Úloha 5: Hyperjemná struktura HCN - řešení

Vojtěch Votruba

6. ledna 2025

Úkol 1

Vyjdeme-li ze zadání, víme, že multiplicita g_{k_i} je počet lineárně nezávislých stavů s momentem hybnosti o velikosti k_i.

Z obecného studia momentu hybnosti v kvantové mechanice víme, že na „magnetické kvantové číslo" m je vůči „vedlejšímu kvantovému číslu" ℓ vždycky kladena podmínka $|m| < \ell$, která vyplývá například z opakovaného používání posunovacích operátorů, které pro hraniční hodnoty m vygenerují nulový vektor. Z toho okamžitě vyplývá, že

$$g_{k_i} = 2k_i + 1.$$

g_{tot} dále spočteme analogicky, protože jde o prostý součin dvou multiplicit, pro které platí stejná podmínka jako výše

$$g_{\text{tot}} = g_{j_i} g_{\ell_N} = (2j_i + 1)(2\ell_N + 1) = 3(2j_i + 1).$$

Úkol 2

V tomto úkolu hledáme přípustná k řešením rovnice

$$\boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{L}_N |(j, \ell_N) k m_K\rangle = 0.$$

Vidíme, že operátorem ve tvaru skalárního součinu na levé straně působíme na kaplovanou bázi, proto se nám bude hodit pracovat v ÚSKO, které jí odpovídá. Dál víme, že operátory $\boldsymbol{J}$ a $\boldsymbol{L}_N$ spolu komutují, protože oba působí na separovaných částech našeho Hilbertova prostoru. Upravme si tedy skalární součin takto

$$K^2 = (\boldsymbol{J} + \boldsymbol{L}_N)^2 = J^2 + L_N^2 + 2\boldsymbol{J} \cdot \boldsymbol{L}_N = J^2 - L_N^2 + 2\boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{L}_N,$$

kde jsme akorát šikovně dosadili za $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{K} - \boldsymbol{L}_N$. Z toho okamžitě dostáváme

$$\boldsymbol{K} \cdot \boldsymbol{L}_N |k m_K\rangle = \frac{1}{2}(K^2 - J^2 + L_N^2)|(j, \ell_N) k m_K\rangle = \frac{\hbar^2}{2}(k(k+1) - j(j+1) + \ell_N(\ell_N + 1))|(j, \ell_N) k m_K\rangle$$

a dosazením za $\ell_N, j = 1$ nakonec máme

$$k(k+1) = 0 \implies k = 0.$$

Úkol 3

Při skládání momentů hybnosti jsme v kvantové mechanice omezeni jistou formou trojúhelníkové nerovnosti. Pro $\boldsymbol{K} = \boldsymbol{J} + \boldsymbol{L}_N$ má konkrétně tvar

$$|j - \ell_N| \leq k \leq j + \ell_N,$$

jednoduchým dosazením $j_i = 5$, $j_f = 4$ a $\ell_N = 1$ tak zjišťujeme, že

$$4 \leq k_i \leq 6, \quad 3 \leq k_f \leq 5, \quad k \in \mathbb{N}.$$

Úkol 4

Dle výpočtu výše vidíme, že pro $j_i = 5$ je minimální možné $k_i = 4$. Z podmínky $|m_K| < k_i$ je dál maximální měřitelná hodnota také $m_K = 4$. Uvažujeme tedy připravený stav $|(j, \ell_N)km_K\rangle$ jako $|(5,1)4,4\rangle$.

Abychom odhalili, jaké hodnoty m_J s jakými pravděpodobnostmi budeme schopni v tomto stavu naměřit, musíme přejít od zadané kaplované báze do tzv. separované báze, která má tvar $|jm_J\rangle|\ell_N m_{L_N}\rangle$. Jak to provést? Odpovědí jsou příslušné Clebsch-Gordanovy koeficienty $C^{k,m_K}_{j,m_J;\ell_N,m_{L_N}}$. Připravený stav si můžeme díky nim a díky podmínkám

$$m_K = m_J + m_{L_N}, \qquad |m_{L_N}| < \ell_N$$

rozepsat do separované báze jako

$$|(5,1)4,4\rangle = C^{4,4}_{5,5;1,-1}|5,5\rangle|1,-1\rangle + C^{4,4}_{5,4;1,0}|5,4\rangle|1,0\rangle + C^{4,4}_{5,3;1,1}|5,3\rangle|1,1\rangle.$$

Tím jsme zjistili, že měřitelná m_J jsou $5, 4, 3$. Co s pravděpodobnostmi? Ty budou rovny kvadrátům daných C.-G. koeficientů, ty si pro jednoduchost necháme spočítat *Mathematicu*, čímž dostáváme

$$|(5,1)4,4\rangle = \frac{3}{\sqrt{11}}|5,5\rangle|1,-1\rangle - \frac{3}{\sqrt{55}}|5,4\rangle|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{55}}|5,3\rangle|1,1\rangle$$

a pravděpodobnosti tedy jako

$$p(m_J = 5|m_K = 4) = \frac{9}{11}, \quad p(m_J = 4|m_K = 4) = \frac{9}{55}, \quad p(m_J = 3|m_K = 4) = \frac{1}{55}.$$

Naopak minimální hodnota je $m_K = -4$, což nám dává tvar rozkladu

$$|(5,1)4,-4\rangle = C^{4,-4}_{5,-3;1,-1}|5,-3\rangle|1,-1\rangle + C^{4,-4}_{5,-4;1,0}|5,-4\rangle|1,0\rangle + C^{4,-4}_{5,-5;1,1}|5,-5\rangle|1,1\rangle.$$

Se stejnými hodnotami C.-G. koeficientů, a tak i se stejnými pravděpodobnostmi jako výše

$$|(5,1)4,-4\rangle = \frac{3}{\sqrt{11}}|5,-3\rangle|1,-1\rangle - \frac{3}{\sqrt{55}}|5,-4\rangle|1,0\rangle + \frac{1}{\sqrt{55}}|5,-5\rangle|1,1\rangle.$$

Úkol 5

Intenzitu spektrální čáry popíšeme podle zadání pomocí Einsteinova A-koeficientu $A_{i\to f}$, který spočteme jako

$$A_{i\to f} = K\frac{j_i}{2j_i+1}\frac{g_{\mathrm{tot}}}{g_{k_i}}\frac{(2k_i+1)(2k_f+1)}{2\ell_N+1}\begin{Bmatrix} j_i & k_i & \ell_N \\ k_f & j_f & 1 \end{Bmatrix}^2, \quad K = \frac{\mu^2\omega^3_{i\to f}}{3\pi\varepsilon_0\hbar c^3}$$

pro deexcitaci z $j_i = 5$ do $j_f = 4$ s $\ell_N = 1$ konkrétně

$$A_{i\to f} = K\frac{5}{\cancel{11}}\frac{\cancel{33}}{\cancel{2k_i+1}}\frac{\cancel{(2k_i+1)}(2k_f+1)}{\cancel{3}}\begin{Bmatrix} 5 & k_i & 1 \\ k_f & 4 & 1 \end{Bmatrix}^2 = 5K(2k_f+1)\begin{Bmatrix} 5 & k_i & 1 \\ k_f & 4 & 1 \end{Bmatrix}^2,$$

nyní máme rozhodnout, jak se intenzita má chovat pro různá kvantová čísla k. Z úkolu 3 víme, že $k_i \in \{4,5,6\}$ a $k_f \in \{3,4,5\}$. Dále víme ze zadání, že jsou zakázané přechody $\Delta k > 0$, jediné přípustné kombinace tedy jsou: $k_i = 4, k_f \in \{3,4,5\}$ a $k_i = 5, k_f \in \{4,5\}$ a $k_i = 6, k_f = 5$. Popořadě tak máme intenzity:

Pro $k_i = 4$, $k_f \in \{3,4,5\}$:

$$5K(7)\frac{1}{9^2} = \frac{35}{81}K, \quad 5K(9)\frac{1}{45^2} = \frac{1}{45}K, \quad 5K(11)\frac{1}{495^2} = \frac{1}{4455}K,$$

z čehož vidíme, že přechod na $k_f = 4$ má oproti $k_f = 3$ zhruba o řád menší intenzitu a $k_f = 5$ ji má dokonce o 3 řády nižší.

Pro $k_i = 5$, $k_f \in \{4, 5\}$:

$$5K(9)\frac{2^2}{5^2}\frac{2}{33} = \frac{24}{55}K, \quad 5K(11)\frac{1}{55^2} = \frac{1}{55}K,$$

podobně jako pro předchozí hodnotu počátečního momentu hybnosti, i tady je přechod odpovídající $k_f = 5$ zhruba o řád slabší než přechod odpovídající $k_f = 4$.

Pro $k_i = 6$, $k_f = 5$:

$$5K(11)\frac{1}{11^2} = \frac{5}{11}K.$$

Zde pozorujeme pouze jeden deexcitační přechod s intenzitou srovnatelnou s nejsilnějšími přechody pro předchozí k_i.