FI-002 Mecânica Quântica II
Lista # 1

Prof. G. Cabrera
cabrera@ifi.unicamp.br

Data de entrega: 14 de abril de 2020
Entregar apenas os exercícios destacados com *

1. **Dois elétrons interagentes**

   Considere um sistema de dois elétrons interagentes (férmions de spin 1/2), com Hamiltoniano que nâo depende do spin. Neste caso, a função de onda total pode ser fatorada numa parte orbital e uma parte spinorial, na forma

   $$\Psi(1,2) = \boldsymbol{\phi}(\overrightarrow{\mathbf{x}_1}, \overrightarrow{\mathbf{x}_2})\boldsymbol{\chi}(\mathbf{s}_1, \mathbf{s}_2) \ .$$

   (a) Considere primeiro a parte spinorial $\boldsymbol{\chi}$ que é obtida por acoplamento dos spins, seguindo a regra de Adição do Momentum Angular. Encontre os valores do spin total. Construa as correspondentes autofunções. Verifique a simetria de permutação do spin para todas elas.

   (b) Discuta a simetria da função orbital $\boldsymbol{\phi}(\overrightarrow{\mathbf{x}_1}, \overrightarrow{\mathbf{x}_2})$ que deverá ser combinada com a parte spinorial, para satisfazer o **Princípio de Exclusão** de Pauli. A função de onda total $\Psi(1,2)$ deverá ser **antisimétrica** pela troca de partículas, o que envolve a permutação simultânea das coordenadas e do spin. Considere o caso onde os elétrons individuais podem ocupar dois orbitais $\omega_A(\vec{\mathbf{r}})$ e $\omega_B(\vec{\mathbf{r}})$. $\square$

2. **Orto e Para Hélio**

   Na natureza existem o *para*-He ($S=0$) e o *orto*-He ($S=1$). Qual você acha que é mais comum na natureza? A configuração do estado fundamental é $1s^2$. O *orto* e o *para*-He estão associados à configuração excitada $1s^1 2s^1$. Construa todas as funções possíveis correspondentes a esta última configuração, e identifique as funções do *orto* e *para*-He. $\square$

3. **O grupo de permutações $\mathcal{S}_3$**

   O grupo das permutações de três objetos (partículas) é isomorfo ao grupo das transformações geométricas que deixam invariante um triângulo equilátero (rotações de 120° e reflexões que deixam um vértice invariante). Usando esta correspondência, encontre um conjunto de 6 matrizes unitárias (2×2) que representem as $3! = 6$ permutações. Mostre que o Determinante das matrizes fornece a paridade da permutação. $\square$

4. **Projetores de Simetrização (S) e Anti-Simetrização (A)**

   Escrevemos de maneira compacta os dois projetores como

   $$\Lambda = \frac{1}{n!} \sum_{\sigma \in S_n} \lambda_\sigma \; P_\sigma \quad ,$$

   com $\lambda_\sigma = 1$ para S, e $\lambda_\sigma = \delta_\sigma$, a paridade da permutação σ, para A. Mostre que temos as propriedades abaixo:

   (a) $\Lambda^\dagger = \Lambda$, isto é os operadores são hermitianos;

   (b) $P_\sigma \Lambda = \Lambda P_\sigma$, para toda permutação $\sigma \in S_n$;

   (c) $\Lambda^2 = \Lambda$, propriedade de um operador de projeção. Em particular mostre que $AS = SA = 0$.

   (d) Seja $\phi(x_1, x_2, x_3) = f(x_{1)} g(x_2) h(x_3)$ uma função das coordenadas de três partículas. Simetrize e anti-simetrize ϕ com os operadores de projeção acima. Discuta a situação quando duas funções das (f, g, h) são iguais. $\square$

5. **Espectro não degenerado**

   Mostre que se uma função de onda de n partículas

   $$\psi(1, 2, ..., n)$$

   é um estado estacionário de um Hamiltoniano invariante por permutação e com espectro **não degenerado**, ela é necessariamente simétrica ou antisimétrica. $\square$

6. **Projetores de Young para três partículas**

   Considere os projetores de Young $\hat{Y}_{[\lambda]}$ associados com o grupo permutações de três partículas $\mathcal{S}_3$. Mostre explícitamente que para cada um deles temos

   $$\hat{Y}^2 = \hat{Y},$$

   e que a soma de todos eles fornece o operador identidade $\sum_{[\lambda]} \hat{Y}_{[\lambda]} = 1.$ $\square$

7. **Estrutura Eletrônica de Camadas atômicas**

   Mostre que para uma camada atómica nl^N cheia com $N = 2(2l + 1)$, temos $L = 0$ e $S = 0$ e portanto ela é esfericamente simétrica. Mostre também que se a camada está preenchida até a metade, o estado de spin S máximo compatível com o Princípio de Pauli tem $L = 0$. Quanto vale o spin desse estado? Mostre que em este caso não existe indefinição da terceira regra de Hund. $\square$

8. **Configurações** $3p^3$ **e** $3p^4$**.**

   Estude a estrutura eletrônica (incluindo o acoplamento spin-órbita) dos átomos de enxôfre e fósforo, no esquema de Russel-Saunders. As configurações fundamentais são:

$$\begin{aligned} \mathrm{S} &: \quad [\mathrm{Ne}]\ 3s^2 3p^4, \\ \mathrm{P} &: \quad [\mathrm{Ne}]\ 3s^2 3p^3. \end{aligned}$$

   Determine também a ordem dos níveis usando as regras de Hund. □

9. **Configurações atómicas** nd^2, nd^3

   Ache a estrutura fina e o estado fundamental correspondente ás configurações:

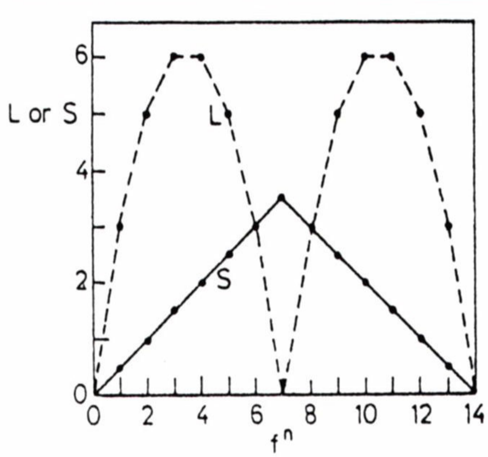
$$nd^2,\ nd^3,$$

   no esquema de Russel-Saunders. Proceda de maneira recursiva, com um, dois e finalmente três elétrons para encontrar a separação dos espaços de permutaçao em espaços com L e S bem definidos. Finalmente acople o spin e a órbita. Ordene os níveis de acordo com as *Regras de Hund*. □

10. * **A série dos íons das Terras Raras**

    A tabela anexa (tabela **2.4** do livro do White, *Quantum Theory of Magnetism*) mostra as propriedades da série dos íons R^{+3} das Terras Raras, determinadas pela camada f^n incompleta:

Table 2.4. Configurations of the rare-earth ions



Ce^{3+}	$4f^1 5s^2 p^6$	$^2F_{5/2}$
Pr^{3+}	$4f^2 5s^2 p^6$	$^3H_4$
Nd^{3+}	$4f^3 5s^2 p^6$	$^4I_{9/2}$
Pm^{3+}	$4f^4 5s^2 p^6$	$^6I_4$
Sm^{3+}	$4f^2 5s^2 p^6$	$^6H_{5/2}$
Eu^{3+}	$4f^6 5s^2 p^6$	$^7F_0$
Gd^{3+}	$4f^7 5s^2 p^6$	$^8S_{7/2}$
Tb^{3+}	$4f^8 5s^2 p^6$	$^7F_6$
Dy^{3+}	$4f^9 5s^2 p^6$	$^6H_{15/2}$
Ho^{3+}	$4f^{10} 5s^2 p^6$	$^5I_8$
Er^{3+}	$4f^{11} 5s^2 p^6$	$^4I_{15/2}$
Tm^{3+}	$4f^{12} 5s^5 p^6$	$^3H_6$
Yb^{3+}	$4f^{13} 5s^2 p^6$	$^2F_{7/2}$

Configuração do estado fundamental dos íons de Terras Raras.

(a) Usando o esquema de acoplamento $L - S$ e as Regras de Hund , explique as propriedades mostradas na tabela (L total, S total e estado fundamental) em função do número n de ocupação do orbital f ;

(b) Encontre todos os multipletos atômicos do Nd^{+3} ordenados segundo as regras de Hund. $\square$

11. **Livro do Sakurai,** *Modern Quantum Mechanics*

    Resolva todos os problemas do capítulo 6 (ver folhas anexas) do *MQM* do Sakurai. $\square$

PROBLEMS

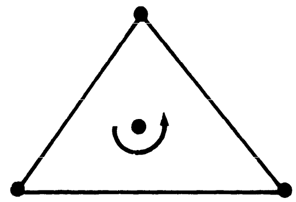
1. a. N identical spin $\frac{1}{2}$ particles are subjected to a one-dimensional simple harmonic oscillator potential. What is the ground-state energy? What is the Fermi energy?

   b. What are the ground state and Fermi energies if we ignore the mutual interactions and assume N to be very large?

2. It is obvious that two nonidentical spin1 particles with no orbital angular momenta (that is, s-states for both) can form $j=0$, $j=1$, and $j=2$. Suppose, however, that the two particles are *identical*. What restrictions do we get?

3. Discuss what would happen to the energy levels of a helium atom if the electron were a spinless boson. Be as quantitative as you can.

4. Three spin 0 particles are situated at the corners of an equilateral triangle. Let us define the z-axis to go through the center and in the direction normal to the plane of the triangle. The whole system is free to rotate about the z-axis. Using statistics considerations, obtain restrictions on the magnetic quantum numbers corresponding to J_z.



5. Consider three weakly interacting, identical spin 1 particles.
   a. Suppose the space part of the state vector is known to be symmetric under interchange of *any* pair. Using notation $|+\rangle|0\rangle|+\rangle$ for particle 1 in $m_s = +1$, particle 2 in $m_s = 0$, particle 3 in $m_s = +1$, and so on, construct the normalized spin states in the following three cases:
      (i) All three of them in $|+\rangle$.
      (ii) Two of them in $|+\rangle$, one in $|0\rangle$.
      (iii) All three in different spin states.
      What is the total spin in each case?
   b. Attempt to do the same problem when the space part is antisymmetric under interchange of any pair.
6. Suppose the electron were a spin $\frac{3}{2}$ particle obeying Fermi-Dirac statistics. Write the configuration of a hypothetical Ne ($Z = 10$) atom made up of such "electrons" [that is, the analog of $(1s)^2(2s)^2(2p)^6$]. Show that the configuration is highly degenerate. What is the ground state (the lowest term) of the hypothetical Ne atom in spectroscopic notation ($^{2S+1}L_J$, where S, L, and J stand for the total spin, the total orbital angular momentum, and the total angular momentum, respectively) when exchange splitting and spin-orbit splitting are taken into account?
7. Two identical spin $\frac{1}{2}$ fermions move in one dimension under the influence of the infinite-wall potential $V = \infty$ for $x < 0$, $x > L$, and $V = 0$ for $0 \leq x \leq L$.
   a. Write the ground-state wave function and the ground-state energy when the two particles are constrained to a triplet spin state (*ortho* state).
   b. Repeat (a) when they are in a singlet spin state (*para* state).
   c. Let us now suppose that the two particles interact mutually via a very short-range attractive potential that can be approximated by
   $$V = -\lambda\delta(x_1 - x_2) \quad (\lambda > 0).$$
   Assuming that perturbation theory is valid even with such a singular potential, discuss semiquantitatively what happens to the energy levels obtained in (a) and (b).