# QM-2-L11-1404-2

Sunday, May 3, 2026 11:50 AM

## روشهای تقریبی برای حل مسائل مکانیک کوانتومی

تا کجا • مسائل حل پذیر مکانیک کوانتومی غیرنسبیتی :

a) نوسانگر هماهنگ
b) اتم هیدروژن (اتم‌های هیدروژن‌گونه)
c) ذره در حضور میدان مغناطیسی همگن و ثابت از زمان

معنی حل :
a) بدست آوردن طیف انرژی ذره (ویژه مقادیر انرژی)
b) بدست آوردن تابع موج (ویژه حالت انرژی)
وقتی $H$ وابسته به زمان نباشد

نکته : مسائل واقعی‌تر (جالب‌تر) معمولاً نمی‌توان بصورت دقیق حل کرد ← روشهای تقریبی

یکی از بهترین روشهای تقریبی (درصورت وجود شرایط لازم) روش اختلال

a) اختلال غیروابسته به زمان
- بدون تبهگنی
- با تبهگنی

b) اختلال وابسته به زمان

a) بهترین مثالها در این درس : حل اتم هیدروژن واقعی
- با در نظر گرفتن تصحیحات نسبیتی
- برهمکنش اسپین - مدار
- ساختار فوق ریز

b) بهترین مثالها در این درس و QM3 : برهمکنش نور (فوتون) با ماده (اتم‌ها) ← مثلاً لیزر

Light Amplification of spontaneous emission of radiation

Laser

---

سایر روشهای تقریبی :

$\boxed{\text{روش وردش} \leftarrow \text{اتم هلیوم} \quad \text{روش } WKB}$ ← روشهای عددی (numerical) در مقابل روش تحلیلی (analytical)

---

پایان مقدمه !

### اختلال غیروابسته به زمان

$$H = H_0 + \lambda H_1$$

- $H_0$ : هامیلتونی کامل نشده
- $\lambda$ : پارامتر اختلال (کمیت بدون بُعد) dimensionless
- $H_1$ : هامیلتونی اختلال

شرط لازم برای استفاده از روش اختلال ←

$$\boxed{\lambda \ll 1}$$

← غیروابسته بودن به زمان : $H_0$ و $H_1$ هر دو غیروابسته به زمان

← غیروابسته بودن به زمان : $H_0$ و $H_1$ هر دو غیر وابسته به زمان

← فرض : معادله ویژه مقداری $H_0\psi_0(\vec{x}) = E_0\psi_0(\vec{x})$ حل شده است.

- هم $E_0$ (طیف انرژی یا ویژه مقادیر انرژی) را داریم
- هم $\psi_0(\vec{x})$ (تابع حالت یا ویژه حالت انرژی) را داریم

← هدف : حل معادله ویژه مقداری

$H\psi(\vec{x}) = E\psi(\vec{x})$ یعنی

- $E$ ویژه مقدار انرژی
- $\psi(\vec{x})$ ویژه حالت انرژی $H$ همیلتونی

فرض ۱

← فرض ساده ساز :

در این توضیح روش حل مسئله (جهت ساده سازی) فرض می‌کنیم $E_0$ طیف گسسته است.

$E_0 \rightarrow E_n^{(0)}$ (معادله ویژه مقداری غیر اختلالی $H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$)

← روش حل : ✓ سری اختلال برای $E_n$

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + O(\lambda^3)$$

انرژی مختل نشده ← $E_n^{(0)}$

$\lambda E_n^{(1)}$ → تصحیح انرژی در مرتبه یک اختلال

✓ سری اختلال برای $|n\rangle$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda |n^{(1)}\rangle + \lambda^2 |n^{(2)}\rangle + O(\lambda^3)$$

ویژه حالت مختل نشده ← $|n^{(0)}\rangle$

$\lambda |n^{(1)}\rangle$ → تصحیح ویژه حالت انرژی در مرتبه یک اختلال

نکته ۱ : برای اینکه این سری‌های اختلال شانس همگرا شدن داشته باشند $\lambda \ll 1$ (شرط لازم برای استفاده از روش اختلال)

✓ با وجود این شرط سری‌های اختلال **معمولاً** همگرا نیستند. به همین دلیل معمولاً فقط چند جمله اول این سری‌ها در نظر گرفته می‌شوند

نکته ۲ : در حد $\lambda \to 0$ باید جواب نهایی به جواب‌های مسئله مختل نشده میل کند :

$$\lim_{\lambda \to 0} E_n = E_n^{(0)}$$

$$\lim_{\lambda \to 0} |n\rangle = |n^{(0)}\rangle$$

برای ادامه باید دو مورد را مستقل بررسی کنیم :

(a) اختلال غیر واگن (غیر تبهگن) مستقل از زمان (غیر تبهگنی را باید تعریف کنیم)

(b) اختلال واگن (تبهگن) مستقل از زمان

فرض ۲

(a) فرض : تبهگنی نداریم به این معنی که به ازای $\boxed{n \neq m}$ حتماً $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$

یا ← $|n^{(0)}\rangle \neq |m^{(0)}\rangle$

فرض ۳

$|n^{(0)}\rangle \neq |m^{(0)}\rangle$ یا

فرض ۳

فرض اضافه که می‌تواند در حل مسئله مفید باشد.

$$\langle n^{(0)}|n\rangle = 1$$

با این فرض به نتیجه زیر می‌رسیم

استفاده می‌کنیم از:

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

$$1 \overset{!}{=} \langle n^{(0)}|n\rangle = \underbrace{\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{=1} + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i \langle n^{(0)}|n^{(i)}\rangle$$

$$\Longrightarrow \boxed{\forall i \geq 1 \Rightarrow \langle n^{(0)}|n^{(i)}\rangle = 0}$$

ادامه می‌دهیم و $|n\rangle$ و $E_n$ را بدست بیاوریم:

قدم اول: پیشنهاد جواب برای $|n\rangle$ با استفاده از این واقعیت که $|n^{(0)}\rangle$ ها پایه کامل در فضای هیلبرت هستند
می‌توان هر حالت دیگر $|n\rangle$ را بر حسب آنها بسط داد:

Ansatz:

$$\boxed{|n\rangle = N(\lambda)\left\{ |n^{(0)}\rangle + \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}(\lambda)\, |k^{(0)}\rangle \right\}} \qquad (A)$$

این ضرایب تابع $\lambda$ هستند و می‌توان بسط آنها را بر حسب $\lambda$ در نظر گرفت

ویژه حالت $H^{(0)}$ (هامیلتونی مختل نشده)

$$\boxed{C_{nk}(\lambda) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i C_{nk}^{(i)}} \qquad (B)$$

مستقل از $\lambda$

به این ترتیب داریم

$$\boxed{|n\rangle = N(\lambda)\left\{ |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} |k^{(0)}\rangle + \lambda^2 \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(2)} |k^{(0)}\rangle + O(\lambda^3) \right\}} \qquad (C)$$

توجه: $N(\lambda)$ خود یک بسط بر حسب $\lambda$ دارد.

مهم: با توجه به این فرض که $\lim_{\lambda\to 0} |n\rangle = |n^{(0)}\rangle$ داریم

$$\boxed{\begin{aligned} &\lim_{\lambda\to 0} N(\lambda) = 1 \\ &\lim_{\lambda\to 0} C_{nk}(\lambda) = 0 \end{aligned}}$$

قدم دوم: تعیین $E_n^{(1)}$ با استفاده از پیشنهاد جواب برای $|n\rangle$ (رابطه B)

میدانیم

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$

$$(H_0 + \lambda H_1)\left(|n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} |k^{(0)}\rangle + O(\lambda^2)\right)$$

$$-\ (H_0+\lambda H_1)\left(|n^{(0)}\rangle+\lambda\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle+O(\lambda^2)\right)$$

جاگذاری سری‌های افزایش

$$=\left(E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+O(\lambda^2)\right)\left(|n^{(0)}\rangle+\lambda\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle+O(\lambda^2)\right)$$

• مقایسه دوطرف رتبه به رتبه در توان‌های $\lambda$ :

a) $H_0|n^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$

b) $$H_1|n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}\boxed{H_0|k^{(0)}\rangle}=E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}E_n^{(0)}|k^{(0)}\rangle$$

(رابطه a)

$= E_k^{(0)}|k^{(0)}\rangle$

از رابطه b داریم:

$$\boxed{E_n^{(1)}|n^{(0)}\rangle=H_1|n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}\left(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\right)|k^{(0)}\rangle}\qquad (D)$$

فرض کرده بودیم که تبهگنی نداریم (فرض ۲) یعنی اگر $k\neq n$ حتماً $E_n^{(0)}\neq E_k^{(0)}$

$\Rightarrow$ $0\neq E_k^{(0)}-E_n^{(0)}$ فرض

• دوطرف رابطه را بر $\langle n^{(0)}|$ تصویر می‌کنیم:

$$E_n^{(1)}\underbrace{\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{1}=\langle n^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}\left(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\right)\underbrace{\langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle}_{\delta_{nk}=0}$$

چون $n\neq k$

$\longrightarrow$ $$\boxed{E_n^{(1)}=\langle n^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}$$

$E_n^{(1)}$ تصحیح رتبه اول در مقدار انرژی.

---

قدم سوم: تعیین $|n^{(1)}\rangle$

دیدیم $|n\rangle=|n^{(0)}\rangle+\lambda|n^{(1)}\rangle+\dots$

با در نظر گرفتن بهنجارش (C)

$$|n\rangle=N(\lambda)\left(|n^{(0)}\rangle+\lambda\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle+O(\lambda^2)\right)$$

هدف: الف) تعیین $C_{nk}^{(1)}$ و $|n^{(1)}\rangle$

ب) تعیین $N(\lambda)$

الف) در قدم قبلی به رابطه زیر رسیدیم: (رابطه (D))

$$H_1|n^{(0)}\rangle+\sum C_{nk}^{(1)}\left(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\right)|k^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$

$$H_1|n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}\left(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\right)|k^{(0)}\rangle=E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$

این رابطه را در $\langle m^{(0)}|$ ضرب می‌کنیم که در آن $m\neq n$

$$\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}\left(E_k^{(0)}-E_n^{(0)}\right)\underbrace{\langle m^{(0)}|k^{(0)}\rangle}_{\delta_{mk}}=E_n^{(0)}\underbrace{\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{\delta_{mn}=0}$$

چون $n\neq m$

$$\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle+C_{nm}^{(1)}\left(E_m^{(0)}-E_n^{(0)}\right)=0$$

نتیجه برای $C_{nm}^{(1)}$ عبارت است از:

$$\boxed{C_{nm}^{(1)}=\frac{\langle m^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}}$$

نکته: از آنجایی که تبهگنی نداریم $E_n\neq E_m$ for $n\neq m$ $\Rightarrow$ در نتیجه مخرج این عبارت هیچگاه صفر نیست.

به یک ترم به مشخص دچار

$$|n\rangle=\underbrace{N(\lambda)}\left(|n^{(0)}\rangle+\lambda\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle+O(\lambda^2)\right)$$

باید طوری $N(\lambda)$ ریزش شود

$N(\lambda)$ هرچه باشد

$N(\lambda)=1+O(\lambda)$

$\lim_{\lambda\to 0}|n\rangle=|n^{(0)}\rangle$

چون

درضمن ما می‌خواهیم تصحیح $|n\rangle$ را تا مرتبه $\lambda$ نگه داشته باشیم،

یعنی $|n^{(1)}\rangle$ در رابطه

$$|n\rangle=|n^{(0)}\rangle+\lambda|n^{(1)}\rangle+\dots$$

به همین دلیل در رابطه بالا کافی است جمله اول در $N(\lambda)$ در نظر گرفته شود یعنی $N(\lambda)\simeq 1$

$$|n\rangle\approx|n^{(0)}\rangle+\boxed{\lambda\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}|k^{(0)}\rangle}=|n^{(0)}\rangle+\boxed{\lambda|n^{(1)}\rangle}$$

به این ترتیب خواهیم داشت

با $C_{nk}^{(0)}$ را می‌توان جایگزین کرد

$$\boxed{|n^{(1)}\rangle=\sum_{\substack{k\neq n\\k}}\frac{|k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}}$$

ب) تعیین $N(\lambda)$

$$|n\rangle=N(\lambda)\left(|n^{(0)}\rangle+\sum_{\substack{k\\k\neq n}}\overbrace{C_{nk}(\lambda)}^{\text{کل بسط}}|k^{(0)}\rangle\right)$$

همانطور که قبلاً فرض کرده بودیم $\langle n|n\rangle=1$

$k \neq n$

$\langle n|n\rangle = 1$ همانطور که قبلاً فرض کرده بودیم

$$\underbrace{\boxed{\langle n|n\rangle}}_{=1} = |N(\lambda)|^2 \Big( \underbrace{\boxed{\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}}_{=1} + \sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}(\lambda) \boxed{\langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle}$$

$n\neq k \Rightarrow \langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle = 0$

$$+ \sum_{\substack{k\\k\neq n}} C^*_{nk}(\lambda) \boxed{\langle k^{(0)}|n^{(0)}\rangle}$$

$n\neq k \Rightarrow \langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle = 0$

$$+ \sum_{\substack{k,l\\k\neq n\\l\neq n}} C_{nk}(\lambda)\, \underset{k}{\underset{\|}{C^*_{nl}}}(\lambda) \underbrace{\boxed{\langle l^{(0)}|k^{(0)}\rangle}}_{\delta_{lk}} \Big)$$

جمع روی $l$ را می‌زنیم

پس داریم

$$1 = |N(\lambda)|^2 \Big(1 + \sum_{\substack{k\\k\neq n}} C^*_{nk}(\lambda) C_{nk}(\lambda)\Big)$$

$$\Rightarrow \quad |N(\lambda)| = \frac{1}{\Big(1 + \sum_{\substack{k\\k\neq n}} |C_{nk}(\lambda)|^2\Big)^{\frac{1}{2}}}$$

توجه کنید : ما جمله اول بسط $N(\lambda)$ را می‌خواهیم $N(\lambda) = 1 + \lambda N^{(1)} + \dots$ ، پس باید بسط $C_{nk}(\lambda)$ را در فرمول
جایگزین کنیم و از رابطه $\frac{1}{(1+x^2)^{1/2}} \approx 1 - \frac{x^2}{2} + \dots$ که در آن $x$ متغیر
ضریب بسط ، $\lambda$ را بازی می‌کند ، استفاده کنیم که از آن $N^{(1)}$ محاسبه می‌شود. نتیجه نشان خواهد داد
که در مرتبه اول $N$ تصحیح ندارد ، و اولین تصحیح احتمالی غیرصفر آن از مرتبه ۲ شروع می‌شود ، یعنی

$$N(\lambda) = 1 + \lambda^2 N^{(2)} + O(\lambda^3)$$

محاسبه :

$$|N(\lambda)| = \frac{1}{\Big(1 + \sum_{\substack{k\\k\neq n}} |\lambda C^{(1)}_{nk} + \dots|^2\Big)^{\frac{1}{2}}}$$

$$\boxed{|N(\lambda)| \approx 1 - \frac{1}{2}\lambda^2 \sum_{\substack{k\\k\neq n}} |C^{(1)}_{nk}|^2 + \dots}$$

---

خلاصه نتایج تا اینجا :

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$
$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle$$
$$H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$$
$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda|n^{(1)}\rangle + \dots$$
$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots$$

$$|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle + \dots$$

$$C_{nk}^{(1)} = \frac{\langle k^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})}$$
$$E_n = E_n + \lambda\langle n^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle + \dots$$