

A redukált resolvens alkalmazása

1

A redukált resolvens

Definiáljunk egy egyrészfelbontást a perturbálatlan probléma megoldásait adó $|\Psi_i^0\rangle$ függvények sorában

$$\hat{P} + \hat{Q} = \hat{1}$$

ahol

$$\hat{P} = |\Psi_i^0\rangle\langle\Psi_i^0| \quad ; \quad \hat{Q} = \hat{1} - \hat{P} = \sum_{\substack{k \\ (k \neq i)}} |\Psi_k^0\rangle\langle\Psi_k^0|$$

és $|\Psi_i^0\rangle = a \hat{H}^0 |\Psi_i^0\rangle = E_i^0 |\Psi_i^0\rangle$ perturbálatlan probléma i -edik megoldása. (Feltételezzük, hogy ez nem degenerált.) A $|\Psi_k^0\rangle$ -k ($k \neq i$) a perturbálatlan probléma többi megoldásait adják.

Írjuk fel a $\hat{H}^0 - E_i^0$ (precízebben a $\hat{H}^0 - E_i^0 \hat{1}$) operátor spektrális felbontását \hat{H}^0 sajátfüggvényei segítségével:

$$\hat{H}^0 - E_i^0 = \sum_l (E_l^0 - E_i^0) |\Psi_l^0\rangle\langle\Psi_l^0|$$

valamint definiáljuk az \hat{R}^0 operátort spektrális felbontásán keresztül:

$$\hat{R}^0 = \sum_{\substack{k \\ (k \neq i)}} \frac{1}{E_k^0 - E_i^0} |\Psi_k^0\rangle\langle\Psi_k^0| \quad (\square)$$

Az önmegesésnél nemcsak megmondtuk biztosítva, hogy a nevező nem válhat 0-vá. (E_i^0 -ről feltehetjük, hogy nem degenerált.)

Határozzuk meg az $\hat{R}^0 (\hat{H}^0 - E_i^0)$ operátor-morzatot:

$$\hat{R}^0 (\hat{H}^0 - E_i^0) = \sum_{\substack{k \\ (k \neq i)}} \frac{1}{E_k^0 - E_i^0} |\Psi_k^0\rangle\langle\Psi_k^0| \sum_l (E_l^0 - E_i^0) |\Psi_l^0\rangle\langle\Psi_l^0| =$$

$$= \sum_k \sum_{(k \neq i)} \frac{E_i^0 - E_k^0}{E_k^0 - E_i^0} |\psi_k^0\rangle \underbrace{\langle \psi_k^0 | \psi_l^0 \rangle}_{\delta_{kl}} \langle \psi_l^0| = \sum_k \langle \psi_k^0 | \psi_k^0 \rangle = \hat{Q} \quad (2)$$

(0)

Tehát a $|\psi_i^0\rangle$ -ra ortogonális altérben \hat{R}^0 úgy viselkedik, mint a $(\hat{H}^0 - E_i^0)$ operátor inverze; ezt "redukált rezolvensnek" nevezzük.

A hullámfüggvény-korrekciók

Vessük be a hullámfüggvény és az energia perturbációs sorfejtését:

$$|\psi_i\rangle = |\psi_i^0\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j |\psi_i^{(j)}\rangle$$

$$E_i = E_i^0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_i^{(k)} \quad (*)$$

és alkalmazzuk a "közbülső" ("intermediárius") normálást:

$$\langle \psi_i^0 | \psi_i^0 \rangle = 1$$

$$\langle \psi_i^0 | \psi_i^{(j)} \rangle = 0 \quad j \geq 1$$

Ez utóbbi követelményből \rightarrow mivel $|\psi_i^0\rangle$ a perturbálatlan probléma megoldása (azaz $\hat{H}^0 |\psi_i^0\rangle = E_i^0 |\psi_i^0\rangle$ és $\langle \psi_i^0 | \hat{H}^0 = E_i^0 \langle \psi_i^0 |$):

$$\langle \psi_i^0 | \hat{H}^0 | \psi_i^0 \rangle = E_i^0$$

$$\langle \psi_i^0 | \hat{H}^0 | \psi_i^{(j)} \rangle = 0$$

Behelyettesítjük a (*) sorfejtéseket a perturbált probléma Schrödinger-egyenletébe:

$$(\hat{H}^0 + \lambda \hat{W}) (|\psi_i^0\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j |\psi_i^{(j)}\rangle) =$$

$$= (E_i^0 + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_i^{(k)}) (|\psi_i^0\rangle + \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^l |\psi_i^{(l)}\rangle) \quad (**)$$

Azért derül:

$$(\hat{H}^0 - E_i^0) \left(|\Psi_i^0\rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j |\Psi_j^0\rangle \right) = \quad (3)$$

$$= \left(-\lambda \hat{W} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_i^{(k)} \right) \left(|\Psi_i^0\rangle + \sum_{l=1}^{\infty} \lambda^l |\Psi_i^{(l)}\rangle \right)$$

$(\hat{H}^0 - E_i^0) |\Psi_i^0\rangle = 0$, ezért a baloldalon az első tag eltűnik. A jobboldalon a $-\lambda \hat{W}$ és az l . rendű ömef. szorzatát tartalmazó tagban bevezetjük a $j = l+1$ ömef. indexet ($l = j-1$), ill. a két ömef. szorzatát tartalmazó tagban k és l helyett átírjuk a $j = k+l$ és k indexek szerinti ömef. számra ($l = j-k$). Kapjuk:

$$(\hat{H}^0 - E_i^0) \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j |\Psi_i^{(j)}\rangle = -\lambda \hat{W} |\Psi_i^{(j)}\rangle -$$

$$- \sum_{j=2}^{\infty} \lambda^j \hat{W} |\Psi_i^{(j-1)}\rangle + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_i^{(k)} |\Psi_i^{(0)}\rangle + \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{l=1}^{j-1} \lambda^j E_i^{(k)} |\Psi_i^{(j-k)}\rangle$$

Alkalmazunk ennek mindkét oldalára az \hat{R}^0 operátort, kihasználva a (0) ömef. függést, valamint azt, hogy $\hat{R}^0 |\Psi_i^0\rangle = 0$. A közbülső normálisból következik, hogy $\hat{Q} |\Psi_i^{(j)}\rangle = |\Psi_i^{(j)}\rangle$ ($j \geq 1$). Kapjuk:

$$\sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j |\Psi_i^{(j)}\rangle = -\lambda \hat{R}^0 \hat{W} |\Psi_i^0\rangle - \sum_{j=2}^{\infty} \lambda^j \hat{R}^0 \hat{W} |\Psi_i^{(j-1)}\rangle +$$

$$+ \sum_{j=2}^{\infty} \sum_{k=1}^{j-1} \lambda^j E_i^{(k)} \hat{R}^0 |\Psi_i^{(j-k)}\rangle$$

A két oldalon egyenlővé tessük egymással a λ különböző hatványai mellett szereplő koefficienseket:

A λ^1 melletti koefficiensek összehasonlítása alapján:

$$|\Psi_i^{(1)}\rangle = -\hat{R}^0 \hat{W} |\Psi_i^0\rangle$$

λ^0 ($j \geq 2$) esetén:

(4)

$$|\Psi_i^{(j)}\rangle = -\hat{R}^0 \hat{U} |\Psi_i^{(j-1)}\rangle + \sum_{k=1}^{j-1} E_i^{(k)} \hat{R}^0 |\Psi_i^{(j-k)}\rangle$$

Ha eszünkbe a kifejtéséskbe bevezetett \hat{R}^0 (□) definícióját, könnyen megkapjuk a $c_{ip}^{(j)}$ perturbációs kifejtési koefficiensek kifejtését.

Kapjuk az elsőrendű hullámfüggvényre:

$$|\Psi_i^{(1)}\rangle = -\hat{R}^0 \hat{U} |\Psi_i^0\rangle = - \sum_{j \neq i} \frac{|\Psi_j^0\rangle \langle \Psi_j^0 | \hat{U} | \Psi_i^0 \rangle}{E_j^0 - E_i^0} = \sum_{j \neq i} \frac{-W_{ji}}{E_j^0 - E_i^0} |\Psi_j^0\rangle$$

- a jól ismert kifejtés. Hasonlóan kapjuk $j \geq 2$ esetén:

$$|\Psi_i^{(j)}\rangle = \sum_{p \neq i} c_{ip}^{(j)} |\Psi_p^0\rangle = -\hat{R}^0 \hat{U} |\Psi_i^{(j-1)}\rangle + \sum_{k=1}^{j-1} E_i^{(k)} \hat{R}^0 |\Psi_i^{(j-k)}\rangle =$$

$$= - \sum_{p \neq i} \frac{|\Psi_p^0\rangle \langle \Psi_p^0 | \hat{U} \sum_{e \neq i} c_{ie}^{(j-1)} |\Psi_e^0\rangle}{E_p^0 - E_i^0} +$$

$$+ \sum_{k=1}^{j-1} E_i^{(k)} \sum_{p \neq i} \frac{|\Psi_p^0\rangle \langle \Psi_p^0 |}{E_p^0 - E_i^0} \sum_{e \neq i} c_{ie}^{(j-k)} |\Psi_e^0\rangle =$$

$$= - \sum_{p \neq i} \sum_{e \neq i} |\Psi_p^0\rangle \frac{W_{pe} c_{ie}^{(j-1)}}{E_p^0 - E_i^0} +$$

$$+ \sum_{p \neq i} \sum_{e \neq i} |\Psi_p^0\rangle \delta_{pe} \frac{1}{E_p^0 - E_i^0} \sum_{k=1}^{j-1} E_i^{(k)} c_{ie}^{(j-k)} =$$

$$= \sum_{p \neq i} |\Psi_p^0\rangle \frac{1}{E_p^0 - E_i^0} \left\{ - \sum_{e \neq i} W_{pe} c_{ie}^{(j-1)} + \sum_{k=1}^{j-1} E_i^{(k)} c_{ip}^{(j-k)} \right\}$$

- visszakapjuk a $c_{ip}^{(j)}$ -re "algebrai" úton levezetett kifejtést.

Az energiahonekváció

Sorozzuk meg (xx) -ot $\langle \Psi_i^0 |$ -val, figyelembe véve a közbülső normálástól következő önműködésüket:

$$\cancel{E_i^0} + \lambda \langle \Psi_i^0 | \hat{W} | \Psi_i^0 \rangle + \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^{j+1} \langle \Psi_i^0 | \hat{W} | \Psi_i^{(j)} \rangle, \quad (5)$$

$$= \cancel{E_i^0} + \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_i^{(k)}$$

A baloldali összeget átírjuk a $j+1=k$ összegző indexre ($j=k-1$):

$$\lambda \langle \Psi_i^0 | \hat{W} | \Psi_i^0 \rangle + \sum_{k=2}^{\infty} \lambda^k \langle \Psi_i^0 | \hat{W} | \Psi_i^{(k-1)} \rangle = \sum_{k=1}^{\infty} \lambda^k E_i^{(k)}$$

Egyenlőség téve egymással a λ különböző hatványai mellett nemleges koefficienseket:

$$E_i^{(1)} = \langle \Psi_i^0 | \hat{W} | \Psi_i^0 \rangle = W_{ii} \quad - \text{az ismert eredeti}$$

$$E_i^{(k)} = \langle \Psi_i^0 | \hat{W} | \Psi_i^{(k-1)} \rangle \quad (k \geq 2)$$

Behelyettesítve $|\Psi_i^{(k-1)}\rangle$ kifejtését a "nullvektorok" függvények segítségével, írhatjuk az "algebrai" úton levezetett kifejezést:

$$E_i^{(k)} = \langle \Psi_i^0 | \hat{W} | \sum_{\substack{p \\ (p \neq i)}} c_{ip}^{(k-1)} \Psi_p^0 \rangle = \sum_{\substack{p \\ (p \neq i)}} c_{ip}^{(k-1)} W_{ip} \quad (k \geq 2)$$