Problema 10

(c) miro los orbitales del O_2^{++}

son $14e^-$ $\Rightarrow$ tengo 7 orbitales ocupados (molec)

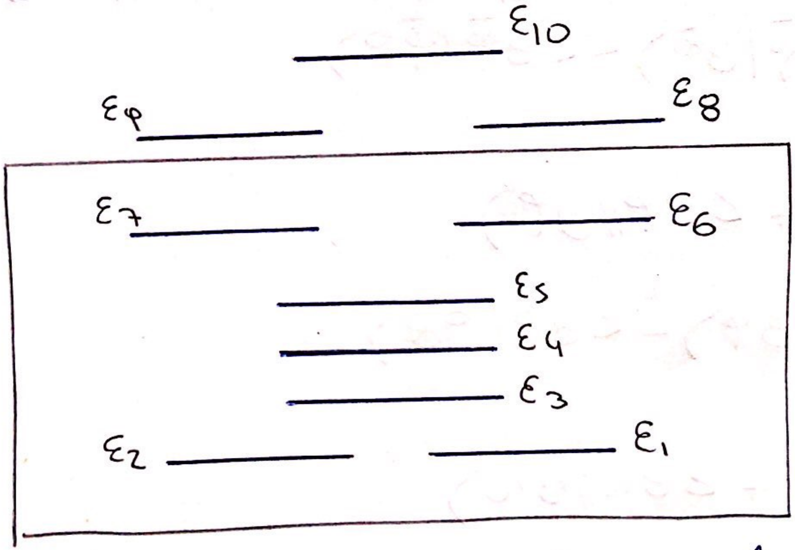
$$|1\rangle = 0{,}703(1s^A - 1s^B) + 0{,}018(2s^A - 2s^B) - 0{,}005(2p_z^A + 2p_z^B)$$

$\vdots$

$$|6\rangle = 0{,}66(2p_x^A + 2p_x^B)$$

$$|7\rangle = 0{,}66(2p_y^A + 2p_y^B)$$

$$|HF: O_2^{++}\rangle = |1\bar{1}2\bar{2}3\bar{3}4\bar{4}5\bar{5}6\bar{6}7\bar{7}\rangle$$



ocupados doblemente acoplan $L^T = S^T = 0$

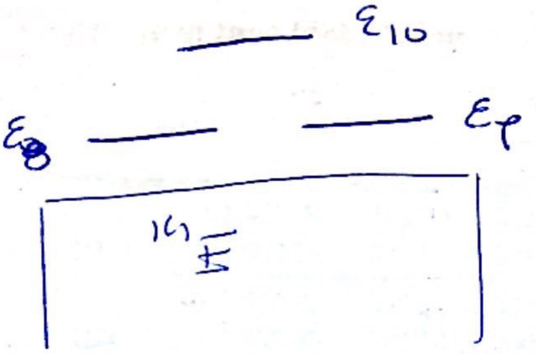
Busco ubicar $2e^-$ en alguno de estos estados $\varepsilon_8, \varepsilon_9, \varepsilon_{10}$.

Tengo que colocar 2 e^- en los estados 8 y/o φ

usar como base E_{14e}

$$E^{16} = E^{14} + \overbrace{\varepsilon_r + \varepsilon_s + \langle rs \| rs \rangle}^{\Delta rs}$$

$$\{r, s\} = \{8, \bar{8}, \varphi, \bar{\varphi}, 10, \overline{10}\}$$



Analizar Δrs

$\boxed{\text{C.ii}}$

El estado es $|O_2\rangle = |1\bar{1}2\bar{2}\cdots 8 9\rangle$

La interacción $\hat{H}_{int} = -\bar{m}\cdot\bar{B}$

$$\bar{M} = \beta(\bar{L} + 2\bar{S}), \quad \text{asumo } \bar{B} = B_0\hat{z}$$

$\Rightarrow$ solo miro M_z.

Hay que calcular $\langle\psi^{16}|M_z|\psi^{16}\rangle$

$$\boxed{= \beta\langle 16|\hat{L}_z|16\rangle + 2\beta\langle 16|\hat{S}_z|16\rangle}$$

$\boxed{S_z}$ $\hat{S}_z = \sum_i^{occ} s_z(i)$ es un op. de "un" cuerpo

$$\hat{S}_z|16\rangle = \left(\sum_i^{occ} m_s(i)\right)|16e\rangle =$$

son todos +, − hasta el 7 inclusive, luego 8 y 9 aportan 1/2 cada uno

$\Rightarrow \sum m_s(i) = 1/2 + 1/2 = 1 \quad \boxed{S_z = 1}$

¿Y S^2?

$$\hat{S}^2 = \hat{S}_-\hat{S}_+ + \hat{S}_z + \hat{S}_z^2 \qquad S_z = 1,\ S_z^2 = 1$$

$$\hat{S}_-\left(\hat{S}_+ |1\bar{1}2\bar{2}3\bar{3}4\bar{4}5\bar{5}6\bar{6}7\bar{7}8\rho\rangle\right) = 0$$

pues $\hat{S}_+$ no puede subir ninguno pues o repiten o no se pueden subir más.

• $\Rightarrow \hat{S}^2|16e\rangle = 2|16e\rangle \Rightarrow \boxed{S = 1}$

Ahora L_z

Pero antes un poco de teoría:

$\hat{L}_z = \sum_i^{oc} \hat{l}_z(i)$ es un op. de un cuerpo.

• $\Rightarrow \hat{L}_z|16e\rangle = |l_z(1)\bar{1}\ldots8\rho\rangle + |1\,l_z(\bar{1})\ldots8\rho\rangle + \cdots$

recordar que $l_z\phi_{ns} = 0 \Rightarrow$ sólo darán $\neq 0$ los que tengan orbitales tipo 'p' ($l=1$)

Pero ojo!! pues $\hat{l}_z$ es a.t. de los Y_{lm} y no tengo s, p, d...

$$\langle \bar{r} | \bar{p}_x \rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} R(r) \left(Y_{11} - Y_{1-1} \right)$$

$$\langle \bar{r} | \bar{p}_y \rangle = \frac{i}{\sqrt{2}} R(r) \left(Y_{11} + Y_{1-1} \right)$$

$$\langle \bar{r} | \bar{p}_z \rangle = R(r)\, Y_{10}$$

ver que

$$\left.\begin{aligned} \hat{l}_z |\bar{p}_x\rangle &= -i |p_y\rangle \\ \hat{l}_z |\bar{p}_y\rangle &= i |p_x\rangle \\ \hat{l}_z |p_z\rangle &= \hat{l}_z |s\rangle = 0 \end{aligned}\right]$$

y ahora si....

$$|1\rangle = a\left(\phi_{1s}^A + \phi_{1s}^B\right) + b\left(\phi_{2s}^A - \phi_{2s}^B\right) - c\left(\phi_{2p_z}^A + \phi_{2p_z}^B\right)$$

$$\hat{l}_z |1\rangle = 0 \,!$$

Empiezo a ver algo recién cuando tenga un p_y, p_x

(...)

$$|6\rangle = a\left(2p_x^A + 2p_x^B\right)$$

$$l_z|6\rangle = a(-i)\left(2p_y^A + 2p_y^B\right) = (-i)|7\rangle \quad \text{repite}$$

$$\Rightarrow |1\bar{1}\cdots(l_z 6)\bar{6}7\bar{7}8\rho\rangle = (-i)|1\bar{1}\cdots 7\bar{6}7\bar{7}8\rho\rangle = 0$$