Problema 2

Sea una base no ortogonal $\{|x_i\rangle\} / S_{ij} = \langle x_i | x_j\rangle$

S_{ij} elementos de matriz ij del overlap $\mathbb{S}$

(2.1) Propongo una manera de hacer la base $\{|x_i\rangle\}$ ortogonal: Gram - Schmidt

- $$|\phi_1\rangle = |x_1\rangle$$

$$|\phi_2\rangle = |x_2\rangle - \frac{\overset{S_{12}}{\langle x_1 | x_2\rangle}}{\langle x_1 | x_1\rangle} |x_1\rangle$$

$\vdots$

$$|\phi_m\rangle = |x_m\rangle - \sum_{i=1}^{n-1} \frac{\langle x_i | x_m\rangle}{\langle x_i | x_i\rangle} |x_i\rangle$$

- falta normalizar, ver que $\langle \phi_2 | \phi_1\rangle = 0$

ojo en gral $\langle \phi_i | \phi_j\rangle$ es difícil pues algún $|\phi_k\rangle$ se construye a partir de los anteriores $\Rightarrow$ no hay una expresión genérica para $\langle \phi_k | \phi_e\rangle = \delta_{ke}$

$\Downarrow$ so, ...

other method

ortogonalización simétrica

$$S_{ij} = \int d^3r \; \chi_i^*(r) \, \chi_j(r) \neq \delta_{ij}$$

Sea $X = S^{-1/2}$ / X ortogonaliza la base $\{|\chi_i\rangle\}$

Supongo $|\chi_i\rangle \in \mathbb{R}$ (+fácil) no ortogonal y buscamos X

$$\underset{\text{no ortog}}{|\chi_i\rangle} \longrightarrow \underset{\text{ortog}}{|\phi_i\rangle} = \sum_k B_{ik} |\chi_k\rangle$$ (Propongo un cambio de base en gral)

veamos que condición debe cumplir $\mathbb{B}$ para que

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \delta_{ij}$$

$$\langle \phi_i | \phi_j \rangle = \left(\sum_e B_{ie} \langle \chi_e | \right) \left(\sum_k B_{jk} |\chi_k\rangle \right)$$

Asumo $\mathbb{B} = \mathbb{B}^\dagger = \mathbb{B}^t$

$$= \sum_{e,k} B_{ie} B_{jk} \underbrace{\langle \chi_e | \chi_k \rangle}_{S_{ek}} = \sum_{e,k} B_{ie} S_{ek} B_{kj}$$

$$\equiv (\mathbb{B} \mathbb{S} \mathbb{B})_{ij} \text{ (y quiero que) } = \delta_{ij}$$

$$\Rightarrow \mathbb{B} \mathbb{S} \mathbb{B} = \mathbb{1}$$ o sea $\mathbb{B}$ diagonaliza $\mathbb{S}$

$$\Rightarrow \mathbb{B} = \mathbb{S}^{-1/2} \Rightarrow |\phi_i\rangle = \sum_e (\mathbb{S}^{-1/2})_{ie} |\chi_e\rangle$$