

```
AJMIC=6.5D0; AI1=73. AI2=68. AI3=3. V=8.1 gamma=15
*****
r.m.s. = .10319721
*****
```

Parametri pentru evaluarea numerică

Formule utilizate:

$$E_{TS02}^{exc}[I] = H_{min}[I] + \frac{1}{2}\Omega_1[I] + \frac{1}{2}\Omega_2[I] - E_0$$

$$I \in TS02: \frac{27}{2}, \frac{31}{2}, \frac{35}{2}, \dots, \frac{91}{2}$$

$$E_0 = H_{min}[6.5] + \frac{1}{2}\Omega_1[6.5] + \frac{1}{2}\Omega_2[6.5] = -8.03 + \frac{1}{2}0.358 + \frac{1}{2}4.100 = -5.80339$$

-8.03298

Exemple numerice pentru $I_1 = \frac{27}{2} = 13.5 \in TS02$

$I_2 = \frac{31}{2} = 15.5$

$$\Omega_1[I_1] = 0.523317$$

$$\Omega_2[I_1] = 4.28728$$

$$\Omega_1[I_2] = 0.561973$$

$$\Omega_2[I_2] = 4.34013$$

(A)

→ Avem concordanță OK la $\{\Omega_1, \Omega_2\}$!

$$H_{\min} [I_1] = -7.08829$$

$$H_{\min} [I_2] = -6.69509$$

(B)

$$(A), (B) \Rightarrow E_{TSB2}^{exc} [I_1] = (-7.088 + 0.261 + 2.143) + 5.803 = 1.1204$$

$$E_{TSB2}^{exc} [I_2] = (-6.695 + 0.280 + 2.170) + 5.803 = 1.559$$

I_1	13.50	50296907	4.26077895	1.32040025	1.33960000
I_2	15.50	54295806	4.31373441	1.75935207	1.74700000

Rezultatele din e-mail-ul dvs.

Nu avem concordanță pentru E_{TSB2}^{exc} !

Revenim la TSB1 :

$$Caz : I_0 = \frac{17}{2} = 8.5 \in TSB1$$

↓

Avem concordanță la $E_{TSB1}^{exc} [I_0]$! (OK)

$$E_{TSB1}^{exc} [I] = H_{\min} [I] + \frac{1}{2} \Omega_1 [I] + \frac{1}{2} \Omega_2 [I] - E_0$$

//



Din faptul ca avem concordanta perfecta la TSD1, ar rezulta faptul ca formulele pentru Omegi cat si pentru H_{min} pe care le-am scris, sunt consistente pentru orice grup de spini I si parametrii de fit. Additional, din faptul ca Omegile sunt identice pentru toti spinii benzilor, nu vad de ce ar aparea alte valori la energiile de excitatie TSD2, altele decat cele marcate numeric mai sus (ma refer la 1.1204 si 1.559 pentru primii doi spini din TSD2).

Repat: formula pentru H_{min} este cea din calculele alezimate, si anume:

$$H_{min} = g(I, A_1, A_2, A_3, V, \varphi; j = \frac{13}{2}) = (A_2 + A_3) \frac{I+j}{2} + A_1 \cdot \left[(I-j)^2 - V \cdot h(\varphi) \right]$$

$$\text{Unde } h(\varphi) = \frac{2j-1}{j+1} \left(\sin \varphi + \frac{\pi}{6} \right)$$