

Integrale di tre armoniche sferiche

Timoniere

July 28, 2008

Operatore di Rotazione La matrice di una rotazione di $\delta\alpha z$, cioè una rotazione di un angolo $\delta\alpha$ piccolo intorno all'asse z , fissata la classica terna destrorsa ortonormale $B = \{|i\rangle, |j\rangle, |k\rangle\}$, è

$$A = M_B(R) = \begin{pmatrix} \cos\delta\alpha & -\sin\delta\alpha & 0 \\ \sin\delta\alpha & \cos\delta\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \approx \begin{pmatrix} 1 & -\delta\alpha & 0 \\ \delta\alpha & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 0 & \delta\alpha & 0 \\ -\delta\alpha & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \equiv 1 - \frac{i\delta\alpha}{\hbar} G \quad (1)$$

$$G = \hbar \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \quad (2)$$

Vogliamo dimostrare che $G = M_B(L_z)$, con L_z operatore di momento angolare lungo l'asse z . Da questa identificazione, visto che rotazioni di angoli finiti sono ottenibili mediante il limite di infinite rotazioni di angoli infinitesimi, segue che l'operatore di rotazione intorno all'asse z di un angolo α , si può definire come $R = e^{-\frac{iL_z\alpha}{\hbar}}$.

In meccanica classica, la funzione generatrice della rotazione di un angolo infinitesimo nelle coordinate è proprio il momento angolare. Data la definizione di R in funzione del momento angolare L_z , per analogia, si definisce L_z come operatore che genera la rotazione di αz .

Per dimostrare che $G = M_B(L_z)$, bisogna solo prendere un po' di familiarità con G . Per prima cosa, notiamo che è una matrice hermitiana. Poichè rappresenta un operatore nella base ortonormale B , questo operatore deve essere hermitiano.

Definiamo poi $l_z = G/\hbar$ e calcoliamo gli autovalori di l_z .

$$\det \begin{pmatrix} -\lambda & -i & 0 \\ i & -\lambda & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda \end{pmatrix} = 0$$

da cui si trova $\lambda_1 = 1$, $\lambda_0 = 0$, $\lambda_{-1} = -1$. Se dunque nella base B , la matrice (2) rappresenta L_z , nella base dei suoi autovettori normalizzati $B' = \{|11\rangle$

, $|10\rangle, |1-1\rangle$, la forma assunta dalla matrice associata è

$$G' = \hbar \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Possiamo confrontare la scrittura di sopra con la più familiare $\langle 1m'|L_z|1m\rangle = m\hbar\delta_{m,m'}$. Quest'ultima è la rappresentazione di L_z con $l = 1$, nella base dei suoi autovettori normalizzati. Si vede che le due matrici coincidono.

Calcoliamo infine i tre autovettori normalizzati indipendenti; essi sono

$$|11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ i \\ 0 \end{pmatrix} \quad |10\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix} \quad |1-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ -i \\ 0 \end{pmatrix}$$

Ci si può chiedere quale sia l'ampiezza di probabilità che uno stato $|lm\rangle$ rappresentato da l ed m , si trovi in una particolare direzione dello spazio. Definendo il versore

$$|r\rangle = \begin{pmatrix} \sin\theta\cos\varphi \\ \sin\theta\sin\varphi \\ \cos\theta \end{pmatrix}$$

si può calcolare questa ampiezza come $\langle r|lm\rangle$, dopo aver definito l'operatore hermitiano \hat{N} i cui autovalori θ e φ identificano la direzione di uno stato. \hat{N} è un parente stretto dell'operatore posizione \vec{r} , solo che è un po' meno preciso visto che non ci dà informazioni su quanto lontano sia lo stato dall'origine del riferimento.

Allora si ha che

$$\langle r|11\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta e^{i\varphi} \quad \langle r|10\rangle = \cos\theta \quad \langle r|1-1\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta e^{-i\varphi}$$

A parte coefficienti di normalizzazione, scelti in modo tale che la probabilità di trovare lo stato in una qualsiasi direzione sia 1, è allora possibile l'identificazione $\langle r|11\rangle = Y_{11}(\theta, \varphi)$, $\langle r|10\rangle = Y_{10}(\theta, \varphi)$ e $\langle r|1-1\rangle = Y_{1-1}(\theta, \varphi)$ e questo dovrebbe bastare per l'identificazione di G come matrice di L_z in B , e quindi per convincersi che $R = e^{-\frac{iL_z\alpha}{\hbar}}$.

Detto questo, si può definire l'elemento di matrice dell'operatore di rotazione nella rappresentazione di L_z

$$D_{m'm}^l(R) = \langle lm|e^{-\frac{iL_z\alpha}{\hbar}}|lm'\rangle \quad (3)$$

Visto che $[L^2, L_z] = 0$, si ha che $e^{-\frac{iL_z\alpha}{\hbar}}|lm'\rangle$ è ancora un autostato di L^2 con autovalore $\hbar^2 l(l+1)$ e quindi l'elemento di matrice di R tra stati con diverso l è nullo. Si quindi che la matrice dell'operatore R nella base degli autovettori di L_z è diagonale a blocchi e quindi si può scrivere che

$$\langle l, m|e^{-\frac{iL_z\alpha}{\hbar}}|l', m'\rangle = \sum_{l,\oplus} D_{m'm}^l(R) \equiv D_{m'm}^0 \oplus D_{mm'}^1 \oplus D_{mm'}^2 \oplus \dots$$

dove ovviamente $-l < m < l$ e con un abuso di notazione si è indicato con $D_{m'm}^l$ la matrice i cui elementi sono $D_{m'm}^l$.

Serie di Clebsch-Gordan Questa parte è una sintesi di quanto spiegato sul libro di Sakurai nella sezione “Teoria del Momento Angolare”.

Immaginiamo di avere due particelle. Tutto quanto si è detto a proposito dello stato di una particella vale per entrambe. Valutiamo l'elemento

$$\begin{aligned} D_{m_1 m'_1}^{l_1}(R) D_{m_2 m'_2}^{l_2}(R) &= \langle l_1 m_1 | R | l_1 m'_1 \rangle \langle l_2, m_2 | R | l_2, m'_2 \rangle = \\ &= (\langle l_1 m_1 | \otimes \langle l_2 m_2 |) R (| l_1 m'_1 \rangle \otimes | l_2, m'_2 \rangle) \end{aligned} \quad (4)$$

dove $R = R_1 \otimes R_2$, e nell'ultimo passaggio si è usata la definizione di prodotto tensoriale tra operatori. R_1 è l'operatore che ruota il vettore posizione della particella 1. Analogamente R_2 ruota la posizione della particella 2.

Facendo uso dei coefficienti di Clebsch-Gordan e riprendendo la (4), si può scrivere

$$\begin{aligned} D_{m_1 m'_1}^{l_1}(R) D_{m_2 m'_2}^{l_2}(R) &= \sum_l \sum_m \sum_{l'} \sum_{m'} (\langle l_1 m_1 | \otimes \langle l_2 m_2 |) | l m \rangle \\ &\quad \langle l m | R | l' m' \rangle \langle l' m' | (| l_1 m'_1 \rangle \otimes | l_2, m'_2 \rangle) \end{aligned} \quad (5)$$

ma visto che $\langle l m | R | l' m' \rangle = \delta_{ll'} D_{mm'}^l(R)$, allora si può scrivere che

$$\begin{aligned} D_{m_1 m'_1}^{l_1}(R) D_{m_2 m'_2}^{l_2}(R) &= \sum_l \sum_m \sum_{m'} (\langle l_1 m_1 | \otimes \langle l_2 m_2 |) | l m \rangle D_{mm'}^l(R) \\ &\quad \langle l m' | (| l_1 m'_1 \rangle \otimes | l_2, m'_2 \rangle) \end{aligned} \quad (6)$$

Ora si ricava un'identità che varrà usata tra breve nella (6) ed è fondamentale per ricavare l'integrale che vogliamo valutare. Sia $|n\rangle$ un generico autovettore normalizzato di \hat{N} e sia $|z\rangle$ l'autovettore della direzione positiva della direzione dell'asse z .

Allora scriviamo $|n\rangle = R|z\rangle$ dove $R = e^{-i\vec{l}\cdot\hat{t}\beta}$ perchè non basta applicare una rotazione intorno all'asse z per mandare $|z\rangle$ in un generico $|n\rangle$. Prima, si consideravano rotazioni intorno all'asse z e quindi si aveva $\vec{L}\cdot\hat{t} = L_z$ perchè \hat{t} , l'asse rispetto a cui è operata la rotazione, coincideva con $|k\rangle$. Usando $I = \sum_{l'} \sum_m |l'm\rangle \langle l'm|$ nella precedente scrittura si ha

$$\langle l m' | n \rangle = \sum_m D_{m'm}^l \langle l m | z \rangle \quad (7)$$

dove si è di nuovo usato che $\delta_{ll'} D_{mm'}^l = \langle l m' | R | l' m \rangle$. Ora osserviamo che $\langle l m | z \rangle = Y_{lm}^*(\theta = 0, \varphi)$ e questa funzione è nulla per qualsiasi $m \neq 0$ come si può dedurre dal fatto che $|z\rangle$, essendo autovettore di $e^{il_z\varphi}$ con autovalore 1, deve essere autovettore di L_z con autovalore 0, vista la dipendenza dell'operatore di rotazione intorno a z da L_z ed il fatto che se $|\eta\rangle$ è un autovettore di $A = f(B)$ con autovalore $\eta = f(q)$, allora $B|\eta\rangle = q|\eta\rangle$. Quindi si ha:

$$L_z |z\rangle = 0 \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} \langle l m | z \rangle = 0 \Rightarrow -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi} Y_{lm}^*(\theta = 0, \varphi) = 0$$

e quindi $mY_{lm}^*(\theta = 0, \varphi) = 0$ da cui si vede che per $m \neq 0$, $Y_{lm}(\theta = 0, \varphi) = 0$.

Usando che l'espressione esplicita delle armoniche sferiche $Y_{lm}(\theta, \varphi)$, ponendo $m = 0$, si ha $Y_{l0}(\hat{n}) = (\frac{2l+1}{4\pi})^{1/2} P_l(\cos\theta)$ (eq. 3.6.40 Sakurai) con P_l polinomio di Legendre di grado l . Poichè $P_l(1) = 1$, si ha

$$\langle lm|z \rangle = Y_{lm}^*(\theta = 0, \varphi) = (\frac{2l+1}{4\pi})^{1/2} \delta_{m0}$$

e quindi

$$\langle lm'|n \rangle = Y_{lm'}^*(\theta, \varphi) = D_{m'0}^l (\frac{2l+1}{4\pi})^{1/2} \quad (8)$$

Ora possiamo riprendere la (6) e scrivere

$$\begin{aligned} D_{m_1 0}^{l_1} D_{m_2 0}^{l_2} &= (\frac{4\pi}{2l_1+1})^{1/2} (\frac{4\pi}{2l_2+1})^{1/2} Y_{l_1 m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}^*(\theta, \varphi) = \\ &= \sum_l \sum_m (\langle l_1 m_1 | \otimes \langle l_2 m_2 |) |lm \rangle D_{m0}^l(R) \langle l0 | (|l_1 0 \rangle \otimes |l_2 0 \rangle) \end{aligned}$$

dove si è posto $m' = 0$ perchè $m' = m'_1 + m'_2$. Dunque,

$$\begin{aligned} Y_{l_1 m_1}^*(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}^*(\theta, \varphi) &= (\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)})^{1/2} \sum_l \sum_m (\langle l_1 m_1 | \otimes \langle l_2 m_2 |) \\ &|lm \rangle \langle l0 | (|l_1 0 \rangle \otimes |l_2 0 \rangle) Y_{lm}^*(\theta, \varphi) \end{aligned}$$

Usando l'ortonormalità delle armoniche sferiche si può finalmente scrivere che

$$\begin{aligned} \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l_1 m_1}(\theta, \varphi) Y_{l_2 m_2}(\theta, \varphi) &= (\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)})^{1/2} \sum_{l'} \sum_{m'} (\langle l_1 m_1 | \\ &\otimes \langle l_2 m_2 |) |l' m' \rangle \langle l' 0 | (|l_1 0 \rangle \otimes |l_2 0 \rangle) \int d\Omega Y_{lm}^*(\theta, \varphi) Y_{l' m'}(\theta, \varphi) = \\ &= (\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l+1)})^{1/2} (\langle l_1 m_1 | \otimes \langle l_2 m_2 |) |lm \rangle \langle l0 | (|l_1 0 \rangle \otimes |l_2 0 \rangle) \quad (9) \end{aligned}$$

Regole di Selezione Nell'espressione del tasso di transizione da uno stato $|a \rangle$ ad uno stato $|b \rangle$, per opera dell'interazione del campo elettromagnetico con il sistema, calcolato in approssimazione di dipolo tramite la teoria delle perturbazioni dipendenti dal tempo, si ha un coefficiente che moltiplica $M_{ab} = \hat{\varepsilon} \cdot \langle a | \vec{r} | b \rangle$, con $\hat{\varepsilon}$ versore di polarizzazione della luce incidente.

Nel caso in cui $|a \rangle$ e $|b \rangle$ rappresentino degli stati atomici, M_{ab} può essere riscritto come

$$M_{ab} = \int dr r^3 R_{n_a l_a}(r) R_{n_b l_b}(r) \int d\Omega Y_{l_a m_a}^*(\hat{r}) \hat{\varepsilon} \cdot \hat{r} Y_{l_b m_b}(\hat{r})$$

L'integrale angolare è diverso da 0 solo per $l_a - l_b = 2p + 1$ con p numero intero. Questa proprietà deriva subito da $Y_{lm}(-\hat{r}) = (-1)^l Y_{lm}(r)$: con il cambio di variabile $\hat{r} \mapsto -\hat{r}$ si l'integrale radiale acquista un fattore $(-1)^{l_a+l_b+1}$ quando ovviamente il risultato dell'integrale non può cambiare a causa di un cambio di variabile. Dunque $l_a + l_b + 1$ deve essere un numero pari, da cui segue la proprietà di sopra.

Inoltre,

$$\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r} = \hat{\varepsilon}_x \sin\theta \cos\varphi + \hat{\varepsilon}_y \sin\theta \sin\varphi + \hat{\varepsilon}_z \cos\theta$$

ed usando l'espressione delle armoniche sferiche di $l = 1$, si può scrivere che

$$\hat{\varepsilon} \cdot \hat{r} = \hat{\varepsilon}_1 Y_{11}(\hat{r}) + \hat{\varepsilon}_0 Y_{10}(\hat{r}) + \hat{\varepsilon}_{-1} Y_{1-1}(\hat{r})$$

dove $\hat{\varepsilon}_1$, $\hat{\varepsilon}_0$ e $\hat{\varepsilon}_{-1}$ sono opportune combinazioni lineari di $\hat{\varepsilon}_x$, $\hat{\varepsilon}_y$ e $\hat{\varepsilon}_z$.

Si vede che l'integrale angolare di sopra è una somma di tre integrali, con diversi coefficienti, di tre armoniche sferiche l'uno. Usiamo la formula (9) per valutare ad esempio il primo di questi tre integrali.

Questo è

$$\int d\Omega Y_{l_a m_a}^*(\hat{r}) Y_{11}(\hat{r}) Y_{l_b m_b}(\hat{r}) = C(\langle 11 | \otimes \langle l_b m_b |) | l_a m_a \rangle$$

dove C è un fattore di poco interesse per valutare solo i casi in cui quest'integrale è diverso da zero. Il coefficiente di Clebsh-Gordan invece è nullo a meno che non sia $m_a = 1 + m_b$ e $|1 - l_b| < l_a < 1 + l_b$.

Avendo nuovamente a che fare con coefficienti di Clebsh-Gordan, dobbiamo sempre immaginare di interessarci a due particelle e di giocare con gli stati accessibili a questo sistema in due basi diverse: quella degli autostati simultanei di L_1, L_2, L_{1z} ed L_{2z} e quella degli autostati simultanei di L^2, L_z, L_1 ed L_2 .

Per provare la prima affermazione si nota che

$$[L_z - L_{1z} - L_{2z}] | l_a m_a \rangle = 0$$

per la definizione di $L_z = L_{1z} + L_{2z}$ e dunque si ha che

$$\langle 11 | \otimes \langle l_b m_b | [L_z - L_{1z} - L_{2z}] | l_a m_a \rangle = (m_a - 1 - m_b)$$

$$\langle 11 | \otimes \langle l_b m_b | | l_a m_a \rangle = 0$$

La seconda invece discende dalla ragionevole aspettativa che un cambio di base non cambi il numero di stati accessibili al sistema di due particelle.

Nella prima base, dato che $-l_{1(2)} < m_{1(2)} < l_{1(2)}$, si hanno $(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)$ stati accessibili al sistema fatto da due particelle di momento angolare $\hbar^2 l_1(l_1 + 1)$ ed $\hbar^2 l_2(l_2 + 1)$, dove $l_1 = 1$ ed $l_2 = l_b$. Dunque si hanno $3(2l_b + 1)$ stati accessibili.

Nella seconda, invece, se $|1 - l_b| < l_a < 1 + l_b$ se ne hanno

$$\sum_{l_a=l_b-1}^{l_b+1} (2l_a + 1) = 3 \frac{\{2(l_b - 1) + 1 + 2(l_b + 1) + 1\}}{2} = 3(2l_b + 1)$$

Quindi, avendo dimostrato le due affermazioni di sopra, si trova che affinché il coefficiente di Clebsh-Gordan sia diverso da 0, $m_a - m_b = 1$ ed $l_b = l_a - 1; l_a; l_a + 1$. Ma l_a ed l_b devono differire di un numero dispari, quindi non possono essere uguali. Segue che $\Delta l = 1$.

Se $\hat{\varepsilon} = \varepsilon_1$, la luce è polarizzata in modo circolare left. Dei tre integrali sopravvive solo quello che abbiamo calcolato e le transizioni accessibili sono tra stati i cui numeri quantici soddisfano le relazioni appena ricavate. In modo analogo si ricavano le regole di selezione per luce incidente polarizzata linearmente ed in modo circolare right.