

Chemische binding I, Opdracht 6

2 oktober 2003

6 Spin

Samenvatting formules:

$$[\hat{S}_x, \hat{S}_y] = i\hbar\hat{S}_z \quad (1)$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 \quad (2)$$

$$\hat{S}_\pm = \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y \quad (3)$$

$$\hat{S}^2|SM\rangle = \hbar^2 S(S+1)|SM\rangle, \quad S = 0, \frac{1}{2}, 1, \dots \quad (4)$$

$$\hat{S}_z|SM\rangle = \hbar M|SM\rangle, \quad M = -S, -S+1, \dots, S \quad (5)$$

$$\hat{S}_\pm|SM\rangle = \hbar\sqrt{S(S+1) - M(M\pm 1)}|SM\pm 1\rangle \quad (6)$$

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_- \hat{S}_+ + \hat{S}_z^2 + \hbar\hat{S}_z \quad (7)$$

$$\langle SM|S'M'\rangle = \delta_{S,S'}\delta_{M,M'} \quad (8)$$

$$\hat{S}_\rho = \hat{s}_\rho \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{s}_\rho, \quad \rho = x, y, z \text{ (twee elektronen)} \quad (9)$$

Opgave 6.1 Toon aan dat de twee-elektronen spinfunctie $\alpha\alpha$ de quantumgetallen $S = 1$ en $M = 1$ heeft, d.w.z., bereken

$$\hat{S}_z\alpha\alpha$$

en

$$\hat{S}^2\alpha\alpha$$

Een $S = 1$ functie wordt een triplet functie genoemd.

Opgave 6.2 Bereken de $M = 0$ en $M = -1$ componenten van dit triplet (hint: gebruik de \hat{S}_- operator). Normeer de functies.

Er bestaat ook een twee elektronen singlet functie ($|00\rangle$). Deze functie is te schrijven als een lineaire combinatie

$$|00\rangle = c_1\alpha\alpha + c_2\alpha\beta + c_3\beta\alpha + c_4\beta\beta$$

Opgave 6.3 Bereken de expansiecoëfficiënten ($c_i, i = 1, \dots, 4$). Aanwijzingen:

- laat eerst de \hat{S}_z operator werken op de linker en rechter kant van deze vergelijking. Welke coëfficiënten kun je zo vinden?
- neem nu het inproduct met de spinfunctie $\langle 10|$ die je in de vorige opgave gevonden hebt
- normeer het resultaat

Maak de volgende opgaven pas als je voorgaande opdrachten af hebt:

Opgave 6.4 *Bewijs dat het resultaat van de vorige opgave inderdaad een singlet ($S = 0$) functie is.*

Opgave 6.5 *Bereken de matrix representatie van \hat{S}_z , \hat{S}_\pm , en vervolgens \hat{S}^2 in de twee-elektronen spin basis $\{\alpha\alpha, \alpha\beta, \beta\alpha, \beta\beta\}$ en bereken (met MATLAB) de eigenwaarden en eigenvectoren van \hat{S}^2 .*

Opgave 6.6 *Controleer de commutatierelatie*

$$[\hat{S}_z, \hat{S}_+] = \hbar\hat{S}_+$$

numeriek.