

Regole di selezione

Pierfrancesco Urbani

28 aprile 2008

In questo breve scritto verranno esaminate le regole di selezione in approssimazione di dipolo nel caso in cui si stanno considerando autostati dell'hamiltoniana relativistica, espressi cioè nella base degli autostati del momento angolare totale definito come somma del momento angolare orbitale e dello spin dell'elettrone. Ci si propone quindi di valutare l'elemento di matrice:

$$\hat{\epsilon} \cdot \langle l_a, \frac{1}{2}; j_a, m_a | \hat{r} | l_b, \frac{1}{2}, j_b, m_b \rangle$$

dove, con ovvie notazioni, si è indicato con j il momento angolare totale. Esiste, nel caso dello spin 1/2 una espressione semplice per la trasformazione dalla base del momento angolare totale alla rappresentazione nella base del momento angolare orbitale e di spin (per i dettagli si può vedere il Sakurai a pagina 211, formula 3.7.64):

$$\begin{aligned} |j_a, m_a \rangle = |l_a \pm \frac{1}{2}, m_a \rangle = & \pm \left(\frac{l_a \pm m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1} \right)^{\frac{1}{2}} |l_a, m_a - \frac{1}{2} \rangle \otimes | \uparrow \rangle + \\ & + \left(\frac{l_a \mp m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1} \right)^{\frac{1}{2}} |l_a, m_a + \frac{1}{2} \rangle \otimes | \downarrow \rangle \end{aligned}$$

e per j_b si ha analogamente:

$$\begin{aligned} |j_b, m_b \rangle = |l_b \pm \frac{1}{2}, m_b \rangle = & \pm \left(\frac{l_b \pm m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1} \right)^{\frac{1}{2}} |l_b, m_b - \frac{1}{2} \rangle \otimes | \uparrow \rangle + \\ & + \left(\frac{l_b \mp m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1} \right)^{\frac{1}{2}} |l_b, m_b + \frac{1}{2} \rangle \otimes | \downarrow \rangle \end{aligned}$$

Si presentano quindi quattro casi:

$$\hat{\epsilon} \cdot \langle l_a - \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle$$

$$\hat{\epsilon} \cdot \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle$$

$$\hat{\epsilon} \cdot \langle l_a - \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b + \frac{1}{2}, m_b \rangle$$

$$\hat{\varepsilon} \cdot \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b + \frac{1}{2}, m_b \rangle$$

Dei quattro casi, in realtà se ne devono analizzare solo due vista la simmetria tra il primo e l'ultimo e tra i due centrali. Inizio dal primo caso.

$$\begin{aligned} & \hat{\varepsilon} \cdot \langle l_a - \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle = \\ & \hat{\varepsilon} \cdot [- (\frac{l_a - m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1})^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a - \frac{1}{2} | \otimes \langle \uparrow | + (\frac{l_a + m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1})^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a + \frac{1}{2} | \otimes \langle \downarrow |] \hat{r} \cdot \\ & \cdot [- (\frac{l_b - m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1})^{\frac{1}{2}} | l_b, m_b - \frac{1}{2} \rangle \otimes | \uparrow \rangle + (\frac{l_b + m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1})^{\frac{1}{2}} | l_b, m_b + \frac{1}{2} \rangle \otimes | \downarrow \rangle] \end{aligned}$$

L'operatore \hat{r} in realtà deve essere scritto come $\hat{r} \otimes I_s$ dove I_s è l'operatore identità nello spazio di Hilbert che descrive lo spin. Tale scrittura non solo è più corretta ma dice che l'operatore \hat{r} lascia invariato il Ket di spin. Si ha quindi:

$$\begin{aligned} & \hat{\varepsilon} \cdot \langle l_a - \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle = \\ & \hat{\varepsilon} \cdot [(\frac{l_a - m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1})^{\frac{1}{2}} (\frac{l_b - m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1})^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a - \frac{1}{2} | \hat{r} | l_b, m_b - \frac{1}{2} \rangle + \\ & + (\frac{l_a + m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1})^{\frac{1}{2}} (\frac{l_b + m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1})^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a + \frac{1}{2} | \hat{r} | l_b, m_b + \frac{1}{2} \rangle] \end{aligned}$$

Le regole di selezione viste per il solo momento angolare orbitale impongono che i due elementi di matrice appena scritti sono diversi da zero solo se si ha $l_a - l_b = \pm 1$ da cui, visto che $j_a = l_a - \frac{1}{2}$ e $j_b = l_b - \frac{1}{2}$, si ha che $j_a - j_b = \pm 1$. Analizzo adesso il secondo caso che risulta leggermente più complicato. Procedo come nel primo caso:

$$\begin{aligned} & \hat{\varepsilon} \cdot \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle = \\ & \hat{\varepsilon} \cdot [(\frac{l_a + m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1})^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a - \frac{1}{2} | \otimes \langle \uparrow | + (\frac{l_a - m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1})^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a + \frac{1}{2} | \otimes \langle \downarrow |] \hat{r} \cdot \\ & \cdot [- (\frac{l_b - m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1})^{\frac{1}{2}} | l_b, m_b - \frac{1}{2} \rangle \otimes | \uparrow \rangle + (\frac{l_b + m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1})^{\frac{1}{2}} | l_b, m_b + \frac{1}{2} \rangle \otimes | \downarrow \rangle] \end{aligned}$$

Ripetendo il discorso fatto in precedenza per la parte di spin si ricava che:

$$\begin{aligned} & \hat{\varepsilon} \cdot \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle = \\ & = \varepsilon \cdot [- (\frac{l_a + m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1})^{\frac{1}{2}} (\frac{l_b - m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1})^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a - \frac{1}{2} | \hat{r} | l_b, m_b - \frac{1}{2} \rangle + \end{aligned}$$

$$+\left(\frac{l_a - m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{l_b + m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a + \frac{1}{2} | \hat{r} | l_b, m_b + \frac{1}{2} \rangle]$$

Se ripetessi lo stesso argomento svolto in precedenza sulle regole di selezione per il momento angolare orbitale otterrei per il momento angolare totale le regole di selezione date da $j_a - j_b = 0, 2$. Mi ripropongo ora di dimostrare che se $j_a - j_b = 2$ allora:

$$\hat{\epsilon} \cdot \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | \hat{r} | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle = 0$$

che equivale a dire che in approssimazione di dipolo la differenza tra i due momenti angolari totali non può superare 1. Inoltre dimostrerò tale affermazione solo nel caso in cui l'onda elettromagnetica incidente sia polarizzata circolarmente destra. Gli altri casi possono essere verificati allo stesso modo imponendo le adeguate regole di selezione per la proiezione del momento angolare orbitale sull'asse z per gli altri tipi di polarizzazione. In realtà si può bypassare il problema perchè semplicemente i tre stati di polarizzazione sono esattamente equivalenti. Ad ogni modo, analizziamo il caso di polarizzazione circolare destra. L'unico fattore che sopravvive nel prodotto scalare è:

$$c\varepsilon_1^* \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | r_1 | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle$$

dove c è un coefficiente appropriato e $r_1 = \frac{1}{r}(x + iy)$. Tale elemento di matrice può essere riscritto nel seguente modo:

$$\begin{aligned} & c\varepsilon_1^* \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | r_1 | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle = \\ & = \varepsilon_1^* \left[-\left(\frac{l_a + m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{l_b - m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a - \frac{1}{2} | r_1 | l_b, m_b - \frac{1}{2} \rangle + \right. \\ & \quad \left. + \left(\frac{l_a - m_a + \frac{1}{2}}{2l_a + 1}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{l_b + m_b + \frac{1}{2}}{2l_b + 1}\right)^{\frac{1}{2}} \langle l_a, m_a + \frac{1}{2} | r_1 | l_b, m_b + \frac{1}{2} \rangle \right] = \\ & = C' \left[-(l_a + m_a + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}}(l_b - m_b + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} \int_0^{4\pi} d\Omega Y_{l_a, m_a - \frac{1}{2}}^* Y_{1,1} Y_{l_b, m_b - \frac{1}{2}} + \right. \\ & \quad \left. + (l_a - m_a + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}}(l_b + m_b + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} \int_0^{4\pi} d\Omega Y_{l_a, m_a + \frac{1}{2}}^* Y_{1,1} Y_{l_b, m_b + \frac{1}{2}} \right] \end{aligned}$$

dove C' è una nuova costante opportuna. Adesso bisogna sfruttare la formula che dà l'integrale di tre armoniche sferiche. La dimostrazione per tale formula può trovarsi sul Sakurai a pagina 213. In alternativa si può usare il teorema di Wigner-Eckart. Tale formula è:

$$\begin{aligned} & \int_0^{4\pi} d\Omega Y_{l,m}^* Y_{l_1, m_1} Y_{l_2, m_2} = \\ & = \left[\frac{(2l_1 + 1)(2l_2 + 1)}{4\pi(2l + 1)} \right]^{\frac{1}{2}} \langle l_1, l_2; 0, 0 | l_1, l_2; l, 0 \rangle \langle l_1, l_2; m_1, m_2 | l_1, l_2; l, m \rangle \end{aligned}$$

Inoltre si ricorda a questo punto che gli elementi di matrice sopra scritti impongono delle regole di selezione sulla proiezione del momento angolare orbitale sull'asse z . In particolare per l'operatore r_1 si ha che l'elemento di matrice è non nullo se $\Delta m = 1$ che nel nostro caso corrisponde a imporre che $m_a = m_b + 1$. Applicando la formula per l'integrale delle tre armoniche sferiche agli elementi di matrice scritti sopra si ottiene che:

$$c\varepsilon_1^* \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | r_1 | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle =$$

$$K [-(l_a + m_a + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} (l_b - m_b + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} \langle 1, l_b; 1, m_b - \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a - \frac{1}{2} \rangle +$$

$$+(l_a - m_a + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} (l_b + m_b + \frac{1}{2})^{\frac{1}{2}} \langle 1, l_b; 1, m_b + \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a + \frac{1}{2} \rangle]$$

dove anche questa volta K è una costante opportuna che racchiude vari fattori non necessari ai fini della dimostrazione. A questo punto occorre mostrare che il contenuto delle parentesi quadre è nullo. Per fare ciò sfruttando le relazioni di ricorrenza per i coefficienti di Clebsch-Gordan la cui dimostrazione può essere trovata sul Sakurai a pagina 207 (formula 3.7.49). La relazione di ricorrenza che verrà usata nel seguito è la seguente:

$$[(j \mp m)(j \pm m + 1)]^{\frac{1}{2}} \langle j_1 j_2; m_1 m_2 | j_1 j_2; j, m \pm 1 \rangle =$$

$$= [(j_1 \mp m_1 + 1)(j_1 \pm m_1)]^{\frac{1}{2}} \langle j_1 j_2; m_1 \mp 1, m_2 | j_1 j_2; j, m \rangle$$

$$[(j_2 \mp m_2 + 1)(j_2 \pm m_2)]^{\frac{1}{2}} \langle j_1 j_2; m_1, m_2 \mp 1 | j_1 j_2; j, m \rangle$$

Se applico la formula relativa al segno inferiore e pongo $m = m_a + \frac{1}{2}$, $j_1 = 1$, $j_2 = l_b$, $m_1 = 1, m_2 = m_b - \frac{1}{2}$, $j = m_a$, ottengo la seguente relazione:

$$[(l_a + m_a + \frac{1}{2})(l_a - m_a + \frac{1}{2})]^{\frac{1}{2}} \langle 1, l_b; 1, m_b - \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a - \frac{1}{2} \rangle =$$

$$= [(l_b + m_b + \frac{1}{2})(l_b - m_b + \frac{1}{2})]^{\frac{1}{2}} \langle 1, l_b; 1, m_b + \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a + \frac{1}{2} \rangle$$

da cui si ricava che:

$$\langle 1, l_b; 1, m_b + \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a + \frac{1}{2} \rangle =$$

$$[\frac{(l_a + m_a + \frac{1}{2})(l_a - m_a + \frac{1}{2})}{(l_b + m_b + \frac{1}{2})(l_b - m_b + \frac{1}{2})}]^{\frac{1}{2}} \langle 1, l_b; 1, m_b - \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a - \frac{1}{2} \rangle$$

Da questa formula ottengo che:

$$c\varepsilon_1^* \langle l_a + \frac{1}{2}, m_a | r_1 | l_b - \frac{1}{2}, m_b \rangle =$$

$$= \langle 1, l_b; 1, m_b - \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a - \frac{1}{2} \rangle \{ (l_a - m_a + \frac{1}{2}) [\frac{l_a + m_a + \frac{1}{2}}{l_b - m_b + \frac{1}{2}}]^{\frac{1}{2}} -$$

$$-[(l_a + m_a + \frac{1}{2})(l_b - m_b + \frac{1}{2})]^{\frac{1}{2}}\}$$

A questo punto occorre andare a riprendere le regole di selezione. In precedenza avevamo detto che sapevamo che tutta questa somma sarebbe stata zero se non fosse stato che $m_a = m_b + 1$. Inoltre l'obiettivo del calcolo era di verificare che la regola di selezione per cui $l_a = l_b + 1$ portava ad un elemento di matrice nullo. Pongo quindi $m_a = m_b + 1$ e $l_a = l_b + 1$. La formula precedente diventa:

$$\begin{aligned} c\varepsilon_1^* < l_a + \frac{1}{2}, m_a | r_1 | l_b - \frac{1}{2}, m_b > = \\ < 1, l_b; 1, m_b - \frac{1}{2} | 1, l_b; l_a, m_a - \frac{1}{2} > \{ (l_b - m_b + \frac{1}{2}) [\frac{l_b + m_b + \frac{3}{2}}{l_b - m_b + \frac{1}{2}}]^{\frac{1}{2}} - \\ - [(l_b + m_b + \frac{3}{2})(l_b - m_b + \frac{1}{2})]^{\frac{1}{2}} \} = 0 \end{aligned}$$

Da cui si vede quindi che gli elementi di matrice per cui $\Delta j = 2$ sono nulli. La dimostrazione può essere ripetuta analogamente in tutti gli altri casi e in tutte le altre polarizzazioni.