QM-2-L12-1404-2

Friday, May 8, 2026 6:46 PM

نظریه اختلال مستقل از زمان (بدون تبهگنی)

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

a) $H = H_0 + \lambda H_1$

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

Ansatz:

b) $|n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle + \lambda^2 \sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(2)}|k^{(0)}\rangle + \dots$

c) $E_n = E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \lambda^2 E_n^{(2)} + \dots$

(a)، (b) و (c) را در رابطه $H|n\rangle = E_n|n\rangle$

$$\boxed{\begin{aligned}&(H_0+\lambda H_1)\Big(|n^{(0)}\rangle + \lambda\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle + \lambda^2\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(2)}|k^{(0)}\rangle + \dots\Big)\\ &= \big(E_n^{(0)}+\lambda E_n^{(1)}+\lambda^2E_n^{(2)}+\dots\big)\Big(|n^{(0)}\rangle + \lambda\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(1)}|k^{(0)}\rangle + \lambda^2\sum_{\substack{k\\k\neq n}} C_{nk}^{(2)}|k^{(0)}\rangle + \dots\Big)\end{aligned}}$$

1) $H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle$ ۱) مرتبه صفر اختلال λ^0

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

۲) مرتبه یک اختلال λ^1

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

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

۳) مرتبه ۲ اختلال λ^2

همه اطلاعات تا مرتبه ۱ اختلال

هدف: الف) تعیین $E_n^{(2)}$

ب) تعیین $C_{nk}^{(2)}$

ج) تعیین $|n^{(2)}\rangle$

الف) تعیین $E_n^{(2)}$: ضرب رابطه (3) در $\langle n^{(0)}|$ با فرض $n\neq k$

الف) تعیین $E_n^{(2)}$: ضرب رابطه (3) در $\langle n^{(0)}|$ با فرض $n\neq k$

$$\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)} \underbrace{\cancel{\langle n^{(0)}|H_0|k^{(0)}\rangle}}_{=E_n^{(0)}|k^{(0)}\rangle} + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle n^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle$$

$$= E_n^{(2)}\underbrace{\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle}_{=1} + E_n^{(1)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\underbrace{\cancel{\langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle}}_{\delta_{nk}=0} + E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}\underbrace{\cancel{\langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle}}_{\delta_{nk}=0}$$

$$\Rightarrow \boxed{E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle n^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle}$$

از اطلاعات رتبه اول اختلال استفاده می‌کنیم :

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

خواهیم داشت :

$$E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n}\frac{\langle n^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle\langle k^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}$$

or

$$\boxed{E_n^{(2)} = \sum_{k\neq n}\frac{|\langle n^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle|^2}{E_n^{(0)}-E_k^{(0)}}}$$

تغییر انرژی در رتبه ۲ اختلال

مخرج هیچگاه صفر نیست چون تبهگنی نداریم

ب) تعیین $C_{nk}^{(2)}$: ضرب رابطه (3) در $\langle m^{(0)}|$ با فرض $m\neq n$

$$\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}\underbrace{\langle m^{(0)}|H_0|k^{(0)}\rangle}_{=E_k^{(0)}\delta_{mk}} + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle m^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle$$

$$= E_n^{(2)}\underbrace{\cancel{\langle m^{(0)}|n^{(0)}\rangle}}_{\delta_{mn}=0} + E_n^{(1)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\underbrace{\langle m^{(0)}|k^{(0)}\rangle}_{\delta_{mk}} + E_n^{(0)}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(2)}\underbrace{\langle m^{(0)}|k^{(0)}\rangle}_{\delta_{mk}}$$

$m\neq n$ بنا به فرض

$$\Rightarrow \boxed{E_m^{(0)}C_{nm}^{(2)} + \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle m^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle = E_n^{(1)}C_{nm}^{(1)} + E_n^{(0)}C_{nm}^{(2)}}$$

$$C_{nm}^{(2)}\left(E_n^{(0)}-E_m^{(0)}\right) = \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\langle m^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle - E_n^{(1)}C_{nm}^{(1)}$$

for $n\neq m \curvearrowright E_n^{(0)}\neq E_m^{(0)}$ چون تبهگنی نداریم

دو طرف را تقسیم بر $E_n^{(0)}-E_m^{(0)}$ می‌کنیم ↶

$$\curvearrowright\quad C_{nm}^{(2)} = \sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\frac{\langle m^{(0)}|H_1|k^{(0)}\rangle}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}} - E_n^{(1)}\frac{C_{nm}^{(1)}}{E_n^{(0)}-E_m^{(0)}}$$

$$C_{nk}^{(1)} = \frac{\langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_k^{(0)}} \quad ; \qquad E_n^{(1)} = \langle n^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle$$

$$\Rightarrow \boxed{C_{nm}^{(2)} = \sum_{\substack{k \\ k \neq n}} \frac{\langle m^{(0)} | H_1 | k^{(0)} \rangle \langle k^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_k^{(0)})\,(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})} - \frac{\langle n^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle \langle m^{(0)} | H_1 | n^{(0)} \rangle}{(E_n^{(0)} - E_m^{(0)})^2}}$$

اگر اشتباه نکرده باشم :)

ج) تعیین $|n\rangle$ تا مرتبه ۲ اختلال :

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

$$= 1 - \frac{1}{2} \lambda^2 \sum_{\substack{k \\ k \neq n}} |C_{nk}^{(1)}|^2 + O(\lambda^3)$$

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

نظریه اختلال تبهگن مستقل از زمان :

می‌خواهیم فرض عدم حضور تبهگنی را کنار بگذاریم. به این معنی که برای یک طیف گسسته $n \neq k$ لزوماً به معنی $\underbrace{E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}}_{\text{طیف همیلتونی کامل شده}}$ نیست.

در همه سناریوهای بالا مشکل اصلی که ما را ناچار به استفاده از این فرض می‌کرد چرا که مخرج $E_n^{(0)} - E_k^{(0)}$ بود که باید به نحوی فرض می‌کردیم غیرصفر است.

برای حل مسئله‌ای که طیف H_0 در آن می‌تواند تبهگنی داشته باشد برمی‌گردیم به معادله ویژه مقداری برای H_0

$$\boxed{H_0 |n_i^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n_i^{(0)}\rangle \qquad i = 1, \dots l}$$

نکته این است که ما در اینجا بیش از یک i داریم

← یعنی حالت‌های $|n_l^{(0)}\rangle$ . . . $|n_1^{(0)}\rangle$ همه ویژه‌حالت‌های H_0 به ازای ویژه مقدار $E_n^{(0)}$ هستند

در مثال اتم هیدروژن $E_n = \frac{-1\,Ry}{n^2}$ طیف انرژی به n بستگی دارد در حالیکه ما دو عدد کوانتومی دیگر هم داریم

ویژه مقدار ویژه حالات

$$E_9 \longleftrightarrow |9,0,0\rangle \quad |9,8,0\rangle, \ |9,7,-2\rangle, \dots$$

$n = 9$

$l = 0, 1, \dots 8 \quad , \quad -9 \leq m_l \leq +9$

روش حل : تعیین Ansatz مربوط به $|n\rangle$

$$|n\rangle = N(\lambda) \left\{ \sum_{i=1}^{l} \alpha_i |n_i^{(0)}\rangle + \sum_{k \dots} C_{nk}(\lambda) \sum_{i=1}^{l} \beta_i |k_i^{(0)}\rangle \right\}$$

$$|n\rangle = N(\lambda)\left\{ \underline{\sum_{i=1}^{l} \alpha_i |n_i^{(0)}\rangle} + \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}(\lambda) \underline{\sum_{i=1}^{l} \beta_i |k_i^{(0)}\rangle} \right\}$$

ترکیب خطی حالت‌های تبهگن

$$\boxed{C_{nk}(\lambda) = \sum_{j=1}^{\infty} \lambda^j C_{nk}^{(j)}}$$ ← گمان

درنتیجه با جایگذاری رابطه $C_{nk}(\lambda)$ در رابطه $|n\rangle$ خواهیم داشت:

$$\boxed{|n\rangle = N(\lambda)\left\{ \sum_{i=1}^{\infty} \alpha_i |n_i^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \beta_i |k_i^{(0)}\rangle + O(\lambda^2) \right\}}$$

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

• همه عملیات قبلی را تکرار می‌کنیم

$$(H_0 + \lambda H_1)\left(\sum_{i=1}^{l} \alpha_i |n_i^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \beta_i |k_i^{(0)}\rangle + \dots \right)$$
$$= (E_n^{(0)} + \lambda E_n^{(1)} + \dots)\left(\sum_{i=1}^{l} \alpha_i |n_i^{(0)}\rangle + \lambda \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \beta_i |k_i^{(0)}\rangle + \dots \right)$$

با انجام عملیات ضرب و غیره به معادلات زیر می‌رسیم:

$$(a) \quad \sum_{i=1}^{l} \alpha_i H_0 |n_i^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} \sum_{i=1}^{l} \alpha_i |n_i^{(0)}\rangle$$ مرتبه صفر اختلال

$$(b) \quad \sum_{i=1}^{l} \alpha_i H_1 |n_i^{(0)}\rangle + \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \beta_i H_0 |k_i^{(0)}\rangle$$
$$= E_n^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \alpha_i |n_i^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} \boxed{C_{nk}^{(1)}} \sum_{i=1}^{l} \beta_i |k_i^{(0)}\rangle$$

?　?

مرتبه یک اختلال

....

و ... مراتب بالای اختلال

در ادامه $E_n^{(1)}$ را بدست میاریم:

• شبیه موردی که تبهگنی نداشتیم رابطه (b) را در $\langle n_j^{(0)}|$ ضرب می‌کنیم:

$$(b)' \curvearrowright \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \langle n_j^{(0)} | H_1 | n_i^{(0)}\rangle + \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \beta_i \langle n_j^{(0)} \cancel{| H_0 | k_i^{(0)}\rangle}$$
$$= E_n^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \alpha_i \langle n_j^{(0)} | n_i^{(0)}\rangle + E_n^{(0)} \sum_{\substack{k \\ k\neq n}} C_{nk}^{(1)} \sum_{i=1}^{l} \beta_i \langle n_j^{(0)} | k_i^{(0)}\rangle$$

$$\langle n_j^{(0)} | H_0 | k_i^{(0)}\rangle = E_k^{(0)} \langle n_j^{(0)} | k_i^{(0)}\rangle = E_k^{(0)} \delta_{nk} \delta_{ij}$$

$$\sum_{i=1} \quad \sum_{k \neq n} \quad \sum_{i=1}$$

در جمله دوم $\qquad \langle n_j^{(0)} | H_0 | k_i^{(0)} \rangle = E_k^{(0)} \langle n_j^{(0)} | k_i^{(0)} \rangle = E_k^{(0)} \underbrace{\delta_{nk}}_{=0} \delta_{ij}$

چون در این جمله $n \neq k$ است $\delta_{nk} = 0$

در جمله سوم $\qquad \langle n_j^{(0)} | n_i^{(0)} \rangle = \delta_{ij} \rightarrow \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i \langle n_j^{(0)} | n_i^{(0)} \rangle = \sum_{i=1}^{\ell} \alpha_i \delta_{ij} = \alpha_j$

در جمله چهارم $\qquad \langle n_j^{(0)} | k_i^{(0)} \rangle = \delta_{ij} \underbrace{\delta_{nk}}_{=0}$

چون در این جمله $n \neq k$

نتیجه :

$$\boxed{\sum_{i=1}^{\ell} \langle n_j^{(0)} | H_1 | n_i^{(0)} \rangle \alpha_i = E_n^{(1)} \alpha_j}$$

این یک معادله ویژه مقداری برای ماتریس M است که عنصر آن عبارت است از :

$$M_{ji} \equiv \langle n_j^{(0)} | H_1 | n_i^{(0)} \rangle \longrightarrow \boxed{\underset{\sim}{M} \vec{\alpha} = E_n^{(1)} \vec{\alpha}}$$

در حالت کلی باید : $\leftarrow$ اگر ماتریس قطری بود، اعضای روی قطر آن $E_n^{(1)}$ هستند

اگر ماتریس قطری نبود، باید ابتدا آن را با استفاده از یک ماتریس unitary قطری کنیم و بعد دوباره اعضای روی قطر آن $E_n^{(1)}$ را می‌دهند.

با توجه به هرمیتی بودن M می‌توان مطمئن بود که یک تبدیل unitary پیدا می‌شود که $\underset{\sim}{M}$ را قطری کند

ادعا $\exists C$:

$$\boxed{\langle \tilde{n}_\alpha^{(0)} | H_1 | \tilde{n}_\beta^{(0)} \rangle = \delta_{\alpha\beta} \left(\bar{H}^{(1)}\right)_\alpha}$$

در طرف راست روی α جمع نیست

که در آن $\qquad |\tilde{n}_\alpha^{(0)}\rangle = C_{\alpha i} |n_i^{(0)}\rangle \quad , \quad CC^+ = C^+C = 1$

که C یک ماتریس unitary است.

این ادعا در جبر خطی برای ماتریس هرمیتی M اثبات می‌شود. اگر نتیجه را قبول داشته باشیم، در ادامه داریم :

$$\sum_{i,j} C^*_{\alpha i} C_{\beta j} \langle n_i^{(0)} | H_1 | n_j^{(0)} \rangle = \bar{H}^{(1)}_\alpha \delta_{\alpha\beta}$$

$$\sum_\alpha C_{\alpha k} \sum_{i,j} C^*_{\alpha i} C_{\beta j} \langle n_i^{(0)} | H_1 | n_j^{(0)} \rangle = \sum_\alpha C_{\alpha k} \bar{H}^{(1)}_\alpha \delta_{\alpha\beta}$$

$$\sum_{i,j} \delta_{ik} C_{\beta j} \langle n_i^{(0)} | H_1 | n_j^{(0)} \rangle = \bar{H}^{(1)}_\beta C_{\beta k}$$

used $\quad \sum_\alpha C_{\alpha k} C^*_{\alpha i} = \sum_\alpha C_{\alpha k} (C^+)_{i\alpha} = (CC^+)_{ik} = \delta_{ik}$

$$\sum_j C_{\beta j} \langle n_k^{(0)} | H_1 | n_j^{(0)} \rangle = \bar{H}_\beta^{(1)} C_{\beta k} = \bar{H}_\beta^{(1)} \delta_{kj} C_{\beta j}$$

$$\boxed{\sum_j C_{\beta j} \left(M_{kj} - \bar{H}_\beta^{(1)} \delta_{kj}\right) = 0}$$

$$\sum_j C_{pj} \left(M_{kj} - \bar{H}_p^{(1)} \delta_{kj} \right) = 0$$

$$\det\left(M - \bar{H}^{(1)} \mathbb{1} \right) = 0$$

برای بدست آوردن $\bar{H}_p^{(1)}$ کافی است

ویژه مقادیر M