Física Teórica II

Guía 7: Impulso angular

Nicolás Mirkin

08 de junio de 2021

Problema XIX

El tensor cuadrupolar eléctrico de una partícula de carga q se define como: $\mathrm{Q}_{ij} = q\left(3r_i r_j - \delta_{ij} r^2\right)$

Suponiendo que se conoce el valor de expectación de Q_{zz} en el autoestado de momento angular |α,j,m=j>: $\mathrm{Q} \equiv \langle \alpha, j, j\,|Q_{zz}|\,\alpha, j, j\rangle = q\left\langle \alpha, j, j\,\middle|\left(3z^2 - r^2\right)\middle|\,\alpha, j, j\right\rangle$

(a) Calcule los elementos de matriz:

$$\mathrm{q}\left\langle \alpha, j, m'\,\middle|\left(x^2 - y^2\right)\middle|\,\alpha, j, m = j\right\rangle, \quad m' = j, j-1, \ldots, -j+1, -j.$$

en función de Q y de los coeficientes de Clebsh-Gordan.

¿Cómo empezamos? Los armónicos esféricos Y_l^m nos dan operadores que son polinomios de grado l en las componentes del vector: $\mathrm{Y}_l^m(x,y,z) = \mathrm{poly}(x,y,z)/r^l$
Acá hay términos de hasta grado 2 en x, y, z → comencemos mirando los Y_2^m.

$$\mathrm{Y}_2^0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(3\cos^2\theta - 1\right), \quad Y_2^{\pm 2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\sin^2\theta e^{\pm 2i\phi}, \quad Y_2^{\pm 1} = \mp\sqrt{\frac{15}{8\pi}}\cos\theta\sin\theta e^{\pm i\phi}$$

Si multiplicamos por r^2, vemos que Y_2^0 nos da algo proporcional a $3z^2-r^2$ (el operador que aparece en Q)

$$\Rightarrow \mathrm{T}_0^{(2)} = r^2\mathrm{Y}_2^0 = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\left(3z^2 - r^2\right)$$

$$\Rightarrow 3\ \mathrm{z}^2 - r^2 = 2\sqrt{\frac{4\pi}{5}}T_0^{(2)}$$

Nos falta ver cómo escribir ($x^2 - y^2$). Escribiendo los armónicos esféricos $Y_2^{\pm 2}$ en cartesianas obtenemos los operadores:

$$
\begin{aligned}
T^{(2)}_{\pm 2} = r^2 Y_2^{\pm 2} &= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} r^2 \sin^2\theta e^{\pm 2i\phi} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}} r^2 \sin^2\theta (\cos\phi \pm i \sin\phi)^2 \\
&= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\left(r^2 \sin^2\theta \cos^2\phi - r^2 \sin^2\theta \sin^2\phi \pm 2ir^2 \sin^2\theta \cos\phi \sin\phi\right) \\
&= \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\left(x^2 - y^2 \pm 2ixy\right) \Longrightarrow \mathrm{x}^2 - y^2 = 2\sqrt{\tfrac{2\pi}{15}}\left(T^{(2)}_2 + T^{(2)}_{-2}\right)
\end{aligned}
$$

Con esta expresión, ahora podemos utilizar el teorema de Wigner-Eckart. Recordemos:

Teorema de Wigner-Eckart: $\left\langle \alpha', j', m' \left| T^{(k)}_q \right| \alpha, j, m \right\rangle = \langle j, k; m, q \mid j', m' \rangle \, T^{k,j',j}_{\alpha',\alpha}$

donde ⟨j,k;m,q|j′,m′⟩ es el coeficiente de Clebsch-Gordan que surge de sumar momentos angulares j y k con proyecciones m y q para obtener un momento angular total j′ con proyección m′. Y además:

$\mathrm{T}^{k,j',j}_{\alpha',\alpha} = \left\langle \alpha', j' \left\| T^{(k)} \right\| \alpha, j \right\rangle$ (no depende de m, m′ ni q)

Los coeficientes de CG nos dan reglas de selección, pues son todos cero a menos que: m+q=m’ y también: |j-k| < j’ < j+k .

¡Usemos el teorema para calcular lo que nos pedía el inciso (a)!

Usando el teorema de Wigner-Eckart:

$$q\left\langle \alpha, j, m' \left| (x^2 - y^2) \right| \alpha, j, j \right\rangle = 2q\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left\langle \alpha, j, m' \left| \left(T_2^{(2)} + T_{-2}^{(2)}\right) \right| \alpha, j, j \right\rangle$$

$$= 2q\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(\underbrace{\left\langle \alpha, j, m' \left| T_2^{(2)} \right| \alpha, j, j \right\rangle}_{=0 \text{ pues } j+2\neq m'} + \left\langle \alpha, j, m' \left| T_{-2}^{(2)} \right| \alpha, j, j \right\rangle \right)$$

$$= 2q\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left\langle \alpha, j \left\| T^{(2)} \right\| \alpha, j \right\rangle \langle j, 2; j, -2 \mid j, m' \rangle . \rightarrow \textbf{ Ec. (•‿•)}$$

Para relacionar <α,j||T$^{(2)}$||α,j> con Q usamos nuevamente el teorema de Wigner-Eckart. Tenemos:

$$Q = q\left\langle \alpha, j, j \left| (3z^2 - r^2) \right| \alpha, j, j \right\rangle = 2q\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\left\langle \alpha, j, j \left| T_0^{(2)} \right| \alpha, j, j \right\rangle$$

$$= 2q\sqrt{\frac{4\pi}{5}}\langle j, 2; j, 0 \mid j, j \rangle \left\langle \alpha, j \left\| T^{(2)} \right\| \alpha, j \right\rangle \Rightarrow \left\langle \alpha, j \left\| T^{(2)} \right\| \alpha, j \right\rangle = \frac{1}{2q}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\frac{Q}{\langle j,2;j,0|j,j\rangle}$$

Finalmente vuelvo a (•‿•):

$$q\left\langle \alpha, j, m' \left| (x^2 - y^2) \right| \alpha, j, j \right\rangle = 2q\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\frac{1}{2q}\sqrt{\frac{5}{4\pi}}\frac{Q}{\langle j, 2; j, 0 \mid j, j \rangle}\langle j, 2; j, -2 \mid j, m' \rangle$$

$$= \frac{1}{\sqrt{6}}\frac{Q}{\langle j, 2; j, 0 \mid j, j \rangle}\langle j, 2; j, -2 \mid j, m' \rangle$$

(b) Nos piden calcular los valores medios de todas las componentes del tensor en el estado |α, j, j⟩, es decir: $\langle \alpha, j, j\,|Q_{ik}|\,\alpha, j, j\rangle$ en función de Q=⟨α,j,j|Q_{zz}|α,j,j⟩ y coeficientes de Clebsch-Gordan.

En otras palabras, esto implicaría que midiendo el valor medio de una única componente del momento cuadrupolar en ese estado de momento angular,se puede inferir el valor medio de todos los otros.

Notemos que: $\mathrm{Q}_{ij} = Q_{ji} \quad \text{simétrico}$ ⟹ Hay 6 componentes independientes: Q_{xx},Q_{yy},Q_{zz},Q_{xy},Q_{xz},Q_{yz}

Primero expresemos las componentes no diagonales de Q en cartesianas:

$$\mathrm{Q}_{xy} = 3qxy, \quad Q_{xz} = 3qxz, \quad Q_{yz} = 3qyz$$

Ahora escribamos esto como combinación lineal de tensores esféricos:

$$\mathrm{T}^{(2)}_{\pm 1} = r^2 Y_2^{\pm 1} = \mp \tfrac{1}{2}\sqrt{\tfrac{15}{2\pi}}(xz \pm iyz)$$

$$\Longrightarrow \mathrm{xz} = \sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(T^{(2)}_{-1} - T^{(2)}_{1}\right), \quad yz = i\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(T^{(2)}_{-1} + T^{(2)}_{1}\right)$$

$$\Longrightarrow \mathrm{Q}_{xz} = 3q\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(T^{(2)}_{-1} - T^{(2)}_{1}\right), \quad Q_{yz} = 3iq\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(T^{(2)}_{-1} + T^{(2)}_{1}\right)$$

De los términos no-diagonales nos queda Q_{xy} .

Para calcularlo, volvemos a la tabla de armónicos esféricos y notemos que:

$$\mathrm{T}^{(2)}_{\pm 2} = r^2 Y_2^{\pm 2} = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}(x \pm iy)^2 = \frac{1}{4}\sqrt{\frac{15}{2\pi}}\left(x^2 - y^2 \pm 2ixy\right)$$

$$\Rightarrow \mathrm{Q}_{xy} = 3qxy = 3iq\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(T^{(2)}_{-2} - T^{(2)}_{2}\right)$$

Todos los Q_{xy},Q_{xz},Q_{yz} nos quedaron en términos de $T_{\pm 2}^{(2)}$ y $T_{\pm 1}^{(2)}$ y ahora habría que calcular cosas como: ⟨α,j,j|$T_{\pm 2}^{(2)}$|α,j,j⟩ y ⟨α,j,j|$T_{\pm 1}^{(2)}$|α,j,j⟩, pero todos van a ser cero pues por las reglas de selección nos va a quedar: $j \pm 2 \neq j$ y $j \pm 1 \neq j$.

Finalmente, quedan los valores medios de los dos términos diagonales:

$$\mathrm{Q}_{xx} = q(3x^2 - r^2), \quad Q_{yy} = q(3y^2 - r^2)$$

Para calcular estos términos hay que usar que el tensor tiene traza cero:

$$Q_{xx} + Q_{yy} + Q_{zz} = q\Big(3x^2 - r^2 + 3y^2 - r^2 + 3z^2 - r^2\Big)$$
$$= 3q\left(x^2 + y^2 + z^2\right) - 3qr^2 = 3qr^2 - 3qr^2 = 0$$

$\Rightarrow$ los valores medios de las tres componentes diagonales no son independientes entre sí $\mathrm{Q}_{xx} + Q_{yy} = -Q_{zz}$

$$\Rightarrow \langle Q_{xx} + Q_{yy}\rangle = -\langle Q_{zz}\rangle \implies \langle Q_{xx}\rangle + \langle Q_{yy}\rangle = -\langle Q_{zz}\rangle = -Q\,(\mathrm{dato})$$

Conocemos cuánto vale la suma de los valores medios de Q_{xx} y Q_{yy}. Pero si quisiésemos despejar $\langle Q_{xx}\rangle$ y $\langle Q_{yy}\rangle$ necesitamos otra ecuación. Por ejemplo, veamos cuánto da la resta:

$$\mathrm{Q}_{xx} - Q_{yy} = q\left(3x^2 - r^2\right) - q\left(3y^2 - r^2\right) = 3qx^2 - 3qy^2 = 3q\left(x^2 - y^2\right)$$

Usando las dos ecuaciones:

$$\langle Q_{xx}\rangle + \langle Q_{yy}\rangle = -\langle Q_{zz}\rangle \quad \text{y} \quad \langle Q_{xx}\rangle - \langle Q_{yy}\rangle = 3q\left\langle x^2 - y^2\right\rangle$$

Llegamos a que:

$$\langle Q_{xx}\rangle = \frac{1}{2}\left(3q\left\langle x^2 - y^2\right\rangle - \langle Q_{zz}\rangle\right) \quad \text{y} \quad \langle Q_{yy}\rangle = -\frac{1}{2}\left(3q\left\langle x^2 - y^2\right\rangle + \langle Q_{zz}\rangle\right)$$

Y nos queda todo en términos de los datos que ya tenemos.
Pero recordemos por el inciso **(a)** que:

$$\mathrm{x}^2 - y^2 = 2\sqrt{\frac{2\pi}{15}}\left(T_2^{(2)} + T_{-2}^{(2)}\right) \implies \langle\alpha, j, j|\, T_{\pm 2}^{(2)}\, |\alpha, j, j\rangle = 0 \text{ pues } j \pm 2 \neq j$$

$$\Longrightarrow \langle Q_{xx}\rangle = \langle Q_{yy}\rangle = -\frac{1}{2}\langle Q_{zz}\rangle = -\frac{Q}{2}$$

(c) Probar que para un núcleo atómico de spin 0 o 1/2 los valores de expectación del momento cuadrupolar eléctrico son nulos. **<u>Tip:</u>** Usar expresión de Q y la regla de selección |j-k| < j' < j+k.