Chemische binding I, Opdracht 6

2 oktober 2003

6 Spin

Samenvatting formules:

$$
\begin{aligned}
[\hat{S}_x, \hat{S}_y] &= i\hbar\hat{S}_z & (1)\\
\hat{S}^2 &= \hat{S}_x^2 + \hat{S}_y^2 + \hat{S}_z^2 & (2)\\
\hat{S}_\pm &= \hat{S}_x \pm i\hat{S}_y & (3)\\
\hat{S}^2|SM\rangle &= \hbar^2 S(S+1)|SM\rangle, \quad S = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots & (4)\\
\hat{S}_z|SM\rangle &= \hbar M|SM\rangle, \quad M = -S, -S+1, \ldots, S & (5)\\
\hat{S}_\pm|SM\rangle &= \hbar\sqrt{S(S+1) - M(M\pm 1)}|S\,M\pm 1\rangle & (6)\\
\hat{S}^2 &= \hat{S}_-\hat{S}_+ + \hat{S}_z^2 + \hbar\hat{S}_z & (7)\\
\langle SM|S'M'\rangle &= \delta_{S,S'}\delta_{M,M'} & (8)\\
\hat{S}_\rho &= \hat{s}_\rho \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{s}_\rho, \quad \rho = x, y, z \text{ (twee elektronen)} & (9)
\end{aligned}
$$

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 expansiecoefficienten ($c_i, i = 1, \ldots, 4$). Aanwijzingen:*

- *laat eerst de $\hat{S}_z$ operator werken op de linker en rechter kant van deze vergelijking. Welke coefficienten 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.