اختلال مستقل از زمان:

$H = H_0 + \lambda H_1$

λ پارامتر بدون بعد بسیار کوچک (آنقدر کوچک که بتوان از $O(\lambda^2)$ صرف‌نظر کرد)

نکته: H_0 و H_1 به صورت صریح به زمان وابستگی ندارند

فرض: ویژه‌مقادیر و ویژه‌حالت‌های H_0 را داریم (برای سادگی طیف را گسسته فرض می‌کنیم)

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

هدف: تعیین ویژه‌مقادیر و ویژه‌توابع H (همیلتونی مختل شده)

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

نشان می‌دهیم که نتیجه نهایی به صورت سری توانی برحسب λ درمی‌آید

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

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

نکته:
- چنین سری معمولاً همگرا نیست. با وجود این، این جمله‌ها معمولاً قابل قبول هستند.
- در حد $\lambda \to 0$ باید برگردیم به جواب‌های مسئله مختل نشده.

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

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

ممکن است گاهی در حد $\lambda \to 0$ تکینگی وجود داشته باشد
که در آن صورت حدگیری با $\lambda = 0$ نتیجه یکسانی ندارند.

اختلال غیرواگن مستقل از زمان:

فرض اول: (برای سادگی) طیف گسسته برای H^0 $\quad H^0 |n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)} |n^{(0)}\rangle$

فرض دوم: طیف فوق غیر واگن است (تبهگنی نداریم)

یعنی: به ازای $n \neq m$ حتماً خواهیم داشت که $E_n^{(0)} \neq E_m^{(0)}$

یک انتخاب مفید برای ادامه مسئله:

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

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

بنابه فرض

$$1 = \langle n^{(0)} | n\rangle = \underbrace{\boxed{\langle n^{(0)} | n^{(0)}\rangle}}_{=1 \text{ داریم}} + \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i \underbrace{\boxed{\langle n^{(0)} | n^{(i)}\rangle}}_{\Rightarrow\ =0}$$

به این ترتیب داریم

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

قدم اول: پیشنهاد جواب برای $|n\rangle$

نکته: از آنجا که $|n^{(0)}\rangle$ تشکیل یک پایه کامل و راست‌بهنجار را برای همیلتونی H_0 می‌دهد، می‌توان $|n\rangle$ را برحسب $|n^{(0)}\rangle$ بسط داد.

$$\boxed{\begin{aligned} &\text{Ansatz}: \quad |n\rangle = N(\lambda)\Big\{ |n^{(0)}\rangle + \sum_{k,\ k\neq n} C_{nk}(\lambda)\, |k^{(0)}\rangle \Big\} \\ &C_{nk}(\lambda) = \sum_{i=1}^{\infty} \lambda^i C_{nk}^{(i)} \end{aligned}}$$

خواص $N(\lambda)$ و $C_{nk}(\lambda)$

$$C_{nk}(\lambda) = \sum_{i=1} \lambda^{i} C_{nk}$$

خواص $C_{nk}(\lambda)$ و $N(\lambda)$

می‌دانیم که در حد $\lambda \to 0$ باید جواب‌های مرتبه صفر اختلال بازتولید شوند

$$\lim_{\lambda\to 0} N(\lambda) = 1 \qquad \text{ضریب } |n^{(0)}\rangle$$

$$\lim_{\lambda\to 0} C_{nk}(\lambda) = 0$$

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

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

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

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

تعدادی معادله بدست میاید :

$$\to a)\quad H_0|n^{(0)}\rangle = E_n^{(0)}|n^{(0)}\rangle \quad ✓ \qquad \text{مرتبه } 1=\lambda^0$$

مرتبه ۱ اختلال

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

و الی آخر

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

اطلاعاتی است که از معادله (a) آمده

مرتبه قبلی

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

از آنجا که فرض کرده بودیم واگنی نداریم برای $k\neq n$ قطعاً $E_n^{(0)} \neq E_k^{(0)}$ است.

دو طرف رابطه را در $\langle n^{(0)}|$ ضرب می‌کنیم . از $\langle n^{(0)}|n^{(0)}\rangle = 1$, $\langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle = \delta_{kn}$
استفاده می‌کنیم

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

چون $n\neq k$

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

$$E_n - E_n^{(0)} \cong \lambda E_n^{(1)} + O(\lambda^2)$$

$$\delta_{nk} = \begin{cases} 0 & n\neq k \\ 1 & n=k \end{cases}$$

قدم سوم: تعیین $|n^{(1)}\rangle$

قبلاً نوشته بودیم

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

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

برای بدست آوردن $|n^{(1)}\rangle$ باید $C_{nk}^{(1)}$ را بدست بیاوریم و $N(\lambda)$ را ؟)

راه حل : قبلاً رابطه (b) را بدست آورده بودیم

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

اگر دو طرف رابطه را در $\langle m|$ با $m\neq n$ ضرب کنیم داریم

اگر دو طرف رابطه را در $\langle m^{(0)}|$ با $m \neq n$ ضرب کنیم داریم

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

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

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

به این ترتیب داریم:

$$|n^{(1)}\rangle = \underbrace{N(\lambda)}_{\sim O(\lambda^2)+1}\sum_{k\neq n} C_{nk}^{(1)}\,|k^{(0)}\rangle \qquad \lim_{\lambda\to 0} N(\lambda) = 1$$

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

• مخرج هیچگاه صفر نیست چون تبهگنی نداریم

تعیین $N(\lambda)$

کل بسط

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

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

استفاده می‌کنیم از $\langle n|n\rangle = 1$

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

$$+ \sum_{k\neq n} C_{nk}(\lambda)\,\cancel{\langle n^{(0)}|k^{(0)}\rangle}^{\,0} \qquad n\neq k$$

$$+ \sum_{k\neq n} C_{nk}^{*}(\lambda)\,\underset{0}{\cancel{\langle k^{(0)}|n^{(0)}\rangle}}\Big\} \qquad n\neq k$$

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

$$|N(\lambda)| = \frac{1}{\left(1+\sum_{k\neq n}|C_{nk}(\lambda)|^2\right)^{1/2}} = \frac{1}{\left(1+\lambda^2\sum_{k\neq n}|C_{nk}^{(1)}|^2 + \cdots\right)^{1/2}}$$

$$\sim 1 - \frac{1}{2}\lambda^2\sum_{k\neq n}|C_{nk}^{(1)}|^2 + \cdots$$

نتیجه: تا مرتبه اول احتمال $\quad N(\lambda) \sim 1$

خلاصه:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \qquad H = H_0 + \lambda H_1$$

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

$$\begin{cases} |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda\,|n^{(1)}\rangle + \cdots \\ E_n = E_n^{(0)} + \lambda\,E_n^{(1)} + \cdots \end{cases}$$

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

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

خلاصه:

$$H|n\rangle = E_n|n\rangle \qquad H = H_0 + \lambda H_1$$

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

$$\begin{cases} |n\rangle = |n^{(0)}\rangle + \lambda\,|n^{(1)}\rangle + \dots \\ E_n = E_n^{(0)} + \lambda\,E_n^{(1)} + \dots \end{cases}$$

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

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

$$E_n = E_n^{(0)} + \lambda\,\langle n^{(0)}|H_1|n^{(0)}\rangle + O(\lambda^2)$$