

Valor medio entre DS

sea un DS (formado por espín-orbitales ortogonales):

$$|\Psi\rangle = |\chi_a, \chi_b, \dots, \chi_f\rangle = |a, b, c, \dots, f\rangle \quad (1)$$

se tiene :

$$\langle \Psi | \hat{O}_1 | \Psi \rangle = \sum_{m \in \Psi} \langle m | \hat{h} | m \rangle = \sum_{m \in \Psi} h_{mm} \quad (2)$$

$$\langle \Psi | \hat{O}_2 | \Psi \rangle = \sum_{(m < n) \in \Psi} \langle m, n | | m, n \rangle \quad (3)$$

donde se define:

$$\langle a, b | c, d \rangle = \langle \chi_a, \chi_b |_{ph} \frac{1}{|\bar{r}_1 - \bar{r}_2|} | \chi_c, \chi_d \rangle_{ph} \quad y \quad \langle a, b | | c, d \rangle \equiv \langle a, b | c, d \rangle - \langle a, b | d, c \rangle \quad (4)$$

DS que difieren en un espín-orbital

$$|\Psi\rangle = |a, b, c, \dots, f\rangle$$

$$|\Psi'\rangle = |a', b, c, \dots, f\rangle \equiv |\Psi_a^{a'}\rangle \quad (4)$$

entonces:

$$\langle \Psi' | \hat{O}_1 | \Psi \rangle = \langle a' | \hat{h} | a \rangle = h_{a'a} \quad (5)$$

$$\langle \Psi' | \hat{O}_2 | \Psi \rangle = \sum_{m \in (\Psi \text{ y } \Psi')} \langle a', m | | a, m \rangle \quad (6)$$

DS que difieren en dos espín-orbitales

$$|\Psi\rangle = |a, b, c, \dots, f\rangle$$

$$|\Psi''\rangle = |a', b', c, \dots, f\rangle \equiv |\Psi_{ab}^{a'b'}\rangle \quad (7)$$

entonces:

$$\langle \Psi'' | \hat{O}_1 | \Psi \rangle = 0 \quad (8)$$

$$\langle \Psi'' | \hat{O}_2 | \Psi \rangle = \langle a', b' | | a, b \rangle \quad (9)$$

DS que difieren en más de dos espín-orbitales

$$\langle \Psi''' | \hat{O}_1 | \Psi \rangle = 0 \quad (5)$$

$$\langle \Psi''' | \hat{O}_2 | \Psi \rangle = 0 \quad (6)$$

Otras expresiones útiles:

- $\hat{J}_\pm |j, m\rangle = \sqrt{j(j+1) \mp m} |j, m \pm 1\rangle$
- $\hat{J}^2 = \hat{J}_- \hat{J}_+ + \hat{J}_z + \hat{J}_z^2 = \hat{J}_+ \hat{J}_- - \hat{J}_z + \hat{J}_z^2$