

А. М. ПРОХОРОВ и Н. Г. БАСОВ

ОБ ОПРЕДЕЛЕНИИ 0- И $\hbar/2$ -СПИНОВ ЯДЕР ИЗ МИКРОВОЛНОВЫХ СПЕКТРОВ МОЛЕКУЛ

(Представлено академиком М. А. Леонтовичем 16 VI 1952)

Изучение микроволновых спектров позволяет определять значение спинов ядер, входящих в состав молекулы. Эти данные вполне надежны, благодаря высокой разрешающей силе радиоспектроскопов и большой точности измерения частот в радиоспектроскопии. Для определения спинов используется тот факт, что если одно или несколько ядер, входящих в состав молекулы, обладают квадрупольным моментом, то вращательные термы молекулы расщепляются, образуя сверхтонкую структуру, происходящую вследствие взаимодействия квадрупольного момента ядра с электрическим полем молекулы. Количество линий, их относительное расположение и интенсивность определяются величиной спина взаимодействующего ядра.

Обычно спин определяется по относительному расположению линий сверхтонкой структуры данного вращательного перехода, но его можно также определить по относительной интенсивности линий сверхтонкой структуры. Описанный выше метод позволил определить спины многих ядер.

Ядра, имеющие спины, равные 0 или $\hbar/2$, не имеют квадрупольного момента, а следовательно, не дают сверхтонкой структуры. Казалось бы, что отсутствие сверхтонкой структуры дает право приписать ядру спин 0 или $\hbar/2$. Однако это не совсем верно. Дело в том, что ядра могут обладать спином, отличным от 0 или $\hbar/2$, но очень малой энергией квадрупольной связи, вследствие чего линии сверхтонкой структуры не разрешаются. Поэтому метод, основанный на наблюдении квадрупольного расщепления вращательных термов, не дает однозначного ответа о спине ядер в случае отсутствия сверхтонкой структуры при наблюдении спектров.

Предлагаемый ниже способ дает возможность однозначно определять спины, равные 0 или $\hbar/2$. Этот метод аналогичен методу определения спина по чередованию интенсивностей полосатых спектров двухатомных молекул, состоящих из одинаковых ядер. Это связано с тем, что если молекула обладает несколькими одинаковыми ядрами, то статистические веса различных термов, вследствие обменного вырождения, зависят от величин спинов этих одинаковых ядер.

Так например, для молекул типа XYZ_3 , обладающих точечной группой симметрии C_{3v} , отношение статистических весов различных вращательных состояний зависит от квантового числа k , характеризующего проекцию вращательного момента количества движения молекулы на ось симметрии молекулы. Статистический вес уровней,

зависящий от спинов I трех одинаковых ядер с k , кратными 3 (включая нуль), равен $(1) \frac{1}{3} (2I + 1) (4I^2 + 4I + 3)$, а для k , не кратных 3, равен $\frac{1}{3} (2I + 1) (4I^2 + 4I)$.

Поэтому при спине, равном нулю, уровни с k , не кратным 3, полностью выпадают, а для спина $\hbar/2$ отношение статистических весов уровней с k , кратным 3, к статистическим весам уровней с k , не кратным 3, равно 2:1.

Если же спины трех одинаковых ядер равны \hbar и $3/2 \hbar$, то отношение статистических весов получается равным 11:8 и 6:5. При $I \rightarrow \infty$ это отношение стремится к единице.

Возможны две различные методики измерения, основанные на зависимости статистических весов уровней от величины спина 3 одинаковых ядер.

1. Если одно из ядер X или Y (или оба) обладают квадрупольным моментом, то различным k соответствуют различные линии сверхтонкой структуры. Это легко позволяет определить спины по относительной интенсивности линий с различными k данного вращательного перехода.

2. Если ни одно из ядер X или Y не обладает квадрупольными моментами, то частоты линий, соответствующих различным значениям k , обычно совпадают. Измерение спина можно провести измерением относительных интенсивностей вращательных линий, соответствующих различным вращательным переходам.

Аналогичная зависимость интенсивности линий от спинов для молекул, состоящих из нескольких одинаковых атомов, будет иметь место и в других молекулах.

Указанные методы пригодны также для измерения спинов больше $\hbar/2$, однако в этом случае сильно возрастают требования к точности измерения относительных интенсивностей.

Физический институт им. П. Н. Лебедева
Академии наук СССР

Поступило
5 XII 1952

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ Г. Герцберг, Колебательные и вращательные спектры многоатомных молекул, М., 1949.