Notas del problema 4 (y notación)

Para 2 electrones, el estado de Hartree es:

$$|\Psi\rangle^{HP} = |\phi_a(e_1)\,\phi_b(e_2)\rangle$$

$$A|\Psi\rangle^{HP} = |\Psi\rangle^{DS} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_a\phi_b - \phi_b\phi_a\right)$$

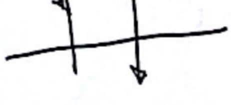
En criollo, $|\Psi\rangle^{DS} = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_a(e_1)\,\phi_b(2) - \phi_b(e_1)\,\phi_a(2)\right]$

$$\equiv |\phi_a\phi_b\rangle \equiv |ab\rangle$$

y meto el spin, $\phi_a\alpha(\omega) \equiv \phi_a \equiv a$

$$\phi_a\beta(\omega) \equiv \bar{\phi}_a \equiv \bar{a}$$

$$\Rightarrow |a\bar{a}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\phi_a(1)\,\bar{\phi}_a(2) - \bar{\phi}_a(1)\,\phi_a(2)\right)$$

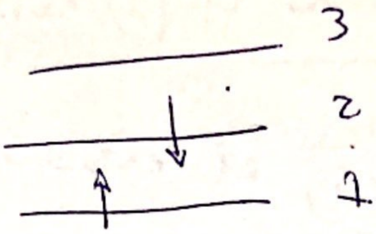
En un esquema de niveles  ϕ_a

Nota En general $\hat{A} = \sum_{\alpha} (-1)^{\alpha}\,\hat{P}_{\alpha}\ (1/\sqrt{m!})$

$\hat{A}$, hermítico y $\hat{A}^2 = \sqrt{m!}\ \hat{A}$

$$\boxed{|DS\rangle = \hat{A}\,|HP\rangle}$$

Notación



$|1\bar{2}\rangle$

Repaso de $\hat{A}$

$|HP\rangle$ producto de Hartree

$$|DS\rangle = \hat{A}\,|HP\rangle$$

$$\hat{A} = \frac{1}{\sqrt{N!}} \sum_{\alpha} (-1)^{\alpha}\, \hat{\mathbb{P}}_{\alpha}$$

α corre a todas las posibles permut. $1, 2, \ldots N$ part

$$\hat{A}^2 = \sqrt{N!}\,\hat{A}$$

Problema 4

$\boxed{\Theta_1}$

un estado de 2 partículas $\Rightarrow |DS\rangle = |ab\rangle$

$$|ab\rangle^{DS} = \frac{|ab\rangle^{HP} - |ba\rangle^{PH}}{\sqrt{2}} \equiv \hat{A}\,|ab\rangle^{PH}$$

$$[\hat{\Theta}_1, \hat{A}] = 0 \Rightarrow \hat{\Theta}_1 A|ab\rangle^{HP} = \hat{A}\,\hat{\Theta}_1|ab\rangle^{HP}$$

Porque lo hago con un $|HP\rangle$. Podría poner un $|DS\rangle$

recordar que $\hat{A}^2 \sim \hat{A}$ $\left(\hat{A}^2 = \sqrt{m!}\,\hat{A}\right)$

$$\hat{\Theta}_1|ab\rangle^{PH} = |(\Theta_1\hat{a})b\rangle + |a(\hat{\Theta}_1 b)\rangle$$

$$\equiv |a'b\rangle + |ab'\rangle$$

$$\hat{\Theta}_1\hat{A}|ab\rangle^{HP} = \hat{\Theta}_1\left[\frac{|ab\rangle^{HP} - |ba\rangle^{HP}}{\sqrt{2}}\right] \equiv \hat{\Theta}_1|ab\rangle^{DS}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2}}\left[|a'b\rangle + |ab'\rangle - |b'a\rangle - |ba'\rangle\right]$$

$$= |a'b\rangle^{DS} + |ab'\rangle^{DS}$$

$$-\hat{A}\hat{\theta}_1|ab)^{HP} = \hat{A}\left(|a'b)^{HP} + |ab')^{HP}\right)$$

$$= |a'b)^{DS} + |ab')^{DS}$$

Moraleja, escribimos siempre $|ab)^{DS} \equiv |ab)$ y al operar sobre un $|DS)$, es como si fuera un $|HP)$.

Propiedades $\quad [\hat{\theta}_1, \hat{A}] = 0$

$$[\hat{\theta}_2, \hat{A}] = 0$$

y como $\hat{A} = \sum_\alpha (-1)^\alpha \hat{\mathbb{P}}_\alpha$

$$\Rightarrow \quad [\hat{\theta}_1, \hat{\mathbb{P}}_\alpha] = [\hat{\theta}_2, \hat{\mathbb{P}}_\alpha] = 0$$