

CALCULO DE PERTURBACIONES Y HAMILTONIANOS EFECTIVOS
EN GRUPOS FINITOS DE SIMETRIA

Manuel Tovar

Centro Atómico Bariloche

Comisión Nacional de Energía Atómica

Instituto de Física "Dr. José A. Balseiro"

Universidad Nacional de Cuyo

En la formulación de Hamiltonianos efectivos que describan adecuadamente los efectos de una interacción real en sucesivos órdenes de perturbaciones, es de mucha utilidad la teoría de operadores tensoriales irreducibles. En este trabajo analiza su aplicación en grupos finitos de simetría, dando expresiones explícitas para los parámetros que multiplican a los operadores efectivos que describen las correcciones de primer y segundo orden a la matriz de energía de un sistema de niveles degenerado.

I. Introducción

La descripción de fenómenos que ocurren en sistemas que poseen propiedades de simetría conocidas se simplifica enormemente separando las características determinadas por la simetría del sistema, de la evaluación de parámetros que son específicos del problema considerado. La teoría de operadores tensoriales irreducibles (ref.1,2) permite una utilización adecuada de estas propiedades de simetría.

Consideremos un sistema cuyo Hamiltoniano H_0 es invariante frente a las operaciones de un grupo G , y sobre el cual actúa una perturbación V tal que el nuevo Hamiltoniano ($H = H_0 + V$) es invariante frente a las operaciones de un grupo G . Supongámonos conocidos los autovalores y las autofunciones del sistema sin perturbar. Si la interacción V es suficientemente 'débil' el cálculo de perturbaciones nos dará una aproximación razonable.

La corrección de primer orden a las energías de un multiplete α (correspondiente al autovalor E_α de H_0) se obtiene diagonalizando los elementos de matriz de V dentro del multiplete. En órdenes superiores son incluidas las interacciones con otros multipletes. Estas correcciones pueden ser descritas mediante interacciones efectivas que deben ser evaluadas entre las funciones base originales del multiplete.

Las sumatorias involucradas en el cálculo de perturbaciones pueden ser evaluadas exactamente utilizando las propiedades de conmutación de operadores tensoriales irreducibles definidos de acuerdo a la simetría G del sistema (ref. 3).

En el presente trabajo extendemos la aplicación del método de evaluación de perturbaciones desarrollado por B.G. Wybourne (ref.3) al caso de grupos finitos de simetría.

Consideremos un Hamiltoniano de perturbación de la forma:

$$\begin{aligned}
 H^1 &= B^{(\delta)} \sum_{\alpha\beta} \langle \delta \delta \beta \alpha | \Gamma_{\alpha} \rangle C_b^{(\nu)} V_{\alpha}^{(\delta)} \\
 &= B^{(\delta)} [\gamma]^{-1/2} \sum_{\gamma} (-1)^{\gamma-\beta} C_{-\gamma}^{(\delta)} V_{\gamma}^{(\delta)}
 \end{aligned} \tag{1}$$

donde $V_{\gamma}^{(\delta)}$ son operadores tensoriales que transforman como Γ_{δ} y $C_{-\gamma}^{(\delta)}$ los coeficientes correspondientes; $[\delta]$ es la dimensión de la representación irreducible Γ_{δ} .

La perturbación de primer orden a los niveles de energía de un nivel degenerador α (tal que sus autofunciones transforman según las componentes de la representación irreducible Γ_{α}) se obtiene diagonalizando la matriz formada por los elementos de matriz de H entre las autofunciones del nivel α .

$$\langle \alpha a | \delta R_{\alpha}^{(1)} | \alpha a' \rangle = \langle \alpha a | \delta R^1 | \alpha a' \rangle \tag{2}$$

pudiendo ser descripta esta corrección, en virtud del teorema de Wigner Eckart por un Hamiltoniano equivalente

$$\begin{aligned}
 \delta R_{\alpha}^{(1)} &= \sum_{\ell=1}^{n_{\gamma}} K_{\alpha}(\ell\delta) [\gamma]^{1/2} \sum_{\gamma} (-1)^{\gamma-\beta} C_{-\gamma}^{(\ell\delta)} U(\alpha, \alpha)_{\gamma}^{(\ell\delta)} \\
 K_{\alpha}(\ell\delta) &= (-1)^{2\alpha} [\alpha]^{1/2} [\gamma]^{-1/2} \langle \alpha || V^{(\ell\delta)} || \alpha \rangle_{\gamma} B^{(\delta)}
 \end{aligned} \tag{3}$$

donde n_{γ} es el número de veces que la representación δ está contenida en el producto directo ($\Gamma_{\alpha} \times \Gamma_{\alpha}$); los operadores $U^{(\ell\delta)}(\alpha, \beta)$ son operadores tensoriales irreducibles que transforman como Γ_{δ} y cuyos elementos de matriz reducidos son no nulos únicamente entre los niveles α y β , (ver apéndice) y $\langle \alpha || V || \alpha \rangle$ es el elemento de matriz reducido del operador $V^{(\delta)}$.

Las correcciones de 2° orden que deben ser incluidas cuando H tiene elementos de matriz no nulos con otro nivel β (que transforma como Γ_{β}) pueden ser expresadas

$$\langle \alpha a | \delta R_{\alpha}^{(2)} | \alpha a' \rangle = \sum_b \frac{\langle \alpha a | \delta R^1 | \beta b \rangle \langle \beta b | \delta R^1 | \alpha a' \rangle}{E_{\alpha} - E_{\beta}} \tag{4}$$

donde E_{α} y E_{β} son los autovalores de H_0 correspondientes a los niveles α y β respectivamente y que se suponen conocidos.

Esta sumatoria se reduce (ref. 3) al reemplazar H^1 por interacciones equivalentes expresadas en términos de operadores $U^{(\delta)}(\alpha, \beta)$ y extendiendo la sumatoria sobre los autoestados del nivel β , a todos los autoestados del sistema. Utilizando la identidad $\sum_{\beta} |\beta b\rangle \langle \beta b| = I$, conjuntamente con las reglas de conmutación de los operadores $U(\alpha, \beta)$ (ver apéndice), los productos de operadores que resultan pueden expresarse en términos de operadores $U(\alpha, \alpha)$. En el proceso se dejan de lado aquellos operadores y productos de operadores cuyos elementos de matriz reducidos son nulos dentro del nivel.

Damos la expresión explícita que corresponde al caso en el que el Hamiltoniano contiene dos términos que transforman como χ_1 y χ_2 respectivamente

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^1 = & B^{(\chi_1)} [\chi_1]^{-1/2} \sum_{q_1} (-1)^{\chi_1 - q_1} C_{-q_1}^{(\chi_1)} V_{q_1}^{(\chi_1)} \\ & + B^{(\chi_2)} [\chi_2]^{-1/2} \sum_{q_2} (-1)^{\chi_2 - q_2} C_{-q_2}^{(\chi_2)} V_{q_2}^{(\chi_2)} \end{aligned} \quad (5)$$

considerando sólo la contribución de términos cruzados en la expresión (4). Los dos términos restantes se obtienen reemplazando χ_1 por χ_2 o viceversa. El Hamiltoniano efectivo expresado a través de productos directos es:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ef}^{(1)} = & \sum_{\ell, k, \Gamma} K_1(\chi_1, \chi_2; k, \ell, \Gamma) \left[[C^{(\chi_1)} \times C^{(\chi_2)}]^{(k, \Gamma)} \times \mathcal{U}(\alpha, \alpha)^{(e, \Gamma)} \right]_{a_1}^{(\Gamma_1)} \\ K_1(\chi_1, \chi_2; k, \ell, \Gamma) = & (-1)^{(2\alpha + \Gamma)_e} [\alpha] [\Gamma]^{1/2} [\chi_1, \chi_2]^{-1/2} (E_\alpha - \bar{E}_\rho)^{-1} \times \\ & \times \sum_{k_1, k_2} (\text{sg } W) \cdot W \begin{Bmatrix} \chi_1(k) & \chi_2 & \Gamma(\ell) \\ \alpha(k_2) & \alpha & \beta(k_1) \end{Bmatrix} \times \\ & \times \left\{ (-1)^{(\alpha + \beta + \chi_2)_{k_2}} \langle \alpha \| V^{(\chi_1)} \| \beta \rangle_{k_1} \langle \alpha \| V^{(\chi_2)} \| \beta \rangle_{k_2}^* B^{(\chi_1)} B^{(\chi_2)*} + \right. \\ & \left. + (-1)^{(\alpha + \beta + \chi_1)_{k_1}} (-1)^{(\chi_1 + \chi_2 + \Gamma)_k} \langle \alpha \| V^{(\chi_1)} \| \beta \rangle_{k_1}^* \langle \alpha \| V^{(\chi_2)} \| \beta \rangle_{k_2} \theta_1 B^{(\chi_1)*} B^{(\chi_2)} \right\} \end{aligned} \quad (6)$$

$\text{sg } (W)$ vale -1 ó $+1$ según que el símbolo W cambie o no de signo ante una permutación de dos de sus columnas. En la expresión (6b) de los coeficientes hemos utilizado la siguiente propiedad de los elementos de matriz reducidos de los operadores V

$$[\beta]^{1/2} B^{(\beta)} \langle \beta \| V^{(\alpha)} \| \alpha \rangle_k = \theta \cdot B^{(\alpha)*} (-1)^{(\alpha + \beta + \chi)_k} (-1)^{\Gamma(\beta)} [\alpha]^{1/2} \langle \alpha \| V^{(\alpha)} \| \beta \rangle_k^*$$

válida \Leftrightarrow :

$$C_{\frac{\chi}{2}}^{(\alpha)*} = \theta (-1)^{\chi - \frac{\chi}{2}} C_{-\frac{\chi}{2}}^{(\alpha)} \quad \text{con } \theta = \pm 1$$

En forma completamente análoga pueden determinarse las expresiones correspondientes a órdenes superiores de perturbaciones.

III. Conclusiones y Comentarios

La característica del método de Wybourne consiste en la evaluación exacta de las sumatorias que intervienen en el cálculo de perturbaciones teniendo en cuenta las relaciones entre los elementos de matriz involucrados que deben satisfacerse de acuerdo a la simetría del sistema.

De las expresiones obtenidas se observa que los diferentes parámetros de los posibles términos del Hamiltoniano efectivo deben sa-

tisfacer relaciones determinadas si se conoce cuál mecanismo de perturbaciones puede ser el predominante. De igual manera se pueden relacionar los parámetros de los Hamiltonianos efectivos que describen una misma interacción en dos niveles de energía diferentes (pero próximos), lo cual es de utilidad cuando ambos pueden ser observados experimentalmente.

A P E N D I C E

Producto directo de representaciones . Coeficientes V

Definimos los coeficientes de acople de vectores en función de los coeficientes V (ref. 1,2,4)

$$V_k \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ a & b & c \end{pmatrix} = (-1)^{2\beta} (-1)^{\gamma-c} [\gamma]^{-1/2} \langle \alpha \beta (k\gamma) c | \alpha \beta a b \rangle$$

factores de fase y coeficientes V han sido tabulados por P.Dodosh (7) para el grupo O*.

Operadores tensoriales irreducibles. Teorema de Wigner Eckart

Decimos que un operador transforma como la c-ésima componente de la presentación irreducible si

$$R P_c^{(\alpha)} R^\dagger = \sum_p \Gamma_c^p(R) P_p^{(\alpha)}$$

donde $\Gamma_c^p(R)$ es la matriz que representa la operación R de simetría. Sus $e^{p,c}$ elementos de matriz son (ref.5)

$$\langle \alpha a | P_c^{(\alpha)} | \beta b \rangle = (-1)^{2\gamma} [\alpha]^{1/2} (-1)^{\gamma-a} \sum_k \langle \alpha || P_c^{(\alpha)} || \beta \rangle_k V_k \begin{pmatrix} \alpha & \beta & \gamma \\ a & b & c \end{pmatrix}$$

donde $\langle \alpha || P_c^{(\alpha)} || \beta \rangle_k$ son los elementos de matriz reducidos del operador $P_c^{(\alpha)}$

Operadores U^(k)(α, β) . Reglas de conmutación

Definimos operadores tensoriales irreducibles U (α, β)^(k,r) a través de

$$\langle \alpha' || U(\alpha, \beta)^{(k,r)} || \beta' \rangle_k = \delta_{\alpha\alpha'} \delta_{\beta\beta'} \delta_{kk'} (-1)^{2\beta} [\gamma]^{1/2} [\alpha]^{-1/2}$$

definición de la cual surgen sus reglas de conmutación:

$$[U(\alpha_1, \beta_1)^{(k_1, r_1)}_{m_1}, U(\alpha_2, \beta_2)^{(k_2, r_2)}_{m_2}] = [\gamma_1, \gamma_2]^{1/2} \times \\ \times \left\{ \delta(\alpha_2, \beta_1) (-1)^{2\beta_2} \sum_{k \in r_1} \sum_{m \in r_1} [\gamma]^{1/2} (-1)^{m_1} V_k \begin{pmatrix} \gamma_1 & \gamma_2 & \gamma \\ m_1 & m_2 & -m \end{pmatrix} (-1)^{m_1 + \beta_2 + r_1} W \begin{pmatrix} \gamma_1(k) & \gamma_2 & \gamma(r) \\ \beta_2(k_2) & \alpha_1 & \beta_1(k_1) \end{pmatrix} U(\alpha_1, \beta_2)^{(k_1, r_1)}_{m_1} - \right. \\ \left. - \delta(\alpha_1, \beta_2) (-1)^{2\beta_1} \sum_{k \in r_2} \sum_{m \in r_2} [\gamma]^{1/2} (-1)^{m_2} V_k \begin{pmatrix} \gamma_2 & \gamma_1 & \gamma \\ m_2 & m_1 & -r \end{pmatrix} (-1)^{m_2 + \beta_1 + r_2} W \begin{pmatrix} \alpha_2(k) & \gamma_1 & \gamma(r) \\ \beta_1(k_1) & \alpha_2 & \alpha_1(k_2) \end{pmatrix} U(\alpha_2, \beta_1)^{(k_2, r_2)}_{m_2} \right\}$$

R E F E R E N C I A S

- (1) U.Fano y G.Racah, "Irreducible Tensorial Sets" (Academic Press Inc. N.Y. 1959)
- (2) J.S.Griffith, "The irreducible-tensor method for molecular symmetry groups" (Prentice Hall, Englewood Cliffs, N.J. 1962)
- (3) B.G.Wybourne, "Optical properties of ions in crystals" (J.Wiley and Sons, 1967)
- (4) P.A. Dodosh, Phys. Rev. A, 5, 2376 (1971)
- (5) G.F. Koster, Phys.Rev. 109, 227 (1958)