Úloha 5: Hyperjemná struktura HCN.

Termín odevzdání: 22. prosince

Úvod

Rozložení kladného náboje v jádru dusíku ^{14}N v molekule HCN není dokonale izotropní, takže atom má nenulový elektrický kvadrupólový moment. Protože má jádro navíc nenulový vnitřní moment hybnosti o velikosti $l_N = 1$, tedy $L_N^2 = \hbar^2 \cdot 1 \cdot (1+1)$, navenek se projevuje jako magnet (s magnetickým dipólem $\mu \approx 3$ Debye) působící na pohybující se elektrony v molekule (viz [1]). Díky této interakci se rotační moment hybnosti $\boldsymbol{J}$ molekuly může částečně přelévat do vnitřního momentu hybnosti $\boldsymbol{L}_N$ dusíkového jádra a naopak. Vektorový součet těchto dvou momentů hybnosti označme $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{L}_N$. Vlastní hodnoty $\hat{K}^2$ značme $\hbar^2 k(k+1)$, vlastní hodnoty $\hat{J}^2$ jako $\hbar^2 j(j+1)$, vlastní hodnoty $\hat{K}_z$ jako $\hbar m_K$ a vlastní hodnoty $\hat{J}_z$ jako $\hbar m_J$.

Astrofyzici studují spektra elektromagnetického záření vysílaného plynem ve vesmíru. Toto záření vzniká při spontánní nebo stimulované emisi z (mimo jiné) rotačně excitovaných stavů atomů a molekul, kdy počáteční excitovaný stav i přejde na koncový méně excitovaný stav f za současného vyzáření fotonu o energii $\Delta E_{i\to f} = \hbar\omega_{i\to f}$. Veličina, která popisuje intenzitu spektrální čáry odpovídající konkrétnímu samovolnému zářivému přechodu $i \to f$, se nazývá *Einsteinův A-koeficient.* V případě přechodů $j_i, k_i \to j_f, k_f$ v HCN má tento koeficient podobu (viz [2])

$$A_{i\to f} = \frac{\mu^2 \omega_{i\to f}^3}{3\pi\varepsilon_0 \hbar c^3} \frac{j_i}{2j_i + 1} \frac{g_{\mathrm{tot}}}{g_{k_i}} S_{i\to f}\,, \tag{1}$$

kde *multiplicita* g_{k_i} je počet lineárně nezávislých stavů s momentem hybnosti o velikosti k_i (tedy počet různých hodnot m_K) a $g_{\mathrm{tot}} = g_{j_i} g_{l_N}$ je celkový počet nezávislých součinových stavů s momenty hybnosti j_i a l_N. Konečně, *intenzita hyperjemného přechodu* $S_{i\to f}$ je definovaná pomocí *Wignerových 6j-symbolů* jako

$$S_{i\to f} = \frac{(2k_i+1)(2k_f+1)}{2l_N+1} \begin{Bmatrix} j_i & k_i & l_N \\ k_f & j_f & 1 \end{Bmatrix}^2 . \tag{2}$$

Relevantní 6j-symboly jsou vyčíslené v pomůcce na druhé straně. Tam najdete i úkoly.

[1] Ahrens a kol., Zeitschrift für Naturforschung A, 57(8), 2014, str. 669.

[2] Mullins a kol., Monthly Notic. of the Royal Astron. Soc., 459(3), 2016, str. 2882.

Úkoly

1. Vyjádřete multiplicity g_{k_i} a g_{tot} pomocí k_i, j_i a l_n. (1 bod)
2. Uvažujte nejprve velikost rotačního momentu hybnosti $j = 1$. Pro jaké hodnoty celkového momentu hybnosti k platí $\hat{\boldsymbol{K}} \cdot \hat{\boldsymbol{L}}_N |(j, l_N) k m_K\rangle = 0$? (2 body)
3. Jakých hodnot může nabývat velikost celkového momentu hybnosti k_i (resp. k_f) pro $j_i = 5$ (resp. $j_f = 4$)? (1 bod)
4. Uvažujme molekulu připravenou ve stavu $j_i = 5$ a s minimálním možným k_i. Jakou maximání hodnotu m_K můžeme v takovém případě naměřit? Pokud měření skutečně provedeme, jaké hodnoty m_J pak můžeme naměřit na výsledném stavu a s jakými pravděpodobnostmi? Jak se výsledek změní, pokud místo maximálního m_K budeme požadovat minimální m_K? (4 body)
5. Předpokládejte, že $\omega_{i \to j}$ nezávisí na celkovém momentu hybnosti. Rozhodněte, jestli intenzita spektrálních čár odpovídajících rotační deexcitaci z $j_i = 5$ do $j_f = 4$ je srovnatelná pro všechny možné změny celkového momentu hybnosti $k_i \to k_f$, nebo jsou některé změny Δk potlačené. (2 body)

Pomůcka – tabulka 6j-symbolů

$$\begin{Bmatrix} 5 & 4 & 1 \\ 5 & 4 & 1 \end{Bmatrix} = \frac{1}{495} \qquad \begin{Bmatrix} 5 & 4 & 1 \\ 3 & 4 & 1 \end{Bmatrix} = \frac{1}{9}$$

$$\begin{Bmatrix} 5 & 5 & 1 \\ 5 & 4 & 1 \end{Bmatrix} = -\frac{1}{55} \qquad \begin{Bmatrix} 5 & 4 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{Bmatrix} = \frac{1}{45}$$

$$\begin{Bmatrix} 5 & 6 & 1 \\ 5 & 4 & 1 \end{Bmatrix} = \frac{1}{11} \qquad \begin{Bmatrix} 5 & 5 & 1 \\ 4 & 4 & 1 \end{Bmatrix} = -\frac{2}{5}\sqrt{\frac{2}{33}}$$

Přechody s $|\Delta k| = |k_f - k_i| > 1$ jsou zakázané (a příslušné 6j symboly jsou nulové), neboť foton odnáší moment hybnosti odpovídací spinu 1, což odpovídá jedničce na posledním místě v 6j symbolu v rovnici (2).