Operadores de 2 cuerpos

$$\hat{O}_2 = \sum_{i,j>i}^{N} \hat{g}(i,j) \qquad \text{por ejemplo } \hat{g}(i,j) = \frac{1}{r_{ij}}$$

En este caso, $\frac{1}{|\vec{r}_{ij}|}$ es simétrico.

(dim 3)

$$\hat{O}_2 = \hat{g}(1,2)\,\mathbb{1}(3) + \hat{g}(1,3)\,\mathbb{1}(2) + \mathbb{1}(1)\,\hat{g}(2,3)$$

(dim 2)

$$\hat{O}_2 = \hat{g}(1,2)$$

Veamos $\langle O_2 \rangle$ para un estado de 2 partículas.

$$|ab\rangle^{(AS)} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_a(1)\phi_b(2) - \phi_b(1)\phi_a(2)\right)$$

$$\langle ab|\hat{O}_2|ab\rangle = \int \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_a^*(1)\phi_b^*(2) - \phi_b^*(1)\phi_a^*(2)\right) \cdot$$

$$\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\hat{g}(1,2)\,\phi_a(1)\phi_b(2) - \hat{g}(1,2)\,\phi_b(1)\phi_a(2)\right) d_1 d_2$$

(distribuyo)

$$\langle O_2 \rangle = \frac{1}{2}\left(\cdots\right)$$

$\langle O_2 \rangle = \frac{1}{2}(\ldots)$

Scanned with CamScanner

$$\text{I)} \int d_1 d_2\, \phi_a^*(1)\, \phi_b^*(2)\, \frac{1}{r_{12}}\, \phi_a(1)\, \phi_b(2) \qquad = \quad e_1 \leftrightarrow e_2$$

$$- \int d_1 d_2\, \phi_a^*(1)\, \phi_b^*(2)\, \hat{g}(1,2)\, \phi_b(1)\, \phi_a(2) \qquad = \quad e_1 \leftrightarrow e_2$$

$$\langle ab | ba \rangle$$

$$- \int d_1 d_2\, \phi_b^*(1)\, \phi_a^*(2)\, \hat{g}(1,2)\, \phi_a(1)\, \phi_b(2)$$

$$\phi_b(2)\, \phi_a(1) \qquad\qquad \phi_a(2)\, \phi_b(1) \rightarrow ab|ba$$

$$+ \int d_1 d_2\, \phi_b^*(1)\, \phi_a^*(2)\, g(1,2)\, \phi_b(1)\, \phi_a(2)$$

$$(d_1 \leftrightarrow d_2)$$

$$\phi_b^*(2)\, \phi_a^*(1)\, g(2,1)\, \phi_b(2)\, \phi_a(1)$$

$$= \phi_a^*(1)\, \phi_b^*(2)\, g(12)\, \phi_a(1)\, \phi_b(2)$$

$$\Rightarrow \langle O_2 \rangle = \frac{1}{2} \Big[2 \int d_1 d_2\, a(1) b(2)\, g(1,2)\, \boxed{a(1) b(2)}$$

$$- 2 \int d_1 d_2\, a(1)\, b(2)\, g(1,2)\, \boxed{b(1)\, a(2)} \Big]$$

$$\langle O_2 \rangle = \langle ab | ab \rangle - \langle ab | ba \rangle$$

Scanned with CamScanner

Notación (y no tanto...)

$$\langle ab|ab\rangle = \int d_1 d_2\, \phi_a^*(1)\, \phi_b^*(2)\, g(1,2)\, \phi_a(1)\, \phi_b(2)$$

$$= \int d_1 d_2\, |\phi_a(1)|^2 \frac{1}{r_{12}} |\phi_b(2)|^2 \equiv J_{ab}$$

$$\langle ab|ba\rangle = \int d_1 d_2\, \phi_a^*(1)\, \phi_b^*(2) \frac{1}{r_{12}}\, \phi_b(1)\, \phi_a(2)$$

$$\equiv K_{ab}$$

J_{ab} es como interacción de coulomb entre las nubes $|\phi_a(1)|^2$ y $|\phi_b(2)|^2$

K_{ab} viene del hecho de que la función de onda es antisimétrica ante el intercambio de 2 part. no tiene un análogo "clásico".

$$\langle \hat{O}_2\rangle = \langle ab|\hat{O}_2|ab\rangle = \langle ab|\,|ab\rangle$$

$$\langle ab||ab\rangle \equiv \langle ab|ab\rangle - \langle ab|ba\rangle$$

$$J_{aa} - K_{aa}$$

Scanned with CamScanner