	-0,2797
850	0,1579	0,1521	0,8539	0,8589	-0,3174	-0,2971
900	0,1665	0,1611	0,8466	0,8512	-0,3338	-0,3146
950	0,1752	0,1700	0,8393	0,8437	-0,3503	-0,3321
1000	0,1839	0,1790	0,8320	0,8361	-0,3669	-0,3496
1050	0,1926	0,1879	0,8248	0,8287	-0,3835	-0,3671
1100	0,2013	0,1969	0,8176	0,8213	-0,4003	-0,3845
1150	0,2101	0,2058	0,8105	0,8140	-0,4171	-0,4020
1200	0,2189	0,2148	0,8034	0,8067	-0,4340	-0,4195