

Tarea 7

Operadores en mecánica cuántica

Operador Hamiltoniano

Estructura de la Materia

Dra. Martha M. Flores Leonar

Semestre 2018-2

En mecánica cuántica se requiere encontrar las soluciones a la ecuación de Schrödinger independiente del tiempo:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

En esta ecuación \hat{H} es el operador Hamiltoniano. Para un sistema de N núcleos y n electrones la forma del hamiltoniano \hat{H} es la siguiente:

$$\hat{H} = \hat{T} + \hat{V}$$
$$\hat{H} = -\sum_{I=1}^N \frac{\hbar^2}{2M_I} \nabla_I^2 - \sum_{i=1}^n \frac{\hbar^2}{2m_i} \nabla_i^2 + \sum_{I=1}^N \sum_{J>I}^N \frac{kZ^2e^2}{|R_I - R_J|} - \sum_{I=1}^N \sum_{i=1}^n \frac{kZe^2}{|R_I - r_i|} + \sum_{i=1}^n \sum_{j>i}^n \frac{ke^2}{|r_i - r_j|}$$

1. Escribe el Hamiltoniano molecular para los siguientes sistemas:
 - a) Be
 - b) O
 - c) Agua: H_2O
 - d) Benceno: C_6H_6
2. Considerando la aproximación de Born-Oppenheimer (aproximación de núcleos fijos), escribe el Hamiltoniano electrónico de los sistemas mencionados anteriormente:
 - a) Be
 - b) O
 - c) Agua: H_2O
 - d) Benceno: C_6H_6