Estructura de la materia 3
2^{do} Cuat. 2021

Serie 1 *Sistemas de partículas indistinguibles*

Ejercicios

1. Sea una base no ortogonal $\{|\chi_i\rangle\}$ del espacio de estados de un sistema físico y $\langle\chi_i \mid \chi_j\rangle = S_{ij}$, el elemento ij de la matriz de "overlap" $\mathbf{S}$ entre dichos estados.

   (a) Proponga formas de obtener una base ortonormal que genere el mismo espacio vectorial que la original.

   (b) Verifique que la ortogonalización simétrica $\left|\chi_j'\right\rangle = \sum_i \left(\mathbf{S}^{-1/2}\right)_{ij} |\chi_i\rangle$ es una posibilidad para contestar 1.1.

2. Dado un operador $\mathbf{F}$, compare las representaciones matriciales $F_{ij} = \langle\chi_i|\mathbf{F}|\chi_j\rangle$, y $\{f_{ij}\}$ tal que $\mathbf{F}\,|\chi_j\rangle = \sum_i f_{ij}|\,\chi_i\rangle$. Nota, la base $\{\chi_j\}$ no es ortonormal.

   (a) ¿Cómo se relacionan ambas matrices?

   (b) ¿En qué casos coinciden?

3. Dados dos conjuntos de K funciones espaciales ortonormales $\{\phi_i(\vec{r})\}_K$ y $\{\chi_i(\vec{r})\}_K$, tales que el primer conjunto no es ortogonal al segundo: $\int d\vec{r}\phi_i(\vec{r})\cdot\chi_i(\vec{r}) = S_{ij}$ (S es la matriz de "overlap"). Se arma un nuevo conjunto $\{\psi_i\}_{2K}$ con $2K$ espín-orbitales construidos por multiplicación de los $\{\phi_i\}$ por la función de espín α y los $\{\chi_i\}$ por β :

$$\begin{aligned} \psi_{2i-1}(\vec{x}) &= \phi_i(\vec{r})\alpha(\omega) \\ \psi_{2i}(\vec{x}) &= \chi_i(\vec{r})\beta(\omega) \\ (\mathrm{i} &= 1, 2, \ldots, K) \end{aligned}$$

   Muestre que el conjunto $\{\chi_i\}_{2K}$ es un conjunto ortonormal.

4. Definiendo los operadores de un cuerpo como: $\hat{O}_1 = \sum_{i=1}^{N} \hat{o}(i)$ y los operadores de dos cuerpos como: $\hat{O}_2 = \sum_{i<j}^{N} \hat{g}(i,j)$. Pruebe los siguientes conmutadores: $\left[\hat{O}_1, A\right] = 0$ y $\left[\hat{O}_2, A\right] = 0$. Para el operador de un cuerpo hágalo explícitamente para estados con dos electrones. Para el caso del operador de dos cuerpos, hágalo para un sistema de 3 electrones.

5. Pruebe que para el estado de N partículas antisimetrizado $|\Psi\rangle$, representado por el determinante de Slater $|\Psi\rangle = |\chi_i\chi_i \ldots\ldots x_k\rangle$, se tiene:
   $\hat{S}_z\,|\chi_i\chi_j \ldots\ldots \chi_k\rangle = 1/2\left(N^\alpha - N^\beta\right)|\chi_i\chi_j \ldots\ldots \chi_k\rangle = M_s\,|\chi_i\chi_j \ldots\ldots \chi_k\rangle$
   donde se toma que $\chi_m = \phi_m(\mathbf{r})\boldsymbol{\alpha}$; o bien $\chi_m = \phi_m(\mathbf{r})\boldsymbol{\beta}$.

6. Dadas dos funciones espaciales $\phi_a(\vec{r})$ y $\phi_b(\vec{r})$ y teniendo en cuenta las funciones de espín α y β. Construya todas las funciones antisimétricas (determinantes) de dos partículas posibles con la base $\left\{\phi_a(x), \overline{\phi_a}(x), \phi_b(x), \overline{\phi_b}(x)\right\}$:

(a) Chequee si en todos los casos se puede factorizar la parte espacial de la parte de spin.

(b) Esquematice los estados con diagramas de niveles, suponiendo que las energías de los estados $\phi_a(\vec{r})$ y $\phi_b(\vec{r})$ no están degeneradas.

7. Tomando que $\{\chi_j\}$ son tales que $\hat{h}(1)\chi_i(x_1) = e_i\chi_i(x_1)$:

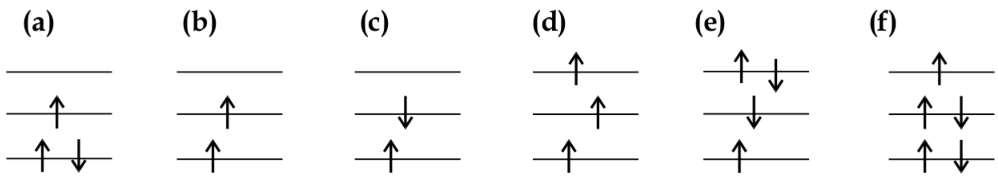
   (a) Mostrar que el producto de Hartree

   $$\Psi^{PH}(x_1, \ldots\ldots, x_N) = \chi_i(x_1)\,\chi_j(x_2)\ldots\ldots\ldots\chi_k(x_N)$$

   es una autofunción del hamiltoniano $\hat{H} = \sum_{l=1}^{N}\hat{h}(l)$ con autovalores dados por: $E = e_i + e_j + \ldots\ldots\ldots + e_k$:

   (b) Mostrar que el determinante de Slater dado por : $A\Psi^{PH}(x_1, \ldots\ldots, x_N) = A\chi_i(x_1)\,\chi_j(x_2)\ldots\ldots\ldots\chi_k(x_N)$ tiene el mismo autovalor. Esto justifica llamar "estados de partícula independiente" a los determinantes de Slater.

8. Calcule, por simple inspección, la energía de los siguientes estados cuya función de onda es unideterminantal:



9. Calcule la energía del siguiente estado bideterminantal: $\frac{1}{\sqrt{2}}(|1,3,\overline{3}\rangle + |1,\overline{2},3\rangle)$

Ejercicios Asterix

1. Para el hamiltoniano (independiente de los espines electrónicos)

$$\hat{H} = \hat{h}_1 + \hat{h}_2 + \frac{1}{r_{12}}$$

$$\text{con} \quad \hat{h}_i = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + V(\vec{r}_i)$$

   (a) Calcule $E = \langle\hat{H}\rangle$ para cada uno de los estados del problema 6. Suponga conocidos los resultados de las integrales.

   (b) ¿Todos los estados tienen el spin bien definido? Calcule S_z y S^2.

   (c) ¿Cuál es el estado de menor energía? Noten que las integrales de Coulomb e intercambio son reales y definidas positivas.

Ayudas

- Para $\overrightarrow{\mathbf{S}}$ un operador de impulso angular vale: $\hat{S}^2 = \hat{S}^+\hat{S}^- - \hat{S}_z + \hat{S}_z^2 = \hat{S}^-\hat{S}^+ + \hat{S}_z + \hat{S}_z^2$