



Università degli Studi di Padova

DIPARTIMENTO DI FISICA E ASTRONOMIA

Corso di Laurea Magistrale in Fisica

TESI DI LAUREA MAGISTRALE

Simmetrie e rotovibrazioni di nuclei α -coniugati

Candidato:

Gianluca Stellan

Matricola 617892-SF

Relatore:

Lorenzo Fortunato

INDICE

1	FENOMENI DI CLUSTERING NEI NUCLEI	1
1.1	Introduzione storica	1
2	IL PROBLEMA NUCLEARE A MOLTI CORPI NELL'APPROCCIO MOLECOLARE	5
2.1	Il sistema classico	5
2.2	Coordinate normali di vibrazione	7
2.3	L'hamiltoniana classica	9
2.4	L'hamiltoniana quantistica	10
2.5	Proprietà di Trasformazione delle coordinate rotazionali e vibrazionali	12
2.5.1	Proprietà di trasformazione degli angoli di Eulero e del momento angolare rotovibrazionale	13
2.5.2	Proprietà di trasformazione delle coordinate normali	14
2.6	Autostati e proprietà di trasformazione dell'hamiltoniana	15
2.6.1	Stati vibrazionali del sistema	16
2.6.2	Coordinate non degeneri: l'oscillatore armonico unidimensionale	16
2.6.3	Coordinate doppiamente degeneri: l'oscillatore armonico bidimensionale	18
2.6.4	Coordinate triplamente degeneri: l'oscillatore armonico tridimensionale	20
2.6.5	Proprietà di trasformazione della funzione d'onda vibrazionale	23
2.6.6	Stati rotazionali del sistema	24
2.6.7	Stati rotazionali di nuclei sferici	24
2.6.8	Stati rotazionali di nuclei simmetrici	26
2.7	Transizioni elettromagnetiche	27
3	IL NUCLEO ^{12}C	31
3.1	Introduzione	31
3.2	Proprietà di trasformazione delle coordinate rotovibrazionali	32
3.3	Proprietà di trasformazione delle autofunzioni rotovibrazionali	36
3.4	Schema dei livelli energetici	41
3.4.1	L'approssimazione di rotore rigido	41
3.4.2	L'approssimazione di rotore soffice	44
3.4.3	L'approssimazione di Dunham	48
3.5	Transizioni di multipolo elettrico	53
3.5.1	Dipolo elettrico	55
3.5.2	Quadrupolo Elettrico	56
3.5.3	Ottupolo Elettrico	61
4	IL NUCLEO ^{16}O	65
4.1	I gruppi puntuali di simmetria	65
4.2	Proprietà di trasformazione delle coordinate rotovibrazionali	66
4.3	Proprietà di trasformazione delle autofunzioni rotovibrazionali	67
4.4	Schema dei livelli energetici	72
4.4.1	L'approssimazione di rotore rigido	72
4.4.2	L'approssimazione di rotore soffice	75
5	CONCLUSIONE	81
5.1	Epilogo	81
i	APPENDICI	83
A	APPENDICE	85
A.1	Tavole dei caratteri	85
A.1.1	Il gruppo $C_{3v} \approx S_3$	85

A.1.2	Il gruppo $\mathcal{D}_{3h} \approx \mathcal{S}_3 \otimes C_i$	86
A.1.3	Il gruppo $\mathcal{T}_d \approx \mathcal{S}_4$	86
A.1.4	Il gruppo $\mathcal{O}_h \approx \mathcal{S}_4 \otimes C_i$	87
A.2	Tavole moltiplicative	87
A.2.1	Il gruppo \mathcal{C}_{3v}	87
A.2.2	Il gruppo \mathcal{D}_{3h}	87
A.2.3	Il gruppo \mathcal{T}_d	87
A.2.4	Il gruppo \mathcal{O}_h	88
A.3	Prodotto simmetrico di rappresentazioni irriducibili	88
BIBLIOGRAFIA		89

ELENCO DELLE FIGURE

- Figura 1 Andamento dell'energia di legame $BE(N, Z)$ in funzione del numero di legami fra particelle α nel modello macroscopico di Wheeler [29]. 2
- Figura 2 Il Diagramma di Ikeda, in una versione del 1980 [36]. Come si osserva, il ^{12}C possiede un'unica configurazione a cluster lineare in prossimità della soglia di decadimento a 3α a 7,28 MeV, mentre il ^{16}O ne ha 2, una catena 4α lineare a 14,44 MeV e una diatomica $\alpha + ^{12}\text{C}$ a 7,16 MeV, invece il ^{20}Ne ne ha 4, una lineare 5α a 19,96 MeV, le diatomiche $\alpha + ^{12}\text{C} + \alpha$ e $2\alpha + ^{12}\text{C}$ a 11,89 MeV e una $\alpha + ^{16}\text{O}$ a 4,73 MeV, et c. 3
- Figura 3 L'abito cristallino dei nuclei α -coniugati leggeri secondo il modello macroscopico di Wheeler [12]. 13
- Figura 4 Decomposizione dell'operazione (12)(3) di $\mathcal{D}_{3h}(N)$ nell'operazione C_2 di \mathcal{D}_{3h} e nella rotazione degli assi della terna solidale $R_{5\pi/6}^\pi$ di R_{rot} . Indicando con $\Delta\alpha_i$ ($\alpha = x, y, z$ e $i = 1, 2, 3$) i generici spostamenti cartesiani delle tre particelle α dalla posizione di equilibrio, si può decomporre l'operazione (12)(3) che scambia le etichette delle due particelle lasciando invariati gli spostamenti, in una rotazione di π attorno ad un asse nel piano xy che forma un angolo di $5\pi/6$ rispetto all'asse x della terna solidale al nucleo e in una rotazione di π attorno all'asse passante per il centro di massa e per il sito della particella non permutata (3), (C_2), che agisce unicamente sugli spostamenti dei tre nuclei di elio dall'equilibrio. 33
- Figura 5 Rappresentazione grafica dei modi normali di vibrazione. Come si osserva, il modo di vibrazione non degenere (ω_1) che trasforma come la rappresentazione completamente simmetrica A'_1 consiste in una dilatazione-contrazione isotropa del triangolo equilatero (carattere di simmetria α), mentre quello doppiamente degenere (ω_2) che trasforma sotto E' si può rappresentare come sovrapposizione di un modo simmetrico per lo scambio di due particelle (23) e indefinito per le altre operazioni di permutazione (carattere di simmetria γ) e di un modo antisimmetrico per lo scambio di due particelle (23) e indefinito per le altre operazioni di S_3 (carattere di simmetria δ). 36
- Figura 6 Schema dei livelli del ^{12}C con $n_1 + n_2 \leq 3$ ed energia inferiore a 30 MeV, nell'approssimazione di rotore rigido di particelle puntiformi, con $\omega_1 = 1.16288 \cdot 10^{22}$ Hz, $\omega_2 = 1.47890 \cdot 10^{22}$ Hz e $l = 2.16951$ fm. 42
- Figura 7 Orientazione scelta per la terna rotante nel calcolo dei momenti d'inerzia del ^{12}C . Si noti che l'angolo fra l'asse y e l'asse passante per l'origine e per la particella 1 coincide con quello fra l'asse x e l'asse intersecante l'origine e la particella 3. 44
- Figura 8 Rappresentazione grafica del nucleo ^{12}C nel modello α -cluster nell'approssimazione di sfere soffici. [42] Si noti che i nucleoni sono stati raffigurati in rosso e in blu. 44
- Figura 9 Andamento della funzione somma degli scarti quadratici $\Delta_\beta^2(I_\beta)$ per la banda rotazionale fondamentale (rosso), per la banda eccitata A'_1 (blu) e per la E' (verde). 45
- Figura 10 Schema dei livelli del ^{12}C con $n_1 + n_2 \leq 3$ ed energia inferiore a 22.5 MeV, nell'approssimazione di sfere soffici. Le righe sperimentali (risp. teoriche) sono riportate in blu (risp. rosso), mentre per la nomenclatura delle bande rotazionali e degli stati valgono le stesse convenzioni presentate in fig. 6. 46

- Figura 11 Andamento degli autovalori E_{RVD}^{th} risultanti dal fit comprensivo del termine di Dunham, in funzione del quadrato del momento angolare totale (in unità di \hbar^2). I dati sperimentali impiegati nell'interpolazione sono rappresentati da cerchi (banda fondamentale), triangoli (banda di Hoyle) e quadrati (banda E_1'). Si osservi che la dipendenza degli autovalori (198) da K^2 spezza la linearità dell'andamento della funzione rispetto a $J(J+1)$ nella banda fondamentale (in rosso): le tre (risp. due) righe con proiezione $K = 3$ (risp. $K = 0$) sono riprodotte dalla retta tratteggiata (risp. continua). 52
- Figura 12 Schema delle transizioni di quadrupolo (in rosso) e di ottupolo elettrico (in blu) fra i livelli energetici α -cluster sperimentalmente osservati del ^{12}C . 59
- Figura 13 Schema dei livelli del ^{12}C con $n_1 + n_2 \leq 3$ ed energia inferiore a 32 MeV in funzione della distanza delle particelle α dal loro centro di massa. Si noti che gli stati (J, K) all'interno della stessa banda rotazionale $[n_1, n_2]$ (cfr. legenda) sono indicati con lo stesso colore. 64
- Figura 14 Effetto dell'operazione (12)(3)(4)* del gruppo di permutazione-inversione $\mathcal{O}_h(N)$ sulle coordinate cartesiane di spostamento (cfr. fig. (4)) delle particelle α del nucleo di ^{16}O . Si osservi che l'operazione presentata non cambia la chiralità della terna solidale al nucleo rotante: è sufficiente eseguire una rotazione antioraria di π intorno all'asse x ed una di $4\pi/3$ attorno all'asse z appena ruotato per stabilire l'orientazione la terna in seguito all'operazione di $\mathcal{O}_h(N)$. 66
- Figura 15 Orientazione scelta per la terna rotante nel calcolo dei momenti d'inerzia del ^{16}O . 75
- Figura 16 Rappresentazione grafica del nucleo ^{16}O nel modello α -cluster nell'approssimazione di sfere soffici. Si noti che i nucleoni sono stati raffigurati in rosso e in blu. 75
- Figura 17 Schema dei livelli del ^{16}O con $n_1 + n_2 + n_1 \leq 1$ ed energia inferiore a 30 MeV, nell'approssimazione di sfere soffici. Le righe sperimentali (risp. teoriche) sono riportate in blu (risp. rosso), mentre per la nomenclatura delle bande rotazionali e degli stati valgono le stesse convenzioni presentate in fig. 18. 78
- Figura 18 Schema dei livelli del ^{16}O con $n_1 + n_2 + n_3 \leq 2$ ed energia inferiore a 30 MeV, nell'approssimazione di rotore rigido di particelle puntiformi, con $\omega_1 = 3,07194 \cdot 10^{21}$ Hz, $\omega_2 = 2,12833 \cdot 10^{21}$ Hz, $\omega_3 = 3,69924 \cdot 10^{21}$ Hz e $l = 4.46921$ fm. 79

ELENCO DELLE TABELLE

- Tabella 1 Scheda riassuntiva delle proprietà di trasformazione di angoli di Eulero e componenti dell'operatore momento angolare nella terna intrinseca. 14
- Tabella 2 Tavola dei caratteri della rappresentazione riducibile delle coordinate di spostamento cartesiane. *E' importante ricordare due convenzioni che da qui in avanti verranno adottate nelle tabelle: (i) il carattere dell'operazione di simmetria R , $\chi_{\Gamma_i}[R] = \text{Tr}\{D^{\Gamma_i}[R]\}$ della rappresentazione Γ_i verrà indicato concisamente con la rappresentazione riducibile stessa Γ_i ; (ii) a capo della colonna delle rappresentazioni metteremo il gruppo puntuale all'equilibrio (o il gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana, in caso di isomorfismo fra i due); (iii) per le rappresentazioni irriducibili del gruppo di simmetria $\mathcal{G}(N) \approx \mathcal{G}$ useremo i simboli di Mulliken.* 34
- Tabella 3 Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle coordinate di rototraslazione. *Si osservi che le componenti z dei vettori di rototraslazione \vec{T} e \vec{R} trasformano separatamente rispetto alle componenti x e y , ovvero si ha rispettivamente $\Gamma(T_x, T_y) = E'$ e $\Gamma(T_z) = A_2''$, $\Gamma(R_x, R_y) = E''$ e $\Gamma(R_z) = A_2'$.* 35
- Tabella 4 Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle coordinate normali. *Si osservi che una delle coordinate normali, che denotiamo con Q_1 , corrisponde ad un modo di vibrazione nondegenere e trasforma sotto la rappresentazione completamente simmetrica A_1' , mentre la rimanente coppia di coordinate (Q_2, Q_3) corrisponde ad un modo doppiamente degenere, e trasforma sotto la rappresentazione irriducibile E' .* 35
- Tabella 5 Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali (con $n_2 \leq 10$). *Osserviamo innanzitutto che non tutte le autofunzioni con lo stesso n_2 e m opposto trasformano fra di loro (i.e. con una irreps doppiamente degenere), infatti mentre le $(\Phi_{1,1}, \Phi_{1,-1})$ trasformano come la E' , una fra le due coppie $(\Phi_{3,1}, \Phi_{3,-1})$ e $(\Phi_{3,3}, \Phi_{3,-3})$ non trasforma come E' ma con due specie 1-dimensionali (e dunque è una falsa coppia). Emerge, inoltre, una periodicità nella decomposizione della rappresentazione riducibile degli stati a numero di fononi n_2 fissato: partendo da $n_2 = 0$, che trasforma come A_1' , si ottengono i cinque livelli successivi aggiungendo alla $\Gamma(\Phi_0)$ in successione $E' - A_1', A_1', A_2', E' - A_2'$ e A_2' , poi il ciclo riparte dall'inizio con $A_1', E' - A_1', A_1'$ etc. In conclusione, è utile ricordare che in articoli storici, come quelli di Dennison (1932) e Wheeler (1937) da cui si è, in parte, attinto, le rappresentazioni irriducibili (A_1', A_1'') sono indicate collettivamente con il carattere di simmetria α in virtù del fatto che sono simmetriche rispetto ad una permutazione qualsiasi delle tre particelle α (i.e. hanno un carattere unitario sotto le operazioni di S_3), mentre le (A_2', A_2'') sono antisimmetriche rispetto alle permutazioni dispari e denotate con β e, infine, le (E', E'') doppiamente degeneri sono indicate con il simbolo (γ, δ) .* 37
- Tabella 6 Tavole dei caratteri delle rappresentazioni degli autostati rotazionali con $J = 3$. 37
- Tabella 7 Tavole dei caratteri delle rappresentazioni degli autostati rotazionali fino a $J = 6$. *Si può evincere che (i) per valori pari (risp. dispari) di J la rappresentazione irriducibile degli stati con $K = 0$ è A_1' (risp. A_2'); (ii) per gli stati con J qualsiasi e K dispari (risp. pari) e non multiplo di 3 la rappresentazione è E'' (risp. E'); (iii) per gli stati con J qualsiasi e K dispari (risp. pari) e multiplo di 3 la rappresentazione è $A_1'' \oplus A_2''$ (risp. $A_1' \oplus A_2'$), ovvero si incontrano le coppie apparenti già osservate.* 38

Tabella 8	Regole di selezione degli stati. <i>E' presentato il numero di stati rotovibrazionali permessi n_α per il nucleo ^{12}C in esame, determinato dai caratteri di simmetria delle funzioni d'onda ψ_R (fino a $J = 5$) e ψ_V (fino a $n_2 = 6$). Si noti che questo numero cresce con il numero di fononi n_2 dell'oscillatore degenere.</i> 39
Tabella 9	Tavola delle energie delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 \leq 1$ nell'approccio di particelle puntiformi. <i>Il valore estremamente piccolo degli errori sui momenti d'inerzia I_x^e e I_z^e è diretta conseguenza della precisione con cui sono noti i valori sperimentali delle tre righe impiegate per la stima dei parametri del modello, nonché del contenuto errore sulla massa delle particelle α [1].</i> 43
Tabella 10	Tavola riassuntiva delle energie delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 \leq 1$ nell'approccio di sfere soffici di raggio pari a quello di materia [3] (colonna centrale) e pari al raggio di carica (colonna più a destra). <i>Quest'ultima stima è stata aggiunta il successivo confronto dei risultati ottenuti dal nostro modello molecolare di sfere soffici con quelli calcolati nell'ambito del modello α-cluster microscopico di Bloch e Brink.</i> 47
Tabella 11	Tavola di confronto fra i raggi di carica nucleari del ^{12}C delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 \leq 1$ ottenuti da due modelli α -cluster differenti. <i>L'asterisco in corrispondenza del valore di R_α adottato da Uesaki et al. [55] indica l'origine non osservativa di tale valore, che è stato ottenuto dalla minimizzazione dell'energia associata alla funzione d'onda variazionale dello stato fondamentale 0^+. Per completezza, anche se in modo improprio, sono state riportate anche le stime dei raggi nucleari di materia, che si avvalgono del valore di R_α ottenuto da Alkhozov et al. (2002) [3].</i> 48
Tabella 12	Tavola di riepilogo delle energie risultanti dalle interpolazioni senza il termine correttivo di Dunham, E_{RV}^{th} , comprensive degli errori statistici. <i>L'asterisco in capo alle colonne a destra indica l'assenza della riga 3^- dal campione di dati impiegato per le corrispondenti interpolazioni non lineari. In fondo alla tabella sono presentati i valori dei momenti d'inerzia, I_x^e e I_z^e, delle frequenze di vibrazione ω_1 e ω_2.</i> 50
Tabella 13	Tavola di riepilogo delle energie risultanti dalle interpolazioni con termine correttivo di Dunham, E_{RVD}^{th} , comprensive degli errori statistici. <i>L'asterisco in capo alle colonne a destra indica l'assenza della riga 3^- dal campione di dati impiegato per le corrispondenti interpolazioni non lineari. In fondo alla tabella sono presentati i valori dei momenti d'inerzia, I_x^e e I_z^e, delle frequenze di vibrazione ω_1 e ω_2, e delle costanti di accoppiamento di Dunham y_{11}, divise per \hbar^2 (cfr. (198)).</i> 51
Tabella 14	Tavola dei caratteri delle proprietà di trasformazione degli operatori di multipolo elettrico intrinseci $\omega_{\lambda\mu}(E)$ con $\mu = 0, \pm 1, \dots, \pm \lambda$ e $\lambda \leq 6$ [26]. <i>Come si osserva, gli $\omega_{\lambda\mu}(E)$ possiedono proprietà di trasformazione molto diverse dei loro corrispettivi nel riferimento che non cancella i moti rotazionali, per le quali un'operazione di \mathcal{D}_{3h} comporta uno scambio di indici di particella nella sommatoria contenuta in $\hat{p}(\vec{r})$ oppure un cambiamento di segno di tutte le coordinate degli \vec{r}_i (irreps A_1' o A_1''). Inoltre, si può osservare come l'operatore di dipolo possieda le stesse proprietà di trasformazione delle coordinate ignorabili T_α, fatto che, come osserveremo nel prossimo paragrafo, non è privo di conseguenze.</i> 54
Tabella 15	Tavola delle probabilità ridotte di transizione di quadrupolo in assorbimento. 57
Tabella 16	Tavola delle probabilità ridotte di transizione di quadrupolo in emissione. 58
Tabella 17	Momenti di quadrupolo intrinseci. 60
Tabella 18	Tavola delle probabilità ridotte di transizione di ottupolo in assorbimento. 62
Tabella 19	Tavola delle probabilità ridotte di transizione di ottupolo in emissione. 62
Tabella 20	Tavola dei caratteri della rappresentazione riducibile delle coordinate di spostamento cartesiane. 67

- Tabella 21 Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle coordinate normali. *Si osservi che una delle coordinate normali, che denotiamo con Q_1 , corrisponde ad un modo di vibrazione nondegenere e trasforma sotto la rappresentazione completamente simmetrica A_{1g} ; la coppia di coordinate (Q_2, Q_3) corrisponde ad un modo doppiamente degenere che trasforma sotto la rappresentazione irriducibile E_g , mentre la terna Q_4, Q_5, Q_6 corrisponde ad un modo triplamente degenere e trasforma sotto l'irreps T_{2g} .* 67
- Tabella 22 Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali (con $n_2 \leq 12$). *Come per gli stati vibrazionali doppiamente degeneri del carbonio, emerge una periodicit  nella decomposizione della rappresentazione riducibile degli stati a numero di fononi n_2 fissato: partendo da $n_2 = 0$, che trasforma come A_{1g} , si ottengono i cinque livelli successivi aggiungendo alla $\Gamma(\Phi_0)$ in successione $E_g - A_{1g}$, A_{1g} , A_{2g} , $E_g - A_{2g}$ e A_{2g} , poi il ciclo riparte dall'inizio con A_{1g} , $E_g - A_{1g}$, A_{1g} etc. Si osservi, infine, l'introduzione di una notazione compatta per le somme dirette di rappresentazioni irriducibili in luogo di quella formale presentata in tab.(5), che verr  ripresa anche nelle tabelle successive.* 68
- Tabella 23 Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali del modo triplamente degenere (con $n_3 \leq 12$). 69
- Tabella 24 Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali con $n_2 + n_3 \leq 9$ e n_1 qualsiasi. 69
- Tabella 25 Caratteri degli stati rotazionali con $J \leq 10$ sotto le operazioni di O_h . *Come si osserva, il carattere gerade o ungerade delle irreps delle autofunzioni rotazionali rispecchia la parit  delle armoniche sferiche $(-1)^J$, ovvero   quando J   pari (risp. dispari), la corrispondente rappresentazione irriducibile di O_h   gerade (risp. ungerade).* 71
- Tabella 26 Caratteri degli stati rotazionali con $J \leq 10$ sotto le operazioni di O_h . *Come si osserva, il carattere gerade o ungerade delle irreps delle autofunzioni rotazionali non naturali rispecchia la parit  dei tensori pseudosferici $(-1)^{J+1}$, ovvero   dispari quando J   pari (risp. dispari), la corrispondente irreps di O_h   gerade (risp. ungerade).* 71
- Tabella 27 Regole di selezione degli stati. *E' presentato il numero di stati rotovibrazionali permessi n_α per l'isotopo ^{16}O in esame, determinato dai caratteri di simmetria delle funzioni d'onda ψ_R (fino a $J = 6$) e ψ_V con $n_2 + n_3 \leq 2$. Si noti che la molteplicit  di questi stati cresce con il numero di fononi di vibrazione $n_3 + n_2$ degli oscillatori armonici 2- e 3-dimensionali.* 72
- Tabella 28 Tavola delle energie delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 + n_3 \leq 1$ nell'approccio di particelle puntiformi. *Il valore estremamente piccolo degli errori sul momento d'inerzia I^e   diretta conseguenza della precisione con cui sono noti i valori sperimentali delle quattro righe impiegate per la stima dei parametri del modello, nonch  del contenuto errore sulla massa delle particelle α [1].* 74
- Tabella 29 Tavola riassuntiva dei livelli energetici inferiori a 30 MeV della banda rotazionale fondamentale e della banda eccitata A_{1g} nell'approccio di sfere soffici di raggio pari a quello di materia [3]. 76
- Tabella 30 Tavola riassuntiva dei livelli energetici inferiori a 30 MeV delle bande rotazionali E_g e T_{1g} nell'approccio di sfere soffici di raggio pari a quello di materia [3]. 77

FENOMENI DI CLUSTERING NEI NUCLEI

1.1 INTRODUZIONE STORICA

Sin dagli inizi della storia della fisica nucleare piccoli conglomerati di protoni e neutroni trovano impiego nella descrizione dei livelli eccitati di bassa energia e delle transizioni elettromagnetiche dei nuclei leggeri.

Il primo a dare importanza ai *cluster* di nucleoni, appena un lustro dopo la scoperta del neutrone (Chadwick, 1932) fu J.A. Wheeler che, adottando un punto di vista molecolare, formulò un metodo alternativo a quello di Hartree-Fock per la costruzione delle funzioni d'onda nucleari microscopiche, utile per il calcolo variazionale delle eccitazioni di bassa energia di nuclei leggeri nonché per la stima della loro energia di legame, il cosiddetto *Resonating Group Structure Method*¹ [58].

Secondo questa descrizione, la materia nucleare è distribuita in gruppi di protoni e neutroni di composizione variabile nel tempo, a causa della continua interazione fra di essi, ripartizione che si riflette nella struttura delle autofunzioni microscopiche del sistema, ora date dalla sovrapposizione di più funzioni d'onda parziali opportunamente antisimmetrizzate per lo scambio di protoni e neutroni, rappresentanti le configurazioni a cluster *stabili* accessibili dal sistema.

A suffragio teorico di questa descrizione è senz'altro la già nota proprietà di saturazione delle forze nucleari, secondo cui un singolo costituente è legato all'intero nucleo non più di quanto lo è ai suoi primi vicini, che favorisce la ripartizione della materia nucleare in piccoli aggregati stabili di protoni e neutroni. Nonostante gran parte dell'energia di legame $BE(N, Z)$ dell'intero nucleo sia immagazzinata dai singoli raggruppamenti, una sua residua frazione è responsabile del legame fra gli aggregati, che interagiscono fra loro scambiando fra loro protoni o neutroni.

In un'interpretazione rotovibrazionale dei moti dei cluster, se il tempo impiegato da un nucleone per diffondersi attraverso due parti del nucleo vibranti in opposizione di fase è grande rispetto al periodo della vibrazione, allora le particelle nel nucleo possono essere suddivise in gruppi che preservano la loro identità abbastanza a lungo da rendere possibile una descrizione semplificata dei moti nucleari in termini degli spostamenti relativi di questi aggregati. Questo è quanto soggiace al modello nucleare macroscopico che tratteremo in questa dissertazione, volto a descrivere una particolare classe di nuclei, detti α -coniugati, attraverso i soli ${}^4\text{He}$ posti ai vertici di strutture cristalline ordinate, presentato anch'esso per la prima volta da J.A. Wheeler nel suo *Molecular Viewpoints in Nuclear Structure* [59].

All'origine della scelta della particella α come unità privilegiata per la descrizione di questa classe di nuclei vi è la sua stabilità, conferitagli dalla natura attrattiva delle forze agenti fra nucleoni distinti di spin parallelo e fra nucleoni identici di spin opposto, nonché l'eisgenza di operare una selezione sul numero delle possibili configurazioni a cluster inequivalenti, utile nella trattazione dei nuclei più complessi [59].

Appena un anno più tardi, R.L. Hafstad ed E. Teller [29], avvalendosi della descrizione proposta da Wheeler, rivelarono la linearità dell'andamento dell'energia di legame $BE(Z, N)$ rispetto al numero di legami fra particelle α all'interno delle strutture ordinate nei nuclei ${}^4\text{He}$, ${}^8\text{Be}$, ${}^{12}\text{C}$, ${}^{16}\text{O}$, ${}^{20}\text{Ne}$, ${}^{24}\text{Mg}$, ${}^{28}\text{Si}$ e ${}^{32}\text{S}$, nuclidi per i quali l'energia di legame raggiunge valori massimali. Furono gli stessi Hafstad e Teller in *The α particle model of the nucleus* ad osservare che, al crescere del numero di nucleoni, il mo-

¹ In alcuni articoli, tale modello viene abbreviato l'acronimo di RGM.

dello macroscopico introdotto da Wheeler perde efficacia, dal momento che ciascuna delle particelle α vedrebbe aumentare il numero di prime vicine e con esse la probabilità di scambiare un nucleone, rompendo la simmetria della configurazione. In tal modo, risulterebbe spiegato il diverso comportamento dell'energia per i nuclei leggeri rispetto a quelli pesanti: mentre nei primi il completamento di una particella α comporta il raggiungimento di un massimo locale nell'energia di legame, nei secondi questo fatto diviene energeticamente irrilevante [29].

Il modello macroscopico introdotto da Wheeler, in seguito, si rivelò adatto alla descrizione dell' ^8Be e, in subordine, degli stati vibrazionali eccitati del ^{12}C [27] e del ^{16}O [38], mentre risultò meno efficace per gli stati fondamentali dei nuclei $4n$ autoconjugati stabili, ove la struttura a cluster è maggiormente impaccata e le particelle α si trovano sovrapposte.

L'idea che la struttura a cluster non sia manifesta sin dallo stato fondamentale ma emerga al crescere

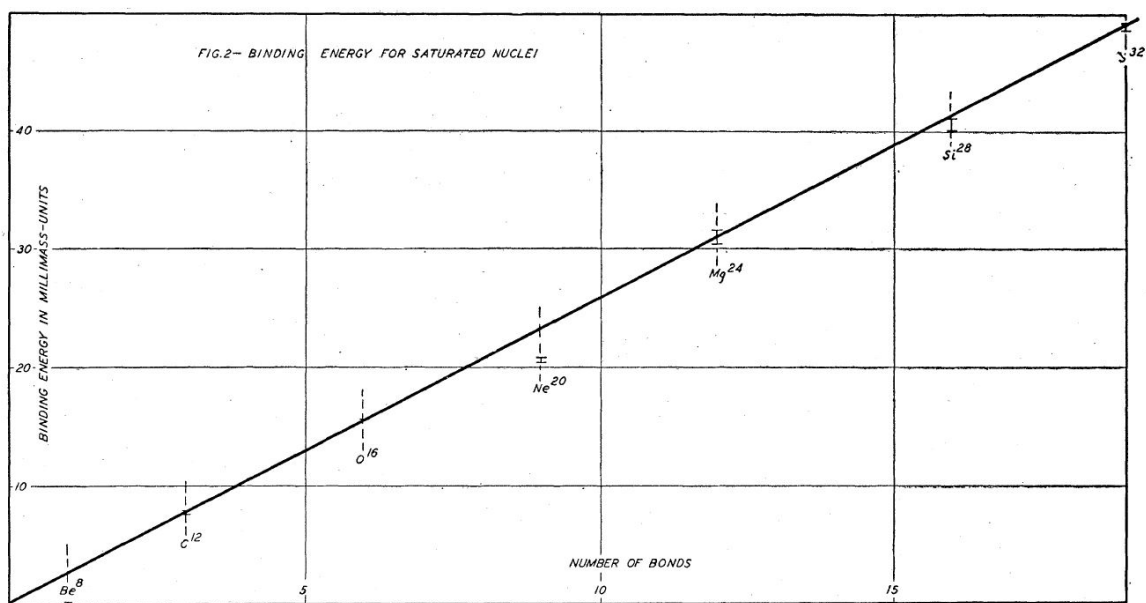


Figura 1: Andamento dell'energia di legame $BE(N, Z)$ in funzione del numero di legami fra particelle α nel modello macroscopico di Wheeler [29].

dell'energia interna del sistema è alla base della rappresentazione diagrammatica proposta da K. Ikeda, N. Takigawa e H. Horiuchi [35] per i nuclei α -conjugati ^{12}C , ^{16}O , ^{20}Ne , ^{24}Mg e ^{28}Si che associa la comparsa della prima alle energie di soglia per il decadimento del dato nuclide nei conglomerati di nucleoni che lo costituiscono. Seguendo lo schema formulato da Morinaga [44] per il ^{12}C , K. Ikeda et al. in *The systematic structure changes into the molecule-like structures in the $4n$ self-conjugate nuclei* [35] asserirono che la configurazione a cluster più adatta a preservare la sua struttura interna fosse quella a catena lineare, concludendo che la ripartizione completa del nucleo α -conjugato con $Z \geq 8$ in particelle α fosse preceduta in energia da suddivisioni parziali, ove almeno uno dei cluster fosse rappresentato da un nucleo α -conjugato di massa uguale o superiore a quella del ^{12}C . In particolare, quando la configurazione lineare è assimilabile ad una molecola diatmica eteropolare, ovvero è priva di simmetria di riflessione, tali bande risultano sdoppiate: pur condividendo la proiezione del momento angolare $K = 0$ lungo l'asse z intrinseco, le due serie si differenziano per la parità degli stati e per una eventuale *gap* ΔE_0 fra i livelli energetici di origine E_0 . La forma degli autovalori energetici corrispondenti ai livelli di queste bande è, pertanto, data da

$$E_{\pm}(I) = E_0 \mp \frac{\Delta E_0}{2} + \frac{\hbar^2}{2\mathcal{I}_{\pm}} I(I+1) \quad (1)$$

ove \mathcal{I}_{\pm} sono i momenti d'inerzia del sistema nelle due bande e I è il numero quantico di momento angolare. Avvalendosi delle relazioni (1), Ikeda et al. [35] analizzarono i livelli energetici allora conosciuti

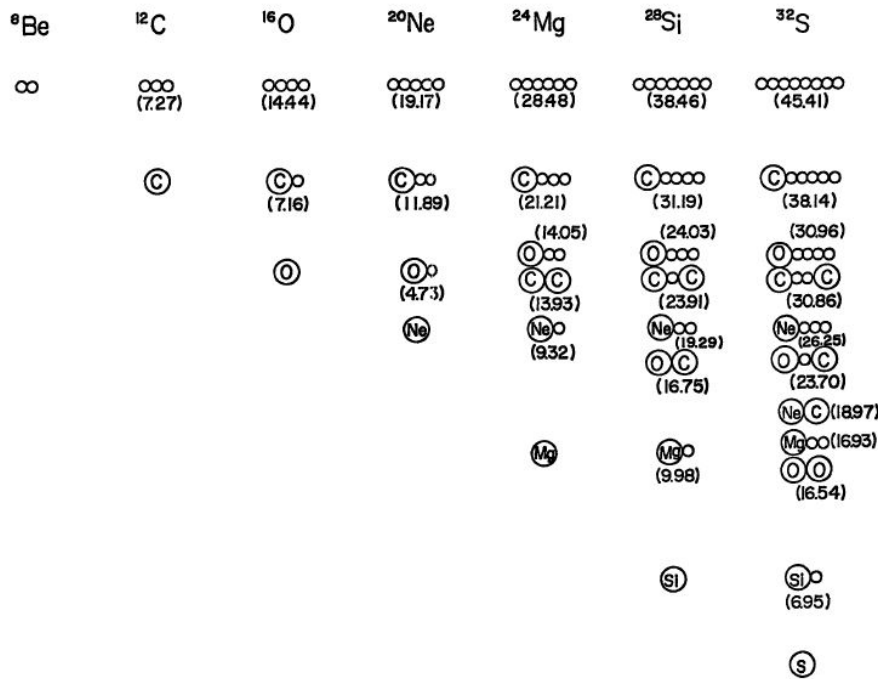


Figura 2: Il Diagramma di Ikeda, in una versione del 1980 [36]. Come si osserva, il ^{12}C possiede un'unica configurazione a cluster lineare in prossimità della soglia di decadimento a 3α a 7,28 MeV, mentre il ^{16}O ne ha 2, una catena 4α lineare a 14,44 MeV e una diatomica $\alpha+^{12}\text{C}$ a 7,16 MeV, invece il ^{20}Ne ne ha 4, una lineare 5α a 19,96 MeV, le diatomiche $\alpha+^{12}\text{C} + \alpha$ e $2\alpha+^{12}\text{C}$ a 11,89 MeV e una $\alpha+^{16}\text{O}$ a 4,73 MeV, et c.

della banda a parità positiva (risp. negativa) a 6,06 MeV (risp. 9,58 MeV) dallo stato fondamentale 0^+ (risp. dallo stato eccitato 1^-) del ^{16}O ($\alpha+^{12}\text{C}$) e la banda 0^- a 5,8 MeV dallo stato 1^- del ^{20}Ne ($\alpha+^{16}\text{O}$). Coevo al diagramma d'Ikeda è anche il *Generator Coordinate Method* [11], sviluppato indipendentemente da D.M. Brink nel 1966 per la descrizione dei moti collettivi dei nuclei leggeri. Questa descrizione prevede la costruzione di una funzione d'onda microscopica attraverso il determinante di Slater di funzioni d'onda orbitali e di spin, dipendente dalle coordinate dei nucleoni contenuti e da opportuni parametri ausiliari, detti *coordinate generatrici*, che sono funzione delle coordinate spaziali dei cluster in cui il sistema è ripartito. Il passaggio cruciale consiste nella scrittura della funzione d'onda siffatta all'interno di un integrale nello spazio delle coordinate generatrici, insieme ad una funzione di peso incognita ², operazione che permette, in seguito, di costruire autofunzioni approssimate del sistema, aventi parità e momento angolare definiti [11]. La determinazione della forma della funzione di peso e, dunque della funzione d'onda microscopica integrata sui parametri ausiliari può seguire dalla risoluzione dell'equazione integrale di Hill-Wheeler³, che si ottiene applicando il principio variazionale per la ricerca dei valori di aspettazione dell'energia.

Il procedimento appena delineato, seppure nella sua forma discretizzata, ha permesso a E. Uegaki et al. (1979) [55] di stimare le autoenergie dei livelli rotovibrazionali del ^{12}C , impegnando nella definizione della funzione d'onda microscopica *sommata* numerose configurazioni α -cluster di forma triangolare equilatera, isoscele e scalena e adottando un potenziale d'interazione nucleone-nucleone di tipo Volkov n° 1.

Inoltre, è importante sottolineare che, fra il GCM di D.M. Brink e l'RGM di J.A. Wheeler, sussiste una relazione di equivalenza che fu messa in evidenza per la prima volta da H.Horiuchi [32].

Alternativo al modello di Brink è l'*Orthogonality Condition Model* (OCM), presentato da S.Saito nel 1969 [47] come approssimazione del *Resonating Group Structure Method* per la costruzione di funzioni d'onda

² In una forma approssimata del modello, l'integrale sulle coordinate generatrici è sostituito da una somma.

³ ove l'integrazione s'intende ancora svolta sulle coordinate generatrici

a cluster microscopiche, con la corretta simmetria di scambio. Il principale proposito di questo modello è la riproduzione dell'andamento oscillatorio della funzione d'onda relativa nello scattering fra due particelle α . In particolare, il modello trae origine dall'osservazione che la posizione del punto nodale più esterno della funzione d'onda, corrispondente al *core strutturale* della particella α , è pressochè indipendente dall'energia del nucleo di ${}^4\text{He}$ incidente. Nel suo *Interaction between clusters and Pauli Principle*, S. Saito dimostrò come tale andamento potesse essere ben riprodotto ricorrendo a un potenziale efficace e imponendo la condizione di ortonormalità fra la funzione d'onda relativa e quella proibita. Queste ultime sono autofunzioni *inter-cluster*, la cui presenza dà luogo allo stato nullo quando la funzione d'onda macroscopica del sistema viene antisimmetrizzata [48].

Il procedimento proposto da S. Saito trovò impiego negli anni successivi nello studio degli stati eccitati a due cluster (cfr. fig. 2) come quelli di tipo ${}^{12}\text{C} + \alpha$ del ${}^{16}\text{O}$ [51] e il ${}^{16}\text{O} + \alpha$ del ${}^{20}\text{Ne}$ [43], oppure nel problema a tre particelle α , il ${}^{12}\text{C}$ [31].

Concludiamo l'introduzione con la presentazione del modello algebrico per i nuclei α -coniugati di R. Bijker e F. Iachello (1999) [5], i cui principali risultati verranno confrontati in più occasioni con quelli ottenuti nell'ambito del modello prescelto. Questo modello prevede l'impiego delle algebre dei gruppi unitari $U(\nu + 1)$ come *spectrum generating algebras* per la descrizione dei moti roto-vibrazionali dei cluster all'interno dei nuclei α -coniugati a $\nu = 3(n - 1)$ gradi di libertà. In particolare, se n è il numero di cluster identici in cui i nucleoni sono ripartiti, per la descrizione del sistema occorreranno $n - 1$ coordinate di Jacobi, la cui quantizzazione porterà alla definizione di $n - 1$ coppie di operatori vettoriali di seconda quantizzazione,

$$\hat{b}_{j\mu}^\dagger, \hat{b}_{j\mu} \quad \text{con } j = 1, 2, \dots, n - 1 \text{ e } \mu = 0, \pm 1. \quad (2)$$

Al grado di libertà ausiliario corrisponderà, invece, l'operatore bosonico scalare di creazione \hat{s}^\dagger (o di distruzione, \hat{s}). Sono proprio i prodotti bilineari fra gli operatori di creazione e distruzione appena introdotti a dare origine all'algebra $U(3n - 2)$ cui faranno capo tutti gli operatori di interesse nel modello, dall'Hamiltoniana, invariante sotto parità e sotto il gruppo delle permutazioni di n elementi, S_n , a quelli di transizione elettromagnetica.

Pur trattandosi di un modello macroscopico, la flessibilità della cornice teorica permette di trattare, estendendo l'algebra a $U(\Omega) \otimes U(\nu + 1)$, anche gli Ω gradi di libertà interni delle particelle con struttura (come i nuclei di ${}^4\text{He}$) o, con opportune modifiche, di introdurre cluster di tipo diverso.

 IL PROBLEMA NUCLEARE A MOLTI CORPI NELL'APPROCCIO MOLECOLARE

Nel capitolo precedente abbiamo ripercorso il cammino storico che ha portato alla formulazione dei principali modelli nucleari a cluster oggi studiati, da quelli macroscopici per i nuclei α -coniugati (detti anche modelli α -cluster) come quello algebrico di Bijker e Iachello [5] fino a quelli microscopici come il *Resonating Group Structure Method* [59][58] e l'*Orthogonality Condition Model* [47], con un campo di applicazione esteso a tutti i nuclidi della Carta di Segrè. Concentriamo, ora, l'attenzione sul primo modello macroscopico α -cluster, formulato da Wheeler [59], Hafstad e Teller [29] e poi ripreso da Glassgold e Galonski [27], partendo dalla descrizione di un sistema di N masse puntiformi rotovibranti ai vertici di una struttura ordinata, che costituisce un terreno ideale per far emergere le simmetrie discrete determinanti per la costruzione degli autostati dell'hamiltoniana dell'analogo sistema quantistico formato da particelle α .

2.1 IL SISTEMA CLASSICO

Come accennato nel preambolo, l'analogo classico dell'arrangiamento reticolare di particelle α rotovibranti proposto da Wheeler è un sistema di N masse puntiformi identiche collocate all'equilibrio ai vertici di un poligono o di un poliedro regolare e connesse da $N(N-1)/2$ molle identiche. Se $\vec{X}_1, \vec{X}_2, \dots, \vec{X}_N$ sono le coordinate dei centri di massa di tali particelle nel sistema di riferimento del laboratorio, introduciamo la terna di assi cartesiani posizionata nel centro di massa, di coordinate

$$\vec{R}_{CM} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \vec{X}_i = X_{CM}\hat{e}_X + Y_{CM}\hat{e}_Y + Z_{CM}\hat{e}_Z : \quad (3)$$

in tale riferimento la particella α iesima avrà coordinate

$$\xi_i = X_{ix} - R_{CMx} \quad \eta_i = X_{iy} - R_{CMY} \quad \zeta_i = X_{iz} - R_{CMz}. \quad (4)$$

Accanto alla terna con origine nel centro di massa a riposo rispetto al laboratorio, rimane da introdurre il sistema di riferimento più adatto allo studio delle vibrazioni, cioè quello solidale al nucleo rotante avente base in $(\hat{e}_x, \hat{e}_y, \hat{e}_z)$ e collegato alla terna a riposo tramite una rotazione degli assi, denotata dai tre angoli di Eulero dipendenti dal tempo, (θ, χ, ϕ) . Dette $\vec{r}_i = x_i\hat{e}_x + y_i\hat{e}_y + z_i\hat{e}_z$ e $\vec{r}_i^e = x_i^e\hat{e}_x + y_i^e\hat{e}_y + z_i^e\hat{e}_z$ rispettivamente le posizioni istantanee e all'equilibrio delle particelle α , lo scostamento dei nuclei di elio dall'equilibrio è dato da

$$\Delta\vec{r}_i = \Delta x_i\hat{e}_x + \Delta y_i\hat{e}_y + \Delta z_i\hat{e}_z, \quad (5)$$

Derivando, allora, il raggio vettore della particella i -esima rispetto al laboratorio,

$$\vec{v}_i \equiv \dot{\vec{X}}_i = \dot{\vec{R}}_{CM} + \Delta\dot{\vec{r}}_i + \dot{\vec{r}}_i^e = \dot{\vec{R}}_{CM} + \vec{\omega} \times \vec{r}_i + \vec{u}_i, \quad (6)$$

ove $\vec{u}_i = \Delta\dot{x}_i\hat{e}_x + \Delta\dot{y}_i\hat{e}_y + \Delta\dot{z}_i\hat{e}_z$ è la velocità della particella α i -esima nella terna rotante e

$$\omega_x = -\dot{\phi} \sin(\theta) \cos(\chi) + \dot{\theta} \sin(\chi), \quad \omega_y = \dot{\phi} \sin(\theta) \sin(\chi) + \dot{\theta} \cos(\chi) \quad e \quad \omega_z = \dot{\phi} \cos(\theta) + \dot{\chi} \quad (7)$$

sono le componenti della velocità angolare rispetto alla terna rotante. Quadrando e sommando le v_i^2 in (7) si ottiene l'energia cinetica del sistema,

$$T = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \vec{v}_i^2 = \frac{Nm}{2} \dot{R}_{CM}^2 + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \vec{u}_i^2 + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N (\vec{\omega} \times \vec{r}_i)^2 + m \vec{R}_{CM} \cdot \left(\vec{\omega} \times \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \right) \quad (8)$$

$$+ m \vec{R}_C M \cdot \sum_{i=1}^N \vec{u}_i + m \vec{\omega} \cdot \left(\sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times \vec{u}_i \right),$$

ove m è la massa di una particella α . Dalla definizione della terna in rotazione con il sistema di particelle, avente origine nel centro di massa del sistema, segue

$$m \sum_{i=1}^N \vec{r}_i = 0 \quad \text{e} \quad m \sum_{i=1}^N \vec{r}_i^e = 0, \quad (9)$$

condizioni che permettono una prima semplificazione del termine cinetico (9),

$$T = \frac{Nm}{2} \dot{R}_{CM}^2 + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \vec{u}_i^2 + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N (\vec{\omega} \times \vec{r}_i)^2 + m \vec{\omega} \cdot \left(\sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times \vec{u}_i \right). \quad (10)$$

Ora, tramite la definizione di tensore d'inerzia del sistema $I_{\alpha\beta} = \sum_{i=1}^N m(\delta_{\alpha\beta} r_i^2 - r_{i,\alpha} r_{i,\beta})$ con $\alpha, \beta = x, y, z$, il terzo termine a secondo membro della (10) può essere riscritto in

$$\frac{m}{2} \sum_{i=1}^N (\vec{\omega} \times \vec{r}_i)^2 = \sum_{i=1}^N m[\vec{\omega}^2 r_i^2 - (\vec{\omega} \cdot \vec{r}_i)^2] = \sum_{i=1}^N m[\omega_x^2 (y_i^2 + z_i^2) + \omega_y^2 (x_i^2 + z_i^2) \quad (11)$$

$$+ \omega_z^2 (x_i^2 + y_i^2) - 2\omega_x \omega_y x_i y_i - 2\omega_x \omega_z x_i z_i - 2\omega_y \omega_z y_i z_i] = \vec{\omega} \cdot \mathbf{I} \vec{\omega},$$

che unito agli altri termini della (10), porta ad una ulteriore semplificazione di T ,

$$T = \frac{Nm}{2} \dot{R}_{CM}^2 + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^N \vec{u}_i^2 + \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \mathbf{I} \vec{\omega} + m \vec{\omega} \cdot \left(\sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times \vec{u}_i \right). \quad (12)$$

Ricordando che la scelta dell'orientazione della terna rotante rispetto alle particelle α è arbitraria, e osservando che il quarto termine della energia cinetica (12) contiene il prodotto scalare fra la velocità angolare e il momento angolare di vibrazione, $J_V \equiv \sum_{i=1}^N \vec{r}_i \times m \vec{u}_i = \sum_{i=1}^N \vec{r}_i^e \times m \vec{u}_i + \sum_{i=1}^N \Delta \vec{r}_i \times m \vec{u}_i$, possiamo scegliere questo sistema di riferimento in modo tale che valgano le cosiddette *condizioni di Eckart* [10],

$$\sum_{i=1}^N m \vec{r}_i^e \times \vec{r}_i = 0. \quad (13)$$

Differenziando la (13) rispetto al tempo, si trova che il quarto termine a secondo membro della (12) si cancella,

$$0 = \frac{d}{dt} \left(\sum_{i=1}^N m \vec{r}_i^e \times \vec{r}_i \right) = \sum_{i=1}^N m (\vec{\omega} \times \vec{r}_i^e) \times \vec{r}_i + \sum_{i=1}^N m \vec{r}_i^e \times (\vec{\omega} \times \vec{r}_i) + \sum_{i=1}^N m \vec{r}_i^e \times \vec{u}_i = \sum_{i=1}^N m \vec{r}_i^e \times \vec{u}_i. \quad (14)$$

Considerando un potenziale quadratico nelle componenti delle coordinate cartesiane di vibrazione Δr_i con $i = 1, 2, \dots, 3N$ come quello che descrive un sistema di masse e molle ideali e la nostra scelta della terna rotante (13), l'energia classica totale assume la forma:

$$E_N = T + V = \frac{Nm}{2} \dot{R}_{CM}^2 + \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{3N} \Delta \dot{r}_i^2 + \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \mathbf{I} \vec{\omega} + m \vec{\omega} \cdot \left(\sum_{i=1}^N \Delta \vec{r}_i \times \vec{u}_i \right) + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} k_{ij} \Delta r_i \Delta r_j, \quad (15)$$

che consta rispettivamente di un termine cinetico del centro di massa (che d'ora in avanti trascureremo), un termine cinetico di vibrazione, riscritto esplicitando le \vec{u}_i , un termine cinetico rotazionale, un

termine di accoppiamento rotovibrazionale (o di Coriolis) e un potenziale armonico caratterizzato da una matrice \mathbf{K} reale e simmetrica. Per procedere oltre, sarà necessario cercare una trasformazione di coordinate in grado di diagonalizzare questa forma quadratica ottenendo l'hamiltoniana vibrazionale di $3N - 6$ oscillatori armonici disaccoppiati: tali coordinate si ritagliano un ruolo particolare nella descrizione di questo sistema fisico e prendono il nome di *coordinate normali di vibrazione*.

2.2 COORDINATE NORMALI DI VIBRAZIONE

Un passo decisivo verso lo studio della hamiltoniana classica del sistema è compiuto grazie alle coordinate normali, di cui si è appena accennato. Prima di giungervi però, operiamo una trasformazione lineare di coordinate $\Delta r_i \rightarrow S_i$ volta a isolare le coordinate ridondanti dai termini cinetico e potenziale vibrazionali, ovvero il secondo e il quinto termine a terzo membro della (15): tali coordinate corrispondono a tre modi di *traslazione*,

$$T_\alpha = \sqrt{Nm} \sum_{i=1}^N m \Delta \alpha_i \quad \alpha = x, y, z \quad (16)$$

e tre ¹ modi di *rotazione*²,

$$R_\alpha = \sqrt{I_{\alpha\alpha}^e} \sum_{i=1}^N \sum_{\beta, \gamma=x,y,z} m \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \beta_i^e \Delta \gamma_i \quad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z, \quad (17)$$

cui corrispondono frequenze di vibrazione nulle. Facendo coincidere l'origine della terna d'assi intrinseca con il centro di massa del sistema di particelle α ,

$$\sum_{i=1}^N \vec{r}_i = 0 \quad (18)$$

e orientando i suoi assi secondo le condizioni di Eckart (13), le sei coordinate spurie (16)-(17) si annullano identicamente, $T_x = T_y = T_z = R_x = R_y = R_z = 0$. Indicando con $(S_{3N-5}, S_{3N-4}, \dots, S_{3N}) \equiv (T_x, T_y, T_z, R_x, R_y, R_z)$ le coordinate ignorabili, completiamo questa trasformazione in modo tale che \mathcal{B}^3 , la matrice che la realizza, sia un elemento di $O(3N)^4$, cioè tale da preservare il prodotto scalare $3N$ -dimensionale. Dall'energia totale del sistema E_N preleviamo termine cinetico e potenziale relativi alle vibrazioni e costruiamo una lagrangiana *ad hoc* nelle nuove coordinate S_i, \dot{S}_i ,

$$\mathcal{L}(S_i, \dot{S}_i) = T - V = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{3N-6} \dot{S}_i^2 - \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N-6} k'_{ij} S_i S_j, \quad (19)$$

allo scopo di illustrare meglio l'origine e il significato delle coordinate normali. Una volta terminata la loro derivazione, torneremo al sistema di energia totale (15). Ora, cancellate le coordinate spurie, procediamo con la definizione delle nuove coordinate. Il tratto caratterizzante delle coordinate che stiamo per introdurre è quello di essere tali da diagonalizzare la matrice di potenziale \mathbf{K}' di elementi k'_{ij} , decomponendo la lagrangiana vibrazionale (19) in $3N - 6$ hamiltoniane indipendenti. Le equazioni del moto della (19),

$$\frac{d}{dt} \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{S}_i} (S_k, \dot{S}_k) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial S_i} (S_k, \dot{S}_k) \quad i, k = 1, 2, \dots, 3N - 6 \quad (20)$$

¹ Nel caso di arrangiamenti lineari di particelle, il numero di modi rotazionali scende a due.

² Si noti che nella (17) è stato definito il tensore completamente antisimmetrico di Levi-Civita con la convenzione $\epsilon_{\alpha\beta\gamma} = 1$.

³ di elementi b_{ij} , ove $i, j = 1, 2, \dots, 3N$

⁴ Un metodo pratico per completare la trasformazione è quello di scegliere *coordinate interne*, ovvero che determinano la posizione delle particelle rispetto alla terna mobile in funzione di angoli e distanze radiali.

sono, allora,

$$m\ddot{S}_i + \sum_{j=1}^{3N-6} k'_{ij} S_j = 0 \quad i = 1, 2, \dots, 3N-6. \quad (21)$$

Una soluzione di queste equazioni è data da $S_i = A_i \cos(\sqrt{\lambda}t + b)$ che, sostituita nelle (21), porge

$$\sum_{j=1}^{3N} (k'_{ji} - m\delta_{ji}\lambda) A_j = 0 \quad i = 1, 2, \dots, 3N-6. \quad (22)$$

Affinchè queste $3N-6$ equazioni nelle ampiezze A_i abbiano soluzione non triviale, la matrice di elementi $k'_{ji} - m\delta_{ji}$ deve avere determinante nullo, ovvero le λ devono essere le $3N-6$ radici dell'equazione secolare,

$$\begin{vmatrix} k'_{11} - m\lambda & k'_{12} & \dots & k'_{1,3N-6} \\ k'_{21} & k'_{22} - m\lambda & \dots & k'_{2,3N-6} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ k'_{3N-6,1} & k'_{3N-6,2} & \dots & k'_{3N-6,3N-6} - m\lambda \end{vmatrix} = 0, \quad (23)$$

che sono tutte diverse da zero. Fissata una radice λ_k , si trova un insieme di soluzioni $\{A_i\}$ ove $i = 1, 2, \dots, 3N-6$ che denoteremo con $\{A_{ik}\}$ ove $i = 1, 2, \dots, 3N-6$: poichè tale insieme non è univocamente determinato⁵, ci uniformiamo alla convenzione

$$c_{ik} \equiv \frac{A_{ik}}{\left[\sum_{i=1}^{3N-6} A_{ik}^2 \right]} \quad \text{con} \quad \sum_{i=1}^{3N-6} c_{ik}^2 = 1. \quad (24)$$

Con le ampiezze c_{ik} normalizzate, abbiamo completato la trasformazione ortogonale delle coordinate S_i in coordinate normali di vibrazione Q_i legate alle precedenti dalla relazione⁶

$$\sqrt{m}S_i = \sum_{j=1}^{3N-6} c_{ij} Q_j, \quad (25)$$

e la lagrangiana vibrazionale (19) ha assunto la forma attesa,

$$\mathcal{L}(Q_k, \dot{Q}_k) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N-6} \dot{Q}_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{3N-6} \lambda_i Q_i^2, \quad (26)$$

dove le coppie (λ_i, Q_i) designano i modi normali di vibrazione. Ritorniamo, ora, all'energia totale del sistema in analisi (15) privata del termine cinetico del centro di massa e riscriviamola con la nuova notazione introdotta nelle (16)-(17) per facilitare il passaggio alle coordinate normali,

$$E_N = \frac{m}{2} \sum_{i=1}^{3N} \Delta r_i^2 + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{3N} k_{ij} \Delta r_i \Delta r_j + m\vec{\omega} \cdot \left(\sum_{i=1}^N \Delta \vec{r}_i \times \vec{u}_i \right) + \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \mathbf{I}\vec{\omega} = \frac{m}{2} \sum_{\alpha=x,y,z} \sum_{i=1}^N \Delta \alpha_i^2 \quad (27)$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta=x,y,z} \sum_{i,j=1}^N k_{\alpha i, \beta j} \Delta \alpha_i \Delta \beta_j + \sum_{\alpha,\beta,\gamma=x,y,z} \omega_\gamma \epsilon_{\gamma\alpha\beta} \sum_{i=1}^N m \Delta \alpha_i \Delta \beta_i + \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \mathbf{I}\vec{\omega}. \quad (28)$$

In tale notazione, le sommatorie sulle coordinate di spostamento Δr_i con $i = 1, 2, \dots, 3N$ sono state sostituite da una sommatoria con indici greci (α, β, γ e δ) sulle componenti x, y e z e da una sommatoria con indici latini da 1, 2.. a N sulle particelle α . Estendendo per somma diretta dell'identità la matrice \mathcal{C} (cfr. (24)-(25)), ovvero $\mathcal{C}' \equiv \mathcal{C} \oplus \mathbb{1}_{6 \times 6}$, possiamo esprimere le due trasformazioni di coordinate appena

⁵ Le equazioni indipendenti nelle A_i (22) sono scese a $3N-5$ a causa dell'aggiunta dell'equazione secolare (23).

⁶ L'ortogonalità della trasformazione siffatta è assicurata dal teorema spettrale reale.

effettuate attraverso una unica trasformazione ortogonale prodotto delle due, di elementi di matrice $l_{\alpha i, j}$, ovvero

$$\sqrt{m}\Delta\alpha_i = \sum_{k,j=i}^{3N-6} b_{\alpha i, k} c_{k, j} Q_j + \sum_{k,j=3N-5}^{3N} b_{\alpha i, k} \delta_{k, j} S_j \equiv \sum_{j=i}^{3N} l_{\alpha i, j} Q_j = \sum_{j=i}^{3N-6} l_{\alpha i, j} Q_j \quad (29)$$

ove abbiamo esteso la definizione delle Q_i finali alle coordinate spurie, $(S_{3N-5}, S_{3N-4}, \dots, S_{3N}) = (T_x, T_y, T_z, R_x, R_y, R_z) \equiv (Q_{3N-5}, Q_{3N-4}, \dots, Q_{3N})$, dal momento che rimangono inalterate dalla seconda trasformazione. Possiamo, ora, proeguire con la trasformazione nelle nuove coordinate normali dell'energia totale (15): poichè i termini vibrazionali sono già stati affrontati nello studio della lagrangiana $\mathcal{L}(S_i, \dot{S}_i)$, il prossimo passo da compiere è la trasformazione del termine di Coriolis, ovvero

$$\begin{aligned} & \sum_{\alpha, \beta, \gamma=x, y, z} \omega_\gamma \epsilon_{\gamma\alpha\beta} \sum_{i=1}^N m \Delta\alpha_i \Delta\dot{\beta}_i = \sum_{\alpha, \beta, \gamma=x, y, z} \omega_\gamma \epsilon_{\gamma\alpha\beta} \sum_{i=1}^N \sum_{j, k=1}^{3N-6} l_{\alpha i, j} Q_j l_{\beta i, k} \dot{Q}_k = \\ & = \sum_{\gamma=x, y, z} \omega_\gamma \sum_{j, k=1}^{3N-6} Q_j \dot{Q}_k \sum_{\alpha, \beta=x, y, z} \epsilon_{\gamma\alpha\beta} \sum_{i=1}^N l_{\alpha i, j} l_{\beta i, k} \equiv \sum_{\gamma=x, y, z} \omega_\gamma \sum_{j, k=1}^{3N-6} \zeta_{j, k}^\gamma Q_j \dot{Q}_k. \end{aligned} \quad (30)$$

Otteniamo così i nuovi termini cinetico e potenziale del sistema nelle coordinate normali,

$$T = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} \dot{Q}_j^2 + \sum_{\gamma=x, y, z} \sum_{j, k=1}^{3N-6} \zeta_{j, k}^\gamma Q_j \dot{Q}_k + \frac{1}{2} \vec{\omega} \cdot \mathbf{I} \vec{\omega} \quad V = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} \lambda_j Q_j^2. \quad (31)$$

2.3 L'HAMILTONIANA CLASSICA

A partire dai termini cinetici e di potenziale nelle coordinate normali (31), scriveremo la hamiltoniana classica del sistema di particelle α in analisi, passaggio che si completa solo dopo l'individuazione delle coordinate generalizzate e di opportuni momenti coniugati. Definiamo, innanzitutto, i momenti P_k associati alle $3N - 6$ coordinate normali Q_k e il momento angolare \vec{J} del sistema,

$$P_k = \frac{\partial T}{\partial \dot{Q}_k} = \dot{Q}_k + \sum_{\gamma} \omega_\gamma \sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j, k}^\gamma Q_j \quad J_\alpha = \frac{\partial T}{\partial \omega_\alpha} = \sum_{\beta} I_{\alpha, \beta} \omega_\beta + \sum_{j, k=1}^{3N-6} \zeta_{j, k}^\alpha Q_j \dot{Q}_k. \quad (32)$$

Detto, allora, \vec{p} il momento angolare vibrazionale, di componenti

$$p_\alpha = \sum_{j, k=1}^{3N-6} \zeta_{j, k}^\alpha Q_j P_k, \quad (33)$$

otteniamo una nuova espressione per l'energia cinetica,

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} (J_\alpha - p_\alpha) \omega_\alpha + \sum_{j=1}^{3N-6} P_j^2. \quad (34)$$

Introduciamo, ora, una matrice μ allo scopo di cancellare le componenti della velocità angolare nella (34), definita nel modo seguente,

$$J_\alpha - p_\alpha = \sum_{\beta} \left[I_{\alpha\beta} \omega_\beta - \omega_\beta \sum_{k=1}^{3N-6} \left(\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j, k}^\alpha Q_j \sum_{l=1}^{3N-6} \zeta_{l, k}^\beta Q_l \right) \right] \equiv \sum_{\beta} \omega_\beta \mu_{\alpha\beta}^{-1}. \quad (35)$$

Invertendo la (35) in $\omega_\alpha = \sum_{\beta} \mu_{\alpha\beta} (J_\beta - p_\beta)$ ricaviamo il nuovo termine cinetico,

$$T = \frac{1}{2} \sum_{\alpha, \beta} (J_\alpha - p_\alpha) \mu_{\alpha\beta} (J_\beta - p_\beta) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} P_j^2. \quad (36)$$

Abbiamo così ottenuto un termine cinetico funzione di $3N - 3$ coordinate generalizzate di cui $3N - 6$ coordinate normali Q_i e 3 angoli di Eulero (θ, χ, ϕ) e $3N-6$ momenti coniugati alle coordinate normali, P_k . Rimangono da determinare i tre momenti coniugati alle tre coordinate angolari, detti rispettivamente $(P_\theta = \frac{\partial T}{\partial \dot{\theta}}, P_\chi = \frac{\partial T}{\partial \dot{\chi}}, P_\phi = \frac{\partial T}{\partial \dot{\phi}})$. A tale scopo si può procedere sfruttando la dipendenza delle componenti del momento angolare del sistema, J_α dalle derivate temporali degli angoli euleriani, ovvero

$$J_\alpha = \frac{\partial T}{\partial \omega_\alpha} = \frac{\partial \dot{\phi}}{\partial \omega_\alpha} \frac{\partial T}{\partial \dot{\phi}} + \frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \omega_\alpha} \frac{\partial T}{\partial \dot{\theta}} + \frac{\partial \dot{\chi}}{\partial \omega_\alpha} \frac{\partial T}{\partial \dot{\chi}} = \frac{\partial \dot{\phi}}{\partial \omega_\alpha} P_\phi + \frac{\partial \dot{\theta}}{\partial \omega_\alpha} P_\theta + \frac{\partial \dot{\chi}}{\partial \omega_\alpha} P_\chi : \quad (37)$$

ed esprimendo queste ultime in funzione delle componenti della velocità angolare nella terna rotante (i.e. per inversione delle (7)),

$$\begin{aligned} \dot{\phi} &= -\omega_x \csc(\theta) \cos(\chi) + \omega_y \csc(\theta) \sin(\chi) \\ \dot{\theta} &= \omega_x \sin(\chi) + \omega_y \cos(\chi) \\ \dot{\chi} &= \omega_x \cot(\theta) \cos(\chi) - \omega_y \cot(\theta) \sin(\chi) + \omega_z, \end{aligned} \quad (38)$$

fino ad ottenere la matrice di trasformazione \mathcal{D} che lascia invariati i momenti coniugati alle coordinate normali trasformando solo i le J_α nella terna di momenti coniugati alle coordinate euleriane, $(P_1, \dots, P_\phi, P_\theta, P_\chi)^T = \mathcal{D}(P_1, \dots, P_{3N-6}, J_x - p_x, J_y - p_y, J_z - p_z)^T$, avente inversa $\mathcal{D}^{-1} =$

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\ 0 & 0 & \dots & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,1}^x Q_j & -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,2}^x Q_j & \dots & -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,3N-6}^x Q_j & -\csc(\theta) \cos(\chi) & \sin(\chi) & \cot(\theta) \cos(\chi) \\ -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,1}^y Q_j & -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,2}^y Q_j & \dots & -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,3N-6}^y Q_j & \csc(\theta) \sin(\chi) & \cos(\chi) & -\cot(\theta) \sin(\chi) \\ -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,1}^z Q_j & -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,2}^z Q_j & \dots & -\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,3N-6}^z Q_j & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}. \quad (39)$$

Denotando con $\mu' = \mathcal{D}^{-T} \mu \mathcal{D}^{-1}$ l'estensione $3N - 3$ -dimensionale della matrice μ definita in (35),

$$\mu' = \begin{bmatrix} \mathbb{1}_{3 \times 3} & \mathbf{O}_{3N-6 \times 3} \\ \mathbf{O}_{3N-6 \times 3} & \mu \end{bmatrix}, \quad (40)$$

trasformata, e indicando collettivamente con P'_k i momenti generalizzati $P_1, \dots, P_\phi, P_\theta, P_\chi$ si ottiene la *hamiltoniana classica* del sistema di particelle α , scritta in forma canonica,

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{j,k=1}^{3N-3} P'_j \mu_{jk} P'_k + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6} \lambda_k \hat{Q}_k^2. \quad (41)$$

2.4 L'HAMILTONIANA QUANTISTICA

Il passaggio dal più generale sistema classico di n coordinate canoniche q_i in una metrica g_{ij} , momenti coniugati p_i e di potenziale $V(q)$ non dipendente dalle velocità, di hamiltoniana

$$H(p, q) = \frac{1}{2} g^{-1/2} \sum_{i,j=1}^n p_i g^{1/2} g_{ij}^{-1} p_j + V(q) \quad (42)$$

ove g è il determinante del tensore metrico, ai corrispondenti operatori quantistici è realizzato attraverso un metodo dovuto a Pauli, che porge

$$\hat{H}(\hat{p}, \hat{q}) = \frac{1}{2} g^{-1/2} \sum_{i,j=1}^n \hat{p}_i g^{1/2} g_{ij}^{-1} \hat{p}_j + V(\hat{q}). \quad (43)$$

Identificato il tensore metrico inverso con la μ' in (40) con determinante $\mu' = \mu \csc(\theta)^2$ ⁷, applichiamo questo risultato al nostro sistema di particelle α (41), ottenendo

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \mu^{1/4} \sum_{i,j=1}^{3N-3} \hat{P}'_i \mu'^{-1/2} \mu'_{ij} \hat{P}'_j \mu^{1/4} + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6} \lambda_k Q_k^2. \quad (44)$$

Esplicitiamo la dipendenza della hamiltoniana (44) negli operatori di momento angolare \hat{J}_α e \hat{p}_α corrispondenti alle variabili classiche p_α e J_α definite in (33) e (35) osservando che, per gli operatori $\hat{P}'_i = -i\hbar \partial_i$ vale la seguente relazione,

$$\sum_{j=1}^{3N-3} \hat{P}'_j \sin(\theta) d_{ij}^{-1} = \sin(\theta) \sum_{j=1}^{3N-3} d_{ij}^{-1} \hat{P}'_j \equiv \sin(\theta) \hat{P}'_i, \quad (45)$$

ove abbiamo riconosciuto collettivamente i \hat{P}'_i come analoghi quantistici dei momenti classici $(P_1, P_2, \dots, P_{3N-6}, J_x - p_x, J_y - p_y, J_z - p_z)$. Espressa in termini di questi operatori, la hamiltoniana (45) assume la forma

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \csc^{1/2}(\theta) \mu^{1/4} \sum_{i,j,m,n,p=1}^{3N-3} \hat{P}'_i \sin(\theta) \mu^{-1/2} d_{mi}^{-1} \mu_{mp} d_{pj}^{-1} d_{jn} \hat{P}'_n \mu^{1/4} \csc^{1/2}(\theta) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6} \lambda_k Q_k^2 \quad (46)$$

$$= \frac{1}{2} \csc^{1/2}(\theta) \mu^{1/4} \sum_{j,m,n=1}^{3N-6} \hat{P}'_j \sin(\theta) d_{mj}^{-1} \mu^{-1/2} \mu_{mn} \hat{P}'_n \mu^{1/4} \csc^{1/2}(\theta) + \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{3N-6} \lambda_k Q_k^2 \quad (47)$$

$$= \frac{1}{2} \sin^{1/2}(\theta) \mu^{1/4} \sum_{\alpha,\beta} (\hat{J}_\alpha - \hat{p}_\alpha) \mu^{-1/2} \mu_{\alpha\beta} (\hat{J}_\beta - \hat{p}_\beta) \mu^{1/4} \sin^{-1/2}(\theta) \quad (48)$$

$$+ \frac{1}{2} \mu^{1/4} \sum_{j=1}^{3N-6} \hat{P}'_j \mu^{-1/2} \hat{P}'_j \mu^{1/4} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} \lambda_j \hat{Q}_j^2.$$

Scegliendo, ora, la seguente convenzione per la normalizzazione delle autofunzioni della hamiltoniana \hat{H} ,

$$\int |F(\phi, \theta, \chi, Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N-6})|^2 \sin(\theta) d\theta d\phi d\chi dQ_1 dQ_2 \dots dQ_{3N-6} = 1 \quad (49)$$

la (49) si semplifica ulteriormente in

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \mu^{1/4} \sum_{\alpha,\beta} (\hat{J}_\alpha - \hat{p}_\alpha) \mu^{-1/2} \mu_{\alpha\beta} (\hat{J}_\beta - \hat{p}_\beta) \mu^{1/4} + \frac{1}{2} \mu^{1/4} \sum_{j=1}^{3N-6} \hat{P}'_j \mu^{-1/2} \hat{P}'_j \mu^{1/4} + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} \lambda_j \hat{Q}_j^2 \quad (50)$$

Infine seguendo una procedura introdotta da K. G. Watson nel 1968 [57] in ambito molecolare per sistemi di nuclei ed elettroni, si ottiene una ulteriore semplificazione della hamiltoniana,

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha,\beta} (\hat{J}_\alpha - \hat{p}_\alpha) \mu_{\alpha\beta} (\hat{J}_\beta - \hat{p}_\beta) + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} \hat{P}'_j^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} \lambda_j \hat{Q}_j^2 - \frac{\hbar^2}{8} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha\alpha} \quad (51)$$

che premette la cancellazione di tutti i determinanti μ dalla hamiltoniana (50), pur comportando l'aggiunta di un termine di traccia della stessa matrice, dipendente dalla distribuzione spaziale delle particelle α . Restringendoci al caso di *piccole vibrazioni attorno alla posizione di equilibrio*, si può approssimare questa traccia con quella dell'inverso del tensore d'inerzia all'equilibrio, \mathbf{I}^e ,

$$\mu_{\alpha\beta} \approx \mu_{\alpha\beta}^e = [\mathbf{I}^e]_{\alpha\beta}^{-1}, \quad (52)$$

che, nel nostro sistema di riferimento, è una matrice diagonale. La cancellazione di questo termine, divenuto ora una costante additiva unita a quella dei momenti angolari di vibrazione, \hat{p}_α , suggerita dalle condizioni di Eckart (13), ci conduce alla *hamiltoniana di rotore rigido*,

$$\hat{H}_{RR} = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha\alpha}^e \hat{J}_\alpha^2 + \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} (\hat{P}'_j^2 + \lambda_j \hat{Q}_j^2) \quad (53)$$

⁷ Si noti che è stato indicato con μ il determinante della matrice omonima, definita in (34).

in cui moti rotazionali e moti vibrazionali delle particelle sono disaccoppiati e la funzione d'onda del sistema assume la forma fattorizzata, $\psi_R\psi_V$: è proprio in tale approssimazione che nelle sezioni successive si studieranno i livelli energetici dei nuclei α -coniugati.

2.5 PROPRIETÀ DI TRASFORMAZIONE DELLE COORDINATE ROTAZIONALI E VIBRAZIONALI

All'inizio di questo capitolo si è accennato alle configurazioni di equilibrio delle particelle α all'interno dei nuclei come strutture geometriche ordinate di complessità crescente con il numero di nuclei di ${}^4\text{He}$ coinvolti nella ripartizione dei nucleoni: ciascuno di queste è lasciata invariante da operazioni di trasformazione R_g come rotazioni, riflessioni o inversioni, compiute a partire da piani, assi o punti contenenti il centro di massa del sistema. L'insieme di queste operazioni unite ad una legge di composizione danno luogo a strutture algebriche ben definite, ovvero gruppi puntuali di simmetria, a cui ci riferiremo avvalendoci della *notazione di Schönflies*, originariamente introdotta in ambito molecolare. Tali configurazioni geometriche (cfr. fig. 3), sono assimilabili classicamente a sistemi di masse puntiformi arrangiate ai vertici di strutture

- ♣ *lineari*, come nel caso del ${}^8\text{Be}$, composto da due particelle α disposte ai vertici di un segmento e perciò dotato sia un gruppo di simmetria discreto di ordine infinito, $D_{\infty v}$;
- ♣ *poligonali*, come il nucleo ${}^{12}\text{C}$, formato da tre particelle α disposte ai vertici di un triangolo equilatero, cui corrisponde il gruppo di simmetria D_{3h} di ordine 12;
- ♣ *poliedriche* come nel caso di nuclei con più di 3 particelle α , come il tetraedrico ${}^{16}\text{O}$, con gruppo puntuale T_d (di 24 elementi) e il bipiramidale trigonale ${}^{20}\text{Ne}$, che condivide il gruppo di simmetria con il ${}^{12}\text{C}$.

Tuttavia, la presenza di moti rotazionali e vibrazionali fra i componenti dei nuclei rende più congeniale, come osservato da Bunker e Jensen in *Fundamentals of Molecular Symmetry* [13] [14] [8] in ambito molecolare, l'introduzione di gruppi di simmetria discreti che lasciano invariante l'hamiltoniana quantistica del sistema, i cui operatori rappresentativi \hat{P}_i sono simmetrie dinamiche del sistema descritto da \hat{H}_{RR} , ovvero

$$[\hat{P}_i, \hat{H}_{RR}] = 0. \quad (54)$$

Nei casi di nostro interesse, il gruppo delle simmetrie discrete della hamiltoniana (53) a N corpi, $\mathcal{G}(N)$ è dato dal prodotto tensore del gruppo delle permutazioni di N elementi, S_N per il gruppo di inversione spaziale o parità, C_i , ovvero

$$\mathcal{G}(N) = S_N \otimes C_i, \quad (55)$$

pertanto conterrà un numero di operazioni pari al prodotto dell'ordine dei due gruppi, ovvero $2(N!)$ elementi. Come è evidente, un'operazione di $S_N \otimes C_i$, che comporta la permutazione dei *label* e il cambiamento di segno delle coordinate delle particelle, induce una ed una sola rotazione propria o impropria, R_{rot}^* , degli assi della terna solidale rispetto a quella del laboratorio, la cui orientazione rispetto alle particelle α roto-vibranti deve rimanere la stessa in seguito all'operazione di $\mathcal{G}(N)$, per definizione.

Allo scopo di mettere in evidenza il ruolo del gruppo puntuale di simmetria nella descrizione delle rotovibrazioni di un sistema quantistico, decomponiamo una generica operazione R del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana come prodotto di due operazioni,

$$R = R_g R_{rot} \quad (56)$$

ove

- ♣ R_g è un'operazione del gruppo puntuale di simmetria all'equilibrio \mathcal{G}_e , effettuata attorno agli assi della terna a riposo rispetto al laboratorio e avente origine nel centro di massa del nucleo (cfr. § 1.3.1), che trasforma unicamente le coordinate vibrazionali nucleari, lasciando invariata l'orientazione della terna rotante;

- ♣ R_{rot}^* è una rotazione propria o impropria del nucleo attorno agli assi della terna rotante che modifica l'orientazione della terna mobile rispetto al riferimento del laboratorio ed è in corrispondenza biunivoca con il gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana.

In tal modo, il gruppo puntuale recupera un suo ruolo nella descrizione delle roto-vibrazioni di un sistema quantistico, pur non essendo in grado di descriverlo nella sua interezza, eccezion fatta per i nuclei planari, come il ^{12}C , ove il gruppo discreto dell'hamiltoniana \hat{H}_{RR} è in corrispondenza biunivoca con gli elementi del gruppo puntuale del sistema all'equilibrio. D'altro canto, per il tetraedrico ^{16}O , la corrispondenza fra il gruppo di permutazione-inversione e gli R_g è 2:1: ad ogni elemento R_g del gruppo puntuale di simmetria all'equilibrio, \mathcal{T}_d , sono associati una permutazione \mathcal{P}_i ed una permutazione-inversione \mathcal{P}_i^* del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana, O_h .

Ora che gli effetti delle operazioni del gruppo discreto di simmetria dell'hamiltoniana sono stati descritti, possiamo conoscere il modo in cui angoli di Eulero e coordinate normali trasformano sotto gli elementi di $\mathcal{G}(N)$, passo necessario per dedurre le proprietà di trasformazione degli autostati di \hat{H}_{RR} sotto lo stesso gruppo.

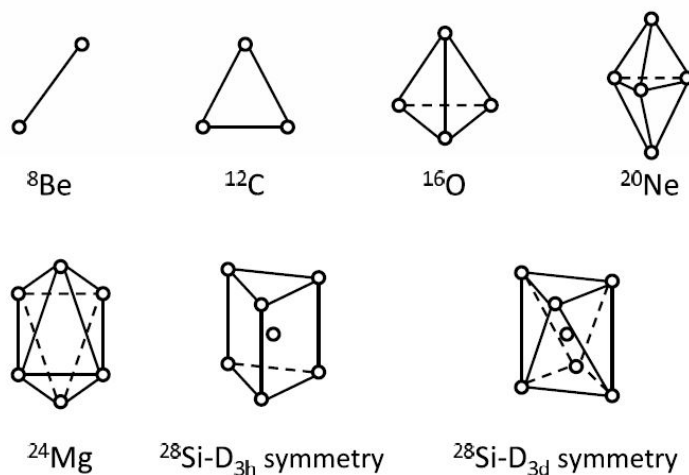


Figura 3: L'abito cristallino dei nuclei α -coniugati leggeri secondo il modello macroscopico di Wheeler [12].

2.5.1 Proprietà di trasformazione degli angoli di Eulero e del momento angolare rotovibrazionale

Come abbiamo visto nella sezione precedente, possiamo decomporre l'operazione di permutazione-inversione delle coordinate delle particelle α in una rotazione del nucleo attorno agli assi della terna solidale e in un'operazione del gruppo puntuale del sistema all'equilibrio oppure specificare l'effetto di una operazione del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana in modo unico attraverso una rotazione o una rotoriflessione dei soli assi della terna rotante.

Una considerevole semplificazione in questa operazione si ottiene riconducendo, nei nuclei planari, gli elementi di R_{rot}^* a due sole tipologie di rotazioni proprie, ovvero una di angolo α attorno ad un asse che forma un angolo α con l'asse x nel piano xy , denotata da R_α^π , e una di angolo β attorno all'asse z , denotata con R_z^β , mentre per quelli poliedrici risulta più immediato esprimere i primi attraverso rotazioni attorno a z , R_z^β e rotazioni di angolo γ attorno all'asse y , R_y^γ e l'inversione dei tre assi, denotata con \mathcal{P} .

Provare le proprietà di trasformazione degli angoli di Eulero (ϕ, θ, χ) e sugli operatori di momento angolare \hat{J}_α non è particolarmente istruttivo, pertanto ci limitiamo a trascrivere i risultati in una tabella, che si rivelerà utile per lo studio dei caratteri di simmetria delle autofunzioni.

	R_α^π	R_β^β	R_γ^γ	\mathcal{P}
ϕ	$\phi + \pi$	ϕ		—
θ	$\pi - \theta$	θ		—
χ	$2\pi - 2\alpha - \chi$	$\chi + \beta$		—
\hat{J}_x	$\hat{J}_x \cos(2\alpha) + \hat{J}_y \sin(2\alpha)$	$\hat{J}_x \cos(\beta) + \hat{J}_y \sin(\beta)$	$\hat{J}_x \cos(\gamma) + \hat{J}_z \sin(\gamma)$	\hat{J}_x
\hat{J}_y	$\hat{J}_x \sin(2\alpha) - \hat{J}_y \cos(2\alpha)$	$-\hat{J}_x \sin(\beta) + \hat{J}_y \cos(\beta)$	\hat{J}_y	\hat{J}_y
\hat{J}_z	$-\hat{J}_z$	\hat{J}_z	$-\hat{J}_x \sin(\gamma) + \hat{J}_z \cos(\gamma)$	\hat{J}_z

Tabella 1: Scheda riassuntiva delle proprietà di trasformazione di angoli di Eulero e componenti dell'operatore momento angolare nella terna intrinseca.

2.5.2 Proprietà di trasformazione delle coordinate normali

Quando abbiamo stabilito la relazione algebrica fra le $3N$ coordinate di spostamento cartesiane $\Delta\alpha$ delle particelle α e le $3N - 6$ coordinate normali Q_i abbiamo avuto bisogno di reinserire le sei coordinate 'spurie' $T_x, T_y, T_z, R_x, R_y, R_z$ per ottenere una unica trasformazione matriciale (cfr. (29)) fra i due insiemi di coordinate. Assumendo che sotto gli elementi R del gruppo discreto di simmetria dell'hamiltoniana le $3N$ coordinate Q_i trasformino secondo un insieme di matrici $D^\Gamma[R]$ che genera la rappresentazione riducibile Γ tale che

$$RQ_i = \sum_{k=1}^{3N} D^\Gamma[R]_{jk} Q_k, \quad (57)$$

allora le $3N$ coordinate cartesiane $\Delta\alpha_i$ trasformeranno come segue,

$$\begin{aligned} \sqrt{m}R\Delta\alpha_i &= \sum_{j=1}^{3N} l_{\alpha i, j} RQ_j = \sum_{j,k=1}^{3N} l_{\alpha i, j} D^\Gamma[R]_{jk} Q_k = \sqrt{m} \sum_{j,k}^{3N} l_{\alpha i, j} D^\Gamma[R]_{jk} \sum_{\beta} \sum_{l=1}^N l_{k, \alpha l}^{-1} \Delta\beta_l \\ &= \sqrt{m} \sum_{\beta} \sum_l^N \bar{D}^\Gamma[R]_{\alpha i, \beta l} \Delta\beta_l, \end{aligned} \quad (58)$$

ovvero la rappresentazione riducibile sotto cui trasformano le coordinate cartesiane è equivalente a quella sotto cui trasformano le coordinate normali,

$$\bar{D}^\Gamma[R] = lD^\Gamma[R]l^{-1}, \quad (59)$$

gli l_{ij} essendo gli elementi della matrice di $O(3N)$ di allacciamento fra le due rappresentazioni. Questo risultato implica che è possibile determinare la rappresentazione delle $3N - 6$ coordinate normali calcolando la rappresentazione delle $3N$ coordinate cartesiane di spostamento e sottraendo da essa la rappresentazione generata dalle coordinate $T_x, T_y, T_z, R_x, R_y, R_z$. Cominciamo lo studio delle proprietà di trasformazione dalle R_α . Poichè le R_α sono vettori assiali come i momenti angolari,

$$R_\alpha = \sqrt{\mu_{\alpha\alpha}^e} \sum_{i=1}^N m \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \Delta\beta_i^e \Delta\gamma_i \quad (60)$$

le loro proprietà di trasformazione sotto R_{rot} sono le stesse degli operatori di momento angolare (cfr. Tabella 1). Se $M_{\alpha\beta}$ sono gli elementi di matrice di un generico R_{rot} , si ha

$$R_{rot}R_\alpha = \sum_{\beta} \sqrt{\frac{\mu_{\alpha\alpha}^e}{\mu_{\beta\beta}^e}} M_{\alpha\beta} R_\beta, \quad (61)$$

ovvero per una trottola simmetrica $\mu_{\alpha\alpha}^e = \mu_{\beta\beta}^e$ e la legge di trasformazione coincide esattamente con quella dei momenti angolari \hat{J}_α . Le operazioni del gruppo puntuale, R_g , non sortiscono invece alcun

effetto sulle R_α , trattandosi di scambi di label di particelle identiche o di inversioni (sotto cui è invariante, essendo scrivibile come prodotto di due vettori polari).

Per la trasformazione delle T_α , che sono componenti del vettore polare

$$T_\alpha = \sqrt{Nm} \sum_{i=1}^N m \Delta \alpha_i, \quad (62)$$

dobbiamo discernere fra operatori di permutazione e operatori di permutazione-inversione di $\mathcal{G}(N)$. Poichè una inversione comporta il cambiamento di segno di tutte le coordinate di spostamento delle particelle α nel sistema di riferimento a riposo, $(\Delta \xi, \Delta \eta, \Delta \zeta) \rightarrow (-\Delta \xi, -\Delta \eta, -\Delta \zeta)$ una operazione di permutazione semplice di \mathcal{N} , R_{rot} porta ad una trasformazione analoga a quella dei momenti angolari sulle componenti di \vec{T} nella terna totale, T_α ,

$$R_{rot} T_\alpha = M_{\alpha\beta} T_\beta, \quad (63)$$

mentre per una operazione di permutazione e inversione il segno s'inverte

$$R_{rot}^* T_\alpha = -M_{\alpha\beta} T_\beta, \quad (64)$$

come avviene nei vettori polari.

Nota allora la rappresentazione riducibile Γ_{Car} associata ai vettori di spostamento cartesiani, $\Delta \alpha_i$ e note le rappresentazioni riducibili associate alle coordinate T_α e R_α , $\Gamma(T_\alpha)$ e $\Gamma(R_\alpha)$, si può, quindi, ricavare la rappresentazione riducibile associata alla trasformazione delle coordinate normali vibrazionali,

$$\Gamma(Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N-6}) = \Gamma_{Car} - [\Gamma(R_\alpha) \oplus \Gamma(T_\alpha)], \quad (65)$$

formula che diviene di grande utilità nello studio dei caratteri di simmetria delle singole coordinate vibrazionali Q_i .

2.6 AUTOSTATI E PROPRIETÀ DI TRASFORMAZIONE DELL'HAMILTONIANA

Coerentemente con i nostri scopi, in § 1.3.4 abbiamo ricavato la versione quantistica dell'hamiltoniana del sistema di N particelle α , ottenendo, alla fine, una \hat{H}_{RR} di rotore rigido decomponibile in due hamiltoniane disaccoppiate, una rotazionale, \hat{H}_R dipendente dalle sole \hat{J}_α , e una vibrazionale \hat{H}_V nelle $3N - 6$ coordinate normali \hat{Q}_i e nei momenti coniugati \hat{P}_i .

Prima di addentrarci nella ricerca degli stati della (53), è utile soffermarsi sulle ragioni che permettono la separazione completa della hamiltoniana nelle \hat{H}_V e \hat{H}_R , ovvero dei moti rotazionali del nucleo da quelli vibrazionali. A tale scopo, ricordiamo che la forma degli operatori $\hat{J}_\alpha - \hat{p}_\alpha$ in rappresentazione coordinata $(Q_1, Q_2, \dots, \phi, \theta, \chi)$ si ottiene applicando la matrice di trasformazione \mathcal{D}^{-1} (39) al vettore dei momenti coniugati $(\hat{P}_1, \hat{P}_2, \dots, \hat{P}'_\phi, \hat{P}'_\theta, \hat{P}'_\chi)^T$, in rappresentazione coordinata dati da $-i\hbar(\frac{\partial}{\partial Q_1}, \frac{\partial}{\partial Q_2}, \dots, \frac{\partial}{\partial \phi}, \frac{\partial}{\partial \theta}, \frac{\partial}{\partial \chi})^T$. L'espressione risultante per le componenti del momento angolare del sistema $\hat{J}_\alpha - \hat{p}_\alpha$ è, quindi, la seguente

$$\hat{J}_x - \hat{p}_x = -i\hbar \sum_{j,k=1}^{3N-6} \zeta_{j,k}^x Q_j \frac{\partial}{\partial Q_k} + i\hbar \frac{\cos(\chi)}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} - i\hbar \sin(\chi) \frac{\partial}{\partial \theta} - i\hbar \frac{\cos(\chi) \cos(\theta)}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \chi} \quad (66)$$

$$\hat{J}_y - \hat{p}_y = -i\hbar \sum_{j,k=1}^{3N-6} \zeta_{j,k}^y Q_j \frac{\partial}{\partial Q_k} - i\hbar \frac{\sin(\chi)}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \phi} - i\hbar \cos(\chi) \frac{\partial}{\partial \theta} + i\hbar \frac{\sin(\chi) \cos(\theta)}{\sin(\theta)} \frac{\partial}{\partial \chi} \quad (67)$$

$$\hat{J}_z - \hat{p}_z = -i\hbar \sum_{j,k=1}^{3N-6} \zeta_{j,k}^z Q_j \frac{\partial}{\partial Q_k} - i\hbar \frac{\partial}{\partial \chi}. \quad (68)$$

Identificando in $-i\hbar \sum_{j,k=1}^{3N-6} \zeta_{j,k}^\alpha Q_j \frac{\partial}{\partial Q_k}$ l'analogo quantistico \hat{p}_α del vettore momento angolare vibrazionale classico definito in (35) possiamo assicurare che le componenti dell'operatore momento angolare in

rappresentazione coordinata \hat{J}_α che ne risultano dipendono esclusivamente dagli angoli di Eulero e da operatori differenziali costruiti a partire da essi. L'ulteriore semplificazione fornita dalla cancellazione dei momenti angolari di vibrazione \hat{p}_α , permette, di ricondurre l'hamiltoniana vibrazionale a quella di un sistema di $3N - 6$ oscillatori armonici disaccoppiati (53).

Non di minor rilievo è, infine, osservare che l'approssimazione dei coefficienti $\mu_{\alpha\beta}$ (cfr. (53)) con gli elementi di matrice del tensore d'inerzia inverso $I_{\alpha\beta}^{-1}$,

$$\mu_{\alpha\beta}^{-1} = I_{\alpha\beta} - \sum_{k=1}^{3N-6} \left(\sum_{j=1}^{3N-6} \zeta_{j,k}^\alpha Q_j \sum_{l=1}^{3N-6} \zeta_{l,k}^\beta Q_l \right) \approx I_{\alpha\beta} \quad (69)$$

cancella ogni dipendenza dalle coordinate normali nel primo termine a secondo membro della (53), permettendo la separazione delle hamiltoniane \hat{H}_V e \hat{H}_R e la conseguente fattorizzazione della funzione d'onda totale del sistema, $\psi_R \psi_V$. Oggetto dell'analisi nelle due sezioni seguenti saranno, quindi, gli autostati del sistema (52), fattorizzati nelle autofunzioni ψ_R e ψ_V , il cui prodotto deve essere completamente simmetrico per lo scambio di due nuclei di ${}^4\text{He}$, secondo la statistica delle particelle bosoniche.

2.6.1 Stati vibrazionali del sistema

Dall'equazione (53) dell'hamiltoniana di *rotore rigido* estraiamo la sua componente vibrazionale, \hat{H}_{vib} ,

$$\hat{H}_{vib} = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^{3N-6} (\hat{P}_j^2 + \lambda_j \hat{Q}_j^2), \quad (70)$$

che coincide con quella di $3N - 6$ oscillatori armonici disaccoppiati di frequenze $\lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_{3N-6}$, autovalori della forma quadratica di elementi k'_{ij} (23). Di conseguenza, gli autostati della possono essere scritti nella forma fattorizzata,

$$\psi_V = \langle Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N-6} | v_1, v_2, \dots, v_{3N-6} \rangle = \prod_{i=1}^{3N-6} \Psi_{v_i}(Q_i), \quad (71)$$

ove v_i è un numero quantico al modo di frequenza λ_i , che troveremo coincidere con il numero di fononi di vibrazione. Poichè, in generale, non tutti gli autovalori della forma quadratica \mathbf{K}' (22) sono distinti, sarà possibile trovare più oscillatori armonici con coordinate normali distinte cui corrisponde la medesima frequenza di vibrazione, $\hbar\gamma \equiv \sqrt{\lambda}$: si tratta dei cosiddetti *modi degeneri*, associati a coordinate vibrazionali che trasformano sotto le operazioni del gruppo discreto di simmetria dell'hamiltoniana (53) come le sue rappresentazioni irriducibili di dimensione pari alla loro degenerazione. Necessitando di una trattazione più ampia, studieremo separatamente autostati e loro proprietà di trasformazione riferiti a coordinate normali degeneri rispetto a quelli non degeneri, da cui cominciamo la nostra analisi.

2.6.2 Coordinate non degeneri: l'oscillatore armonico unidimensionale

L'hamiltoniana del sistema è quella di un oscillatore armonico 1-dimensionale di frequenza $\omega_1 = \sqrt{\lambda}$, ovvero

$$\hat{H}_{V_1} = \frac{1}{2}(\hat{p}^2 + \lambda \hat{Q}^2) = -\frac{\hbar^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{1}{2} \omega_1^2 Q^2. \quad (72)$$

Introducendo gli operatori di seconda quantizzazione \hat{a}^\dagger e \hat{a} , che innalzano e abbassano rispettivamente gli autovalori della hamiltoniana di $\hbar\sqrt{\lambda}^8$

$$\hat{a}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\sqrt{\omega_1}\hat{Q} - \frac{i}{\sqrt{\omega_1}}\hat{P}) \quad \hat{a} = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}}(\sqrt{\omega_1}\hat{Q} + \frac{i}{\sqrt{\omega_1}}\hat{P}) \quad (73)$$

l'hamiltoniana assume la forma

$$\hat{H}_{V_1} = \hbar\omega_1 \left(\hat{a}^\dagger \hat{a} + \frac{1}{2} \right). \quad (74)$$

Poichè \hat{H}_{V_1} è un operatore autoaggiunto con autovalori reali e positivi, esiste un autovalore minimo E_0 corrispondente all'autostato $\Phi_0(Q) = \langle Q|0 \rangle$ tale che, una successiva applicazione dell'operatore di distruzione \hat{a} fa collassare lo stato in zero,

$$\hat{a}|0 \rangle = 0: \quad (75)$$

passando alla rappresentazione delle coordinate Q , la (75) è un'equazione differenziale che porta alla definizione concreta dello stato fondamentale normalizzato (a zero fononi),

$$\Phi_0(Q) = \sqrt{\frac{\omega_1}{\hbar\sqrt{\pi}}} e^{-\frac{\omega_1}{2\hbar}Q^2}. \quad (76)$$

Applicando alla (73) l'operatore hamiltoniano (74) si trova che a questo stato corrisponde un'energia pari a $\hbar\omega_1/2$, detta *energia di vuoto* o di punto zero del sistema: l'effetto di $\hat{a}^\dagger \hat{a}$ risulta quindi quello di contare il numero di fononi dello stato e pertanto verrà indicato successivamente con \hat{N} . Incrementando l'energia di (76) con l'applicazione consecutiva di v operatori di creazione \hat{a}^\dagger e normalizzando all'unità lo stato così ottenuto, si ricava la forma generale dell'autostato dell'hamiltoniana (74),

$$\Phi_v(Q) = \langle Q|v \rangle = \sqrt{\frac{\omega_1}{2^v v! \hbar \sqrt{\pi}}} H_v \left(\sqrt{\frac{\omega_1}{\hbar}} Q \right) e^{-\frac{\omega_1}{2\hbar}Q^2} \quad (77)$$

ove $H_v(\gamma Q)$ è un polinomio ortogonale di Hermite di ordine v ,

$$H_v \left(\sqrt{\frac{\omega_1}{\hbar}} Q \right) = e^{\frac{\omega_1}{2\hbar}Q^2} (-1)^v \frac{d^v}{d(\sqrt{\frac{\omega_1}{\hbar}} Q)^v} e^{-\frac{\omega_1}{2\hbar}Q^2}. \quad (78)$$

Applicando, come per lo stato fondamentale la (74) al ket $|v \rangle$ si ottengono gli autovalori E_v dell'hamiltoniana (76),

$$E_v = \hbar\omega_1 \left(v + \frac{1}{2} \right), \quad (79)$$

che ci permettono di esplicitare la forma dell'autostato totale dell'hamiltoniana (74) in termini degli autostati di $3N - 6$ oscillatori armonici 1-dimensionali,

$$\psi_V = \langle Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N-6} | v_1, v_2, \dots, v_{3N-6} \rangle = \prod_{i=1}^{3N-6} \sqrt{\frac{\omega_{1i}}{2^{v_i} v_i! \hbar \sqrt{\pi}}} H_{v_i} \left(\sqrt{\frac{\omega_{1i}}{\hbar}} Q_i \right) e^{-\frac{\omega_{1i}}{2\hbar} Q_i^2}. \quad (80)$$

Presentata la forma generale dell'autostato dell'oscillatore armonico (76), determiniamo ora il suo carattere di simmetria sotto l'azione degli elementi del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana nucleare (53). Innanzitutto, dalla espressione dello stato fondamentale (53), quadratica nelle coordinate normali come la stessa hamiltoniana (74), possiamo asserire che $\Phi_0(Q)$ trasformerà sotto $\mathcal{G}(N)$ come la rappresentazione irriducibile triviale, indicata convenzionalmente con il simbolo di Mulliken A_1^9 . Ricordando che l'autostato a v fononi della hamiltoniana (1.80) può essere ottenuto applicando v volte

8 Si noti che gli operatori \hat{Q} e \hat{P} hanno rispettivamente la dimensione di una coordinata spaziale moltiplicata per la radice di una massa e di un momento diviso per la radice di una massa, pertanto il commutatore fra i due operatori coincide ancora con quello canonico.

9 Nelle tavole dei caratteri di alcuni gruppi puntuali la rappresentazione irriducibile con $\chi[R] = 1 \forall R \in \mathcal{G}(N)$ è indicata con A_1^1 .

gli operatori di creazione (modulo un fattore di normalizzazione dello stato), si trova che il carattere di simmetria della hamiltoniana dipenderà dal carattere di simmetria di $(\hat{a}^\dagger)^v$, essendo il prodotto tensore di una rappresentazione irriducibile data di dimensione qualsiasi per la rappresentazione triviale coincidente con la rappresentazione di partenza¹⁰. Ora, dalla forma di \hat{a}^\dagger in (73), si evince che trasforma secondo la stessa rappresentazione irriducibile Γ_1 del gruppo di simmetria $\mathcal{G}(N)$ di Q e pertanto $\Phi_v(Q)$ trasforma come il v -prodotto tensore di Γ_1 , ovvero

$$\Gamma(\Phi_v(Q)) = \underbrace{\Gamma_1 \otimes \Gamma_1 \otimes \dots \otimes \Gamma_1}_{v \text{ volte}} = \Gamma_1^v. \quad (81)$$

Dal momento che la rappresentazione irriducibile Γ_1 è 1-dimensionale¹¹, allora il prodotto tensore per se stessa dà la rappresentazione completamente simmetrica, $\Gamma_1 \otimes \Gamma_1 = A_1$: da ciò segue che la $\Phi_v(Q)$ trasforma semplicemente come Γ_1 (risp. A_1) se v è dispari (risp. pari).

2.6.3 Coordinate doppiamente degeneri: l'oscillatore armonico bidimensionale

Il primo esempio di degenerazione delle coordinate normali che affrontiamo è la doppia degenerazione. Dette (Q_1, Q_2) le coordinate vibrazionali degeneri e (P_1, P_2) i rispettivi momenti coniugati, l'hamiltoniana del sistema avrà la forma

$$\hat{H}_{V_2} = \sum_{i=1}^2 \frac{1}{2} (\hat{P}_i^2 + \lambda^2 \hat{Q}_i^2) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} - \frac{\omega_2^2}{\hbar^2} Q_i^2 \right) \quad (82)$$

ovvero quella di un oscillatore armonico isotropo 2-dimensionale. Non essendoci termini di accoppiamento fra i due oscillatori di egual frequenza, possiamo estendere i risultati presentati in (74)-(79), introducendo gli operatori di seconda quantizzazione *cartesiani*

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\sqrt{\omega_3} \hat{Q}_j + \frac{i}{\sqrt{\omega_3}} \hat{P}_j) \quad \text{e} \quad \hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\sqrt{\omega_3} \hat{Q}_j - \frac{i}{\sqrt{\omega_3}} \hat{P}_j) \quad \text{con } j = 1, 2, \quad (83)$$

che permettono di riscrivere la (82) come

$$\hat{H}_{V_2} = \hbar\omega_2 (\hat{a}_1^\dagger \hat{a}_1 + \hat{a}_2^\dagger \hat{a}_2 + 1). \quad (84)$$

Una base di autostati dell'hamiltoniana (84) è, quindi, quella denotata dai numeri fononici dei due oscillatori, (v_1, v_2) , composta gli autostati simultanei di $\hat{N} \equiv \hat{N}_1 + \hat{N}_2$ e di \hat{N}_i con $i=1,2$,

$$\{|v_1, v_2 \rangle\} \quad v_1, v_2 = 0, 1, 2, 3, \dots, \quad (85)$$

corrispondenti alle autoenergie

$$E(v_1, v_2) = \hbar\omega_2(v_1 + v_2 + 1), \quad (86)$$

da cui segue che ogni livello energetico, denotato dall'intero $v \equiv v_1 + v_2$, è $v + 1$ volte degenero. Esiste, inoltre, un'altra scelta della base che mette in relazione la $v + 1$ -degenerazione degli stati a v fissato con la presenza di un operatore di Casimir *nascosto* nell'hamiltoniana, appartenente all'algebra di un sottogruppo del gruppo continuo di simmetria $U(2)$ della hamiltoniana: come vedremo, si tratta dell'unico elemento dell'algebra del gruppo abeliano $SO(2)$, le cui rappresentazioni irriducibili sono denotate dal numero quantico l . Consideriamo, a tale scopo, il passaggio dalle coordinate normali (Q_1, Q_2) alle coordinate polari (Q, α) , ovvero

$$Q_1 = Q \cos(\alpha) \quad Q_2 = Q \sin(\alpha), \quad (87)$$

¹⁰ Questo risultato si può provare sapendo che date due rappresentazioni irriducibili Γ_i e Γ_j di un gruppo puntuale $\mathcal{G}(N)$ di caratteri $\chi_i[R]$ e $\chi_j[R]$ con R una operazione del gruppo, il carattere della rappresentazione $\Gamma_i \otimes \Gamma_j$ è il prodotto dei caratteri delle due generatrici, $\chi_{\Gamma_i \otimes \Gamma_j}[R] = \chi_{\Gamma_i}[R] \chi_{\Gamma_j}[R]$. Ricordando che per la rappresentazione triviale $\chi_{A_1}[R] = 1 \forall R \in \mathcal{G}(N)$, segue l'asserto.

¹¹ Ciò è assicurato dal fatto che le coordinate normali Q sono non degeneri.

e trasformimano gli operatori differenziali nella hamiltoniana a terzo membro della (83), ottenendo

$$\frac{\partial^2}{\partial Q_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial Q_2^2} = \frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{1}{Q} \frac{\partial}{\partial Q} + \frac{1}{Q^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}. \quad (88)$$

Inserendo quanto appena trovato (88) nella hamiltoniana completa (82) si ricava l'espressione dell'operatore \hat{H}_{V_2} in rappresentazione coordinata,

$$\hat{H}_{V_2} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial Q^2} + \frac{1}{Q} \frac{\partial}{\partial Q} + \frac{1}{Q^2} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{\omega_2^2}{\hbar} Q^2 \right). \quad (89)$$

Riconoscendo in $\hat{M} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha}$ il momento coniugato all'angolo $\hat{\alpha}$, possiamo interpretare questo operatore come il generatore infinitesimo delle rotazioni nel piano originato dagli assi cartesiani \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 ,

$$\hat{M} = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} = -i\hbar \left(\frac{\partial Q_1}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial Q_1} + \frac{\partial Q_2}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial Q_2} \right) = +i\hbar Q \sin(\alpha) \frac{\partial}{\partial Q_1} - i\hbar Q \cos(\alpha) \frac{\partial}{\partial Q_2} = \hat{Q}_1 \hat{P}_2 - \hat{Q}_2 \hat{P}_1, \quad (90)$$

ovvero come la componente di un ipotetico momento angolare operatoriale ortogonale a questo piano. Calcolando, inoltre, il commutatore fra \hat{H}_{V_2} e \hat{M} si trova

$$[\hat{H}_{V_2}, \hat{M}] = 0 \quad (91)$$

cioè \hat{M} soddisfa le proprietà richieste per l'operatore di Casimir di $SO(2)$ che stiamo cercando. E' quindi possibile costruire una base di autostati simultanei di \hat{H}_{V_2} e \hat{M} che denotiamo con i numeri quantici (v, m) , ovvero

$$\{|v, m\rangle\} \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots \quad m = v, v-2, v-4, \dots -v, \quad (92)$$

legati ai due operatori dalle relazioni

$$\hat{M}|v, m\rangle = m\hbar|v, m\rangle \quad \hat{H}_{V_2}|v, m\rangle = (1+v)\hbar\omega_2|v, m\rangle. \quad (93)$$

Dalla forma esplicita di \hat{M} e dalle (93) segue che le autofunzioni d'onda del sistema in rappresentazione coordinata hanno la forma fattorizzata $\langle Q, \alpha | m, v \rangle = e^{im\alpha} f_{m,v}(Q)$. Per lo studio successivo delle proprietà di trasformazione degli autostati sotto il gruppo discreto di simmetria dell'hamiltoniana $\mathcal{G}(M)$, è utile introdurre dei nuovi operatori di creazione e distruzione che non spezzino la catena algebrica $SO(2) \subset U(2)$ che soggiace alla nuova base (1.99) di autostati della (1.90). A tale scopo, partendo dagli operatori di creazione e distruzione *cartesiani* del sistema (83), costruiamo due coppie di nuovi operatori di distruzione e creazione,

$$\hat{a}_R^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^\dagger + i\hat{a}_2^\dagger), \quad \hat{a}_R = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 - i\hat{a}_2), \quad (94)$$

e

$$\hat{a}_L^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1^\dagger - i\hat{a}_2^\dagger), \quad \hat{a}_L = \frac{1}{\sqrt{2}} (\hat{a}_1 + i\hat{a}_2), \quad (95)$$

che prendono il nome rispettivamente di operatori di creazione e distruzione di fononi circolari *destro-giri* e *levogiri*. La ragione di questa denominazione risiede nel fatto che l'operatore \hat{M} che genera le rotazioni nel piano (Q_1, Q_2) si può riscrivere come

$$\hat{M} = \hat{Q}_1 \hat{P}_2 - \hat{Q}_2 \hat{P}_1 = \hbar (\hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R - \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L) \equiv \hbar (\hat{N}_R - \hat{N}_L), \quad (96)$$

ovvero si può esprimere semplicemente come la differenza fra i contatori \hat{N}_R e \hat{N}_L , pertanto l'aggiunta di un quanto circolare di tipo R (risp. L) ad uno stato $|n_R, n_L\rangle$ fa crescere la proiezione del momento

angolare lungo un asse Q_3 ortogonale al piano (Q_1, Q_2) che origina una terna d'assi destrogiro (risp. levogiro). Scrivendo la hamiltoniana (82) in termini di questi operatori si ha

$$\hat{H}_{V_2} = \hbar\omega_2 \left(\hat{a}_R^\dagger \hat{a}_R + \hat{a}_L^\dagger \hat{a}_L + 1 \right) : \quad (97)$$

come si osserva, la base *algebraica* di autostati di H_{V_2} , $\{|v, m\rangle\}$, coincide con la base *circolare* $\{|n_R, n_L\rangle\}$ essendo i numeri di fononi circolari n_R e n_L legati a m e v dalle relazioni di consistenza

$$v = n_L + n_R \quad m = n_R - n_L, \quad (98)$$

che si evincono per confronto fra le (93) e le (96)-(97). Procedendo come nel caso dell'oscillatore armonico 1-dimensionale, gli autostati del sistema nella base algebraica $\{|v, m\rangle\}$ si ottengono per applicazione consecutiva di operatori di creazione sullo stato fondamentale $|0, 0\rangle$, in questo caso \hat{a}_R^\dagger e \hat{a}_L^\dagger ,

$$|v, m\rangle = |n_R, n_L\rangle = \frac{(\hat{a}_L^\dagger)^{n_L} (\hat{a}_R^\dagger)^{n_R}}{\sqrt{n_R! n_L!}} |0, 0\rangle = \frac{(\hat{a}_L^\dagger)^{(v-m)/2} (\hat{a}_R^\dagger)^{(v+m)/2}}{\sqrt{\frac{v-m}{2}! \frac{v+m}{2}!}} |0, 0\rangle \quad \text{con } v = n_L + n_R. \quad (99)$$

E' importante osservare che la regola di selezione per i numeri quantici di momento angolare, apparsa nella (92), proibisce la comparsa di operatori sotto radice quadrata nella costruzione degli autostati a partire da quello fondamentale nella (99), cancellando le 1 dispari (risp. pari) negli autostati pari (risp. dispari) di v .

Presentati gli autostati in (99), possiamo ora ricercare il loro carattere di simmetria sotto le operazioni del gruppo discreto della hamiltoniana $\mathcal{G}(N)$. Analogamente al caso precedente, si trova che la coppia di operatori $(\hat{a}_R^\dagger, \hat{a}_L^\dagger)$ in rappresentazione coordinata trasforma come la coppia di coordinate normali da cui dipendono (Q_1, Q_2) , ovvero sotto una rappresentazione irriducibile 2-dimensionale di $\mathcal{G}(N)$ che denotiamo con Γ_2 . Ne segue che le $(v+1)$ funzioni d'onda degeneri di energia $E(v)$ trasformano rispettivamente come gli operatori

$$(\hat{a}_R^\dagger)^v, (\hat{a}_L^\dagger)(\hat{a}_R^\dagger)^{v-1}, (\hat{a}_L^\dagger)^2(\hat{a}_R^\dagger)^{v-2}, \dots, (\hat{a}_L^\dagger)^v. \quad (100)$$

Essendo le funzioni simmetriche per lo scambio di $(\hat{a}_R^\dagger)^r$ e $(\hat{a}_L^\dagger)^{v-r}$ allora le autofunzioni $v+1$ -degeneri trasformano nel loro insieme come la potenza v -esima della rappresentazione 2-dimensionale Γ_2 . Dalla teoria dei gruppi discreti, il carattere della rappresentazione riducibile generata dalla potenza v -esima simmetrica di una rappresentazione irriducibile doppiamente degenera Γ_2 è dato dalla formula ricorsiva

$$\chi^{(\Gamma_2)^v}[R] = \frac{1}{2} \left[\chi^{\Gamma_2}[R] \chi^{(\Gamma_2)^{v-1}}[R] + \chi^{\Gamma_2}[R^v] \right] \quad \forall R \in \mathcal{G}(N), \quad (101)$$

che permette di risalire alla rappresentazione riducibile cui trasformano collettivamente le autofunzioni $v+1$ -degeneri, a sua volta esprimibile come somma diretta di rappresentazioni irriducibili del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana nucleare.

2.6.4 Coordinate triplamente degeneri: l'oscillatore armonico tridimensionale

Altrettanto importante per gli sviluppi successivi, è la trattazione della tripla degenerazione delle coordinate normali di vibrazione (Q_1, Q_2, Q_3) , cui è associata l'hamiltoniana di oscillatore armonico isotropo tridimensionale di frequenza $\omega_3 = \sqrt{\lambda}$,

$$\hat{H}_{V_3} = \sum_{i=1}^3 \frac{1}{2} (\hat{P}_i^2 + \lambda \hat{Q}_i^2) = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^3 \left(\frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} - \frac{\omega_3^2}{\hbar^2} Q_i^2 \right). \quad (102)$$

Come nel caso precedente, introduciamo gli operatori di creazione e distruzione dei tre oscillatori armonici 1-dimensionali che compongono il sistema (102),

$$\hat{a}_j = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\sqrt{\omega_3} \hat{Q}_j + \frac{i}{\sqrt{\omega_3}} \hat{P}_j) \quad \text{e} \quad \hat{a}_j^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2\hbar}} (\sqrt{\omega_3} \hat{Q}_j - \frac{i}{\sqrt{\omega_3}} \hat{P}_j) \quad \text{con } j = 1, 2, 3, \quad (103)$$

¹² ciò segue direttamente dal commutatore $[\hat{a}_R^\dagger, \hat{a}_L^\dagger] = 0$.

che permettono di riscrivere l'hamiltoniana (102) in seconda quantizzazione

$$\hat{H}_{V_3} = \hbar\omega_3 \left(\hat{a}_1^+ \hat{a}_1^- + \hat{a}_2^+ \hat{a}_2^- + \hat{a}_3^+ \hat{a}_3^- + \frac{3}{2} \right), \quad (104)$$

e, dunque, di ottenere gli autovalori dell'energia del sistema,

$$E(v) \equiv E(v_1, v_2, v_3) = \hbar\omega_3 \left(v_1 + v_2 + v_3 + \frac{3}{2} \right), \quad (105)$$

ove v_1, v_2 e v_3 sono i numeri fononici dei tre oscillatori armonici 1-dimensionali e $v = v_1 + v_2 + v_3$ è il numero fononico totale del sistema 3-dimensionale. Una base di autostati del sistema è, quindi, data dagli autostati simultanei di $\hat{N} = \sum_{i=1}^3 \hat{N}_i$ e degli $\hat{N}_i = \hat{a}_i^+ \hat{a}_i^-$ con $i = 1, 2, 3$,

$$\{|v_1, v_2, v_3 \rangle\} \quad v_1, v_2, v_3 = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (106)$$

che, fissato v , possiedono una degenerazione in energia pari a $(v+1)(v+2)/2$. Come nel caso precedente, esiste un'altra scelta della base che mette in relazione la $(v+2)(v+1)/2$ -degenerazione degli stati a v fissato con la presenza di due operatori di Casimir appartenenti a due sottogruppi del gruppo di simmetria continuo di H_{V_3} (1.108), ovvero $U(3)$: si tratta di \hat{L}^2 , riconducibile all'algebra di $SU(2)$ (o $SO(3)$), le cui rappresentazioni irriducibili sono indicate con l , e di L_3 , appartenente all'algebra di $SO(2)$, le cui rappresentazioni irriducibili sono denotate dal numero quantico m .

Consideriamo, a tale scopo, il passaggio dalle coordinate normali (Q_1, Q_2, Q_3) alle coordinate sferiche (Q, α, β) , ovvero

$$Q_1 = Q \cos(\alpha) \sin(\beta) \quad Q_2 = Q \sin(\alpha) \sin(\beta) \quad Q_3 = Q \cos(\beta), \quad (107)$$

e trasformiamo gli operatori differenziali nella hamiltoniana a terzo membro della (102), ottenendo

$$\sum_{i=1}^3 \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} = \frac{1}{Q^2} \frac{\partial}{\partial Q} Q^2 \frac{\partial}{\partial Q} + \frac{1}{Q^2 \sin(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} \sin(\beta) \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{Q^2 \sin^2(\beta)} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2}. \quad (108)$$

Inserendo quanto appena trovato nella hamiltoniana completa (102) si ricava l'espressione dell'operatore \hat{H}_{V_3} in rappresentazione coordinata,

$$\hat{H}_{V_3} = -\frac{\hbar^2}{2} \left(\frac{1}{Q^2} \frac{\partial}{\partial Q} Q^2 \frac{\partial}{\partial Q} + \frac{1}{Q^2 \sin(\beta)} \frac{\partial}{\partial \beta} \sin(\beta) \frac{\partial}{\partial \beta} + \frac{1}{Q^2 \sin^2(\beta)} \frac{\partial^2}{\partial \alpha^2} - \frac{\omega_2^2}{\hbar} Q^2 \right). \quad (109)$$

Come nel caso 2-dimensionale, individuando in $\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha}$ il momento coniugato all'angolo $\hat{\alpha}$, possiamo interpretare questo operatore come il generatore infinitesimo delle rotazioni nel piano originato dagli assi cartesiani \hat{Q}_1 e \hat{Q}_2 ,

$$\hat{L}_3 = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \alpha} = -i\hbar \left(\frac{\partial Q_1}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial Q_1} + \frac{\partial Q_2}{\partial \alpha} \frac{\partial}{\partial Q_2} \right) = +i\hbar Q \sin(\alpha) \frac{\partial}{\partial Q_1} - i\hbar Q \cos(\alpha) \frac{\partial}{\partial Q_2} = \hat{Q}_1 \hat{P}_2 - \hat{Q}_2 \hat{P}_1, \quad (110)$$

ovvero come la componente di un momento angolare operatoriale, che indichiamo con \hat{L} , ortogonale a questo piano. Calcolando anche le altre due componenti, \hat{L}_1 e \hat{L}_2 , di quest'ultimo operatore,

$$\hat{L}_1 = -i\hbar \left(Q_2 \frac{\partial}{\partial Q_3} - Q_3 \frac{\partial}{\partial Q_2} \right) = i\hbar \left(\sin(\alpha) \frac{\partial}{\partial \beta} + \cot(\beta) \cos(\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} \right) \quad (111)$$

e

$$\hat{L}_2 = -i\hbar \left(Q_3 \frac{\partial}{\partial Q_1} - Q_1 \frac{\partial}{\partial Q_3} \right) = i\hbar \left(-\cos(\alpha) \frac{\partial}{\partial \beta} + \cot(\beta) \sin(\alpha) \frac{\partial}{\partial \alpha} \right), \quad (112)$$

osserviamo che esse, come atteso, soddisfano le regole di commutazione degli elementi dell'algebra di $SO(3)$ (o $SU(2)$), $[\hat{L}_i, \hat{L}_j] = i\hbar \epsilon_{ijk} \hat{L}_k$. Quadrando e sommando fra loro le tre componenti (110)-(112)

otteniamo l'operatore di Casimir \hat{L}^2 di tale algebra, che, in rappresentazione coordinata, corrisponde al secondo e al terzo termine della (109), moltiplicato per $2Q^2$. Dal momento che $[\hat{L}^2, \hat{L}_i]$ con $i = 1, 2, 3$, segue che il commutatore fra \hat{H}_{V_3} e \hat{L}_i è nullo,

$$[\hat{H}_{V_3}, \hat{L}_i] = 0, \quad (113)$$

è possibile costruire una base di autostati simultanei di \hat{H}_{V_3} e \hat{L}^2 e di una delle sue componenti, \hat{L}_3 , che denotiamo con i numeri quantici (v, l, m) , ovvero

$$\{|v, l, m\rangle\} \quad v = 0, 1, 2, 3, \dots \quad l = v, v-2, v-4, \dots, 1 \text{ o } 0 \quad m = l, l-1, l-2, \dots, -l, \quad (114)$$

legati ai tre operatori dalle equazioni

$$\hat{H}_{V_3}|v, l, m\rangle = \left(v + \frac{3}{2}\right)\hbar\omega_2|v, l, m\rangle \quad \hat{L}^2|v, l, m\rangle = l(l+1)\hbar^2|v, l, m\rangle \quad \hat{L}_3|v, l, m\rangle = m\hbar|v, l, m\rangle. \quad (115)$$

Come nel caso 2-dimensionale, cerchiamo di scrivere il generico autostato $|v, l, m\rangle$ in questa nuova base come il risultato dell'azione di operatori di creazione sullo stato di vuoto. Reintroduciamo, a tale scopo, gli operatori di creazione e distruzione di fononi circolari $(\hat{a}_R, \hat{a}_R^\dagger)$ e $(\hat{a}_L, \hat{a}_L^\dagger)$ con la stessa definizione data in (94)(95) ed esprimiamo l'operatore hamiltoniano H_{V_3} e i due Casimir \hat{L}^2 e \hat{L}_3 in termini di questi operatori,

$$\hat{L}_3 = \hbar(\hat{a}_R^\dagger\hat{a}_R - \hat{a}_L^\dagger\hat{a}_L) = \hbar(\hat{N}_R - \hat{N}_L), \quad (116)$$

$$\hat{L}^2 = \hbar^2(\hat{N}_R^2 + \hat{N}_L^2 + \hat{N}_3^2 + \hat{N}_R + \hat{N}_L + \hat{N}_3 - 2\hat{N}_R\hat{N}_L + 2\hat{N}_R\hat{N}_3 + 2\hat{N}_L\hat{N}_3 - 2\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_L\hat{a}_R - 2\hat{a}_R^\dagger\hat{a}_L^\dagger\hat{a}_3\hat{a}_3) \quad (117)$$

e

$$\hat{H}_{V_3} = \hbar\omega_3 \left(\hat{a}_R^\dagger\hat{a}_R + \hat{a}_L^\dagger\hat{a}_L + \hat{a}_3^\dagger\hat{a}_3 + \frac{3}{2} \right). \quad (118)$$

Come si osserva dalle (116)-(118), la base di autostati di \hat{N}_R , \hat{N}_L e \hat{N}_3 e dunque anche di $\hat{N} = \hat{N}_R + \hat{N}_L + \hat{N}_3$, generati dall'applicazione v -esima di \hat{a}_R^\dagger , \hat{a}_L^\dagger e \hat{a}_3^\dagger sullo stato di vuoto,

$$|n_R, n_L, n_3\rangle = \frac{(\hat{a}_R^\dagger)^{n_R}(\hat{a}_L^\dagger)^{n_L}(\hat{a}_3^\dagger)^{n_3}}{\sqrt{n_R!n_L!n_3!}}|0, 0, 0\rangle \quad \text{con } v = n_R + n_L + n_3, \quad (119)$$

non corrisponde più alla base $\{|v, l, m\rangle\}$ suggerita dalla catena algebrica $SO(2) \subset SO(3) \subset U(3)$: ciò è dovuto alla presenza dei termini misti $-2\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_L\hat{a}_R$ e $-2\hat{a}_R^\dagger\hat{a}_L^\dagger\hat{a}_3\hat{a}_3$ nell'espressione di \hat{L}^2 , che non permettono di esprimere completamente il quadrato del momento angolare attraverso i tre operatori numerici \hat{N}_R , \hat{N}_L e \hat{N}_3 , a differenza di \hat{L}_3 e di \hat{H}_{V_3} . Conseguentemente, gli stati $\{|v, l, m\rangle\}$ possono essere espressi come combinazione lineare degli autostati $\{|n_R, n_L, n_3\rangle\}$, che conservano un numero fononico totale v e una proiezione del momento angolare $m = n_R - n_L$ ben definiti (cfr. (116) e (118)): applicando, per esempio, l'operatore di innalzamento della proiezione lungo l'asse Q_3 del momento angolare, $\hat{L}_+ = \hbar\sqrt{2}(\hat{a}_3^\dagger\hat{a}_L - \hat{a}_R^\dagger\hat{a}_3)$ e l'operatore \hat{L}^2 allo stato $|n_R = n, n_L = 0, n_3 = 0\rangle \equiv |\sigma_{n,0,0}\rangle$,

$$\hat{L}_+|\sigma_{n,0,0}\rangle = 0 \quad \hat{L}^2|\sigma_{n,0,0}\rangle = n(n+1)\hbar^2|\sigma_{n,0,0}\rangle, \quad (120)$$

troviamo che questo coincide con lo stato $|v = n, l = n, m = n\rangle \equiv |\tau_{n,l,m}\rangle$ della base (119) del sistema. Applicando, invece, l'operatore di abbassamento della proiezione lungo l'asse Q_3 del momento angolare, $\hat{L}_- = \hbar\sqrt{2}(\hat{a}_L^\dagger\hat{a}_3 - \hat{a}_3^\dagger\hat{a}_R)$ troviamo

$$\hat{L}_-|\tau_{n,n,n}\rangle = \sqrt{n}|\tau_{n,n,n-1}\rangle = \hat{L}_-|\sigma_{n,0,0}\rangle = -\sqrt{n}|\sigma_{n-1,0,1}\rangle. \quad (121)$$

Facendo agire ancora \hat{L}_- su ambo i membri della , dopo aver rimosso la superflua \sqrt{n} , si ottiene

$$\hat{L}_-|\tau_{n,n,n-1}\rangle = \sqrt{2n-1}|\tau_{n,n,n-2}\rangle = \sqrt{2n-2}|\sigma_{n-2,0,2}\rangle - |\sigma_{n-1,1,0}\rangle. \quad (122)$$

Applicando, infine, gli operatori \hat{L}^2 e \hat{L}_3 sullo stato combinazione lineare di $|\sigma_{n-2,0,2}\rangle$ e $|\sigma_{n-1,1,0}\rangle$ ortogonale a $|\tau_{n,n,n-2}\rangle$ si può riconoscere lo stato $|\tau_{n,n-2,n-2}\rangle$,

$$|\tau_{n,n-2,n-2}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2n-1}}|\sigma_{n-2,0,2}\rangle + \sqrt{\frac{2n-2}{2n-1}}|\sigma_{n-1,1,0}\rangle, \quad (123)$$

che ha autovalori rispettivamente $(n-2)(n-1)\hbar^2$ e $(n-2)\hbar$. Iterando il procedimento appena illustrato, è possibile esprimere tutti gli stati della base $\{|v, l, m\rangle\}$ tramite combinazioni lineari degli autostati $\{|n_R, n_L, n_3\rangle\}$. Presentati gli autostati in (119), possiamo ora ricercare il loro carattere di simmetria sotto le operazioni del gruppo discreto della hamiltoniana $\mathcal{G}(N)$. Analogamente al caso precedente, si trova¹³ che la terna di operatori $(\hat{a}_R^\dagger, \hat{a}_L^\dagger, \hat{a}_3^\dagger)$ in rappresentazione coordinata trasforma come la coppia di coordinate normali da cui dipendono (Q_1, Q_2, Q_3) , ovvero sotto una rappresentazione irriducibile 3-dimensionale di $\mathcal{G}(N)$ che denotiamo con Γ_3 . Ne segue che le $(v+1)(v+2)/2$ funzioni d'onda degeneri di energia $E(v)$ trasformano rispettivamente come gli operatori

$$(\hat{a}_R^\dagger)^v, (\hat{a}_R^\dagger)^{v-1}(\hat{a}_L^\dagger), (\hat{a}_R^\dagger)^v(\hat{a}_L^\dagger)^1(\hat{a}_3^\dagger)^1, \dots, (\hat{a}_3^\dagger)^v. \quad (124)$$

Essendo le funzioni simmetriche per lo scambio di $(\hat{a}_R^\dagger)^{n_R}, (\hat{a}_L^\dagger)^{n_L}$ o $(\hat{a}_3^\dagger)^{v-n_R-n_L}$, allora le autofunzioni $(v+1)(v+2)/2$ -degeneri trasformano nel loro insieme come la potenza v -esima della rappresentazione 3-dimensionale Γ_3 . Dalla teoria dei gruppi discreti, il carattere della rappresentazione riducibile generata dalla potenza v -esima simmetrica di una rappresentazione irriducibile 3-dimensionale Γ_3 è dato dalla formula [26]

$$\chi^{(\Gamma_3)^v}[R] = \frac{1}{3} \left[2\chi^{\Gamma_3}[R]\chi^{(\Gamma_3)^{v-1}}[R] + \frac{1}{2}(\chi^{\Gamma_3}[R^2] - \chi^{\Gamma_3}[R]^2)\chi^{(\Gamma_3)^{v-2}}[R] + \chi^{\Gamma_3}[R^v] \right], \quad (125)$$

ove si sottointende per convenzione che $\chi^{\Gamma_3}[R^0] = 1$. Tale formula, come la (101) nel caso 2-dimensionale, permette di risalire alla rappresentazione riducibile cui trasformano collettivamente le autofunzioni $(v+1)(v+2)/2$ -degeneri, a sua volta esprimibile come somma diretta di rappresentazioni irriducibili del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana nucleare.

2.6.5 Proprietà di trasformazione della funzione d'onda vibrazionale

Nei due paragrafi precedenti abbiamo osservato che la simmetria di funzione d'onda vibrazionale a v fononi relativa al modo di frequenza λ_k è data, in generale, dal v -prodotto tensore della rappresentazione irriducibile della coordinata normale Q_k nel caso non degenero e dal v -prodotto tensore simmetrico della rappresentazione irriducibile 2-dimensionale della coppia di coordinate normali (Q_{k_1}, Q_{k_2}) . Quest'ultimo risultato è estendibile, anche se non lo dimostriamo, ai casi di degenerazione superiore a due e ci permette di scrivere il carattere di simmetria della funzione d'onda vibrazionale totale come prodotto tensore delle rappresentazioni (in generale, riducibili) cui trasformano le singole autofunzioni d'onda. Se $n \leq 3N - 6$ è il numero di frequenze di vibrazione distinte del sistema (2.6.1), la rappresentazione (riducibile) della funzione d'onda vibrazionale totale, risulta, quindi,

$$\Gamma_V = [\Gamma^1]^{v_1} \otimes [\Gamma^1]^{v_2} \otimes \dots \otimes [\Gamma^n]^{v_n}, \quad (126)$$

ove Γ^i con $i = 1, 2, \dots, n$ è la rappresentazione irriducibile associata alle coordinate normali corrispondenti alla frequenza λ_i e $[\Gamma^i]^{v_i}$ denota il v_i -prodotto tensore (risp. v_i -prodotto tensore simmetrico) della corrispondente rappresentazione irriducibile non degenero (risp. degenero).

¹³ è un fatto tutto da dimostrare

2.6.6 Stati rotazionali del sistema

Terminata l'analisi delle funzioni d'onda vibrazionali, passiamo all'esame degli autostati rotazionali della hamiltoniana \hat{H}_R a secondo membro della (53),

$$\hat{H}_R = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \mu_{\alpha\alpha}^e \hat{J}_{\alpha}^2 = \frac{1}{2} A_e \hat{J}_a^2 + \frac{1}{2} B_e \hat{J}_b^2 + \frac{1}{2} C_e \hat{J}_c^2, \quad (127)$$

ove i coefficienti $A_e = [I_{aa}^e]^{-1}$, $B_e = [I_{bb}^e]^{-1}$ e $C_e = [I_{cc}^e]^{-1}$ sono scelti in modo tale che $A_e \geq B_e \geq C_e$ e gli indici a, b e c indicano gli indici degli assi della terna rotante. Denotando l'asse z nella terna rispettivamente come a, b e c il sistema nucleare rotante verrà definito rispettivamente di tipo I, II o III, secondo la nomenclatura in uso in ambito molecolare.

Dal momento che i coefficienti appena definiti dipendono dagli elementi diagonali del tensore d'inerzia del nucleo all'equilibrio, la forma delle autofunzioni d'onda dipenderà strettamente dal gruppo di simmetria puntuale posseduto delle particelle α in questa configurazione, \mathcal{G}^e . Più precisamente, riprendendo la notazione di Schönflies, si può asserire che

- ♠ un nucleo con uno ed un solo asse principale proprio C_n o improprio S_n con $n \geq 3$ finito si comporta come una *trottola simmetrica*, ovvero due elementi diagonali del tensore d'inerzia coincidono;
- ♠ un nucleo con più di un asse proprio C_n con $n \geq 3$ finito è assimilabile ad una *trottola sferica*, ove i tre elementi diagonali del tensore d'inerzia coincidono;
- ♠ un nucleo con assi propri C_n con $n \leq 2$ è una *trottola asimmetrica* e i tre elementi diagonali del tensore d'inerzia sono tutti distinti.

Non rientrando alcun nucleo α -coniugato in quest'ultima categoria, la nostra analisi verterà esclusivamente sulle autofunzioni e sui livelli energetici dai nuclei di tipo sferico, simmetrico oblato e prolato.

2.6.7 Stati rotazionali di nuclei sferici

Come accennato nella sezione precedente, per i nuclei assimilabili a trottole sferiche, i tre elementi diagonali del tensore d'inerzia $I_{\alpha\beta}^e$ coincidono e la hamiltoniana (127) assume una forma particolarmente semplice,

$$\hat{H}_R = \frac{1}{2} A_e \hat{J}^2, \quad (128)$$

ovvero coincide, modulo un fattore moltiplicativo, con l'operatore di Casimir dell'algebra di $SU(2)$ e $SO(3)$. Quanto appena osservato si può provare mediante un calcolo esplicito dei commutatori fra le componenti del momento angolare nella terna rotante, $(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)$: ricordando la forma data in (66)-(68) si trova

$$[\hat{J}_{\alpha}, \hat{J}_{\beta}] = -i\hbar \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{J}_{\gamma} \quad \text{e} \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_{\alpha}] = 0 \quad \forall \alpha, \beta, \gamma \in x, y, z, \quad (129)$$

ovvero le componenti di \hat{J} nella terna rotante generano un'algebra isomorfa a quella di $SU(2)$ e $SO(3)$, la mappa di isomorfismo essendo data dalla matrice euleriana di cambiamento di base $\Lambda(\varphi, \theta, \chi)^{-1}$ fra la terna rotante e quella a riposo rispetto al laboratorio, con origine comune nel centro di massa del nucleo. Applicando, infatti, l'inversa della $\Lambda(\varphi, \theta, \chi)$,

$$\Lambda(\varphi, \theta, \chi) = \begin{bmatrix} \cos(\theta) \cos(\varphi) \cos(\chi) - \sin(\varphi) \sin(\chi) & \cos(\theta) \sin(\varphi) \cos(\chi) + \cos(\varphi) \sin(\chi) & -\sin(\theta) \cos(\chi) \\ -\cos(\theta) \cos(\varphi) \sin(\chi) - \sin(\varphi) \cos(\chi) & -\cos(\theta) \sin(\varphi) \sin(\chi) + \cos(\varphi) \cos(\chi) & \sin(\theta) \sin(\chi) \\ \sin(\theta) \cos(\varphi) & \sin(\theta) \sin(\varphi) & \cos(\theta) \end{bmatrix}, \quad (130)$$

al vettore momento angolare $(\hat{J}_x, \hat{J}_y, \hat{J}_z)^T$ si ottengono le sue componenti nella base a riposo rispetto al laboratorio, \hat{J}_ζ , \hat{J}_η e \hat{J}_ξ , che permettono di riconoscere a vista le costanti di struttura canoniche dell'algebra di $SU(2)$ e $SO(3)$,

$$[\hat{J}_i, \hat{J}_j] = i\hbar\epsilon_{ijk}\hat{J}_k \quad \text{e} \quad [\hat{J}^2, \hat{J}_k] = 0 \quad \forall i, j, k \in \xi, \eta, \zeta. \quad (131)$$

Ricordando che le rappresentazioni irriducibili delle algebre di $SU(2)$ e $SO(3)$ possono essere scelte in modo tale che \hat{J}^2 e \hat{J}_z (oppure \hat{J}^2 e \hat{J}_ζ) siano simultaneamente diagonali e che \hat{J}_ζ e \hat{J}_z sono osservabili compatibili¹⁴

$$[\hat{J}_\zeta, \hat{J}_z] = 0, \quad (132)$$

possiamo scegliere gli autostati della (128) come autostati simultanei di \hat{J}_z , \hat{J}_ζ e \hat{H}_R , ovvero

$$\hat{H}_R|J, K, M\rangle = \frac{1}{2}A_eJ(J+1)\hbar^2|J, K, M\rangle \quad \hat{J}_z|J, K, M\rangle = \hbar K|J, K, M\rangle \quad \hat{J}_\zeta|J, K, M\rangle = \hbar M|J, K, M\rangle, \quad (133)$$

con l'usuale regola di selezione

$$J \in 0, 1, 2, 3, \dots \quad M, K = J, J-1, J-2, \dots -J. \quad (134)$$

Dalla (128) segue, inoltre, che ciascun livello energetico a J fissato corrisponde a $(2J+1)^2$ autofunzioni degeneri, che trasformano sotto rappresentazioni irriducibili della catena algebrica $SO(2) \subset SO(3), SU(2)$. Esprimendo gli operatori \hat{J}_z , \hat{J}_ζ e \hat{H}_R in rappresentazione coordinata (φ, θ, χ) nelle rispettive equazioni agli autovalori sulle funzioni d'onda, si ottiene, per l'autofunzione del sistema, l'espressione

$$\Psi_{R_s}(\varphi, \theta, \chi) \equiv \Psi_{J,K,M}(\varphi, \theta, \chi) = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} D_{MK}^J(\varphi, \theta, \chi)^*, \quad (135)$$

ove $D_{MK}^J(\varphi, \theta, \chi)$ è una *matrice D di Wigner*,

$$D_{MK}^J(\varphi, \theta, \chi) = e^{-iM\varphi} d_{KM}^J(\theta) e^{-iK\chi} \quad (136)$$

ove $d_{MK}^J(\theta)$ è detta *matrice ridotta o d di Wigner*,

$$d_{KM}^J(\theta) = \sum_{\sigma} (-1)^{\sigma} \frac{\sqrt{(J+M)!(J-M)!(J+K)!(J-K)!}}{\sigma!(J-K-\sigma)!(K-M+\sigma)!(J+M-\sigma)!} [\cos(\frac{\theta}{2})]^{2J+M-K-2\sigma} [\sin(\frac{\theta}{2})]^{K-M+2\sigma} \quad (137)$$

ove la somma sugli interi σ comincia dal maggiore fra 0 e $K-M$ e termina nel minore fra $J-M$ e $J+K$.

Trovata la forma degli autostati della (128), proseguiamo con l'analisi delle proprietà di trasformazione delle autofunzioni sotto elementi del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana (53), $\mathcal{G}(N)$. A tale scopo, scriviamo l'autostato del sistema attraverso gli operatori di scala della terna rotante \hat{J}_n^{\pm} e della terna solidale al laboratorio \hat{J}_l^{\pm} ¹⁵

$$|J, \pm K, \pm M\rangle = N_{\pm} (\hat{J}_n^{\mp})^K (\hat{J}_l^{\pm})^M |J, 0, 0\rangle. \quad (138)$$

Ricordando le proprietà di trasformazione degli angoli di Eulero e dei momenti angolari in *Tabella 1* sotto le operazioni R_z^{β} e R_{α}^{π} si trova, per gli operatori di scala della terna rotante

$$R_z^{\beta} \hat{J}_n^{\pm} = [\hat{J}_x \cos(\beta) + \hat{J}_y \sin(\beta)] R_z^{\beta} \pm i[-\hat{J}_x \sin(\beta) + \hat{J}_y \cos(\beta)] R_z^{\beta} = e^{\mp i\beta} \hat{J}_n^{\pm} R_z^{\beta} \quad (139)$$

e

$$R_{\alpha}^{\pi} \hat{J}_n^{\pm} = [\hat{J}_x \cos(2\alpha) + \hat{J}_y \sin(2\alpha)] R_{\alpha}^{\pi} \pm i[\hat{J}_x \sin(2\alpha) - \hat{J}_y \cos(2\alpha)] R_{\alpha}^{\pi} = e^{\pm i2\alpha} \hat{J}_n^{\pm} R_{\alpha}^{\pi}, \quad (140)$$

¹⁴ Il calcolo diretto di \hat{J}_ζ in rappresentazione coordinata a partire dalla \hat{J}_z in (66) secondo il procedimento suggerito porge $\hat{J}_z = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \chi}$ e $\hat{J}_\zeta = -i\hbar \frac{\partial}{\partial \varphi}$.

¹⁵ Tali operatori s'intendono definiti come da convenzione, ovvero rispettivamente come $\hat{J}_n^{\pm} = \hat{J}_x \pm i\hat{J}_y$ e $\hat{J}_l^{\pm} = \hat{J}_\xi \pm i\hat{J}_\eta$.

mentre i \hat{J}_I^\pm rimangono invariati sotto le date operazioni,

$$R_z^\beta \hat{J}_I^\pm = \hat{J}_I^\pm R_z^\beta \quad \text{e} \quad R_\alpha^\pi \hat{J}_I^\pm = \hat{J}_I^\pm R_\alpha^\pi \quad (141)$$

che agiscono unicamente sulla terna solidale al nucleo. Ora, passando dal ket $|J, 0, 0\rangle$ alla rispettiva funzione d'onda in rappresentazione coordinata, troviamo che R_z^β lascia immutato $D_{00}^J(\theta, \phi, \chi)^* = D_{00}^J(\theta)$ essendo θ invariante rispetto ad una rotazione attorno all'asse z , mentre R_α^π aggiunge all'autofunzione (e al relativo ket) una fase $(-1)^J$,

$$\begin{aligned} R_\alpha^\pi \Psi_{J,0,0}(\varphi, \theta, \chi) &= \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} R_\alpha^\pi D_{00}^J(\theta) = \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} (J!)^2 R_\alpha^\pi \sum_{\sigma=0}^J (-1)^\sigma \frac{[\cos^2(\frac{\theta}{2})]^{J-\sigma} [\sin^2(\frac{\theta}{2})]^\sigma}{\sigma!^2 J! J - \sigma!} \\ &= \sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} (J!)^2 \sum_{\sigma=0}^J (-1)^\sigma \frac{[\cos^2(\frac{\theta}{2})]^\sigma [\sin^2(\frac{\theta}{2})]^{J-\sigma}}{\sigma!^2 J! J - \sigma!} = (-1)^J \Psi_{R_s}(\varphi, \theta, \chi), \end{aligned} \quad (142)$$

essendo $R_\alpha^\pi(\theta) = (\pi - \theta)$ (cfr. *Tabella 1*). In conclusione, mettendo insieme i risultati ottenuti finora, si ottiene, per gli autoket della (128),

$$R_z^\beta |J, K, M\rangle = e^{iK\beta} |J, K, M\rangle \quad \text{e} \quad R_\alpha^\pi |J, K, M\rangle = (-1)^J e^{-2iK\alpha} |J, -K, M\rangle. \quad (143)$$

2.6.8 Stati rotazionali di nuclei simmetrici

Nei nuclei che si comportano come trottole simmetriche, due dei tre elementi diagonalizzati del tensore d'inerzia $I_{\alpha\beta}^e$ coincidono: in particolare, se $C_e = B_e$ il nucleo sarà prolato, mentre se $A_e = B_e$ la configurazione d'equilibrio sarà oblatata. Nel primo caso, individuando in a, b e c rispettivamente gli assi z, x e y del sistema (rotore di *tipo I*), l'hamiltoniana del sistema diviene

$$\hat{H}_{Rp} = \frac{1}{2} B_e \hat{J}^2 + \frac{1}{2} (A_e - B_e) \hat{J}_z^2, \quad (144)$$

ovvero coincide, con una combinazione lineare dell'operatore di Casimir dell'algebra di $SU(2)$ e $SO(3)$, \hat{J}^2 , e del Casimir di $SO(2)$, \hat{J}_z^2 . Poichè l'hamiltoniana commuta ancora con \hat{J}_z , possiamo ancora scegliere i ket $|J, K, M\rangle$ come base di autostati del sistema (144), con la essenziale differenza che la degenerazione delle autoenergie nel numero quantico K è rotta dalla dipendenza esplicita di \hat{H}_{Rp} da \hat{J}_z : ne segue che gli stati a J e $|K|$ fissato avranno una degenerazione pari a $2(2J+1)$. Procedendo come nella sezione precedente, gli autovalori dell'energia avranno la forma

$$E_{Rp} = \frac{1}{2} B_e \hbar^2 J(J+1) + \frac{1}{2} (A_e - B_e) \hbar^2 K^2, \quad (145)$$

e, fissato J , saranno crescenti al crescere della proiezione del momento angolare sull'asse z della terna rotante, $\hbar K$.

Per quanto riguarda il nucleo simmetrico oblatato, denotando con a, b e c rispettivamente gli assi x, y e z del sistema (rotore di *tipo III*), l'hamiltoniana risulta

$$\hat{H}_{Ro} = \frac{1}{2} B_e \hat{J}^2 - \frac{1}{2} (B_e - C_e) \hat{J}_z^2, \quad (146)$$

ovvero valgono le stesse considerazioni del sistema prolato. Gli autostati del sistema sono, pertanto, i $|J, K, M\rangle$ con la medesima degenerazione dei precedenti, mentre le autoenergie

$$E_{Ro} = \frac{1}{2} B_e \hbar^2 J(J+1) - \frac{1}{2} (B_e - C_e) \hbar^2 K^2, \quad (147)$$

risultano decrescenti al crescere delle proiezioni $\hbar K$ del momento angolare sull'asse z , contrariamente al caso prolato.

Essendo gli autostati di base nei due nuclei prolati e oblato coincidenti con quelli del nucleo sfericamente simmetrico, l'analisi delle proprietà di trasformazione degli stati sotto le operazioni del gruppo di simmetria del nucleo $\mathcal{G}(N)$ coincide con quella nella sezione precedente, dunque possiamo iniziare ad applicare i risultati finora ottenuti in questo modello *molecolare* ai nuclei di ^{12}C e ^{16}O .

2.7 TRANSIZIONI ELETTROMAGNETICHE

L'interazione della radiazione elettromagnetica con il nucleo fornisce la maggior parte dell'informazione sperimentale di struttura nucleare attualmente disponibile. La finita probabilità per il nucleo di passare da uno stato ad un altro del suo spettro attraverso l'emissione o l'assorbimento di raggi γ rende, inoltre, accessibile il contenuto in momento angolare dei singoli livelli, numero quantico che assume significati diversi all'interno dei modelli nucleari.

In questa descrizione, riveste un ruolo peculiare lo sviluppo delle onde elettromagnetiche, intese come soluzioni di onde piane di momento $\hbar k$ e polarizzazione e_μ (in base sferica) dell'equazione di Helmholtz,

$$(\nabla^2 + k^2)\vec{A}(\vec{r}, k)e^{ickt} = 0, \quad (148)$$

in termini di potenziali vettori con proprietà di trasformazione ben definite sotto $SO(3)$, ovvero dotati di buon momento angolare λ ,

$$e_\mu e^{ikz} = -\mu\sqrt{2\pi} \sum_\lambda \sqrt{2\lambda+1} i^\lambda \left(\vec{A}_{\lambda\mu}(\vec{r}; M) + i\mu \vec{A}_{\lambda\mu}(\vec{r}; E) \right), \quad (149)$$

ove z è la direzione di propagazione delle onde e

$$\vec{A}_{\lambda\mu}(\vec{r}; E) = \sqrt{\frac{\lambda+1}{2\lambda+1}} j_{\lambda-1}(kr) \vec{Y}_{\lambda\mu, \lambda-1}(\Omega) - \sqrt{\frac{\lambda}{2\lambda+1}} j_{\lambda+1}(kr) \vec{Y}_{\lambda\mu, \lambda+1}(\Omega) \quad (150)$$

e

$$\vec{A}_{\lambda\mu}(\vec{r}; M) = j_\lambda(kr) \vec{Y}_{\lambda\mu, \lambda}(\Omega) \quad (151)$$

sono, rispettivamente, i potenziali vettori di 2^λ -polo elettrico e magnetico¹⁶. Queste due ultime espressioni possono assumere una forma più semplice quando $kr \ll 1$ ¹⁷,

$$\vec{A}_{\lambda\mu}(\vec{r}; E) \approx \sqrt{\frac{\lambda+1}{\lambda}} \frac{1}{k} \vec{\nabla} \left(\frac{(kr)^\lambda}{(2\lambda+1)!!} Y_{\lambda\mu}(\Omega) \right) \quad (153)$$

e

$$\vec{A}_{\lambda\mu}(\vec{r}; M) \approx \frac{1}{\sqrt{\lambda(\lambda+1)}} \frac{1}{\hbar} \vec{L} \left(\frac{(kr)^\lambda}{(2\lambda+1)!!} Y_{\lambda\mu}(\Omega) \right), \quad (154)$$

ovvero quando l'energia della radiazione incidente sul nucleo presenta una lunghezza d'onda molto maggiore della sua dimensione tipica, R : in particolare, se il raggio nucleare è di 5 fm il limite superiore sull'energia del fotone incidente, $\hbar ck$, si attesta a circa 40 MeV, mentre per nuclei con $R = 10 fm$ tale soglia corrisponde a poco meno di 20 MeV, restrizione che ci permette di descrivere tutte le transizioni di nostro interesse, escluse le risonanze giganti.

E' proprio in tale approssimazione che introduciamo il tasso di transizione di multipolo elettrico o magnetico (con $R = E, M$) fra gli stati nucleari caratterizzati dagli insiemi i e f di numeri quantici e dai rispettivi momenti angolari J_i e J_f ,

$$T_{fi}(\lambda, R) = \frac{8\pi(\lambda+1)}{\lambda[(2\lambda+1)!!]^2} \frac{k^{2\lambda+1}}{\hbar} B(R\lambda, J_i \rightarrow J_f), \quad (155)$$

ove $B(R\lambda, J_i \rightarrow J_f)$ è il contenuto di maggiore interesse della (155), la cosiddetta *probabilità ridotta di transizione* di multipolo, definita come

$$B(R\lambda, J_i \rightarrow J_f) = \frac{1}{2J_i+1} \sum_{\mu=-\lambda}^{\lambda} |\langle f | \Omega_{\lambda\mu}(R) | i \rangle|^2, \quad (156)$$

¹⁶ Si noti che nelle (150)-(151) sono state introdotte sia le funzioni di Bessel sferiche $j_l(kr)$ sia le armoniche sferiche vettoriali, $\vec{Y}_{\lambda\mu, l}$, legate alle $Y_{\lambda\mu}(\Omega)$ dalla relazione

$$\vec{Y}_{\lambda\mu, l} = \sum_{m, \nu} (11\lambda | \nu m \mu) Y_{\lambda\nu} e_m, \quad (152)$$

ove e_m sono i versori di una base sferica (complessa), e_0, e_\pm , e $(11\lambda | \nu m \mu)$ è un coefficiente di Clebsch-Gordan.

¹⁷ Per una ricostruzione completa dei passaggi della data approssimazione si rimanda al testo *Nuclear Models* di W. Greiner e J.A. Maruhn [28].

ove l'operatore compreso nell'elemento di matrice assume la forma [28]

$$\Omega_{\lambda\mu}(E) = \int d^3r r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi) \hat{p}(\vec{r}) \quad (157)$$

per transizioni di multipolo elettrico e

$$\Omega_{\lambda\mu}(M) = -\frac{1}{\hbar c(\lambda + 1)} \int d^3r \hat{L} [Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi)] \cdot \hat{j}(\vec{r}) \quad (158)$$

per transizioni di multipolo magnetico. In particolare, nel nostro modello α -cluster in approssimazione di particelle puntiformi, gli operatori di densità di carica, $\hat{p}(\vec{r})$ e densità di corrente $\hat{j}(\vec{r})$ divengono, rispettivamente

$$\hat{p}(r) = 2e \sum_{j=1}^N \delta^{(3)}(\vec{r} - \vec{r}_j) \quad (159)$$

e

$$\hat{j}(\vec{r}) = \frac{e\hbar}{mi} \sum_{j=1}^N [\delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{\nabla}_j - (\delta(\vec{r} - \vec{r}_j) \vec{\nabla}_j)^\dagger], \quad (160)$$

ove i vettori \vec{r}_j indicano la posizione delle N particelle α e m la loro massa. A partire dal contenuto in momento angolare λ degli operatori multipolari $\Omega_{\lambda\mu}(R)$ e da quello degli stati nucleare iniziale e finale è possibile stabilire la prima regola di selezione sulle transizioni elettromagnetiche,

$$|J_i - \lambda| \leq J_f \leq J_i + \lambda \quad (161)$$

che segue direttamente dalla regola di addizione dei momenti angolari J_i e λ . Un'ulteriore condizione da imporre sugli stati nucleari proviene, invece, della parità dell'argomento degli integrali in d^3r nelle (157)-(158), che deve essere complessivamente positiva, essendo il dominio d'integrazione simmetrico: sapendo che gli operatori di transizione di multipolo elettrico e magnetico hanno, rispettivamente, parità $(-1)^\lambda$ e $(-1)^{\lambda+1}$, segue che due stati iniziali con parità opposte (risp. concordi) possono essere collegati da transizioni di multipolo elettrico dispari (risp. pari) o di multipolo magnetico pari (risp. dispari). Nel nostro modello nucleare α -cluster quanto appena asserito si traduce nella richiesta che le irreps di $\mathcal{G}(N)$ sotto cui gli operatori $\Omega_{\lambda\mu}(R)$ trasformano abbiano carattere ± 1 sotto inversione e rispettino la natura additiva degli operatori di densità di carica e di corrente¹⁸, ovvero siano bosoniche e 1-dimensionali, come le A'_1 e le A'_1 di \mathcal{D}_{3h} o le A_{1g} e A_{2u} di \mathcal{O}_h . Pur considerando le regole di selezione appena enunciate, a mediare una data transizione rimangono ancora numerosi operatori multipolari $\Omega_{\lambda\mu}(R)$, fra i quali è auspicabile poter operare una selezione.

Dipendendo fortemente dal modello nucleare considerato non è possibile ottenere una stima generale dell'importanza relativa fra le varie multipolarità elettromagnetiche che permettono di compiere una determinata transizione, pertanto ci affidiamo alle *stime di Weißkopf*, secondo le quali le funzioni d'onda nei bra e ket delle (157)-(158) possono essere approssimate con un prodotto fra una parte spinoriale di singola particella, una parte orbitale di tipo costante, Y_{00} e una parte radiale *a gradino*, costante entro il raggio nucleare R e nulla al di fuori di esso [28]. Seppure valide per le transizioni di singolo nucleone, queste stime costituiscono un tentativo di rispondere alla nostra richiesta, suggerendo che, per nuclei con $8 \leq A \leq 40$ il tasso di transizione T_{fi} di $2^{\lambda+1}$ -polo elettrico è pari a 0,0016÷0,016 volte quello di 2^λ -polo magnetico, mentre è 13÷39 volte quello della stessa multipolarità magnetica [28]. Inoltre, sapendo che il tasso di transizione di multipolo elettrico scala come $(kR)^{2\lambda}$ e che il regime di validità della (157) è $kR \ll 1$, si deduce che le multipolarità elettriche, su cui ci concentriamo al termine del prossimo capitolo, avranno un'importanza decrescente al crescere di λ .

Infine, per completezza è utile osservare come le probabilità ridotte di transizione, a dispetto di quanto suggerisce il nome, sono grandezze dimensionali che dipendono dal quadrato dell'unità di carica e

¹⁸ Un'operazione di permutazione di $\mathcal{G}(N)$ comporta unicamente uno scambio degli indici delle particelle all'interno delle sommatorie contenute negli operatori $\hat{p}(\vec{r})$ e $\hat{j}(\vec{r})$ e, dunque, ha carattere +1.

dall'unità di lunghezza elevata alla 2λ , quindi dalla multipolarità della transizione stessa. Comune è, in fisica nucleare, esprimere queste quantità nelle unità di Weiskopf¹⁹, che presentiamo sia per le transizioni di multipolo elettrico che per quelle di multipolo magnetico,

$$B(E\lambda)_{W.U.} = \frac{1}{4\pi} \left(\frac{3}{\lambda + 3} \right)^2 (1, 2)^{2\lambda} A^{2\lambda/3} e^2 \text{fm}^{2\lambda} \quad (162)$$

e

$$B(M\lambda)_{W.U.} = \frac{10}{\pi} \left(\frac{3}{\lambda + 3} \right)^2 (1, 2)^{2\lambda-2} A^{\frac{2\lambda-2}{3}} \left(\frac{\mu_N}{c} \right)^2 \text{fm}^{2\lambda-2} \quad (163)$$

ove $\mu_N = e\hbar/m_n$ è il magnetone nucleare e A è il numero di massa. L'osservazione di transizioni di multipolo elettromagnetico con probabilità ridotta di transizione superiore a una unità di Weiskopf è considerata un'importante evidenza della partecipazione di più nucleoni alle date eccitazioni e dunque depone a favore dei modelli nucleari di tipo *collettivo* [28].

♣ RIEPILOGO

Questo capitolo è incentrato attorno alla descrizione del modello soggiacente a quello α -cluster macroscopico di tipo molecolare proposto originariamente da J.A. Wheeler in *Molecular Viewpoints in Nuclear Structure* [59], mutuando il formalismo e la notazione dal testo di E. Bright Wilson, J.C. Decius, P.C. Cross *The theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra* [10], da quello di P.R. Bunker e P. Jensen, *Molecular Symmetry and Spectroscopy* [13] e dai compendi omonimi di M. Houde [33].

La trattazione si apre con la descrizione dell'analogo classico del sistema di particelle α del modello in analisi, ovvero quello di N particelle puntiformi identiche connesse da molle ideali con la medesima costante elastica. Nella derivazione dell'espressione dell'hamiltoniana classica del sistema, le coordinate del centro di massa sono state scartate, consentendo la descrizione dei moti rotovibrazionali attraverso i soli angoli di Eulero (φ, θ, χ) e le coordinate normali di vibrazione, che permettono di diagonalizzare la forma quadratica del potenziale elastico. Successivamente, il sistema classico è stato quantizzato seguendo il procedimento di Pauli, e sono state operate le principali semplificazioni sull'hamiltoniana, come la cancellazione dei momenti angolari vibrazionali e l'identificazione dei momenti d'inerzia con quelli del sistema di particelle all'equilibrio, approssimazioni che hanno permesso il disaccoppiamento fra i moti rotazionali e quelli vibrazionali. Grazie a queste semplificazioni, l'hamiltoniana del sistema ha assunto la forma di quella di un rotore rigido simmetrico, sferico o triassiale accostato a $3N-6$ oscillatori armonici unidimensionali disaccoppiati, invariante per permutazioni e inversioni delle coordinate delle particelle. A questo punto, fa il suo ingresso nella dissertazione il gruppo di permutazione-inversione del sistema di bosoni, $\mathcal{G}(N)$, che ricoprirà un ruolo cruciale nella costruzione degli autostati dell'hamiltoniana rotovibrazionale rispettosi della simmetria di scambio bosonica, propria delle particelle α . Viene, inoltre, accennato il legame fra quest'ultimo e il gruppo puntuale di simmetria delle particelle α nella configurazione di equilibrio ai vertici di una struttura geometrica regolare, \mathcal{G} . In seguito, sono richiamati gli autostati di un oscillatore armonico 1-, 2- e 3-dimensionale, mettendo in luce, nel primo caso, il legame fra la base standard e quella polare degli autostati e nel secondo quello con la base sferica.

In chiusura, sono stati introdotti gli operatori di transizione di multipolo elettromagnetico e le probabilità ridotte di transizione in vista del loro successivo utilizzo nel contesto del ^{12}C [16], nonché le unità di Weiskopf, comunemente adottate in letteratura per quantificare tali grandezze.

¹⁹ abbreviate, spesso, in W.U.

 IL NUCLEO ^{12}C

Dopo aver studiato le autofunzioni dell'hamiltoniana quantistica di sistemi rotovibranti di N particelle identiche e analizzato le loro proprietà di trasformazione sotto le operazioni del gruppo di permutazione-inversione $\mathcal{G}(N)$, applichiamo i risultati di questo modello *molecolare* a due nuclei α -conuigati, il ^{12}C e il ^{16}O , due isotopi che saranno oggetto di una trattazione algebrica nel prossimo capitolo.

3.1 INTRODUZIONE

Il ^{12}C rappresenta uno dei sistemi di protoni e neutroni dotati di maggiore stabilità e costituisce un terreno di prova per numerosi modelli di struttura nucleare, collettivi e microscopici. Il suo ruolo cruciale nella nucleosintesi stellare e in particolare nel ciclo CNO, ha portato prima alla teorizzazione e poi alla scoperta di un livello nucleare di grande interesse per i modelli α -cluster, lo stato 0^+ a $7,65420 \pm 0,00015$ MeV [2] che prende il nome di risonanza di Hoyle. Fu, infatti, l'astronomo F. Hoyle nel 1954 a postulare l'esistenza di uno stato eccitato 0^+ nello spettro del ^{12}C situato leggermente al di sopra della soglia di decadimento del nucleo in tre particelle α che, insieme allo stato fondamentale ^8Be , posto 91 keV al di sopra della soglia di decadimento a 2α , avrebbe dovuto mantenere in ambienti stellari una quantità di ^{12}C e ^8Be tale da sostenere la fusione dell'idrogeno in ^4He attraverso il ciclo CNO [41]. La conferma sperimentale dell'esistenza di questo stato 0^+ , che decade in 10^{-17} s in $^8\text{Be} + \alpha^1$, ha permesso di escludere processi d'urto a tre corpi all'interno del ciclo CNO e di meccanismi di fusione di nuclei più pesanti.

La presenza di uno stato eccitato 0^+ ad una energia relativamente bassa, unita ad un'elevata ampiezza di decadimento 3α , difficilmente interpretabili attraverso il modello a shell, hanno portato un rinnovato interesse verso i modelli di J.A.Wheeler (1937) e di Hafstad-Teller (1938), sviluppati in analogia con le molecole triatomiche omonucleari e oggetto della nostra trattazione all'interno di questo capitolo, e dato un forte impulso allo sviluppo di altri modelli α -cluster collettivi, di tipo algebrico, come l'*Algebraic Cluster Model* (ACM) di R.Bijker e F.Iachello (1999) [5], che condivide parte del formalismo del modello di struttura adronica a tre quark di R. Bijker, F. Iachello e A. Leviatan (1994) [7], o di tipo microscopico come quello di H. Horiuchi (1972) e di Bloch-Brink. Secondo il diagramma di K. Ikeda (1968), la regione di dominanza dei fenomeni di clustering del carbonio si colloca intorno alla soglia di disintegrazione in 3α , pari a $7,3672$ MeV, mentre la formazione delle particelle α è inibita nelle vicinanze dello stato fondamentale, a causa della compenetrazione fra i tre nuclei di elio: al crescere dell'energia di eccitazione aumenta l'energia di legame dei cluster alle spese di quella di interazione fra di essi.

Sebbene non esista un'univoca interpretazione della configurazione delle particelle α all'interno del nucleo nella banda di Hoyle, le recenti misure sperimentali degli stati 2^+ [21] e 4^+ [22] della stessa serie premettono di escludere la configurazione lineare originariamente avanzata da H. Morinaga nel 1956, secondo cui, dato l'elevato momento d'inerzia della configurazione, il primo stato rotazionale eccitato della banda avrebbe dovuto trovarsi a soli $0,8$ MeV dallo 0^+ , contro i 2 MeV osservati [40][41].

¹ Ridotta, ma non irrilevante, è anche la branching ratio dello stato di Hoyle verso lo il ground state, che si attesta intorno a $0,04\%$ [41].

Ciò che appare acquisito è, invece, che i nuclei di ^4He in questa banda interagiscono più debolmente fra loro, dando origine ad un arrangiamento oblatto di volume maggiore rispetto a quello dello stato fondamentale, tanto da suggerire a Y. Funaki, H. Horiuchi, G. Röpke, P. Schuck e A. Tohsaki (2005), l'interpretazione del ^{12}C come un gas diluito di bosoni che possiede la struttura di un condensato di Bose-Einstein, provando che la funzione d'onda della risonanza di Hoyle 0^+ ottenuta dal modello microscopico di Bloch-Brink [54] ha una sovrapposizione quadratica di più del 90% con quella di un condensato di tre particelle α con piccole deviazioni dalla sfericità [24].

Secondo questo penultimo modello, il passaggio del sistema dallo stato fondamentale ad uno qualsiasi di questa banda comporta una trasformazione di fase [54], evidenziata dalla comparsa di più di un minimo nelle superfici di energia associate ai singoli livelli della stessa: in particolare, lo stato di Hoyle 0^+ , possiede due configurazioni di equilibrio di tipo triangolare isoscele con angoli d'apertura pari a circa 40° e 95° , mentre gli stati della banda fondamentale presentano come unica configurazione quella triangolare equilatera. Fra i successi di questo modello, che si avvale del *Generator Coordinate Method* (GCM) e dell'equazione di Hill-Wheeler [30], si annoverano le ampiezze di decadimento degli stati eccitati 0^+ e 2^+ , la probabilità ridotte di transizione $E2$ (risp. $E0$) dello 2_1^+ (risp. 0_2^+) verso lo stato fondamentale e l'energia dello stato 3_1^- della stessa banda, riprodotta meno fedelmente dal modello α -cluster molecolare di Wheeler che, tuttavia, risulta più efficace del primo nella predizione dello stato 4^+ della stessa banda.

Di impostazione microscopica è anche il coevo modello di H. Horiuchi (1974) [31], che costituisce un'approssimazione del *Resonating Group Method* (RGM) [59] (cfr. § 2.2) compiuta estendendo l'*Orthogonality Condition Model* di S. Saito [47] ad un sistema a tre cluster, modello che trae origine dall'osservazione del comportamento nodale delle *funzioni d'onda relative* di processi d'urto fra particelle α . Questo approccio risulta di buon successo per la descrizione degli stati a cluster più pronunciati e in particolare per l'elemento di matrice di transizione $E0$ fra lo stato di Hoyle e quello fondamentale, mentre risulta meno efficace per i livelli più prossimi allo stato fondamentale, ove è maggiore la compenetrazione fra i nuclei di elio.

Infine, è importante sottolineare che non tutte le righe oggi osservate per questo nucleo trovano una interpretazione teorica nei modelli a cluster: primi fra tutti, risultano esclusi dalla legge di composizione dei momenti angolari i livelli cui è associato un isospin totale T diverso da zero, dal momento che le particelle α sono accoppiamenti di quattro nucleoni a isospin nullo. Di natura energetica è invece l'esclusione del livello 1^+ che, nonostante presenti il corretto isospin totale ($T = 0$), si situa a soli 12,71 MeV dal ground state, un'energia troppo bassa per essere incluso nella più vicina banda rotazionale in cui uno stato di tale parità e momento angolare è previsto [27][42].

3.2 PROPRIETÀ DI TRASFORMAZIONE DELLE COORDINATE ROTOVIBRAZIONALI

Avviamo la nostra analisi con il nucleo α -coniugato stabile più semplice, ovvero il planare ^{12}C , formato da tre particelle α che all'equilibrio si dispongono ai vertici di un triangolo equilatero. Il suo gruppo puntuale di simmetria all'equilibrio corrisponde, quindi, a \mathcal{D}_{3h} , composto da due rotazioni di 120° lungo l'asse principale del nucleo, C_3 , ortogonale al piano orizzontale del nucleo; tre rotazioni C_2 attorno ai tre rispettivi assi diedrali; tre riflessioni rispetto ai tre piani verticali intersecanti il piano orizzontale nei tre assi di simmetria del triangolo, σ_V ; una riflessione rispetto al piano orizzontale σ_h e due rotazioni attorno all'asse principale seguite da riflessione sul piano orizzontale, S_3 , per un totale di 12 elementi. D'altro canto, il gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana cui \mathcal{D}_{3h} è isomorfo, $\mathcal{D}_{3h}(N)$, è dato dal prodotto tensore del gruppo delle permutazioni di tre elementi $S_3 = \{(1)(2)(3), (1)(23), (12)(3), (13)(2), (123), (132)\}$, di ordine sei, per il gruppo d'inversione $C_i = \{I, I^*\}$ di due elementi, ovvero

$$\mathcal{D}_{3h}(N) \equiv \mathcal{G}(N) = S_3 \otimes C_i. \quad (164)$$

Procedendo come in §1.3.5, ovvero decomponendo ciascuna delle dodici operazioni del gruppo di permutazione-inversione dell'hamiltoniana

$$\hat{H}_{RV} = \frac{1}{2} (\hat{p}^2 + \omega_1^2 \hat{Q}^2) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^2 (\hat{p}_i^2 + \omega_2^2 \hat{Q}_i^2) + \sum_{i=1}^3 \frac{\hat{I}_i^2}{2I_i^e}, \quad (165)$$

in una rotazione della terna solidale al nucleo R_{rot} , e in una operazione del gruppo puntuale all'equilibrio \mathcal{D}_{3h} eseguita sulle coordinate di spostamento cartesiane $\Delta\alpha_i$ con $\alpha = x, y, z$ e $i = 1, 2, 3$, si può ricostruire la mappa di isomorfismo fra i due gruppi, associando uno ed un solo elemento di \mathcal{D}_{3h} a ciascuna delle operazioni di permutazione-inversione di $\mathcal{D}_{3h}(N)$.

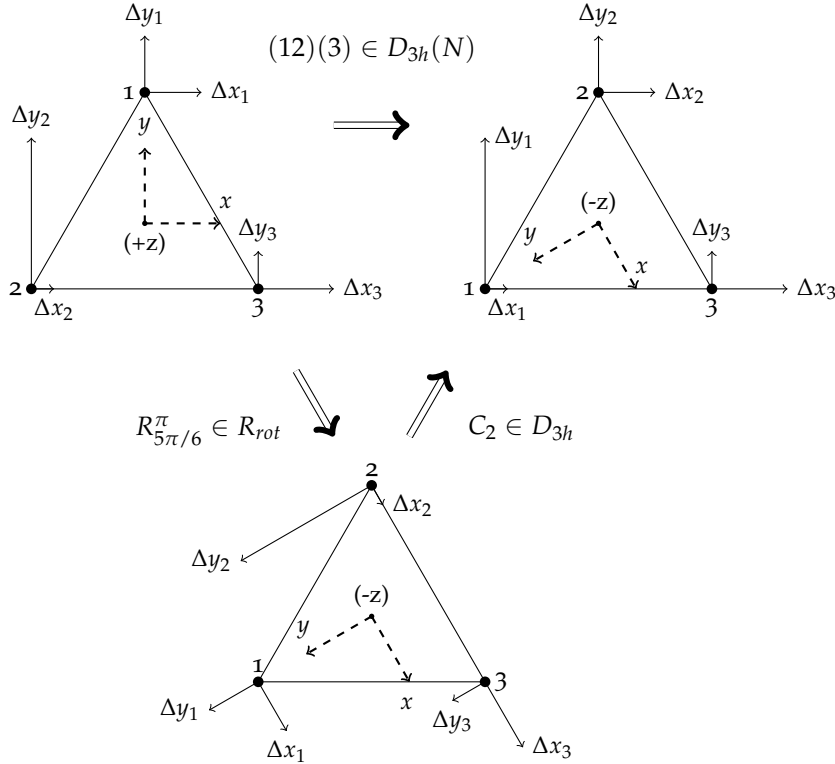


Figura 4: Decomposizione dell'operazione $(12)(3)$ di $\mathcal{D}_{3h}(N)$ nell'operazione C_2 di \mathcal{D}_{3h} e nella rotazione degli assi della terna solidale $R_{5\pi/6}^{\pi}$ di R_{rot} . Indicando con $\Delta\alpha_i$ ($\alpha = x, y, z$ e $i = 1, 2, 3$) i generici spostamenti cartesiani delle tre particelle α dalla posizione di equilibrio, si può decomporre l'operazione $(12)(3)$ che scambia le etichette delle due particelle lasciando invariati gli spostamenti, in una rotazione di π attorno ad un asse nel piano xy che forma un angolo di $5\pi/6$ rispetto all'asse x della terna solidale al nucleo e in una rotazione di π attorno all'asse passante per il centro di massa e per il sito della particella non permutata (3), (C_2) , che agisce unicamente sugli spostamenti dei tre nuclei di elio dall'equilibrio.

Denotando le tre particelle con i label (1), (2) e (3) e scegliendo l'orientazione terna solidale al nucleo come in fig. (4), si trova

$$(1)(2)(3) \leftrightarrow \mathbb{I}R_0 \quad (166)$$

$$(123) \leftrightarrow C_3 R_z^{4\pi/3} \quad (132) \leftrightarrow C_3^2 R_z^{2\pi/3} \quad (167)$$

$$(12)(3) \leftrightarrow C_2 R_{5\pi/6}^{\pi} \quad (23)(1) \leftrightarrow C_2 R_{\pi/2}^{\pi} \quad (13)(2) \leftrightarrow C_2 R_{\pi/6}^{\pi} \quad (168)$$

$$(1)(2)(3)^* \leftrightarrow \sigma_h R_z^{\pi} \quad (169)$$

$$(123)^* \leftrightarrow S_3 R_z^{\pi/3} \quad (132)^* \leftrightarrow S_3^2 R_z^{5\pi/3} \quad (170)$$

$$(12)(3)^* \leftrightarrow \sigma_V R_{4\pi/3}^{\pi} \quad (23)(1)^* \leftrightarrow \sigma_V R_0^{\pi} \quad (13)(2)^* \leftrightarrow \sigma_V R_{2\pi/3}^{\pi}, \quad (171)$$

ove (166), (167), (168), (169), (170), (171) costituiscono le sei classi di coniugazione del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana $\mathcal{D}_{3h}(N)$ (e di \mathcal{D}_{3h}), indicate rispettivamente con II , 2C_3 , 3C_2 , σ_h , 2S_3 e $3\sigma_V$. Individuata la corrispondenza fra gli elementi di \mathcal{D}_{3h} e quelli di $\mathcal{D}_{3h}(N)$, proseguiamo l'analisi con la ricerca della rappresentazione riducibile Γ_{Car} di \mathcal{D}_{3h} sotto la quale trasformano collettivamente le coordinate normali di vibrazione (Q_1, Q_2, Q_3) e di rototraslazione ($T_x, T_y, T_z, R_x, R_y, R_z$) isomorfa alla rappresentazione delle coordinate cartesiane di spostamento $\Delta\alpha_i$ con $\alpha = x, y, z$ e $i = 1, 2, 3$, come osservato in § 1.3.5. Prendendo, a titolo di esempio, l'operazione di permutazione-inversione (12)* con le stesse convenzioni adottate in fig. 1 si trova che

$$(12)(3)^*(\Delta x_1, \Delta y_1, \Delta z_1, \Delta x_2, \Delta y_2, \Delta z_2, \Delta x_3, \Delta y_3, \Delta z_3)^T \equiv D^{\Gamma_{\text{Car}}}[(12)(3)^*]\Delta\vec{r} =$$

$$(\Delta x_2 c_3 - \Delta y_2 s_3, -\Delta x_2 s_3 - \Delta y_2 c_3, \Delta z_2, \Delta x_1 c_3 - \Delta y_1 s_3, -\Delta x_1 s_3 - \Delta y_1 c_3,$$

$$\Delta z_1, \Delta x_3 c_3 - \Delta y_3 s_3, -\Delta x_3 s_3 - \Delta y_3 c_3, \Delta z_3)$$
(172)

ove $c_3 \equiv \cos(\pi/3)$ e $s_3 \equiv \sin(\pi/3)$, e dunque il carattere della matrice di trasformazione $D^{\Gamma_{\text{Car}}}[(12)^*]$ risulta $\text{Tr}\{D^{\Gamma_{\text{Car}}}[(12)^*]\} = +1$, traccia che è condivisa da tutti gli altri rappresentativi delle operazioni nella classe di coniugazione di (12)(3)*, $3\sigma_V$. Ripetendo lo stesso procedimento per le altre undici operazioni del gruppo, si ottengono tutti i caratteri della rappresentazione riducibile delle coordinate cartesiane di spostamento Γ_{Car} ,

$\mathcal{D}_{3h}(N)$	(1)(2)(3)	(123) (132)	(12)(3) (23)(1) (13)(2)	(1)(2)(3)*	(123)* (132)*	(12)(3)* (23)(1)* (13)(2)*
R_{rot}	R_0	$R_z^{4\pi/3}$ $R_z^{2\pi/3}$	R_z^{π} $R_z^{\pi/2}$ $R_z^{\pi/6}$	R_z^{π}	$R_z^{\pi/3}$ $R_z^{5\pi/3}$	R_z^{π} R_0^{π} $R_z^{2\pi/3}$
\mathcal{D}_{3h}	II	2C_3	3C_2	σ_h	2S_3	$3\sigma_V$
Γ_{Car}	9	0	-1	3	0	1

Tabella 2: Tavola dei caratteri della rappresentazione riducibile delle coordinate di spostamento cartesiane. E' importante ricordare due convenzioni che da qui in avanti verranno adottate nelle tabelle: (i) il carattere dell'operazione di simmetria R , $\chi_{\Gamma_i}[R] = \text{Tr}\{D^{\Gamma_i}[R]\}$ della rappresentazione Γ_i verrà indicato concisamente con la rappresentazione riducibile stessa Γ_i ; (ii) a capo della colonna delle rappresentazioni metteremo il gruppo puntuale all'equilibrio (o il gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana, in caso di isomorfismo fra i due); (iii) per le rappresentazioni irriducibili del gruppo di simmetria $\mathcal{G}(N) \approx \mathcal{G}$ useremo i simboli di Mulliken.

Il passo successivo verso la decomposizione della rappresentazione riducibile delle coordinate normali (Q_1, Q_2, Q_3),

$$Q_1 = -\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{3}}\Delta y_1 + \frac{\sqrt{m}}{2}\Delta x_2 + \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{3}}\Delta y_2 - \frac{\sqrt{m}}{2}\Delta x_3 + \frac{\sqrt{m}}{2\sqrt{3}}\Delta y_3$$
(173)

$$Q_2 = \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}}\Delta x_1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}}\Delta y_1 - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}}\Delta x_2 +$$

$$+ \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right)\frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}}\Delta y_2 + \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}}\Delta x_3 + \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}}\Delta y_3$$
(174)

$$Q_3 = \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}} \Delta x_1 + \left(-\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}} \Delta y_1 + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}} \Delta x_2 + \\ - \left(\frac{1}{2} + \frac{1}{\sqrt{3}}\right) \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}} \Delta y_2 - \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}} \Delta x_3 + \frac{\sqrt{m}}{\sqrt{6}} \Delta y_3, \quad (175)$$

è dato dalla ricerca delle rappresentazioni riducibili sotto cui trasformano le coordinate di rototraslazione, $\Gamma(T_\alpha)$ e $\Gamma(R_\alpha)$, i cui caratteri vanno sottratti a quelli di Γ_{Car} (cfr. (65)). A tale scopo, si può procedere avvalendosi delle matrici di trasformazione $D^{\Gamma_{Car}}[R]$ e sostituendo alle Δx_i nelle (60) e (62) le coordinate di spostamento cartesiane nella terna trasformata dall'operazione R del gruppo $\mathcal{D}_{3h}(R)$: prendendo, ancora, l'operazione (12)(3)* compiuta sulle coordinate di traslazione (T_x, T_y, T_z), si ha

$$(12)(3)^* T_x = -\sqrt{3m^3}(-\Delta x_2 c_3 + \Delta y_2 s_3 - \Delta x_1 c_3 + \Delta y_1 s_3 - \Delta x_3 c_3 + \Delta y_3 s_3) = \frac{1}{2} T_x - \frac{\sqrt{3}}{2} T_y \quad (176)$$

$$(12)(3)^* T_y = -\sqrt{3m^3}(\Delta x_2 s_3 + \Delta y_2 c_3 + \Delta x_1 s_3 + \Delta y_1 c_3 + \Delta x_3 s_3 + \Delta y_3 c_3) = \frac{1}{2} T_x - \frac{\sqrt{3}}{2} T_y \quad (177)$$

$$(12)(3)^* T_z = -\sqrt{3m^3}(\Delta x_2 + \Delta x_1 + \Delta x_3) = T_z. \quad (178)$$

Seguendo il metodo appena indicato o applicando quanto suggerito in § 1.3.5 e in *tabella 1*, si ottengono i caratteri delle rappresentazioni riducibili $\Gamma(T_\alpha)$ e $\Gamma(R_\alpha)$,

D_{3h}	II	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_V$
$\Gamma(T_\alpha) = E' \oplus A_2''$	3	0	-1	1	-2	1
$\Gamma(R_\alpha) = E'' \oplus A_2'$	3	0	-1	-1	2	-1

Tabella 3: Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle coordinate di rototraslazione. Si osservi che le componenti z dei vettori di rototraslazione \vec{T} e \vec{R} trasformano separatamente rispetto alle componenti x e y , ovvero si ha ripetivamente $\Gamma(T_x, T_y) = E'$ e $\Gamma(T_z) = A_2''$, $\Gamma(R_x, R_y) = E''$ e $\Gamma(R_z) = A_2'$.

risultati che conducono alla rappresentazione riducibile delle coordinate normali $\Gamma(Q_1, Q_2, Q_3)$, per sottrazione dalla Γ_{Car} dei caratteri della rappresentazione $\Gamma(T_\alpha) \oplus \Gamma(R_\alpha)$ come in (65).

D_{3h}	II	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_V$
Γ_{Car}	9	0	-1	3	0	1
$\Gamma(T_\alpha) \oplus \Gamma(R_\alpha)$	6	0	-2	0	0	0
$\Gamma(Q_1, Q_2, Q_3) = A_1' \oplus E'$	3	0	1	3	0	1

Tabella 4: Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle coordinate normali. Si osservi che una delle coordinate normali, che denotiamo con Q_1 , corrisponde ad un modo di vibrazione nondegenere e trasforma sotto la rappresentazione completamente simmetrica A_1' , mentre la rimanente coppia di coordinate (Q_2, Q_3) corrisponde ad un modo doppiamente degenere, e trasforma sotto la rappresentazione irriducibile E' .

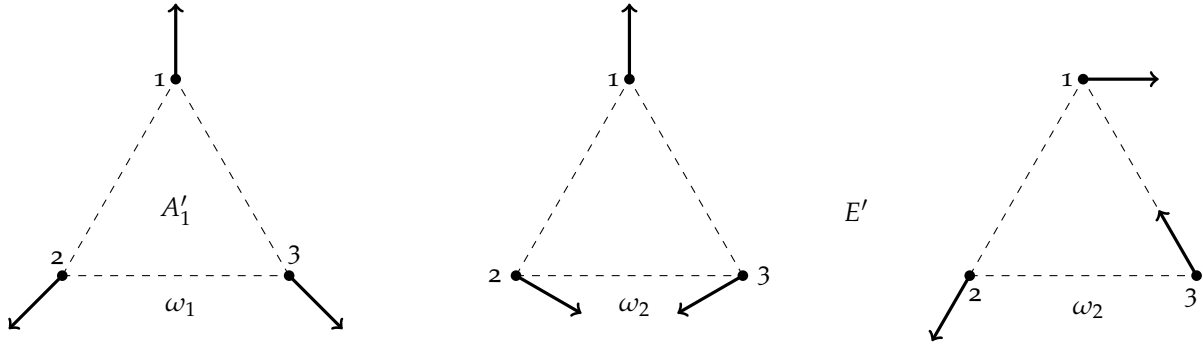


Figura 5: Rappresentazione grafica dei modi normali di vibrazione. Come si osserva, il modo di vibrazione non degenere (ω_1) che trasforma come la rappresentazione completamente simmetrica A'_1 consiste in una dilatazione-contrazione isotropa del triangolo equilatero (carattere di simmetria α), mentre quello doppiamente degenere (ω_2) che trasforma sotto E' si può rappresentare come sovrapposizione di un modo simmetrico per lo scambio di due particelle (23) e indefinito per le altre operazioni di permutazione (carattere di simmetria γ) e di un modo antisimmetrico per lo scambio di due particelle (23) e indefinito per le altre operazioni di S_3 (carattere di simmetria δ).

3.3 PROPRIETÀ DI TRASFORMAZIONE DELLE AUTOFUNZIONI ROTOVIBRAZIONALI

Denotando con Q_1 la coordinata corrispondente al modo normale completamente simmetrico A'_1 e con (Q_2, Q_3) le coordinate normali corrispondenti al modo di vibrazione doppiamente degenere, possiamo ora determinare le proprietà di simmetria degli autostati vibrazionali del sistema, seguendo il procedimento tracciato in § 1.3.6. In particolare, si trova che gli autostati dell'oscillatore armonico 1-dimensionale di coordinata Q_1 trasformano tutti sotto la rappresentazione triviale A'_1 di $\mathcal{D}_{3h}(N)$, pertanto il carattere di simmetria della funzione d'onda vibrazionale del sistema dipenderà unicamente dalle proprietà di trasformazione degli autostati vibrazionali degeneri dell'oscillatore 2-dimensionale di coordinate (Q_2, Q_3) . Applicando la formula ricorsiva (101) si ottengono i caratteri di simmetria degli autostati vibrazionali $(n_2 + 1)$ -degeneri dell'oscillatore 2-dimensionale, denotati collettivamente dal numero quantico fononico n_2 ²,

$$\Gamma(\Phi_{n_2}) \equiv \Gamma[\Phi_{n_2, n_2}(Q_2, Q_3), \Phi_{n_2, n_2-2}(Q_2, Q_3), \Phi_{n_2, n_2-4}(Q_2, Q_3), \dots, \Phi_{n_2, -n_2}(Q_2, Q_3)]. \quad (179)$$

In particolare, a partire dalle proprietà di trasformazione degli operatori \hat{a}_R, \hat{a}_L e dei loro aggiunti, si può provare che quando il numero quantico vibrazionale m (92) non è multiplo di tre, la coppia di autofunzioni $(\Phi_{n_2, m}, \Phi_{n_2, -m})$ trasforma sotto l'irreps E' di \mathcal{D}_{3h} , mentre, nel caso contrario, si ha che le combinazioni lineari

$$\frac{\Phi_{n_2, m} + (-1)^m \Phi_{n_2, -m}}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad \frac{\Phi_{n_2, m} - (-1)^m \Phi_{n_2, -m}}{\sqrt{2}} \quad (180)$$

trasformano rispettivamente attraverso le rappresentazioni irriducibili A'_1 e A'_2 dello stesso gruppo.

² In questa sezione, le autofunzioni associate agli autostati dell'oscillatore armonico 2-dimensionale $|n_2, m > a \equiv n_2$ fononi (cfr. (92)) verranno indicate con $\Phi_{n_2, m}$.

D_{3h}	\mathbb{I}	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_V$
$\Gamma(\Phi_0) = A'_1$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma(\Phi_1) = E'$	2	-1	0	2	-1	0
$\Gamma(\Phi_2) = A'_1 \oplus E'$	3	0	1	3	0	1
$\Gamma(\Phi_3) = A'_1 \oplus A'_2 \oplus E'$	4	1	0	4	1	0
$\Gamma(\Phi_4) = A'_1 \oplus E' \oplus E'$	5	-1	1	5	-1	1
$\Gamma(\Phi_5) = A'_1 \oplus A'_2 \oplus E' \oplus E'$	6	0	0	6	0	0
$\Gamma(\Phi_6) = A'_1 \oplus A'_1 \oplus A'_2 \oplus E' \oplus E'$	7	1	1	7	1	1
$\Gamma(\Phi_7) = A'_1 \oplus A'_2 \oplus E' \oplus E' \oplus E'$	8	-1	0	8	-1	0
$\Gamma(\Phi_8) = A'_1 \oplus A'_1 \oplus A'_2 \oplus E' \oplus E' \oplus E'$	9	0	1	9	0	1
$\Gamma(\Phi_9) = A'_1 \oplus A'_1 \oplus A'_2 \oplus A'_2 \oplus E' \oplus E' \oplus E'$	10	1	0	10	1	0
$\Gamma(\Phi_{10}) = A'_1 \oplus A'_1 \oplus A'_2 \oplus E' \oplus E' \oplus E' \oplus E'$	11	-1	1	11	-1	1

Tabella 5: Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali (con $n_2 \leq 10$). Osserviamo innanzitutto che non tutte le autofunzioni con lo stesso n_2 e m opposto trasformano fra di loro (i.e. con una irreps doppiamente degenera), infatti mentre le $(\Phi_{1,1}, \Phi_{1,-1})$ trasformano come la E' , una fra le due coppie $(\Phi_{3,1}, \Phi_{3,-1})$ e $(\Phi_{3,3}, \Phi_{3,-3})$ non trasforma come E' ma con due specie 1-dimensionali (e dunque è una falsa coppia). Emerge, inoltre, una periodicità nella decomposizione della rappresentazione riducibile degli stati a numero di fononi n_2 fissato: partendo da $n_2 = 0$, che trasforma come A'_1 , si ottengono i cinque livelli successivi aggiungendo alla $\Gamma(\Phi_0)$ in successione $E' - A'_1$, A'_1 , A'_2 , $E' - A'_2$ e A'_2 , poi il ciclo riparte dall'inizio con A'_1 , $E' - A'_1$, A'_1 etc. In conclusione, è utile ricordare che in articoli storici, come quelli di Dennison (1932) e Wheeler (1937) da cui si è, in parte, attinto, le rappresentazioni irriducibili (A'_1, A''_1) sono indicate collettivamente con il carattere di simmetria α in virtù del fatto che sono simmetriche rispetto ad una permutazione qualsiasi delle tre particelle α (i.e. hanno un carattere unitario sotto le operazioni di S_3), mentre le (A'_2, A''_2) sono antisimmetriche rispetto alle permutazioni dispari e denotate con β e, infine, le (E', E'') doppiamente degeneri sono indicate con il simbolo (γ, δ) .

Trovati i caratteri di simmetria degli autostati vibrazionali del sistema, passiamo all'analisi delle proprietà di simmetria delle autofunzioni rotazionali, applicando direttamente i risultati presentati in sezione 1.3.6. Come osservato in tale sezione, se il nucleo all'equilibrio è dotato al più di un asse di rotazione C_3 , il suo comportamento sarà assimilabile a quello di una trottola simmetrica e dunque i suoi autostati saranno della forma $|J, K, M \rangle$, $2(2J + 1)$ -degeneri per J e $|K|$ fissati, mentre le corrispondenti autofunzioni in rappresentazione coordinata dipenderanno dai soli tre angoli di Eulero, ragion per cui scriviamo l'azione degli elementi del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana attraverso i soli elementi di R_{rot} . A titolo di esempio, consideriamo l'azione degli elementi di $\mathcal{D}_{3h}(N)$ sugli stati $|3, K, M \rangle$,

$$R_\alpha^\pi |3, 0, M \rangle = (-1)|3, 0, M \rangle \quad R_z^\beta |3, 0, M \rangle = |3, 0, M \rangle, \quad (181)$$

$$R_\alpha^\pi |3, \pm 1, M \rangle = (-1)e^{\mp i 2\alpha} |3, \mp 1, M \rangle \quad R_z^\beta |3, \pm 1, M \rangle = e^{\pm i \beta} |3, \pm 1, M \rangle, \quad (182)$$

$$R_\alpha^\pi |3, \pm 2, M \rangle = (-1)e^{\mp i 4\alpha} |3, \mp 2, M \rangle \quad R_z^\beta |3, \pm 2, M \rangle = e^{\pm i 2\beta} |3, \pm 2, M \rangle, \quad (183)$$

$$R_\alpha^\pi |3, \pm 3, M \rangle = (-1)e^{\mp i 6\alpha} |3, \mp 3, M \rangle \quad R_z^\beta |3, \pm 3, M \rangle = e^{\pm i 3\beta} |3, \pm 3, M \rangle. \quad (184)$$

D_{3h}	\mathbb{I}	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_V$
$\Gamma(3, 0, M \rangle) = A'_2$	1	-1	1	1	1	-1
$\Gamma(3, \pm 1, M \rangle) = E''$	2	-1	0	-2	1	0
$\Gamma(3, \pm 2, M \rangle) = E'$	2	-1	0	2	-1	0
$\Gamma(3, \pm 3, M \rangle) = A''_1 \oplus A''_2$	2	2	0	-2	-2	0

Tabella 6: Tavole dei caratteri delle rappresentazioni degli autostati rotazionali con $J = 3$.

Come si osserva nella tabella 6, la coppia $|3, \pm 3, M\rangle$ non trasforma secondo le rappresentazioni doppiamente degeneri E' ed E'' come le altre due coppie di stati, ma secondo una rappresentazione 2-dimensionale riducibile (i.e. si tratta di una *falsa* coppia), decomponibile in $A_1'' \oplus A_2''$: scegliendo la nuova base di stati $\frac{1}{\sqrt{2}}(|3, 3, M\rangle \pm |3, -3, M\rangle)$ in vece di $|3, \pm 3, M\rangle$ si trova che la combinazione simmetrica (+) dei precedenti trasforma come A_1'' mentre la combinazione antisimmetrica (-) trasforma come A_2'' .

J	$ K $	D_{3h}	\mathbb{I}	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_V$
0	0	A_1'	1	1	1	1	1	1
1	0	A_2'	1	1	-1	1	1	-1
	1	E''	2	-1	0	-2	1	0
2	0	A_1'	1	1	1	1	1	1
	1	E''	2	-1	0	-2	1	0
	2	E'	2	-1	0	2	-1	0
3	0	A_2'	1	1	-1	1	1	-1
	1	E''	2	-1	0	-2	1	0
	2	E'	2	-1	0	2	-1	0
	3	$A_1'' \oplus A_2''$	2	2	0	-2	-2	0
4	0	A_1'	1	1	1	1	1	1
	1	E''	2	-1	0	-2	1	0
	2	E'	2	-1	0	2	-1	0
	3	$A_1'' \oplus A_2''$	2	2	0	-2	-2	0
	4	E'	2	-1	0	2	-1	0
5	0	A_2'	1	1	-1	1	1	-1
	1	E''	2	-1	0	-2	1	0
	2	E'	2	-1	0	2	-1	0
	3	$A_1'' \oplus A_2''$	2	2	0	-2	-2	0
	4	E'	2	-1	0	2	-1	0
	5	E''	2	-1	0	-2	1	0
6	0	A_1'	1	1	1	1	1	1
	1	E''	2	-1	0	-2	1	0
	2	E'	2	-1	0	2	-1	0
	3	$A_1'' \oplus A_2''$	2	2	0	-2	-2	0
	4	E'	2	-1	0	2	-1	0
	5	E''	2	-1	0	-2	1	0
	6	$A_1' \oplus A_2'$	2	2	0	2	2	0

Tabella 7: Tavole dei caratteri delle rappresentazioni degli autostati rotazionali fino a $J = 6$. Si può evincere che (i) per valori pari (risp. dispari) di J la rappresentazione irriducibile degli stati con $K = 0$ è A_1' (risp. A_2'); (ii) per gli stati con J qualsiasi e K dispari (risp. pari) e non multiplo di 3 la rappresentazione è E'' (risp. E'); (iii) per gli stati con J qualsiasi e K dispari (risp. pari) e multiplo di 3 la rappresentazione è $A_1'' \oplus A_2''$ (risp. $A_1' \oplus A_2'$), ovvero si incontrano le coppie apparenti già osservate.

Generalizzando quanto asserito per la coppia di stati con $J = |K| = 3$, possiamo concludere che gli stati rotazionali $|J, K, M\rangle$ con K multiplo pari (risp. dispari) di tre, le combinazioni

$$\frac{|J, K, M\rangle - (-1)^J |J, -K, M\rangle}{\sqrt{2}} \quad \text{e} \quad \frac{|J, K, M\rangle + (-1)^J |J, -K, M\rangle}{\sqrt{2}} \quad (185)$$

trasformano rispettivamente tramite le rappresentazioni irriducibili A_1'' (risp. A_1') e A_2'' (risp. A_2'), mentre, per K pari (risp. dispari) non multiplo di 3 gli stati trasformano sotto le irreps E' (risp. E'') di \mathcal{D}_{3h} . Iterando il procedimento descritto nelle (181)-(184) fino a $J = 6$ si ottengono i caratteri di simmetria

degli autostati rotazionali, riportati in tabella 7.

$n_1 = 0, 1, 2, 3, \dots; n_2 =$		0	1	2	3	4	5	
J	$ K $	$D_{3h}(N)$	A'_1	E'	$A'_1 \oplus E'$	$A'_1 \oplus A'_2 \oplus E'$	$A'_1 \oplus E' \oplus E'$	$A'_1 \oplus A'_2 \oplus E' \oplus E'$
0	0	A'_1	1	0	1	1	1	1
1	0	A'_2	0	0	0	1	0	1
	1	E''	0	1	1	1	2	2
2	0	A'_1	1	0	1	1	1	1
	1	E''	0	1	1	1	2	1
	2	E'	0	1	1	1	2	2
3	0	A'_2	0	0	0	1	0	1
	1	E''	0	1	1	1	2	2
	2	E'	0	1	1	1	2	2
	3	$A''_1 \oplus A''_2$	1	0	1	2	1	2
4	0	A'_1	1	0	1	1	1	1
	1	E''	0	1	1	1	2	2
	2	E'	0	1	1	1	2	2
	3	$A''_1 \oplus A''_2$	1	0	1	2	1	2
	4	E'	0	1	1	1	2	2
5	0	A'_2	0	0	0	1	0	1
	1	E''	0	1	1	1	2	2
	2	E'	0	1	1	1	2	2
	3	$A''_1 \oplus A''_2$	1	0	1	2	1	2
	4	E'	0	1	1	1	2	2
	5	E''	0	1	1	1	2	2
6	0	A'_1	1	0	1	1	1	1
	1	E''	0	1	1	1	2	2
	2	E'	0	1	1	1	2	2
	3	$A''_1 \oplus A''_2$	1	0	1	2	1	2
	4	E'	0	1	1	1	2	2
	5	E''	0	1	1	1	2	2
	6	$A'_1 \oplus A'_2$	1	0	1	2	1	2

Tabella 8: Regole di selezione degli stati. E' presentato il numero di stati rotovibrazionali permessi n_α per il nucleo ^{12}C in esame, determinato dai caratteri di simmetria delle funzioni d'onda ψ_R (fino a $J = 5$) e ψ_V (fino a $n_2 = 6$). Si noti che questo numero cresce con il numero di fononi n_2 dell'oscillatore degenere.

Ora che conosciamo i caratteri di simmetria degli autostati vibrazionali e rotazionali del ^{12}C , possiamo procedere selezionando tutti quegli stati che presentano la corretta simmetria di scambio per un sistema di tre bosoni interagenti, quali sono le particelle α . A tale scopo è sufficiente ricordare che la funzione d'onda rotovibrazionale, prodotto degli autostati rotazionali e vibrazionali, deve trasformare sotto le operazioni di permutazione di $\mathcal{D}_{3h}(N)$ (ovvero \mathbb{I} , $2C_3$ e $3C_2$) in modo completamente simmetrico, ovvero deve avere carattere $+1$ sotto queste trasformazioni: ne segue che la $\psi_V\psi_R$ deve trasformare come le rappresentazioni irriducibili A'_1 e A''_1 . Essendo A'_1 e A''_1 rappresentazioni irriducibili 1-dimensionali, le funzioni d'onda rotovibrazionali risultano dotate di buona parità: osservando che l'operazione σ_h di \mathcal{D}_{3h} corrisponde all'operazione di inversione di $\mathcal{D}_{3h}(N)$, si trova che gli stati A'_1 (risp. A''_1) hanno parità

positiva (risp. negativa), ovvero hanno carattere $+1$ (risp. -1) sotto questa operazione³. Avvalendoci della tabella dei prodotti tensori binari fra rappresentazioni irriducibili di \mathcal{D}_{3h} presente in appendice (A.1.3), conteggiamo il numero di stati con questo carattere di simmetria, n_α , contenuti nel prodotto fra gli $n_2 + 1$ stati vibrazionali degeneri a n_2 fissato e gli autostati vibrazionali a $J, |K|$ (ed M) fissati: tale numero corrisponde all'occorrenza delle rappresentazioni A'_1 e A''_1 nella decomposizione della rappresentazione riducibile prodotto tensore fra $\Gamma(\Phi_{n_2})^4$ e $\Gamma(|J, |K|, M \rangle)$,

$$\Gamma[F(n_1, n_2, J, |K|, M)] \equiv \Gamma(\Phi_{n_1}) \otimes \Gamma(\Phi_{n_2}) \otimes \Gamma(|J, |K|, M \rangle) = \underbrace{A'_1 \oplus A'_1 \oplus \dots \oplus A'_1 \oplus A''_1 \oplus A''_1 \oplus \dots \oplus A''_1}_{n_\alpha \text{ volte}} \oplus \dots \quad (186)$$

Il risultato di questo conteggio è presentato nella tabella 8, che soggiace alla costruzione dei livelli energetici rotovibrazionali del ^{12}C . Come si osserva, gli stati rotovibrazionali permessi dal nostro modello α -cluster molecolare collimano con quelli riprodotti dall'approssimazione di stati coerenti nell'approccio algebrico $U(7)$ dello stesso modello [5]: agli stati vibrazionali a zero fononi restano associati gli stati rotazionali con J pari (risp. dispari) e $|K|$ intero positivo o nullo (risp. non nullo) e multiplo di 3, regole di selezione che si possono estendere a tutti gli stati vibrazionali di allungamento isotropo (o di tipo A'_1)⁵. Per gli autostati a un fonone di vibrazione doppiamente degeneri E' , vale la regola di selezione complementare di quella appena presentata per gli stati con $n_2 = 0$ e J pari, ovvero sono permessi solo gli stati con proiezione $|K|$ non nulla e non multipla di 3⁶.

Un'ispezione più dettagliata delle proprietà di trasformazione degli stati rotovibrazionali sotto \mathcal{D}_{3h} ci permette di conoscere la loro forma esplicita: in particolare, per le autofunzioni permesse a zero fononi vibrazionali di tipo E' (cfr. tab. 8) si ha

$$\sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} \Phi_{n_1} \Phi_{0,0} \left(\frac{D_{MK}^{J*} - (-1)^J D_{M-K}^{J*}}{\sqrt{2}} \right) \quad (187)$$

quando K è multiplo di tre, altrimenti

$$\sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} \Phi_{n_1} \Phi_{0,0} D_{M0}^{J*} \quad (188)$$

quando J è pari e $K = 0$. Viceversa, a $n_2 \neq 0$ fononi di vibrazione degeneri, le autofunzioni permesse conservano la forma fattorizzata $\psi_R \psi_V$ quando m e K sono multipli di tre,

$$\sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} \Phi_{n_1} \left(\frac{\Phi_{n_2,m} + (-1)^m \Phi_{n_2,m}}{\sqrt{2}} \right) \left(\frac{D_{MK}^{J*} - (-1)^J D_{M-K}^{J*}}{\sqrt{2}} \right), \quad (189)$$

mentre la perdono quando entrambi i numeri quantici non sono divisibili per tre,

$$\sqrt{\frac{2J+1}{8\pi^2}} \Phi_{n_1} \left(\frac{\Phi_{n_2,m} D_{MK}^{J*} - (-1)^{J+K} \Phi_{n_2,-m} D_{M-K}^{J*}}{\sqrt{2}} \right). \quad (190)$$

Selezionati gli autostati del sistema rispettosi della statistica delle particelle in analisi, ovvero i nuclei di ^4He , concludiamo questa sezione estendendo le considerazioni appena fatte per particelle indistinguibili che fanno capo a statistiche differenti. Per sistemi di fermioni, la scelta delle rappresentazioni irriducibili 1-dimensionali di $\mathcal{D}_{3h}(N)$ sotto cui gli autostati devono trasformare deve ricadere sulle irreps con carattere -1 sotto permutazioni dispari (ovvero i 2-cicli (1)(23), (2)(13), (3)(12)) e $+1$ sotto permutazioni pari (l'identità (1)(2)(3) e i 3-cicli (123) e (132)): ne segue (cfr. tabella (A.1.3)) che le funzioni d'onda ammissibili trasformano sotto A'_2 e A''_2 .

³ Avendo parità definita, denoteremo gli stati rotovibrazionali dotati degli stessi numeri fononici con il numero quantico J e con la loro parità positiva ($A'_1, +$) o negativa ($A''_1, -$) in apice, J^P

⁴ Si osservi che $\Gamma(\Phi_{n_1})$ può essere omessa dal prodotto tensore delle rappresentazioni di ψ_R e ψ_V , essendo per ogni n_1 uguale alla rappresentazione triviale A'_1 .

⁵ Equivalentemente, la banda rotazionale a n_1 fononi di tipo A'_1 è composta da stati con $|K| = 3n$ (con $n = 0, 1, 2, 3, \dots$) con $J = 0, 2, 4, 6, \dots$ per $K = 0$ e $J = |K|, |K| + 1, |K| + 2, |K| + 3, \dots$ per $K \neq 0$.

⁶ In altri termini, la banda rotazionale a un fonone di vibrazione E' è formata dagli stati con $|K| = 3n + 1, 3n + 2$ (con $n = 0, 1, 2, 3, \dots$) e $J = |K|, |K| + 1, |K| + 2, |K| + 3, \dots$ etc.

3.4 SCHEMA DEI LIVELLI ENERGETICI

3.4.1 L'approximazione di rotore rigido

Nella sezione appena conclusa abbiamo ricostruito, seppure in una forma implicita, lo schema dei livelli energetici accessibili al sistema (cfr. tabella (8)), corrispondenti agli autostati genuinamente bosonici dell'hamiltoniana rotovibrazionale del ^{12}C (165), operazione che abbiamo compiuto facendo ricorso alla decomposizione delle rappresentazioni riducibili della funzione d'onda rotovibrazionale nelle irrepes di \mathcal{D}_{3h} (cfr. tabella (A.1.2)). L'obiettivo di questo paragrafo, sarà, invece, quello di rendere esplicita la costruzione di questo schema, ripartendo i livelli energetici in tabella (8) in bande rotazionali, ciascuna delle quali denotata da una coppia ordinata di numeri fononici vibrazionali, (n_1, n_2) ⁷, e ricavando numericamente le autoenergie del sistema (165),

$$E_{RV} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I_x^e} - \frac{\hbar^2 K^2}{2} \left(\frac{1}{I_x^e} - \frac{1}{I_z^e} \right) + \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 (n_2 + 2). \quad (191)$$

Il successivo confronto dei risultati ottenuti con i dati sperimentali disponibili in letteratura [42][2] ci fornirà l'occasione per provare la bontà delle approssimazioni soggiacenti al modello di rotore rigido con vibrazioni armoniche.

Necessaria per il calcolo degli autovalori dell'energia della (165) è la stima dei *parametri liberi* del sistema, ovvero dei tre elementi diagonali del tensore d'inerzia del nucleo all'equilibrio I_i^e e delle frequenze dei due modi normali di vibrazione, ω_1 e ω_2 : a partire dalle energie⁸ associate a righe spettrali sperimentali di riconosciuta appartenenza alle bande rotazionali del ^{12}C nel modello a *cluster* di particelle α [42] determineremo il valore delle variabili incognite. Prima di stimare tali parametri, è utile soffermarsi sul calcolo dei momenti d'inerzia del sistema di particelle α all'equilibrio, $I_i^e \equiv \mathbf{I}_{ii}^e$: assimilando i nuclei di ^4He a particelle puntiformi di massa m_α come in § 1.3.1 e scegliendo la terna di assi della terna rotante come in figura (7), si trova

$$\mathbf{I}_{xx}^e = \mathbf{I}_{yy}^e = \frac{3}{2} m_\alpha l^2, \quad \mathbf{I}_{zz}^e = 3m_\alpha l^2 \quad \text{e} \quad \mathbf{I}_{xz}^e = \mathbf{I}_{xy}^e = \mathbf{I}_{yz}^e = 0, \quad (192)$$

ove l è la distanza radiale fra la particella α e il centro di massa (cfr. fig. (7)), risultato consistente con la descrizione di ^{12}C come un rotore simmetrico *oblato*: l'inverso del momento d'inerzia attorno all'asse di simmetria z , $C_e = (I_z^e)^{-1}$, è pari alla metà dei corrispettivi attorno agli assi complanari al nucleo, $B_e = A_e = (I_x^e)^{-1} = (I_y^e)^{-1}$. Assegnando a m_α il valore fiduciale presente nell'archivio CODATA [1], è sufficiente porre un vincolo su tre linee spettrali note del ^{12}C per conoscere il valore dei tre parametri liberi del sistema, l , ω_1 , ω_2 : dalle energie degli stati 2^+ , 0^+ e 1^- delle bande rotazionali a zero fononi, a un fonone di tipo A_1' e a un fonone di tipo E' è possibile ottenere una stima rispettivamente di l , ω_1 e ω_2 .

Stimate le variabili l , ω_1 , ω_2 e gli autovalori di H_{RV} nell'approximazione di particelle puntiformi (cfr. tab. (10)), passiamo al confronto delle energie sperimentali dei livelli α -cluster del ^{12}C con quelle predette dal nostro modello di rotore rigido, comparazione che è oggi ristretta ad una decina di righe, tutte comprese nelle prime tre bande rotazionali.

Per quanto concerne la serie di stati $(J^P, |K|)$ a zero fononi di vibrazione, i dati sperimentali disponibili includono la riga $(2^+, 0)$ a $4,43891 \pm 0,00031$ MeV [2], la riga $(3^-, 3)$ a $9,641 \pm 0,005$ MeV [2], la $(4^-, 3)$ a $13,352 \pm 0,017$ MeV [39], precedentemente classificata come 2^- [2], la $(4^+, 0)$ a $14,083 \pm 0,015$ MeV [2] e la $(5^-, 3)$ a $22,4 \pm 0,2$ MeV, isolata appena un anno fa nel ciclotrone di Birmingham [42].

⁷ Insieme alla coppia di numeri quantici vibrazionali, è comune in letteratura indicare le bande rotazionali con la rappresentazione irriducibile di \mathcal{D}_{3h} sotto cui gli stati vibrazionali (n_1, n_2) trasformano, convenzione che noi adotteremo.

⁸ In questa sezione useremo il termine *energia* in associazione ad un livello spettrale per indicare la differenza fra l'autoenergia (i.e. un autovalore di \hat{H}_{RV} in (165)) del dato livello e quella dello stato fondamentale (i.e. con $J = K = n_1 = n_2 = 0$).

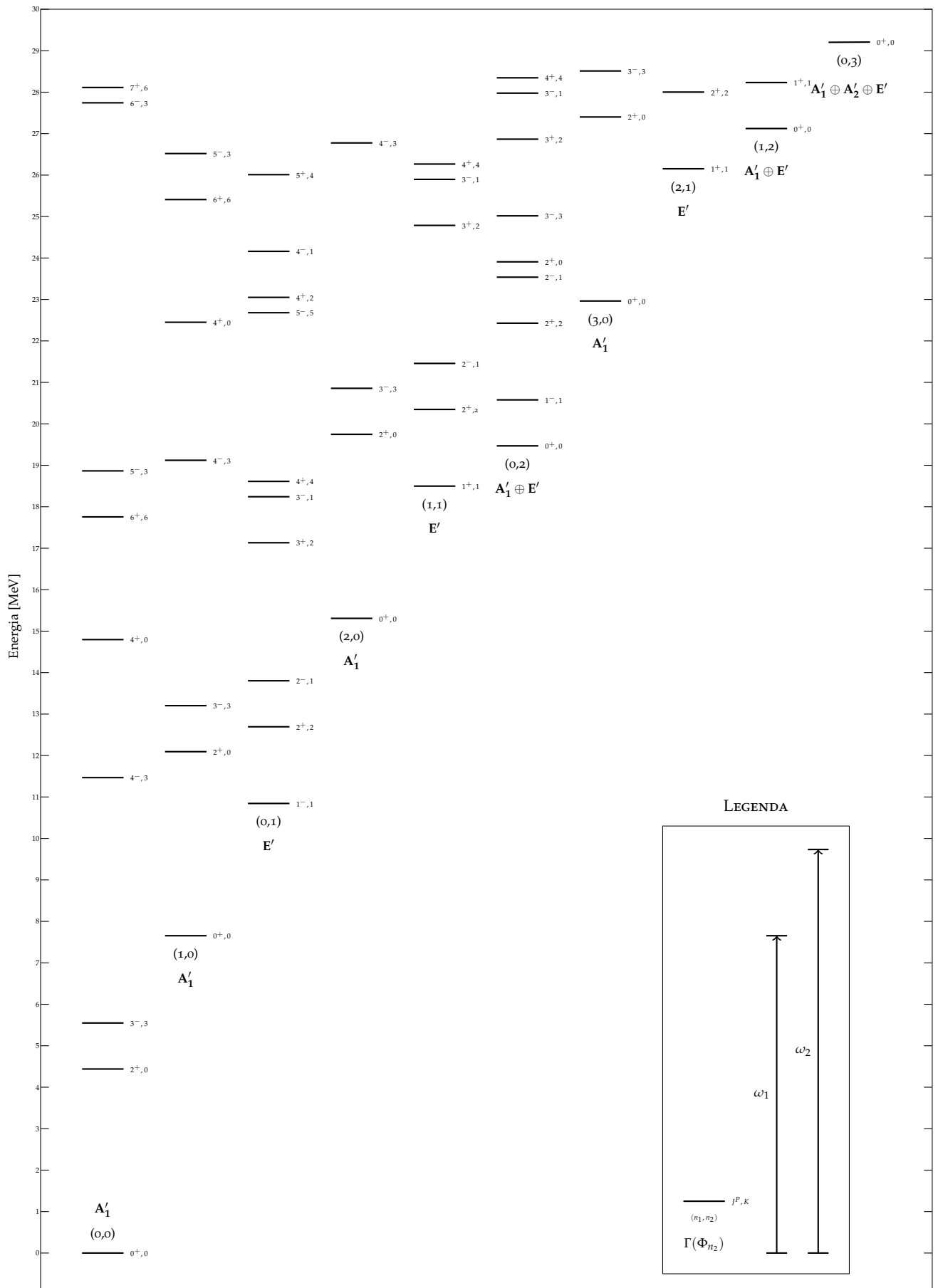


Figura 6: Schema dei livelli del ^{12}C con $n_1 + n_2 \leq 3$ ed energia inferiore a 30 MeV, nell'approssimazione di rotore rigido di particelle puntiformi, con $\omega_1 = 1.16288 \cdot 10^{22}$ Hz, $\omega_2 = 1.47890 \cdot 10^{22}$ Hz e $l = 2.16951$ fm.

Dal confronto dei risultati del modello con i dati sperimentali, si trova che il livello della banda maggiormente in accordo con i dati osservativi è il 4^+ , mentre le energie dei livelli 3^- , 4^- e 5^- risultano sottostimate di rispettivamente di 4,09, 1,88 e 3,53 MeV, suggerendo una forte sovrastima della spaziatura fra gli stati accomunati da J , ma dotati di diversa proiezione di momento angolare lungo l'asse z della terna intrinseca.

La banda successiva in analisi è quella a un fonone di vibrazione *isotropo*, A'_1 , composta da uno stato $(0^+, 0)$ a $7,65420 \pm 0,00015$ MeV [2], un $(2^+, 0)$ intorno a $9,6 \pm 0,1$ MeV di larghezza $0,6 \pm 0,1$ MeV [21] e un $(4^+, 0)$ a $13,3 \pm 0,2$ MeV [39], di cui rimangono ancora inosservati gli stati $(3^-, 3)$, $(4^-, 3)$ e $(5^-, 3)$ predetti dal modello α -cluster. Questa serie di livelli è associata, in letteratura [42][25], alla *Banda di Hoyle*, dal nome del fisico che per primo predisse l'esistenza di uno stato 0^+ collocato appena al di sopra della soglia di disintegrazione del nucleo in tre particelle α , pari a 7,27 MeV [41], per sostenere la produzione del ^{12}C all'interno di processi di nucleosintesi stellare. Le successive misure dell'ampiezza di decadimento α di questo stato e dell'energia di questo stato, pari a 7,65 MeV, un valore troppo basso per essere spiegato con eccitazioni di quattro particelle o quattro buche nel modello a shell, hanno dato impulso allo sviluppo di modelli α -cluster, fra cui quello a *catena lineare* di Morinaga (1956) e quelli a condensazione di Bose-Einstein [24].

(n_1, n_2)	$J, K $	E^{th} [MeV]	E^{exp} [MeV]
(0,0)	0,0	0	0
	2,0	$4,43891 \pm 0,00031$	$4,43891 \pm 0,00031$ [2]
	3,3	$5,54864 \pm 0,00039$	$9,641 \pm 0,005$ [2]
	4,3	$11,46718 \pm 0,00080$	$13,352 \pm 0,017$ [2]
	4,0	$14,79637 \pm 0,00103$	$14,083 \pm 0,015$ [2]
	5,3	$18,86537 \pm 0,00132$	$22,4 \pm 0,2$ [42]
(1,0)	0,0	$7,65420 \pm 0,00015$	$7,65420 \pm 0,00015$ [2]
	2,0	$12,09311 \pm 0,00034$	$9,6 \pm 0,1$ [21]
	3,3	$13,20284 \pm 0,00042$	nd
	4,3	$19,12138 \pm 0,00081$	nd
	4,0	$22,45057 \pm 0,00104$	$13,3 \pm 0,2$ [22]
	5,3	$26,51957 \pm 0,00133$	nd
(0,1)	1,1	$10,844 \pm 0,016$	$10,844 \pm 0,016$ [2]
	2,2	$12,69355 \pm 0,01600$	nd
	2,1	$13,80327 \pm 0,01600$	$11,828 \pm 0,016$ [2]
	3,2	$17,13246 \pm 0,01601$	nd
	3,1	$18,24218 \pm 0,01601$	nd
	4,4	$18,61209 \pm 0,01601$	nd
l [fm]		$2.16951 \pm 0,00008$	–
ω_1 [10^{22} Hz]		$1,16288 \pm 0,00002$	–
ω_2 [10^{22} Hz]		$1,47890 \pm 0,00243$	–
I_x^e [10^{-43} MeV s^2]		$2.9280383721 \pm 0,0000000010$	–
I_z^e [10^{-43} MeV s^2]		$5.856076744174 \pm 0.000000000020$	–

Tabella 9: Tavola delle energie delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 \leq 1$ nell'approccio di particelle puntiformi. Il valore estremamente piccolo degli errori sui momenti d'inerzia I_x^e e I_z^e è diretta conseguenza della precisione con cui sono noti i valori sperimentali delle tre righe impiegate per la stima dei parametri del modello, nonché del contenuto errore sulla massa delle particelle α [1].

Come si evince dalla tabella (9), se la struttura di questa banda eccitata fosse la stessa della precedente, lo stato $(2^+, 0)$ si dovrebbe trovare intorno a 12,09 MeV (cfr. tab. (10)), mentre il $(4^+, 0)$ si dovrebbe attestare a 22,45 MeV contro i 14,08 MeV sperimentalmente misurati. Dal momento che stati 2^+ e

4^+ intorno a 12 e 22 MeV non sono mai stati osservati⁹, si può concludere che la banda rotazionale eccitata è pesantemente influenzata dal quanto di vibrazione [19].

Per quanto riguarda la banda vibrazionale a un fonone doppiamente degenere, E' , gli unici stati oggi riconosciuti come α -cluster sono $1^-(1)$ a 10,844 MeV, impiegato nella stima di ω_2 , e il $(2^-, 1)$ a $11,828 \pm 0,016$ MeV [2] [25], la cui classificazione è stata contestata da Freer et al. [20] nel 2007, poi riconfermata nel 2010, in seguito all'individuazione della riga 4^- della rotazionale banda a un fonone A'_1 [39].

Il confronto tra l'unico dato osservativo non vincolato di questa banda e il corrispettivo previsto dal modello sembra avvalorare la nostra ipotesi sull'accoppiamento di rotovibrazionale: lo stato 2^- previsto dal nostro modello, che, stando a quanto asserito sulla separazione dei livelli con lo stesso J , avrebbe dovuto trovarsi energeticamente al di sotto della riga sperimentale, si colloca invece circa 1,98 MeV al di sopra di essa.

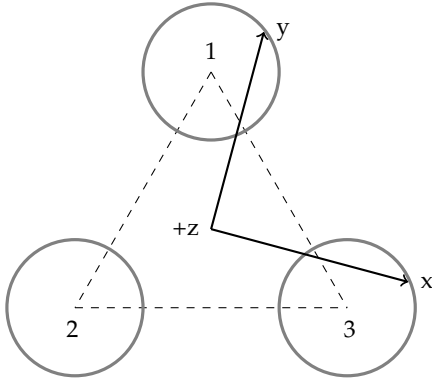


Figura 7: Orientazione scelta per la terna rotante nel calcolo dei momenti d'inerzia del ^{12}C . Si noti che l'angolo fra l'asse y e l'asse passante per l'origine e per la particella 1 coincide con quello fra l'asse x e l'asse intersecante l'origine e la particella 3.

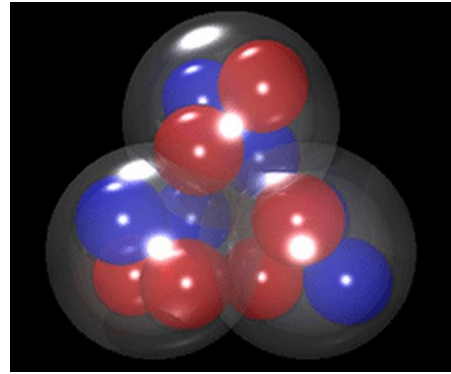


Figura 8: Rappresentazione grafica del nucleo ^{12}C nel modello α -cluster nell'approssimazione di sfere soffici. [42] Si noti che i nucleoni sono stati raffigurati in rosso e in blu.

3.4.2 L'approssimazione di rotore soffice

Un sensibile miglioramento dell'accordo fra le energie del modello e quelle sperimentali può essere raggiunto superando l'approssimazione di particelle puntiformi con la più realistica definizione di regioni sferiche di raggio fissato associate ai nuclei di ^4He , schematizzazione la cui validità è correlata alla conservazione del volume occupato dalle particelle α durante le rotovibrazioni, ovvero all'assenza di eccitazioni di gradi di libertà interni ad esse durante i moti collettivi. Una stima della dimensione tipica di queste particelle è fornita da G.D. Alkhazov et al. [3], che, dall'analisi di Glauber delle sezioni d'urto di reazioni di scattering elastico $^4\text{He}(p, p)^4\text{He}$ in canale t con quadrimomento trasferito $|t|$ pari a $0,02 \text{ GeV}/c^2$, hanno estrapolato un raggio di materia pari a $1,49 \pm 0,03 \text{ fm}$, per mezzo di distribuzioni fenomenologiche a due parametri della densità di materia nucleare. Detto, allora, R_α il raggio effettivo delle particelle α , il momento d'inerzia in (192) cambia in

$$\mathbf{I}_{xx}^e = \mathbf{I}_{yy}^e = \frac{6}{5}m_\alpha R_\alpha^2 + \frac{3}{2}m_\alpha l^2, \quad \mathbf{I}_{zz}^e = \frac{6}{5}m_\alpha R_\alpha^2 + 3m_\alpha l^2 \quad \text{e} \quad \mathbf{I}_{xz}^e = \mathbf{I}_{xy}^e = \mathbf{I}_{yz}^e = 0, \quad (193)$$

da cui ci attendiamo una significativa riduzione della spaziatura energetica fra gli stati con lo stesso numero quantico J al crescere di R_α .

⁹ Nonostante nel catalogo di F. Ajzenberg-Selove (1990) [2] compaia una riga 2^+ a $11,160 \pm 0,050$ MeV, misure successive (2012) non hanno confermato la sua presenza nello spettro del ^{12}C [49].

Esprimendo gli autovalori dell'energia (191) in termini della distanza delle particelle α dall'asse z della terna solidale al nucleo, l e avvalendoci delle energie delle sole righe 0^+ e 1^- a un fonone di vibrazione A_1' e E' nonché della stima di R_α appena presentata, è stato ricostruito lo spettro a parametro del ^{12}C (cfr. fig. (14)), rappresentando i livelli α cluster attualmente osservati (risp. non rivelati) con curve continue (risp. tratteggiate). Seppure in modo non sempre monotono, l'energia di tutti i livelli tende a decrescere all'aumentare della distanza delle particelle dall'asse z della terna rotante, suggerendo che un migliore accordo con i dati osservativi per i livelli energetici delle bande eccitate A_1' ed E' possa essere raggiunto assumendo che a ciascuna banda rotazionale rimanga associato un valore diverso di l . La sovrastima delle energie delle bande eccitate (cfr. tab. 10), infatti, ci suggerisce che il momento d'inerzia del nostro rotore simmetrico oblatto cresca con il numero di fononi, ovvero che i moti rotazionali e vibrazionali sono accoppiati, pertanto il nucleo in analisi può difficilmente essere assimilato ad un rotore rigido. Mantenendo invariata la forma dell'hamiltoniana del sistema originale (165), ricerchiamo per ciascuna delle bande rotazionali (n_1, n_2) in analisi un diverso valore della distanza dei tre nuclei di elio dall'asse di rotazione l , crescente con il numero i fononi di vibrazione, che denotiamo con l_β ove $\beta = (0, 0)$, $(1, 0)$ e $(0, 1)$. A tale scopo, introduciamo la funzione somma dei quadrati degli scarti fra le energie sperimentali delle bande rotazionali, E_i^{exp} , e le corrispettive teoriche E_i^{th} per ciascuna delle coppie (n_1, n_2) ,

$$\Delta_\beta^2(l_\beta) = \sum_{i=1}^{N_\beta} \left(E_i^{th}(l_\beta) - E_i^{exp} \right)^2, \quad (194)$$

ove il pedice i in (194) indica le righe α -cluster a nostra disposizione.

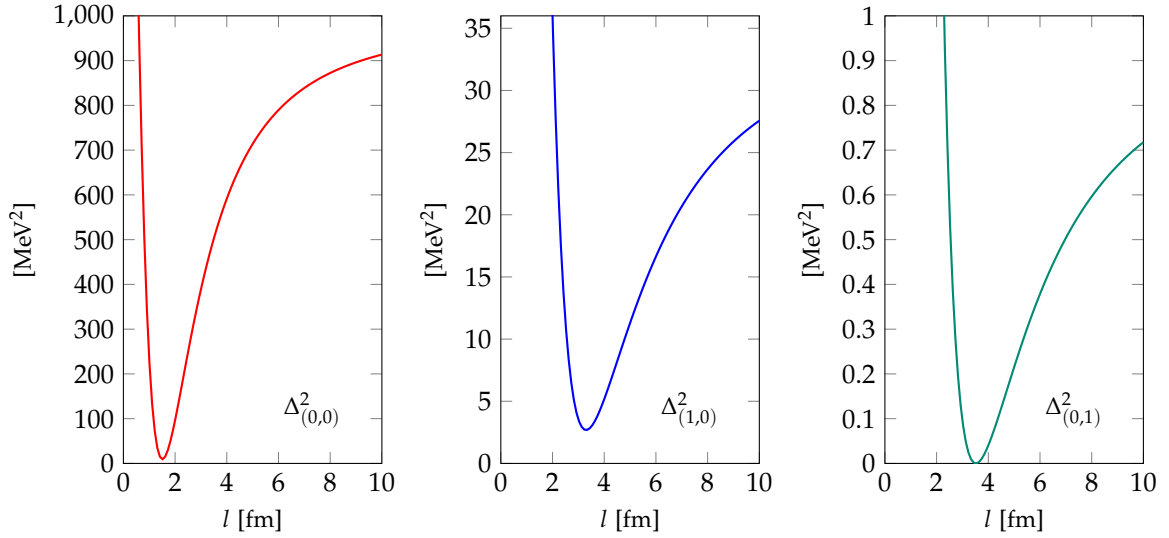


Figura 9: Andamento della funzione somma degli scarti quadratici $\Delta_\beta^2(l_\beta)$ per la banda rotazionale fondamentale (rosso), per la banda eccitata A_1' (blu) e per la E' (verde).

Minimizzando la somma dei quadrati degli scostamenti fra le stime energetiche (194) per ciascuna delle tre bande, otteniamo il valore di l_β che meglio descrive i dati sperimentali a nostra disposizione.

La minimizzazione proposta porge $l \approx 1,587$ fm per la banda fondamentale, una distanza che, confrontata con il raggio di materia dei nuclei ^4He , consente l'uso del termine *sfere soffici* per questa descrizione, essendo le tre particelle α significativamente sovrapposte. Sostituendo $l_{(0,0)}$ nella (191) si trova una leggera riduzione della spaziatura dei livelli con lo stesso momento angolare J (cfr. tab. (10)): le discrepanze residue con i dati osservativi, dell'ordine di 12 MeV, possono essere ricondotte ad effetti di allontanamento centrifugo delle particelle dall'asse di rotazione, di importanza crescente con il crescere del momento angolare J . Inoltre, la distonia più evidente fra il valore energetico predetto dal

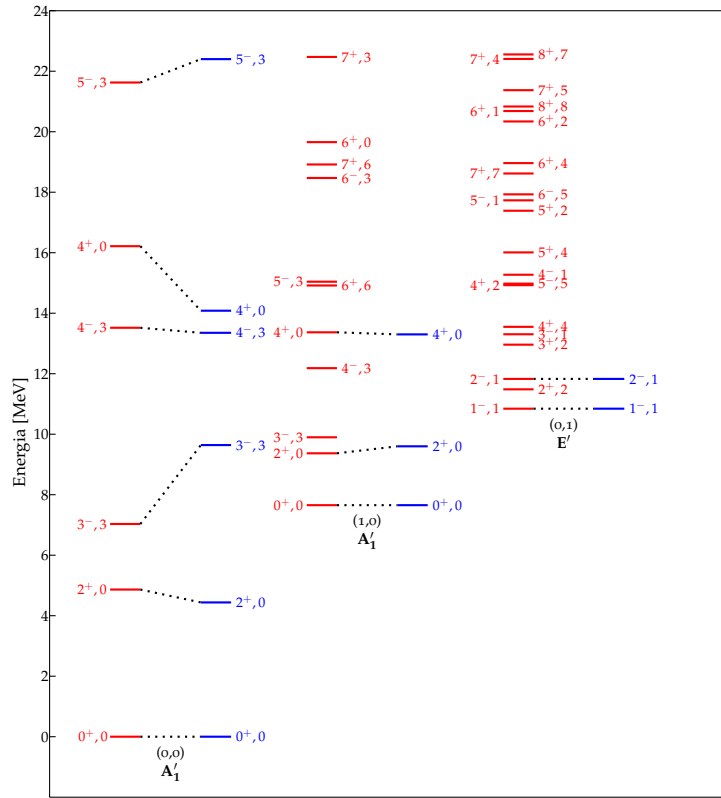


Figura 10: Schema dei livelli del ^{12}C con $n_1 + n_2 \leq 3$ ed energia inferiore a 22.5 MeV, nell'approssimazione di sfere soffici. Le righe sperimentali (risp. teoriche) sono riportate in blu (risp. rosso), mentre per la nomenclatura delle bande rotazionali e degli stati valgono le stesse convenzioni presentate in fig. 6.

modello e quello osservativo, si ravvisa per la riga 3^- , ove il dato misurato di $9,641 \pm 0,005$ MeV [2] sopravanza il risultato atteso di ben $2,375$ MeV collocandosi a soli $0,257$ MeV al di sotto del valore previsto per l'omologo stato della banda eccitata A'_1 . Nonostante la classificazione di questa riga all'interno della banda fondamentale sia di lunga data [54] e la sua presenza sia confermata da misure recenti [23], proviamo a valutare gli effetti di una sua possibile riattribuzione presso la banda di Hoyle. Ripetendo il procedimento appena descritto, l'eventuale ri-classificazione comporterebbe variazioni dell'ordine 1-3% sulle stime di $l_{(0,0)}$ e $l_{(1,0)}$, con ricadute altrettanto contenute sulle energie, ora a $4,752 \pm 0,077$, $6,859 \pm 0,060$, $13,209 \pm 0,149$, $15,874 \pm 0,259$ e $21,102 \pm 0,274$ MeV per gli stati 2^+ , 3^- , 4^- , 4^+ e 5^- della banda fondamentale e $7,65420 \pm 0,00015$, $9,342 \pm 0,097$, $9,8985 \pm 0,0067$, $13,2796 \pm 0,0324$ MeV, per i 0^+ , 2^+ , 3^- , 4^+ della banda A'_1 in luogo dei corrispettivi valori presentati nella colonna a sinistra della tabella (10).

Per quanto riguarda la banda di Hoyle, l'accoppiamento rotovibrazionale di cui abbiamo accennato in precedenza si traduce in un allontanamento delle tre particelle α dall'asse z della terna solidale, che vengono a situarsi ad una distanza l pari a $3,226$ fm, più che doppia rispetto a quella della banda fondamentale. La ricostruzione delle energie di questa banda eccitata evidenzia un rimarchevole miglioramento dell'accordo con i dati in letteratura [2] [21] [22]: le energie delle righe 0^+ , 2^+ e 4^+ previste dal modello si trovano a meno di tre deviazioni standard dai dati sperimentali, risultando, pertanto, compatibili con esse. Inoltre, essendo gli errori sulle righe previste dal modello sottostimati, tale compatibilità è destinata a migliorare: la forte non linearità della dipendenza degli autovalori energetici dal parametro l ha impedito di eseguire interpolazioni per una stima completa della distanza delle particelle α dall'asse z della terna solidale, obbligandoci a ripiegare su un mero calcolo numerico (cfr. (194)). Considerazioni analoghe valgono anche per la banda eccitata doppiamente degenera E' , dove

(n_1, n_2)	$J, K $	E^{th} [MeV]		E^{exp} [MeV]
(0,0)	0,0	0,0	0	0
	2,0	$4,865 \pm 0,081$	$4,808 \pm 0,088$	$4,43891 \pm 0,00031$ [2]
	3,3	$7,0322 \pm 0,063$	$7,266 \pm 0,075$	$9,641 \pm 0,005$ [2]
	4,3	$13,519 \pm 0,156$	$13,676 \pm 0,174$	$13,352 \pm 0,017$ [2]
	4,0	$16,216 \pm 0,270$	$16,026 \pm 0,297$	$14,083 \pm 0,015$ [2]
	5,3	$21,627 \pm 0,288$	$21,689 \pm 0,317$	$22,4 \pm 0,2$ [42]
(1,0)	0,0	$7,65420 \pm 0,00015$	$7,65420 \pm 0,00015$	$7,65420 \pm 0,00015$ [2]
	2,0	$9,369 \pm 0,010$	$9,369 \pm 0,011$	$9,6 \pm 0,1$ [21]
	3,3	$9,8984 \pm 0,0067$	$9,9279 \pm 0,0077$	nd
	4,3	$12,184 \pm 0,019$	$12,214 \pm 0,021$	nd
	4,0	$13,369 \pm 0,033$	$13,3694 \pm 0,0377$	$13,3 \pm 0,2$ [22]
	5,3	$15,042 \pm 0,035$	$15,0716 \pm 0,0399$	nd
(0,1)	1,1	$10,8440 \pm 0,0028$	$10,844 \pm 0,016$ [2]	
	2,2	$11,484 \pm 0,016$	$11,4908 \pm 0,0034$	nd
	2,1	$11,828 \pm 0,017$	$11,8280 \pm 0,0063$	$11,828 \pm 0,016$ [2]
	3,2	$12,960 \pm 0,018$	$12,967 \pm 0,010$	nd
	3,1	$13,304 \pm 0,020$	$13,304 \pm 0,014$	nd
	4,4	$13,550 \pm 0,017$	$13,5860 \pm 0,0080$	nd
R_α [fm]		$1,49 \pm 0,03$	$1,6755 \pm 0,0028$	–
$l_{(0,0)}$ [fm]		1,58700	1,44908	–
$l_{(1,0)}$ [fm]		3,22639	3,15275	–
$l_{(0,1)}$ [fm]		3,51840	3,45098	–
ω_1 [10^{22} Hz]		$1,16288 \pm 0,00002$	$1,16288 \pm 0,00002$	–
ω_2 [10^{22} Hz]		$1,58969 \pm 0,00244$	$1,58768 \pm 0,00048$	–
I_x^e [10^{-43} MeV s ²]	(0,0)	$2,6717 \pm 0,0449$	$2,7034 \pm 0,0500$	–
	(1,0)	$7,5806 \pm 0,0449$	$7,5806 \pm 0,0500$	–
	(0,1)	$8,8058 \pm 0,0449$	$8,8058 \pm 0,0500$	–
I_z^e [10^{-43} MeV s ²]	(0,0)	$4,2384 \pm 0,0449$	$4,0097 \pm 0,0500$	–
	(1,0)	$14,0563 \pm 0,0449$	$13,7641 \pm 0,0500$	–
	(0,1)	$16,5068 \pm 0,0449$	$16,2144 \pm 0,0500$	–

Tabella 10: Tavola riassuntiva delle energie delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 \leq 1$ nell'approccio di sfere soffici di raggio pari a quello di materia [3] (colonna centrale) e pari al raggio di carica (colonna più a destra). *Quest'ultima stima è stata aggiunta il successivo confronto dei risultati ottenuti dal nostro modello molecolare di sfere soffici con quelli calcolati nell'ambito del modello α -cluster microscopico di Bloch e Brink.*

la distanza $l_{(0,1)}$ vale circa 3,518 fm, e il ridotto numero di righe sperimentali disponibili porta ad una adesione ottimale fra i dati attesi e quelli osservati: il valore teorico dell'energia dello stato 2^- risulta sovrapponibile con quello misurato.

Concludiamo questa sezione con la stima di un altro parametro d'interesse per la descrizione delle bande rotazionali (0,0), (1,0) e (0,1), il raggio nucleare di carica del ^{12}C , e con il successivo confronto con i raggi di carica quadratici medi calcolati nell'ambito di un altro modello α -cluster microscopico di Brink [47][31][55]. A tale scopo, avvalendoci della stima del raggio di carica delle particelle α , $1,6755 \pm 0,0028$ fm, effettuata da I. Angeli e K.P. Marinova [4] a partire dalle sezioni d'urto di scattering elastico $^4\text{He}(e^-, e^-)^4\text{He}$ in $1,6755 \pm 0,028$ fm, ripercorriamo il procedimento appena illustrato per la determinazione dei tre parametri di distanza l_β (cfr. tab (10)). Dalle stime di R_α [4] ed l_β così ricavate, determiniamo il valore dei semiassi dell'ellissoide d'inerzia (o di *Poinsot*)¹⁰ associato al nucleo in analisi

¹⁰ Ricordiamo che tale ellissoide condivide, per definizione, i momenti d'inerzia e la massa con il corpo rigido cui è associato.

che, nel nostro approccio molecolare, è un rotore triangolare simmetrico oblato formato da sfere soffici (cfr. (197)). Considerando, infine, una regione sferica di raggio R_β con lo stesso volume dell'ellissoide di Poincot, si trova l'espressione del raggio nucleare,

$$R_\beta(l_\beta) = \left(R_\alpha^3 + \frac{5}{2} R_\alpha l_\beta^2 \right)^{1/3}, \quad (195)$$

funzione del parametro di distanza e del raggio di carica R_α dei nuclei di ^4He , che ci fornisce la stima del raggio di carica nucleare per le tre bande rotazionali $(0,0)$, $(1,0)$ e $(0,1)$. A partire dai raggi quadratici medi stimati da Uesaki et al. (1979) [55] per gli stati 0^+ , 2^- , 3^- , 4^+ e 4^- della banda fondamentale, 0^+ , 2^+ e 4^+ della banda A'_1 ¹¹ e 1^- e 2^- della banda E' allora conosciuti, sono stati calcolati i valori medi e i corrispettivi scarti quadratici medi per i raggi nucleari di carica relativi alle tre bande, riportati nella tabella 11 sottostante.

MODELLO α -CLUSTER	R_α	RAGGIO NUCLEARE R_β [fm]		
		(0,0)	(1,0)	(0,1)
MOLECOLARE	$1,49 \pm 0,03$	$2,3325 \pm 0,0238$	$3,4783 \pm 0,0270$	$3,6697 \pm 0,0279$
	$1,6755 \pm 0,0028$	$2,3811 \pm 0,0023$	$3,5918 \pm 0,0024$	$3,7934 \pm 0,0025$
MICROSCOPICO	$1,41^*$	$2,676 \pm 0,262$	$3,613 \pm 0,115$	$3,405 \pm 0,021$

Tabella 11: Tavola di confronto fra i raggi di carica nucleari del ^{12}C delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 \leq 1$ ottenuti da due modelli α -cluster differenti. L'asterisco in corrispondenza del valore di R_α adottato da Uesaki et al. [55] indica l'origine non osservativa di tale valore, che è stato ottenuto dalla minimizzazione dell'energia associata alla funzione d'onda variazionale dello stato fondamentale 0^+ . Per completezza, anche se in modo improprio, sono state riportate anche le stime dei raggi nucleari di materia, che si avvalgono del valore di R_α ottenuto da Alkhozov et al. (2002) [3].

Come si evince dalla tabella, i risultati del nostro modello per le bande $(0,0)$ e $(1,0)$ sono compatibili con quelli ottenuti da Uesaki et al. [55], mentre per la banda a un fonone E' la vicinanza è solo nei valori centrali. Sapendo che il raggio di carica nucleare sperimentalmente osservato per lo stato fondamentale 0^+ del nostro isotopo è compreso fra 2,41 e 2,47 fm [55], possiamo affermare che entrambi i modelli, che si avvalgono di arrangiamenti triangolari di particelle α per la descrizione del nucleo, predicono soddisfacentemente questo valore, l'uno in difetto, l'altro in eccesso (cfr. tab. 11).

3.4.3 L'approssimazione di Dunham

Nella sezione § 2.3.1 abbiamo riprodotto, a partire da tre righe sperimentali, lo schema dei livelli del ^{12}C , assimilando le particelle α a masse puntiformi. Tale spettro, posto a confronto con i dati osservativi, ci ha fornito l'occasione per riconoscere i limiti dell'approccio di rotore rigido. Con l'intento di colmare il profondo disaccordo fra le energie delle bande rotazionali eccitate a un fonone di vibrazione A'_1 ed E' nonchè di ridurre la spaziatura fra i livelli con lo stesso J , abbiamo superato la precedente descrizione con quella di sfere soffici, al costo di impiegare *de facto* tre hamiltoniane di rotore rigido (165) distinte per la descrizione delle tre bande, ciascuna caratterizzata da un diverso valore del parametro di distanza l . L'obiettivo di questa sezione è, pertanto, quello di sistematizzare l'approssimazione di sfere soffici introducendo nella (165) un termine di accoppiamento fra moti rotazionali e vibrazionali che preservi la forma e le proprietà di trasformazione degli autostati della hamiltoniana di rotore rigido. Ciò equivale a richiedere che il termine aggiuntivo costituisca una simmetria dinamica per il sistema, ovvero sia funzione di uno o più operatori di Casimir indipendenti dell'hamiltoniana (165) quali \hat{N}_1 , \hat{N}_2 , \hat{J}_z^2 , \hat{J}_z e

¹¹ Nell'articolo citato, il valore dell'energia dello stato 2^+ della banda $(1,0)$ era 10,3 MeV, mentre quello (ipotetico) dello stato 4^+ della stessa banda era pari a 11,2 MeV.

\hat{f}_z . Restringendoci a termini a quattro corpi, facciamo ricadere la nostra scelta sul termine con $i = j = 1$ dell'espansione di T. J. Dunham (1932),

$$E(v, l) = \sum_{ij} y_{ij} \left(v + \frac{1}{2} \right)^i [l(l+1)]^j, \quad (196)$$

corrispondente al prodotto dell'hamiltoniana vibrazionale di oscillatore armonico per il quadrato dell'operatore momento angolare rotazionale, che nel nostro caso particolare si traduce in

$$\hat{H}_D = d_1 \left(\hat{N}_1 + \frac{1}{2} \right) \hat{f}^2 + d_2 (\hat{N}_2 + 1) \hat{f}^2, \quad (197)$$

ovvero in una combinazione lineare del prodotto delle hamiltoniane di oscillatore armonico 1-dimensionale e 2-dimensionale per \hat{f}^2 . Sebbene l'ambito d'applicazione originario di questa espansione sia quello chimico-fisico, come la descrizione di stati rotovibrazionali molecolari¹², la (196) può trovare impiego anche in altri sistemi rotovibranti, purchè i termini quadratici y_{11} , y_{20} , y_{02} e superiori siano ragionevolmente più piccoli di quelli lineari, y_{10} e y_{01} . Conseguentemente, gli autovalori dell'hamiltoniana del sistema rotovibrazionale così accoppiato assumeranno la forma

$$E_{RVD} = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I_x^e} - \left(\frac{1}{I_x^e} - \frac{1}{I_z^e} \right) \frac{\hbar^2 K^2}{2} + \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 (n_2 + 1) + \hbar^2 J(J+1) \left[d_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + d_2 (n_2 + 1) \right], \quad (198)$$

ove il pedice *RVD* indica la presenza del termine aggiuntivo (197) nell'hamiltoniana di rotore rigido (165). Presentati gli autovalori (198), procediamo con la stima delle energie dei livelli energetici del sistema in questa approssimazione, eseguendo, questa volta, un'interpolazione non lineare pesata sulle energie delle dieci righe sperimentali α -cluster attualmente riconosciute [25] per la determinazione dei sei parametri del sistema, ω_1 , ω_2 , $I_y^e = I_x^e$, I_z^e , d_1 e d_2 .

Dal confronto delle energie riprodotte da questa regressione con quelle ottenute da un fit non lineare privo dei termini di Dunham (ie. di equazione (191)), emerge un notevole avvicinamento delle autoenergie ai loro valori sperimentalmente osservati, particolarmente evidente per gli stati delle bande eccitate A'_1 e E' . Per quanto concerne i parametri dell'interpolazione, si trova che, in valore assoluto, i termini di Dunham di tipo y_{11} , come $d_1 \hbar^2$ (risp. $d_2 \hbar^2$) non superano il 5,8% (risp. il 4,8%) dei corrispettivi termini y_{10} , come $\hbar\omega_1$ (risp. $\hbar\omega_2$), mentre raggiungono il 30,6% (risp. il 33,9%) del termine y_{01} , ovvero $\hbar^2/2I_x^e$: un tale peso relativo per i termini di accoppiamento è consistente con il fatto che tutti i livelli in analisi, eccezion fatta per la riga 2^+ della banda fondamentale, giacciono al di sopra della soglia di disintegrazione del nucleo in tre particelle α , e pertanto rappresentano eccitazioni di un sistema molto debolmente legato.

¹² In particolare, per modi di vibrazione di molecole debolmente legate come quello di Van der Waals, il parametro y_{11} raggiunge il 10% di y_{01} , mentre per molecole rigide, questo parametro vale meno del 5% del termine precedente [34].

(n_1, n_2)	$J, K $	E_{RV}^{th} [MeV]	E_{RV}^{th*} [MeV]	E^{exp} [MeV]
(0, 0)	0, 0	0	0	0
	2, 0	$4,437 \pm 0,021$	$4,438 \pm 0,016$	$4,43891 \pm 0,00031$ [2]
	3, 3	$9,465 \pm 0,328$	$7,447 \pm 0,852$	$9,641 \pm 0,005$ [2]
	4, 3	$15,381 \pm 0,329$	$13,364 \pm 0,852$	$13,352 \pm 0,017$ [2]
	4, 0	$14,789 \pm 0,070$	$14,792 \pm 0,052$	$14,083 \pm 0,015$ [2]
	5, 3	$22,775 \pm 0,334$	$20,760 \pm 0,852$	$22,4 \pm 0,2$ [42]
(1, 0)	0, 0	$7,654 \pm 0,01$	$7,654 \pm 0,008$	$7,65420 \pm 0,00015$ [2]
	2, 0	$12,091 \pm 0,024$	$12,092 \pm 0,017$	$9,6 \pm 0,1$ [21]
	4, 0	$22,443 \pm 0,071$	$22,446 \pm 0,052$	$13,3 \pm 0,2$ [22]
(0, 1)	1, 1	$9,857 \pm 0,776$	$9,857 \pm 0,094$	$10,844 \pm 0,016$ [2]
	2, 1	$12,815 \pm 0,774$	$12,815 \pm 0,095$	$11,828 \pm 0,016$ [2]
$I_x^e = I_y^e$ [10^{-43} MeV s 2]		$2,929 \pm 0,010$	$2,929 \pm 0,008$	—
I_z^e [10^{-43} MeV s 2]		$2,69 \pm 0,12$	$3,73 \pm 0,61$	—
ω_1 [10^{22} Hz]		$1,1629 \pm 0,0016$	$1,1629 \pm 0,0011$	—
ω_2 [10^{22} Hz]		$1,26 \pm 0,12$	$1,297 \pm 0,087$	—

Tabella 12: Tavola di riepilogo delle energie risultanti dalle interpolazioni senza il termine correttivo di Dunham, E_{RV}^{th} , comprensive degli errori statistici. L'asterisco in capo alle colonne a destra indica l'assenza della riga 3^- dal campione di dati impiegato per le corrispondenti interpolazioni non lineari. In fondo alla tabella sono presentati i valori dei momenti d'inerzia, I_x^e e I_z^e , delle frequenze di vibrazione ω_1 e ω_2 .

Tuttavia, gli elevati errori statistici associati ai parametri y_{11} di Dunham (cfr. tab. 13), non completamente imputabili al ridotto rapporto fra il numero di punti a disposizione (10) e a quello dei parametri incogniti dell'interpolazione (6), mettono in luce una criticità insita del modello α cluster molecolare, già rilevata da Uesaki et al. nel 1977 [54], ovvero la difficoltà nel riprodurre con ragionevole verosimiglianza l'energia del livello 3^- (e, in misura minore, degli altri stati con proiezione $|K| = 3$) senza causare una distorsione sulla stima dei parametri caratteristici del modello: la migliore adesione delle energie delle righe 3^- e 5^- a quelle sperimentalmente osservate (cfr. col. E_{RV}^{th} in tab.12 e E_{RVD}^{th} in tab. 13) si ottiene al costo di mutare la natura *oblata* del nucleo in *prolata*. In altri termini, entrambe le stime dei momenti d'inerzia I_z^e ottenute dalle interpolazioni eseguite sull'intero campione di righe sperimentali a disposizione risultano inferiori a quelle di $I_x^e = I_y^e$, causando una riflessione in energia di tutti gli stati con proiezione K non nulla rispetto allo stato con lo stesso J e $K = 0$, come si osserva in tabella 13, ove il livello 4^- della banda fondamentale scavalca in energia il vicino 4^+ di poco meno di 1 MeV. Rimuovendo dal campione la riga maggiormente all'origine di queste anomalie, 3^- , il corretto comportamento di rotore oblato del nucleo risulta, infatti, ripristinato (cfr. coll. E_{RV}^{th*} in tab.12 e E_{RVD}^{th*} in tab. 13) ed i momenti d'inerzia $I_x^e = I_y^e$ (cfr. col. E_{RV}^{th*} 12) risultano in buona compatibilità con quelli ottenuti nell'approssimazione di rotore rigido di particelle puntiformi (cfr. col E^{th} in tab. 10). D'altro canto, ripetendo l'interpolazione di Dunham in assenza della riga 3^- , i momenti d'inerzia risultano in notevole disaccordo con quelli ricavati nelle approssimazioni di particelle puntiformi e di sfere soffici (cfr. tab. 10) essendo, come previsto, il ruolo dei momenti d'inerzia, parzialmente supplito dai termini correttivi y_{11} di Dunham (cfr. col. E_{RVD}^{th*} in tab. 13).

(n_1, n_2)	$J, K $	E_{RVD}^{th} [MeV]	E_{RVD}^{th*} [MeV]	E^{exp} [MeV]
(0, 0)	0, 0	0	0	0
	2, 0	$4,43 \pm 0,20$	$4,438 \pm 0,009$	$4,43891 \pm 0,00031$ [2]
	3, 3	$9,47 \pm 0,55$	$7,45 \pm 0,47$	$9,641 \pm 0,005$ [2]
	4, 3	$15,38 \pm 0,47$	$13,36 \pm 0,47$	$13,352 \pm 0,017$ [2]
	4, 0	$14,79 \pm 0,66$	$14,79 \pm 0,03$	$14,083 \pm 0,015$ [2]
	5, 3	$22,78 \pm 0,56$	$20,76 \pm 0,47$	$22,4 \pm 0,2$ [42]
(1, 0)	0, 0	$7,65 \pm 0,68$	$7,654 \pm 0,004$	$7,65420 \pm 0,00015$ [2]
	2, 0	$9,41 \pm 0,49$	$9,41 \pm 1,43$	$9,6 \pm 0,1$ [21]
	4, 0	$13,52 \pm 0,79$	$13,52 \pm 4,77$	$13,3 \pm 0,2$ [22]
(0, 1)	1, 1	$10,84 \pm 0,81$	$10,85 \pm 0,45$	$10,844 \pm 0,016$ [2]
	2, 1	$11,83 \pm 0,81$	$11,84 \pm 0,45$	$11,828 \pm 0,016$ [2]
$I_x^e = I_y^e$ [10^{-43} MeV s ²]		$1,49 \pm 0,70$	$1,49 \pm 0,29$	—
I_z^e [10^{-43} MeV s ²]		$1,42 \pm 0,43$	$1,67 \pm 0,26$	—
ω_1 [10^{22} Hz]		$1,1629 \pm 0,0016$	$1,1629 \pm 0,0006$	—
ω_2 [10^{22} Hz]		$1,56 \pm 0,26$	$1,598 \pm 0,107$	—
d_1 [10^{42} MeV ⁻¹ s ⁻²]		$-1,03 \pm 1,32$	$-1,03 \pm 0,55$	—
d_2 [10^{42} MeV ⁻¹ s ⁻²]		$-1,14 \pm 0,87$	$-1,14 \pm 0,36$	—

Tabella 13: Tavola di riepilogo delle energie risultanti dalle interpolazioni con termine correttivo di Dunham, E_{RVD}^{th} , comprensive degli errori statistici. L'asterisco in capo alle colonne a destra indica l'assenza della riga 3^- dal campione di dati impiegato per le corrispondenti interpolazioni non lineari. In fondo alla tabella sono presentati i valori dei momenti d'inerzia, I_x^e e I_z^e , delle frequenze di vibrazione ω_1 e ω_2 , e delle costanti di accoppiamento di Dunham y_{11} , divise per \hbar^2 (cfr. (198)).

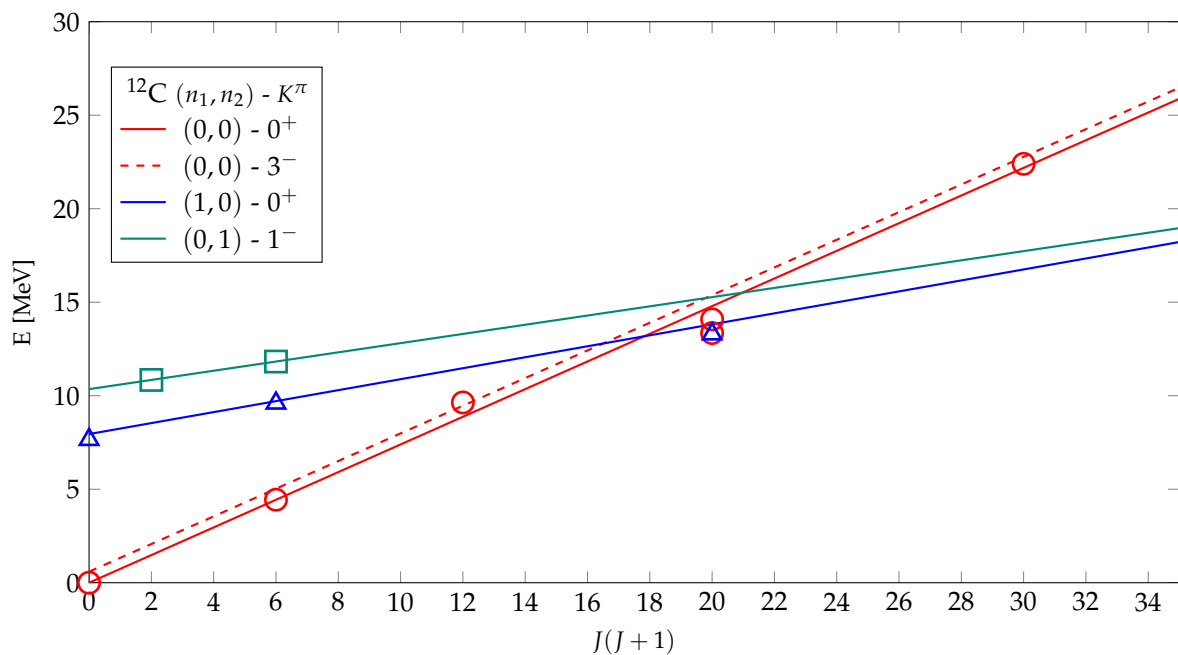


Figura 11: Andamento degli autovalori E_{RVD}^{\hbar} risultanti dal fit complessivo del termine di Dunham, in funzione del quadrato del momento angolare totale (in unità di \hbar^2). I dati sperimentali impiegati nell'interpolazione sono rappresentati da cerchi (banda fondamentale), triangoli (banda di Hoyle) e quadrati (banda E_1'). Si osservi che la dipendenza degli autovalori (198) da K^2 spezza la linearità dell'andamento della funzione rispetto a $J(J+1)$ nella banda fondamentale (in rosso): le tre (risp. due) righe con proiezione $K = 3$ (risp. $K = 0$) sono riprodotte dalla retta tratteggiata (risp. continua).

3.5 TRANSIZIONI DI MULTIPOLO ELETTRICO

In § 2.7 abbiamo introdotto le probabilità ridotte di transizione di multipolo elettrico (cfr. (155)), che si ottengono sommando fra loro quadraticamente tutti i $2\lambda + 1$ elementi di matrice corrispondenti agli operatori di multipolo elettrico di momento angolare λ fissato, aventi parità $(-1)^\lambda$. Come abbiamo osservato, la legge di parità delle armoniche sferiche nonché la natura additiva dell'operatore di densità di carica richiedono che gli operatori $\Omega_{\lambda\mu}(E)$ trasformino sotto rappresentazioni irriducibili 1-dimensionali di \mathcal{D}_{3h} di tipo bosonico, A'_1 e A''_1 , le stesse *irreps* sotto cui trasformano gli autostati rotovibrazionali del sistema: da ciò segue che le multipolarità elettriche di ordine dispari (risp. pari) possono descrivere solo transizioni fra stati con opposta (risp. la stessa) parità.

Ricordando la formula generale delle probabilità ridotte di transizione di multipolo elettrico (cfr. (155)), adattiamo la sua forma analitica al presente modello α -cluster, in vista del calcolo esplicito delle $B(E\lambda)$. Richiamiamo, innanzitutto, i numeri quantici che caratterizzano gli stati nucleari iniziale e finale,

$$|s\rangle \equiv |J_s, M_s, K_s, n_{1s}, n_{2s}\rangle \quad \text{con } s = i, f, \quad (199)$$

ove n_{1s} e n_{2s} sono associati agli oscillatori armonici 1- e 2-dimensionali. Essendo, inoltre, l'energia degli stati indipendente dalla proiezione del momento angolare lungo l'asse z della terna a riposo rispetto al laboratorio, M , eseguiamo una media sulle $2J_i + 1$ transizioni con J_i e K_i fissati che raggiungono lo stato (J_f, K_f, M_f) , poi sommiamo su tutte le $2J_f + 1$ proiezioni M_f assunte dagli stati finali con momento angolare J_f e proiezione z intrinseca K_f , ottenendo

$$B(E\lambda) = \sum_{M_i, M_f} \sum_{\mu} |\langle J_f, M_f, K_f, n_{1f}, n_{2f} | \Omega(E)_{\lambda, \mu} | J_i, M_i, K_i, n_{1i}, n_{2i} \rangle|^2 : \quad (200)$$

in questo modo, la transizione $J_i \rightarrow J_f$ e la sua inversa avranno la stessa probabilità ridotta, ad eccezione di un fattore dovuto alla molteplicità degli stati iniziali.

Il secondo adattamento da effettuare rispetto alle (155) consiste nella scelta dell'operatore di densità di carica $\hat{p}(\vec{r})$, che, nella nostra approssimazione di particelle puntiformi risulta

$$\hat{p}(\vec{r}) = 2e \sum_{i=1}^3 \delta^3(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (201)$$

espressione che permette di svolgere l'integrale sul volume della

$$\Omega_{\lambda\mu}(E) = \int d^3r \hat{p}(r) r^\lambda Y_{\lambda\mu}(\theta, \phi), \quad (202)$$

in modo immediato, una volta che le armoniche sferiche sono espresse in funzione delle componenti di \vec{r} , (ξ, η, ζ) : la dipendenza degli operatori di multipolo elettrico dalle coordinate delle particelle rispetto ad un sistema inerziale, come quello con origine nel centro di massa del sistema, è proprio il frutto di questa integrazione (cfr. (155)). Una volta eseguita quest'ultima integrazione, è necessario esprimere le coordinate delle particelle α , \vec{r}_i di componenti $A_i \in \xi_i, \eta_i, \zeta_i$ in funzione degli angoli di Eulero (φ, θ, χ) e delle coordinate delle stesse nel sistema intrinseco $\alpha_i \in x_i, y_i, z_i$ (cfr. formule),

$$A_i = \sum_{\alpha=x,y,z} \Lambda_{A\alpha} \alpha_i = \sum_{\alpha=x,y,z} \Delta \alpha_i \Lambda_{A\alpha} + \sum_{\alpha=x,y,z} \Lambda_{A\alpha} \alpha_i^e, \quad (203)$$

ove $\Lambda(\varphi, \theta, \chi)$ è la matrice di rotazione fra le due terne (cfr. (130)) e α_i^e sono le coordinate di equilibrio delle tre particelle α rispetto al sistema intrinseco. Risulta, in seguito, conveniente riscrivere ciascuno di questi elementi di matrice $\Lambda_{A\alpha}$ attraverso opportune combinazioni lineari di elementi di matrice di Wigner, $D_{MK}^{J*}(\varphi, \theta, \chi)$, passaggio che permette di svolgere le integrazioni fra le autofunzioni rotazionali in modo immediato, avvalendosi della relazione

$$\int D_{M_1 K_1}^{J_1}(\varphi, \theta, \chi) D_{M_2 K_2}^{J_2*}(\varphi, \theta, \chi) D_{M_3 K_3}^{J_3*}(\varphi, \theta, \chi) \sin \theta d\varphi d\theta d\chi = \frac{8\pi^2}{2J_3 + 1} (J_1 J_2 J_3 | M_1 M_2 M_3) (J_1 J_2 J_3 | K_1 K_2 K_3). \quad (204)$$

Alternativamente, lo sviluppo delle componenti rotazionali degli operatori di multipolo (202) negli elementi di matrice di Wigner può essere compiuto più efficientemente passando attraverso la definizione degli operatori di multipolo elettrico intrinseci, $\omega_{\lambda\mu}(E)$: ricordando che i $\Omega_{\lambda\mu}(E)$ sono operatori tensoriali sferici irriducibili di rango λ , vale la seguente legge di trasformazione sotto rotazioni

$$\Omega_{\lambda\mu}(E) = \sum_{\nu=-\lambda}^{\lambda} D_{\mu\nu}^{\lambda*}(\varphi, \theta, \chi) \omega_{\lambda\nu}(E), \quad (205)$$

ove gli operatori $\omega_{\lambda\nu}(E)$ possono essere espressi unicamente attraverso le coordinate di spostamento $\Delta\alpha_i$ e di equilibrio α_i delle particelle α rispetto al sistema di riferimento solidale al nucleo rotante. Un'indagine delle proprietà di trasformazione di questi ultimi sotto le operazioni del gruppo di permutazione-inversione (cfr. (14)) consente di operare una selezione preliminare sugli elementi di matrice fra gli autostati vibrazionali da calcolare, sfruttando unicamente delle loro proprietà di trasformazione sotto \mathcal{D}_{3h} : dal momento che gli stati dell'oscillatore armonico 1-dimensionale trasformano sotto l'irreps A_1' , possono essere scartati a priori gli elementi di matrice che presentano unicamente una fra le irreps A_1'' e A_2'' nella decomposizione della rappresentazione riducibile sotto cui trasformano sotto \mathcal{D}_{3h} ,

$$\Gamma(\Phi_{n_{2f}, m_f}) \otimes \Gamma[\omega_{\lambda\mu}(E)] \otimes \Gamma(\Phi_{n_{1i}, m_i}) = A_1'' \vee A_2'' \quad (206)$$

Gli altri elementi di matrice vibrazionali non nulli a priori possono essere calcolati esplicitamente

$\mathcal{D}_{3h}(N)$	I	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_V$
$\Gamma[\omega_{00}(E)] = A_1'$	1	1	1	1	1	1
$\Gamma[\omega_{1\mu}(E)] = A_2' + E'$	3	0	-1	1	-2	1
$\Gamma[\omega_{2\mu}(E)] = A_1' + E' + E''$	5	-1	1	1	1	1
$\Gamma[\omega_{3\mu}(E)] = A_1' + A_2' + A_2'' + E' + E''$	7	1	-1	1	1	1
$\Gamma[\omega_{4\mu}(E)] = A_1' + A_1'' + A_2'' + 2E' + E''$	9	0	1	1	-2	1
$\Gamma[\omega_{5\mu}(E)] = A_1' + A_2' + A_2'' + 2E' + 2E''$	11	-1	-1	1	1	1
$\Gamma[\omega_{6\mu}(E)] = 2A_1' + A_2' + A_1'' + A_2'' + 2E' + 2E''$	13	1	1	1	1	1

Tabella 14: Tavola dei caratteri delle proprietà di trasformazione degli operatori di multipolo elettrico intrinseci $\omega_{\lambda\mu}(E)$ con $\mu = 0, \pm 1, \dots, \pm \lambda$ e $\lambda \leq 6$ [26]. Come si osserva, gli $\omega_{\lambda\mu}(E)$ possiedono proprietà di trasformazione molto diverse dei loro corrispettivi nel riferimento che non cancella i moti rotazionali, per le quali un'operazione di \mathcal{D}_{3h} comporta uno scambio di indici di particella nella sommatoria contenuta in $\hat{p}(\vec{r})$ oppure un cambiamento di segno di tutte le coordinate degli \vec{r}_i (irreps A_1' o A_1''). Inoltre, si può osservare come l'operatore di dipolo possieda le stesse proprietà di trasformazione delle coordinate ignorabili T_α , fatto che, come osserveremo nel prossimo paragrafo, non è privo di conseguenze.

esprimendo le nove coordinate di spostamento cartesiane $\Delta\alpha_i$ dapprima attraverso le tre coordinate normali Q_i (cfr. (173)-(175)) e le sei coordinate T_α e R_α (cfr. (16)-(17)), queste ultime nulle grazie alle condizioni di Eckart per la scelta della terna intrinseca (10)-(11) e poi, trattando le prime come operatori coordinati, \hat{Q}_i con $i = 1, 2, 3$, in termini degli operatori di creazione e distruzione ad esse associati, \hat{a}_1 , \hat{a}_R , \hat{a}_L e aggiunti (cfr. (71) e (92)-(93)): così facendo, gli integrali significativi fra gli autostati vibrazionali possono essere calcolati in modo immediato.

Il procedimento appena illustrato è stato impiegato per la riscrittura degli operatori di dipolo, quadrupolo e ottupolo elettrico e per il calcolo delle probabilità ridotte di transizione $B(E\lambda)$ fra gli stati α -cluster del ^{12}C sperimentalmente osservati, presentate nei tre paragrafi che seguono.

3.5.1 Dipolo elettrico

Come illustrato in § 2.7, il più rilevante contributo al tasso di transizione elettromagnetica fra due stati rotovibrazionali di parità discorde è dovuto agli operatori di dipolo elettrico $\Omega_{2\mu}(E)$ con $\mu = 0, \pm 1$, che, eseguiti gli integrali di volume (202), presentano la forma

$$\Omega(E)_{1,0} = \sqrt{\frac{3}{4\pi}} \sum_{i=1}^3 2e\zeta_i \quad (207)$$

e

$$\Omega(E)_{1,\pm 1} = -\sqrt{\frac{3}{8\pi}} \sum_{i=1}^3 2e(\pm\zeta_i + i\eta_i). \quad (208)$$

Esprimendo le coordinate A_i a secondo membro delle due equazioni appena scritte in funzione delle coordinate intrinseche α_i e degli elementi di matrice di rotazione $\Lambda_{A\alpha}$, si ottiene

$$\Omega(E)_{1,0} = \frac{2e\sqrt{3}}{\sqrt{4\pi}} \sum_{i=1}^3 \sum_{\alpha=x,y,z} \Lambda_{\zeta\alpha} \alpha_i^e + \frac{2e}{\sqrt{4\pi}} \sum_{i=1}^3 \sum_{\alpha=x,y,z} \Lambda_{\zeta\alpha} T_\alpha, \quad (209)$$

e

$$\Omega(E)_{1,\pm 1} = -\frac{2e\sqrt{3}}{m\sqrt{8\pi}} \sum_{i=1}^3 \sum_{\alpha=x,y,z} (\Lambda_{\zeta\alpha} \alpha_i^e \pm i\Lambda_{\eta\alpha} \alpha_i^e) - \frac{2e}{m\sqrt{8\pi}} \sum_{i=1}^3 \sum_{\alpha=x,y,z} (\Lambda_{\zeta\alpha} T_\alpha \pm i\Lambda_{\eta\alpha} T_\alpha) \quad (210)$$

forme analitiche che portano a concludere che il contributo degli operatori di dipolo è nullo, essendo entrambi gli operatori esprimibili unicamente attraverso le componenti T_α del vettore di centro di massa del sistema nella terna rotante, e tramite le sommatorie sulle coordinate α_i^e dei tre nuclei di elio nelle loro posizioni di equilibrio rispetto alla terna intrinseca,

$$\sum_{i=1}^3 \alpha_i^e = 0 \quad \alpha = x, y, z, \quad (211)$$

anch'esse identicamente nulle. Tale assenza è la conseguenza diretta della coincidenza del centro di massa con il centro della distribuzione delle cariche elettriche del sistema, proprietà condivisa da tutti i possibili nuclei α -coniugati trattati in questo modello e comporta un decremento nel tasso di transizione fra tutti i livelli energetici associati a funzioni d'onda con parità opposte, il cui contributo più significativo dovrà provenire dagli operatori di ottupolo elettrico. Infine, la particolare semplicità delle espressioni analitiche degli operatori di dipolo elettrico ci permette di verificare la consistenza di quanto asserito sulle loro proprietà di trasformazione sotto le operazioni del gruppo di permutazione-inversione del nucleo D_{3h} : dalle equazioni (207) e (208) si evince immediatamente che trasformano entrambe sotto l'irreps bosonica dispari A_1'' ¹³, la medesima irreps che si ritrova nella decomposizione del prodotto delle irreps di T_z e $\Lambda_{z\zeta}$ (cfr. (209))¹⁴

$$\Gamma(T_z) \otimes \Gamma(\Lambda_{z\zeta}) = A_2'' \otimes A_2' = A_1'', \quad (212)$$

e delle irreps di (T_x, T_y) e $(\Lambda_{x\zeta}, \Lambda_{y\zeta})$ (cfr. (209))

$$\Gamma(T_x, T_y) \otimes \Gamma(\Lambda_{x\zeta}, \Lambda_{y\zeta}) = E' \otimes E'' = A_1'' \oplus A_2'' \oplus E''. \quad (213)$$

¹³ Un'operazione di D_{3h} comporta solo uno scambio di indici nella sommatoria sulle particelle e al più un cambiamento di segno nelle loro coordinate

¹⁴ Si noti come gli elementi di matrice $\Lambda_{\alpha A}$ con $\alpha = x, y, z$ e $A = \zeta, \eta, \zeta$ possiedono le stesse proprietà di trasformazione sotto D_{3h} delle componenti dell'operatore momento angolare nel sistema intrinseco \hat{J}_α , dovendo le componenti dello stesso nel sistema del laboratorio, \hat{J}_A , trasformare sotto la rappresentazione triviale A_1' .

3.5.2 Quadrupolo Elettrico

A seguito della cancellazione degli operatori dipolari, le transizioni elettromagnetiche fra stati che conservano la parità risultano favorite rispetto a quelle fra autostati di parità opposta, essendo il quadrupolo, come vedremo, il contributo non nullo di ordine più basso alle transizioni di multipolo elettrico. Svolte, infatti, le integrazioni sul volume (cfr. (202)), gli operatori di nostro interesse in questa sezione assumono la forma

$$\Omega_{2,\pm 2}(E) = \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \frac{e}{2} \sum_{i=1}^3 (\xi_i \pm i\eta_i)^2, \quad (214)$$

$$\Omega_{2,\pm 1}(E) = \mp e \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sum_{i=1}^3 (\xi_i \pm i\eta_i) \zeta_i \quad (215)$$

e

$$\Omega_{2,0}(E) = \sqrt{\frac{5}{\pi}} \frac{e}{2} \sum_{i=1}^3 (2\zeta_i^2 - \xi_i^2 - \eta_i^2). \quad (216)$$

Essendo gli $\Omega_{2\mu}(E)$ quadratici nelle coordinate A_i , il successivo passaggio prima alle coordinate $\alpha_i = \delta\alpha_i + \alpha_i^e$,

$$A_i B_i = \sum_{\alpha,\beta} \Lambda_{A\alpha} \Lambda_{B\beta} (\Delta\alpha_i \Delta\beta_i + \Delta\alpha_i \beta_i^e + \Delta\beta_i \alpha_i^e + \alpha_i^e \beta_i^e), \quad (217)$$

e poi alle coordinate normali porta alla formazione di termini *indipendenti* da queste ultime (cfr. $\alpha_i^e \beta_i^e \propto l^2$ in (217)), che contribuiscono solo nelle transizioni puramente rotazionali (o *intrabanda*); di termini lineari nelle coordinate normali (cfr. $\Delta\alpha_i^e \beta_i^e, \Delta\beta_i^e \alpha_i^e \propto l$ in (217)), che contribuiscono solo nelle transizioni rotovibrazionali a ± 1 fonone (o *interbanda*), e di termini quadratici nelle coordinate normali (cfr. $\Delta\alpha_i^e \Delta\beta_i^e$ in (217)), non nulli sia nelle transizioni a ± 2 fononi sia in quelle genuinamente rotazionali.

Alle regole di selezione rotazionali, che seguono direttamente dal contenuto in momento angolare, $\lambda = 2$, degli operatori (214)-(31),

$$|J_i - 2| \leq J_f \leq J_i + 2 \quad (218)$$

si aggiunge, quindi, la regola di selezione vibrazionale,

$$\Delta n_1 + \Delta n_2 = \pm 2, \pm 1, 0 \quad (219)$$

che ci permette di asserire che gli operatori di quadrupolo non possono mediare passaggi quantici di più di due fononi vibrazionali, siano essi di tipo A'_1 o di tipo E' .

Presentate le regole di selezione per le transizioni quadrupolari, riportiamo, per completezza, la forma analitica degli operatori $\Omega_{2\mu}(E)$,

$$\begin{aligned} \Omega_{20}(E) = & \frac{e}{4m} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (1+i) [(-3i + \sqrt{3})(l\sqrt{m} - \hat{Q}_1)(\hat{Q}_2 - i\hat{Q}_3) D_{0-2}^{2*}(\varphi, \theta, \chi) + \\ & - (1-i)(l^2 m - 2l\sqrt{m}\hat{Q}_1 + \hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_2^2 + \hat{Q}_3^2) D_{00}^{2*}(\varphi, \theta, \chi) + (3i + \sqrt{3})(l\sqrt{m} - \hat{Q}_1)(-i\hat{Q}_2 + \hat{Q}_3) D_{02}^{2*}(\varphi, \theta, \chi)] \end{aligned} \quad (220)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{2\pm 1}(E) = & \frac{e}{4m} (1+i) \sqrt{\frac{5}{\pi}} [(-3i + \sqrt{3})(l\sqrt{m} - \hat{Q}_1)(\hat{Q}_2 - i\hat{Q}_3) D_{\pm 1-2}^{2*}(\varphi, \theta, \chi) + \\ & - (1-i)(l^2 m - 2l\sqrt{m}\hat{Q}_1 + \hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_2^2 + \hat{Q}_3^2) D_{\pm 10}^{2*}(\varphi, \theta, \chi) + (3i + \sqrt{3})(l\sqrt{m} - \hat{Q}_1)(-i\hat{Q}_2 + \hat{Q}_3) D_{\pm 12}^{2*}(\varphi, \theta, \chi)] \end{aligned} \quad (221)$$

$$\begin{aligned} \Omega_{2\pm 2}(E) = & \frac{e}{4m} (1+i) \sqrt{\frac{5}{\pi}} [(-3i + \sqrt{3})(l\sqrt{m} - \hat{Q}_1)(\hat{Q}_2 - i\hat{Q}_3) D_{\pm 2-2}^{2*}(\varphi, \theta, \chi) + \\ & - (1-i)(l^2 m - 2l\sqrt{m}\hat{Q}_1 + \hat{Q}_1^2 + \hat{Q}_2^2 + \hat{Q}_3^2) D_{\pm 20}^{2*}(\varphi, \theta, \chi) + (3i + \sqrt{3})(l\sqrt{m} - \hat{Q}_1)(-i\hat{Q}_2 + \hat{Q}_3) D_{\pm 22}^{2*}(\varphi, \theta, \chi)] \end{aligned} \quad (222)$$

impiegati nei calcoli degli elementi di matrice di transizione fra i livelli α -cluster sperimentalmente osservati per questo nucleo (cfr. fig. 12).

All'interno delle (220)-(222), è possibile isolare i contributi dei momenti di quadrupolo intrinseci alle $\Omega_{2\mu}(E)$, separando queste ultime nelle loro componenti $D_{\mu\nu}^{2*}(\varphi, \theta, \chi)$ (cfr. (205)): come si evince, non vi è alcuna dipendenza dalle $D_{\mu\pm 1}^{2*}(\varphi, \theta, \chi)$, ovvero dagli operatori intrinseci $\omega_{2\pm 1}(E)$, funzione delle sole coordinate $z_i\alpha_i$. La cancellazione di questi operatori è riconducibile alla natura planare del sistema di tre particelle α : facendo coincidere l'asse intrinseco z con l'asse C_3 del nucleo, le coordinate le z_i^e si annullano, mentre le Q_i risultano indipendenti dalle coordinate di spostamento intrinseche Δz_i .

A partire dalle forme analitiche delle $\Omega_{2\mu}(E)$ sono state, quindi, calcolate le probabilità ridotte di transizione $B(E2, |i\rangle \rightarrow |f\rangle)$ fra tutti gli stati α -cluster attualmente accreditati, avvalendosi del valore della massa delle particelle α fornito da CODATA [1], nonché dei valori delle frequenze di vibrazione ω_1 e ω_2 presenti in tabella (9), da cui dipendono gli elementi di matrice per effetto dell'applicazione delle \hat{Q}_i sugli stati vibrazionali. Determinante è, inoltre, il ruolo del parametro di distanza l dei nuclei di ${}^4\text{He}$ dall'asse di simmetria C_3 che, come abbiamo osservato in § 3.41, non è indipendente dal numero di fononi vibrazionali di uno stato, come il modello di rotore rigido impone, ma cresce al crescere di n_1 e n_2 , rimanendo approssimativamente costante all'interno di ciascuna banda rotazionale: per questa ragione, affianchiamo nelle due tabelle che seguono, la stima della probabilità di transizione ridotta nel modello di *rotore rigido* a quella del modello di *rotore soffice*. Alle transizioni interbanda corrispondono, nell'approssimazione di rotore soffice, due valori di $B(E2)$, uno associato al valore di l della banda iniziale e uno a quello della banda di destinazione: è ragionevole, pertanto, attendersi che il valore sperimentale della probabilità ridotta di transizione sia compreso nell'intervallo individuato da questi due valori.

STATO INIZIALE				STATO FINALE				B(E2 \uparrow , $ i\rangle \rightarrow f\rangle$) [$e^2 \text{ fm}^4$]			
J	$ K $	n_1	n_2	J	$ K $	n_1	n_2	ROTORE RIGIDO		ROTORE SOFFICE	
								$L = 2, 1695 \text{ fm}$	$l_{0,0} = 1, 5870 \text{ fm}$	$l_{1,0} = 3, 2264 \text{ fm}$	$l_{0,1} = 3, 5148 \text{ fm}$
0	0	0	0	2	0	0	0	16,6165	7,2687	—	—
2	0	0	0	4	0	0	0	8,5445	3,73818	—	—
3	3	0	0	4	3	0	0	7,4774	3,2709	—	—
3	3	0	0	5	3	0	0	2,2155	0,9692	—	—
4	3	0	0	5	3	0	0	6,6412	2,9074	—	—
0	0	1	0	2	0	1	0	24,3600	—	72,8371	—
2	0	1	0	4	0	1	0	12,5280	—	37,4555	—
1	1	0	1	2	1	0	1	12,9628	—	—	49,3156
2	0	0	0	2	0	1	0	1,46054	0,7815	3,2302	—
4	0	0	0	4	0	1	0	1,3277	0,7105	2,9365	—
0	0	0	0	2	0	1	0	5,1119	2,7354	11,3056	—
2	0	0	0	0	0	1	0	1,0223	0,5471	2,2611	—
2	0	1	0	4	0	0	0	2,6290	1,4068	5,8143	—
2	0	0	0	4	0	1	0	2,6290	1,4068	5,8143	—
3	3	0	0	1	1	0	1	2,584	1,3827	5,7148	6,7961
3	3	0	0	2	1	0	1	1,7227	0,9218	3,8099	4,5307
2	1	0	1	4	3	0	0	3,0164	1,6132	6,6674	7,9289

Tabella 15: Tavola delle probabilità ridotte di transizione di quadrupolo in *assorbimento*.

Con un valore di $39,7 \pm 3,3 e^2 \text{ fm}^4$ [45], la probabilità di transizione sperimentalmente osservata per la transizione fra lo stato 0^+ e lo stato 2^+ della banda fondamentale risulta dello stesso ordine di grandezza del ottenuto dal nostro modello di rotore rigido, pur collocandosi significativamente al di sopra della stima di rotore soffice ($l_{0,0} = 1, 5870 \text{ fm}$). Un accordo sensibilmente migliore si raggiunge per la reazione inversa, ove il valore sperimentale, pari a $7,8 \pm 0,4 e^2 \text{ fm}^4$ [55] risulta più prossimo sia alla stima di rotore rigido, $3,32 e^2 \text{ fm}^4$, che a quella di rotore soffice, $1,4537 e^2 \text{ fm}^4$ (cfr. tab. 17).

STATO INIZIALE				STATO FINALE				B(E2 ↓, $ i\rangle \rightarrow f\rangle$) [$e^2 \text{ fm}^4$]			
J	$ K $	n_1	n_2	J	$ K $	n_1	n_2	ROTORE RIGIDO		ROTORE SOFFICE	
								$L = 2, 1695 \text{ fm}$	$l_{0,0} = 1, 5870 \text{ fm}$	$l_{1,0} = 3, 2264 \text{ fm}$	$l_{0,1} = 3, 5148 \text{ fm}$
2	0	0	0	0	0	0	0	3,3233	1,4537	—	—
4	0	0	0	2	0	0	0	4,7469	2,0768	—	—
4	3	0	0	3	3	0	0	5,8158	2,5440	—	—
5	3	0	0	3	3	0	0	1,4099	0,6168	—	—
5	3	0	0	4	3	0	0	5,4337	2,3788	—	—
2	0	1	0	0	0	1	0	4,8720	—	14,5674	—
4	0	1	0	2	0	1	0	6,9600	—	20,8086	—
2	1	0	1	1	1	0	1	7,7777	—	—	29,5894
2	0	1	0	2	0	0	0	1,46054	0,7815	3,2302	—
4	0	1	0	4	0	0	0	1,3277	0,7105	2,9365	—
2	0	1	0	0	0	0	0	1,0224	0,5471	2,2611	—
0	0	1	0	2	0	0	0	5,1115	2,7355	11,3055	—
4	0	0	0	2	0	1	0	1,4606	0,7816	3,2302	—
4	0	1	0	2	0	0	0	1,4606	0,7816	3,2302	—
1	1	0	1	3	3	0	0	6,0293	3,2263	13,3345	15,8576
2	1	0	0	3	3	0	0	2,4118	1,2905	5,3339	6,34298
4	3	0	0	2	1	0	1	1,6748	0,8962	3,7041	4,4049

Tabella 16: Tavola delle probabilità ridotte di transizione di quadrupolo in *emissione*.

Decisamente migliore è l'accordo fra il valore sperimentale e la stima di rotore soffice con $l = l_{1,0}$ della probabilità ridotta di transizione fra lo stato di Hoyle 0^+ e lo stato 2^+ della banda fondamentale: il valore osservativo di quest'ultima, pari a $13,5 \pm 4 \text{ e}^2 \text{ fm}^4$ [55] risulta compatibile entro una deviazione standard con quello predetto dal modello di rotore soffice, pari a $11,31 \text{ e}^2 \text{ fm}^4$, e, in misura minore con quello di rotore rigido, pari a $5,11 \text{ e}^2 \text{ fm}^4$.

Nonostante non tutte le probabilità ridotte calcolate possano trovare una loro controparte sperimentale (la riga 5^- della banda fondamentale e la 2^+ della banda di Hoyle sono il frutto di recenti acquisizioni [42][22][20]), si può osservare che l'accordo del nostro modello con i valori osservativi è migliore per le transizioni che non coinvolgono lo stato fondamentale, dove il carattere α -cluster del nucleo è più marcato e la separazione fra i tre nuclei di ^4He costituenti risulta maggiore. Una possibile sorgente delle discrepanze con i dati sperimentali è data alla scelta dell'operatore di densità di carica $\hat{\rho}(\vec{r})$ come sovrapposizione di Delta di Dirac che, pur permettendoci di svolgere l'integrale di volume nelle (202), trascura l'estensione spaziale delle particelle α , il cui effetto sulle B(E2) è più marcato per le transizioni fra livelli più prossimi in energia allo stato fondamentale, ove le tre particelle α si trovano più ravvicinate¹⁵.

Inoltre, i risultati ottenuti all'interno del nostro modello molecolare α -cluster di rotore rigido e di rotore soffice (cfr. 15-17) ci permettono di concludere che le transizioni fra stati della stessa banda rotazionale sono generalmente favorite rispetto a quelle vibrazionali e rotovibrazionali che coinvolgono un cambiamento nel numero di fononi. Infine, l'interdizione della transizione di quadrupolo fra lo stato 0^+ a $7,6542 \text{ MeV}$ e quello fondamentale per effetto della (218), devia il percorso di decadimento dello stato di Hoyle verso il secondo sullo stato 2^+ della banda fondamentale: nonostante questo livello energetico si trovi al di sopra della soglia di disintegrazione del nucleo in tre particelle α , ci si attende un'emivita più lunga per questo stato rispetto agli altri della stessa banda rotazionale eccitata.

¹⁵ L'approssimazione di rotore soffice, che consiste nella stima delle probabilità ridotte di transizione a partire dalle l_{n_1, n_2} in tabella 10, sarebbe stata completa se si fosse considerata la dimensione delle particelle α anche nell'espressione della densità di carica $\hat{\rho}(\vec{r})$ (cfr. (201)).

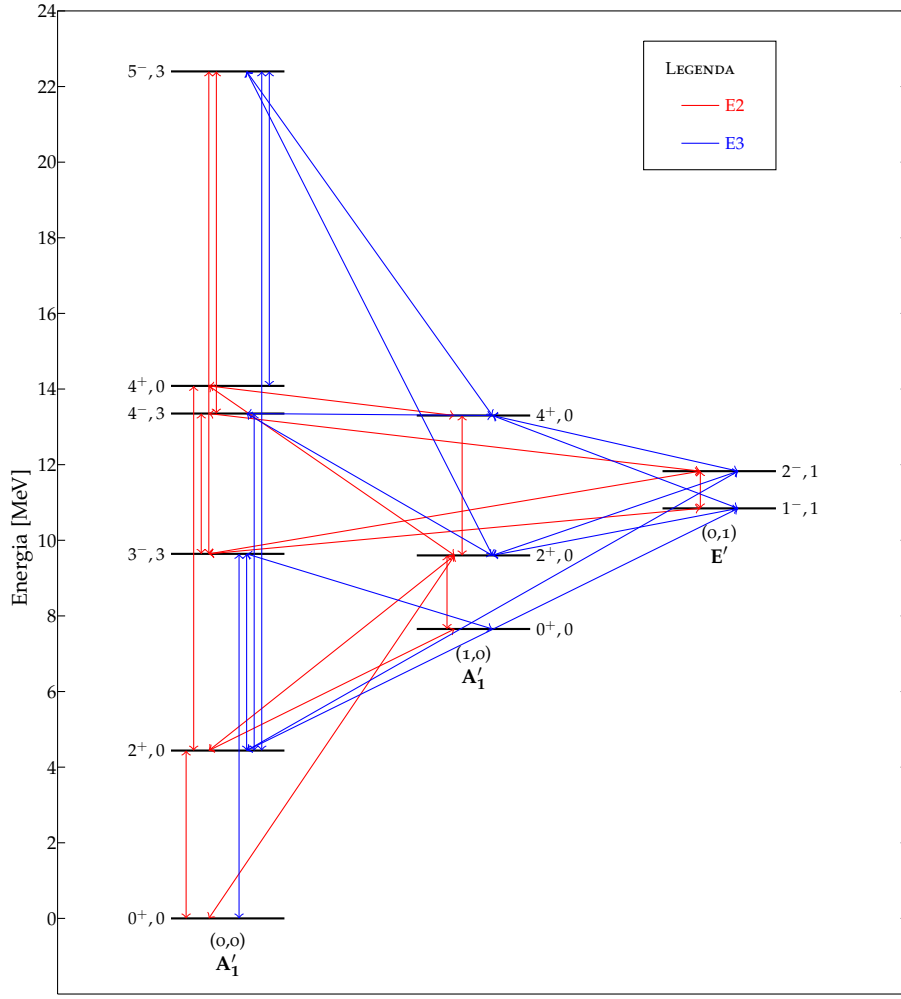


Figura 12: Schema delle transizioni di quadrupolo (in rosso) e di ottupolo elettrico (in blu) fra i livelli energetici α -cluster sperimentalmente osservati del ^{12}C .

Prima di affrontare le transizioni di ottupolo elettromagnetico, focalizziamoci sul calcolo di una quantità che la misura della separazione media fra le particelle α in un dato livello energetico del nucleo in analisi, il *momento di quadrupolo intrinseco* degli stati, definito come

$$Q(J, |K|, |M|, n_1, n_2) = \langle J, |K|, |M|, n_1, n_2 | \Omega_{20}(E) | J, |K|, |M|, n_1, n_2 \rangle, \quad (223)$$

ove la proiezione $|M|$ è fissata, così come gli altri numeri quantici caratteristici dello stato, e, tipicamente, viene fatta coincidere con la massima proiezione del momento angolare J [28]. Come si evince dalla (224), l'unico contributo al momento di quadrupolo intrinseco è fornito dall'operatore $\Omega_{20}(E)$, attraverso la sua componente dipendente dalla matrice di Wigner $D_{00}^{2*}(\varphi, \theta, \chi)$, mentre gli altri suoi termini non portano alcun apporto in quanto violerebbero la legge di conservazione della terza componente del momento angolare. Alla luce di questa considerazione, possiamo riscrivere il momento di quadrupolo intrinseco come

$$Q(J, |K|, |M|, n_1, n_2) = \langle J, |K|, |M|, n_1, n_2 | D_{00}^{2*} \omega_{20}(E) | J, |K|, |M|, n_1, n_2 \rangle, \quad (224)$$

cioè attraverso l'operatore omonimo e la matrice di Wigner D_{00}^{2*} , agente sugli stati rotazionali.

Con un valore di 6 ± 3 e fm^2 [2], il momento di quadrupolo intrinseco del ^{12}C dello stato 2^+ della banda fondamentale con massima proiezione di momento angolare $|M|$ [28], risulta in buona compatibilità

AUTOSTATO					MOMENTI DI QUADRUPOLO INTRINSECI [$e \text{ fm}^2$]			
J	$ K $	$ M $	n_1	n_2	ROTORE RIGIDO	ROTORE SOFFICE		
					$L = 2,1695 \text{ fm}$	$l_{0,0} = 1,5870 \text{ fm}$	$l_{1,0} = 3,2264 \text{ fm}$	$l_{0,1} = 3,5184 \text{ fm}$
2	0	0	0	0	-1,1647	-0,7703	-	-
2	0	1	0	0	-0,5824	-0,3851	-	-
2	0	2	0	0	1,1647	0,7703	-	-
2	0	0	1	0	-1,4106	-	-2,4384	-
2	0	1	1	0	-0,7053	-	-1,2192	-
2	0	2	1	0	1,4106	-	2,4384	-
4	0	0	0	0	-1,0588	-0,7003	-	-
4	0	1	0	0	-0,9000	-0,5952	-	-
4	0	2	0	0	-0,42350	-0,2801	-	-
4	0	3	0	0	0,3706	0,2451	-	-
4	0	4	0	0	1,4823	0,9838	-	-
4	0	0	1	0	-1,2824	-	2,21675	-
4	0	1	1	0	-1,0363	-	-1,8842	-
4	0	2	1	0	-0,5130	-	-0,8867	-
4	0	3	1	0	0,4488	-	0,7759	-
4	0	4	1	0	1,7954	-	3,1035	-
3	3	0	0	0	1,3588	0,8987	-	-
3	3	1	0	0	1,0191	0,6740	-	-
3	3	2	0	0	0	0	-	-
3	3	3	0	0	-1,6985	-1,1234	-	-
4	3	0	0	0	-0,3150	0,0490	-	-
4	3	1	0	0	0,3149	0,2083	-	-
4	3	2	0	0	0,1482	0,0980	-	-
4	3	3	0	0	-0,1297	-0,0858	-	-
4	3	4	0	0	-0,5188	-0,3431	-	-
5	3	0	0	0	-0,1045	-0,0691	-	-
5	3	1	0	0	-0,0940	-0,0622	-	-
5	3	2	0	0	-0,0627	-0,0415	-	-
5	3	3	0	0	-0,1297	-0,0858	-	-
5	3	4	0	0	0,0627	0,0415	-	-
5	3	5	0	0	0,1567	0,1037	-	-
1	1	0	0	1	1,0183	-	-	1,9831
1	1	1	0	1	-0,5092	-	-	-0,9916
2	1	0	0	1	-0,7274	-	-	-1,4188
2	1	1	0	1	-0,3637	-	-	-0,7094
2	1	1	0	1	0,7274	-	-	1,4188

Tabella 17: Momenti di quadrupolo intrinseci.

con quello calcolato nell'ambito del modello di rotore rigido e di sfere soffice, a causa del generoso errore statistico ad esso associato, che non ci permette di trarre conclusioni sulla bontà delle due approssimazioni del modello α -cluster in analisi. E', infine, rilevante osservare che, a parità di momento angolare e di proiezioni $|K|$ e $|M|$, lo stato con il numero di fononi più elevato, sia nel modello di rotore rigido, sia nel modello di rotore soffice, risulta possedere, anche se in misura diversa, il momento di quadrupolo intrinseco più grande, per effetto della maggiore distanza media fra le particelle α .

3.5.3 Ottupolo Elettrico

Come abbiamo anticipato, il momento di ottupolo rappresenta la prima multipolarità rilevante nella descrizione delle transizioni elettromagnetiche fra stati con parità discorde, per effetto della cancellazione degli operatori dipolari. In seguito alle intergrazioni sul volume (cfr. (202)), gli operatori di ottupolo assumono la forma

$$\Omega_{3,\pm 3}(E) = \mp \sqrt{\frac{35}{\pi}} \frac{e}{4} \sum_{i=1}^3 (\xi_i \pm i\eta_i)^3. \quad (225)$$

$$\Omega_{3,\pm 2}(E) = \sqrt{\frac{105}{2\pi}} \frac{e}{2} \sum_{i=1}^3 \zeta_i (\xi_i \pm i\eta_i)^2, \quad (226)$$

$$\Omega_{3,\pm 1}(E) = \mp \sqrt{\frac{21}{\pi}} \frac{e}{4} \sum_{i=1}^3 (\xi_i \pm i\eta_i) (4\zeta_i^2 - \xi_i^2 - \eta_i^2). \quad (227)$$

e

$$\Omega_{3,0}(E) = \sqrt{\frac{7}{\pi}} \frac{e}{2} \sum_{i=1}^3 (2\zeta_i - 3\xi_i^2 - 3\eta_i^3) \zeta_i \quad (228)$$

Similmente al caso precedente, il passaggio dalle coordinate intrinseche alle coordinate di spostamento $\Delta\alpha_i$ e di equilibrio α_i^e ,

$$A_i B_i C_i = \sum_{\alpha,\beta,\gamma} \Lambda_{A\alpha} \Lambda_{B\beta} \Lambda_{C\gamma} (\Delta\alpha_i \Delta\beta_i \Delta\gamma_i + \Delta\alpha_i \Delta\gamma_i \beta_i^e + \Delta\beta_i \Delta\gamma_i \alpha_i^e + \Delta\beta_i \Delta\alpha_i \gamma_i^e + \Delta\alpha_i \gamma_i^e \beta_i^e + \Delta\gamma_i \alpha_i^e \beta_i^e + \Delta\beta_i \alpha_i^e \gamma_i^e + \alpha_i^e \beta_i^e \gamma_i^e), \quad (229)$$

e la successiva introduzione delle coordinate normali comporta la comparsa di termini cubici, quadratici, lineari e indipendenti dalle \hat{Q}_i , che ricoprono un ruolo diverso a seconda della natura della transizione elettromagnetica. Come nel caso del quadrupolo, l'apporto dei termini indipendenti dalle coordinate normali (cfr. $\alpha_i^e \beta_i^e \gamma_i^e$ in (42)) è non nullo solo nelle transizioni rotazionali, mentre i termini lineari (cfr. $\alpha_i \beta_i^e \gamma_i^e$ ed affini in (42)) contribuiscono sia nelle transizioni vibrazionali pure ($\Delta J = \Delta K = 0$) che in quelle rotovibrazionali a un fonone; i termini quadratici (cfr. $\alpha_i \beta_i \gamma_i^e$ ed affini in (42)) hanno, invece, un ruolo sia nelle transizioni rotazionali che in quelle rotovibrazionali con $\Delta n_1 + \Delta n_2 = \pm 2$, mentre i cubici (cfr. $\alpha_i \beta_i \gamma_i$ in (42)) risultano determinanti solo nelle transizioni a uno o tre fononi di vibrazione. Analogamente al caso precedente, si affiancano alla legge di composizione del momento angolare $|J_i - 3| \leq J_f \leq J_i + 3$ le regole di selezione vibrazionali

$$\Delta n_1 + \Delta n_2 = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3 \quad (230)$$

che, prevedibilmente, interdicono tutte le transizioni vibrazionali e rotovibrazionali che comportano una variazione di più di tre fononi, di tipo E' o A'_1 .

Riportiamo, inoltre, le espressioni degli operatori ottupolari nel sistema di riferimento intrinseco

$$\omega_{3-3}(E) = \frac{2ie}{16m^{3/2}} \sqrt{\frac{35}{3\pi}} \left[L^3 m^{3/2} - 3L^2 m \hat{Q}_1 + 3L\sqrt{m} \hat{Q}_1^2 - \hat{Q}_1^3 - \sqrt{2}(\hat{Q}_2 - i\hat{Q}_3)^3 \right], \quad (231)$$

$$\omega_{3-2}(E) = 0, \quad (232)$$

$$\omega_{3-1}(E) = -\frac{e}{16m^{3/2}} (3i + \sqrt{3}) \sqrt{\frac{35}{3\pi}} (L\sqrt{m} - \hat{Q}_1) \left[-\sqrt{2}(\hat{Q}_2 - i\hat{Q}_3)^2 + (1+i)L\sqrt{m}(\hat{Q}_2 + i\hat{Q}_3) - (1+i)\hat{Q}_1, (\hat{Q}_2 + i\hat{Q}_3) \right] \quad (233)$$

$$\omega_{30}(E) = 0, \quad (234)$$

$$\omega_{31}(E) = \frac{e}{16m^{3/2}}(-3i + \sqrt{3})(L\sqrt{m} - \hat{Q}_1) \left[(1-i)L\sqrt{m}(\hat{Q}_2 - i\hat{Q}_3) - \sqrt{2}(\hat{Q}_2 + i\hat{Q}_3)^2 + (1+i)\hat{Q}_1(i\hat{Q}_2 + \hat{Q}_3) \right], \quad (235)$$

$$\omega_{32}(E) = 0 \quad (236)$$

e

$$\omega_{33}(E) = \frac{2ie}{16m^{3/2}} \sqrt{\frac{35}{3\pi}} \left[L^3 m^{3/2} - 3L^2 m \hat{Q}_1 + 3L\sqrt{m} \hat{Q}_1^2 - \hat{Q}_1^3 + \sqrt{2}(i\hat{Q}_2 - \hat{Q}_3)^3 \right], \quad (237)$$

risultate decisamente più convenienti delle $\Omega_{3\mu}(E)$ nel calcolo degli elementi di matrice di transizione. Come si evince dalle (232), (234) e (236), la natura planare del nucleo porta alla cancellazione di tutte di tutti i contributi alle $\Omega_{3\mu}(E)$ provenienti dalle $\omega_{3\pm 2}(E)$ e $\omega_{30}(E)$, che contengono unicamente termini trilineari del tipo $z_i \alpha_i \beta_i$. Avvalendosi, ancora delle fonti da cui si è attinto nel caso del quadrupolo (cfr. § 3.5.2), sono state, quindi, calcolate alcune delle probabilità ridotte di transizione di ottupolo $B(E3, |i\rangle \rightarrow |f\rangle)$ fra le righe α -cluster sperimentalmente osservate (cfr. fig. 12), riportate nelle tabelle seguenti.

STATO INIZIALE				STATO FINALE				B(E3, $ i\rangle \rightarrow f\rangle$) [$e^2 \text{ fm}^6$]			
J	$ K $	n_1	n_2	J	$ K $	n_1	n_2	ROTORE RIGIDO $L = 2, 1695 \text{ fm}$	$l_{0,0} = 1, 5870 \text{ fm}$	$l_{1,0} = 3, 2264 \text{ fm}$	$l_{0,1} = 3, 5148 \text{ fm}$
0	0	0	0	3	3	0	0	99,666	24,372	—	—
2	0	0	0	3	3	0	0	41,528	10,155	—	—
2	0	0	0	4	3	0	0	39,814	9,749	—	—
2	0	0	0	5	3	0	0	10,858	2,659	—	—
4	0	0	0	5	3	0	0	46,852	11,457	—	—
0	0	1	0	3	3	0	0	82,800	29,211	350,762	—
2	0	1	0	3	3	0	0	34,500	11,956	146,151	—
4	0	1	0	3	3	0	0	2,803	0,971	11,872	—
2	0	0	0	1	1	0	1	5,521	1,909	23,581	32,722

Tabella 18: Tavola delle probabilità ridotte di transizione di ottupolo in assorbimento.

STATO INIZIALE				STATO FINALE				B(E3, $ i\rangle \rightarrow f\rangle$) [$e^2 \text{ fm}^6$]			
J	$ K $	n_1	n_2	J	$ K $	n_1	n_2	ROTORE RIGIDO $L = 2, 1695 \text{ fm}$	$l_{0,0} = 1, 5870 \text{ fm}$	$l_{1,0} = 3, 2264 \text{ fm}$	$l_{0,1} = 3, 5148 \text{ fm}$
3	3	0	0	0	0	0	0	14,238	3,482	—	—
3	3	0	0	2	0	0	0	29,663	7,254	—	—
4	3	0	0	2	0	0	0	22,119	5,416	—	—
5	3	0	0	4	0	0	0	4,936	1,176	—	—
5	3	0	0	4	0	0	0	38,333	9,374	—	—
3	3	0	0	0	0	1	0	11,829	4,173	50,109	—
3	3	0	0	2	0	1	0	24,643	8,540	104,394	—
3	3	0	0	4	0	1	0	3,603	1,249	15,264	—
1	1	0	1	2	0	0	0	9,202	3,182	39,302	54,536

Tabella 19: Tavola delle probabilità ridotte di transizione di ottupolo in emissione.

Con $119.5 \pm 19.8 e^2 \text{ fm}^6$ [37] [50], il valore sperimentalmente della probabilità di transizione $B(E3, 0^+ \rightarrow 3^-)$ ottenuto dalla distribuzione angolare di nucleoni diffusi inelasticamente [50], si trova in ottimo accordo

con quello che abbiamo calcolato, pari a $99,69 e^2 \text{ fm}^6$ nel modello di rotore rigido (a $l = 2, 16 \text{ fm}$), mentre risulta più distante da quello stimato nell'approssimazione di rotore soffice: una parte di questa discrepanza si deve all'allontanamento centrifugo delle particelle α dall'asse di rotazione C_3 , effetto che si osserva principalmente negli stati di massima proiezione $|K|$ del momento angolare lungo l'asse z intrinseco (cfr. § 3.4.2.). Tale accordo, tuttavia, peggiora se si considera la stima di $B(E3, 0^+ \rightarrow 3^-)$ eseguita a partire da reazioni di scattering elastico $^{12}\text{C}(e, e')^{12}\text{C}$, ove probabilità di transizione si attesta a $610 \pm 85 e^2 \text{ fm}^6$ [50].

Altri valori in aggiunta a questo sono stati calcolati (cfr. 18-19), fra cui la transizione interbanda tra lo stato 2^+ della banda fondamentale e 1^- della banda E' , per la quale l'intervallo di valori fornito dall'approssimazione di rotore soffice è abbastanza generoso da comprendere anche la stima di rotore rigido, variando da $1,90$ a $32,72 e^2 \text{ fm}^6$ come conseguenza della dipendenza delle $B(E3)$ rotovibrazionali dalla sesta potenza del parametro di distanza l .

♣ RIEPILOGO

In questo capitolo il modello α -cluster macroscopico introdotto in § 1 è stato applicato al ^{12}C , che in tale descrizione è assimilato ad nucleo planare con configurazione di equilibrio triangolare cui è associato il gruppo di simmetria \mathcal{D}_{3h} , isomorfo al gruppo di permutazione-inversione delle coordinate delle tre particelle α , $\mathcal{S}_3 \otimes C_i$.

Nella prima parte, sono state analizzate le proprietà di trasformazione delle coordinate di spostamento cartesiane, delle coordinate normali di vibrazione, e delle coordinate ignorabili T_α e R_α sotto le operazioni del gruppo di permutazione-inversione. Questo studio preliminare ha poi permesso di determinare le proprietà di trasformazione degli stati rotazionali e vibrazionali e infine di costruire esplicitamente le autofunzioni rotovibrazionali del sistema, rispettose della natura bosonica delle particelle α (irreps A_1' e A_1''). In particolare, la sequenza dei livelli energetici permessi così ottenuta è risultata consistente con quella dell'*Algebraic Cluster Model* di R. Bijker e F. Iachello [5]. Lo spettro del nucleo è stato, in seguito, ricostruito, prima nell'approccio originario del modello, quello di rotore rigido, poi tentando di riprodurre gli effetti dell'accoppiamento rotovibrazionale precedentemente rimosso attraverso l'introduzione nell'hamiltoniana di termini di Dunham e l'approssimazione di *rotore soffice*. In quest'ultimo approccio, il momento d'inerzia è stato lasciato variare con il numero di fononi vibrazionali, ed è stata superata l'approssimazione di particelle puntiformi, permettendo una più fedele riproduzione della spaziatrura energetica fra i livelli all'interno delle bande rotazionali. Infine, la trattazione si è conclusa con la stima delle probabilità ridotte di transizione $B(E\lambda, |i\rangle \rightarrow |f\rangle)$ di quadrupolo e ottupolo elettromagnetico fra i livelli α -cluster osservati sperimentalmente e dei momenti di quadrupolo intrinseci degli stessi.

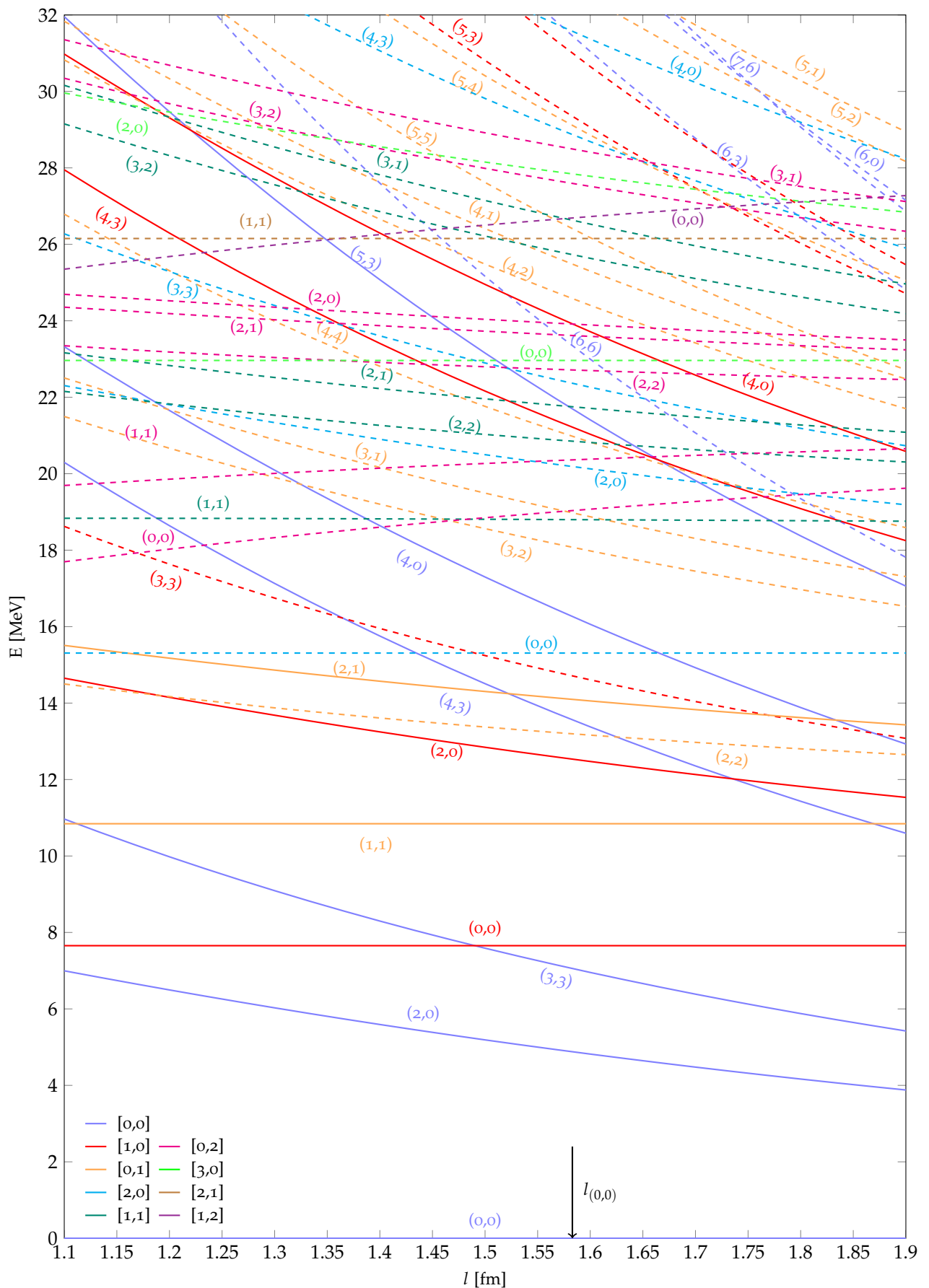


Figura 13: Schema dei livelli del ^{12}C con $n_1 + n_2 \leq 3$ ed energia inferiore a 32 MeV in funzione della distanza delle particelle α dal loro centro di massa. Si noti che gli stati (J, K) all'interno della stessa banda rotazionale $[n_1, n_2]$ (cfr. legenda) sono indicati con lo stesso colore.

 IL NUCLEO ^{16}O

La stessa cornice teorica che ci ha permesso di ricostruire lo spettro rotovibrazionale del ^{12}C può essere impiegata per il ^{16}O , nucleo composto da quattro particelle α che, all'equilibrio, si dispongono ai vertici di un tetraedro. La tridimensionalità di tale configurazione, come osserveremo all'interno del capitolo, si traduce nell'inequivalenza fra il gruppo puntuale all'equilibrio e il gruppo di permutazione-inversione dei quattro nuclei di ^4He che avrà importanti ripercussioni sulla costruzione degli stati rotovibrazionali, $\psi_R \psi_V$, nonché sullo spettro α -cluster del nucleo stesso, derivato per la prima volta da J.A. Wheeler nel 1937 [59] e poi, in forma completa da S.L. Kameny nel 1956 [38].

4.1 I GRUPPI PUNTUALI DI SIMMETRIA

Come anticipato nel preambolo, la configurazione di equilibrio di un sistema di quattro particelle α è un *tetraedro*, struttura che è lasciata invariante dalle 24 operazioni del gruppo T_d , quali le otto rotazioni di 120° attorno ai quattro assi C_3 passanti per il centro di massa ed uno dei quattro vertici; le tre rotazioni di 180° , C_2 attorno ai tre assi passanti per il punto medio di uno spigolo ed il centro di massa del sistema; le sei riflessioni rispetto ai sei piani ortogonali ad una faccia e passanti per il vertice opposto, σ_d , e le sei rotazioni di 90° attorno all'asse passante per il centro di massa e il punto medio di uno spigolo seguite da riflessioni rispetto al piano ortogonale all'asse, S_4 .

D'altra parte, il gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana del sistema,

$$\hat{H}_{RV} = -\frac{\hbar^2}{2} \sum_{i=1}^6 \frac{\partial^2}{\partial Q_i^2} + \frac{\omega_1^2}{2} Q_1^2 + \frac{\omega_2^2}{2} \sum_{j=2}^3 Q_j^2 + \frac{\omega_3^2}{2} \sum_{j=4}^6 Q_j^2 + \sum_{i=1}^3 \frac{\hat{J}_i}{2I_i}, \quad (238)$$

ovvero il gruppo di permutazione-inversione di quattro elementi ¹,

$$\mathcal{O}_{3h}(N) \equiv \mathcal{G}(N) = \mathcal{S}_4 \otimes \mathcal{C}_i, \quad (239)$$

non è più isomorfo al gruppo puntuale di simmetria del ^{16}O all'equilibrio, \mathcal{T}_d , ma al gruppo ottaedrico \mathcal{O}_h , a differenza del caso del carbonio. Tuttavia, l'isomorfismo fra il gruppo delle permutazioni di quattro elementi \mathcal{S}_4 e il gruppo \mathcal{T}_d , sottogruppo normale di $\mathcal{O}_h(N)$, ci consente di mettere in relazione le rappresentazioni irriducibili del secondo con quelle di \mathcal{T}_d , attraverso una prassi comune in ambito molecolare [15]. Considerando, infatti, i caratteri delle rappresentazioni irriducibili di \mathcal{T}_d e di \mathcal{O}_h relativi alle classi di coniugazione $1, 8C_3, 3C_2, 6S_4, \sigma_d$, comuni ad entrambi i gruppi (cfr. *Appendice A*), si trovano le seguenti relazioni di *riduzione* delle rappresentazioni,

$$A_1 \leftrightarrow A_{1g}, A_{2u} \quad A_2 \leftrightarrow A_{2g}, A_{1u} \quad E \leftrightarrow E_{1g}, E_{2g} \quad T_1 \leftrightarrow T_{1g}, T_{2u} \quad T_2 \leftrightarrow T_{2g}, T_{1u}, \quad (240)$$

ove i simboli A_1, A_2, E, T_1 e T_2 denotano le rappresentazioni irriducibili di \mathcal{T}_d , mentre le $A_{1i}, A_{2i}, E_i, T_{1i}$ e T_{2i} con $i = u, g$ indicano le rappresentazioni irriducibili del gruppo ottaedrico nella notazione

¹ Si noti che è stato indicato con $\mathcal{C}_i = \{\mathbb{I}, \mathbb{I}^*\}$ il gruppo d'inversione delle coordinate, mentre il gruppo delle permutazioni è dato da $\mathcal{S}_4 = \{(1)(2)(3)(4), (12)(3)(4), (123)(4), (12)(34), (1234)\}$, ove per brevità è stata inclusa nella definizione una sola operazione rappresentativa per ogni classe di coniugazione del gruppo.

di Schönflies. Avvalendoci, inoltre, della mappatura di isomorfismo fra \mathcal{T}_d e S_4 e fra \mathcal{O}_h e $S_4 \otimes C_i$ presentate in *Appendice A*, possiamo identificare nelle A_{1g} e A_{2u} di \mathcal{O}_h (corrispondenti alla A_1 di T_d), le uniche rappresentazioni irriducibili ammissibili sotto cui un'autofunzione rotovibrazionale del sistema può trasformare, essendo entrambe 1-dimensionali e *bosoniche*, ovvero completamente simmetriche per scambio di due particelle α qualsiasi [9]. Prima di proseguire con la decomposizione delle operazioni del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana $\mathcal{O}_h(N)$ come in § 1.4.1, è importante concentrare l'attenzione su un'altra conseguenza della tridimensionalità della distribuzione di particelle, ovvero la presenza di 24 trasformazioni di $\mathcal{O}_h(N)$ (e 12 di \mathcal{T}_d) che non preservano la chiralità destrogira della terna solidale al nucleo rotante: si tratta di operazioni come permutazioni dispari o permutazioni pari seguite da inversione che, a differenza delle analoghe (12)(3), (23)(1), (13)(2) e (1)(2)(3)* di \mathcal{D}_{3h} il cui effetto sulla terna solidale al nucleo planare ^{12}C si riduce a quello di una rotazione propria degli assi della stessa, comportano necessariamente il passaggio da una terna destrogira ad una levogira.

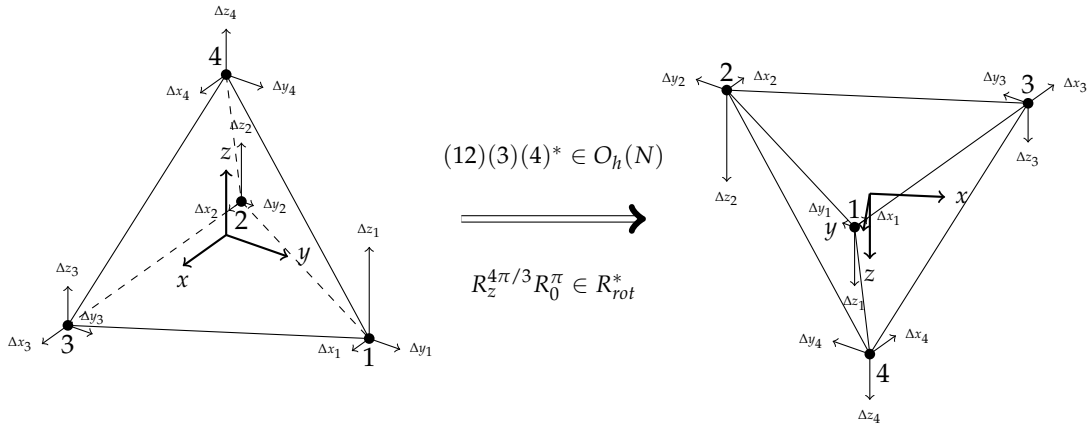


Figura 14: Effetto dell'operazione $(12)(3)(4)^*$ del gruppo di permutazione-inversione $\mathcal{O}_h(N)$ sulle coordinate cartesiane di spostamento (cfr. fig. (4)) delle particelle α del nucleo di ^{16}O . Si osservi che l'operazione presentata non cambia la chiralità della terna solidale al nucleo rotante: è sufficiente eseguire una rotazione antioraria di π intorno all'asse x ed una di $4\pi/3$ attorno all'asse z appena ruotato per stabilire l'orientazione la terna in seguito all'operazione di $\mathcal{O}_h(N)$.

Conseguentemente, a ciascuna delle 48 operazioni del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana, isomorfo ad \mathcal{O}_h , resta associata una operazione di rotazione o rotazione-inversione degli assi della terna solidale al nucleo rotante: indicando le quattro particelle con (1), (2), (3) e (4) e fissando l'orientazione della terna solidale come in figura (14), si trova, per le dieci operazioni scelte come rappresentative delle dieci classi di equivalenza di \mathcal{O}_h ,

$$\begin{aligned}
 R_0 &\leftrightarrow (1)(2)(3)(4) \in \mathbb{1} & \mathcal{P} &\leftrightarrow (1)(2)(3)(4)^* \in \mathbb{1}^*, \\
 R_z^{4\pi/3} &\leftrightarrow (123)(4) \in 8C_3 & \mathcal{P}R_z^{4\pi/3} &\leftrightarrow (123)(4)^* \in 8S_6, \\
 R_z^{4\pi/3}R_0^\pi &\leftrightarrow (12)(3)(4)^* \in 6C_2 & \mathcal{P}R_z^{4\pi/3}R_0^\pi &\leftrightarrow (12)(3)(4) \in 6\sigma_d, \\
 R_z^{\pi/6}R_y^{2\pi-\alpha}R_z^{5\pi/6} &\rightarrow (1234)^* \in 6C_4 & \mathcal{P}R_z^{\pi/6}R_y^{2\pi-\alpha}R_z^{5\pi/6} &\rightarrow (1234) \in 6S_4, \\
 R_z^{\pi/2}R_y^{\pi-\alpha}R_z^{7\pi/6} &\leftrightarrow (12)(34) \in 3C_2 & \mathcal{P}R_z^{\pi/2}R_y^{\pi-\alpha}R_z^{7\pi/6} &\leftrightarrow (12)(34)^* \in 3\sigma_h,
 \end{aligned} \tag{241}$$

ove R_y indica una rotazione attorno all'asse y della terna rotante, \mathcal{P} l'operatore di inversione 3-dimensionale (o *parità*) e $\alpha = \arccos(-1/3)$ l'angolo tetraedrico, di ampiezza $109^\circ 27'$.

4.2 PROPRIETÀ DI TRASFORMAZIONE DELLE COORDINATE ROTOVIBRAZIONALI

Proseguiamo l'analisi, come in precedenza, con la ricerca della rappresentazione riducibile Γ_{Car} di \mathcal{O}_h sotto la quale trasformano collettivamente le coordinate normali di vibrazione ($Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, Q_5, Q_6$)

e di rototraslazione $(T_x, T_y, T_z, R_x, R_y, R_z)$ isomorfa alla rappresentazione delle coordinate cartesiane di spostamento $\Delta\alpha_i$ con $\alpha = x, y, z$ e $i = 1, 2, 3$, (cfr. § 1.3.5).

Considerando, a titolo di esempio, l'operazione di permutazione-inversione $(12)(3)(4)^*$ con le stesse convenzioni adottate in figura (14) si trova che

$$(12)(3)(4)^*(\Delta x_1, \Delta y_1, \Delta z_1, \Delta x_2, \Delta y_2, \Delta z_2, \Delta x_3, \Delta y_3, \Delta z_3, \Delta x_4, \Delta y_4, \Delta z_4)^T \equiv D^{\Gamma_{Car}}[(12)(3)(4)^*]\Delta\vec{r} =$$

$$(\Delta x_2 c_3 - \Delta y_2 s_3, -\Delta x_2 s_3 - \Delta y_2 c_3, \Delta z_2, \Delta x_1 c_3 - \Delta y_1 s_3, -\Delta x_1 s_3 - \Delta y_1 c_3,$$

$$\Delta z_1, \Delta x_3 c_3 - \Delta y_3 s_3, -\Delta x_3 s_3 - \Delta y_3 c_3, \Delta z_3, \Delta x_4 c_3 - \Delta y_4 s_3, -\Delta x_4 s_3 - \Delta y_4 c_3, \Delta z_4)$$
(242)

ove $c_3 \equiv \cos(\pi/3)$ e $s_3 \equiv \sin(\pi/3)$, e dunque il carattere della matrice di trasformazione $D^{\Gamma_{Car}}[(12)(3)(4)^*]$ risulta $Tr\{D^{\Gamma_{Car}}[(12)^*]\} = +2$, traccia che è condivisa da tutti gli altri rappresentativi delle operazioni nella classe di coniugazione di $(12)(3)(4)^*$, $6C_2$. Ripetendo lo stesso procedimento per le altre nove operazioni rappresentative del gruppo, si ottengono tutti i caratteri della rappresentazione riducibile delle coordinate cartesiane di spostamento Γ_{Car} ,

$O_h(N)$	(1)(2)(3)(4)	(123)(4)	(12)(3)(4)*	(1234)*	(12)(34)	(1)(2)(3)(4)*	(1234)	(123)(4)*	(12)(34)*	(12)(3)(4)
O_h	\mathbb{I}	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	$\mathbb{1}^*$	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
Γ_{Car}	12	0	2	0	0	12	0	0	0	2

Tabella 20: Tavola dei caratteri della rappresentazione riducibile delle coordinate di spostamento cartesiane.

Ora, sapendo che le coordinate traslazionali (T_x, T_y, T_z) e le coordinate rotazionali (R_x, R_y, R_z) dovranno trasformare rispettivamente con le rappresentazioni irriducibili T_2 e T_1 di \mathcal{T}_d [15], ci attendiamo dalla decomposizione di Γ_{Car} la comparsa di almeno una fra T_{2g} e T_{1u} e una fra T_{1g} e T_{2u} , oltre alle rappresentazioni di O_h corrispondenti alle tre irreps di T_d , A_1 , E e T_2 , sotto cui trasformano le coordinate normali di un sistema di quattro particelle poste all'equilibrio ai vertici di un tetraedro. Eseguendo la decomposizione di Γ_{Car} nelle rappresentazioni irriducibili di O_h si trovano proprio le rappresentazioni T_{2g} e T_{1g} per le coordinate traslazionali e rotazionali e le $A_{1g} \oplus E_g \oplus T_{2g}$ per le coordinate normali $(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, Q_5, Q_6)$, confermando quanto appena previsto: si può quindi osservare che, nonostante il gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana sia isomorfo al gruppo puntuale ottaedrico O_h , i modi normali di vibrazione delle tre particelle α rimangono quelli di un sistema tetraedrico.

O_h	\mathbb{I}	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	$\mathbb{1}^*$	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
Γ_{Car}	12	0	2	0	0	12	0	0	0	2
$\Gamma(T_\alpha) = T_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$\Gamma(R_\alpha) = T_{1g}$	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
$\Gamma(Q_i)$	6	0	2	0	2	6	0	0	2	2
$\Gamma(Q_1) = A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma(Q_2, Q_3) = E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$\Gamma(Q_4, Q_5, Q_6) = T_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1

Tabella 21: Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle coordinate normali. Si osservi che una delle coordinate normali, che denotiamo con Q_1 , corrisponde ad un modo di vibrazione nondegenere e trasforma sotto la rappresentazione completamente simmetrica A_{1g} ; la coppia di coordinate (Q_2, Q_3) corrisponde ad un modo doppiamente degenere che trasforma sotto la rappresentazione irriducibile E_g , mentre la terna Q_4, Q_5, Q_6 corrisponde ad un modo triplamente degenere e trasforma sotto l'irrep T_{2g} .

4.3 PROPRIETÀ DI TRASFORMAZIONE DELLE AUTOFUNZIONI ROTOVIBRAZIONALI

Denotando con Q_1 la coordinata corrispondente al modo normale completamente simmetrico A_{1g} , con (Q_2, Q_3) le coordinate normali corrispondenti al modo di vibrazione doppiamente degenere e con

(Q_4, Q_5, Q_6) le coordinate del modo triplamente degenere, possiamo ora determinare le proprietà di simmetria degli autostati vibrazionali del sistema, seguendo il procedimento seguito per il nucleo di carbonio.

Come nel caso precedente, gli autostati dell'oscillatore armonico 1-dimensionale di coordinata Q_1 trasformano tutti sotto la rappresentazione triviale A'_1 di $\mathcal{O}_h(N)$, pertanto il carattere di simmetria della funzione d'onda vibrazionale del sistema dipenderà unicamente dalle proprietà di trasformazione degli autostati vibrazionali degli oscillatori 2- e 3-dimensionali di coordinate (Q_2, Q_3) e (Q_4, Q_5, Q_6) . Applicando la formula ricorsiva (101) si ottengono i caratteri di simmetria degli autostati vibrazionali $(n_2 + 1)$ -degeneri dell'oscillatore 2-dimensionale, denotati collettivamente dal numero quantico fononico n_2 (cfr. (179)) e riportati nella tabella sottostante.

O_h	Γ	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	$\mathbb{1}^*$	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$\Gamma(\Phi_0) = A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma(\Phi_1) = E_g$	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
$\Gamma(\Phi_2) = A_{1g} + E_g$	3	0	1	1	3	3	1	0	3	1
$\Gamma(\Phi_3) = A_{1g} + A_{2g} + E_g$	4	1	0	0	4	4	0	1	4	0
$\Gamma(\Phi_4) = A_{1g} + 2E_g$	5	-1	1	1	5	5	1	-1	5	1
$\Gamma(\Phi_5) = A_{1g} + A_{2g} + 2E_g$	6	0	0	0	6	6	0	0	6	0
$\Gamma(\Phi_6) = 2A_{1g} + A_{2g} + 2E_g$	7	1	1	1	7	7	1	1	7	1
$\Gamma(\Phi_7) = A_{1g} + A_{2g} + 3E_g$	8	-1	0	0	8	8	0	-1	8	0
$\Gamma(\Phi_8) = 2A_{1g} + A_{2g} + 3E_g$	9	0	1	1	9	9	1	0	9	1
$\Gamma(\Phi_9) = 2A_{1g} + 2A_{2g} + 3E_g$	10	1	0	0	10	10	0	1	10	0
$\Gamma(\Phi_{10}) = 2A_{1g} + A_{2g} + 4E_g$	11	-1	1	1	11	11	1	-1	11	1
$\Gamma(\Phi_{11}) = 2A_{1g} + 2A_{2g} + 4E_g$	12	0	0	0	12	12	0	0	12	0
$\Gamma(\Phi_{12}) = 3A_{1g} + 2A_{2g} + 4E_g$	13	1	1	1	13	13	1	1	13	1

Tabella 22: Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali (con $n_2 \leq 12$). Come per gli stati vibrazionali doppiamente degeneri del carbonio, emerge una periodicità nella decomposizione della rappresentazione riducibile degli stati a numero di fononi n_2 fissato: partendo da $n_2 = 0$, che trasforma come A_{1g} , si ottengono i cinque livelli successivi aggiungendo alla $\Gamma(\Phi_0)$ in successione $E_g - A_{1g}$, A_{1g} , A_{2g} , $E_g - A_{2g}$ e A_{2g} , poi il ciclo riparte dall'inizio con A_{1g} , $E_g - A_{1g}$, A_{1g} etc. Si osservi, infine, l'introduzione di una notazione compatta per le somme dirette di rappresentazioni irriducibili in luogo di quella formale presentata in tab.(5), che verrà ripresa anche nelle tabelle successive.

Applicando, invece, la formula ricorsiva (125) si ottengono i caratteri di simmetria degli autostati vibrazionali $(n_3 + 1)(n_3 + 2)/2$ -degeneri dell'oscillatore 3-dimensionale, denotati collettivamente dal numero quantico fononico n_3 (cfr. (114)),

$$\Gamma(\Phi_{n_3}) \equiv \Gamma[\Phi_{n_3, n_3, n_3}(Q_4, Q_5, Q_6), \Phi_{n_3, n_3, n_3-1}(Q_4, Q_5, Q_6), \dots, \Phi_{n_3, n_3, -n_3}(Q_4, Q_5, Q_6), \Phi_{n_3, n_3-2, n_3-2}(Q_4, Q_5, Q_6), \Phi_{n_3, n_3-2, n_3-3}(Q_4, Q_5, Q_6), \dots, \Phi_{n_3, n_3-2, -n_3+2}(Q_4, Q_5, Q_6), \dots, \Phi_{n_3, l_-, -l_-}(Q_4, Q_5, Q_6)]' \quad (243)$$

ove l_- è un intero che vale 0 (risp. 1) se n_3 è pari (risp. dispari) come indicato dalle regole di selezione in (114).

\mathcal{O}_h	\mathbb{I}	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	$\mathbb{1}^*$	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
$\Gamma(\Phi_0) = A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma(\Phi_1) = T_{2g}$	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
$\Gamma(\Phi_2) = A_{1g} + E_g + T_{2g}$	6	0	2	0	2	6	0	0	2	2
$\Gamma(\Phi_3) = A_{1g} + T_{1g} + 2T_{2g}$	10	1	2	0	-2	10	0	1	-2	2
$\Gamma(\Phi_4) = 2A_{1g} + 2E_g + T_{1g} + 2T_{2g}$	15	0	3	1	3	15	1	0	3	3
$\Gamma(\Phi_5) = 2A_{1g} + E_g + 2T_{1g} + 4T_{2g}$	21	0	3	-1	-3	21	-1	0	-3	3
$\Gamma(\Phi_6) = 3A_{1g} + A_{2g} + 3E_g + 2T_{1g} + 4T_{2g}$	28	1	4	0	4	28	0	1	4	4
$\Gamma(\Phi_7) = 2A_{1g} + 2E_g + 4T_{1g} + 6T_{2g}$	36	0	4	0	-4	36	0	0	-4	4
$\Gamma(\Phi_8) = 4A_{1g} + A_{2g} + 5E_g + 4T_{1g} + 6T_{2g}$	45	0	5	1	5	45	1	0	5	5
$\Gamma(\Phi_9) = 3A_{1g} + A_{2g} + 3E_g + 6T_{1g} + 9T_{2g}$	55	1	5	-1	-5	55	-1	1	-5	5
$\Gamma(\Phi_{10}) = 5A_{1g} + 2A_{2g} + 7E_g + 6T_{1g} + 9T_{2g}$	66	0	6	0	6	66	0	0	6	6
$\Gamma(\Phi_{11}) = 4A_{1g} + A_{2g} + 5E_g + 9T_{1g} + 12T_{2g}$	78	0	6	0	-6	78	0	0	-6	6
$\Gamma(\Phi_{12}) = 7A_{1g} + 3A_{2g} + 9E_g + 9T_{1g} + 12T_{2g}$	91	1	7	1	7	91	1	1	7	7

Tabella 23: Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali del modo triplamente degenere (con $n_3 \leq 12$).

Ora che abbiamo descritto le proprietà di trasformazione degli autostati degli oscillatori armonici 2- e 3-dimensionali sotto il gruppo di permutazione-inversione, ricerchiamo le rappresentazioni riducibili di \mathcal{O}_h sotto cui trasforma lo stato vibrazionale completo $\Psi_{V_{n_1, n_2, n_3}}(Q_1, Q_2, Q_3, Q_4, Q_5, Q_6)$, prodotto delle funzioni d'onda dei 3 oscillatori, che dipenderanno esclusivamente dal prodotto diretto delle rappresentazioni $\Gamma(\Phi_{n_3})$ e $\Gamma(\Phi_{n_3})$,

$$\Gamma(\Psi_{V_{n_1, n_2, n_3}}) = \Gamma(\Phi_{n_1}) \otimes \Gamma(\Phi_{n_2}) \otimes \Gamma(\Phi_{n_3}) = \Gamma(\Phi_{n_2}) \otimes \Gamma(\Phi_{n_3}) : \quad (244)$$

la decomposizione di tali rappresentazioni nelle irrepes di \mathcal{O}_h è riportata nella tabella seguente.

$n_3 \rightarrow$ $n_2 \downarrow$	0	1	2	3	4
0	A_{1g}	T_{2g}	$A_{1g} + E_g + T_{2g}$	$A_{1g} + T_{1g} + 2T_{2g}$	$2A_{1g} + 2E_g + T_{1g} + 2T_{2g}$
1	E_g	$T_{1g} + T_{2g}$	$A_{1g} + A_{2g} + 2E_g + T_{1g} + T_{2g}$	$E_g + 3T_{1g} + 3T_{2g}$	$2A_{1g} + 2A_{2g} + 4E_g + 3T_{1g} + 3T_{2g}$
2	$A_{1g} + E_g$	$T_{1g} + 2T_{2g}$	$2A_{1g} + A_{2g} + 3E_g + T_{1g} + 2T_{2g}$	$A_{1g} + E_g + 4T_{1g} + 5T_{2g}$	$4A_{1g} + 2A_{2g} + 6E_g + 4T_{1g} + 5T_{2g}$
3	$A_{1g} + A_{2g} + E_g$	$2T_{1g} + 2T_{2g}$	$2A_{1g} + 2A_{2g} + 4E_g + 2T_{1g} + 2T_{2g}$	$A_{1g} + E_g + 4T_{1g} + 5T_{2g}$	$4A_{1g} + 4A_{2g} + 8E_g + 6T_{1g} + 6T_{2g}$
4	$A_{1g} + 2E_g$	$2T_{1g} + 3T_{2g}$	$3A_{1g} + 2A_{2g} + 5E_g + 2T_{1g} + 3T_{2g}$	$A_{1g} + 2E_g + 7T_{1g} + 8T_{2g}$	$6A_{1g} + 4A_{2g} + 10E_g + 7T_{1g} + 8T_{2g}$
5	$A_{1g} + A_{2g} + 2E_g$	$3T_{1g} + 3T_{2g}$	$3A_{1g} + 3A_{2g} + 6E_g + 3T_{1g} + 3T_{2g}$	$A_{1g} + A_{2g} + 2E_g + 9T_{1g} + 9T_{2g}$	$6A_{1g} + 6A_{2g} + 12E_g + 9T_{1g} + 9T_{2g}$

Tabella 24: Tavola dei caratteri delle rappresentazioni delle autofunzioni vibrazionali con $n_2 + n_3 \leq 9$ e n_1 qualsiasi.

Ricavati i caratteri di simmetria degli autostati vibrazionali del sistema (cfr. tab. (26)) sotto le operazioni di $\mathcal{O}_h(N)$, possiamo passare all'analisi delle proprietà di simmetria delle autofunzioni rotazionali sotto gli elementi di R_{rot}^* , in corrispondenza biunivoca con le operazioni di $\mathcal{O}_h(N)$ (cfr. (241)). Essendo il gruppo \mathcal{T}_d dotato di quattro assi di rotazione C_3 , il comportamento del ^{16}O come rotore rigido sarà assimilabile a quello di una trottola sferica (cfr. § 1.3.6) e, dunque, i suoi autostati saranno ancora della forma $|J, K, M\rangle$, ma la loro degenerazione sarà $(2J+1)^2$, a differenza del caso del carbonio. Applicando, a titolo di esempio, l'operazione (1234) di $\mathcal{O}_h(N)$ sugli stati rotazionali (135) con $J = 1$ e M fissato, si ottiene

$$(1234)D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) = (1234)(-1)^{M-1}D_{1M}^1(-\phi, \theta, -\chi), \quad (245)$$

ove è stata sfruttata la proprietà $D_{MK}^{J*}(\phi, \theta, \chi) = (-1)^{M-K} D_{KM}^J(-\phi, \theta, -\chi)$ degli elementi di matrice di Wigner. Ricordando che all'operazione (1234) corrisponde la sequenza di rotazioni-inversioni $\mathcal{P}R_z^{\pi/2}R_y^{\pi-\alpha}R_z^{7\pi/6}$ (cfr. (241)), si ricava

$$\begin{aligned} (1234)D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) &= \mathcal{P}R_z^{\pi/2}R_y^{\pi-\alpha}R_z^{7\pi/6}\langle 11|\hat{R}(-\phi, \theta, -\chi)|1M\rangle(-1)^{M-1} \\ &= \langle 11|\mathcal{P}R_z^{\pi/2}R_y^{\pi-\alpha}R_z^{7\pi/6}\hat{R}(-\phi, \theta, -\chi)|1M\rangle(-1)^{M-1} \\ &= (-1)\langle 11|R_z^{\pi/2}R_y^{\pi-\alpha}R_z^{7\pi/6}\hat{R}(-\phi, \theta, -\chi)|1M\rangle(-1)^{M-1}, \end{aligned} \quad (246)$$

ove nell'ultimo passaggio è stato applicato l'operatore di inversione all'autostato $|11\rangle$, che ha parità negativa, mentre è stato indicato con $\hat{R}(\phi, \theta, \phi)$ l'operatore di rotazione negli angoli di Eulero, $e^{-i\phi/\hbar\hat{\zeta}}e^{-i\theta/\hbar\hat{\eta}}e^{-i\chi/\hbar\hat{\zeta}}$ [56]. Inserendo la relazione di completezza delle autofunzioni di momento angolare all'interno dell'elemento di matrice a terzo membro della (247),

$$(1234)D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) = \sum_{J=0}^{+\infty} \sum_{L=-J}^J (-1)\langle 11|R_z^{\pi/2}R_y^{\pi-\alpha}R_z^{7\pi/6}|JL\rangle\langle JL|\hat{R}(-\phi, \theta, -\chi)|1M\rangle(-1)^{M-1}, \quad (247)$$

e, dall'espressione analitica degli elementi di matrice di Wigner [56], si ottiene l'azione esplicita di $(1234) \in \mathcal{O}_h(N)$ sullo stato $\langle \phi, \theta, \chi|11M\rangle$,

$$\begin{aligned} (1234)D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) &= (-1)D_{11}^1(\pi/2, \pi - \alpha, 7\pi/6)D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) + \\ &+ (-1)D_{1-1}^1(\pi/2, \pi - \alpha, 7\pi/6)D_{M-1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) + D_{10}^1(\pi/2, \pi - \alpha, 7\pi/6)D_{M0}^{1*}(\phi, \theta, \chi) = \\ &= -\frac{2}{3}e^{i5\pi/3}D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) - \frac{1}{3}e^{i2\pi/3}D_{M-1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) - \frac{2}{3}e^{i\pi/2}D_{M0}^{1*}(\phi, \theta, \chi). \end{aligned} \quad (248)$$

Ripetendo il medesimo procedimento (cfr. (245)-(249)) sulle altre due autofunzioni con $J = 1$ e proiezione $\hbar M$ di \hat{J} sull'asse \hat{e}_ζ nella terna a riposo rispetto al laboratorio, si ha

$$(1234)D_{M-1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) = -\frac{1}{3}e^{i2\pi/3}D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) - \frac{2}{3}e^{i5\pi/3}D_{M-1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) - \frac{2}{3}e^{i\pi/2}D_{M0}^{1*}(\phi, \theta, \chi) \quad (249)$$

e

$$(1234)D_{M0}^{1*}(\phi, \theta, \chi) = -\frac{2}{3}e^{i7\pi/6}D_{M1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) + \frac{2}{3}e^{-i7\pi/6}D_{M-1}^{1*}(\phi, \theta, \chi) - \frac{1}{3}D_{M0}^{1*}(\phi, \theta, \chi), \quad (250)$$

e, dunque, il carattere della matrice di trasformazione 3×3 associata all'operazione (1234) è pari a -1 , traccia che è condivisa da tutti gli altri rappresentativi delle operazioni nella classe di coniugazione di (1234), $6S_4$. Iterando lo stesso procedimento per le altre nove operazioni rappresentative del gruppo e per i $2J + 1$ stati con momento angolare $J \leq 10$ e proiezione M , si ottengono tutti i caratteri delle rappresentazioni riducibili relative agli stati rotazionali $|J, K, M\rangle$ con $J \leq 6$, riportati nella tabella sottostante.

J	O_h	I	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	1^*	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
0^+	A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
1^-	T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
2^+	$E_g + T_{2g}$	5	-1	1	-1	1	5	-1	-1	1	1
3^-	$A_{2u} + T_{1u} + T_{2u}$	7	1	-1	-1	-1	-7	1	-1	1	1
4^+	$A_{1g} + E_g + T_{1g} + T_{2g}$	9	0	1	1	1	9	1	0	1	1
5^-	$E_u + 2T_{1u} + T_{2u}$	11	-1	-1	1	-1	-11	-1	1	1	1
6^+	$A_{1g} + A_{2g} + E_g + T_{1g} + 2T_{2g}$	13	1	1	-1	1	13	-1	1	1	1
7^-	$A_{2u} + E_u + 2T_{1u} + 2T_{2u}$	15	0	-1	-1	-1	-15	1	0	1	1
8^+	$A_{1g} + 2E_g + 2T_{1g} + 2T_{2g}$	17	-1	1	1	1	17	1	-1	1	1
9^-	$A_{1u} + A_{2u} + E_u + 3T_{1u} + 2T_{2u}$	19	1	-1	1	-1	-19	-1	-1	1	1
10^+	$A_{1g} + A_{2g} + 2E_g + 2T_{1g} + 3T_{2g}$	21	0	1	-1	1	21	-1	0	1	1

Tabella 25: Caratteri degli stati rotazionali con $J \leq 10$ sotto le operazioni di \mathcal{O}_h . Come si osserva, il carattere gerade o ungerade delle irreps delle autofunzioni rotazionali rispecchia la parità delle armoniche sferiche $(-1)^J$, ovvero è quando J è pari (risp. dispari), la corrispondente rappresentazione irriducibile di \mathcal{O}_h è gerade (risp. ungerade).

Come si evince dalle equazioni (249)-(250) e dalla tabella (26), il carattere di simmetria delle autofunzioni rotazionali sotto le operazioni di $\mathcal{O}_h(N)$ che coinvolgono un cambiamento di chiralità della terna solidale riflette la parità delle autofunzioni di J e K (o J e M) da cui sono costituite, ovvero quella delle armoniche sferiche. Poiché l'hamiltoniana rotazionale è invariante sotto l'intero gruppo $O(3) \approx SO(3) \times C_i$, le sue autofunzioni includeranno non solo gli elementi di matrice di Wigner (138) costruiti sui vettori di base $|J, K \rangle$ (o $|J, M \rangle$) di parità naturale² $(-1)^J$ o *tensoriali*, ma anche quelli formati da vettori di base di parità innaturale $(-1)^{J+1}$ o *pseudotensoriali*. In particolare, le rappresentazioni di $O(3)$ associate a vettori di base $|J, K \rangle$ (o $|J, M \rangle$) dispari (risp. pari) sotto inversione saranno fedeli (risp. infedeli), dal momento che le rotazioni proprie risultano distinte (risp. indistinte) da quelle improprie [17] [53]. L'inclusione di stati siffatti fra le autofunzioni rotazionali del sistema risulta significativa per il nucleo in analisi, dal momento che la decomposizione delle rappresentazioni riducibili di \mathcal{O}_h sotto cui le matrici di Wigner *non naturali* trasformano presenta irreps di tipo *gerade* (risp. *ungerade*) per J dispari (risp. pari), a differenza degli stati in tabella (26). D'altro canto, nel caso del ^{12}C , la costruzione degli autostati rotazionali a partire da tensori o da pseudotensori sferici risulta non comporta alcun cambiamento nelle loro proprietà di trasformazione sotto le operazioni del gruppo di simmetria discreto dell'hamiltoniana, essendo tutte le operazioni di $\mathcal{D}_{3h}(N)$ riconducibili a rotazioni proprie della terna solidale al nucleo.

J	\mathcal{O}_h	\mathbb{I}	$8C_3$	$6C_2$	$6C_4$	$3C_2$	$\mathbb{1}^*$	$6S_4$	$8S_6$	$3\sigma_h$	$6\sigma_d$
0^-	A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
1^+	T_{1g}	3	0	-1	1	1	3	1	0	-1	-1
2^-	$E_u + T_{2u}$	5	-1	1	-1	1	-5	1	1	-1	-1
3^+	$A_{2g} + T_{1g} + T_{2g}$	7	1	-1	-1	-1	7	-1	1	-1	-1
4^-	$A_{1u} + E_u + T_{1u} + T_{2u}$	9	0	1	1	1	-9	-1	0	-1	-1
5^+	$E_g + 2T_{1g} + T_{2g}$	11	-1	-1	1	-1	11	1	-1	-1	-1
6^-	$A_{1u} + A_{2u} + E_g + T_{1u} + 2T_{2u}$	13	1	1	-1	1	-13	1	-1	-1	-1
7^+	$A_{2g} + E_g + 2T_{1g} + 2T_{2g}$	15	0	-1	-1	-1	15	-1	0	-1	-1
8^-	$A_{1u} + 2E_u + 2T_{1u} + 2T_{2u}$	17	-1	1	1	1	-17	-1	1	-1	-1
9^+	$A_{1g} + A_{2g} + E_g + 3T_{1g} + 2T_{2g}$	19	1	-1	1	-1	19	1	1	-1	-1
10^-	$A_{1u} + A_{2u} + 2E_u + 2T_{1u} + 3T_{2u}$	21	0	1	-1	1	-21	1	0	-1	-1

Tabella 26: Caratteri degli stati rotazionali con $J \leq 10$ sotto le operazioni di \mathcal{O}_h . Come si osserva, il carattere gerade o ungerade delle irreps delle autofunzioni rotazionali *non naturali* rispecchia la parità dei tensori pseudosferici $(-1)^{J+1}$, ovvero è dispari quando J è pari (risp. dispari), la corrispondente irreps di \mathcal{O}_h è gerade (risp. ungerade).

Ora che le le proprietà degli stati rotazionali e vibrazionali del sistema sono state eviscerate, è possibile selezionare gli autostati rotovibrazionali del sistema, seguendo il procedimento illustrato nel caso del ^{12}C , ovvero ricercando le molteplicità delle rappresentazioni di \mathcal{O}_h rispettose della natura bosonica delle particelle α nella decomposizione della rappresentazione degli stati rotovibrazionali del sistema in irreps di \mathcal{O}_h . Dalla tavola dei caratteri (A.1.4) in Appendice, si evince che tali rappresentazioni corrispondono alle A_{1g} o A_{2u} di $\mathcal{O}_h(N)$ (o alla A_1 di \mathcal{T}_d), completamente simmetriche per scambio di due particelle α qualsiasi e, rispettivamente, pari e dispari per inversione delle coordinate dei quattro nuclei di ^4He .

² Tale termine è spesso usato in ambito nucleare per designare gli autostati di momento angolare con la stessa legge di parità delle armoniche sferiche, $(-1)^J$, mentre, in caso contrario, gli stati si dicono *innaturali*.

$n_1 = 0, 1, 2, 3, \dots; (n_2, n_3) =$		(0,0)	(0,1)	(1,0)	(2,0)	(0,2)	(1,1)
J	$\mathcal{O}_h(N)$	A_{1g}	T_{2g}	E_g	$A_{1g} + E_g$	$A_{1g} + E_g + T_{2g}$	$T_{1g} + T_{2g}$
0^+	A_{1g}	1	0	0	1	1	0
0^-	A_{1u}	0	0	0	0	0	0
1^+	T_{1g}	0	0	0	0	0	1
1^-	T_{1u}	0	1	0	0	1	1
2^+	$E_g + T_{2g}$	0	1	1	1	2	1
2^-	$E_u + T_{2u}$	0	0	1	1	1	1
3^+	$A_{2g} + T_{1g} + T_{2g}$	0	1	0	0	1	2
3^-	$A_{2u} + T_{1u} + T_{2u}$	1	1	0	1	2	2
4^+	$A_{1g} + E_g + T_{1g} + T_{2g}$	1	1	1	2	3	2
4^-	$A_{1u} + E_u + T_{1u} + T_{2u}$	0	1	1	1	2	2
5^+	$E_g + 2T_{1g} + T_{2g}$	0	1	1	1	2	3
5^-	$E_u + 2T_{1u} + T_{2u}$	0	2	1	1	3	3
6^+	$A_{1g} + A_{2g} + E_g + T_{1g} + 2T_{2g}$	1	2	1	2	4	3
6^-	$A_{1u} + A_{2u} + E_u + T_{1u} + 2T_{2u}$	1	1	1	2	3	3
7^+	$A_{2g} + E_g + 2T_{1g} + 2T_{2g}$	0	2	1	1	3	4
7^-	$A_{2u} + E_u + 2T_{1u} + 2T_{2u}$	1	2	1	2	4	4
8^+	$A_{1g} + 2E_g + 2T_{1g} + 2T_{2g}$	1	2	2	3	3	4
8^-	$A_{1u} + 2E_u + 2T_{1u} + 2T_{2u}$	0	2	2	2	4	4
9^+	$A_{1g} + A_{2g} + E_g + 3T_{1g} + 2T_{2g}$	1	2	1	2	4	5
9^-	$A_{1u} + A_{2u} + E_u + 3T_{1u} + 2T_{2u}$	1	3	1	2	5	5
10^+	$A_{1g} + A_{2g} + 2E_g + 2T_{1g} + 3T_{2g}$	1	3	2	3	6	5
10^-	$A_{1u} + A_{2u} + 2E_u + 2T_{1u} + 3T_{2u}$	1	2	2	3	5	5

Tabella 27: Regole di selezione degli stati. E' presentato il numero di stati rotovibrazionali permessi n_α per l'isotopo ^{16}O in esame, determinato dai caratteri di simmetria delle funzioni d'onda ψ_R (fino a $J = 6$) e ψ_V con $n_2 + n_3 \leq 2$. Si noti che la molteplicità di questi stati cresce con il numero di fononi di vibrazione $n_3 + n_2$ degli oscillatori armonici 2- e 3-dimensionali.

Come nel caso precedente, gli stati rotovibrazionali previsti dal nostro modello α -cluster molecolare presentati in tabella (27) risultano in accordo con quelli predetti dall'*Algebraic Cluster Model* $U(10)$ [6]: il contenuto di momento angolare e parità degli stati della banda rotazionale A_{1g} a zero fononi è $J^P = 0^+, 3^-, 4^+, 6^\pm, \dots$, mentre per la banda a un fonone di tipo E_g la sequenza risulta $J^P = 2^\pm, 4^\pm, 5^\pm, 6^\pm, \dots$, che per la banda a un fonone di tipo T_{1g} diviene $J^P = 1^-, 2^+, 3^\pm, 4^{\pm-}, 5^{\pm+}, 6^{\pm+}$.

Concludiamo questa sezione estendendo le considerazioni appena fatte ai sistemi di fermioni identici. In tal caso, la scelta delle rappresentazioni irriducibili 1-dimensionali di $\mathcal{O}_h(N)$ sotto cui gli autostati devono trasformare deve ricadere sulle rappresentazioni irriducibili con carattere -1 sotto permutazioni dispari (i 2-cicli e i 4-cicli) e $+1$ sotto permutazioni pari (l'identità, i 3-cicli e i 2+2-cicli): ne segue (cfr. tabella (A.1.4)) che le funzioni d'onda ammissibili trasformano sotto A_{2g} e A_{1u} , rispettivamente pari e dispari per inversione delle coordinate.

4.4 SCHEMA DEI LIVELLI ENERGETICI

4.4.1 L'approssimazione di rotore rigido

Terminata la selezione degli autostati con la corretta proprietà di trasformazione sotto le operazioni del gruppo di permutazione-inversione \mathcal{O}_h del nucleo, ricostruiamo in forma esplicita lo spettro di bassa energia dell'ossigeno, calcolando numericamente gli autovalori di $\hat{H}_R V$ (cfr. (238)) dopo aver determinato i parametri liberi del sistema a partire da alcune righe α -cluster sperimentalmente osservate. Ripartiamo, come in precedenza, i livelli energetici rotovibrazionali ammessi in bande rotazionali caratterizzate dai tre numeri quantici fononici (n_1, n_2, n_3) e dalle irreps $\Gamma(\Phi_{n_2}) \otimes \Gamma(\Phi_{n_3})$ di \mathcal{O}_h sotto cui

le componenti vibrazionali degli autostati ivi contenuti trasformano. Analogamente al caso del ^{12}C , gli autovalori energetici³ del sistema in analisi,

$$E_{RV}(J, n_1, n_2, n_3) = \frac{\hbar^2 J(J+1)}{2I^e} + \hbar\omega_1 \left(n_1 + \frac{1}{2} \right) + \hbar\omega_2 (n_2 + 1) + \hbar\omega_3 \left(n_3 + \frac{3}{2} \right), \quad (251)$$

sono univocamente determinati da quattro parametri che, in questo caso comprendono le tre frequenze di oscillazione ω_1 , ω_2 e ω_3 e la distanza delle particelle α dal loro comune centro di massa, l , da cui il momento d'inerzia I^e dipende. Orientando, infatti, la terna intrinseca secondo i tre assi principali d'inerzia (cfr. fig. 15) del sistema si ottengono, infatti, le espressioni delle componenti diagonali del tensore d'inerzia nell'approssimazione di rotore rigido di particelle puntiformi di massa m ,

$$I^e \equiv \mathbf{I}_{xx}^e = \mathbf{I}_{yy}^e = \mathbf{I}_{zz}^e = ml^2, \quad (252)$$

espressione che evidenzia la natura sferica del rotore in analisi. Partendo dalla riga α cluster di $10,356 \pm 0,003$ MeV, attribuita in letteratura allo stato 4^+ della banda fondamentale e avvalendosi del valore CODATA per la massa m della particella α , si ottengono un momento d'inerzia di $4,1861 \pm 0,0012 \cdot 10^{-43}$ MeV s^2 e un parametro di distanza l pari a $3,17606 \pm 0,00046$ fm che, in base a quanto asserito sull'estensione spaziale delle particelle α (cfr. § 3.4.2), costituisce una sovrastima della distanza fra le quattro particelle α all'equilibrio e il loro centro di massa. A partire dalla stima di I^e appena presentata, si ottengono quelle delle autoenergie rispetto allo stato di vuoto delle righe 3^- a $6,129893 \pm 0,00004$ MeV e 6^+ a $21,052 \pm 0,006$ MeV della stessa banda, che risultano sorprendentemente vicini a quelli osservativi (cfr. tab. 28): pur nel contesto della minimale approssimazione di rotore rigido, le autoenergie dei livelli della banda rotazionale fondamentale sono riprodotte con apprezzabile fedeltà, indice di una ben sviluppata struttura α -cluster. Sull'onda di questa verosimiglianza, siamo portati a suggerire l'identificazione della riga 7^- osservata a $28,2$ MeV [52] con quella predetta dal nostro modello per la banda fondamentale.

Per quanto concerne la banda eccitata A_{1g} (cfr. fig. 18), la riga 0^+ a $6,0494 \pm 0,0010$ MeV è stata scelta per la determinazione della frequenza ω_1 di vibrazione del modo non degenerare, che si attesta a $0,91906 \pm 0,00015 \cdot 10^{22}$ Hz, risultando sensibilmente inferiore a quella del modo di vibrazione isotropo A'_1 del ^{12}C (cfr. tab. 9). Come si evince dalla tabella 28, le energie degli stati 3^- a $11,600 \pm 0,020$ MeV, 4^+ a $14,620 \pm 0,020$ MeV e 6^+ a $23,879 \pm 0,006$ MeV sono riprodotte meno fedelmente rispetto a quelle della banda fondamentale, avvalorando l'ipotesi, già avanzata per il nucleo di carbonio, di un allontanamento isotropo delle particelle α dal loro comune centro di massa, che si riflette in un incremento del momento d'inerzia I^e e in una riduzione della spaziatura fra i livelli della stessa banda. Ciononostante, la discrepanza fra i dati osservativi e quelli predetti dal modello di rotore rigido, più contenuta rispetto a quella della banda eccitata A'_1 del ^{12}C , ove l'accoppiamento rotovibrazionale produce distonie più marcate (cfr. 9).

È, tuttavia, nelle bande rotazionali a un fonone di tipo E_g e T_{1g} che fa la sua comparsa l'unica rilevante discrepanza con il modello in analisi, ovvero la rottura della degenerazione fra i livelli con lo stesso momento angolare e parità opposta: come si osserva nella tabella 28 la riga 2^+ a $6,9171 \pm 0,0006$ MeV si trova quasi 2 MeV al di sotto dello stato 2^- della stessa banda, mentre il livello 1^- a $7,11685 \pm 0,00014$ MeV della seconda banda si trova circa 0,6 MeV al di sotto della posizione della riga proibita con lo stesso momento angolare e opposta parità predetta dal modello di rotore rigido applicato agli stati 2^+ e 3^+ della stessa banda.

Questa separazione in energia fra stati di parità opposta fu predetta già nel 1937 da J.A. Wheeler [59], che la attribuì alla probabilità finita che una fra le particelle α vibranti attorno alle loro posizioni di equilibrio ai vertici di un tetraedro attraversasse la faccia ad essa opposta, invertendo la distribuzione piramidale. Nell'ipotesi che questo fenomeno si verificasse nella stessa misura in tutte le bande rotazionali, egli introdusse nell'espressione degli autovalori (251) un termine di splitting fenomenologico

³ Come in § 3.4, useremo in questa sezione e in quella seguente il termine 'autoenergia' o 'energia' in associazione ad uno stato del sistema (n_1, n_2, n_3, J) per indicare la differenza fra l'autovalore di \hat{H}_{RV} ad esso corrispondente (251) e quello dello stato di vuoto, $E_{RV}(0, 0, 0, 0)$.

$\pm\Delta\epsilon$ con $\Delta\epsilon > 0$, associando il segno negativo (risp. positivo) agli stati rotazionali simmetrici (risp. antisimmetrici) per inversione delle coordinate delle particelle, che trasformano sotto le operazioni di \mathcal{O}_h attraverso irreps di carattere *gerade* (risp. *ungerade*).

(n_1, n_2, n_3)	J^π	E^{th} [MeV]	E_{RV}^{th} [MeV]	E^{exp} [MeV] [52]
(0, 0, 0)	0 ⁺	0	0	0
	3 ⁻	6,2136 ± 0,0018	5,02 ± 0,51	6,129893 ± 0,00004
	4 ⁺	10,356 ± 0,003	8,37 ± 0,85	10,356 ± 0,003
	6 ⁺	21,7476 ± 0,0063	17,57 ± 1,79	21,052 ± 0,006
	7 ⁻	28,9968 ± 0,0084	23,43 ± 2,38	28,2
(1, 0, 0)	0 ⁺	6,0494 ± 0,0010	6,06 ± 0,61	6,0494 ± 0,0010
	3 ⁻	12,2630 ± 0,0021	11,08 ± 0,77	11,600 ± 0,020
	4 ⁺	16,4054 ± 0,0032	14,43 ± 1,01	14,620 ± 0,020
	6 ⁺	27,797 ± 0,0064	23,63 ± 1,84	23,879 ± 0,006
	7 ⁻	35,0462 ± 0,0108	29,49 ± 2,41	nd
(0, 1, 0)	2 ⁺	6,9171 ± 0,0006	6,71 ± 0,36	6,9171 ± 0,0006
	2 ⁻	6,9171 ± 0,0006	6,71 ± 0,36	8,8719 ± 0,0005
	4 ⁺	14,1663 ± 0,0032	12,57 ± 0,63	11,0967 ± 0,0016
	5 ⁺	19,3443 ± 0,0046	16,75 ± 1,01	nd
	5 ⁻	19,3443 ± 0,0046	16,75 ± 1,01	nd
	6 ⁺	25,5579 ± 0,0063	21,78 ± 1,50	nd
	6 ⁻	25,5579 ± 0,0063	21,78 ± 1,50	nd
(0, 0, 1)	1 ⁻	7,7733 ± 0,0011	8,14 ± 0,35	7,11685 ± 0,00014
	2 ⁺	9,8445 ± 0,0014	9,81 ± 0,31	9,8445 ± 0,0005
	3 ⁺	12,9513 ± 0,0021	12,32 ± 0,39	11,080 ± 0,003
	3 ⁻	12,9513 ± 0,0021	12,32 ± 0,39	nd
	4 ⁺	17,0937 ± 0,0032	15,67 ± 0,66	nd
	4 ⁻	17,0937 ± 0,0032	15,67 ± 0,66	nd
	5 ⁺	22,2717 ± 0,0046	19,85 ± 1,06	nd
	5 ⁻	22,2717 ± 0,0046	19,85 ± 1,06	nd
$\epsilon(0, 0, 0)$ [MeV]		-0,0837	1,1098	-
$\epsilon(1, 0, 0)$ [MeV]		-0,663	0,52	-
$\epsilon(0, 1, 0)$ [MeV]		1,9548	2,1619	-
$\epsilon(0, 0, 1)$ [MeV]		-0,6565	-1,0232	-
l [fm]		3,17606 ± 0,00046	3,53 ± 0,18	-
ω_1 [10^{22} Hz]		0,91906 ± 0,00015	0,921 ± 0,093	-
ω_2 [10^{22} Hz]		0,57889 ± 0,00016	0,638 ± 0,073	-
ω_3 [10^{22} Hz]		1,02364 ± 0,00016	1,109 ± 0,061	-
I^e [10^{-43} MeV s ²]		4,18608 ± 0,00121	5,18 ± 0,53	-

Tabella 28: Tavola delle energie delle bande rotazionali con $n_1 + n_2 + n_3 \leq 1$ nell'approccio di particelle puntiformi. Il valore estremamente piccolo degli errori sul momento d'inerzia I^e è diretta conseguenza della precisione con cui sono noti i valori sperimentali delle quattro righe impiegate per la stima dei parametri del modello, nonchè del contenuto errore sulla massa delle particelle α [1].

L'attuale interpretazione delle righe spettrali sperimentalmente osservate all'interno dei modelli α -cluster [6], contrariamente a quanto asserito originariamente da Wheeler [59], ci porta ad escludere che lo scarto fenomenologico fra le serie di stati con definita parità, $2\Delta\epsilon$, abbia un segno definito e che assuma un valore indipendente dai numeri quantici che caratterizzano le bande rotazionali previste dal nostro modello. I dati osservativi a nostra disposizione ci consentono, infatti, di prevedere che,

in assenza di anarmonicità negli oscillatori, l'ampiezza di questa separazione energetica sia funzione lineare crescente dei numeri fononici,

$$2\Delta\epsilon(n_1, n_2, n_3) = E_{RV}^{exp}(J^-, n_1, n_2, n_3) - E_{RV}^{exp}(J^+, n_1, n_2, n_3) = \epsilon_1 n_1 + \epsilon_2 n_2 + \epsilon_3 n_3 \quad \text{con } \epsilon_1 \approx 0 \quad (253)$$

predizione che, nella descrizione semiclassica di Wheeler, si traduce in un andamento crescente della probabilità di inversione del tetraedro con l'ampiezza delle oscillazioni dei nuclei di ${}^4\text{He}$ attorno alle loro posizioni di equilibrio. La presenza di questa rottura di simmetria, tuttavia, non impedisce alle serie di stati di parità definite interne alle bande E_g e T_{1g} di preservare la loro struttura di bande rotazionali di un rotore sferico: ad eccezione delle due righe 2^+ a $6,9171 \pm 0,0006$ e $9,8445 \pm 0,0005$ MeV impiegate per la determinazione delle pulsazioni ω_2 e ω_3 , gli altri livelli sperimentalmente osservati delle stesse ovvero il 4^+ a $11,0967 \pm 0,0016$ MeV per la E_g e il 3^+ a $11,080 \pm 0,003$ MeV per la T_{1g} , sembrano trovarsi nelle posizioni predette dal modello di rotore rigido, fatta salva la contenuta discrepanza dovuta alla dilatazione isotropa del nucleo.

Accanto alla ricostruzione delle autonergie nella tabella 28, presentiamo graficamente lo spettro di rotore rigido del ${}^{16}\text{O}$ (cfr. fig. 18), impiegando in questa ricostruzione gli autovalori ottenuti da un'interpolazione non lineare sulle energie delle righe di parità positiva di tutte le bande, pur consapevoli che l'effetto della rottura di simmetria è sensibile solo nelle bande eccitate E_g e T_{1g} . Tale regressione ci ha fornito un'ulteriore stima del momento d'inerzia del rotore in analisi che risulta superiore a quello trovato a partire dallo stato 4^+ a $10,356 \pm 0,003$ MeV (cfr. tab. 28), a causa della presenza nel fit delle righe delle bande eccitate, ove, come vedremo nella prossima sezione, la distanza fra le particelle α è sensibilmente maggiore.

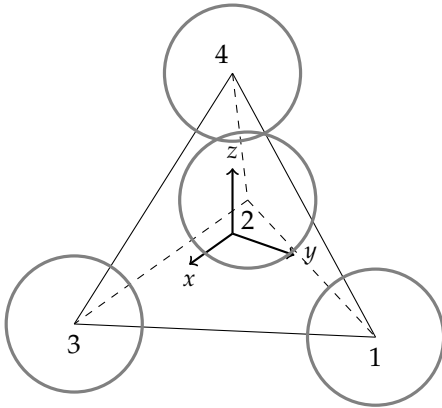


Figura 15: Orientazione scelta per la terna rotante nel calcolo dei momenti d'inerzia del ${}^{16}\text{O}$.

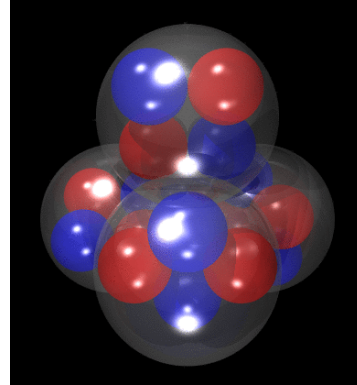


Figura 16: Rappresentazione grafica del nucleo ${}^{16}\text{O}$ nel modello α -cluster nell'approssimazione di sfere soffice. Si noti che i nucleoni sono stati raffigurati in rosso e in blu.

4.4.2 L'approssimazione di rotore soffice

Con l'intento di migliorare l'accordo delle autoenergie con i loro valori sperimentali, ricorriamo ad una descrizione che ci permette di considerare l'effetto della dilatazione della materia nucleare al crescere del numero di fononi di vibrazione (n_1, n_2, n_3) , consentendo ai momenti d'inerzia I^e di assumere un valore caratteristico in ciascuna delle bande rotazionali: si tratta dell'approccio di rotore soffice, già introdotto nel caso del ${}^{12}\text{C}$. Inoltre, il proposito di ottenere stime più verosimili della distanza l dei nuclei di ${}^4\text{He}$ dal loro comune centro di massa per ciascuna delle bande rotazionali ci spinge a superare l'approssimazione di particelle puntiformi, assimilando i quattro nuclei di ${}^4\text{He}$ a sfere soffice di dimensione pari al raggio di materia [3], R . In tale approccio, l'espressione del momento d'inerzia (252) cambia in

$$I^e \equiv \mathbf{I}_{xx}^e = \mathbf{I}_{yy}^e = \mathbf{I}_{zz}^e = ml^2 + \frac{8}{5}mR^2, \quad (254)$$

pur rimanendo quella di un rotore sferico. Differentemente dal caso del carbonio, procediamo eseguendo un' interpolazione sulle autoenergie sperimentali di parità positiva di ciascuna banda per la determinazione del corrispondente valore del momento d'inerzia I^e e del parametro di distanza $l_{(n_1, n_2, n_3)}$ nonchè della frequenza di vibrazione ω_i con $i=1,2,3$, affiancando a ciascuna stima il relativo errore statistico ottenuto per propagazione da quello presente sulle righe sperimentali (cfr. tab. 30) o, quando il numero di righe a disposizione lo consente, dalla regressione stessa (cfr. tab. 29). Questo procedimento renderà, inoltre, possibile l'interpretazione di ulteriori righe sperimentali con $T = 0$ come nuovi membri delle banda rotazionali, compito che, tuttavia, risulta complicato dalla presenza nello spettro di livelli *non-cluster* corrispondenti ad eccitazioni che coinvolgono la struttura interna delle particelle α , già a partire da energie dell'ordine di 16 MeV, ovvero della gap del *modello a shell* [6].

(n_1, n_2, n_3)	J	E^{th} [MeV]	E^{exp} [MeV] [52]
(0, 0, 0)	0^+	0	0
	3^-	$6, 12989 \pm 0, 09925$	$6, 129893 \pm 0, 00004$
	4^+	$10, 1823 \pm 0, 1654$	$10, 356 \pm 0, 003$
	6^+	$21, 3828 \pm 0, 3473$	$21, 052 \pm 0, 006$
	7^-	$28, 5310 \pm 0, 463182$	28, 2
	7^+	$28, 5104 \pm 0, 4632$	nd
	(1, 0, 0)	0^+	$6, 0521 \pm 0, 1029$
3^-		$11, 6000 \pm 0, 2050$	$11, 600 \pm 0, 020$
4^+		$14, 5827 \pm 0, 3128$	$14, 620 \pm 0, 020$
6^+		$23, 9663 \pm 0, 6288$	$23, 879 \pm 0, 006$
7^+		$29, 9378 \pm 0, 8336$	nd
7^-		$30, 3674 \pm 0, 8336$	nd
R_α [fm]		$1, 49 \pm 0, 03$	–
$l_{(0,0,0)}$ [fm]		$2, 5898 \pm 0, 0700$	–
$l_{(1,0,0)}$ [fm]		$2, 9485 \pm 0, 1459$	–
ω_1 [10^{22} Hz]		$0, 91919 \pm 0, 01563$	–
$2\epsilon(0, 0, 0)$ [MeV]		0, 0205	–
$2\epsilon(1, 0, 0)$ [MeV]		0, 4296	–
I^e [10^{-43} MeV s^2] (0, 0, 0)		$4, 2575 \pm 0, 0691$	–
I^e [10^{-43} MeV s^2] (1, 0, 0)		$5, 0818 \pm 0, 1759$	–

Tabella 29: Tavola riassuntiva dei livelli energetici inferiori a 30 MeV della banda rotazionale fondamentale e della banda eccitata A_{1g} nell'approccio di sfere soffici di raggio pari a quello di materia [3].

Come si evince nella tabella 29, il momento d'inerzia I^e è rimasto invariato rispetto a quello di rotore rigido, mentre il parametro di distanza si è assestato a $2, 59 \pm 0, 07$ fm⁴, collocandosi 2025% al di sopra di quello estratto da Bjiker e Iachello [6] dal primo minimo del fattore di forma elettromagnetico nell'ambito dell'*Algebraic Cluster Model*. Analogamente a quanto osservato nell'analisi di rotore rigido, essendo la riga 7^- a 28,2 MeV [52] ben riprodotta dal nostro modello, può essere suggerita come nuovo membro di questa banda, anche se misure ulteriori saranno necessarie per meglio specificare la sua posizione all'interno dello spettro del nucleo in analisi, nonchè il suo isospin T , ancora incognito. D'altro canto, dall'interpolazione sugli stati 0^+ , 4^+ e 6^+ della banda eccitata A_{1g} si ottiene un valore di l sensibilmente superiore a quello della banda fondamentale, pari a $2, 9485 \pm 0, 1459$ MeV, confrontabile con quello della banda eccitata A_1' del ^{12}C (cfr. 10).

Rimarchevole è, inoltre, osservare che lo stato fondamentale della banda, lo 0^+ a $6, 0494 \pm 0, 0010$ MeV si colloca in prossimità soglia di decadimento del nucleo in $^{12}\text{C} + \alpha$, pari a 7,16 MeV [35]: come

4 Considerando, invece, il raggio di carica presente nel catalogo di Angeli e Marinova [4] nella si ottiene una $l_{(0,0,0)}$ pari a $2, 40 \pm 0, 07$ fm.

suggerisce il diagramma di Ikeda [35], il nucleo in questa banda può presentare una struttura interna a due cluster $^{12}\text{C}+\alpha$ ben sviluppata.

Per quanto riguarda la banda eccitata E_g , dalla regressione si ottiene una distanza fra le posizioni di equilibrio delle particelle α e il loro centro di massa pari a $3,7341 \pm 0,0192$ fm, un valore vicino a quello della banda doppiamente degenere E' del ^{12}C (cfr. tab. 10).

(n_1, n_2, n_3)	J	E^{th} [MeV]	E^{exp} [MeV] [52]
(0, 1, 0)	2 ⁺	$6,9171 \pm 0,0011$	$6,9171 \pm 0,0006$
	2 ⁻	$8,8719 \pm 0,0013$	$8,8719 \pm 0,0005$
	4 ⁺	$11,0967 \pm 0,0027$	$11,0967 \pm 0,0016$
	5 ⁺	$14,0821 \pm 0,0038$	$14,399 \pm 0,002$
	5 ⁻	$16,0369 \pm 0,0038$	nd
	6 ⁺	$17,6646 \pm 0,0052$	$17,555 \pm 0,021$
	6 ⁻	$19,6194 \pm 0,0052$	nd
	7 ⁺	$21,8442 \pm 0,0069$	nd
	7 ⁻	$23,7990 \pm 0,0069$	nd
	8 ⁺	$26,6209 \pm 0,0089$	nd
8 ⁻	$28,5757 \pm 0,0089$	nd	
(0, 0, 1)	1 ⁻	$7,11685 \pm 0,0032$	$7,11685 \pm 0,00014$
	2 ⁺	$9,8445 \pm 0,0042$	$9,8445 \pm 0,0005$
	3 ⁻	$9,17602 \pm 0,0067$	nd
	4 ⁻	$10,8234 \pm 0,0104$	nd
	3 ⁺	$11,0800 \pm 0,0067$	$11,080 \pm 0,003$
	5 ⁻	$12,8825 \pm 0,0153$	nd
	4 ⁺	$12,7273 \pm 0,0104$	nd
	5 ⁺	$14,7865 \pm 0,0153$	nd
	6 ⁻	$15,3535 \pm 0,0212$	nd
	6 ⁺	$17,2575 \pm 0,0212$	nd
	7 ⁻	$18,2364 \pm 0,0282$	nd
	7 ⁺	$20,1404 \pm 0,0282$	nd
	8 ⁻	$21,5310 \pm 0,0361$	nd
	8 ⁺	$23,4350 \pm 0,0361$	nd
9 ⁻	$25,2375 \pm 0,0451$	nd	
9 ⁺	$27,1415 \pm 0,0451$	nd	
10 ⁻	$29,3559 \pm 0,0551$	nd	
R_α [fm]		$1,49 \pm 0,03$	–
$2\epsilon(0, 1, 0)$ [MeV]		1,9548	–
$2\epsilon(0, 0, 1)$ [MeV]		-1,9040	–
$l_{(0,1,0)}$ [fm]		$3,7341 \pm 0,0192$	–
$l_{(0,0,1)}$ [fm]		$4,6705 \pm 0,0325$	–
ω_2 [10^{22} Hz]		$0,77851 \pm 0,00017$	–
ω_3 [10^{22} Hz]		$1,30753 \pm 0,00048$	–
I^e [10^{-43} MeV s ²] (0, 1, 0)		$7,2604 \pm 0,0030$	–
I^e [10^{-43} MeV s ²] (0, 0, 1)		$10,5263 \pm 0,0259$	–

Tabella 30: Tavola riassuntiva dei livelli energetici inferiori a 30 MeV delle bande rotazionali E_g e T_{1g} nell'approccio di sfere soffice di raggio pari a quello di materia [3].

La notevole vicinanza dei valori sperimentali con quelli di rotore soffice, ci consente, inoltre, di suggerire l'assegnazione delle righe 5⁺ a $14,399 \pm 0,002$ MeV e 6⁺ a $17,555 \pm 0,021$ MeV alla banda in analisi, due livelli α -cluster che, in analogia con lo stato di Hoyle del ^{12}C , si situano in prossimità della soglia di decadimento del nucleo in quattro particelle α , pari a 14,44 MeV [35]. Seppure ancora privi

di classificazione all'interno di un modello α -cluster, questi livelli sono stati oggetto anche di recenti investigazioni, come quelle sulle reazioni di scambio $^{12}\text{C}(^6\text{Li}^2\text{H})^{16}\text{O}$ di Dias Rodrigues et al. [46], ove anche uno stato 5^- a $14,566 \pm 0,011$ MeV [46] [60] è stato isolato: tale riga, tuttavia, risulta di classificazione incerta, collocandosi in posizione intermedia fra gli stati 5^- delle bande E_g e T_{1g} previsti dal nostro modello di rotore soffice (cfr. tab. 30).

Infine, l'interpolazione sulle righe 2^+ e 3^+ della banda rotazionale a un fonone triplamente degenere T_{1g} porge un momento d'inerzia pari a $10,5263 \pm 0,0259 \cdot 10^{-43}$ MeV s^2 , cui corrisponde un parametro di distanza pari a $4,6705 \pm 0,0325$ fm che suggerisce una sensibile dilatazione della materia nucleare rispetto alla banda fondamentale. Pur mancando righe sperimentali entro 0,5 MeV da quelle ottenute dal modello di rotore soffice, è importante osservare come la crescita del momento d'inerzia porti alla comparsa di stati di dieci unità di momento angolare ad una energia inferiore a 30 MeV, regione in cui, tuttavia, il riconoscimento di righe α -cluster è complicato della possibilità di eccitazioni interne alle singole particelle α .

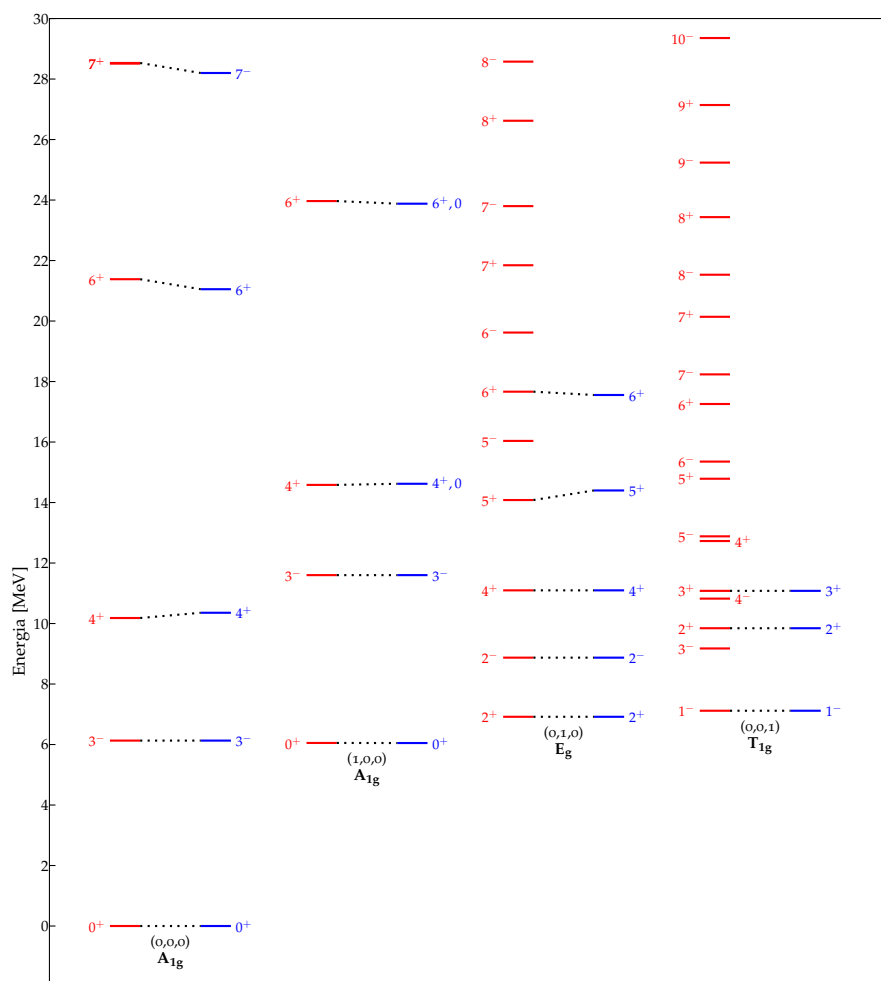


Figura 17: Schema dei livelli del ^{16}O con $n_1 + n_2 + n_3 \leq 1$ ed energia inferiore a 30 MeV, nell'approssimazione di sfere soffici. Le righe sperimentali (risp. teoriche) sono riportate in blu (risp. rosso), mentre per la nomenclatura delle bande rotazionali e degli stati valgono le stesse convenzioni presentate in fig. 18.

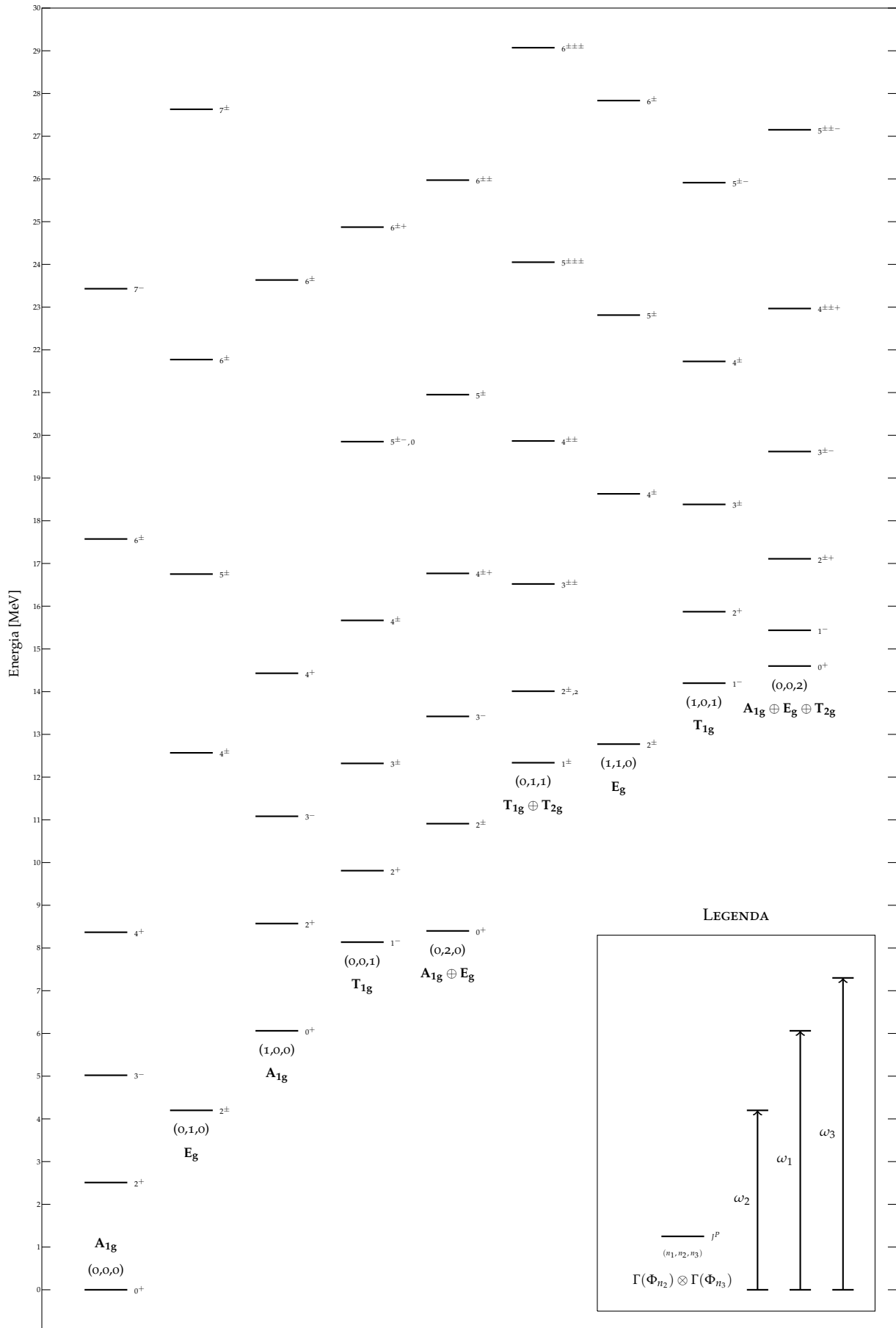


Figura 18: Schema dei livelli del ^{16}O con $n_1 + n_2 + n_3 \leq 2$ ed energia inferiore a 30 MeV, nell'approssimazione di rotore rigido di particelle puntiformi, con $\omega_1 = 3,07194 \cdot 10^{21}$ Hz, $\omega_2 = 2,12833 \cdot 10^{21}$ Hz, $\omega_3 = 3,69924 \cdot 10^{21}$ Hz e $l = 4.46921$ fm.

♣ RIEPILOGO

Argomento di questo capitolo è la descrizione del ^{16}O nella cornice teorica del modello α -cluster macroscopico introdotto in § 1, secondo il quale tale nucleo è raffigurato come un sistema di particelle α rotovibranti attorno alle loro posizioni di equilibrio ai vertici di un tetraedro.

Differentemente dal caso del ^{12}C , il gruppo puntuale di simmetria dei nuclei di ^4He all'equilibrio, \mathcal{T}_d , non è più isomorfo al gruppo di permutazione-inversione delle coordinate delle quattro particelle, \mathcal{O}_h , bensì al solo gruppo delle permutazioni di quattro elementi, \mathcal{S}_4 , fatto che, tuttavia, non impedisce di trovare una corrispondenza fra le rappresentazioni irriducibili del gruppo tetraedrico e quelle del gruppo ottaedrico. Come nel caso precedente, sono state studiate le proprietà di trasformazione sotto \mathcal{O}_h delle coordinate di spostamento cartesiane e poi delle coordinate normali di vibrazione. A quest'analisi è seguito lo studio delle proprietà di trasformazione degli stati rotazionali e vibrazionali del nucleo, propedeutico alla selezione degli autostati rotovibrazionali con la corretta simmetria di scambio (irreps A_{1g} e A_{1u} di \mathcal{O}_h). Al termine della trattazione, si è, invece, ricostruito lo spettro del nucleo, dapprima nell'approssimazione di rotore rigido e, in un secondo momento, in quella di rotore soffice già presentata nel caso del ^{12}C . Nonostante il modello di rotore rigido si sia rivelato inaspettatamente efficace nella riproduzione dei livelli della banda fondamentale e di quella eccitata a un fonone di vibrazione A_{1g} , un significativo *splitting* dei livelli di parità opposta e con lo stesso momento angolare J si verifica nelle bande eccitate, richiedendo l'aggiunta di un termine correttivo crescente con il numero di fononi di vibrazione E_g e T_{1g} nell'espressione degli autovalori dell'hamiltoniana, già predetto da J.A. Wheeler nella presentazione del modello adottato [59].

 CONCLUSIONE

5.1 EPILOGO

Nel corso di questa trattazione, è stato presentato, seppure in una forma rielaborata, il modello α -cluster macroscopico di tipo molecolare proposto originariamente da J.A. Wheeler nel 1937 [59], partendo dalla formulazione dei primi modelli nucleari macroscopici e microscopici, basati sulla ripartizione del nucleo in tutti i possibili raggruppamenti di nucleoni, la cui importanza sarà proporzionale al tempo di permanenza del sistema nella data configurazione.

L'intento è stato quello di ripercorrere tutti i passaggi fondamentali per la comprensione del modello e la sua applicazione al ^{12}C e al ^{16}O , riportando a suffragio dei risultati i passaggi algebrici più significativi, come si è fatto nella derivazione dell'hamiltoniana di un insieme di N particelle puntiformi fra loro connesse da molle ideali con la stessa costante elastica, sistema che può essere considerato l'analogo classico delle particelle α all'interno di un nucleo α -coniugato, e nella successiva introduzione delle $3N - 6$ coordinate normali di vibrazione ($Q_1, Q_2, \dots, Q_{3N-6}$) delle sei coordinate di rototraslazione (\vec{T}, \vec{R}) [10]. In seguito, il sistema di hamiltoniana \hat{H}_{RV} , è stato quantizzato secondo il metodo di W. Pauli e la sua forma è stata ulteriormente semplificata seguendo una procedura introdotta da J.K.G. Watson [57]. La successiva separazione approssimata dei moti rotazionali da quelli vibrazionali ha permesso, poi, di descrivere il nucleo attraverso $3N-6$ hamiltoniane di oscillatori armonici 1-dimensionali e una di rotore rigido di tipo sferico, simmetrico o triassiale.

Con un'attenzione particolare per le simmetrie discrete legate alla natura bosonica delle particelle α , sono stati introdotti il gruppo puntuale di permutazione-inversione dell'hamiltoniana, $\mathcal{G}(N)$ e il gruppo di simmetria dei nuclei di ^4He nelle posizioni di equilibrio ai vertici di una struttura ordinata, \mathcal{G} , due gruppi che, come dimostra il caso del ^{16}O , non sono necessariamente isomorfi. D'altra parte, per il ^{12}C , il gruppo di permutazione-inversione di \hat{H}_{RV} è in corrispondenza biunivoca con il gruppo diedrale \mathcal{D}_{3h} , che coincide con il gruppo di simmetria all'equilibrio di un arrangiamento triangolare di particelle.

Proprio facendo leva sulle proprietà di trasformazione degli autostati rotazionali e vibrazionali di questo nucleo sotto il gruppo \mathcal{D}_{3h} , sono state determinate le regole di selezione per gli stati rotovibrazionali del sistema, i quali, data la natura bosonica dei nuclei di ^4He , devono trasformare sotto rappresentazioni irriducibili 1-dimensionali completamente simmetriche per scambio di due particelle α . Inoltre, la sequenza degli stati rotovibrazionali così ottenuti è risultata, in accordo con quella predetta da altri modelli α -cluster, come quello algebrico $U(7)$ proposto da R. Bijker e F. Iachello [5]. In aggiunta, l'approssimazione di rotore soffice ha dimostrato come la presenza di termini di accoppiamento rotovibrazionale, il cui effetto è stato riprodotto lasciando variare il parametro di distanza con il numero di fononi vibrazionali, possa portare ad un miglioramento dell'accordo fra le autoenergie previste e quelle sperimentalmente rivelate. Proprio fra queste dieci righe osservative sono state calcolate le probabilità ridotte di transizione di quadrupolo e di ottupolo elettrico, dapprima nell'approccio di rotore rigido e poi in quella di rotore soffice, pur adoperando in entrambi i casi un operatore densità di carica a delta di Dirac. Il valori delle $B(E\lambda, \uparrow)$ ottenuti in queste approssimazioni, pur collocandosi nello stesso ordine di grandezza dei corrispettivi sperimentali, risultano sottostimati, per effetto dell'estensione spaziale delle particelle α che ricopre un ruolo di crescente importanza al diminuire della distanza fra le particelle stesse. L'accordo con i valori osservativi, infatti, migliora per le transizioni che coinvolgono

almeno uno stato a un fonone di vibrazione, come quella fra lo stato di Hoyle 0^+ e lo stato 2^+ della banda fondamentale: in questo caso la probabilità ridotta di transizione si è rivelata compatibile entro una deviazione standard con il dato sperimentale.

Tuttavia, molte fra le probabilità ridotte di transizione calcolate risultano orfane della loro controparte sperimentale, carenza parzialmente giustificata essendo una parte delle righe α -cluster disponibili frutto di recenti acquisizioni, come le 2^+ e 4^+ della banda di Hoyle A'_1 e la 5^- della banda fondamentale, rilevata recentemente presso il ciclotrone di Birmingham [42].

Per quanto riguarda, invece, il ^{16}O , il gruppo di permutazione-inversione dell'hamiltoniana è, invece, isomorfo al gruppo ottaedrico \mathcal{O}_h , mentre il gruppo puntuale delle quattro particelle α all'equilibrio è il tetraedrico $\mathcal{T}_d \subset \mathcal{O}_h$, un sottogruppo proprio del primo. Ciononostante, a partire dai caratteri delle operazioni comuni a \mathcal{O}_h e \mathcal{T}_d è stato possibile associare alle rappresentazioni irriducibili del gruppo tetraedrico due irreps del gruppo ottaedrico \mathcal{O}_h [15] collegando così le proprietà di trasformazione degli autostati rotazionali sotto \mathcal{O}_h a quelle sotto \mathcal{T}_d .

E' stato, inoltre, seguito lo stesso paradigma del ^{12}C per l'individuazione degli autostati rotovibrazionali del sistema che, in questo contesto, trasformano sotto le irreps bosoniche A_{1g} e A_{2u} del gruppo ottaedrico \mathcal{O}_h : anche in questo caso, i risultati ottenuti sono stati consistenti con quelli dell'*Algebraic Cluster Model* (ACM) [9] $U(10)$ di R.Bijker e F. Iachello che con quelli individuati da S.L. Kameny [38]. Infine, è stato ricostruito lo spettro rotovibrazionale di questo nucleo, avvalendosi dapprima dell'approssimazione di rotore rigido e poi di quella di rotore soffice. Dal confronto delle energie predette in tali approcci per le bande rotazionali eccitate E_g e T_{1g} e le corrispettive sperimentali, è emersa la rottura della degenerazione per gli stati con lo stesso momento angolare ed opposta parità all'interno di ciascuna banda rotazionale, fenomeno già predetto dallo stesso J.A. Wheeler [59]. Nel tentativo di riprodurre questo effetto, recentemente è stata suggerita [18], all'interno di un calcolo ab-initio dello spettro del ^{16}O , una configurazione di equilibrio quadrata per alcuni livelli energetici eccitati di bassa energia.

La flessibilità della cornice teorica del modello macroscopico affrontato così come quella del più recente ACM ci permette, in conclusione, di esplorare configurazioni di equilibrio nucleari diverse da quelle descritte e di provarne la compatibilità con i dati sperimentali, come quella a catena lineare nel caso del ^{12}C proposta da H. Morinaga [44] o quella quadrata per il ^{16}O cui corrisponde il gruppo di simmetria di equilibrio \mathcal{D}_{4h} o di studiare altri nuclei α -coniugati più pesanti come il ^{20}Ne o il ^{24}Mg .

Parte I

APPENDICI

A

APPENDICE

In questo capitolo sono riportate le tavole dei caratteri e le tavole moltiplicative dei principali gruppi puntuali $\mathcal{G}(N)$ di cui si fa riferimento nel corso della dissertazione. In ciascuna delle prime, è messa in evidenza la relazione che sussiste fra gli elementi del gruppo discreto e quelli del gruppo delle rotazioni proprie R_{rot} (o improprie, R_{rot}^*) e del gruppo di permutazione \mathcal{S}_n (o permutazione-inversione, $\mathcal{G}(N)$), ad esso isomorfi. Quando, però, il numero degli elementi di ciascuna classe di equivalenza è elevato, viene riportato per brevità solo l'elemento di R_{rot}^* corrispondente al primo elemento a partire dall'alto del gruppo di permutazione o permutazione-inversione.

Al termine di questo complemento, è presentata una formula generale per la determinazione della rappresentazione riducibile data dal prodotto simmetrico di un numero arbitrario di rappresentazioni irriducibili di un dato gruppo finito discreto, che si può usare in alternativa delle (101) e (125) presentate nel capitolo 2.

A.1 TAVOLE DEI CARATTERI

A.1.1 Il gruppo $C_{3v} \approx \mathcal{S}_3$

\mathcal{S}_3	(1)(2)(3)	(123) (132)	(12)(3) (23)(1) (13)(2)
R_{rot}	R_0	$R_z^{4\pi/3}$ $R_z^{2\pi/3}$	$R_{5\pi/6}^\pi$ $R_{\pi/2}^\pi$ $R_{\pi/6}^\pi$
C_{3v}	\mathbb{I}	$2C_3$	$3C_2$
A_1'	1	1	1
A_2'	1	1	-1
E'	2	-1	0

A.1.2 Il gruppo $D_{3h} \approx S_3 \otimes C_i$

$D_{3h}(N)$	(1)(2)(3)	(123) (132)	(12)(3) (23)(1) (13)(2)	(1)(2)(3)*	(123)* (132)*	(12)(3)* (23)(1)* (13)(2)*
R_{rot}	R_0	$R_z^{4\pi/3}$ $R_z^{2\pi/3}$	$R_{5\pi/6}^\pi$ $R_{\pi/2}^\pi$ $R_{\pi/6}^\pi$	R_z^π	$R_z^{\pi/3}$ $R_z^{5\pi/3}$	$R_{4\pi/3}^\pi$ R_0^π $R_{2\pi/3}^\pi$
D_{3h}	\mathbb{I}	$2C_3$	$3C_2$	σ_h	$2S_3$	$3\sigma_V$
A_1'	1	1	1	1	1	1
A_2'	1	1	-1	1	1	-1
E'	2	-1	0	2	-1	0
A_1''	1	1	1	-1	-1	-1
A_2''	1	1	-1	-1	-1	1
E''	2	-1	0	-2	1	0

A.1.3 Il gruppo $T_d \approx S_4$

S_4	(1)(2)(3)(4)	(123)(4) (134)(2) (124)(3) (234)(1) (243)(1) (142)(3) (143)(2) (132)(4)	(12)(34) (13)(24) (14)(23)	(1234) (1324) (1432) (1243) (1423) (1342)	(12)(3)(4) (13)(2)(4) (14)(2)(3) (23)(1)(4) (24)(1)(3) (34)(1)(2)
R_{rot}^*	R_0	$R_z^{4\pi/3}$	$R_z^{\pi/2} R_y^{\pi-\alpha} R_z^{7\pi/6}$	$\mathcal{P} R_z^{\pi/6} R_y^{2\pi-\alpha} R_z^{5\pi/6}$	$\mathcal{P} R_z^{2\pi/3}$
T_d	\mathbb{I}	$8C_3$	$3C_2$	$6S_4$	$6\sigma_d$
A_1	1	1	1	1	1
A_2	1	1	1	-1	-1
E	2	-1	2	0	0
T_1	3	0	-1	1	-1
T_2	3	0	-1	-1	-1

A.1.4 Il gruppo $\mathcal{O}_h \approx \mathcal{S}_4 \otimes C_i$

$O_h(N)$	(1)(2)(3)(4)	(123)(4)	(12)(3)(4)*	(1234)*	(i2)(34)	(1)(2)(3)(4)*	(1234)	(123)(4)*	(12)(34)*	(12)(3)(4)
		(134)(2)	(13)(2)(4)*	(1324)*	(13)(24)		(1324)	(134)(2)*	(23)(24)*	(13)(2)(4)
		(124)(3)	(14)(2)(3)*	(1432)*	(14)(23)		(1432)	(124)(3)*	(14)(23)*	(14)(2)(3)
		(234)(1)	(23)(1)(4)*	(1243)*			(1243)	(234)(1)*		(23)(1)(4)
		(243)(1)	(24)(1)(3)*	(1423)*			(1423)	(243)(1)*		(24)(1)(3)
		(142)(3)	(34)(1)(2)*	(1342)*			(1342)	(142)(3)*		(34)(1)(2)
		(143)(2)						(143)(2)*		
		(132)(4)						(132)(4)*		
R_{rot}^*	R_0	$R_z^{4\pi/3}$	$R_z^{4\pi/3} R_0^*$	$R_z^{\pi/6} R_y^{2\pi-\alpha} R_z^{5\pi/6}$	$R_z^{\pi/2} R_y^{\pi-\alpha} R_z^{7\pi/6}$	\mathcal{O}	$\mathcal{O} R_z^{\pi/6} R_y^{2\pi-\alpha} R_z^{5\pi/6}$	$\mathcal{O} R_z^{4\pi/3}$	$\mathcal{O} R_z^{\pi/2} R_y^{\pi-\alpha} R_z^{7\pi/6}$	$\mathcal{O} R_z^{4\pi/3} R_0^*$
O_h	1	8C ₃	6C ₂	6C ₄	3C ₂ (= C ₄ ²)	1*	6S ₄	8S ₆	3σ _h	6σ _d
A_{1g}	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
A_{2g}	1	1	-1	-1	1	1	-1	1	1	-1
E_g	2	-1	0	0	2	2	0	-1	2	0
T_{1g}	3	0	-1	1	-1	3	1	0	-1	-1
T_{2g}	3	0	1	-1	-1	3	-1	0	-1	1
A_{1u}	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
A_{2u}	1	1	-1	-1	1	-1	1	-1	-1	1
E_u	2	-1	0	0	2	-2	0	1	-2	0
T_{1u}	3	0	-1	1	-1	-3	-1	0	1	1
T_{2u}	3	0	1	-1	-1	-3	1	0	1	-1

A.2 TAVOLE MULTIPLICATIVE

A.2.1 Il gruppo \mathcal{C}_{3v}

×	A ₁	A ₂	E
A ₁	A ₁	A ₂	E
A ₂	A ₂	A ₁	E
E	E	E	A ₁ + A ₂ + E

A.2.2 Il gruppo \mathcal{D}_{3h}

×	A' ₁	A' ₂	E'	A'' ₁	A'' ₂	E''
A' ₁	A' ₁	A' ₂	E'	A'' ₁	A'' ₂	E''
A' ₂	A' ₂	A' ₁	E'	A'' ₂	A'' ₁	E''
E'	E'	E'	A' ₁ + A' ₂ + E'	E''	E''	A'' ₁ + A'' ₂ + E''
A'' ₁	A'' ₁	A'' ₂	E''	A' ₁	A' ₂	E'
A'' ₂	A'' ₂	A'' ₁	E''	A' ₂	A' ₁	E'
E''	E''	E''	A'' ₁ + A'' ₂ + E''	E'	E'	A' ₁ + A' ₂ + E'

A.2.3 Il gruppo \mathcal{T}_d

\times	A_1	A_2	E	T_1	T_2
A_1	A_1	A_2	E	T_1	T_2
A_2	A_2	A_1	E	T_2	T_1
E	E	E	$A_1 + A_2 + E$	$T_1 + T_2$	$T_1 + T_2$
T_1	T_1	T_2	$T_1 + T_2$	$A_1 + E + T_1$	$A_2 + E + T_1 + T_2$
T_2	T_2	T_1	$T_2 + T_1$	$A_2 + E + T_2$	$A_1 + E_g + T_2 + T_1$

A.2.4 Il gruppo \mathcal{O}_h

\times	A_{1g}	A_{2g}	E_g	T_{1g}	T_{2g}	A_{1u}	A_{2u}	E_u	T_{1u}	T_{2u}
A_{1g}	A_{1g}	A_{2g}	E_g	T_{1g}	T_{2g}	A_{1u}	A_{2u}	E_u	T_{1u}	T_{2u}
A_{2g}	A_{2g}	A_{1g}	E_g	T_{2g}	T_{1g}	A_{2u}	A_{1u}	E_u	T_{2u}	T_{1u}
E_g	E_g	E_g	$A_{1g} + A_{2g} + E_g$	$T_{1g} + T_{2g}$	$T_{1g} + T_{2g}$	E_u	E_u	$A_{1u} + A_{2u} + E_u$	$T_{1u} + T_{2u}$	$T_{1u} + T_{2u}$
T_{1g}	T_{1g}	T_{2g}	$T_{1g} + T_{2g}$	$A_{1g} + E_g + T_{1g}$	$A_{2g} + E_g + T_{1g} + T_{2g}$	T_{1u}	T_{2u}	$T_{1u} + T_{2u}$	$A_{1u} + E_u + T_{1u} + T_{2u}$	$A_{2u} + E_u + T_{1u} + T_{2u}$
T_{2g}	T_{2g}	T_{1g}	$T_{2g} + T_{1g}$	$A_{2g} + E_g + T_{2g}$	$A_{1g} + E_g + T_{2g} + T_{1g}$	T_{2u}	T_{1u}	$T_{2u} + T_{1u}$	$A_{2u} + E_u + T_{2u} + T_{1u}$	$A_{1u} + E_u + T_{2u} + T_{1u}$
A_{1u}	A_{1u}	A_{2u}	E_u	T_{1u}	T_{2u}	A_{1g}	A_{2g}	E_g	T_{1g}	T_{2g}
A_{2u}	A_{2u}	A_{1u}	E_u	T_{2u}	T_{1u}	A_{2g}	A_{1g}	E_g	T_{2g}	T_{1g}
E_u	E_u	E_u	$A_{1u} + A_{2u} + E_u$	$T_{1u} + T_{2u}$	$T_{1u} + T_{2u}$	E_g	E_g	$A_{1g} + A_{2g} + E_g$	$T_{1g} + T_{2g}$	$T_{1g} + T_{2g}$
T_{1u}	T_{1u}	T_{2u}	$T_{1u} + T_{2u}$	$A_{1u} + E_u + T_{1u}$	$A_{2u} + E_u + T_{1u} + T_{2u}$	T_{1g}	T_{2g}	$T_{1g} + T_{2g}$	$A_{1g} + E_g + T_{1g} + T_{2g}$	$A_{2g} + E_g + T_{1g} + T_{2g}$
T_{2u}	T_{2u}	T_{1u}	$T_{2u} + T_{1u}$	$A_{2u} + E_u + T_{2u}$	$A_{1u} + E_u + T_{2u} + T_{1u}$	T_{2g}	T_{1g}	$T_{2g} + T_{1g}$	$A_{2g} + E_g + T_{2g} + T_{1g}$	$A_{1g} + E_g + T_{2g} + T_{1g}$

A.3 PRODOTTO SIMMETRICO DI RAPPRESENTAZIONI IRRIDUCIBILI

Dalla teoria dei gruppi discreti, il carattere della rappresentazione riducibile generata dalla potenza v -esima simmetrica di una rappresentazione irriducibile n -dimensionale Γ_n è dato dalla formula

$$\chi^{(\Gamma_n)^v}[R] = \frac{1}{v!} \sum_{\substack{j_1, j_2, j_3, \dots, j_v=0 \\ j_1 + j_2 + \dots + j_v = v \\ \text{distinti}}}^v C_{j_1, j_2, \dots, j_v} \chi^{\Gamma_n}[R^{j_1}] \chi^{\Gamma_n}[R^{j_2}] \dots \chi^{\Gamma_n}[R^{j_v}] \quad \forall R \in \mathcal{G}(N), \quad (255)$$

ove la sommatoria s'intende eseguita su tutti i modi distinti per scrivere v come somma di numeri naturali, mentre C_{j_1, j_2, \dots, j_v} è il numero di j_1 -cicli, j_2 -cicli, ..., j_v -cicli contenuti nella data classe di coniugazione del gruppo simmetrico S_v e si sottointende per convenzione che $\chi^{\Gamma_n}[R^0] = 1$ con R elemento del gruppo puntuale di cui Γ_n è irreps.

BIBLIOGRAFIA

- [1] CODATA Recommended Values. 2010. URL <http://physics.nist.gov/cuu/Constants/index.html>.
- [2] F. Ajzenberg-Selove. Energy levels of light nuclei $A = 11-12$. *Nuclear Physics A*, A506:1–158, January 1990. doi: 10.1016/0375-9474(90)90271-M.
- [3] G.D. Alkhozov, A.V. Dobrovolsky, P. Egelhof, H. Geissel, H. Irnich, A.V. Khanzadeev, G.A. Korolev, A.A. Lobodenko, G. Münzenberg, M. Mutterer, S.R. Neumaier, W. Schwab, D.M. Seliverstov, T. Suzuki, and A.A. Vorobyov. Nuclear matter distributions in the 6he and 8he nuclei from differential cross sections for small-angle proton elastic scattering at intermediate energy. *Nuclear Physics A*, 712(3–4):269 – 299, December 2002. ISSN 0375-9474. doi: 10.1016/S0375-9474(02)01273-3. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0375947402012733>.
- [4] I. Angeli and K.P. Marinova. Table of experimental nuclear ground state charge radii: An update. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 99(1):69 – 95, January 2013. ISSN 0092-640X. doi: 10.1016/j.adt.2011.12.006. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X12000265>.
- [5] R. Bijker and F. Iachello. Cluster states in nuclei as representations of a $U(v + 1)$ group. *Phys. Rev. C*, 61:067305, May 2000. doi: 10.1103/PhysRevC.61.067305. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.61.067305>.
- [6] R. Bijker and F. Iachello. Evidence for tetrahedral symmetry in ^{16}O . *Physical Review Letters*, 112:152501, April 2014. doi: 10.1103/PhysRevLett.112.152501. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.152501>.
- [7] R. Bijker, F. Iachello, and A. Leviatan. Algebraic models of hadron structure. i. nonstrange baryons. *Annals of Physics*, 236(1):69 – 116, 1994. ISSN 0003-4916. doi: 10.1006/aphy.1994.1108. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0003491684711080>.
- [8] R. Bijker, A. E. L. Dieperink, and A. Leviatan. Spectrum-generating algebra for x_3 molecules. *Physical Review A*, 52:2786–2790, October 1995. doi: 10.1103/PhysRevA.52.2786. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevA.52.2786>.
- [9] Roelof Bijker. Discrete and continuous symmetries in α -cluster nuclei. *Journal of Physics: Conference Series*, 512:1–7, 2014. doi: 10.1088/1742-6596/512/1/012007.
- [10] E. Bright Wilson jr., J.C. Decius, and P.C. Cross. *The Theory of Infrared and Raman Vibrational Spectra*. Dover Publications, 1955 (1980). ISBN -10: 048663941X, ISBN-13: 978-0486639413.
- [11] D.M. Brink. The alpha particle model of light nuclei. *Proceedings of the International School E. Fermi - Varenna*, 36:247–277, 1966. doi: 10.1143/PTPS.62.11.
- [12] D.M. Brink and E. Boeker. Effective interactions for hartree-fock calculations. *Nuclear Physics A*, 91:1 – 26, 1967. ISSN 0375-9474. doi: 10.1016/0375-9474(67)90446-0. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947467904460>.
- [13] Philip R. Bunker and Per Jensen. *Molecular Symmetry and Spectroscopy*. NRC Research Press, Ottawa, 1998. ISBN -10 066019628X, ISBN -13 9780660196282.
- [14] Philip R. Bunker and Per Jensen. *Fundamentals of Molecular Symmetry*. Institute of Physics, Bristol, 2005. ISBN -10 0750309415, ISBN -13 000-0750309415.

- [15] Robert L. Carter. *Molecular Symmetry and Group Theory*. Wiley and Sons, December 1997. ISBN 978-0-471-14955-2.
- [16] Claude Cohen-Tannoudji, Bernard Diu, and Franck Lalœ. *Quantum Mechanics*. John Wiley and Sons, June 1977. ISBN 9780471164333. URL <http://eu.wiley.com/WileyCDA/WileyTitle/productCd-047116433X.html>.
- [17] G. Costa and G. Fogli. *Symmetries and Group Theory in Particle Physics*. Lecture Notes in Physics, Springer, 2012. ISBN -13 978-3642154829.
- [18] Evgeny Epelbaum, Hermann Krebs, Timo A. Lähde, Dean Lee, Ulf-G. Meißner, and Gautam Rupak. *Ab Initio* calculation of the spectrum and structure of ^{16}O . *Physical Review Letters*, 112:102501, March 2014. doi: 10.1103/PhysRevLett.112.102501. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.112.102501>.
- [19] M. Freer. The structure of ^{12}C . *Pramana - Journal of Physics*, 83:643–650, November 2014. doi: 10.1007/s12043-014-0859-6.
- [20] M. Freer, I. Boztosun, C. A. Bremner, S. P. G. Chappell, R. L. Cowin, G. K. Dillon, B. R. Fulton, B. J. Greenhalgh, T. Munoz-Britton, M. P. Nicoli, W. D. M. Rae, S. M. Singer, N. Sparks, D. L. Watson, and D. C. Weissler. Reexamination of the excited states of ^{12}C . *Phys. Rev. C*, 76:034320, September 2007. doi: 10.1103/PhysRevC.76.034320. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.76.034320>.
- [21] M. Freer, H. Fujita, Z. Buthelezi, J. Carter, R. W. Fearick, S. V. Förtsch, R. Neveling, S. M. Perez, P. Papka, F. D. Smit, J. A. Swartz, and I. Usman. 2^+ excitation of the ^{12}C hoyle state. *Phys. Rev. C*, 80:041303, October 2009. doi: 10.1103/PhysRevC.80.041303. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.80.041303>.
- [22] M. Freer, S. Almaraz-Calderon, A. Aprahamian, N. I. Ashwood, M. Barr, B. Bucher, P. Copp, M. Couder, N. Curtis, X. Fang, F. Jung, S. Leshner, W. Lu, J. D. Malcolm, A. Roberts, W. P. Tan, C. Wheldon, and V. A. Ziman. Evidence for a new ^{12}C state at 13.3 MeV. *Phys. Rev. C*, 83:034314, March 2011. doi: 10.1103/PhysRevC.83.034314. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.83.034314>.
- [23] M. Freer, M. Itoh, T. Kawabata, H. Fujita, H. Akimune, Z. Buthelezi, J. Carter, R. W. Fearick, S. V. Förtsch, M. Fujiwara, U. Garg, N. Hashimoto, K. Kawase, S. Kishi, T. Murakami, K. Nakanishi, Y. Nakatsugawa, B. K. Nayak, R. Neveling, S. Okumura, S. M. Perez, P. Papka, H. Sakaguchi, Y. Sasamoto, F. D. Smit, J. A. Swartz, H. Takeda, S. Terashima, M. Uchida, I. Usman, Y. Yasuda, M. Yosoi, and J. Zenihiro. Consistent analysis of the 2^+ excitation of the ^{12}C hoyle state populated in proton and α -particle inelastic scattering. *Physical Review C*, 86:034320, September 2012. doi: 10.1103/PhysRevC.86.034320. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.86.034320>.
- [24] Y. Funaki, A. Tohsaki, H. Horiuchi, P. Schuck, and G. Röpke. Resonance states in ^{12}C and α -particle condensation. *The European Physical Journal A - Hadrons and Nuclei*, 24:321–342, 2005. ISSN 1434-6001. doi: 10.1140/epja/i2004-10238-x. URL <http://link.springer.com/article/10.1140/2Fepja%2Fi2004-10238-x#>.
- [25] Moshe Gai. Triangular \mathcal{D}_{3h} symmetry in the rotation-vibration spectrum of ^{12}C . *Journal of Physics: Conference Series*, 580:012043, 2015. doi: 10.1088/1742-6596/580/1/012043. URL <http://iopscience.iop.org/1742-6596/580/1/012043>.
- [26] Achim Gelessus, Walter Thiel, and Wolfgang Weber. Multipoles and symmetry. *Journal of Chemical Education*, 72:505–508, June 1995. ISSN 0021-9584. doi: 10.1021/ed072p505. URL <http://pubs.acs.org/doi/pdf/10.1021/ed072p505>.

- [27] A. E. Glassgold and A. Galonsky. Alpha-particle model of C^{12} . *Physical Review*, 103:701–703, August 1956. doi: 10.1103/PhysRev.103.701. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.103.701>.
- [28] Walter Greiner and Joachim A. Maruhn. *Nuclear Models*. Springer-Verlag, Berlin Heidelberg, 1996. ISBN 354059180X.
- [29] L. R. Hafstad and E. Teller. The alpha-particle model of the nucleus. *Phys. Rev.*, 54:681–692, November 1938. doi: 10.1103/PhysRev.54.681. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.54.681>.
- [30] David Lawrence Hill and John Archibald Wheeler. Nuclear constitution and the interpretation of fission phenomena. *Physical Review*, 89:1102–1145, March 1953. doi: 10.1103/PhysRev.89.1102. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.89.1102>.
- [31] H. Horiuchi. Three-alpha model of ^{12}C , orthogonality condition model as an approximation of resonating group treatment. *Progress of Theoretical Physics*, 51:1266–1268, 1974. doi: 10.1143/PTP.51.1266. URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/51/4/1266.refs?sid=6d1b0fb1-528b-402b-a074-66b29dfef1af>.
- [32] Hisashi Horiuchi. Generator coordinate treatment of composite particle reaction and molecule-like structures. *Progress of Theoretical Physics*, 43:375–389, 1970. doi: 10.1143/PTP.43.375. URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/43/2/375.full.pdf+html>.
- [33] Martin Houde. *Molecular Symmetry and Spectroscopy*. 2008. URL http://www.astro.uwo.ca/~houde/courses/astromy_9701physics_9524.html.
- [34] F. Iachello and R.D. Levine. *Algebraic Theory of Molecules*. Oxford University Press, January 1995. ISBN -10 0195080912, ISBN -13 978-0195080919.
- [35] K. Ikeda, N. Takigawa, and H. Horiuchi. The systematic structure-change into the molecule-like structures in the self-conjugate $4n$ nuclei. *Supplement of the Progress of Theoretical Physics*, Extra Number:464–475, 1968. doi: 10.1143/PTPS.E68.464. URL <http://ptps.oxfordjournals.org/content/E68/464.full.pdf+html>.
- [36] K. Ikeda, H. Horiuchi, and S. Saito. Chapter i - introduction to comprehensive nuclear structure study based on cluster correlations and molecular viewpoint. *Supplement of the Progress of Theoretical Physics*, 68:1–28, 1980. doi: 10.1093/ptpsupp.68.i. URL <http://ptps.oxfordjournals.org/content/68/1.full.pdf>.
- [37] K. W. Jones, C. Glashauser, R. de Swiniarski, S. Nanda, T. A. Carey, W. Cornelius, J. M. Moss, J. B. McClelland, J. R. Comfort, J.-L. Escudie, M. Gazzaly, N. Hintz, G. Igo, M. Haji-Saeid, and C. A. Whitten. Energy dependence of deformation parameters in the ^{12}C reaction. *Physical Review C*, 33:17–21, January 1986. doi: 10.1103/PhysRevC.33.17. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.33.17>.
- [38] S. L. Kameny. α -particle model of O^{16} . *Physical Review*, 103:358–364, July 1956. doi: 10.1103/PhysRev.103.358. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.103.358>.
- [39] O. S. Kirsebom, M. Alcorta, M. J. G. Borge, M. Cubero, C. A. Diget, R. Dominguez-Reyes, L. M. Fraile, B. R. Fulton, H. O. U. Fynbo, S. Hyldegaard, B. Jonson, M. Madurga, A. Muñoz Martin, T. Nilsson, G. Nyman, A. Perea, K. Riisager, and O. Tengblad. Breakup of ^{12}C resonances into three α particles. *Phys. Rev. C*, 81:064313, June 2010. doi: 10.1103/PhysRevC.81.064313. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.81.064313>.
- [40] Tz. Kokalova. To condense, or not to condense, that is the question. *Jorunal of Physics: Conference Series*, 569:012010. doi: 10.1088/1742-6596/569/1/012010. URL <http://iopscience.iop.org/1742-6596/569/1/012010>.

- [41] Tzany Kokalova. Who plays in the hoyle band? *European Physics Journal Web Conf.*, 66:03046, 2014. doi: 10.1051/epjconf/20146603046. URL <http://dx.doi.org/10.1051/epjconf/20146603046>.
- [42] D. J. Marín-Lámbarri, R. Bijker, M. Freer, M. Gai, Tz. Kokalova, D. J. Parker, and C. Wheldon. Evidence for triangular D_{3h} symmetry in ^{12}C . *Phys. Rev. Lett.*, 113:012502–1, June 2014. doi: 10.1103/PhysRevLett.113.012502. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevLett.113.012502>.
- [43] T. Matsuse and M. Kamimura. A study of α -widths of ^{20}Ne based on ^{16}O and α -cluster model. *Progress of Theoretical Physics*, 49:1765–1767, 1973. doi: 10.1143/PTP.49.1765. URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/49/5/1765>.
- [44] H. Morinaga. Interpretation of some of the excited states of $4n$ self-conjugate nuclei. *Physical Review*, 101:254–258, January 1956. doi: 10.1103/PhysRev.101.254. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.101.254>.
- [45] S. Raman, C.W. Nestor, and P. Tikkanen. Transition probability from the ground to the first-excited 2^+ state of even-even nuclides. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 78:1–128, 2001. ISSN 0092-640X. doi: 10.1006/adnd.2001.0858. URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/S0092640X01908587>.
- [46] Rodrigues, Márcia Regina Dias, Borello-Lewin, Thereza, Miyake, Hideaki, Cappuzzello, Francesco, Cavallaro, Manuela, Duarte, José Luciano Miranda, Rodrigues, Cleber Lima, Souza, Marco Antonio de, Horodyski-Matsushigue, Brighitta, Cunsolo, Angelo, Foti, Antonio, Ukita, Gilberto Mitsuo, Faria, Pedro Neto de, Agodi, Clementina, De Napoli, Marzio, Nicolosi, Dario, Bondi, Dario, Carbone, Diana, and Tropea, Stefania. Alpha cluster structure in ^{16}O . *European Physical Journal - Web of Conferences*, 66:02093, 2014. doi: 10.1051/epjconf/20146602093. URL <http://dx.doi.org/10.1051/epjconf/20146602093>.
- [47] S. Saito. Interaction between clusters and pauli principle. *Progress of Theoretical Physics*, 41:705–722, 1969. doi: 10.1143/PTP.41.705. URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/51/4/1266.refs?sid=6d1b0fb1-528b-402b-a074-66b29fdfe1af>.
- [48] Sakae Saito. Chapter ii - theory of resonating group method and generator coordinate method, and orthogonality condition model. *Supplement of the Progress of Theoretical Physics*, 62:11–89, 1977. doi: 10.1143/PTPS.62.11. URL <http://ptps.oxfordjournals.org/content/62/11.full.pdf+html>.
- [49] F. D. Smit, F. Nemulodi, Z. Buthelezi, J. Carter, R. W. Fearick, S. V. Förtsch, M. Freer, H. Fujita, M. Jingo, C. O. Kureba, J. Mabilia, J. Mira, R. Neveling, P. Papka, G. F. Steyn, J. A. Swartz, I. T. Usman, and J. J. van Zyl. No evidence of an 11.16 mev 2^+ state in ^{12}C . *Phys. Rev. C*, 86:037301, September 2012. doi: 10.1103/PhysRevC.86.037301. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.86.037301>.
- [50] R.H. Spear. Reduced electric-octupole transition probabilities for even-even nuclides throughout the periodic table. *Atomic Data and Nuclear Data Tables*, 42(1):55 – 104, 1989. ISSN 0092-640X. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0092-640X\(89\)90032-6](http://dx.doi.org/10.1016/0092-640X(89)90032-6). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0092640X89900326>.
- [51] Y. Suzuki and K. Ikeda. Structure of $t = 0$ states in ^{16}O . *Progress of Theoretical Physics*, 51:1621–1623, 1974. doi: 10.1143/PTP.51.1621. URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/51/5/1621>.
- [52] D.R. Tilley, H.R. Weller, and C.M. Cheves. Energy levels of light nuclei $a = 16$ –17. *Nuclear Physics A*, 564(1):1 – 183, 1993. ISSN 0375-9474. doi: [http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474\(93\)90073-7](http://dx.doi.org/10.1016/0375-9474(93)90073-7). URL <http://www.sciencedirect.com/science/article/pii/0375947493900737>.
- [53] Wu-Ki Tung. *Group Theory in Physics*. World Scientific Publishing, 1985. ISBN -13 978-9971966577.

-
- [54] E. Uegaki, S. Okabe, Y. Abe, and H. Tanaka. Structure of the excited states in ^{12}C . i. *Progress of Theoretical Physics*, 57:1262–1276, 1977. doi: 10.1143/PTP.57.1262. URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/57/4/1262.abstract>.
- [55] E. Uegaki, Y. Abe, S. Okabe, and H. Tanaka. Structure of the excited states in ^{12}C . ii. *Progress of Theoretical Physics*, 62:1621–1640, 1979. doi: 10.1143/PTP.62.1621. URL <http://ptp.oxfordjournals.org/content/62/6/1621.abstract>.
- [56] J. Van de Wiele. Rotations et moments angulaires en mecanique quantique. *Annales de Physique*, 26:1–169, 2001. doi: HALId:in2p3-00019832. URL <http://hal.in2p3.fr/in2p3-00019832>.
- [57] James K.G. Watson. Simplification of molecular vibration-rotation hamiltonian. *Molecular Physics*, 15:479–490, September 1968. doi: 10.1080/00268976800101381. URL <http://www.tandfonline.com/doi/abs/10.1080/00268976800101381>.
- [58] John A. Wheeler. On the mathematical description of light nuclei by the method of resonating group structure. *Physical Review*, 52:1107–1122, Dec 1937. doi: 10.1103/PhysRev.52.1107. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.1107>.
- [59] John Archibald Wheeler. Molecular viewpoints in nuclear structure. *Physical Review*, 52:1083–1106, December 1937. doi: 10.1103/PhysRev.52.1083. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRev.52.1083>.
- [60] C. Wheldon, N. I. Ashwood, M. Barr, N. Curtis, M. Freer, Tz. Kokalova, J. D. Malcolm, S. J. Spencer, V. A. Ziman, Th. Faestermann, R. Krücken, H.-F. Wirth, R. Hertenberg, R. Lutter, and A. Bergmaier. High-resolution measurement of absolute α -decay widths in ^{16}O . *Physical Review C*, 83:064324, June 2011. doi: 10.1103/PhysRevC.83.064324. URL <http://link.aps.org/doi/10.1103/PhysRevC.83.064324>.