X1-102 (2014/08/22)

اختلال ِ تبهگن

محمد خرمی mamwad@mailaps.org

یک دستورالعمل ِ سیستماتیک برا یِ تعیین ِ اختلالی یِ ویژه‌مقدارها و ویژه‌بردارها یِ یک عملگر ِ اِرمیتی داده میشود، که هر مرتبه ای معتبر است، حتا اگر عملگر تبهگن باشد.

0 درامد

اختلال برا یِ قطری-کردن ِ یک عملگر ِ اِرمیتی بر این اساس است که ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها یِ عملگر ِ مختل-نشده (H) معلوم ند. برا یِ ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها یِ عملگر ِ مختل-شده $(H+V)$ یک بسط حُل ِ مقدارها یِ مختل-نشده فرض میشود، و ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها جمله-به-جمله محاسبه میشوند. معادله یِ ویژه‌برداری برا یِ H چنین است.

$$H\,e_i = \lambda_i\,e_i. \tag{1}$$

e_i یک ویژه‌بردار ِ H، و λ_i ویژه‌مقدار ِ متناظر است. H اِرمیتی ست، پس ویژه‌مقدارها یَش حقیقی اند. ویژه‌بردارها یِ متناظر با ویژه‌مقدارها یِ متمایز هم بر یکدیگر عمود ند. اگر H تبهگن باشد هم میشود در هر ویژه‌فضا یَش یک پایه یِ متعامد گرفت. به این ترتیب ویژه‌بردارها یِ H بر هم عمود میشود. و

البته میشود آنها را یکه هم کرد. چون H اِرمیتی ست، طیف ِ H کامل است. یعنی یک پایه هست که هر یک از اعضا یَش ویژه‌بردار ِ H است. به این ویژه‌پایه یِ H میگویم. و البته این پایه را میشود یکه‌متعامد کرد. از این پس فرض میکنم چنین است. پایه را با e نشان میدهم:

$$\langle e_i, e_j\rangle = \delta_{i\,j}, \tag{2}$$

یا

$$e_i^\dagger\, e_j = \delta_{i\,j}. \tag{3}$$

میخاهم جواب ِ معادله یِ ویژه‌برداری برا یِ $(H+V)$ را تا مرتبه یِ یک نسبت به V حساب کنم. ویژه‌بردارها و ویژه‌مقدارها یِ متناظر را با، به ترتیب، $(e_i+\delta e_i)$ و $(\lambda_i+\delta\lambda_i)$ نشان میدهم. معادله میشود

$$(H+V)\,(e_i+\delta e_i) = (\lambda_i+\delta\lambda_i)\,(e_i+\delta e_i), \tag{4}$$

و تا اولین مرتبه یِ اختلال،

$$H\,(e_i+\delta e_i) + V\,e_i = \lambda_i\,(e_i+\delta e_i) + (\delta\lambda_i)\,e_i + o(V). \tag{5}$$

$e_i^\dagger$ را از چپ در این ضرب میکنم. نتیجه میشود

$$\delta\lambda_i = e_i^\dagger\,V\,e_i + o(V). \tag{6}$$

این تغییر ِ ویژه‌مقدار در مرتبه یِ یک ِ اختلال است. برا یِ محاسبه یِ ویژه‌بردار تا مرتبه یِ یک، توجه میکنم که ویژه‌پایه یِ $(H+V)$ را هم میشود یکه‌متعامد کرد. دنبال ِ این ویژه‌پایه یِ یکه‌متعامد َم. (δe_i) را چنین مینویسم.

$$\delta e_i = \alpha_i\,e_i + \delta_\perp e_i, \tag{7}$$

که $(\delta_\perp e_i)$ بر e_i عمود است. از یکه-بودن ِ $(e_i+\delta e_i)$ نتیجه میشود

$$\alpha_i + \alpha_i^\dagger = o(V). \tag{8}$$

پس α_i (تا مرتبه یِ اول ِ اختلال) مُهومی یِ محض است. رُشن است که اگر $(e_i+\delta e_i)$ را به $[\exp(-\alpha_i)]\,(e_i+\delta e_i)$ تبدیل کنم، ویژه‌پایه یِ قبلی به یک ویژه‌پایه یِ دیگر تبدیل میشود که همچنان

یکه‌متعامد است (تا مرتبه یِ یک نسبت به V). چنین میکنم. از

$$
\begin{aligned}
[\exp(-\alpha_i)]\,(e_i+\delta e_i)-e_i &= -\alpha_i\,e_i+\delta_i+o(V),\\
&= \delta_\perp e_i+o(V),
\end{aligned}
\tag{9}
$$

دیده میشود با استفاده از $[\exp(-\alpha_i)]\,(e_i+\delta e_i)$ به جا یِ $(e_i+\delta e_i)$، تغییر ِ e_i تا مرتبه یِ یک بر e_i عمود است. پس همیشه میشود ویژه‌پایه یِ مختل-شده را چنان گرفت که تغییر ِ هر عضو ِ آن تا مرتبه یِ یک بر آن عضو عمود باشد. چنین میکنم. یعنی

$$e_i^\dagger\,(\delta e_i)=o(V), \tag{10}$$

یا

$$\delta e_i=\delta_\perp e_i+o(V). \tag{11}$$

با این انتخاب، $e_j^\dagger$ با $j\ne i$ را از چپ در (5) ضرب میکنم:

$$\lambda_j\,e_j^\dagger\,(\delta e_i)+e_j^\dagger\,V\,e_i=\lambda_i\,e_j^\dagger\,(\delta e_i)+o(V),\qquad j\ne i, \tag{12}$$

یا

$$e_j^\dagger\,V\,e_i=(\lambda_i-\lambda_j)\,e_j^\dagger\,(\delta e_i)+o(V),\qquad j\ne i. \tag{13}$$

اگر H تبهگن نباشد، وقت ی j با i برابر نباشد، λ_j هم با λ_i فرق دارد. پس

$$e_j^\dagger\,(\delta e_i)=\frac{e_j^\dagger\,V\,e_i}{\lambda_i-\lambda_j}+o(V),\qquad j\ne i, \tag{14}$$

که همراه با (10) نتیجه میدهد

$$\delta e_i=\sum_{\substack{j\\ j\ne i}}\frac{e_j\,e_j^\dagger\,V\,e_i}{\lambda_i-\lambda_j}+o(V). \tag{15}$$

اما اگر H تبهگن باشد، رابطه یِ (13) برا یِ $(\lambda_j=\lambda_i)$ ناسازگار است، مگر طرف ِ چپ صفر باشد (دست- ِ-کم تا مرتبه یِ یک نسبت به V). پس باید پایه یِ خاص ی گرفت که ضمن ِ این که ویژه‌پایه یِ H است، چنان باشد که طرف ِ چپ ِ (13) به ازا یِ $(\lambda_j=\lambda_i)$ صفر شود. این پایه را با f نشان میدهم:

$$f_j^\dagger\,V\,f_i=0,\qquad [(j\ne i)\wedge(\lambda_j=\lambda_i)]. \tag{16}$$

البته این علاوه بر شرطها یِ متناظر با رابطه‌ها یِ (1) و (3) است:

$$H\,f_i = \lambda_i\,f_i. \tag{17}$$

$$f_i^\dagger\,f_j = \delta_{i\,j}. \tag{18}$$

با استفاده از f به جا یِ e، رابطه یِ (13) سازگار میشود. اما ضمنَن بعض ی از معادلات از دست میرود. در واقع (14) میشود

$$f_j^\dagger\,(\delta f_i) = \frac{f_j^\dagger\,V\,f_i}{\lambda_i - \lambda_j} + o(V), \qquad \lambda_j \neq \lambda_i. \tag{19}$$

از معادله یِ متناظر با (13) مقدار ِ $[f_j^\dagger\,(\delta f_i)]$ به ازا یِ $(\lambda_j = \lambda_i)$ تعیین نمیشود. رابطه یِ (16) را میشود چنین نوشت.

$$f_j^\dagger\,V\,f_i = V_i\,\delta_{i\,j}, \qquad \lambda_j = \lambda_i, \tag{20}$$

و مانسته یِ (6) هم میشود

$$\delta\lambda_i = V_i + o(V). \tag{21}$$

رابطه‌ها یِ (19) تا (21) بحث ِ معمول ِ اختلال ِ تبهگن ند (مثلَن [1]). با اینها ویژه‌مقدار تا مرتبه یِ یک ِ اختلال حساب میشود. اما ویژه‌بردار حتا تا این مرتبه کاملَن محاسبه نشده. نَ تنها این. رابطه‌ها یِ (1) و (3) و (16)، یا به جا یِ رابطه یِ اخیر (20)، پایه یِ f را تا حد ِ یک فاز ِ ضربی مشخص میکنند، اگر تحدید ِ V به ویژه‌فضا یِ H ناتبهگن باشد. اگر نَ خُد ِ f هم به طُر ِ یکتا مشخص نمیشود. یعنی ویژه‌پایه تا مرتبه یِ صفر هم کاملَن مشخص نیست. برا یِ تعیین ِ ویژه‌پایه باید اختلال در مرتبه‌ها یِ بالاتر را به کار بُرد.

1 یک روش ِ تکرار

یک نگرش ِ دیگر به مسئله یِ قطری-کردن ِ $(H+V)$ این است که بخش ی از V به H اضافه شود، چنان که باقیمانده یِ V از مرتبه ای بیشتر نسبت به V باشد:

$$H + V = H^{[1]} + V^{[1]}. \tag{22}$$

$$V^{[1]} = o(V). \tag{23}$$

و البته پایه یِ یکه‌متعامد ِ $e^{[1]}$ هم چنان به دست آید که $e^{[1]}$ ویژه‌پایه یِ $H^{[1]}$ باشد. اگر این کار شدنی باشد، یک ساز-ُ-کار ِ سیستماتیک برا یَش پیدا شود، می‌شود آن را تکرار کرد. از $(H^{[1]}, V^{[1]}, e^{[1]})$ مانسته یِ مرتبه یِ بعدی یِ تکرار به دست می‌آید، که $(H^{[2]}, V^{[2]}, e^{[2]})$ ست. به طُر ِ کلی، دنبال ِ روش ی یَم که از $(H^{[n]}, V^{[n]}, e^{[n]})$، که $H^{[n]}$ و $V^{[n]}$ اِرمیتی اند و $e^{[n]}$ یک ویژه‌پایه یِ یکه‌متعامد ِ $H^{[n]}$ است، $(H^{[n+1]}, V^{[n+1]}, e^{[n+1]})$ را بدهد که $H^{[n+1]}$ و $V^{[n+1]}$ اِرمیتی اند، $e^{[n+1]}$ یک ویژه‌پایه یِ یکه‌متعامد ِ $H^{[n+1]}$ است، و البته

$$H^{[n]} + V^{[n]} = H^{[n+1]} + V^{[n+1]}. \qquad (24)$$

$$V^{[n+1]} = o(V^{[n]}). \qquad (25)$$

از (H, V, e) شروع می‌کنم. e' را چنان می‌سازم که یک ویژه‌پایه یِ یکه‌متعامد ِ H باشد و (16) را براورَد. این یعنی تحدید ِ V به هر ویژه‌فضا یِ H را قطری می‌کنم، رابطه یِ (20). عملگر ِ A را با اثر َش بر f تعریف می‌کنم:

$$A\, f_i = \sum_{\substack{k \\ \lambda_k \neq \lambda_i}} \frac{f_k^\dagger\, V\, f_i}{\lambda_i - \lambda_k}\, f_k. \qquad (26)$$

نشان می‌دهم A پادارمیتی ست. برا یِ این کار عنصرها یِ ماتریسی یِ A در پایه یِ f را حساب می‌کنم:

$$\begin{aligned} f_i^\dagger\, A\, f_j &= \sum_{\substack{k \\ \lambda_k \neq \lambda_j}} \frac{f_k^\dagger\, V\, f_j}{\lambda_j - \lambda_k}\, \delta_{i\,k}, \\ &= \begin{cases} 0, & \lambda_j = \lambda_i \\ \dfrac{f_i^\dagger\, V\, f_j}{\lambda_j - \lambda_i}, & \lambda_i \neq \lambda_j \end{cases}. \end{aligned} \qquad (27)$$

چون V اِرمیتی و f یکه‌متعامد است،

$$f_j^\dagger\, V\, f_i = \overline{(f_i^\dagger\, V\, f_j)}, \qquad (28)$$

که $\overline{X}$ مزدوج ِ مختلط ِ X است. از اینجا دیده می‌شود

$$f_j^\dagger\, A\, f_i = -\overline{(f_i^\dagger\, A\, f_j)}. \qquad (29)$$

پس A پادارمیتی ست، و در نتیجه $[\exp(A)]$ یکانی ست:

$$[\exp(A)]^\dagger = [\exp(A)]^{-1}. \qquad (30)$$

پایه یِ جدید، $e^{[1]}$، را چنین تعریف میکنم.

$$e_i^{[1]} = [\exp(A)]\, f_i. \tag{31}$$

چون $[\exp(A)]$ یکانی ست، $e^{[1]}$ هم یکه‌متعامد است. دیده میشود

$$\begin{aligned} e_i^{[1]\,\dagger}\, H\, e_j^{[1]} &= f_i^\dagger\, [\exp(A)]^\dagger\, H\, [\exp(A)]\, f_j, \\ &= f_i^\dagger\, (H + H\,A - A\,H)\, f_j + o(V), \\ &= \lambda_i\, \delta_{i\,j} + (\lambda_i - \lambda_j)\, (f_i^\dagger\, A\, f_j) + o(V), \end{aligned} \tag{32}$$

که نشان میدهد

$$e_i^{[1]\,\dagger}\, H\, e_j^{[1]} = \left\{ \begin{matrix} \lambda_i\, \delta_{i\,j}, & \lambda_j = \lambda_i \\ \\ -f_i^\dagger\, V\, f_j, & \lambda_i \ne \lambda_j \end{matrix} \right\} + o(V). \tag{33}$$

همچنین،

$$\begin{aligned} e_i^{[1]\,\dagger}\, V\, e_j^{[1]} &= f_i^\dagger\, V\, f_j + o(V), \\ &= \left\{ \begin{matrix} V_i\, \delta_{i\,j}, & \lambda_j = \lambda_i \\ \\ f_i^\dagger\, V\, f_j, & \lambda_i \ne \lambda_j \end{matrix} \right\} + o(V). \end{aligned} \tag{34}$$

به این ترتیب،

$$\begin{aligned} e_i^{[1]\,\dagger}\, (H + V)\, e_j^{[1]} &= \left\{ \begin{matrix} (\lambda_i + V_i)\, \delta_{i\,j}, & \lambda_j = \lambda_i \\ \\ 0, & \lambda_i \ne \lambda_j \end{matrix} \right\} + o(V), \\ &= (\lambda_i + V_i)\, \delta_{i\,j} + o(V). \end{aligned} \tag{35}$$

$H^{[1]}$ را با اثرَش بر پایه یِ $e^{[1]}$ تعریف میکنم:

$$H^{[1]}\, e_i^{[1]} = (\lambda_i + V_i)\, e_i^{[1]}. \tag{36}$$

دیده میشود

$$e_i^{[1]\,\dagger}\, H^{[1]}\, e_j^{[1]} = (\lambda_i + V_i)\, \delta_{i\,j}. \tag{37}$$

$V^{[1]}$ را هم چنین تعریف میکنم.

$$V^{[1]} = H + V - H^{[1]}. \tag{38}$$

رُشن است که $H^{[1]}$ و $V^{[1]}$ اِرمیتی یند. همچنین،

$$\begin{aligned} e_i^{[1]\,\dagger}\, V^{[1]}\, e_j^{[1]} &= e_i^{[1]\,\dagger}\, (H + V - H^{[1]})\, e_j^{[1]}, \\ &= o(V). \end{aligned} \tag{39}$$

به این ترتیب، $(H^{[1]}, V^{[1]}, e^{[1]})$ چنان است که $H^{[1]}$ و $V^{[1]}$ اِرمیتی یند، $e^{[1]}$ یک ویژه‌پایه یِ یکه‌متعامد ِ $H^{[1]}$ است، و (22) و (23) براورده میشوند.

دستور ِ بالا برا یِ ساختن ِ $(H^{[1]}, V^{[1]}, e^{[1]})$ از رو یِ (H, V, e) را میشود تکرار کرد و یک روش ِ استقرایی برا یِ ساختن ِ $(H^{[n]}, V^{[n]}, e^{[n]})$ داد. تعریف میکنم،

$$(H^{[0]}, V^{[0]}, e^{[0]}) := (H, V, e). \tag{40}$$

با داشتن ِ $(H^{[n]}, V^{[n]}, e^{[n]})$، که $H^{[n]}$ و $V^{[n]}$ اِرمیتی یند و $e^{[n]}$ یک ویژه‌پایه یِ یکه‌متعامد ِ $H^{[n]}$ است،

$$e_j^{[n]\,\dagger}\, H^{[n]}\, e_i^{[n]} = \lambda_i^{[n]}\, \delta_{i\,j}, \tag{41}$$

$f^{[n]}$ را چنان میسازم که یک ویژه‌پایه یِ یکه‌متعامد ِ $H^{[n]}$ باشد،

$$f_j^{[n]\,\dagger}\, H^{[n]}\, f_i^{[n]} = \lambda_i^{[n]}\, \delta_{i\,j}, \tag{42}$$

و مانسته یِ (16) را براورَد:

$$f_j^{[n]\,\dagger}\, V^{[n]}\, f_i^{[n]} = 0, \qquad [(j \neq i) \wedge (\lambda_j^{[n]} = \lambda_i^{[n]})]. \tag{43}$$

در این صورت،

$$f_j^{[n]\,\dagger}\, V^{[n]}\, f_i^{[n]} = V_i^{[n]}\, \delta_{i\,j}, \qquad \lambda_j^{[n]} = \lambda_i^{[n]}, \tag{44}$$

که مانسته یِ (20) است. عملگر ِ $A^{[n]}$ را مثل ِ (26) با اثر َش بر $f^{[n]}$ تعریف میکنم:

$$A^{[n]}\, f_i^{[n]} = \sum_{\substack{k \\ \lambda_k \neq \lambda_i}} \frac{f_k^{[n]\,\dagger}\, V^{[n]}\, f_i^{[n]}}{\lambda_i^{[n]} - \lambda_k^{[n]}}\, f_k^{[n]}. \tag{45}$$

تعریف میکنم

$$e_i^{[n+1]} = [\exp(A^{[n]})]\, f_i^{[n]}. \tag{46}$$

$$H^{[n+1]}\, e_i^{[n+1]} = (\lambda_i^{[n]} + V_i^{[n]})\, e_i^{[n+1]}. \tag{47}$$

$$V^{[n+1]} = H^{[n]} + V^{[n]} - H_i^{[n+1]}. \tag{48}$$

با اثبات ی کاملَن مشابه با آنچه در ساختنِ $(H^{[1]}, V^{[1]}, e^{[1]})$ از (H, V, e) به کار رفت، دیده میشود $(H^{[n+1]}, V^{[n+1]}, e^{[n+1]})$ ویژه‌گیها یِ لازم را دارد.

2 پانوشتها

[1] J. J. Sakurai; "modern quantum mechanics" 3rd edition (Addison-Wesley, 1995) chapter 5