Úloha 2: Otáčení molekuly.

Termín odevzdání: 28. března 2025

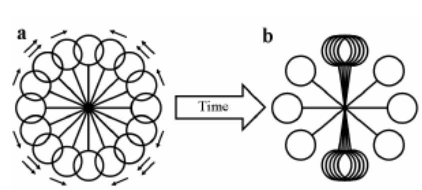
Uvažujeme malou lineární molekulu s nehybnými jádry a jediným elektronem. V souřadnicovém systému, jehož počátek je v těžišti molekuly, orientujeme osu molekuly podél souřadnicové osy z a stav elektronu v molekule budeme modelovat jednoduchým neizotropním stavem

$$|\psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(|1,0,0\rangle + |2,1,0\rangle \right) ,$$

tedy jako lineární kombinaci stavů vodíkového atomu $|n,l,m\rangle$. V následujícím budeme vyšetřovat dipólový moment elektronu vůči těžišti molekuly, $\boldsymbol{d} = e\boldsymbol{r}$.

1. Určete střední hodnotu elektronového dipólového momentu $\langle \boldsymbol{d} \rangle = \langle \psi | \boldsymbol{d} | \psi \rangle$, v uvedeném systému, kde je molekula orientovaná podél osy z. (2 body)
2. S použitím Wignerových D-matic napište, jak bude vypadat stav $|\psi(\hat{R})\rangle$ získaný otočením molekuly o Eulerovy úhly $\hat{R} \equiv (\alpha, \beta, \gamma)$ vůči těžišti. (1 bod)
3. Předchozí bod vyčíslete speciálně pro volby (a) $\alpha = \beta = 0$, $\gamma \neq 0$; (b) $\alpha = \gamma = 0$, $\beta = \pi$. Vysvětlete podobnosti a rozdíly ve srovnání s původním neotočeným stavem. (2 body)
4. Ukažte, že v „neorientovaném“ souboru molekul, kde jsou rovnoměrně zastoupené všechny možné orientace molekul, je střední naměřená hodnota $\boldsymbol{d}$, kterou lze spočítat jako $\langle\!\langle \boldsymbol{d} \rangle\!\rangle = (8\pi^2)^{-1} \int \langle \psi(\hat{R}) | \boldsymbol{d} | \psi(\hat{R}) \rangle \mathrm{d}^3\hat{R}$, nulová. (2 body)
5. Určete střední naměřenou hodnotu $\boldsymbol{d}$ v částečně orientovaném souboru molekul, kde jsou různé orientace zastoupené s vahou $\chi(\alpha, \beta, \gamma) = (4\pi^2)^{-1} \cos^2(\beta/2)$. (3 body)

Poznámka 1: Měření vlastností molekul je často obtížné kvůli tomu, že se vyskytují v náhodných orientacích. Existují ale experimentální techniky, které—například aplikací krátkého elektromagnetického pulzu—umožňují vnutit molekulárnímu shluku určité, typicky časově proměnné a periodické, rozložení orientací. (Viz obr. vpravo.)



Isr. J. Chem. 2012, 52, 414 - 437

Poznámka 2: Můžou se vám hodit vlastnosti Wignerových D-matic, Clebsch-Gordanovy koeficienty, mimo jiné $C^{1,\pm 1}_{1,\pm 1,1,0} = \pm 1/\sqrt{2}$, a vzorce

$$d^{(1)}_{0,0}(\beta) = \cos\beta \,, \qquad \langle r\hat{\boldsymbol{n}} | 1,0,0 \rangle = 2\mathrm{e}^{-r} Y_{00}(\hat{\boldsymbol{n}}) \,, \qquad Y_{0,0} = \frac{1}{\sqrt{4\pi}} \,,$$

$$d^{(1)}_{\pm 1,0}(\beta) = \mp \frac{1}{\sqrt{2}} \sin\beta \,, \qquad \langle r\hat{\boldsymbol{n}} | 2,1,0 \rangle = \frac{1}{2\sqrt{6}} r \mathrm{e}^{-r/2} Y_{10}(\hat{\boldsymbol{n}}) \,, \qquad Y_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \cos\theta \,,$$

$$d^{(1)}_{1,\pm 1}(\beta) = \frac{1}{2}(1 \pm \cos\beta) \,. \qquad Y_{1,\pm 1} = \mp \sqrt{\frac{3}{8\pi}} \mathrm{e}^{\pm \mathrm{i}\phi} \sin\theta \,.$$