

P3. (2.75 pts.) Considere un átomo de hidrógeno sujeto a un campo eléctrico de modo que la perturbación al Hamiltoniano está dada por $V = \lambda xz$.

- Usando simetría de paridad diga qué elementos de matriz de la perturbación para el nivel $n = 2$: $\langle 2l'm' | V | 2lm \rangle$ son nulos.
- Considerando los tensores irreducibles $T_{\pm 1}^{(2)} = \mp xz - iy z$, evalúe todos los elementos de matriz de la perturbación para el nivel $n = 2$ si se conoce el elemento de matriz $a = \langle 210 | T_{-1}^{(2)} | 211 \rangle$. Use el Teorema de Wigner Eckart para relacionar los elementos de matriz no nulos.
- Calcule las correcciones a la energía del nivel $n = 2$ a primer orden de perturbaciones. *Ayuda.* Puede ser útil tomar en cuenta que los autovalores de la matriz A son 1, 0 y -1 .

$$A = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & -1 \\ 0 & -1 & 0 \end{pmatrix}$$

Solución

a) $H = H_0 + V$, con $V = \lambda xz$. Este potencial es par ante transformación de paridad: $\mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ pues $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r})$. Por consiguiente los elementos de matriz de estados con paridad diferente son nulos:

$$\langle 2l'm' | V | 2lm \rangle = 0 \quad l + l' \text{ impar}$$

En el problema como $n = 2$, tenemos $l = 0, 1$, y por consiguiente:

$$\langle 200 | V | 21m \rangle = 0 \quad m = 1, 0, -1$$

No se acoplan estados con diferente valor de momento angular l .

b) Dados $T_{\pm 1}^{(2)} = \mp xz - iy z$ es posible obtener $xz = (T_{-1}^{(2)} - T_1^{(2)})/2$, entonces:

$$V = \frac{\lambda}{2} (T_{-1}^{(2)} - T_1^{(2)})$$

Para el nivel $n = 2$, teniendo en cuenta la regla de selección de paridad del punto anterior y que el operador V es hermítico, necesitaremos calcular:

$$\langle 200 | V | 200 \rangle = \frac{\lambda}{2} \langle 200 | T_{-1}^{(2)} - T_1^{(2)} | 200 \rangle$$

$$\langle 21m' | V | 21m \rangle = \frac{\lambda}{2} \langle 21m' | T_{-1}^{(2)} - T_1^{(2)} | 21m \rangle$$

Usaremos el teorema de Wigner-Eckart:

$$\langle \alpha' j' m' | T_q^{(k)} | \alpha j m \rangle = \langle j' m' | k j, q m \rangle \langle \alpha' j' | | T^{(k)} | | \alpha j \rangle$$

El elemento de matriz es nulo si:

i) $m' \neq q + m$

o si no se cumple:

ii) $|k - j| \leq j' \leq k + j$

Por i) y ii):

$$\langle 200 | V | 200 \rangle = 0$$

Por i) $m - m' = \pm 1$. Sólo necesitaremos los elementos de matriz (dado que V es operador hermítico):

$$\langle 210 | V | 211 \rangle \quad \text{y} \quad \langle 210 | V | 21 - 1 \rangle$$

En término de los operadores tensoriales queda:

$$\begin{aligned} \langle 210 | V | 211 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \langle 210 | T_{-1}^{(2)} - T_1^{(2)} | 211 \rangle = \frac{\lambda}{2} \langle 210 | T_{-1}^{(2)} | 211 \rangle \\ \langle 210 | V | 21 - 1 \rangle &= \frac{\lambda}{2} \langle 210 | T_{-1}^{(2)} - T_1^{(2)} | 21 - 1 \rangle = -\frac{\lambda}{2} \langle 210 | T_1^{(2)} | 21 - 1 \rangle \end{aligned}$$

Aplicando el teorema de Wigner Eckart, relacionamos los elementos de matriz de los operadores tensoriales irreducibles:

$$\begin{aligned} \langle 210 | T_{-1}^{(2)} | 211 \rangle &= \langle 10 | 2, 1; -1, 1 \rangle \gamma = \sqrt{\frac{3}{10}} \gamma \\ \langle 210 | T_1^{(2)} | 21 - 1 \rangle &= \langle 10 | 2, 1; 1, -1 \rangle \gamma = \sqrt{\frac{3}{10}} \gamma \end{aligned}$$

Usando el dato del problema y la igualdad de ambos elementos de matriz:

$$\langle 210 | V | 211 \rangle = \frac{\lambda}{2} a \quad \text{y} \quad \langle 210 | V | 21 - 1 \rangle = -\frac{\lambda}{2} a$$

La matriz del potencial en el subespacio $n = 2$ resulta usando la base $\{|200\rangle, |211\rangle, |210\rangle, |21 - 1\rangle\}$:

$$V = \frac{\lambda}{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & a & 0 \\ 0 & a & 0 & -a \\ 0 & 0 & -a & 0 \end{pmatrix}$$

c) La matriz de V es diagonal por bloques, el primer bloque de 1×1 tiene autovalor nulo, y el segundo bloque es 3×3 : $V_1 = \frac{\lambda a}{\sqrt{2}} A$, con autovalores: $\{\frac{\lambda a}{\sqrt{2}}, 0, -\frac{\lambda a}{\sqrt{2}}\}$.

Por consiguiente las correcciones a primer orden de la energía son: $\{0, \pm \frac{\lambda a}{\sqrt{2}}\}$. La perturbación no rompe totalmente la degeneración pues 0 es un autovalor degenerado de la matriz V .