

Estructura de la Materia 3

Serie 3: Operadores de Spin - Adaptación de Spin - Configuraciones Spin adaptadas - Multipletes

1. a) Encontrar las representaciones matriciales de los operadores de spin: \mathbf{S}^2 , \mathbf{S}_z , \mathbf{S}_+ y \mathbf{S}_- en la base $\{|\alpha\rangle, |\beta\rangle\}$.

b) Mostrar la validez de las igualdades:

$$\text{i. } \mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_+\mathbf{S}_- - \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z^2 \qquad \text{ii. } \mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_-\mathbf{S}_+ + \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z^2$$

en esas representaciones.

2. Probar que:

$$\mathbf{S}_z |\chi_i\chi_j \dots \chi_k\rangle = \frac{1}{2} (N^\alpha - N^\beta) |\chi_i\chi_j \dots \chi_k\rangle$$

Hint: usar la expansión del determinante de Slater y notar que \mathbf{S}_z es invariante ante cualquier permutación de los nombres de los electrones, es decir conmutan con el operador de permutación \mathbf{P}_n .

3. Probar que:

$$\mathbf{S}^2 |\chi_i\bar{\chi}_i\chi_j\bar{\chi}_j \dots \chi_k\bar{\chi}_k\rangle = 0$$

4. Dadas dos funciones de estado espaciales de una partícula $\phi_1(\vec{r})$ y $\phi_2(\vec{r})$ pueden construirse funciones antisimétricas de dos partículas teniendo en cuenta las funciones de spin α y β y que cada función total está factorizada en una parte espacial por otra de spin.

i. Hacer todas las combinaciones posibles;

ii. Para cada combinación observe la simetría de la parte espacial y de spin y relacionela con el valor que surge de aplicarle \mathbf{S}^2 y \mathbf{S}_z . Son estas últimas, relaciones de autovalores?

iii. Observar si cada una de ellas se puede expresar como un único determinante de Slater.

5. Utilizar $\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_- \mathbf{S}_+ + \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z^2$ para mostrar que:

i. $|^1\Psi_1^2\rangle$ es un singlete.

ii. $|^3\Psi_1^2\rangle$, $|\Psi_1^{\bar{2}}\rangle$ y $|\Psi_1^2\rangle$ son tripletes.

6. a) Escriba todas las configuraciones posibles que pueden formarse con dos electrones en orbitales espaciales ψ_1 y ψ_2 .

b) Diga para cada una de ellas si es o no autofunción del operador de spin \mathbf{S}^2 y su proyección sobre los ejes. Calcule sus autovalores. Cual es su degeneración.

7. Determinar las autofunciones de un sistema de 3 electrones.