

Kvantová chemie

Cvičení 4

Vícečásticové systémy

Problém 1 (Hejtman)

Ukažte, že vektory báze Hilbertova prostoru stavů dvou spinů, $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle$, $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$, $|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$, jsou vlastními vektory operátoru z-tové složky celkového spinu $\hat{S}_Z = \hat{S}_{1Z} \otimes \hat{1} + \hat{1} \otimes \hat{S}_{2Z}$, kde $\hat{1}$ je operátor identity na jednospinovém prostoru. (Návod: $(\hat{S}_{1Z} \otimes \hat{1})|x\rangle|y\rangle = \hat{S}_{1Z}|x\rangle\hat{1}|y\rangle$ a $(\hat{1} \otimes \hat{S}_{2Z})|x\rangle|y\rangle = \hat{1}|x\rangle\hat{S}_{2Z}|y\rangle$.)

Problém 2

Pomocí symetrizačního / antisymetrizačního operátoru symetrizujte / antisymetrizujte vektory báze Hilbertova prostoru stavů dvou spinů: $|\uparrow\rangle|\uparrow\rangle$, $|\uparrow\rangle|\downarrow\rangle$, $|\downarrow\rangle|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle|\downarrow\rangle$. Za předpokladu ortonormality jednospinových funkcí $|\uparrow\rangle$ a $|\downarrow\rangle$ normalizujte získané symetrické a antisymetrické dvojspinové funkce.

Problém 3 (Hlobílková)

Ukažte, že Slaterův determinant pro systém dvou částic reprezentuje za předpokladu ortonormality jednočásticových vlnových funkcí dvojspinovou vlnovou funkci, která je rovněž normalizována.