**Estructura de la materia 3**
**Serie – algebra**
**Cátedra Martín Ruiz de Azúa.**
**2do cuatrimestre de 2005**

**1.** Mostrar que un operador hermitiano es tal que
1.1. Tiene autovalores reales.
1.2. Los autovectores correspondientes a distintos autovalores son ortogonales.
1.3. Los autovectores correspondientes a igual autovalor pueden elegirse ortogonales.

**2.** Sea una base $\{|\chi_i\rangle\}$ del espacio de estados de un sistema físico no ortogonal y $\langle\chi_i|\chi_j\rangle = S_{ij}$, el elemento *ij* de la matriz de "overlap" **S** entre dichos estados.
2.1. Proponga formas de obtener una base ortonormal que genere el mismo espacio vectorial que la original.
2.2. Verifique que la ortogonalización simétrica $|\chi_j'\rangle = (\mathbf{S}^{-1/2})_{ij}|\chi_i\rangle$ es una posibilidad para contestar 2.1.
2.3. Construya el proyector ortogonal **P** sobre el subespacio generado por un subconjunto $\{|\chi_i\rangle,....,|\chi_N\rangle\}$ de funciones de la base. ¿Qué condiciones debe satisfacer?
2.4. Verifique que $0 \le \langle\Psi|\mathbf{P}|\Psi\rangle \le 1 \quad \forall\,\Psi$.

**3.** Dado un operador **F**, compare las representaciones matriciales $F_{ij} = \langle\chi_i|\mathbf{F}|\chi_j\rangle$ y $\{f_{ij}\}$ tal que $\mathbf{F}|\chi_j\rangle = \sum_i f_{ij}|\chi_i\rangle$.
3.1. ¿Cómo se relacionan ambas matrices?
3.2. ¿En qué casos coinciden?

4. Para el siguiente problema, se pide
4.1. Demostrar que el operador permutación **P** es unitario.
4.2. Demostrar que el operador de antisimetrización $\mathbf{A} = (\sqrt{N!})^{-1}\sum(-1)^p\,\mathbf{P}$ satisface $\mathbf{A}^\dagger = \mathbf{A}$ y $\mathbf{A}^2 = \sqrt{N!}\mathbf{A}$.
4.3. Mostrar que dada una base ortonormal de funciones de una partícula para una sistema de *N* fermiones, $\{\chi_i\}$, el conjunto $\{A|\chi_{i1}(1),....,\chi_{iN}(N)\rangle\}$ es una base ortonormal.
4.4. Si la base de funciones de una partícula tiene *K* elementos, ¿cuántos tiene el conjunto $\{A|\chi_{i1},....,\chi_{iN}\rangle\}$ (es decir, cuál se su dimensión)?

5. Halle el conmutador [ **A** , **F** ] para un operador **F** de uno y de dos cuerpos.

6. Dado un conjunto de K funciones espaciales ortonormales $\{\chi_i^\alpha(\vec{\mathbf{r}})\}$ y otro conjunto de K funciones espaciales ortonormales $\{\chi_i^\beta(\vec{\mathbf{r}})\}$, tales que el primer conjunto no es ortogonal al segundo: $\int \mathbf{d\vec{r}}\ \chi_i^\alpha(\vec{\mathbf{r}})^*\chi_i^\beta(\vec{\mathbf{r}}) = \mathbf{S_{ij}}$ donde **S** es la matriz de "overlap".

Muestre que el conjunto $\{\chi_i\}$ de los 2K espín-orbitales construidos por multiplicación de los $\chi_i^{\alpha}$ por la función de espín $\alpha$ y los $\chi_i^{\beta}$ por la función $\beta$ de la forma:

$\chi_{2i-1}(\vec{x}) = \chi_i^{\alpha}(\vec{r})\alpha(\omega)$ ; $\chi_{2i}(\vec{x}) = \chi_i^{\beta}(\vec{r})\beta(\omega)$ (i=1,2,..........,K)

es un conjunto ortonormal

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

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

$$\vec{S}_1.\vec{S}_2 = \frac{1}{2}\left\{S_1^-S_2^+ + S_1^+S_2^-\right\} + S_{1z}S_{2z}$$

Para $S_1 = S_2 = 1/2$ se tiene

$$(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1S_2 = 3/2 + S_1^-S_2^+ + S_1^+S_2^- + 2S_{1z}S_{2z}$$

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

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

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

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

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

8. Dadas dos funciones espaciales $\phi_1(\vec{r})$ y $\phi_2(\vec{r})$, teniendo en cuenta las funciones de espín $\alpha$ y $\beta$ pueden construirse funciones antisimétricas de dos partículas donde queden factorizadas la parte espacial y la de espín.

8.1 Haga todas las combinaciones posibles.

8.2 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.

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

9 Para el hamiltoniano (independiente de los espines electrónicos)

$$\mathbf{H} = \mathbf{h}_1 + \mathbf{h}_2 + \frac{1}{r_{12}} \qquad \mathbf{h}_i = -\frac{1}{2}\nabla_i^2 + \mathbf{V}(\vec{r}_i)$$

9.1 Calcule $\mathbf{E} = \langle \mathbf{H} \rangle$ para cada uno de los estados del problema 8.

9.2 Analice el signo de las integrales de Coulomb y de intercambio.

9.3 ¿Cuál es el estado de menor energía?

9.4 ¿Qué pasa con el estado triplete si $\phi_2(\vec{r}) = \phi_1(\vec{r})$?

10 Analice si en un subespacio del espacio de estados de un sistema físico, la solución óptima desde el punto de vista variacional coincide con la que corresponde a diagonalizar el hamiltoniano proyectado en el subespacio en cuestión.

11 ¿Es posible reducir cualquier función de N fermiones a un único determinante de Slater?