بسمه تعالی

اختلال (perturbation)

تعیین ضرایب بسط بردارهای ویژه

هامیلتونین $H = H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)}$ بر حسب بردارهای

ویژه عملگر $H^{(0)}$ در حالتی که $H^{(0)}$ دژنرسی داشته باشد

تالیف هایک قولتوقچیان

خرداد ۸۵

بسمه تعالی

این تالیف طبق قرارداد پژوهشی ۱۶۰/۳۱۱٤ مورخه ۸٤/۲/۲ مورد حمایت مالی دانشگاه علم و صنعت ایران قرار گرفته است که بدین وسیله تشکر می شود.

مولف وظیفه خود می داند که از دوست و معلم گرامی **آرداشس آ.** که پاسخگوی بسیاری از سوالات در مکانیک کوانتومی و در مبحث پرتورباسیون بوده است صمیمانه تشکر و قدردانی نماید. چنانچه این مقاله ثوابی را داشته باشد مسلماً ایشان شریک اصلی محسوب می گردد.

تایپ این مقاله توسط دانشجو مهرنوش نفریه با دقت فروان صورت گرفته است که از زحمات نامبرده قدردانی می گردد.

امید است این تالیف و دیگر تالیفات منتشر شده مولف (امواج ، الکتریسیته و مغناطیس ، مکانیک عمومی ، روشهای جدید برای تعیین بردار سرعت زاویه ای جسم صلب ، ریاضی فیزیک I و مکانیک کوانتومی I) برای خوانندگان فیزیک مفید واقع گردد و مولف را از اشتباهات و اشکالات احتمالی آن مطلع نمایند که مزید بر تشکر است .

هایک قولتوقچیان

خرداد ۸۵

چکیده :

مبحث پرتورباسیون یکی از فصول مهم تمامی کتابهای مکانیک کوانتومی مقطع کارشناسی و کارشناسی ارشد را تشکیل می دهد .با این وجود تعیین ضرایب بسط بردارهای ویژه H که $H = H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)}$ بر حسب بردارهای ویژه $H^{(0)}$ در حالتی که $H^{(0)}$دژنرسی داشته باشد در کتب معتبری نظیر

1-Principles of Quantum Mechanics by RShankar. 2nd Ed. Plenum Press.
2- Introductory Quantum Mechanics by R.L.Liboff. 3 rd Ed. Addison Wesley.

صورت نگرفته است . در کتاب

3- Quantum Mechanics by J.L.Powell & B. Crasemann. Addison Wesley.

این ضرایب فقط در فضای خارج دژنرسی محاسبه شده است و در نتیجه پاسخ به دست آمده نادرست است .

در ویرایش اول کتاب

4-Modern Quantum Mechanics by J.J. Sakurai. Addison Wesley

ضرایب یاد شده محاسبه نشده است اما در ویرایش دوم با استفاده از روش Kato محاسبات صورت گرفته است . با این وجود در حالتی که $H^{(1)}$ هم دژنرسی داشته باشد اظهاراتی شده که مقبول نمی باشد و دلایل لازم در این رابطه آورده شده است .

روش بکار گرفته شده در این مقاله استفاده از تبدیلات فعال در جبر خطی است که امروزه اساس ریاضیات مکانیک کوانتومی را تشکیل می دهد. این روش مقتبس از کتاب [3] می باشد که جهت نقد و بررسی توسط طیف وسیعتری از دانشجویان و اساتید با جزئیات کامل شرح داده شده است. اشکالاتی که در کتب یاد شده در فوق مشاهده شده است با ذکر شماره فرمول آنها اشاره شده است .

هایک قولتوقچیان

اختلال (perturbation)

A-1 مقدمه :

تعیین بردارهای ویژه و مقادیر ویژه عملگر هامیلتونین (که در محاسبات تعیین عملگرانتشارگرکاربری اساسی دارد) یکی از وظایف اصلی در مکانیک کوانتومی می باشد . در فضای هیلبرت بی نهایت بعدی این عمل منجر به حل معادلات دیفرانسیل مرتبه دوم می گردد که گاهی اوقات تعیین جواب آنها (یعنی توابع ویژه و مقادیر ویژه) کار بسیار سختی می شود . در مبحث پرتورباسیون غالباً عملگر هامیلتونین $H^{(0)}$ای را که بردارهای ویژه و مقادیر ویژه آن معلوم است، در نظر می گیرند و سپس عملگر هامیلتونین Hای که تفاوت چندانی با $H^{(0)}$ ندارد داده می شود و خواهان تعیین بردارهای ویژه و مقادیر ویژه آن بر حسب بردارهای ویژه و مقادیر ویژه $H^{(0)}$ (به روش تقریبی) می گردند. بقولی در رابطه

$$H^{(0)}\left|u_n^{(0)}\right\rangle = E_n\left|u_n^{(0)}\right\rangle \tag{A-1}$$

$E_n^{(0)}$ و $\left|u_n^{(0)}\right\rangle$ معلوم و قبلاً محاسبه شده و H به صورت

$$H = H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)} \tag{A-2}$$

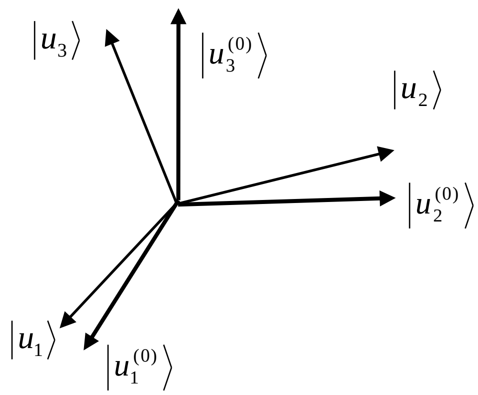
تعریف می شود. ε پارامتری است که کوچک بودن عملگر $H^{(1)}$ را تایید می کند . در رابطه

$$H\left|u_n\right\rangle = E_n\left|u_n\right\rangle \tag{A-3}$$

E_nها و $|u_n\rangle$ ها مجهول هستند .

چون عملگر $H^{(0)}$ هرمیتی است، بردارهای ویژه آن اورتونرمال هستند و می توانند تشکیل دستگاه بردار پایه برای بسط هر بردار دیگری را بدهند. البته بردارهای ویژه H هم خـود تشـکیل دسـتگاه بردار پایه اورتونرمال دیگری می دهند .

نمایش هندسی مطالب گفته شده برای فضای سه بعدی مطابق شکل (A-1) است .



شکل (A-1)

توجه نمایید هرگاه $\varepsilon \to 0$، $|u_n\rangle \to |u_n^{(0)}\rangle$ میل می کند و به همین دلیل است که در شکل(A-1) هر $|u_n\rangle$ای نزدیک $|u_n^{(0)}\rangle$ رسم شده است .

از طرفی چون هردو دسته بردارهای ویژه عملگرهای H و $H^{(0)}$ اورتونرمال هستند، به موجب مطالب گفته شده در مبحث ریاضیات مکانیک کوانتومی می توان عملگر یونیتاری K یافت که با تاثیر بر $|u_n^{(0)}\rangle$ آن را تبدیل (فعال) به بردار $|u_n\rangle$ نماید .یعنی

$$K\,|u_n^{(0)}\rangle = |u_n\rangle \tag{A-4}$$

$$\sum_{n'} |u_{n'}^{(0)}\rangle\langle u_{n'}^{(0)}|\,K\,|u_n^{(0)}\rangle = \sum_{n'} K_{n'n}\,|u_{n'}^{(0)}\rangle = |u_n\rangle \tag{A-5}$$

پس اگر بتوان عملگر K را در بردار پایه $\left\{\left|u_n^{(0)}\right\rangle\right\}$ تعیین نمود، در این صورت بردارهای $\left|u_n\right\rangle$ بر حسب بردارهای معلوم $\left|u_n^{(0)}\right\rangle$ مشخص می شوند. علاوه بر این با معلوم بودن K مقادیر ویژه Hهم مشخص می شود، چه می دانیم:

$$\left\langle u_{n'}\right|H\left|u_n\right\rangle = E_n\delta_{n'n} \tag{A-6}$$

و با جایگزاری رابطه(A-4) در (A-6)

$$\left\langle u_{n'}^{(0)}\right|K^+HK\left|u_n^{(0)}\right\rangle = E_n\delta_{n'n} \tag{A-7}$$

یعنی با ضرب سه عملگر رابطه (A-7) (که همگی در بردار پایه $\left|u_n^{(0)}\right\rangle$ نمایش داده شده است) عملگر قطری حاصل می شود که عناصر قطری آن E_nها می باشند. نمایش مختصاتی (A-7) به صورت

$$\sum_{m',m}\left\langle u_{n'}^{(0)}\right|K^+\left|u_{m'}^{(0)}\right\rangle\left\langle u_{m'}^{(0)}\right|H\left|u_m^{(0)}\right\rangle\left\langle u_m^{(0)}\right|K\left|u_n^{(0)}\right\rangle = E_n\delta_{n'n} \tag{A-8}$$

است. از طرفی می دانیم هر عملگر یونیتاری را می توان به صورت زیر نمایش داد :

$$S^+ = S \qquad K = e^{-iS} \tag{A-9}$$

که S عملگری است هرمیتی.

حال چون عملگر $H^{(1)}$در مقایسه با $H^{(0)}$بسیار کوچک می باشد هر $\left|u_n\right\rangle$ای بسیار نزدیک $\left|u_n^{(0)}\right\rangle$ است و در نتیجه عملگر یونیتاری Kبسیار نزدیک به عملگر واحد است. این خود سبب می گردد که عملگر هرمیتی S تعریف شده در (A-9) به صورت زیر نشان داده شود :

$$S = 0 + \varepsilon S^{(1)} + \varepsilon^2 S^{(2)} \tag{A-10}$$

یعنی عملگر S با تقریب صفر برابر صفر و با تقریب اول بی نهایت کوچک مرتبه اول می باشد .

نمایش محض (A-7) به صورت

$$e^{iS}He^{-iS} = (H)' \tag{A-11}$$

می باشد . با استفاده از فرمول Baker- Hausdorff (A-11) به صورت

$$(H)' = H + i\varepsilon[S,H] + \frac{(i\varepsilon)^2}{2!}[S,[S,H]] + ... \qquad \text{(A-12)}$$

در می آید. با جایگزاری H بر حسب $H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)}$ و S به صورت (A-10) در(A-12) و

نوشتن آن بر حسب توانهای مختلف ε خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}(H)' &= H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)} + i\,\varepsilon[S^{(1)}, H^{(0)}] + i\,\varepsilon^2[S^{(1)}, H^{(1)}] \\ &+ \frac{(i\,\varepsilon)^2}{2!}[S^{(1)},[S^{(1)}, H^{(0)}]] + i\,\varepsilon^2[S^{(2)}, H^{(0)}] + (0)\varepsilon^3\end{aligned} \qquad \text{(A-13)}$$

ازطرفی نمایش صریح $(H)'$ یعنی نمایش H در دستگاه $\{|u_n\rangle\}$ در رابطه (A-13) بصورت زیر

است:

$$(H)' = \begin{bmatrix} E_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4 \end{bmatrix} \equiv$$

$$\begin{bmatrix} E_1^{(0)} + \varepsilon E_1^{(1)} + \varepsilon^2 E_1^{(2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} + \varepsilon E_2^{(1)} + \varepsilon^2 E_2^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} + \varepsilon E_3^{(1)} + \varepsilon^2 E_3^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4^{(0)} + \varepsilon E_4^{(1)} + \varepsilon^2 E_4^{(2)} \end{bmatrix}$$

که آن را برحسب ماتریس های قطری با توان های مختلف ε تجزیه می نماییم:

$$(H)' = \begin{bmatrix} E_1^{(0)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4^{(0)} \end{bmatrix} + \varepsilon \begin{bmatrix} E_1^{(1)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(1)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4^{(1)} \end{bmatrix} +$$

$$\varepsilon^2 \begin{bmatrix} E_1^{(2)} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & E_2^{(2)} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(2)} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & E_4^{(2)} \end{bmatrix}$$

(A-14) $$(H)' = \mathbf{E}^{(0)} + \varepsilon \mathbf{E}^{(1)} + \varepsilon^2 \mathbf{E}^{(2)}$$

با مقایسه توان های مساوی εاز طرفین در رابطه (A-13) نتیجه می گیریم:

(A-15) $$\begin{aligned} \mathbf{E}^{(0)} &= H^{(0)} \\ \mathbf{E}^{(1)} &= H^{(1)} + i[S^{(1)}, H^{(0)}] \\ \mathbf{E}^{(2)} &= i[S^{(1)}, H^{(1)}] - \frac{1}{2}[S^{(1)}, [S^{(1)}, H^{(0)}]] + i[S^{(2)}, H^{(0)}] \end{aligned}$$

رابطه اول (A-15) عینیت است، اما اگر از رابطه دوم (A-15) عنصر ماتریسی $\left\langle u_{n'}^{(0)} \right| ... \left| u_n^{(0)} \right\rangle$ بگیریم خواهیم داشت:

$$E_n^{(1)} \delta_{n'n} = H_{n'n}^{(1)} + i \left\langle u_{n'}^{(0)} \right| (S^{(1)} H^{(0)} - H^{(0)} S^{(1)}) \left| u_n^{(0)} \right\rangle$$

(A-16) $$E_n^{(1)} \delta_{n'n} = H_{n'n}^{(1)} + i(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}) S_{n'n}^{(1)}$$

هر گاه در رابطه (A-16) $n = n'$ قرار دهیم، تغییر تراز انرژی با تقریب اول به دست می آید. یعنی

(A-17) $$E_n^{(1)} = H_{nn}$$

و هرگاه در رابطه فوق $n \neq n'$ انتخاب نماییم، مولفه های عملگر $S^{(1)}$ (یا به قولی مولفه های عملگر یونیتاری K)حاصل می شود.

(A-18) $$S_{n'n}^{(1)} = \frac{1}{i} \frac{H_{n'n}^{(1)}}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}}$$

به موجب (A-16) و (A-18) در می یابیم که عناصر قطری $S^{(1)}$ قابل محاسبه نیست. نکته مهم دیگر آنکه روش پرتورباسیون گفته شده برای هامیلتونین $H^{(0)}$ای صادق است که طیف آن گسسته باشد. یعنی به عنوان مثال $H^{(0)}$ را نمی توان هامیلتونین ذره آزاد انتخاب کرد. برای هامیلتونین های با طیف پیوسته روش دیگری موسوم به روش Lippmann –schwinger وجود دارد که در مباحث پراکندگی از آن استفاده می کنند. در ضمن برای کوچک ماندن $S_{n'n}^{(1)}$ کوچک بودن عناصر ماتریسی عملگر $H^{(1)}$ در مقایسه با اختلاف ترازهای عملگر $H^{(0)}$ ضروری است.

حال با تقریب اول $\left|u_n\right\rangle$ را محاسبه می کنیم. به موجب (A-4)

$$\left|u_n\right\rangle = K\left|u_n^{(0)}\right\rangle \approx e^{-i\varepsilon S^{(1)}}\left|u_n^{(0)}\right\rangle$$
$$\left|u_n\right\rangle \approx (1-i\varepsilon S^{(1)})\left|u_n^{(0)}\right\rangle$$
$$\left|u_n\right\rangle \approx \left|u_n^{(0)}\right\rangle - i\varepsilon\sum_{n'}\left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle\left\langle u_{n'}^{(0)}\right|S^{(1)}\left|u_n^{(0)}\right\rangle$$
$$\left|u_n\right\rangle \approx \left|u_n^{(0)}\right\rangle - i\varepsilon\sum_{n'}S_{n'n}^{(1)}\left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle \tag{A-19}$$

جمله $n' = n$ را در بسط فوق جدا می کنیم:

$$\left|u_n\right\rangle \approx (1-i\varepsilon S_{nn}{}^{(1)})\left|u_n^{(0)}\right\rangle - i\varepsilon\sum_{n'\neq n}S_{n'n}^{(1)}\left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle$$

هرگاه از $(1-i\varepsilon S_{nn}{}^{(1)})$ فاکتور گرفته و سپس فقط جملات بی نهایت کوچک مرتبه اول را حفظ کنیم، خواهیم داشت:

$$\left|u_n\right\rangle \approx (1-i\varepsilon S_{nn}{}^{(1)})\left\{\left|u_n^{(0)}\right\rangle - i\varepsilon\sum_{n'\neq n}S_{n'n}^{(1)}\left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle\right\}$$
$$\approx e^{-i\varepsilon S_{nn}}\left\{\left|u_n^{(0)}\right\rangle - \varepsilon\sum_{n'\neq n}\frac{H_{n'n}^{(1)}}{E_{n'}^{(0)}-E_n^{(0)}}\left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle\right\} \tag{A-20}$$

بنابراین عدم توانائی در محاسبه $S_{n'n}^{(1)}$ مشکلی (جز در ایجاد فاکتور فاز) در محاسبه $\left|u_n\right\rangle$ ایجاد نمی کند که خود مسئله بی اهمیتی می باشد.

هرگاه $\left|u_n\right\rangle$ را به صورت زیر بسط دهیم:

$$\left|u_n\right\rangle = \left|u_n^{(0)}\right\rangle + \varepsilon\left|u_n{}^{(1)}\right\rangle + \varepsilon^2\left|u_n^{(2)}\right\rangle + \dots \tag{A-21}$$

در این صورت به موجب رابطه (A-20) اصلاح $\left|u_n\right\rangle$ با تقریب اول برابر

$$\left|u_n^{(1)}\right\rangle = -\sum_{n\neq n'}\frac{H_{n'n}^{(1)}}{E_{n'}^{(0)}-E_n^{(0)}}\left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle \tag{A-22}$$

می شود. حال به شکل (A-1) و فرمول (A-20) توجه نمائید. آیا پاسخ بدست آمده در(A-20) منطقی است؟ نکته دیگر آنکه $|u_n\rangle$ داده شده با رابطه (A-20) نرمالیزه نمی باشد. برای محاسبه ضریب نرمالیزاسیون مجذور طول بردار را محاسبه می کنیم.

$$\langle u_n | u_n \rangle = \left[\langle u_n^{(0)} | - \varepsilon \sum_{n' \neq n} \frac{H_{n'n}^{(1)}}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}} \langle u_{n'}^{(0)} | \right] \left[| u_n^{(0)} \rangle - \varepsilon \sum_{n'' \neq n} \frac{H_{n''n}^{(1)}}{E_{n''}^{(0)} - E_n^{(0)}} | u_{n''}^{(0)} \rangle \right]$$

چون جمع بندی n' و n'' در فضای خارج n صورت می گیرد

$$\langle u_n | u_n \rangle = \left[1 + \varepsilon^2 \sum_{n' \neq n} \frac{H_{n'n}^{(1)} H_{n'n}^{(1)}}{\left(E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)} \right)^2} \right]$$

پس

$$|u_n\rangle_N = \left[1 + \varepsilon^2 \sum_{n' \neq n} \frac{\left| H_{n'n}^{(1)} \right|^2}{\left(E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)} \right)^2} \right]^{-\frac{1}{2}} |u_n\rangle$$

$$|u_n\rangle_N \approx \left\{ 1 - \frac{1}{2} \varepsilon^2 \sum_{n' \neq n} \frac{\left| H_{n'n}^{(1)} \right|^2}{\left(E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)} \right)^2} \right\} |u_n\rangle \qquad \text{(A-23)}$$

یعنی ضریب نرمالیزاسیون را با تقریب اول بی نهایت کوچک می توان واحد در نظر گرفت.

حال برای تعیین تراز انرژی با تقریب دوم، از رابطه سوم (A-15) استفاده می کنیم:

$$\mathbf{E}^{(2)} = i \left[S^{(1)}, H^{(1)} \right] - \frac{1}{2} \left[S^{(1)}, \left[S^{(1)}, H^{(0)} \right] \right] + i \left[S^{(2)}, H^{(0)} \right]$$

با جایگزاری رابطه دوم (A-15) در رابطه فوق نتیجه

$$\mathbf{E}^{(2)} = i \left[S^{(1)}, H^{(1)} \right] - \frac{1}{2i} \left[S^{(1)}, (-H^{(1)}) \right] - \frac{1}{2i} \left[S^{(1)}, \mathbf{E}^{(1)} \right] + i \left[S^{(2)}, H^{(0)} \right]$$

$$\mathbf{E}^{(2)} = \frac{i}{2} \left[S^{(1)}, H^{(1)} \right] + \frac{i}{2} \left[S^{(1)}, \mathbf{E}^{(1)} \right] + i \left[S^{(2)}, H^{(0)} \right] \qquad \text{(A-24)}$$

حاصل می شود.

هر گاه عنصر ماتریسی $\langle u_{n'}^{(0)} | ..... | u_n^{(0)} \rangle$ رابطه (A-24) را بگیریم

$$E_n^{(2)}\delta_{n'n} = \frac{i}{2}\sum_m \left(S_{n'm}^{(1)}H_{mn}^{(1)} - H_{n'm}^{(1)}S_{mn}^{(1)}\right) + \frac{i}{2}S_{n'n}^{(1)}\left(E_n^{(1)} - E_{n'}^{(1)}\right) + iS_{n'n}^{(2)}\left(E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}\right) \tag{A-25}$$

و اگر در رابطه فوق $n' = n$ انتخاب کنیم

$$E_n^{(2)} = \frac{i}{2}\sum_m \left(S_{nm}^{(1)}H_{mn}^{(1)} - H_{nm}^{(1)}S_{mn}^{(1)}\right) + 0 + 0 \tag{A-25-a}$$

در جمع بندی اندیس m، جمله $m = n$ برابر صفر می شود. در نتیجه با جایگزاری رابطه (A-18) در رابطه فوق

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \neq n} \frac{H_{nm}^{(1)}H_{mn}^{(1)}}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq n} \frac{\left|H_{nm}^{(1)}\right|^2}{E_n^{(0)} - E_m^{(0)}} \tag{A-26}$$

از (A-26) در می یابیم که

$$E_n^{(2)} = \langle u_n^{(0)} | H^{(1)} | u_n^{(1)} \rangle \tag{A-27}$$

که برای استخراج رابطه (A-27) کافی است از رابطه (A-22) استفاده کنیم. روش دیگر استخراج (A-27) استفاده از رابطه (A-19) است. یعنی

$$|u_n\rangle = |u_n^{(0)}\rangle + \varepsilon |u_n^{(1)}\rangle + ... = (1 - i\,\varepsilon S^{(1)} + ...)|u_n^{(0)}\rangle$$

$$\begin{aligned} -iS^{(1)}|u_n^{(0)}\rangle &= |u_n^{(1)}\rangle \\ +i\,\langle u_n^{(0)}|S^{(1)} &= \langle u_n^{(1)}| \end{aligned} \tag{A-28}$$

جایگزاری (A-28) در (A-25-a)

$$E_n^{(2)} = \frac{i}{2}\langle u_n^{(0)} | S^{(1)}H^{(1)} - H^{(1)}S^{(1)} | u_n^{(0)} \rangle + 0 + 0$$

$$
\begin{aligned}
&= \frac{1}{2}\left[\left\langle u_n^{(1)}\middle|H^{(1)}\middle|u_n^{(0)}\right\rangle + \left\langle u_n^{(0)}\middle|H^{(1)}\middle|u_n^{(1)}\right\rangle\right] \\
&= \frac{1}{2}\left[\left\langle u_n^{(0)}\middle|H^{(1)}\middle|u_n^{(1)}\right\rangle^* + \left\langle u_n^{(0)}\middle|H^{(1)}\middle|u_n^{(1)}\right\rangle\right] \\
&= \mathrm{Re}\left\{\left\langle u_n^{(0)}\middle|H^{(1)}\middle|u_n^{(1)}\right\rangle\right\}
\end{aligned}
$$

هرگاه در (A-25) $n' \neq n$ در نظر بگیریم مقدار $S_{n'n}^{(2)}$ حاصل می شود،

$$
S_{n'n}^{(2)} = \frac{1}{2\left(E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}\right)}\left\{\left(S_{n'm}^{(1)} H_{n'm}^{(1)} - H_{n'm}^{(1)} S_{mn}^{(1)}\right) + S_{n'n}^{(1)}\left(E_n^{(1)} - E_{n'}^{(1)}\right)\right\} \qquad \text{(A-29)}
$$

که به علت بی نهایت کوچک بودن مرتبه دوم در این بخش از پرتورباسیون از آن استفاده نمی کنیم.

A-2 پرتورباسیون در حالتی که $H^{(0)}$ دژنرسی داشته باشد :

در تعیین $|u_n\rangle$ها و E_nهای هامیلتونین H که $H = H^{(0)} + \varepsilon H^{(1)}$ و در آن $H^{(0)}$ دژنره باشد به مشکلاتی برخورد می کنیم که می بایستی درصدد رفع آن برآییم.

برای درک دقیق مطلب، بردارهای ویژه $H^{(0)}$ را به صورت

$$|u_1^{(0)}\rangle, |u_2^{(0)}\rangle, ..., |u_{k-1}^{(0)}\rangle \underbrace{|u_k^{(0)}\rangle, |u_{k+1}^{(0)}\rangle ...., |u_{k+g-1}^{(0)}\rangle}_{\text{زیر فضای دژنرسی}}, |u_{k+g}^{(0)}\rangle, ...$$

نمایش می دهیم. بعد زیر فضای دژنرسی برابر g است که هر گاه اندیس nبین k تا $k+g-1$ باشد، $|u_n^{(0)}\rangle$ها معرف بردارهای ویژه با مقادیر ویژه برابر $E_D^{(0)}$خواهد شد. به قولی

$$E_k^{(0)} = E_{k+1}^{(0)} = ... = E_{k+g+1}^{(0)} = E_D^{(0)}$$

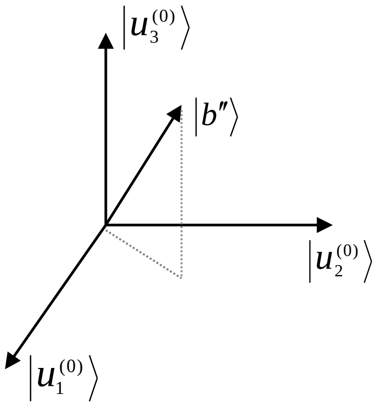
حال اگر در رابطه (A-16) اندیسهای n و n' متعلق به زیرفضای دژنرسی ولی $n' \neq n$ باشد انتخاب کنیم، (مثلاً $n = k+2$ و $n' = k+5$ باشد) چون $E_{n'}^{(0)} = E_n^{(0)} = E_D^{(0)}$ است، این رابطه به صورت

$$H_{n'n}^{(1)} = 0 \qquad (n' \neq n) \qquad n, n' \in D \tag{A-30}$$

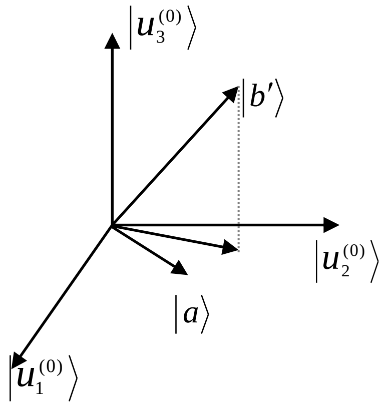
در می آید. اما در حالت کلی چون عملگر $H^{(1)}$ با $H^{(0)}$ کمیوت نمی کند، بردار ویژه مشترکی برای این دو عملگر یافت نمی گردد که رابطه (A-30) را اقناع نماید. البته توجه می کنیم که رابطه (A-30) را فقط در زیر فضای دژنرسی می خواهیم برقرار گردد. سوالی که در ذهن مطرح می گردد این است که آیا در زیر فضای دژنرسی می توان دسته بردارهای جدیدی انتخاب کرد که هم بردار ویژه $H^{(0)}$ باشند و هم شرط (A-30) را اقناع نمایند ؟

برای توجیه هندسی مسئله فضای برداری سه بعدی مطابق شکل (A-2) در نظر می گیریم که در آن $\left|u_1^{(0)}\right\rangle$ و $\left|u_2^{(0)}\right\rangle$ متعلق به زیرفضای دژنرسی هستند، یعنی $E_1^{(0)} = E_2^{(0)} = E_D^{(0)}$ و $E_3^{(0)} \neq E_D^{(0)}$ است. چون $\left[H^{(0)}, H^{(1)}\right] \neq 0$ است، تاثیر $H^{(1)}$ بر $\left|u_1^{(0)}\right\rangle$ بردار $\left|b''\right\rangle$ را حاصل می کند.

$$H^{(1)}\left|u_1^{(0)}\right\rangle = \left|b''\right\rangle \qquad \text{(A-31)}$$



شکل (A-2)



شکل (A-3)

$\left|b''\right\rangle$ بر روی شکل (A-2) مشخص شده است.

هر گاه $\left|a\right\rangle$ ترکیب خطی دلخواهی از بردارهای ویژه زیر فضای دژنرسی باشد، رابطه

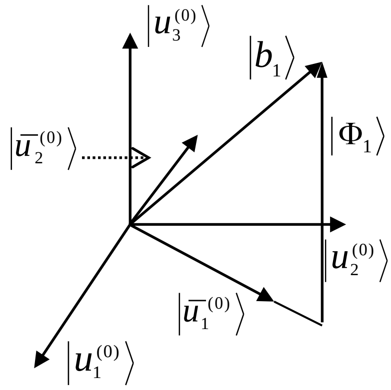
$$H^{(1)}\left|a\right\rangle = \left|b'\right\rangle \qquad \text{(A-32)}$$

برقرار است که $\left|b'\right\rangle$ مطابق شکل (A-3) مشخص شده است.

حال از خود سوال می کینم آیا ترکیب خطی خاصی از بردارهای ویژه در زیرفضای دژنرسی وجود دارد که اگر آنرا $\left|\overline{u}_n^{(0)}\right\rangle$ بنامیم رابطه

$$H^{(1)}\left|\overline{u}_n^{(0)}\right\rangle = \left|b_n\right\rangle = \lambda\left|\overline{u}_n^{(0)}\right\rangle + \left|\Phi_n\right\rangle ، \quad n = k, k+1 \ldots k+g-1 \qquad \text{(A-33)}$$

برقرار باشد؟ به شکل (A-4) مراجعه کنید و تفاوت اصلی آن را با شکلهای (A-2) و (A-3) دریابید.



شکل (A-4)

توجه نمایید که در این حالت هم به موجب (A-33) $|\bar{u}_n^{(0)}\rangle$ (در شکل (A-4) $|\bar{u}_1^{(0)}\rangle$) بردار ویژه $H^{(1)}$ نمی باشد. در رابطه (A-33)، $|\Phi_n\rangle$ مولفه بردار $|b_n\rangle$ در فضای خارج دژنرسی می باشد. اگر (A-33) را در $\langle u_{n'}^{(0)}|$ ضرب کنیم خواهیم داشت:

$$\langle u_{n'}^{(0)}|H^{(1)}|\bar{u}_n^{(0)}\rangle = \lambda\langle u_{n'}^{(0)}|\bar{u}_n^{(0)}\rangle + \langle u_{n'}^{(0)}|\Phi_n\rangle \tag{A-34}$$

اگر اندیس n' متعلق به زیرفضای دژنرسی نباشد، جمله اول طرف راست صفر و جمله دوم غیر صفر است؛ یعنی $H_{n'n}^{(1)}$ مخالف صفر است و به قولی $H^{(1)}$ در این بردار پایه غیر قطری است. اما اگر اندیس n' متعلق به زیرفضای دژنرسی باشد در این زیر فضا دو دسته بردارهای متفاوت $\{|u_{n'}^{(0)}\rangle\}$ و $\{|\bar{u}_{n'}^{(0)}\rangle\}$ خواهیم داشت. اگر دسته بردارهای ویژه قدیمی یعنی $|u_{n'}^{(0)}\rangle$ را انتخاب کنیم (A-33) به صورت

$$\langle u_{n'}^{(0)}|H^{(1)}|\bar{u}_n^{(0)}\rangle = \lambda\langle u_{n'}^{(0)}|\bar{u}_n^{(0)}\rangle + 0 \tag{A-35}$$

در می آید. رابطه فوق مبین این واقعیت است که $H^{(1)}$ در چنین نمایشی قطری نیست و مضافاً دو

دستگاه $\left\{\left|u_n^{(0)}\right\rangle\right\}$ و $\left\{\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle\right\}$ در زیر فضای دژنرسی بر هم عمود نیستند. اما هرگاه دسته بردارهای

جدید $\left\{\left|\bar{u}_{n'}^{(0)}\right\rangle\right\}$ را انتخاب نماییم

$$\left\langle \bar{u}_{n'}^{(0)} \right| H^{(1)} \left| \bar{u}_n^{(0)} \right\rangle = \lambda \left\langle \bar{u}_{n'}^{(0)} \middle| \bar{u}_n^{(0)} \right\rangle + 0 = \lambda \delta_{n'n} \tag{A-36}$$

یعنی با وجود آنکه $\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle$ها بردار ویژه عملگر $H^{(1)}$ نمی باشند اما $\left\langle \bar{u}_{n'}^{(0)} \right| H^{(1)} \left| \bar{u}_n^{(0)} \right\rangle$ به صورت

قطری است. شایان ذکر است که $\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle$ بردار ویژه عملگر $H^{(0)}$ باقی می ماند. بنابراین به جای

انتخاب بردارهای

$$\left|u_1^{(0)}\right\rangle, \left|u_2^{(0)}\right\rangle, \ldots\ldots, \left|u_k^{(0)}\right\rangle, \left|u_{k+1}^{(0)}\right\rangle, \left|u_{k+2}^{(0)}\right\rangle \ldots\ldots, \left|u_{k+g-1}^{(0)}\right\rangle, \left|u_{k+g}^{(0)}\right\rangle, \ldots.$$

به عنوان بردارهای ویژه عملگر $H^{(0)}$، دسته بردارهای ویژه دوم زیر را انتخاب می کنیم که به

صورت

$$\left|u_1^{(0)}\right\rangle, \left|u_2^{(0)}\right\rangle, \ldots\ldots, \left|\bar{u}_k^{(0)}\right\rangle, \left|\bar{u}_{k+1}^{(0)}\right\rangle, \left|\bar{u}_{k+2}^{(0)}\right\rangle \ldots\ldots, \left|\bar{u}_{k+g-1}^{(0)}\right\rangle, \left|u_{k+g}^{(0)}\right\rangle, \ldots.$$

است. فرق این دو دسته بردار پایه را دریابید.

حال ممکن است این سوال مطرح شود که آیا دسته بردارهای جدید در زیرفضای دژنرسی بر هم

عمود هستند یا نه ؟ ما از تعامد آن در (A-36) استفاده کرده ایم.

اثبات تعامد $\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle$ها بسیار آسان است. با در نظر گرفتن هرمیتی بودن عملگر $H^{(1)}$ روابط زیر

برقرار است

$$\begin{aligned} H^{(1)} \left| \bar{u}_n^{(0)} \right\rangle &= \lambda_n \left| \bar{u}_n^{(0)} \right\rangle + \left| \Phi_n \right\rangle \\ \left\langle \bar{u}_{n'}^{(0)} \right| H^{(1)} &= \lambda_{n'}^* \left\langle \bar{u}_{n'}^{(0)} \right| + \left\langle \Phi_{n'} \right| \end{aligned} \tag{A-37}$$

با ضرب دو رابطه فوق در $\left|\overline{u}_{n'}^{(0)}\right\rangle$ و $\left|\overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle$ و تفریق آنها و با در نظر گرفتن اینکه $\left|\Phi_{n}\right\rangle$ و $\left|\Phi_{n'}\right\rangle$ بردارهایی هستند که فقط در فضای خارج دژنرسی مولفه دارند نتیجه

$$\left(\lambda_n - \lambda_{n'}^{*}\right)\left\langle \overline{u}_{n'}^{(0)} \middle| \overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle = 0 \tag{A-38}$$

حاصل می شود که مبین تعامد بردارهای یاد شده و حقیقی بودن λ_nها است . از این پس λ_nها را با $E_n^{(1)}$ نشان می دهیم .

سوال اصلی که حال مطرح می شود این است که این دسته بردارهای ویژه جدید $H^{(0)}$ در زیرفضای دژنرسی چگونه به دست می آید؟ ابتدا توجه می کنیم:

$$\left|\overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle = \sum_{\substack{\text{˜ áÝÖ Ç}\\ \text{ã áÈÑÊ}}} \left|u_{m}^{(0)}\right\rangle\left\langle u_{m}^{(0)} \middle| \overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle = \sum_{m\in D} \left|u_{m}^{(0)}\right\rangle\left\langle u_{m}^{(0)} \middle| \overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle$$

$$\left|\overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle = \sum_{m\in D} \beta_{mn}\left|u_{m}^{(0)}\right\rangle \qquad\qquad \left\langle u_{m}^{(0)} \middle| \overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle \equiv \beta_{mn} \tag{A-39}$$

توجه نمایید β_{mn} ضرایب بسط $\left|\overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle$ در دستگاه بردار پایه قدیمی و در زیرفضای دژنرسی می باشد. حال اگر رابطه (A-33) را در برای قدیمی $\left\langle u_{n'}^{(0)}\right|$ که n' اندیس متعلق به زیرفضای دژنرسی است، ضرب کنیم، خواهیم داشت:

$$\left\langle u_{n'}^{(0)}\right| H^{(1)}\left|\overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle = E_n^{(1)}\left\langle u_{n'}^{(0)} \middle| \overline{u}_{n}^{(0)}\right\rangle + \left\langle u_{n'}^{(0)} \middle| \Phi_n\right\rangle \tag{A-40}$$

با در نظر گرفتن اینکه $\left\langle u_{n'}^{(0)} \middle| \Phi_n\right\rangle = 0$ است، با جایگزاری $\left\langle \overline{u}_{n}^{(0)}\right|$ بر حسب (A-39) نتیجه

$$\sum_{m\in D}\left\langle u_{n'}^{(0)}\right| H^{(1)}\left|u_{m}^{(0)}\right\rangle \beta_{mn} = E_n^{(1)}\beta_{n'n} + 0$$

حاصل می شود که می توان آن را به صورت

$$\sum_{m\in D}\left[\left\langle u_{n'}^{(0)}\right| H^{(1)}\left|u_{m}^{(0)}\right\rangle - E_{n'}^{(1)}\delta_{n'm}\right]\beta_{mn} = 0 \tag{A-41}$$

نوشت. رابطه (A-41) یک معادله مشخصه g بعدی است که از حل آن نه تنها $E_n^{(1)}$ها بلکه ضرایب بسط $\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle$ بر حسب بردارهای قدیمی به دست می آید .

حال مطالب گفته شده را با کتاب Liboff مقایسه نمایید. هر چند رابطه *(13-17)* آن درست می باشد اما نتیجه (*13-22*) آن نادرست است. علاوه بر این اظهارات مندرج در همین کتاب صفحه 717 که با تعیین $\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle$ ها ابهامات مربوط به دژنرسی $H^{(0)}$ مرتفع می گردد و می توان مسئله را همانند پرتورباسیونی که در آن $H^{(0)}$ غیر دژنره است حل کرد، نیز نادرست می باشد. برای یافتن پاسخ درست و رفع ابهامات باقیمانده سعی در تعیین $\left|u_n\right\rangle$ می نماییم. به موجب (A-4) ، (A-9) و (A-10)

$$\left|u_n\right\rangle = e^{-i\varepsilon S^{(1)}}\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle \approx \left(1-i\,\varepsilon S^{(1)}\right)\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle \qquad n \in D$$

$$\left|u_n\right\rangle \approx \left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle - i\,\varepsilon \sum_{\substack{n' \\ \text{áÝÖÇ} \\ \text{ã áÈÑÊ}}} \left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle\left\langle u_{n'}^{(0)}\right|S^{(1)}\left|u_n^{(0)}\right\rangle \tag{A-42}$$

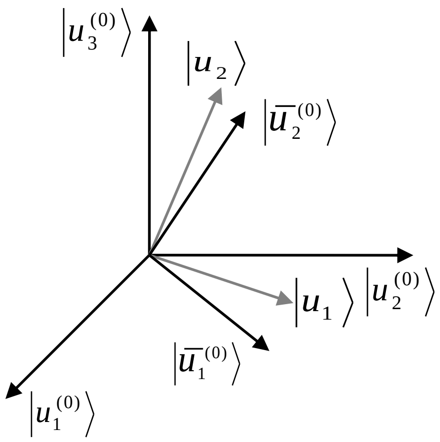
در (A-42) جمله $n'=n$را جدا می کنیم. همچنین جمعبندی n' را به دو زیر فضای دژنرسی و غیر دژنرسی تقسیم می کنیم

$$\left|u_n\right\rangle = \left(1-i\,\varepsilon S_{nn}^{(1)}\right)\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle - i\,\varepsilon\sum_{n'\in D}\left\langle\bar{u}_{n'}^{(0)}\right|S^{(1)}\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle\left|\bar{u}_{n'}^{(0)}\right\rangle - i\,\varepsilon\sum_{n'\notin D}\left\langle u_{n'}^{(0)}\right|S^{(1)}\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle\left|u_{n'}^{(0)}\right\rangle$$

عنصر ماتریسی $S^{(1)}$ در جمله سوم طرف راست همانند پرتورباسیون غیر دژنره قابل محاسبه است چون برای $n'\notin D$ و $n \in D$

$$\begin{aligned} S_{n'n}^{(1)} &\equiv \left\langle u_{n'}^{(0)}\right|S^{(1)}\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle = \frac{1}{i}\,\frac{H_{n'n}^{(1)}}{E_{n'}^{(0)}-E_D^{(0)}} \\ H_{n'n}^{(1)} &\equiv \left\langle u_{n'}^{(0)}\right|H^{(1)}\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle \end{aligned} \tag{A-43}$$

اما در جمله دوم طرف راست (A-43) که $n' \in D$ است، نمی توان مقدار $\langle u_{n'}^{(0)} | S^{(1)} | \bar{u}_n^{(0)} \rangle$ را از روی رابطه (A-16) برای $n' \neq n$ و $n' \in D$ و $n \in D$ تعیین نمود، چون $E_{n'}^{(0)} = E_n^{(0)} = E_D^{(0)}$ است. به قولی مولفه های ماتریسی $S^{(1)}$ در زیرفضای دژنرسی هنوز مشخص نشده است. استدلال فوق مبین آن است که پرتورباسیون در حالتی که $H^{(0)}$ دژنرسی دارد با تعیین $|\bar{u}_n^{(0)}\rangle$ کاملاً حل نمی شود. علاوه بر این کتاب Powell & Crasemann در فرمول *(11-56)* در تعیین $|u_n\rangle$ از جمع بندی n' در زیرفضای دژنرسی چشم پوشی می نماید که این استدلال هم بنا به دلایل هندسی زیر نادرست است. مطابق شکل (A-5) ، $|u_1^{(0)}\rangle$ و $|u_2^{(0)}\rangle$ متعلق به زیر فضای دژنرسی هستند. $|\bar{u}_1^{(0)}\rangle$ و $|\bar{u}_2^{(0)}\rangle$ هم در این شکل مشخص شده است .



شکل (A-5)

در این شکل همچنین $|u_1\rangle$ و $|u_2\rangle$ را هم رسم کرده ایم. این بردارها را بسیار نزدیک به $|\bar{u}_1^{(0)}\rangle$ و $|\bar{u}_2^{(0)}\rangle$ رسم کرده ایم. علت امر استخراج رابطه (A-42) است که در آن $|u_n\rangle$ بسیار نزدیک به $|\bar{u}_n^{(0)}\rangle$ است. این نتیجه بسیار جالبی می باشد. چه در ابتدای امر اگر $H^{(0)}$ دژنره ای داشته باشیم در زیرفضای دژنرسی، بردارهای ویژه آن به صورت $|u_n^{(0)}\rangle$ داده می شود اما $|\bar{u}_n^{(0)}\rangle$ ها هم می

توانستند بردارها ویژه $H^{(0)}$ باشند. اما به محض آنکه به $H^{(0)}$ عملگر $H^{(1)}$ را اضافه کنیم، بردارهای ویژه H یعنی $|u_n\rangle$ها بسیار نزدیک به $|\overline{u}_n^{(0)}\rangle$ها می گردند و بالاجبار مجبور به تعیین $|\overline{u}_n^{(0)}\rangle$ها شدیم. به قولی $|u_n\rangle$ بردار ویژه عملگر H خیلی نزدیک به زیرفضای دژنرسی است و نه خیلی نزدیک به $|u_n^{(0)}\rangle$. حال برمی گردیم به موضوع ضرایب بسط $|u_n\rangle$ در زیر فضای دژنرسی، با صرفنظر کردن از $S_{n'n}^{(1)}$ هنگامی که $n,n'\in D$ و $n\neq n'$ است . به معنای این است که $|u_n\rangle$ در زیر فضای دژنرسی مولفه ای جزء $|\overline{u}_n^{(0)}\rangle$ ندارد . اگر به شکل (A-5) توجه نمایید لزومی ندارد که مثلاً $|u_1\rangle$ در زیرفضای دژنرسی مولفه های دیگری نداشته باشد، کافی است $|u_1\rangle$ را با کمی انحراف رسم نماییم. بنابراین می بایستی $S_{n'n}^{(1)}$ که در آن $n',n\in D$ و $n'\neq n$ است را تعیین نماییم.

متاسفانه این رابطه را هیچ یک از کتابهای (1) و (2) و (3) استخراج نکرده اند.

برای تعیین $S_{n'n}^{(1)}$ گفته شده از رابطه (A-24) استفاده می کنیم. برای این منظور عنصر ماتریسی $\langle\overline{u}_{n'}^{(0)}|...|\overline{u}_n^{(0)}\rangle$ می گیریم. به دلیل آنکه $H^{(0)}|\overline{u}_n^{(0)}\rangle=E_D^{(0)}|\overline{u}_n^{(0)}\rangle$ است در نتیجه

$$E_n^{(2)}\delta_{n'n}=\frac{i}{2}\sum_{\substack{m\\ \text{کل فضای هیلبرت}}}\Big[\langle\overline{u}_{n'}^{(0)}|S^{(1)}|u_m^{(0)}\rangle\langle u_m^{(0)}|H^{(1)}|\overline{u}_n^{(0)}\rangle-\langle\overline{u}_{n'}^{(0)}|H^{(1)}|u_m^{(0)}\rangle\langle u_m^{(0)}|S^{(1)}|\overline{u}_n^{(0)}\rangle\Big]+\frac{i}{2}S_{n'n}^{(1)}\left(E_n^{(1)}-E_{n'}^{(1)}\right)+iS_{n'n}^{(2)}\left(E_D^{(0)}-E_D^{(0)}\right)\qquad\text{(A-44)}$$

حاصل می گردد. حال اگر در (A-44) $n'\neq n$ انتخاب و در جمعبندی روی اندیس m ، m را به اندیس زیرفضای دژنرسی و اندیس خارج زیرفضای دژنرسی تقسیم نماییم و با در نظر گرفتن رابطه $\langle\overline{u}_m^{(0)}|H^{(1)}|\overline{u}_n^{(0)}\rangle=E_n^{(1)}\delta_{mn}$ به نتیجه

$$0=\frac{i}{2}\left(S_{n'n}^{(1)}E_{n}^{(1)}-S_{n'n}^{(1)}E_{n'}^{(1)}\right)+\sum_{m\notin D}\frac{i}{2}\left(S_{n'm}^{(1)}H_{mn}^{(1)}-H_{n'm}^{(1)}S_{mn}^{(1)}\right)+\frac{i}{2}S_{n'n}^{(1)}\left(E_{n}^{(1)}-E_{n'}^{(1)}\right)$$

می رسیم که می توان آن را به صورت زیر نوشت:

$$2S_{n'n}^{(1)}\left(E_{n'}^{(1)}-E_{n}^{(1)}\right)=\sum_{m\notin D}\left(S_{n'm}^{(1)}H_{mn}^{(1)}-H_{n'm}^{(1)}S_{mn}^{(1)}\right) \quad \text{(A-45)}$$

توجه نمایید که

$$S_{n'n}^{(1)}=\left\langle\bar{u}_{n'}^{(0)}\right|S^{(1)}\left|\bar{u}_{n}^{(0)}\right\rangle$$

و برای $m\notin D$

$$S_{n'm}^{(1)}=\left\langle\bar{u}_{n'}^{(0)}\right|S^{(1)}\left|u_{m}^{(0)}\right\rangle\equiv\frac{1}{i}\frac{H_{n'm}^{(1)}}{\left(E_{D}^{(0)}-E_{m}^{(0)}\right)}$$

بالاخره از رابطه (A-45) نتیجه می گیریم که

$$S_{n'n}^{(1)}=\frac{1}{2i\left(E_{n'}^{(1)}-E_{n}^{(1)}\right)}\sum_{m\notin D}\left\{\frac{H_{n'm}^{(1)}H_{mn}^{(1)}}{\left(E_{D}^{(0)}-E_{m}^{(0)}\right)}-\frac{H_{n'm}^{(1)}H_{mn}^{(1)}}{\left(E_{m}^{(0)}-E_{D}^{(0)}\right)}\right\}$$

$$S_{n'n}^{(1)}=\frac{i}{\left(E_{n'}^{(1)}-E_{n}^{(1)}\right)}\sum_{m\notin D}\frac{H_{n'm}^{(1)}H_{mn}^{(1)}}{\left(E_{m}^{(0)}-E_{D}^{(0)}\right)}\qquad n'\neq n\qquad n',n\notin D \quad \text{(A-46)}$$

رابطه $S_{n'n}^{(1)}$ در (A-46) با در نظر گرفتن مخرج $\left(E_{n'}^{(1)}-E_{n}^{(1)}\right)$ کمیتی است از بی نهایت کوچک مرتبه اول و یگانه کتابی که آن را استخراج نموده کتاب ساکورایی (رابطه *(5-2-14)*) است که از روش دیگری استفاده شده است. در کتابهای دیگر ضریب $S_{n'n}^{(1)}$ استخراج نشده است .

حال اگر در (A-44) $n'=n$ انتخاب کنیم مطابق روشی که منجر به رابطه (A-46) گردید، به نتیجه

$$E_{n}^{(2)}=\frac{i}{2}\sum_{m\notin D}\left(S_{nm}^{(1)}H_{mn}^{(1)}-H_{nm}^{(1)}S_{mn}^{(1)}\right)$$

می رسیم که با جایگزاری $S_{mn}^{(1)}$ و $S_{nm}^{(1)}$ ، $E_{n}^{(2)}$ برابر

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \notin D} \frac{\left|H_{nm}^{(1)}\right|^2}{E_D^{(0)} - E_m^{(0)}} \qquad \text{(A-47)}$$

حال اگر در مسئله ای علاوه بر $H^{(0)}$ عملگر $H^{(1)}$ هم در زیرفضای دژنرسی دارای دژنرسی باشد یعنی $E_n^{(1)} = E_{n'}^{(1)}$ باشد، در این صورت در (A-45) نمی توان طرفین رابطه را بر $\left(E_{n'}^{(1)} - E_n^{(1)}\right)$ تقسیم نمود و به نتیجه (A-46) رسید. در این حالت قید جدیدی در مسئله ایجاد می گردد که به موجب (A-45) و (A-46) به صورت زیر است :

$$\sum_{m \notin D} \frac{H_{n'm}^{(1)} H_{mn}^{(1)}}{E_m^{(0)} - E_D^{(0)}} = 0 \qquad \text{(A-48)}$$

در حالت کلی رابطه فوق با انتخاب بردار پایه $\left\{\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle\right\}$ برقرار نمی گردد مگر آنکه به جای انتخاب دسته بردار پایه دوم یعنی $\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle$ها دستگاه بردار پایه سومی نظیر $\left|\bar{\bar{u}}_n^{(0)}\right\rangle$ انتخاب نماییم که رابطه (A-48) برقرار گردد. نکته بسیار مهمی که از قید (A-48) حاصل می شود این است که با اعمال قید یاد شده فرمول $E_n^{(2)}$ هم دیگر قابل استفاده نمی شود، چون در فرمول $E_n^{(2)}$، عملگر $H^{(1)}$ در دستگاه بردار پایه دوم $\left\{\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle\right\}$ محاسبه شده است .

ساکورای در این باره (ص 301) اظهار می دارد برای آنکه از (A-46) بتوان استفاده کرد می بایستی دژنرسی $H^{(1)}$ را برطرف نمود. اگر $H^{(1)}$ دژنرسی داشته باشد در هر بردار پایه متعلق به زیرفضای دژنرسی باز هم $H^{(1)}$ دژنره باقی می ماند. در ضمن ساکورای درباره اینکه فرمول $E_n^{(2)}$ در دستگاه $\left\{\left|\bar{u}_n^{(0)}\right\rangle\right\}$ دیگر قابل استفاده نیست، بحثی نکرده است.

مولف این نتایج به دست آمده را برای مسئله سه بعدی زیر نشان داده است:

هرگاه $H^{(0)}$ یک عملگر (3×3) که دارای دژنرسی مرتبه دوم باشد، به طوریکه نمایش $H^{(1)}$ هم در همان زیرفضای دژنرسی دارای دژنرسی باشد یعنی

$$H^{(0)}=\begin{pmatrix} E_D^{(0)} & 0 & 0 \\ 0 & E_D^{(0)} & 0 \\ 0 & 0 & E_3^{(0)} \end{pmatrix} \qquad H^{(1)}=\begin{pmatrix} E_1^{(1)} & 0 & a \\ 0 & E_1^{(1)} & b \\ a^* & b^* & E_3^{(1)} \end{pmatrix} \tag{A-49}$$

(a و b مقادیر دلخواه بی نهایت کوچک مرتبه اول هستند.)در این صورت مشاهده می گردد که شرط (A-48) برقرار نمی گردد، چه برای ($n'=1$ و $n=2$) و ($n=1$ و $n'=2$)

$$\begin{aligned} \frac{H_{13}^{(1)}H_{32}^{(1)}}{E_3^{(0)}-E_D^{(0)}} &= \frac{ab^*}{E_3^{(0)}-E_D^{(0)}} \neq 0 \\ \frac{H_{23}^{(1)}H_{31}^{(1)}}{E_3^{(0)}-E_D^{(0)}} &= \frac{ba^*}{E_3^{(0)}-E_D^{(0)}} \neq 0 \end{aligned} \tag{A-50}$$

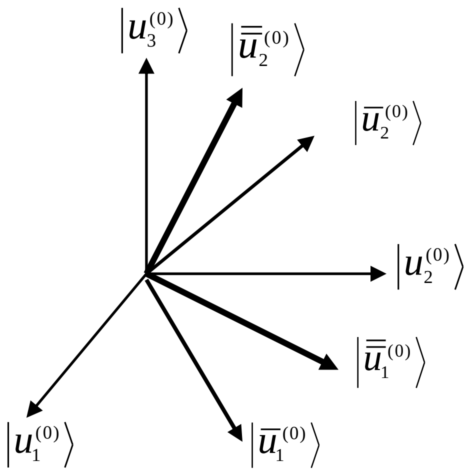
حال این سوال پیش می آید که آیا دسته بردار پایه سومی یافت می گردد که در آن رابطه (A-48) برقرار گردد ؟ در مقام پاسخ ترکیب خطی دلخواهی از بردارهای $\left|\overline{u}_n^{(0)}\right\rangle$ در نظر می گیریم یعنی برای مثال مورد نظر ما

$$\begin{aligned} \left|\overline{\overline{u}}_1^{(0)}\right\rangle &= \sum_{i=1}^{2} c_i^{(1)}\left|\overline{u}_i^{(0)}\right\rangle \\ \left|\overline{\overline{u}}_2^{(0)}\right\rangle &= \sum_{i=1}^{2} c_i^{(2)}\left|\overline{u}_i^{(0)}\right\rangle \end{aligned} \tag{A-51}$$

برای این دسته بردار پایه سوم داریم

$$\begin{aligned} \left\langle\overline{\overline{u}}_1^{(0)}\right|H^{(1)}\left|\overline{\overline{u}}_1^{(0)}\right\rangle &= E_1^{(1)} \\ \left\langle\overline{\overline{u}}_2^{(0)}\right|H^{(1)}\left|\overline{\overline{u}}_1^{(0)}\right\rangle &= 0 \end{aligned} \tag{A-52}$$

در رابطه دوم (A-52) $\left|\overline{\overline{u}}_2^{(0)}\right\rangle$ را طوری انتخاب کرده ایم که بر $\left|\overline{\overline{u}}_1^{(0)}\right\rangle$ عمود باشد. به شکل(A-6) مراجعه نمایید.



شکل(A-6)

حال $\left|\bar{\bar{u}}_i^{(0)}\right\rangle$ها را طوری باید انتخاب نمود که عنصر $\left\langle \bar{\bar{u}}_1^{(0)} \middle| H^{(1)} \middle| u_3^{(0)} \right\rangle$ صفر شود و در نتیجه شرط (A-48) و در نهایت (A-50) برقرار می گردد. توجه نمایید که دستگاه بردار پایه سوم عبارتند از $\left|u_3^{(0)}\right\rangle$ و $\left|\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right\rangle$ و $\left|\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right\rangle$.

$$\left\langle \bar{\bar{u}}_1^{(0)} \middle| H^{(1)} \middle| u_3^{(0)} \right\rangle = \left\{ c_1^{(1)^*} \left\langle \bar{u}_1^{(0)} \right| + c_2^{(1)^*} \left\langle \bar{u}_2^{(0)} \right| \right\} H^{(1)} \left| \bar{u}_3^{(0)} \right\rangle = 0$$

$$c_1^{(1)^*} H_{13}^{(1)} + c_2^{(1)^*} H_{23}^{(1)} = 0$$

$$c_2^{(1)^*} = -\frac{c_1^{(1)^*} H_{13}^{(1)}}{H_{23}^{(1)}} \rightarrow c_2^{(1)} = -\frac{c_1^{(1)} H_{31}^{(1)}}{H_{32}^{(1)}} \qquad \text{(A-53)}$$

بنابراین $\left|\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right\rangle$ نرمالیزه از روابط

$$\left|\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right\rangle = c_1^{(1)} \left[\left|\bar{u}_1^{(0)}\right\rangle - \frac{H_{31}^{(1)}}{H_{32}^{(1)}} \left|\bar{u}_2^{(0)}\right\rangle \right]$$

$$= c_1^{(1)} \left[\left|\bar{u}_1^{(0)}\right\rangle - \frac{a^*}{b^*} \left|\bar{u}_2^{(0)}\right\rangle \right]$$

$$\left|c_1^{(1)}\right|^2 + \left|c_2^{(1)}\right|^2 = 1$$

$$\left|c_1^{(1)}\right|^2 + \frac{|a|^2}{|b|^2}\left|c_1^{(1)}\right|^2 = 1$$

$$\left|c_1^{(1)}\right|^2 = \frac{|b|^2}{|a|^2 + |b|^2} \tag{A-54}$$

به دست می آید. بردار $\left|\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right\rangle$ از روی رابطه عمود بودن آن بر $\left|\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right\rangle$ و نرمالیزه بودن آن به دست می آید که تعیین آن بسیار آسان است.

$$\left|\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right\rangle = c_1^{(2)}\left[\left|\bar{u}_1^{(0)}\right\rangle + \frac{b}{a}\left|\bar{u}_2^{(0)}\right\rangle\right] \tag{A-55}$$

$$\left|c_1^{(2)}\right|^2 = \frac{|a|^2}{|a|^2 + |b|^2} \tag{A-55-a}$$

بنابراین عملگر $H^{(1)}$ در دستگاه بردار پایه سوم دارای شکل جدید زیر می گردد

$$\left\langle\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right|H^{(1)}\left|\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right\rangle = E_1^{(1)}$$

چون $\left|\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right\rangle$ را عمود بر $\left|\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right\rangle$ انتخاب کرده ایم

$$\left\langle\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right|H^{(1)}\left|\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right\rangle = 0$$

$$\left\langle\bar{\bar{u}}_1^{(0)}\right|H^{(1)}\left|u_3^{(0)}\right\rangle = c_1^{(1)^*}\left[H_{13}^{(1)} - \frac{a}{b}H_{23}^{(1)}\right]$$

$$= c_1^{(1)^*}\left[a - \frac{a}{b}b\right] = 0$$

البته نیاز به محاسبه رابطه سوم نداشتیم چون دستگاه بردار پایه سوم را با قید صفر شدن رابطه سوم تعیین کرده بودیم . در ضمن

$$\left\langle\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right|H^{(1)}\left|\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right\rangle = E_1^{(1)}$$

$$\left\langle \bar{\bar{u}}_2^{(0)} \right| H^{(1)} \left| u_3^{(0)} \right\rangle = c_1^{(2)^*} \left[\left\langle \bar{u}_1^{(0)} \right| + \frac{b^*}{a^*} \left\langle \bar{u}_2^{(0)} \right| \right] H^{(1)} \left| u_3^{(0)} \right\rangle$$

$$= c_1^{(2)^*} \left[H_{13}^{(1)} + \frac{b^*}{a^*} H_{23}^{(1)} \right]$$

$$= c_1^{(2)^*} \left[a + \frac{b^* b}{a^*} \right] = \frac{|a|}{a^*} \sqrt{|a|^2 + |b|^2} \equiv \Omega$$

بنابراین در دستگاه بردار پایه سوم نمایش $H^{(1)}$ به صورت

$$H^{(1)} = \begin{pmatrix} E_1^{(1)} & 0 & 0 \\ 0 & E_1^{(1)} & \Omega \\ 0 & \Omega & E_3^{(1)} \end{pmatrix} \quad \text{(A-56)}$$

حال محاسبه $E_n^{(2)}$ با استفاده از دستگاه بردار پایه سوم برابر می شود با

$$E_n^{(2)} = \sum_{m \notin D} \frac{\left| H_{nm}^{(1)} \right|^2}{E_D^{(0)} - E_m^{(0)}}$$

$$\text{(A-57)} \qquad \begin{cases} E_1^{(2)} = 0 \\ E_2^{(2)} = \dfrac{\left| H_{23}^{(1)} \right|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)}} = \dfrac{|a|^2 + |b|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)}} \\ E_3^{(2)} = \dfrac{\left| H_{31}^{(1)} \right|^2}{E_3^{(0)} - E_1^{(0)}} + \dfrac{\left| H_{32}^{(1)} \right|^2}{E_3^{(0)} - E_2^{(0)}} = -\dfrac{|a|^2 + |b|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)}} \end{cases}$$

حال اگر از دستگاه بردارهای دوم یعنی $\left| u_3^{(0)} \right\rangle$ و $\left| \bar{u}_2^{(0)} \right\rangle$ و $\left| \bar{u}_1^{(0)} \right\rangle$ استفاده کنیم نمایش $H^{(1)}$ با

رابطه (A-49) داده شده است.

$$
\text{(A-58)}\qquad
\begin{cases}
E_1^{(2)} = \dfrac{\left|H_{13}^{(1)}\right|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)}} = \dfrac{|a|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)}} \\[2ex]
E_2^{(2)} = \dfrac{H_{23}^{(1)}}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)}} = \dfrac{|b|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)}} \\[2ex]
E_3^{(2)} = \text{تغییر نکرده}
\end{cases}
$$

با مشاهده روابط (A-57) و (A-58) در می یابیم نتایج به دست آمده برای $E_n^{(2)}$ در زیرفضای دژنرسی با همدیگر سازگاری ندارد.کدامین جواب درست است ؟ مطمئن ترین روش برای پاسخ دادن به این سوال حل دترمینان مشخصه هامیلتونین H که با رابطه (A-49) داده شده می باشد.

$$
\begin{aligned}
\varepsilon_1 &= E_D^{(0)} + E_1^{(1)} \\
\varepsilon_2 &= E_D^{(0)} + E_1^{(1)} \equiv \varepsilon_1 \\
\varepsilon_3 &= E_3^{(0)} + E_3^{(1)}
\end{aligned}
\qquad\qquad
H = \begin{pmatrix} \varepsilon_1 & 0 & a \\ 0 & \varepsilon_1 & b \\ a^* & b^* & \varepsilon_3 \end{pmatrix} \text{(A-59)}
$$

$$
\det(H - 1\lambda) = 0 \rightarrow \begin{vmatrix} \varepsilon_1 - \lambda & 0 & a \\ 0 & \varepsilon_1 - \lambda & b \\ a^* & b^* & \varepsilon_3 - \lambda \end{vmatrix} = 0
$$

$$
\lambda_1 = \varepsilon_1
$$

$$
\lambda^2 - \lambda\left(\varepsilon_1 + \varepsilon_3\right) - |a|^2 - |b|^2 + \varepsilon_1\varepsilon_3 = 0
$$

$$
\lambda_{\substack{2\\3}} = \frac{1}{2}\left\{\left(\varepsilon_1 + \varepsilon_3\right) \pm \sqrt{\left(\varepsilon_1 - \varepsilon_3\right)^2 + 4(|a|^2 + |b|^2)}\right\}
$$

اگر $\varepsilon_3 > \varepsilon_1$ و $\varepsilon_3 - \varepsilon_1 \gg |a|^2, |b|^2$ باشد

$$\lambda_{\substack{2\\3}} = \frac{1}{2}\left\{(\varepsilon_1+\varepsilon_3) \pm (\varepsilon_3-\varepsilon_1)\left[1+\frac{4(|a|^2+|b|^2)}{(\varepsilon_3-\varepsilon_1)^2}\right]^{\frac{1}{2}}\right\}$$

$$\lambda_2 \simeq \varepsilon_1 - \frac{|a|^2+|b|^2}{\varepsilon_3-\varepsilon_1}$$

$$\lambda_2 \simeq \varepsilon_3 + \frac{|a|^2+|b|^2}{\varepsilon_3-\varepsilon_1}$$

به قولی

$$\begin{cases} \lambda_1 = \varepsilon_1 = E_D^{(0)} + E_1^{(1)} + 0 \\ \lambda_2 = E_D^{(0)} + E_1^{(1)} + \dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)} + (E_1^{(1)} - E_3^{(1)})} \\ \lambda_3 = E_3^{(0)} + E_3^{(1)} - \dfrac{|a|^2+|b|^2}{E_D^{(0)} - E_3^{(0)} + (E_1^{(1)} - E_3^{(1)})} \end{cases} \tag{A-60}$$

با حذف جملات بی نهایت کوچک مرتبه اول در مقایسه اختلاف ترازهای انرژی $H^{(0)}$ به موجب رابطه (A-60) نتیجه می گیریم که اعمال قید(A-48) در حالتی که $H^{(1)}$ در زیرفضای دژنرسی عملگر $H^{(0)}$ دژنرسی داشته باشد ضروریست و استفاده از فرمول $E_n^{(2)}$ فقط در بردار پایه $\left|\bar{\bar{u}}_2^{(0)}\right\rangle$ درست می باشد.