P, Q формализм для неоднородного ур-ния
Вопрос о нормировке

Восстановим логику P, Q формализма. Начнем с ур-ния Шр-ра:

$$H\Psi = E\Psi \qquad (1)$$

С помощью $I = P + Q$ разложения получаем систему

$$\begin{cases} PHP\varphi + PHQ\chi = E\varphi & (2a) \\ QHQ\chi + QHP\varphi = E\chi & (2b) \\ \Psi = P\Psi + Q\Psi \equiv \varphi + \chi & (2c) \end{cases}$$

Формальное решение (2b):

$$\chi = \frac{1}{E - QHQ} QHP\chi \equiv R(E) QHP\chi \qquad (3)$$

Подставляя в (2a) получаем

$$\left[PHP + PHQ R(E) QHP\right]\varphi = E\varphi \qquad (4)$$

Нормировка (2c) записывается через φ так:

$$\langle\Psi|\Psi\rangle = 1 = \langle\varphi|\, 1 + PHQ R^2(E) QHP\,|\varphi\rangle \qquad (5)$$

Если ввести оператор

$$\Sigma(E) = PHQ R(E) QHP \qquad (6)$$

то (5) переписывается так:

$$\langle\varphi|\, 1 - \frac{\partial}{\partial E}\Sigma(E)\,|\varphi\rangle = 1 \qquad (7)$$

5/03/10-2

Переходим к неоднородному ур-нию

$$(E-H)\Psi = D\psi \qquad (8)$$

Снова вводим разложение

$$\begin{cases} \Psi = P\Psi + Q\Psi \equiv \eta + \zeta & (9a) \\ (E-PHP)\eta - PHQ\zeta = PDP\varphi + PDQ\chi & (9в) \\ (E-QHQ)\zeta - QHP\eta = QDQ\chi + QDP\varphi & (9c) \end{cases}$$

Решаем (9в):

$$\zeta = R(E)\left[QDQ\chi + QDP\varphi + QHP\eta\right] \qquad (10)$$

Подставляем в (9а):

$$(E-PHP)\eta - PHQR(E)\left[QDQ\chi + QDP\varphi + QHP\eta\right] = PDP\varphi + PDQ\chi$$

$$\left[E-PHP-PHQR(E)QHP\right]\eta = PDP\varphi + PDQ\chi + PHQR(E)QDQ\chi + PHQR(E)QDP\varphi$$

$$\left[E-PHP-\Sigma(E)\right]\eta = \left[PDP + PDQR(E)QHP + PHQR(E)QDP\right]\varphi + PHQR(E)QDQR(E)QHP\varphi$$

Окончательно, получаем:

$$\boxed{\left[E-H_{eff}\right]\eta = \left[PDP + PDQR(E)QHP + PHQR(E)QDE + PHQRQDQRQHP\right]\varphi \qquad (11)}$$

То, что стоит в правой части (11) в точности совпадает с определением $\mathcal{D}_{eff}$. Поэтому, (11) имеет вид

$$\begin{cases} [E - H_{eff}(E)]\,\eta = \mathcal{D}_{eff}\,\varphi & (12a)\\ H_{eff} = PHP + \Sigma(E) & (12b) \\ \mathcal{D}_{eff} = P\mathcal{D}P + P\mathcal{D}Q\,R(E)QHP + PHQR(E)Q\mathcal{D}P + PHQR(E)\mathcal{D}R(E)QHP & (12c)\end{cases}$$

Нормировка η задается нормировкой φ (7), так что пока никакой неопределенности <u>не возникает</u>.

Уравнение (8) возникает при нахождении величин типа

$$\alpha = -2\langle\psi|\mathcal{D}|\Upsilon\rangle \qquad (13)$$

Посмотрим, как выразить α через решение (12a)

$$\langle\psi|\mathcal{D}|\Upsilon\rangle = \langle\varphi|P\mathcal{D}P|\eta\rangle + \langle\chi|Q\mathcal{D}P|\eta\rangle + \langle\varphi|P\mathcal{D}Q|\zeta\rangle + \langle\chi|Q\mathcal{D}Q|\zeta\rangle$$

Подставляем χ и ζ из (3) и (10):

$$= \langle\varphi|P\mathcal{D}P + PHQR(E)Q\mathcal{D}P|\eta\rangle + \langle\varphi|P\mathcal{D}QR(E)QHP|\eta\rangle$$
$$+ \langle\varphi|P\mathcal{D}QR(E)\mathcal{D}R(E)QHP|\varphi\rangle + \langle\varphi|P\mathcal{D}QR(E)Q\mathcal{D}P|\varphi\rangle$$
$$+ \langle\varphi|PHQR(E)\mathcal{D}R(E)QHP|\eta\rangle + \langle\varphi|PHQR(E)\mathcal{D}R(E)Q\mathcal{D}P|\varphi\rangle$$
$$+ \langle\varphi|PHQR(E)\mathcal{D}R(E)Q\mathcal{D}PR(E)QHP|\varphi\rangle$$

Выделяем члены, соотв. эфф. оператору D_{eff} (подчеркнуты волнистой):

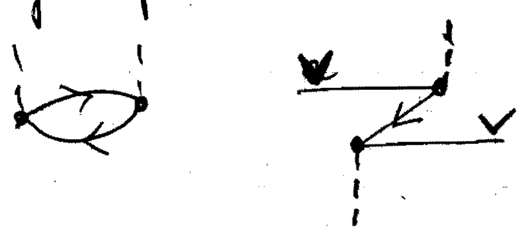
$$\langle\Psi|D|\Psi\rangle = \langle\varphi|D_{eff}|\eta\rangle + \qquad (14a)$$

$$+ \langle\varphi|PDQ\,R(E)\,QDP|\varphi\rangle + \langle\varphi|PDQR(E)DR(E)QHP|\varphi\rangle \qquad (14b)$$

$$+ \langle\varphi|PHQ\,R(E)DR(E)QDP|\varphi\rangle + \langle\varphi|PHQR(E)DR(E)DR(E)QHP|\varphi\rangle \qquad (14c)$$

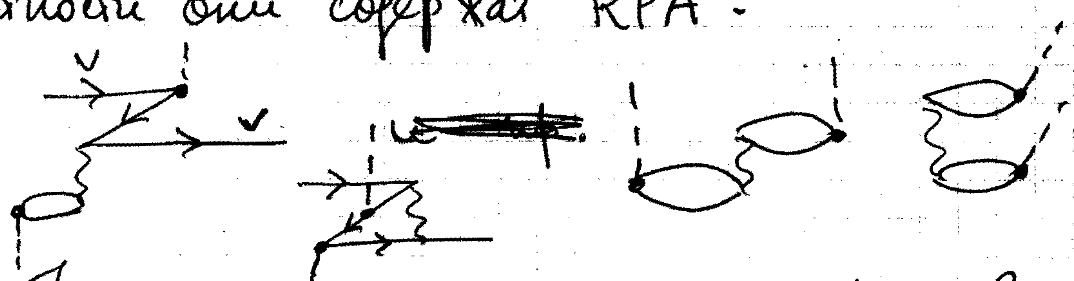
Видим, что ∃ четыре доп. члена кроме того, который выражается через решение неоднородного ур-ния (12a) и эфф. оператор D_{eff}. Отличительная особенность этих членов в том, что они не содержат проекторов P нигде, кроме крайних обкладок.

В низшем порядке (I член в (14в)) это сводится к двум диаграммам:



(15)

Остальные члены можно считать поправками к этим двум. В частности они содержат RPA:



(16)

Таким образом, эти члены нельзя представить в виде суммы по состояниям из **P**, тогда как член (14a) содержит хотя бы одну такую сумму (т.к. η - лежит в P).

Нормировка

(5/03/10-5)

Поляризуемость α находится из ур-ний (1), (8) и (13) с нормировкой $\langle\Psi|\Psi\rangle = 1$. Это однозначно определяет нормировку (7) для обеих обкладок φ в (12а) и (14а).

Это, однако, означает, что (14а) нельзя записать в виде:

$$
\begin{cases}
\langle\varphi|D_{eff}|\eta\rangle \neq \sum\limits_n \dfrac{|\langle\varphi_n|D_{eff}|\varphi\rangle|^2}{E-E_n}, & (17а)\\
\langle\varphi_n|1 - \dfrac{\partial}{\partial E}\Sigma(E)|\varphi_n\rangle = 1 & (17в)
\end{cases}
$$

Вместо этого имеем:

$$
\begin{cases}
\langle\varphi|D_{eff}|\eta\rangle = \sum\limits_n \dfrac{|\langle\varphi_n|D_{eff}|\varphi\rangle|^2}{E-E_n} & (18а)\\
\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle = 1 & (18в)
\end{cases}
$$

Возникает противоречие с тем, как мы считаем вал. амплитуды используя нормировку (17в), а не (18в).

<u>Может ли быть, что нормировка (17в) както учитывает отброшенные вклады из (14в) и (14с)?</u>

Казалось бы, ответ <u>нет</u>, т.к. отброшенные члены **не** представимы в виде (17а), где сумма идет по состояниям из P. С другой стороны, нормировка (17в) тоже не представима в виде суммы по P!

Запишем правую часть (17а) с учетом нормировки (17в) так:

$$\sum_n \frac{|\langle\varphi_n|D_{eff}|\varphi\rangle|^2}{E-E_n} = \sum_n \frac{|\langle\varphi_n|D_{eff}|\varphi\rangle|^2}{(E-E_n)\langle\varphi_n|\varphi_n\rangle} \approx \tag{19}$$

$$\approx \langle\varphi|PD_{eff}P\left[1+\frac{\partial}{\partial E}\Sigma\right]P\frac{1}{E-H_{eff}}PD_{eff}P|\varphi\rangle$$

$$= \langle\varphi|D_{eff}\left[1-PHQ\,R(E)^2QHP\right]\frac{1}{E-H_{eff}}D_{eff}|\varphi\rangle,$$

где мы (приближенно) заменили $\frac{1}{1-\partial_E\Sigma} \to 1+\partial_E\Sigma$

Таким образом, нормировочная поправка имеет вид:

$$-\langle\varphi|D_{eff}\,PHQ\,R^2(E)\,QHP\frac{1}{E-H_{eff}}D_{eff}|\varphi\rangle$$

$$= -\langle\varphi|D_{eff}\,PHQ\,R^2(E)\,QHP|\eta\rangle \tag{20}$$

То есть, нормировочная поправка выражается через η, тогда как члены (14в,с) - не выражаются. Знагит, различие в нормировках между (17) и (18) нельзя объяснить членами (14в,с)