

Sul moto di precessione di un Quadrupolo

Simone Salustro

Onde, Radiazione e Relatività

CdL in Scienza dei Materiali

Università degli studi di Torino



L'articolo

- Discussion of Quadrupole Precession
- J. C. Raich & R. H. Good, Jr.
- Institute for Atomic Research and Department of Physics, Iowa State University, Ames, Iowa
- 6 Agosto 1962
- American Journal of Physics

Osservazioni

- Descrivere il moto di precessione di un nucleo dotato di un momento di quadrupolo immerso in un campo elettrostatico non costante...
- Il moto è dovuto all'interazione tra il campo ed il momento di quadrupolo.
- Punto di vista *classico* (e *quantistico...*)
- Analogo ad un momento di dipolo magnetico immerso in un campo magnetostatico

Dipolo in campo magnetostatico

□ Partiamo da un lavoro fatto da G. E. Pake
(*G. E. Pake, Am. J. Phys. 18,483, 1950*)

□ $\boldsymbol{\mu}$: dipolo magnetico \boldsymbol{J} : momento angolare
 \boldsymbol{B} : campo magnetico g : noto in parte
 M : massa del protone c : velocità luce

$$\vec{\mu} = g \left(\frac{e}{2Mc} \right) \vec{J} \Rightarrow H = -\vec{\mu} \cdot \vec{B}$$

$$\frac{d\vec{J}}{dt} = \frac{i}{\hbar} [H, \vec{J}] \Rightarrow \frac{d\vec{J}}{dt} = g \left(\frac{e}{2Mc} \right) \vec{J} \times \vec{B}$$

Risultati

- Indipendentemente dall'angolo che forma con \mathbf{B} , \mathbf{J} ha un moto di precessione lungo \mathbf{B} in senso antiorario
- La frequenza di precessione del momento angolare (*frequenza di Larmor*) è data da

$$\omega = g \left(\frac{e}{2Mc} \right) B$$

Quadrupolo in campo elettrostatico

- Nucleo fisso nello spazio ma libero di ruotare
- Origine: centro di massa del nucleo
- W : livello energetico I : autovalore di \mathbf{J}^2
 m : num. q. magnetico P : operatore parità

$$H_0 \psi_m = W \psi_m$$

$$J^2 \psi_m = I(I+1)\hbar^2 \psi_m$$

$$J_z \psi_m = m\hbar \psi_m$$

$$P \psi_m = \pm \psi_m$$

Un approccio perturbativo

- Campo elettrico \implies Perturbazione

$$H = H_0 + H_{Int}$$

- Campo elettrostatico \implies irrotazionale

- Contributo di energia elettrostatica

$$H_{Int} = e \sum_{\alpha} \phi(\vec{x}_{\alpha})$$

$$\phi(\vec{x}) = \phi_0 - x_i E_{0,i} - \frac{1}{2} x_i x_j \left. \frac{\partial E_i}{\partial x_j} \right|_0$$

Quanto è perturbato?

- Calcoliamo l'effetto del campo sui livelli energetici di funzioni d'onda imperturbate

$$\int \psi_m^* H_{Int} \psi_{m'} = \phi_0 e \sum_{\alpha} \int \psi_m^* \psi_{m'} - E_{0,i} e \sum_{\alpha} \int \psi_m^* x_{i,\alpha} \psi_{m'} +$$

$$-\frac{1}{2} \frac{\partial E_i}{\partial x_j} \Big|_0 e \int \psi_m^* \sum_{\alpha,i} x_{\alpha,i} x_{\alpha,j} \psi_{m'}$$

Costante

=0

Wigner-Eckart

Teorema di Wigner-Eckart

- Consente di semplificare il calcolo di tensori *sferici* \implies Coefficiente \times Elemento di matrice
- Dipendenza angolare della matrice è raccolto nel coefficiente di Clebsch-Gordan
- Si ottiene un'espressione per l'Hamiltoniana di interazione del tipo

$$H_{Int} = - \left(\frac{\partial E_i}{\partial x_j} \right) \frac{Qe}{4I(2I-1)\hbar^2} (J_i J_j + J_j J_i)$$

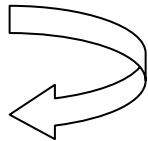
L'Hamiltoniana di interazione

$$H_{Int} = - \left(\frac{\partial E_i}{\partial x_j} \right) \frac{Qe}{4I(2I-1)\hbar^2} (J_i J_j + J_j J_i)$$

- Q : momento di quadrupolo elettrico
- Può essere ulteriormente modificata giocando sulle derivate e sugli assi...
- Per convenzione, gli assi si scelgono tali che

$$\left| \frac{\partial E_z}{\partial z} \right| \geq \left| \frac{\partial E_y}{\partial y} \right| \geq \left| \frac{\partial E_x}{\partial x} \right|$$

Campo elettrico solenoidale (o quasi...)

- Vogliamo diagonalizzare il tensore
Opportuna scelta degli assi 
- Necessari due parametri per definire il tensore delle derivate di \mathbf{E}

$$\nabla \cdot \vec{E} = \frac{\partial E_x}{\partial x} + \frac{\partial E_y}{\partial y} + \frac{\partial E_z}{\partial z} = 0 \Rightarrow \eta = \frac{\left(\frac{\partial E_x}{\partial x} - \frac{\partial E_y}{\partial y} \right)}{\frac{\partial E_z}{\partial z}}$$
$$q = -\frac{1}{e} \frac{\partial E_z}{\partial z}$$

Il tensore derivata di E

- Può essere riscritto in termini di q e η come

$$\frac{\partial E_i}{\partial x_j} = \begin{pmatrix} \eta - 1 & 0 & 0 \\ 0 & -\eta - 1 & 0 \\ 0 & 0 & 2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} -\frac{eq}{2} \\ \\ \end{pmatrix}$$

- L'Hamiltoniana di interazione diviene, in termini di q e η

$$H_{Int} = \frac{e^2 q Q}{4I(2I-1)\hbar^2} \left(3J_z^2 - J^2 + \eta J_x^2 - \eta J_y^2 \right)$$

Il problema classico

- Nell'asse principale, l'equazioni del moto sono

$$\frac{dJ_x}{dt} = -2 \frac{A}{\hbar^2} (\eta + 3) J_y J_z$$

$$\frac{dJ_y}{dt} = -2 \frac{A}{\hbar^2} (\eta - 3) J_z J_x$$

$$\frac{dJ_z}{dt} = 4 \frac{A}{\hbar^2} \eta J_x J_y$$

$$A \equiv \frac{e^2 q Q}{4I(2I - 1)}$$

Un punto su una sfera

- Siccome J^2 risulta essere un integrale del moto, allora il percorso di J può essere descritto dal moto di un punto sulla superficie di una sfera di raggio J

$$J_x = J \sin(\vartheta) \cos(\phi)$$

$$J_y = J \sin(\vartheta) \sin(\phi)$$

$$J_z = J \cos(\vartheta)$$

- Poiché anche $J_i J_j \partial E_i / \partial x_j$ è un integrale del moto, ciò implica necessariamente che

$$(\eta - 1) \sin^2(\theta) \cos^2(\phi) + (-\eta - 1) \sin^2(\theta) \sin^2(\phi) + 2 \cos^2(\theta) = K$$

Quanto vale K ?

- Imponendo $\theta = \theta_0$ e $\varphi = \pi/2$, otteniamo

$$K = 2 - (\eta + 3)\sin^2(\theta_0)$$

- La relazione si semplifica in

$$\sin^2(\theta) = \left[\frac{3 + \eta}{3 - \eta + 2\eta \sin^2(\phi)} \right] \sin^2(\theta_0)$$

- Abbiamo due possibili assi attorno ai quali può avvenire il moto di precessione...

1) Precessione lungo l'asse z

$$\sin^2(\theta_0) < \frac{3-\eta}{3+\eta}$$

- Un incremento di φ da 0 a $\pi/2$ comporta una decrescita del valore di $\sin^2(\theta)$.
- Se si considera φ da $\pi/2$ a π , si ritorna al valore iniziale a $\varphi = 0$
- Considerando ora il tratto da π a 2π , il percorso è simmetrico.

2) Precessione lungo l'asse y

$$\sin^2(\theta_0) > \frac{3-\eta}{3+\eta}$$

- Se $\sin^2(\theta)$ passa da $\sin^2(\theta_0)$ a 1 , allora $\sin^2(\varphi)$ diminuisce.
- La curva percorsa dal momento angolare sulla superficie della sfera è simmetrica rispetto ai piani xy e yz
- Come varia allora \mathbf{J} nel tempo?

Le funzioni ellittiche di Jacobi

- Funzioni doppiamente periodiche nel campo complesso \implies Analogie con trigonometriche
- Usando le proprietà differenziali delle funzioni ellittiche è possibile dedurre come variano nel tempo le componenti del momento angolare totale \mathbf{J}
- 2 assi lungo i quali avviene il moto; necessari allora 2 set di equazioni che descrivano il moto di precessione di \mathbf{J} ...

Soluzione del moto lungo z

- Sfruttando le funzioni ellittiche sn , cn e dn

$$J_x = -\left(\sqrt{\frac{3+\eta}{3-\eta}}\right) J \sin(\theta_0) sn[\omega(t-t_0)]$$

$$J_y = J \sin(\theta_0) cn[\omega(t-t_0)]$$

$$J_z = J \cos(\theta_0) dn[\omega(t-t_0)]$$

$$\omega = \frac{2A}{\hbar^2} J \cos(\theta_0) \sqrt{9-\eta^2}$$

- k^2 , il modulo delle funzioni ellittiche, vale

$$k^2 = \frac{2\eta}{3-\eta} \tan^2(\theta_0)$$

Soluzione del moto lungo y

□ Analogamente a prima,

$$J_x = -\left(\sqrt{\frac{3+\eta}{2\eta}}\right) J \cos(\theta_0) \operatorname{sn}[\omega(t-t_0)]$$

$$J_y = J \sin(\theta_0) \operatorname{dn}[\omega(t-t_0)]$$

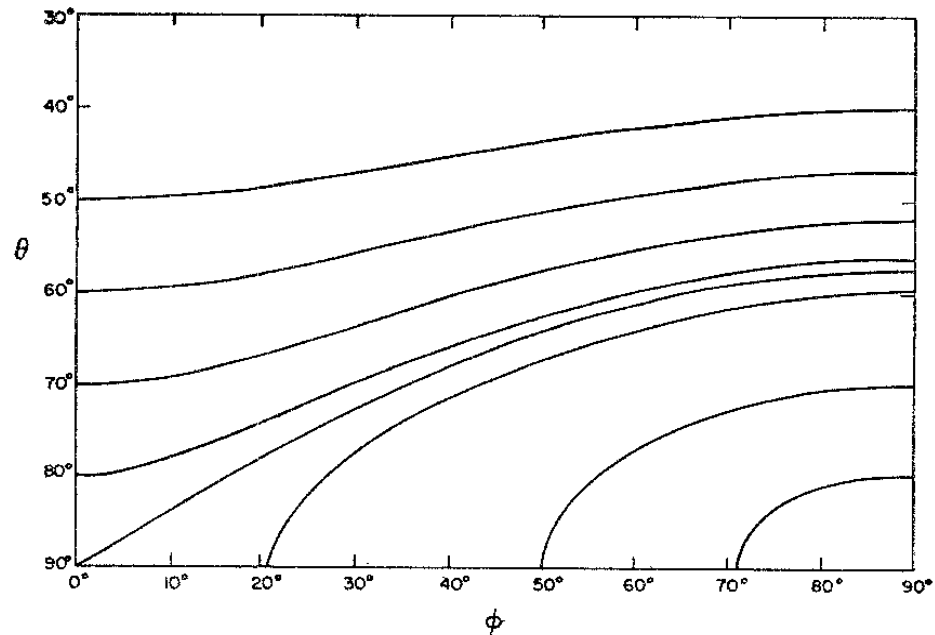
$$J_z = J \cos(\theta_0) \operatorname{cn}[\omega(t-t_0)]$$

$$\omega = \frac{2A}{\hbar^2} J \sin(\theta_0) \sqrt{2\eta(3+\eta)}$$

□ k^2 in questo caso vale

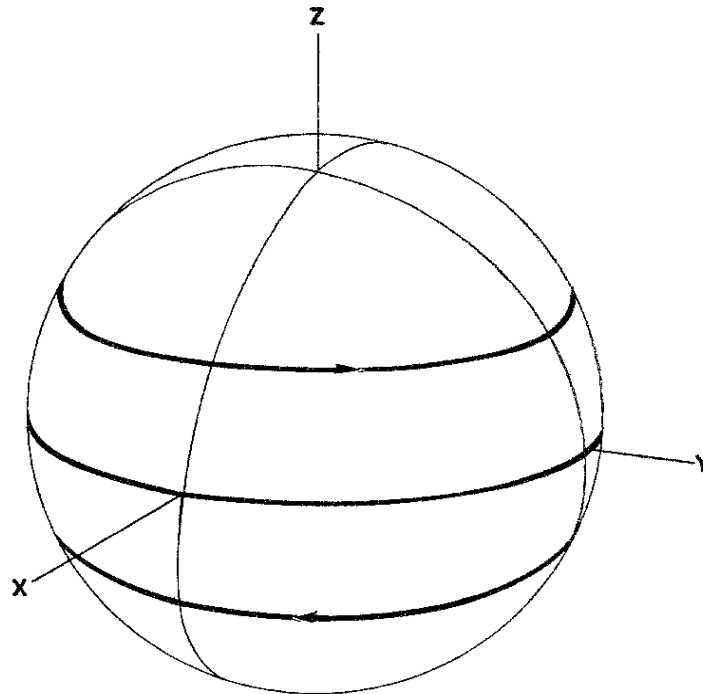
$$k^2 = \frac{3-\eta}{2\eta} \cot^2(\theta_0)$$

I possibili percorsi di J (I)



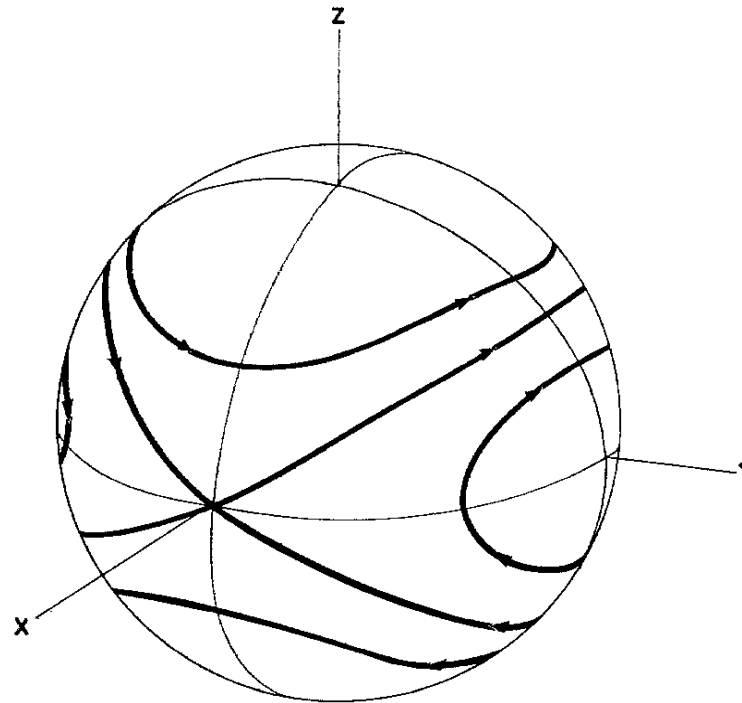
- Percorsi tracciati dal momento angolare totale J secondo la relazione appena trovata, fissati diversi valori di θ_0 e con $\eta=1/2$

I possibili percorsi di J (II)



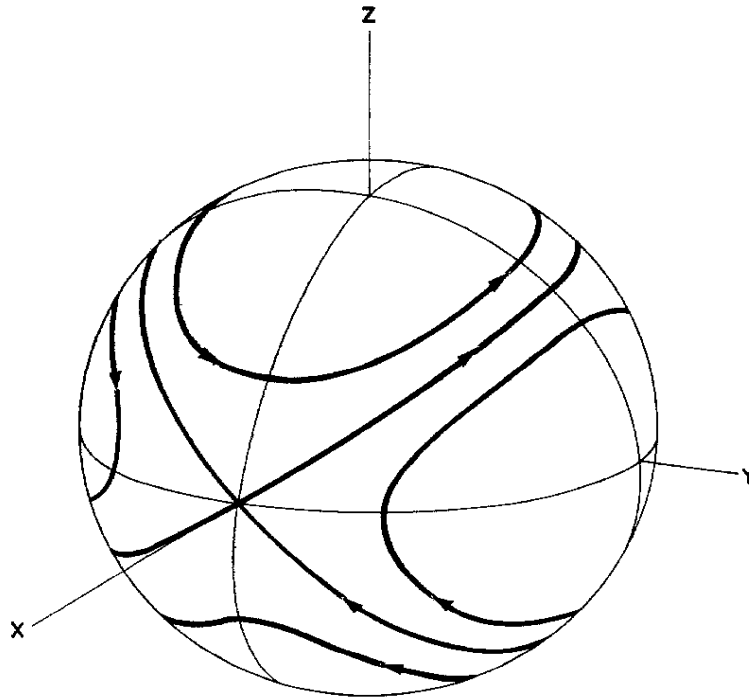
- Moto di precessione di J nel caso in cui $\eta=0$. Le frecce indicano la direzione di precessione se $A>0$. **Solo precessione lungo z.**

I possibili percorsi di J (III)



- Moto di precessione di J nel caso in cui $\eta=1/2$. Le frecce indicano la direzione di precessione se $A>0$. **Precessione lungo y quando $\sin^2(\theta_0)> 5/7$**

I possibili percorsi di J (IV)



- Moto di precessione di J nel caso in cui $\eta=1$. Le frecce indicano la direzione di precessione se $A>0$. **Precessione lungo y quando $\sin^2(\theta_0)>1/2$**

Piccole considerazioni

- La direzione di precessione lungo z dipende dal segno della grandezza $A\cos(\theta_0)$; quando questa è positiva, il moto segue la *regola della mano destra*.
- La direzione di precessione lungo y , invece, dipende solo dal segno di A (ossia da $qQ\dots$): quando questa è positiva, il moto segue la *regola della mano sinistra*.
- Le soluzioni trovate per il moto lungo l'asse y tengono conto solo della semisfera con $y > 0$. Si può trovare la soluzione per la semisfera con $y < 0$ cambiando i segni alle componenti J_y e J_z .

Il caso più semplice

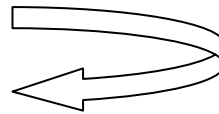
- Si possono ottenere importanti informazioni anche senza la introduzione delle funzioni ellittiche ma utilizzando quelle trigonometriche. Nel caso in cui $\eta=0$, allora

$$J_x = -R \sin[\omega(t - t_0)]$$

$$J_y = R \cos[\omega(t - t_0)]$$

$$J_z = C$$

$$\omega = \frac{6AC}{\hbar^2}$$



- $R=J\sin(\theta_0)$ e $C=J\cos(\theta_0)$ sono delle costanti di integrazione

Prime osservazioni

- Il momento di quadrupolo Q impone un moto di precessione al momento angolare totale J lungo un asse di un campo elettrico simmetrico, esattamente come il momento di dipolo magnetico μ lo imponeva nel caso di un campo magnetico.
- In questo caso però la *frequenza di precessione è legata alla terza componente del momento angolare*, cosa che nel caso studiato da Pake non avveniva; la frequenza di precessione era la medesima per tutte le orientazioni.

Il caso un po' più complicato

- Per il caso $\eta=0$, il campo ha una simmetria assiale rispetto all'asse z . Nel caso di *leggera asimmetria*, possiamo dunque sviluppare la soluzione per piccoli η , ossia

$$J_x = -R \sin [\omega(t - t_0)] + \eta K_x$$

$$J_y = R \cos [\omega(t - t_0)] + \eta K_y$$

$$J_z = C + \eta K_z$$

- Il vettore \mathbf{K} può essere visto come un vettore correttivo rispetto alla soluzione ottenuta nel caso di simmetria assiale del campo.

Le equazioni del moto di K

- Sostituendo quanto appena dedotto nelle equazioni del moto, e trascurando i termini del caso della simmetria assiale

$$\frac{dK_x}{dt} = -\omega K_y - 6 \frac{A}{\hbar^2} R \cos[\omega(t - t_0)] K_z - \frac{1}{3} \cos[\omega(t - t_0)]$$

$$\frac{dK_y}{dt} = -\omega K_x - 6 \frac{A}{\hbar^2} R \sin[\omega(t - t_0)] K_z - \frac{1}{3} \sin[\omega(t - t_0)]$$

$$\frac{dK_z}{dt} = -2 \frac{A}{\hbar^2} R^2 \sin[2\omega(t - t_0)]$$

- Dobbiamo trovare delle soluzioni particolari che non modifichino l'espressione del moto di precessione nel caso di perfetta simmetria assiale...

Soluzioni (I)

- Per la componente K_z la risoluzione è molto semplice, infatti

$$K_z = \frac{AR^2}{\hbar^2 \omega} \cos[2\omega(t - t_0)]$$

- Dobbiamo risolvere le altre due equazioni differenziali; più comode da risolvere se le componenti K_x e K_y sono espresse come

$$K_+ = K_x + iK_y$$

- Ciò premesso, allora

$$\frac{dK_+}{dt} = \frac{dK_x}{dt} + i \frac{dK_y}{dt} = i\omega K_+ - 6 \frac{A \cdot R}{\hbar^2} e^{i\omega(t-t_0)} K_z - \frac{1}{3} R\omega e^{-i\omega(t-t_0)}$$

Soluzioni (II)

- Sostituendo in quest'ultima relazione l'espressione di K_z

$$\frac{dK_+}{dt} = i\omega K_+ - \left(\frac{3A^2 R^3}{\omega \hbar^4} + \frac{1}{3} R\omega \right) e^{-i\omega(t-t_0)} - 3 \frac{A^2 R^3}{\omega \hbar^4} e^{3i\omega(t-t_0)}$$

- Risolvendo ora l'equazione differenziale, si ottiene

$$K_+ = -iR \left(\frac{3A^2 R^2}{2\omega^2 \hbar^4} + \frac{1}{6} \right) e^{-i\omega(t-t_0)} + i \frac{3}{2} \frac{A^2 R^3}{\omega^2 \hbar^4} e^{3i\omega(t-t_0)}$$

- Unendo quanto trovato alla soluzione del moto di precessione di \mathbf{J} per un campo elettrostatico simmetrico, otteniamo le espressioni delle componenti del momento angolare del nucleo anche in condizioni di piccola asimmetria del campo...

Soluzioni (III)

- Le espressioni globali che descrivono l'evoluzione temporale delle componenti del momento angolare \mathbf{J} sono quindi

$$J_x = -R \sin[\omega(t - t_0)] - \eta R \left(\frac{3}{2} \frac{A^2 R^2}{\omega^2 \hbar^4} + \frac{1}{6} \right) \sin[\omega(t - t_0)] - \eta \frac{3}{2} \frac{A^2 R^3}{\omega^2 \hbar^4} \sin[3\omega(t - t_0)]$$

$$J_y = R \cos[\omega(t - t_0)] - \eta R \left(\frac{3}{2} \frac{A^2 R^2}{\omega^2 \hbar^4} + \frac{1}{6} \right) \cos[\omega(t - t_0)] + \eta \frac{3}{2} \frac{A^2 R^3}{\omega^2 \hbar^4} \cos[3\omega(t - t_0)]$$

$$J_z = C + \eta \frac{AR^2}{\omega \hbar^2} \cos[2\omega(t - t_0)]$$

- Le costanti di integrazione sono R , C e t_0 .
- Il moto di precessione ha periodicità $2\pi/\omega$.

Conclusioni per il problema classico

- La frequenza di precessione del momento angolare è proporzionale alla terza componente del momento angolare stesso e dipende dal prodotto qQ .
- La costante C può essere intesa come il valor medio della terza componente del momento angolare.
- L'interpretazione della costante R invece si trova quadrando e sommando le equazioni precedenti; si ottiene $J^2 = R^2 + C^2$
- L'effetto di un piccolo scostamento dalla situazione di $\eta = 0$ comporta l'introduzione *della seconda armonica* nel moto di J_z e della *terza armonica* nel moto di J_x e J_y

Il problema quantistico

- L'obiettivo di questo ulteriore *divertissement* è quello di mostrare che, per grandi numeri quantici, teoria classica e quantistica *convergono alla medesima soluzione*.
- Riprendiamo l'Hamiltoniana del problema classico (*slide 12*) e riscriviamola in termini di

$$H_{Int} = H_1 + H'$$

$$H_1 = \frac{A}{\hbar^2} (3J_z^2 - J^2)$$

$$H' = \frac{A}{2\hbar^2} \eta (J_+^2 + J_-^2)$$

$$J_{\pm} = J_x \pm iJ_y$$

Un po' di matrici

- Per una rappresentazione matriciale di questi operatori utilizziamo le funzioni d'onda imperturbate ψ_m .

- Gli elementi di matrice non nulli sono dati da

$$(H_1)_{m,m} = A[3m^2 - I(I+1)]$$

$$(H')_{m,m\pm 2} = \frac{A}{2} \eta [I(I+1) - m(m\pm 1)]^{\frac{1}{2}} \cdot [I(I+1) - (m\pm 1)(m\pm 2)]^{\frac{1}{2}}$$

- Gli autovalori di questa matrice danno lo splitting del quadrupolo e gli autovettori determinano le funzioni d'onda φ degli stati in termini delle ψ_m .

Caso simmetrico

- Per il caso simmetrico, la Hamiltoniana è già diagonale $H'=0$ e gli stati φ sono le stesse ψ_m ; splitting energetico è dato da

$$E_m = A[3m^2 - I(I + 1)]$$

- Le regole di selezione prevedono che $\Delta m=0, \pm 1$. Pertanto, per una transizione da $m-1$ a m e imponendo, ad esempio, A e m positivi, la frequenza di precessione è data da

$$\omega = 6 \frac{A}{\hbar} \left(m - \frac{1}{2} \right)$$

- Per grandi numeri quantici, *c'è accordo tra i risultati ottenuti dalla meccanica classica e quelli ottenuti dalla meccanica quantistica.*

Caso asimmetrico

- Per piccoli spostamenti dalla condizione di simmetria, la teoria perturbativa della Hamiltoniana fornisce autovalori ed autovettori pari a

$$E_m = A[3m^2 - I(I+1)]$$
$$\phi_m = \psi_m + \frac{(H')_{m+2,m}}{E_m - E_{m+2}} \psi_{m+2} + \frac{(H')_{m-2,m}}{E_m - E_{m-2}} \psi_{m-2} + \dots$$

- La perturbazione H' rimuove la degenerazione tra gli stati $\psi_{\pm I}$ pertanto queste espressioni non vanno bene per $m=\pm 1$.
- Siccome noi ragioniamo in termini di grandi numeri quantici, questo dettaglio è assolutamente ininfluente.

Risultati

- Le regole di selezione $\Delta m = \pm 1$ valgono ancora per la matrice diagonale H_1 , ma ora sono permesse anche transizioni per diversi Δm , come ad esempio $\varphi_{m-2} \rightarrow \varphi_m$ o $\varphi_{m-3} \rightarrow \varphi_m$!!
- Le frequenze di precessione per queste transizioni sono

$$\omega_{m-2 \rightarrow m} = 12 \frac{A}{\hbar} (m-1)$$

$$\omega_{m-3 \rightarrow m} = 18 \frac{A}{\hbar} \left(m - \frac{3}{2} \right)$$

- Per grandi numeri quantici, *queste frequenze non sono altro che la seconda e terza armonica della frequenza del caso simmetrico, esattamente come nel caso classico!*

Ringraziamenti

- Al *Prof. Ezio Menichetti*, per il supporto fisico e matematico, per la grande pazienza, per la stima e la grande fiducia.
- Al *Prof. Cesare Pisani*, che mi ha consigliato diverse letture per ogni domanda che gli ho posto.
- Alla *Prof.ssa Maria Luisa Tonon*, per la cortesia e la spiegazione di alcuni concetti matematici.

- Grazie per l'attenzione!