Estructura de la materia 3
Serie 3 – Espín adaptadas.
Cátedra Horacio Grinberg.
Verano 2006

Configuraciones de Espín Adaptadas.

1. El estado excitado de más baja energía del átomo de He está representado a orden cero por la configuración 1s2s.
   a) Determine las energías de los estados singlete y triplete usando el modelo de partícula independiente. Los valores de las integrales de Coulomb e intercambio son 0,419 y 0,044 u.a. Compare el resultado obtenido con los valores experimentales de –2,147 y –2,176 u.a. para los estados singlete y triplete. Discuta los resultados en términos del principio de antisimetría y del efecto de correlación de intercambio o correlación de espín.
   b) Demuestre que la separación singlete-triplete está de acuerdo con la regla de
   Hund de máxima multiplicidad.

2. Usando el método del operador proyección determine las configuraciones de espín adaptadas (combinaciones lineales correctamente antisimetrizadas de funciones unideterminantiales) para un sistema de tres electrones. Analizarlas de acuerdo a su degeneración de espín. ¿Cuáles son las doce configuraciones que son automáticamente autofunciones de S^2 ?

3. Para $\vec{\mathbf{S}}$ un operador de impulso angular vale:

$$\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}^+\mathbf{S}^- - \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z^2 = \mathbf{S}^-\mathbf{S}^+ + \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z^2$$

$$\vec{\mathbf{S}}_1.\vec{\mathbf{S}}_2 = \frac{1}{2}\left\{\mathbf{S}_1^-\mathbf{S}_2^+ + \mathbf{S}_1^+\mathbf{S}_2^-\right\} + \mathbf{S}_{1z}\mathbf{S}_{2z}$$

Para $\mathbf{S}_1 = \mathbf{S}_2 = \tfrac{1}{2}$ se tiene

$$(\vec{\mathbf{S}}_1 + \vec{\mathbf{S}}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1\mathbf{S}_2 = \tfrac{3}{2} + \mathbf{S}_1^-\mathbf{S}_2^+ + \mathbf{S}_1^+\mathbf{S}_2^- + 2\mathbf{S}_{1z}\mathbf{S}_{2z}$$

Muestre que los estados $\left|\Psi^{\pm}\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left|\alpha(1)\beta(2) \pm \beta(1)\alpha(2)\right\rangle$ son tales que

$$\mathbf{S}^2\left|\mathbf{\Psi}^+\right\rangle = 2\left|\mathbf{\Psi}^+\right\rangle$$

$$\mathbf{S}_z\left|\mathbf{\Psi}^+\right\rangle = \mathbf{0} \qquad \text{corresponde a S} = 1$$

$$\mathbf{S}^2\left|\mathbf{\Psi}^-\right\rangle = \mathbf{0}$$

$$\mathbf{S}_z\left|\mathbf{\Psi}^-\right\rangle = \mathbf{0} \qquad \text{corresponde a S} = 0$$

4. Dadas dos funciones espaciales $\boldsymbol{\phi}_1(\vec{\mathbf{r}})$ y $\boldsymbol{\phi}_2(\vec{\mathbf{r}})$, teniendo en cuenta las funciones de espín $\boldsymbol{\alpha}$ y $\boldsymbol{\beta}$ pueden construirse funciones antisimétricas de dos partículas donde queden factorizadas la parte espacial y la de espín.
   a) Haga todas las combinaciones posibles.
   b) Relacione la simetría de la parte espacial y de espín con el valor de $\mathbf{S}^2$ y de $\mathbf{S}_z$ del estado correspondiente.

c) Analice si puede expresar a cada una de ellas como un único determinante de Slater.

5. Pruebe que $\mathbf{S}^2\left|\chi_i\bar{\chi}_i\chi_j\bar{\chi}_j\cdots\cdots\chi_k\bar{\chi}_k\right\rangle = \mathbf{0}$

Ayudas:

- $\mathbf{S}^2 = \mathbf{S}_-\mathbf{S}_+ + \mathbf{S}_z + \mathbf{S}_z^2$
- Como un resultado del problema anterior es suficiente con mostrar que $\mathbf{S}_+\left|\chi_i\bar{\chi}_i\chi_j\bar{\chi}_j\cdots\cdots\chi_k\bar{\chi}_k\right\rangle = \mathbf{0}$
- Usar la expansión de un determinante de Slater y notar que $\mathbf{S}_+$ conmuta con el operador permutación.
- $\mathbf{S}_+\chi\alpha = \mathbf{0}$
- Finalmente, $\mathbf{S}_+\chi\beta = \chi\alpha$, pero el determinante se anula porque contiene 2 columnas idénticas.