دانشگاه اصفهان
دانشکدهٔ علوم — گروه فیزیک

پایان نامهٔ کارشناسی ارشد فیزیک حالت جامد

مدل هابارد

بررسی حل دقیق در یک بعد

استاد راهنما
دکتر اعظم پورقاضی

استاد مشاور
دکتر احمد پرورش

نگارش
جواد رشدی دیزجی

شهریور ۱۳۷۹

تقدیم به

پدر و مادر مهربانم

به پاس حمایتهای فراوانشان

قدردانی

پس از حمد و سپاس بی‌منتها به درگاه خداوند متعال لازم می‌دانم که از زحمات گرانقدر استاد خود، سرکار خانم دکتر اعظم پورقاضی که در کلیه مراحل انجام این پایان نامه بسیار صمیمانه مرا یاری نموده‌اند تشکر و قدردانی نمایم. همچنین از استاد گرانقدر جناب آقای دکتر احمد پرورش و کلیه کسانی که مرا در انجام این پایان نامه یاری نموده‌اند سپاسگزاری می‌نمایم.

جواد رشدی دیزجی

شهریور ۱۳۷۹

چکیده

موفقیت مدل هابارد در توصیف همبستگی الکترونی برای الکترونهای d در فلزات واسط نظر بسیاری از فیزیک‌دانان را به خود جلب کرد. اهمیت ویژهٔ این مدل در توصیف گذار مات فلز–عایق و در ابررساناهای با T_c بالا است.

در این پایان نامه با معرفی مدل هابارد به بررسی هامیلتونی هابارد می‌پردازیم.

هامیلتونی هابارد حلهای تقریبی بسیاری دارد که برخی از آنها را نیز به اختصار معرفی می‌کنیم، و شرط وجود فرومغناطیس در این حلها را بررسی می‌کنیم.

پاسخ‌های دقیق برای مدل هابارد بسیار نادر هستند و تنها برای حالتهای خاص وجوددارند. در اینجا ما به بررسی پاسخ دقیق در یک بعد نیز پرداخته‌ایم.

فهرست مندرجات

۱ هامیلتونی دستگاههای بدون برهمکنش در فرمولبندی کوانتش ثانوی ۳

۱–۱ مقدمه ۳

۱–۲ تقریب هارتری ۵

۱–۳ هامیلتونی تک ذره‌ای در کوانتش ثانوی ۷

۱–۴ هامیلتونی N ذره‌ای و نمایش اعداد اشغال ۱۲

۱–۵ جمع بندی ۲۲

۲ هامیلتونی در حضور برهمکنش و مدل هابارد ۲۳

۲–۱ برهمکنش جفت ذره ۲۴

۲–۲ تقریب سخت مقید ۲۷

۲–۳ مدل هابارد ۳۱

۳ توابع گرین ۳۴

۳–۱ نمایش شرودینگر ۳۴

۳–۲ نمایش هایزنبرگ ۳۵

۳–۳ نمایش برهمکنشی ۳۶

۳–۴ ماتریس $\hat{S}$ ۴۰

۳–۵ برقراری برهمکنش به طور بی‌دررو ۴۲

۳–۶ تابع گرین فرمیونی دمای صفر ۴۳

۳–۷ تفسیر فیزیکی تابع گرین ۴۵

۳–۸ توابع گرین تاخیری و تعجیلی ۴۶

۳–۹ تابع گرین فرمیونی دمای متناهی ۴۹

۴ حل تقریبی مدل هابارد ۵۳

۴–۱ پاسخ دقیق در حد اتمی ۵۳

۴–۲ پاسخ تقریبی ۵۷

۴–۳ خواص پاسخ تقریبی ۶۱

۴–۴ مثال دو الکترونی ۶۸

۴–۵ شرط فرومغناطیس ۷۱

۴–۶ جمع بندی ۷۵

۵ حل دقیق مدل هابارد در یک بعد ۷۶

۵–۱ هامیلتونی هابارد در یک بعد ۷۶

۵–۲ معادلهٔ ویژه مقداری ۷۸

۵–۳ مشکلات تعمیم به سه بعد ۸۴

۵–۴ جمع بندی ۸۴

A روابط پادجابجایی عملگرهای فرمیونی ۸۵

مراجع ۹۰

پیشگفتار

مدل هابارد اولین بار در سال ۱۹۶۳ در دو مقالهٔ جدا از هم توسط گاتزویلر[۳] و هابارد[۲] ارائه شد. در این دو مقاله سعی شده بود که به روشی ساده تاثیر همبستگی الکترونهای d در فلزات واسط توصیف شود. به همین منظور هابارد مدلی را برای نوارهای باریک d ارائه کرد. اما با وجود تمام تقریبهای انجام شده در هامیلتونی مدل هابارد، همچنان حل این هامیلتونی مشکل بود. هابارد در مقالهٔ خود تنها جوابی تقریبی برای این مدل پیدا کرد. در سالهای بعد تلاشهای زیادی برای حل مدل هابارد صورت گرفت. ولی جوابهای دقیق در این مورد بسیار نادرند و تنها برای حالتهای خاص وجود دارند،که از آن جمله می‌توان به حل **الیوت لیب** و **فرد وو** در سال ۱۹۶۸ [۱۰] اشاره کرد که در حالت یک بعدی به دست آمده است.

در این تحقیق سعی کرده‌ایم که مدل هابارد و چگونگی هامیلتونی آن را به طور مفصل بررسی کنیم. برای این منظور در فصل اول ابتدا لزوم استفاده از هامیلتونی بس–ذره‌ای و روشهای ساده‌سازی هامیلتونی بس–ذره‌ای به هامیلتونی تک ذره‌ای (تقریب هارتری) را بررسی می‌کنیم و در ادامهٔ فصل به معرفی فرمولبندی کوانتش ثانوی برای هامیلتونی‌های بس–ذره‌ای در دستگاههای بدون برهمکنش که در مسائل بس–ذره‌ای دارای اهمیت خاصی است، می‌پردازیم. فصل دوم به چگونگی فرمولبندی کوانتش ثانوی برای دستگاههایی با برهمکنش جفت ذره پرداخته و با بیان تقریبهای لازم، هامیلتونی هابارد را به دست می‌آوریم.

از آنجایی که توابع گرین در حل مسائل بس—ذره‌ای از اهمیت خاصی برخوردارند، در فصل سوم به بررسی توابع گرین می‌پردازیم. در فصل چهارم پس از حل تقریبی هامیلتونی هابارد به وسیلهٔ توابع گرین، شرط وجود فرومغناطیس را برای پاسخ‌های تقریبی به‌دست آمده بررسی می‌کنیم.

در فصل پنجم به بررسی حل دقیق مدل هابارد در یک بعد با استفاده از روش الیوت لیب و فرد وو می‌پردازیم.

فصل ۱

هامیلتونی دستگاههای بدون برهمکنش در فرمولبندی کوانتش ثانوی

حل معادلهٔ شرودینگر بس–ذره‌ای غیرممکن است. بنابراین باید به گونه‌ای این معادلهٔ شرودینگر را به بخشهای حل شدنی ساده کنیم. به کمک تقریب هارتری می‌توان معادلهٔ شرودینگر بس‌الکترونی را به معادلهٔ شرودینگر تک‌الکترونی ساده کرد. ولی این تقریب در توصیف بیشتر پدیده‌های فیزیکی ناکاراست. راههای ساده‌سازی دیگری برای معادلات بس–ذره‌ای وجود دارد که به کمک فرمولبندی کوانتش ثانوی صورت می‌گیرد، که در این فصل تنها به بررسی کوانتش ثانوی برای دستگاههای بدون برهمکنش جفت ذره‌ای می‌پردازیم.

۱–۱ مقدمه

جامدات را می‌توان به صورت تعداد زیادی از اتم‌های یکسان بیان کرد که بر روی ساختار شبکه‌ای منظمی قرار دارند. برای چنین دستگاهی می‌توان معادلهٔ شرودینگر

کامل شامل حالتهای تمام اتمها و الکترونها رانوشت. بادر نظر گرفتن تمام برهمکنشهای بین الکترونها و مغزه‌های اتمی معادلهٔ شرودینگر N الکترونی را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\begin{aligned}\hat{\mathrm{H}}\Psi &= \sum_{i=1}^{N}\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla_i^2\Psi - Ze^2\sum_{\mathbf{R}}\frac{1}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{R}|}\Psi\right)+\frac{1}{2}\sum_{i\neq j}\frac{e^2}{|\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j|}\Psi \\ &= E\Psi \qquad (1-1)\end{aligned}$$

که در آن جملهٔ دوم پتانسیل الکتروستاتیکی مغزه‌های اتمی لخت در نقاط شبکهٔ براوه $\mathbf{R}$ و جملهٔ سوم برهمکنش الکترونها با یکدیگر را نشان می‌دهد.اما حل چنین معادله‌ای کاملاً غیر ممکن است. در فیزیک حالت جامد کوشش می‌شود که اینگونه معادلات شرودینگر را به بخش‌های حل شدنی تقسیم کنیم . در این راه مدلهایی ساخته می‌شوند، که هریک شامل تقریبهایی هستند که برای ارائهٔ موارد ضروری خواص تحت مطالعه به کارگرفته می‌شوند.

با توجه به این واقعیت که سرعتهای الکترونی بسیار بزرگتر از سرعتهای یونی هستند (سرعت الکترونی از مرتبهٔ $10^8 cm/sec$ و سرعت یونی از مرتبهٔ $10^5 cm/sec$ است). بنابراین در هر لحظه می‌توان الکترونها را در پیکربندی‌ای تصور کرد که گویی یونها در مکانهای خود ثابت هستند. با استفاده از این تقریب که تقریب بی‌دررو خوانده می‌شود می‌توان دستگاه الکترونی را مستقل از دستگاه یونی در نظر گرفت.

در این فصل به بررسی فرمولبندی کوانتش ثانوی در مدل ساده‌ای از جامد می‌پردازیم. در این مدل فرض می‌کنیم که الکترونها هیچ برهمکنشی با یکدیگر ندارند و تنها در میدان پتانسیل حاصل از هسته‌های یونی اتم‌ها قرار دارند. این فرض چندان هم دور از واقعیت نیست. برای مثال با استفاده از تقریب هارتری (که در ادامه آن را توضیح می‌دهیم) می‌توان به جای برهمکنش بین الکترونها، برهمکنش بین یک

الکترون و میدان حاصل از برآیند مکانی دیگرالکترونها را از طریق توابع موج آنها در نظر گرفت. با این کار می‌توان مسئلهٔ بس ذره‌ای مورد نظر را به یک مسالهٔ تک ذره‌ای تبدیل کرد. لذا ابتدا به معرفی فرمولبندی کوانتش ثانوی و عملگرهای خلق و نابودی برای تک ذره می‌پردازیم. در ادامه آن را برای N ذره تعمیم خواهیم داد و سپس هامیلتونی دستگاههای بدون برهمکنش در فرمولبندی کوانتش ثانوی را به‌دست خواهیم آورد. در فصل بعدی به بررسی برهمکنش بین الکترونها در فرمولبندی کوانتش ثانوی خواهیم پرداخت.

۱—۲ تقریب هارتری

با تقریب الکترون مستقل می‌توان از برهمکنش بین الکترونها با یکدیگر صرفنظر کرد و معادله شرودینگر کل را به N معادلهٔ شرودینگر تک الکترونی تقسیم کرد

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi(\mathbf{r})+U(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r})=\epsilon\psi(\mathbf{r}) \qquad (۲-۱)$$

حالت پایهٔ این دستگاه N الکترونی را می‌توان از حل معادلهٔ تک الکترونی با شرایط مرزی مناسب و به دست آوردن ترازهای تک الکترونی ϵ_i برای حالتهای الکترونی $\psi_i(\mathbf{r})$ و سپس پر کردن این ترازها در شرایطی مطابق اصل طرد پائولی به دست آورد. اما تاثیر برهمکنش الکترون—الکترون را چگونه می‌توان به حساب آورد؟

از آنجایی که برهمکنش بین الکترونها آثار بسیار پیچیده‌ای را به وجود می‌آورد، توصیف الکترون در فلز بدون در نظر گرفتن این برهمکنش‌ها امکان‌پذیر نیست. برای محاسبهٔ دقیق‌تر خواص الکترونی باید معادلهٔ شرودینگر N الکترونی (۱—۱) را حل کنیم، ولی همانطور که گفته شد حل چنین معادله‌ای بسیار مشکل و غیر ممکن است.

پس باید به پتانسیل مناسبی فکر کنیم که پاسخهای معادلهٔ تک الکترونی (۱—۲) را معقول تر سازد.

برای این کار پتانسیل موثری در نظر می‌گیریم که شامل پتانسیل یونها باشد. بعلاوه باید شامل جملهٔ دیگری که بیانگر میدان $N-1$ الکترون دیگر است نیز باشد، یعنی

$$U^{eff}(\mathbf{r}) = U^{ion}(\mathbf{r}) + U^{el}(\mathbf{r}) \qquad (۱—۳)$$

که در آن داریم

$$U^{ion}(\mathbf{r}) = -Ze^{۲}\sum_{\mathbf{R}} \frac{۱}{|\mathbf{r}-\mathbf{R}|} \qquad (۱—۴)$$

اگر $N-1$ الکترون دیگر را به صورت توزیعی از بار منفی با چگالی $\rho(\mathbf{r})$ در نظر بگیریم، انرژی پتانسیل آنها را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$U^{el}(\mathbf{r}) = -e\int d\mathbf{r}'\rho(\mathbf{r}')\frac{۱}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \qquad (۱—۵)$$

که در آن $\rho(\mathbf{r})$ چگالی الکترونهاست که از روی تابع موج الکترونی به صورت زیر تعریف می‌شود

$$\rho(\mathbf{r}) = -e\sum_{i}|\psi_i(\mathbf{r})|^{۲} \qquad (۱—۶)$$

و مجموعیابی برروی تمام ترازهای تک الکترونی اشغال شده در فلز صورت می‌گیرد.

با این پتانسیل می‌توان معادلهٔ شرودینگر (۱—۱) را به N معادله شرودینگر تک الکترونی به صورت زیر ساده کرد

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\psi_i(\mathbf{r}) + U^{eff}(\mathbf{r})\psi_i(\mathbf{r}) = \epsilon_i\psi_i(\mathbf{r}) \qquad (۷—۱)$$

مجموعهٔ معادلات فوق (برای هریک از ترازهای تک الکترونی اشغال شدهٔ $\psi_i(\mathbf{r})$) به عنوان **معادلات هارتری** شناخته می‌شوند. حل چنین معادله‌ای به روش خودسازگار صورت می‌گیرد. بدین ترتیب که ابتدا شکلی برای پتانسیل $U^{el}(\mathbf{r})$ حدس زده می‌شود و براساس آن معادلات هارتری حل می‌شوند. سپس از توابع موج به دست آمده $\psi_i(\mathbf{r})$، شکل جدیدی برای $U^{el}(\mathbf{r})$ محاسبه می‌شود و به کمک آن دوباره معادلات هارتری را حل می‌کنیم. این روند تا جایی ادامه می‌یابد که در پتانسیل حاصل تغییر محسوسی مشاهده نشود. به همین دلیل تقریب هارتری به **تقریب میدان خودسازگار** نیز معروف است.

به این ترتیب **تقریب هارتری** به جای در نظر گرفتن برهمکنش بین الکترونها، برهمکنش بین الکترون و میدان حاصل از برآیند مکانی الکترونهای دیگر را از طریق توابع موج آنها در نظر می‌گیرد.

۱—۳ هامیلتونی تک ذره‌ای در کوانتش ثانوی

دستگاهی شامل یک ذره در پتانسیل $\hat{V}(\mathbf{r})$ را در نظر می‌گیریم. هامیلتونی این دستگاه به شکل زیر خواهد بود

$$\hat{\mathsf{H}} = \frac{\hat{\mathsf{P}}^{۲}}{۲m} + \hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}) \qquad (۸-۱)$$

که در آن $\hat{\mathsf{P}}$ عملگر اندازه حرکت به صورت $-i\hbar\nabla$ می‌باشد. معادلهٔ مستقل از زمان شرودینگر این دستگاه را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\hat{\mathsf{H}}\phi(\mathbf{r}) = E\phi(\mathbf{r}) \qquad (۹-۱)$$

پاسخ‌های معادلهٔ ویژه مقداری زیر را می‌توان به سادگی به دست آورد

$$\frac{\hat{\mathsf{P}}^{۲}}{۲m}\, u_\alpha(\mathbf{r}) = E_\alpha\, u_\alpha(\mathbf{r}) \qquad (۱۰-۱)$$

که در آن E_αها $(\alpha = ۱, ۲, ۳, ...)$ مجموعهٔ ویژه مقادیر انرژی ذرهٔ آزاد و u_αها مجموعهٔ ویژه توابع آن را تشکیل می‌دهند. ویژه توابع $u_\alpha(\mathbf{r})$ مجموعهٔ کاملی را تشکیل می‌دهند، به طوری که $u_\alpha(\mathbf{r})$های متناظر با αهای متفاوت متعامدند،یعنی

$$\int u^*_\alpha(\mathbf{r}) u_{\alpha'}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = ۰ \qquad (\alpha \neq \alpha') \qquad (۱۱-۱)$$

که در آن $d\mathbf{r}$ کوتاه شدهٔ $dx\ dy\ dz$ و u^* همیوغ مختلطu است. در این نوشتار همه‌جا انتگرال‌گیری‌هابرروی کل فضا است مگر آنکه توضیح دیگری داده‌شده باشد. اگر توابع موج $u_\alpha(\mathbf{r})$ بهنجار باشند، انتگرال فوق برای $\alpha = \alpha'$ برابر واحد خواهد شد.رابطهٔ تعامد و بهنجارش در نمادگذاری دیراک به صورت زیر نوشته می‌شود

$$< \alpha | \alpha' >= \delta_{\alpha\alpha'} \qquad (۱۲-۱)$$

هرتابع $\phi(\mathbf{r})$ را می‌توانیم برحسب این مجموعهٔ کامل بسط دهیم

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha} b_\alpha \; u_\alpha(\mathbf{r}) \qquad (۱۳-۱)$$

که در آن

$$b_\alpha = \int u^*_\alpha(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r})d\mathbf{r} \qquad (۱۴-۱)$$

بسط فوق در نماد گذاری دیراک به صورت زیر در می آید

$$|\phi> = \sum_{\alpha} b_\alpha |\alpha> \qquad , \qquad b_\alpha = <\alpha|\phi> \qquad (۱۵-۱)$$

یا

$$|\phi> = \sum_{\alpha} |\alpha><\alpha|\phi> \qquad (۱۶-۱)$$

دراین رابطه می‌توانیم بخش اول سمت راست را یک عملگر همانی درنظر بگیریم، یعنی

$$\sum_{\alpha} |\alpha><\alpha| \equiv \mathbb{1} \qquad (۱۷-۱)$$

ترکیب $|\alpha><\alpha|$ یک عدد نیست بلکه یک عملگر است، که وقتی برروی تابع‌موج $|\phi>$ اثرکند ترکیب $|\alpha><\alpha|\phi>$ را می‌دهد که در آن $<\alpha|\phi>$ یک عدد است که در تابع موج $|\alpha>$ ضرب شده است. به عبارت دیگر $|\alpha><\alpha|$ وقتی روی کت $|\phi>$ عمل‌کند آنرا به مضربی $(<\alpha|\phi>)$ از کت دیگری یعنی $|\alpha>$ تبدیل می‌کند.

با استفاده از عملگر همانی فوق برای هر عملگر $\hat{V}(\mathbf{r})$ می‌توان نوشت

$$\begin{aligned}\hat{V}(\mathbf{r}) &= \left(\sum_{\alpha'} |\alpha'><\alpha'|\right) \hat{V}(\mathbf{r}) \left(\sum_{\alpha''} |\alpha''><\alpha''|\right) \\ &= \sum_{\alpha'\alpha''} <\alpha'|\hat{V}|\alpha''> \quad |\alpha'><\alpha''| \qquad (۱۸-۱)\end{aligned}$$

که در آن عناصر ماتریسی $<\alpha'|\hat{V}|\alpha''>$ عبارتند از

$$<\alpha'|\hat{V}|\alpha''> = \int u^*_{\alpha'}(\mathbf{r})\hat{V}(\mathbf{r})u_{\alpha''}(\mathbf{r})d\mathbf{r} \qquad (۱۹-۱)$$

حاصل عمل عملگر $|\alpha'><\alpha''|$ بر روی حالت $|\alpha>$ صفر است مگر آنکه $\alpha = \alpha''$ باشد، که در این‌صورت $|\alpha'>$ را نتیجه خواهد داد. پس می‌توانیم عملگر $|\alpha'><\alpha''|$ را به عنوان عملگری تفسیر کنیم که ذره‌ای را از حالت $|\alpha''>$ برمی‌داردو در حالت $|\alpha'>$ قرار می‌دهد. به عبارت دیگر این عملگر ذره‌ای در حالت $|\alpha''>$ را نابود می‌کند و ذره‌ای دیگری در حالت $|\alpha'>$ خلق می‌کند. برای بیان این موضوع تابع موج $|۰>$ را که نشانگر حالتی است که هیچ ذره‌ای وجود نداشته باشد، تعریف می‌کنیم. این حالت بر تمام حالتهای $|\alpha>$ متعامد است

$$<\alpha|۰> = ۰ \qquad (۲۰-۱)$$

و چنان بهنجار شده است که

$$<۰|۰> = ۱ \qquad (۲۱-۱)$$

این حالت را **حالت خلا** می‌نامیم و باید دقت کنیم که این حالت از عدد صفر متفاوت است. بدین ترتیب می‌توان نوشت

$$|\alpha' >< \alpha''| = |\alpha' > (< 0|0 >) < \alpha''| = (|\alpha' >< 0|)\ (|0 >< \alpha''|) \qquad (۲۲-۱)$$

حال ترکیب $|0 >< \alpha''|$ را به عنوان عملگر $\hat{c}_{\alpha''}$ تعریف می‌کنیم. این عملگر ذره‌ای را که در حالت $|\alpha'' >$ قرارداشته باشد نابود می‌کند (یعنی حالت خلا را ایجاد می‌کند). این عملگر را **عملگر نابودی** می‌نامیم.ترکیب مزدوج آن $|\alpha' >< 0|$ را به عنوان **عملگر خلق** $\hat{c}^{\dagger}_{\alpha'}$ تعریف می‌کنیم که از حالت خلا $|0 >$ حالت $|\alpha' >$ را خلق می‌کند. پس

$$|\alpha' >< \alpha''| = (|\alpha' >< 0|)\ (|0 >< \alpha''|) \equiv \hat{c}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{c}_{\alpha''} \qquad (۲۳-۱)$$

حالا می‌توانیم بنویسیم

$$\hat{V}(\mathbf{r}) = \sum_{\alpha'\alpha''} < \alpha'|\hat{V}|\alpha'' > \hat{c}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{c}_{\alpha''} \qquad (۲۴-۱)$$

این رابطه تاثیر پتانسیل $\hat{V}(\mathbf{r})$را به‌صورت مجموع احتمالهای پراکندگی ذره از هر حالت $|\alpha'' >$ به هر حالت $|\alpha' >$ نشان می‌دهد.

به طور مشابه برای عملگر انرژی جنبشی می‌توان نوشت

$$\frac{\hat{P}^2}{2m} \equiv \frac{1}{2m}\sum_{\alpha'\alpha''} < \alpha'|\hat{P}^2|\alpha'' > \hat{c}^{\dagger}_{\alpha'}\hat{c}_{\alpha''} \qquad (۲۵-۱)$$

به این ترتیب هامیلتونی کل برحسب عملگرهای خلق و نابودی در فرمولبندی کوانتش ثانوی به شکل زیر خواهد شد

$$\hat{H} = \frac{1}{2m} \sum_{\alpha'\alpha''} \left[<\alpha'|\hat{P}^2|\alpha''> + <\alpha'|\hat{V}|\alpha''> \right] \hat{c}^{\dagger}_{\alpha'} \hat{c}_{\alpha''} \qquad (۱-۲۶)$$

نوشتن هامیلتونی یک تک ذره برحسب عملگرهای خلق و نابودی کار بی‌فایده‌ای است که تنها بر پیچیدگی مسئله می‌افزاید، ولی در مسائل بس ذره‌ای که با تعداد زیادی از ذرات سروکار داریم، کارایی این روش مشخص می‌شود.

۱-۴ هامیلتونی N ذره‌ای و نمایش اعداد اشغال

حال یک جامد N اتمی را در نظر می‌گیریم. هر اتم را به صورت مجموع یک الکترون و یک هستهٔ یونی در نظر می‌گیریم که هسته‌های یونی بر روی نقاط شبکهٔ بلوری قرار دارند. فرض می‌کنیم که الکترونها هیچ برهمکنشی با یکدیگر ندارند و الکترونها تنها پتانسیل هسته‌های یونی $\hat{V}(\mathbf{r})$ را احساس می‌کنند. هامیلتونی چنین دستگاهی چیزی به‌جز مجموع هامیلتونی‌های ذرات منفرد نیست

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^{N} \hat{H}_i \qquad (۱-۲۷)$$

که در آن $\hat{H}_i$ همان هامیلتونی تک ذره‌ای است

$$\hat{H}_i = \frac{\hat{P}_i^2}{2m} + \hat{V}(\mathbf{r}_i) \qquad (۱-۲۸)$$

ویژه توابع هامیلتونی کل $\hat{H}$ را می‌توان برحسب حاصلضرب ویژه توابع u_{α_i} مربوط به هامیلتونی تک ذره‌ای نوشت

$$\hat{H}_i \; u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_i) \;=\; E_{\alpha_i} u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_i) \qquad (۲۹-۱)$$

که در آن $\alpha_i = \{۱, ۲, ۳, ...\}$ است.به این ترتیب خواهیم داشت

$$\phi(\alpha_۱, \alpha_۲, ..., \alpha_N) = \prod_{i=۱}^{N} u_{\alpha_i}(\mathbf{r}_i) = u_{\alpha_۱}(\mathbf{r}_۱)\; u_{\alpha_۲}(\mathbf{r}_۲) \; ... \; u_{\alpha_N}(\mathbf{r}_N) \qquad (۳۰-۱)$$

تابع موج ϕ فاقد تقارن لازم است. بنابراین نمی‌تواند پاسخ مناسبی برای معادلهٔ شرودینگر به‌حساب آید.می‌دانیم که با تعویض هر دوتایی از مختصات، تابع موج ϕ برای ذرات بوزونی باید بدون تغییر مانده و برای ذرات فرمیونی به $-\phi$ تبدیل شود. یعنی برای ذرات بوزونی بایستی ϕ نسبت به جایگشت مختصات **متقارن** و برای ذرات فرمیونی **پادمتقارن** باشد.برای الکترونها که فرمیون هستند تابع موج ϕ باید به صورت ترکیبی پادمتقارن ارائه شود. برای این منظور از دترمینان زیر (که به دترمینان اسلیتر مشهور است) استفاده می‌کنیم

$$\phi \;=\; \frac{۱}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} u_{\alpha_۱}(\mathbf{r}_۱) & u_{\alpha_۱}(\mathbf{r}_۲) & ... & u_{\alpha_۱}(\mathbf{r}_N) \\ u_{\alpha_۲}(\mathbf{r}_۱) & & ... & \\ . & & . & \\ . & & . & \\ . & & . & \\ u_{\alpha_N}(\mathbf{r}_۱) & ... & ... & u_{\alpha_N}(\mathbf{r}_N) \end{vmatrix} \qquad (۳۱-۱)$$

کار با این شکل از تابع موج حتی در مورد ساده‌ای که ذرات هیچ برهمکنشی با یکدیگر نداشته‌باشند نیز بسیار پرزحمت است. هنگامی که برهمکنشهایی بین ذرات وجود داشته‌باشد، دیگر این ϕ که از توابع موج تک الکترونی ساخته‌شده‌است نمی‌تواند ویژه تابع $\hat{H}$ باشد. ولی از آنجایی که این ϕها تشکیل یک مجموعهٔ کامل می‌دهند، هر تابع موج بس–الکترونی ψ را می‌توان برحسب آنها بسط داد

$$\psi = \sum_{\alpha_1,...,\alpha_N} b(\alpha_1,...,\alpha_N)\ \phi(\alpha_1,...,\alpha_N) \qquad (۳۲-۱)$$

از آنجایی که هر ϕ خود مجموع $N!$ جمله است، محاسبهٔ تابع موج ψ به این روش بسیار پر دردسر است. به همین دلیل برای توصیف ϕ از نماد کوتاه‌نوشتی استفاده می‌کنیم تا اطلاعات زاید را حذف کنیم. این روش به عنوان روش **نمایش اعداد اشغال** معروف است.می‌دانیم که N ذره داریم و تمام مختصات $\mathbf{r}_i$ مربوط به ذرات در تابع موج به صورتی کاملاً هم‌ارز یکدیگر ظاهر می‌شوند. همچنین می‌دانیم که ϕ پادمتقارن است، بنابراین هربار نیازی به نوشتن شکل صریح آن نداریم. همهٔ آنچه که نیاز داریم تعیین حالتهای اشغال‌شدهٔ u_α در دترمینان (۱–۳۱) است. برای هر حالت u_α عدد اشغال n_α را تعریف می‌کنیم که اگر حالت u_α در دترمینان ϕ ظاهر شده باشد (یعنی حالت u_α اشغال شده باشد) برابر یک و در غیر این‌صورت برابر صفر است. بدین ترتیب برای نمایش ϕ از نماد زیر استفاده می‌کنیم

$$\phi \equiv |n_1, n_2 ... > \qquad (۳۳-۱)$$

به طور مختصرتر می‌توانیم ϕ را به صورت $|\{n_\mu\}>$ نشان دهیم که در آن $\{n_\mu\}$ مجموعهٔ اعداد اشغال است.

از آنجایی که توابع $u_\alpha(\mathbf{r})$ متعامدند بنابراین توابع ϕ که حاصلضرب توابع $u_\alpha(\mathbf{r})$ هستند نیز متعامد هستند. پس توابع ϕ با مجموعه‌های ناهمسان $\{n_\mu\}$ و $\{n_{\mu'}\}$ بر هم عمود هستند، یعنی

$$< \{n_\mu\}|\{n_{\mu'}\} > = \ ۰ \qquad (۳۴-۱)$$

برای بهنجار بودن توابع موج باید داشته باشیم

$$< \{n_\mu\}|\{n_\mu\} > = \ ۱ \qquad (۳۵-۱)$$

همانند حالت تک ذره‌ای، در اینجا نیز عملگر همانی به شکل زیر به‌دست می آید

$$\sum_{\{n_\mu\}} |\{n_\mu\} >< \{n_\mu\}| \ \equiv \mathbb{1} \qquad (۳۶-۱)$$

که در آن مجموعیابی بر روی تمام مجموعه‌های اعداد اشغال ممکن $\{n_\mu\}$ صورت می‌گیرد. بدین ترتیب می‌توانیم عملگر $\hat{\mathrm{V}}$ را در نمایش اعداد اشغال به شکل زیر بنویسیم

$$\begin{aligned} \hat{\mathrm{V}} \ &\equiv \sum_{\{n_\mu\},\{n_{\mu'}\}} |\{n_\mu\} >< \{n_\mu\}| \ \hat{\mathrm{V}} \ |\{n_{\mu'}\} >< \{n_{\mu'}\}| \\ &= \sum_{\{n_\mu\},\{n_{\mu'}\}} V_{\mu\mu'} \ |\{n_\mu\} >< \{n_{\mu'}\}| \end{aligned} \qquad (۳۷-۱)$$

که در آن

$$V_{\mu\mu'} \ = < \{n_\mu\}| \ \hat{\mathrm{V}} \ |\{n_{\mu'}\} > \qquad (۳۸-۱)$$

برای ذرات فرمیونی اعداد اشغال تنها می‌توانند مقادیر ۰ و ۱ را داشته باشند. ساده‌ترین عملگر از نوع $|\{n_\mu\}><\{n'_\mu\}|$ به گونه‌ای است که در آن تنها یکی از n_iها با n'_iها متفاوت باشد. برای مثال

$$|n_۱, n_۲, ..., n_p = ۰, ... >< n_۱, n_۲, ..., n_p = ۱, ...| \qquad (۳۹-۱)$$

واضح است که این یک عملگر نابودی است، زیرا تابع موج خاصی که اثر این عملگر برآن غیر صفر است حالت p ام اشغال شده دارد و در آن همهٔ اعداد اشغال دیگر با n_iهای رابطهٔ (۱-۳۹) یکسان است. تابع موج حاصل همان اعداد اشغال را خواهد داشت با این تفاوت که در آن حالت p ام خالی است. اگر عملگری بخواهیم که اثر آن بر روی هر تابع موجی که در آن $n_p = ۱$ باشد غیر صفر باشد، باید بر روی تمام n_iهای ممکن مجموعیابی کنیم

$$\sum_{\substack{\{n_i\} \\ (i \neq p)}} |n_۱, n_۲, ..., n_p = ۰, ... >< n_۱, n_۲, ..., n_p = ۱, ...| \qquad (۴۰-۱)$$

لازم است که در مورد علامت تابع موجی که در اثر این عملگر حاصل می‌شود، دقت کنیم. برای این منظور عدد زیر را تعریف می‌کنیم

$$N_p = \sum_{j=۱}^{p-۱} n_j \qquad (۴۱-۱)$$

و عملگر را در $(-۱)^{N_p}$ ضرب می‌کنیم. نتیجه را به عنوان **عملگر نابودی دستگاه فرمیونی** تعریف می‌کنیم

$$\hat{c}_p = \sum_{\substack{\{n_i\} \\ (i\neq p)}} (-1)^{N_p} |n_1, n_2, ..., n_p = 0, ... >< n_1, n_2, ..., n_p = 1, ...| \quad (۱-۴۲)$$

$\hat{c}_p$ برروی هر تابع موجی که در آن حالت p ام آن خالی است عمل کند ، نتیجهٔ صفر می‌دهد.

$$\hat{c}_p \; |..., n_p = 0, ... > = \; 0 \quad (۱-۴۳)$$

و اگر حالت p ام در تابع موج اشغال شده باشد $|..., n_p = 1, ... >$، در مجموعیابی (۱-۴۲) تنهایک جمله وجود دارد که بر این تابع موج عمود نیست. درنتیجه داریم

$$\hat{c}_p \; |n_1, ..., n_p = 1, ... > = \; (-1)^{N_p} \; |n_1, ..., n_p = 0, ... > \quad (۱-۴۴)$$

بنابراین نقش این عملگر نابود کردن ذره در حالت p ام است.

عملگر خلق $\hat{c}_p^\dagger$ را که همیوغ عملگر نابودی $\hat{c}_p$ است، به شکل زیر تعریف می‌کنیم

$$\hat{c}_p^\dagger = \sum_{\substack{\{n_i\} \\ (i\neq p)}} (-1)^{N_p} |n_1, n_2, ..., n_p = 1, ... >< n_1, n_2, ..., n_p = 0, ...| \quad (۱-۴۵)$$

با استدلالی مشابه می‌توان دید که عمل $\hat{c}_p^\dagger$ بر هر تابع موجی که در آن حالت p ام اشغال شده است $|..., n_p = 1, ... >$، نتیجهٔ صفر می‌دهد و اگر حالت p ام خالی باشد $|..., n_p = 0, ... >$، حالتی می‌دهد که در آن حالت p ام اشغال شده است.

روابط پادجابجایی زیر برای این عملگرهاوجود دارد(پیوست A)

$$\begin{aligned} \{\hat{c}_p, \hat{c}_q^\dagger\} &= \delta_{pq} \\ \{\hat{c}_p, \hat{c}_q\} &= ۰ \\ \{\hat{c}_p^\dagger, \hat{c}_q^\dagger\} &= ۰ \end{aligned} \qquad (۴۶-۱)$$

عملگر $\hat{n}_p = \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p$ را درنظر بگیرید. اگر این عملگربر روی تابع موجی که حالت p ام آن اشغال شده است عمل کند همان حالت را نتیجه می‌دهد، یعنی ابتدا ذره را نابود و دوباره آنرا خلق می‌کند

$$\hat{n}_p|..., n_p = ۱, ... >= |..., n_p = ۱, ... > \qquad (۴۷-۱)$$

و اگر بر روی تابع موجی که حالت p ام آن خالی است اثر کند، نتیجه می‌دهد

$$\hat{n}_p|..., n_p = ۰, ... >= ۰ \qquad (۴۸-۱)$$

بنابراین ویژه مقدار این عملگر هنگامی که بر روی حالتی با $n_p = ۰$ عمل کند، صفر است و هنگامی که بر روی حالتی با $n_p = ۱$ عمل کند، یک است. به همین دلیل این عملگر به **عملگرتعداد** معروف است.

در مورد ذرات فرمیونی همواره داریم

$$\hat{n}_p^۲ = \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p = \hat{c}_p^\dagger \hat{c}_p = \hat{n}_p \qquad (۴۹-۱)$$

حال می‌توانیم از رابطهٔ (۱—۳۷) استفاده کنیم و هر عملگری را برحسب عملگرهای خلق و نابودی بنویسیم. در اینجا عملگر تک ذره‌ای ساده‌ای مانند یک پتانسیل معمولی $\hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r})$ را در نظر می‌گیریم. این پتانسیل در هامیلتونی بس ذره‌ای به شکل زیر وارد می‌شود

$$\sum_{i}^{N}\hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i)=\sum_{i}\sum_{\{n_\mu\},\{n_{\mu'}\}}|\{n_\mu\}><\{n_\mu\}|\ \hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i)\ |\{n_{\mu'}\}><\{n_{\mu'}\}|$$
$$=\sum_{i}\sum_{\{n_\mu\},\{n_{\mu'}\}}<\{n_\mu\}|\hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i)|\{n'_\mu\}>|\{n_\mu\}><\{n_{\mu'}\}| \qquad (۵۰—۱)$$

که در آن عناصر ماتریسی $\hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i)$ عبارتند از

$$<\{n_\mu\}|\ \hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i)\ |\{n_{\mu'}\}>=\int\phi^*(\alpha_1,...,\alpha_N)\hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i)$$
$$\times\phi(\beta_1,...,\beta_N)d\mathbf{r}_1...d\mathbf{r}_N \qquad (۵۱—۱)$$

تابع موج ϕ به صورت دترمینان اسلیتر است یعنی به صورت مجموع جملاتی است که هریک ازآنهاحاصلضرب u_αها می‌باشند. بدین ترتیب انتگرال فوق حاوی مجموع جمله‌هایی به شکل زیر است

$$\int\ u_a^*(\mathbf{r}_1)u_b^*(\mathbf{r}_2)...u_z^*(\mathbf{r}_N)\ \hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i)\ u_{a'}(\mathbf{r}_1)u_{b'}(\mathbf{r}_2)...u_{z'}(\mathbf{r}_N)d\mathbf{r}_1...d\mathbf{r}_N \qquad (۵۲—۱)$$

که در آن هرجمله می‌تواند به حاصلضرب انتگرالهایی به شکل زیر جدا شود

$$\int u_a^*(\mathbf{r}_1)u_{a'}(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1\ \int u_b^*(\mathbf{r}_2)u_{b'}(\mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_2\ ... \qquad (۵۳—۱)$$

که در آن تنها انتگرال برروی $d\mathbf{r}_i$ با بقیه تفاوت دارد و به شکل زیر است

$$\int u_\alpha^*(\mathbf{r}_i)\ \hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r}_i)\ u_\beta(\mathbf{r}_i)d\mathbf{r}_i \qquad (۵۴-۱)$$

انتگرالهای (۱−۵۳)به علت تعامد $u(\mathbf{r})$ها، تنها هنگامی غیر صفر می‌شوند که $a=a'$، $b=b'$ و... باشد. پس تنها حالتهای اشغال α و β در انتگرال (۱−۵۴) می‌توانند با هم تفاوت داشته باشند. به این ترتیب

$$\begin{aligned}\sum_i \hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r}_i) &= \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}|...,n_\alpha=۱,...,n_\beta=۰,...><...,n_\alpha=۰,...,n_\beta=۱,...| \\ &= \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}\ c_\alpha^\dagger\ c_\beta \qquad (۵۵-۱)\end{aligned}$$

که در آن

$$V_{\alpha\beta} = \int u_\alpha^*(\mathbf{r})\ \hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r})\ u_\beta(\mathbf{r})d\mathbf{r} \qquad (۵۶-۱)$$

رابطهٔ (۱−۵۵) پتانسیل $\hat{\mathrm{V}}(\mathbf{r})$ را به صورت مجموع پراکندگی های ذرات از حالتهای β به حالتهای α نشان می‌دهد. بنابراین $V_{\alpha\beta}$ مقیاسی از احتمال پراکندگی ذره است.

به روش مشابهی برای بخش انرژی جنبشی هامیلتونی خواهیم یافت

$$\sum_i \frac{\hat{\mathrm{P}}_i^۲}{۲m} = \sum_{\alpha\beta} T_{\alpha\beta}\ \hat{\mathrm{c}}_\alpha^\dagger\ \hat{\mathrm{c}}_\beta \qquad (۵۷-۱)$$

که در آن

$$T_{\alpha\beta} = \int u_\alpha^*(\mathbf{r}) \left(\frac{\hat{\mathsf{P}}^2}{2m}\right) u_\beta(\mathbf{r}) d\mathbf{r} \qquad (۵۸-۱)$$

به این ترتیب هامیلتونی دستگاههای بدون برهمکنش در فرمولبندی کوانتش ثانوی خواهد شد

$$\hat{\mathsf{H}} = \sum_{\alpha\beta} T_{\alpha\beta}\ \hat{\mathsf{c}}_\alpha^\dagger\ \hat{\mathsf{c}}_\beta + \sum_{\alpha\beta} V_{\alpha\beta}\ c_\alpha^\dagger\ c_\beta \qquad (۵۹-۱)$$

اغلب مناسب تر است که مجموعه‌ای از $u_\alpha(\mathbf{r})$ها را انتخاب کنیم که ماتریس T در آن قطری باشد. برای این منظور از تابع موج تخت استفاده می‌کنیم

$$u_\alpha(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \Omega^{-\frac{1}{2}}\ e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \qquad (۶۰-۱)$$

که در آن Ω ضریب بهنجارش است. به این ترتیب خواهیم داشت

$$\begin{aligned} T_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} &= \int \psi_{\mathbf{k}}^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) \psi_{\mathbf{k}'} d\mathbf{r} \\ &= \Omega^{-1} \int e^{i\mathbf{k}.\mathbf{r}} \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2\right) e^{i\mathbf{k}'.\mathbf{r}} d\mathbf{r} \\ &= \frac{\hbar^2\mathbf{k}^2}{2m}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \epsilon_{\mathbf{k}}\ \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \end{aligned} \qquad (۶۱-۱)$$

$$V_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} = \int \psi_{\mathbf{k}}^* \hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r})\ \psi_{\mathbf{k}'} d\mathbf{r} \qquad (۶۲-۱)$$

در نتیجه هامیلتونی N ذره‌ای در فرمولبندی کوانتش ثانوی به‌صورت زیردر می‌آید

$$\hat{H} = \sum_{k} \epsilon_k \, \hat{c}_k^{\dagger} \, \hat{c}_k + \sum_{kk'} V_{kk'} \, c_k^{\dagger} \, c_{k'} \qquad (۱-۶۳)$$

جملهٔ دوم هامیلتونی که تاثیر پتانسیل هسته‌های یونی برروی الکترونها را نشان می‌دهد، بیانگر پراکندگی الکترونی است.

۱–۵ جمع بندی

دستگاه بس–ذره‌ای بدون برهمکنش، دستگاهی است که برای آن به سادگی و بدون توسل به فرمولبندی‌های پیشرفته می‌توان به پاسخهای دقیق دست یافت. فرمولبندی کوانتش ثانوی برای این دستگاهها در این فصل تنها به منظور شناساندن نوع فرمولبندی و تعریف کمیتهای مربوط صورت می‌گیرد. در این فصل انرژی جنبشی و پتانسیل دستگاه را برحسب عملگرهای خلق و نابودی و با معرفی اعداد اشغال به دست آوردیم.

فصل ۲

هامیلتونی در حضور برهمکنش و مدل هابارد

جهان فیزیکی شامل دستگاههای بس–ذره‌ای با برهمکنش است. برای توصیف دقیق چنین دستگاههایی لازم است که برهمکنشهای بین ذره‌ای را نیز در معادلات شرودینگر بس–ذره‌ای وارد کنیم. حل مستقیم این معادلات غیرعملی است. بنابراین نیاز داریم که به شگردهای دیگری مانند کوانتش ثانوی، نظریهٔ میدانهای کوانتمی و استفاده از توابع گرین متوسل شویم.

در این فصل هامیلتونی دستگاههای برهمکنشی را در فرمولبندی کوانتش ثانوی به‌دست می‌آوریم. در ادامه با اعمال تقریبهای فیزیکی این هامیلتونی را به شکلهای ساده‌تری تبدیل خواهیم کرد.

۲–۱ برهمکنش جفت ذره

در فصل قبل هامیلتونی دستگاههای بدون برهمکنش را در فرمولبندی کوانتش ثانوی تنها با حضور پتانسیل خارجی $\hat{V}(\mathbf{r})$ بررسی کردیم. اگر بین ذرات برهمکنش وجود داشته باشد باید جملاتی به شکل زیر را به هامیلتونی (۱–۸) اضافه کنیم

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{ij\\ i\neq j}}\hat{U}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j) \qquad (۱–۲)$$

که در آن $\hat{U}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)$ برهمکنش فضائی (در اینجا برهمکنش مستقل از اسپین در نظر گرفته می‌شود) بین جفت ذرات $\mathbf{r}_i$ و $\mathbf{r}_j$ را ارائه می‌کند و عامل $\frac{1}{2}$ برای جلوگیری از دوباره‌شماری برهمکنش‌ها وارد شده است. مانند فصل قبل خواهیم داشت

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{ij\\ i\neq j}}\hat{U}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j) = \frac{1}{2}\sum_{\substack{ij\\ i\neq j}}\sum_{\{n_\mu\},\{n_{\mu'}\}} <\{n_\mu\}|\,\hat{U}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)\,|\{n_{\mu'}\}> |\{n_\mu\}><\{n_{\mu'}\}| \qquad (۲–۲)$$

که در آن

$$<\{n_\mu\}|\,\hat{U}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)\,|\{n_{\mu'}\}> = \int \phi^*(\alpha_1,...,\alpha_N)\hat{U}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j) \times\phi(\beta_1,...,\beta_N)\,d\mathbf{r}_1...d\mathbf{r}_N \qquad (۳–۲)$$

که می‌تواند به حاصلضرب انتگرالهایی به شکل زیر جدا شود

$$\int u_a^*(\mathbf{r}_1)u_{a'}(\mathbf{r}_1)d\mathbf{r}_1 \int u_b^*(\mathbf{r}_2)u_{b'}(\mathbf{r}_2)d\mathbf{r}_2 \ldots \qquad (۴–۲)$$

به استثنای انتگرال برروی $d\mathbf{r}_i$ و $d\mathbf{r}_j$ که به شکل زیر است

$$\int u^*_\alpha(\mathbf{r}_i)\; u^*_\beta(\mathbf{r}_j)\; \hat{\mathsf{U}}(\mathbf{r}_i,\mathbf{r}_j)\; u_\gamma(\mathbf{r}_i)\; u_\delta(\mathbf{r}_j) d\mathbf{r}_i\; d\mathbf{r}_j \qquad (۵-۲)$$

انتگرالهای (۲−۴) تنها در صورتی که $a=a'$، $b=b'$ و... باشدغیر صفرند. پس تنها چهارحالت اشغال α، β، γ و δ می‌توانند متفاوت باشند. بدین ترتیب

$$\frac{۱}{۲}\sum_{\substack{ij\\ i\neq j}} \hat{\mathsf{U}}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j) \;=\; \frac{۱}{۲}\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} U_{\alpha\beta\gamma\delta}\; \hat{\mathsf{c}}^\dagger_\alpha\; \hat{\mathsf{c}}^\dagger_\beta\; \hat{\mathsf{c}}_\gamma\; \hat{\mathsf{c}}_\delta \qquad (۶-۲)$$

که در آن

$$U_{\alpha\beta\gamma\delta} \;=\; \int u^*_\alpha(\mathbf{r}_۱)\; u^*_\beta(\mathbf{r}_۲)\; \hat{\mathsf{U}}(\mathbf{r}_۱-\mathbf{r}_۲)\; u_\gamma(\mathbf{r}_۱)\; u_\delta(\mathbf{r}_۲)\; d\mathbf{r}_۱ d\mathbf{r}_۲ \qquad (۷-۲)$$

انرژی جنبشی و انرژی پتانسیل خارجی که در فصل قبل آنها را بررسی کردیم عملگرهای تک ذره‌ای‌اند، که هر بار تنها شامل مختصات یک ذره‌اند. بنابراین هر بار تنها برروی یکی از توابع موج تک ذره‌ای عمل می‌کنند. ولی جملهٔ برهمکنشی جفت ذره‌ای کمی پیچیده تر است. از آنجایی که جملهٔ برهمکنشی شامل مختصات دو ذره می‌باشد، در نتیجه می‌تواند تابع موج دو ذره را تغییر دهد. به این ترتیب این جمله توصیف کنندهٔ رویدادهای پراکندگی دو ذره‌ای است. دو ذره در حالتهای γ و δ در اثر برهمکنش به حالتهای α و β پراکنده می‌شوند. باید توجه کرد که با نوشتن عملگرهای خلق و نابودی به شکل $\hat{\mathsf{c}}^\dagger_\alpha\hat{\mathsf{c}}^\dagger_\beta\hat{\mathsf{c}}_\gamma\hat{\mathsf{c}}_\delta$ از برهمکنش ذره با خودش (یعنی حالت

$i=j$ دررابطهٔ (۲−۶)) جلوگیری می‌شود. [۱]

اگر $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ توابع بلوخ نواری پاسخهای هامیلتونی زیر باشد

$$\hat{\mathsf{H}}_{\circ}=\sum_{i=1}^{N}\frac{\hat{\mathsf{P}}_i^{2}}{2m}+\hat{\mathsf{V}}(\mathbf{r}_i) \qquad (۲-۸)$$

و $\epsilon_{\mathbf{k}}$ انرژی‌های متناظر آن باشد. در این‌صورت با انتخاب $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ به عنوان مجموعهٔ تابعهای پایهٔ $u_{\alpha}(\mathbf{r})$، خواهیم یافت

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{ij\\ i\neq j}}\hat{\mathsf{U}}(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)\;=\;\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}_2}\;\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}'_1}\;\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}'_2} \qquad (۲-۹)$$

که درآن

$$U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}\;=\;\int\psi^{*}_{\mathbf{k}_1}(\mathbf{r}_1)\psi^{*}_{\mathbf{k}_2}(\mathbf{r}_2)\;\hat{\mathsf{U}}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\;\psi_{\mathbf{k}'_1}(\mathbf{r}_1)\psi_{\mathbf{k}'_2}(\mathbf{r}_2)$$
$$\times d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \qquad (۲-۱۰)$$

به این ترتیب هامیلتونی کل برحسب عملگرهای خلق و نابودی خواهد شد

$$\hat{\mathsf{H}}=\sum_{\mathbf{k}}\epsilon_{\mathbf{k}}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}}\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}}+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}_2}\;\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}'_1}\;\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}'_2} \qquad (۲-۱۱)$$

---

[۱] اگر ترتیب عملگرها را به صورت $\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\alpha}\;\hat{\mathsf{c}}_{\gamma}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\beta}\;\hat{\mathsf{c}}_{\delta}$ می‌نوشتیم در این صورت تاثیر این عملگر برای مورد $\alpha=\beta=\gamma=\delta=\mu$ بر روی حالت تک ذره‌ای $|\circ>$ ، حالت تک ذره‌ای $\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\alpha}|\circ>$ را نتیجه می‌داد

$$V_{\alpha\beta\gamma\delta}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\alpha}\;\hat{\mathsf{c}}_{\gamma}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\beta}\;\hat{\mathsf{c}}_{\delta}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mu}|\circ>=\;V_{\alpha\beta\gamma\delta}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\alpha}\;|\circ>$$

یعنی برهمکنش ذره با خودش را نیز به حساب آورده‌ایم. به عبارت دیگر حتی با داشتن یک ذره نیز برای برهمکنش جواب غیر صفر داریم که این مغایر با اصول اولیه برهمکنش دو ذره‌ای است.

تاکنون دستگاهی از ذرات بدون اسپین را در نظر گرفته بودیم. اگر ذرات تشکیل دهندهٔ دستگاه ما الکترونها باشند بایستی اسپین آنها را نیز به حساب آوریم. یک الکترون می‌تواند یک حالت $\mathbf{k}$ را با یکی از دو حالت اسپینی بالا و پایین اشغال کند. برای در نظر گرفتن اسپین الکترونها، هامیلتونی فوق را به شکل زیر باز نویسی می‌کنیم.

$$\begin{aligned}\hat{\mathsf{H}} &= \sum_{\mathbf{k}}\sum_{\sigma}\epsilon_{\mathbf{k}}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma}\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}\sigma} \\ &+\frac{1}{2}\sum_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}\sum_{\sigma_1\sigma_2}U_{\mathbf{k}_1\mathbf{k}_2\mathbf{k}'_1\mathbf{k}'_2}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}_1\sigma_1}\;\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}_2\sigma_2}\;\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}'_1\sigma_1}\;\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}'_2\sigma_2} \quad (۱۲-۲)\end{aligned}$$

در حالت معمول حل هامیلتونی فوق غیر ممکن است و نیاز داریم که به‌وسیلهٔ مدلها، تقریبهای دراین هامیلتونی وارد کنیم. در ادامه به بررسی این تقریبها می‌پردازیم.

۲-۲ تقریب سخت مقید

در این بخش به بررسی جامداتی (فلزات یا عایقها) می‌پردازیم که در آنها الکترونها برهمکنش ضعیفی با یکدیگر دارند. Nاتم را در نظر می‌گیریم که بر روی نقاط یک شبکهٔ مکعبی مرکز حجمی با ثابت شبکه‌ای از مرتبهٔ سانتی‌متر (به جای آنگستروم) قرار دارند. به عبارت دیگر الکترونهای هر اتم وجود اتمهای دیگر را احساس نمی‌کنند. یعنی هامیلتونی بلوری را می‌توانیم به صورت مجموع هامیلتونی‌های اتمی بنویسیم

$$\hat{\mathsf{H}} = \sum_{i}\hat{\mathsf{H}}_i$$

که در آن $\hat{\mathrm{H}}_i$ هامیلتونی اتمی برای الکترون مربوط به اتم i ام است و ویژه توابع آن توابع موج الکترونهای اتمی یا ترازهای الکترونی اتمی را مشخص می‌کنند

$$\hat{\mathrm{H}}_i\phi_l = E_l\phi_l \qquad (۱۳-۲)$$

بنابراین به ازای هر تراز E_l با N تراز تبهگن یکسان روبه‌رو هستیم. حال اگر بلور را فشرده کنیم تا این آرایهٔ اتمها به یکدیگر نزدیک شوند، هنگامی که فاصلهٔ بین اتمی قابل مقایسه با گسترهٔ فضایی تابع موج الکترونها می‌شود، الکترونهای این ترازها حضور اتمهای همسایه را احساس می‌کنند. به این ترتیب ترازهای الکترونی بلوری دیگر به صورت ترازهای الکترونی متناظر با ترازهای الکترونی اتمی‌مربوط به اتمهای منزوی نخواهند بود و نوارهای انرژی را تشکیل خواهند داد.

برای مثال برای اتمهای سدیم که بر روی شبکهٔ واقعی سدیم فلزی قرار دارند ترازهای الکترونی $۱s$ هیچ همپوشی ندارند. برای ترازهای $۲s$ و $۲p$ این همپوشی بسیار کوچک است. همپوشی ترازهای $۳s$ (که الکترونهای ظرفیت اتمی در آنها قرار دارند) قابل ملاحظه است. بدین ترتیب دلیلی ندارد که انتظار داشته باشیم که ترازهای الکترونی واقعی $۳s$ این الکترونها شباهتی با ترازهای الکترونی اتمی داشته باشند. روشهای متفاوتی برای به دست آوردن توابع موج الکترونی در بلور وجود دارد که هریک از درجاتی از تقریب چه در اصول و چه در روش محاسبه برخوردار است. تقریب سخت مقید به مواردی مربوط می‌شود که همپوشی توابع موج اتمی به اندازه‌ای است که نیاز به تصحیح پاسخهای اتمی وجود دارد. اما این همپوشی آنقدر نیست که توصیف اتمی را کاملاً بلا استفاده سازد. این تقریب برای نوارهای انرژی حاصل از پوسته‌های نیمه‌پر d اتمهای فلزات واسط و برای توصیف ساختار الکترونی عایقها مناسب است.

در این گونه موارد می‌توانیم توابع موج اتمی را به‌عنوان توابع پایه برگزینیم. در اینجا برای سادگی ابتدا اوربیتال اتمی s را که تنها دارای دو حالت اسپینی بالا و پایین است در نظر می‌گیریم. به این ترتیب با استفاده از تبدیلهای زیر می‌توانیم هامیلتونی را برحسب توابع اتمی بنویسیم

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_i e^{i\mathbf{k}.\mathbf{R}_i}\ \phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i) \qquad (۱۴-۲)$$

که درآن $\phi(\mathbf{r}-\mathbf{R}_i)$ تابع موج اتمی‌الکترونی با اسپین بالا یا پایین در جایگاه $\mathbf{R}_i$، $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ تابع موج تخت و N تعداد اتمهاست و همچنین

$$\hat{\mathsf{c}}_{\mathbf{k}\sigma} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_i e^{i\mathbf{k}.\mathbf{R}_i} \hat{\mathsf{c}}_{i\sigma} \qquad , \qquad \hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{\mathbf{k}\sigma} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_i e^{-i\mathbf{k}.\mathbf{R}_i} \hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma} \quad (۱۵-۲)$$

که در آن عملگرهای $\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma}$ و $\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}$ به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی برای الکترونی با اسپین σ برروی اتم i ام است. با بازنویسی هامیلتونی (۲-۱۲) خواهیم یافت

$$\hat{\mathsf{H}} = \sum_{ij}\sum_{\sigma}\ T_{ij}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{\mathsf{c}}_{j\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\sum_{\sigma\sigma'} U_{ijkl}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{j\sigma'}\hat{\mathsf{c}}_{k\sigma'}\hat{\mathsf{c}}_{l\sigma} \qquad (۱۶-۲)$$

که در آن

$$T_{ij} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}\ e^{i\mathbf{k}.(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)} \qquad (۱۷-۲)$$

$$U_{ijkl} = \int \phi^*(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_i)\phi^*(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_j)\ \hat{\mathsf{U}}(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2)\ \phi(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_k)$$
$$\times\phi(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_l)\ d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \qquad (۱۸-۲)$$

جملهٔ اول رابطه (۲–۱۶) نشان می‌دهد که الکترونی در اتم j ام نابود و الکترونی با همان اسپین در اتم i ام خلق می‌شود. به عبارت دیگر این جمله **جهش الکترونی** را از اتم j ام به اتم i ام نشان می‌دهد.بدین ترتیب T_{ij} مقیاسی از فراوانی جهش است. اما جملهٔ دوم نشان می‌دهد که دو الکترون در جایگاههای l ام و k ام در اثر برهمکنش با یکدیگر به جایگاههای اتمی j ام و i ام پراکنده شده‌اند.

برهمکنش ذره–ذره اغلب به صورت برهمکنش کولنی بین الکترونها در نظر گرفته‌می‌شود. بدین ترتیب خواهیم داشت

$$U_{ijlk} = \int \phi^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)\phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_k)\ \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} \times \phi^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)\phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_l)\ d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \qquad (۲–۱۹)$$

این چهار تابع موج $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ می‌توانند در چهار جایگاه اتمی متفاوت متمرکز شده‌باشند. ازاین‌رو این انتگرالها **انتگرالهای چارمرکزی** خوانده می‌شوند. با توجه به آنکه تابع موج اتمی $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ تنها به‌ازای r درهمسایگی نقطهٔ R دارای مقدار قابل ملاحظه‌ای است. بنابراین حاصلضربهای $\phi^*(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_i)\phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_k)$ و $\phi^*(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_j)\phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_l)$ هنگامی دارای مقادیر قابل ملاحظه‌ای هستند که $\mathbf{R}_i = \mathbf{R}_k$ و $\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_l$ باشد. از طرفی جملهٔ کولنی $\frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}$ با افزایش فاصلهٔ $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ به شدت به صفر میل می‌کند. بنابراین معمولاً بیشتر U_{ijkl}ها کوچک اند و تقریباً همواره در محاسبات بس‌ذره‌ای صرفنظر می‌شوند. جملات برتر در هامیلتونی تنها بزرگترین جملات کولنی‌اند. یک جملهٔ ممکن، برهمکنش مستقیم بین دو ذره در دو جایگاه اتمی متفاوت است. برای مثال با قراردادن $k = l$ و $i = j$ بدست می آوریم

$$\frac{1}{2}\sum_{j\neq k} U_{jk}\hat{\mathsf{n}}_j\hat{\mathsf{n}}_k \qquad (۲۰-۲)$$

$$U_{jk} = \int |\phi(\mathbf{r}_1 - \mathbf{R}_j)|^2 \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|} |\phi(\mathbf{r}_2 - \mathbf{R}_k)|^2 d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \qquad (۲۱-۲)$$

که این جمله نسبت به جمله‌ای که در چهار جایگاه اتمی متفاوت $(i \neq j \neq k \neq l)$ باشد بزرگتر است.

درتقریب سخت مقید توابع اتمی $\phi(\mathbf{r} - \mathbf{R})$ جایگزیده‌اند،به طوری که می‌توان تنها برهمکنش و جهش بین اتمهای نزدیکترین همسایه را در نظر گرفت. به این ترتیب T_{ij} تنها برای اتمهای نزدیکترین همسایه دارای مقدار قابل ملاحظه‌ای خواهد بود. بنابراین هامیلتونی (۲-۱۶) را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\hat{\mathsf{H}} = \sum_{<ij>}\sum_{\sigma} T_{ij}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{\mathsf{c}}_{j\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{ijkl}\sum_{\sigma\sigma'} U_{ijkl}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{j\sigma'}\hat{\mathsf{c}}_{k\sigma'}\hat{\mathsf{c}}_{l\sigma} \qquad (۲۲-۲)$$

که در آن $\sum_{<ij>}$ نشان دهندهٔ جمع بندی بر روی همسایه های نزدیک است.

۲-۳ مدل هابارد

فلزات واسط و فلزات خاکی کمیاب علاوه بر نوارهای رسانش دارای نوارهای نیمه پر d یا f نیز هستند که خواص ویژه این فلزات را به وجود می‌آورند. این نوارهای انرژی بسیار باریک‌اند. چگالی بار الکترونی در یک نوار d در نزدیکی هسته‌های درون جامد متمرکز است وفضای بین اتمها خالی است. به طوریکه می‌توان گفت که هر الکترون

بر روی یک اتم ویژه قرار دارد. این شرایط امکان داشتن توصیف اتمی برای نوار d را علیرغم عرض نواری قابل‌ملاحظه آن به وجود می‌آورد.

در سال ۱۹۶۳ هابارد [۲] و گاتزویلر [۳] در دو مقالهٔ مستقل تقریبی را پیشنهاد کردند که در آن مورد چنین نوارهایی از برهمکنش بین الکترونها در جایگاههای اتمی متفاوت چشم‌پوشی می‌شود وتنها کافی است که برهمکنش بین الکترونهایی در جایگاه اتمی یکسان را در نظر بگیریم. این مدل به **مدل هابارد** معروف است.

به این ترتیب مدل هابارد از بین جملات برهمکنشی تنها انتگرالهای کولنی با بزرگترین مقدار را نگه می‌دارد (یعنی جملهٔ $(i=j=k=l)$. پس جملهٔ برهمکنشی خواهد شد

$$\frac{1}{2}\sum_{\substack{i\\ \sigma\sigma'}} U_i \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma'}\hat{c}_{i\sigma'}\hat{c}_{i\sigma} \qquad (۲-۲۳)$$

باتوجه به آنکه ذرات فرمیون هستند دو عملگر نابودی $\hat{c}_{i\sigma'}\hat{c}_{i\sigma}$ تنها در صورتی که $\sigma \neq \sigma'$ باشد، جواب غیر صفر می‌دهد. پس می‌توان نوشت

$$\frac{1}{2}\sum_{i,\sigma} U_i \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}^{\dagger}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma} \qquad (۲-۲۴)$$

که در آنها

$$U_i = \int d^3r_1 d^3r_2 \; |\phi(\mathbf{r}_1-\mathbf{R}_i)|^2 \; \frac{e^2}{|\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2|} \; |\phi(\mathbf{r}_2-\mathbf{R}_i)|^2 \; = \; U \qquad (۲-۲۵)$$

برای تمام iها مقدار یکسانی را خواهد داشت. با توجه به روابط جابجایی عملگرهای

خلق و نابودی و با در نظر گرفتن $\hat{n}_{i\sigma} = \hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{i\sigma}$ می‌توان جملهٔ برهمکنشی را به‌صورت زیر ساده کرد

$$\frac{1}{2}\sum_{i,\sigma} U\hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma} \qquad (۲۶-۲)$$

بدین ترتیب **هامیلتونی هابارد** به شکل زیر خواهد شد

$$\hat{H} = \sum_{\substack{ij\\ \sigma}} T_{ij}\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} + \frac{1}{2}\sum_{i\sigma} U\hat{n}_{i\sigma}\hat{n}_{i,-\sigma} \qquad (۲۷-۲)$$

در اینجا پارامتر Uبرهمکنش کولنی بین دو الکترون بر روی جایگاه اتمی یکسان را نشان می‌دهد. با وجود تقریب‌های به کارگرفته شده یافتن پاسخهای هامیلتونی فوق بسیار مشکل و غیر ممکن می‌باشد. یافتن پاسخهای دقیق این هامیلتونی تنها در موارد حدی خاص انجام شده است. اما پاسخهای تقریبی بسیاری برای آن ارائه شده است. یکی از این پاسخهای تقریبی توسط هابارد به دست آمده است، که روش محاسبه آن براساس تکنیک تابع گرین است (این تکنیک توسط زوباروف [۵] در سال ۱۹۶۰ معرفی شده است). در فصلهای بعدی به بررسی تکنیک تابع گرین و پاسخ ارائه شده توسط هابارد خواهیم پرداخت.

فصل ۳

توابع گرین

تصحیحات چند مرتبهٔ اول نظریهٔ اختلال در بیشتر موارد برای توصیف دستگاههای بس–ذره‌ای کافی نیست. به همین دلیل ضروری است که روشهای سیستماتیکی برای یافتن تمام مرتبه‌های نظریهٔ اختلال در حل معادلهٔ شرودینگر بیابیم.

در این فصل به عنوان اولین قدم سه نمایش مهم (شرودینگر، هایزنبرگ و برهمکنشی) که در تحلیل معادلهٔ شرودینگر در فرمولبندی کوانتش ثانوی مفید هستند را بررسی خواهیم کرد. در ادامه به بررسی تابع گرین می‌پردازیم، که در حل مسائل بس–ذره‌ای از اهمیت خاصی برخوردار است.

۳–۱ نمایش شرودینگر

در مباحث معمول مکانیک کوانتومی فرض بر آن است که توابع موج وابسته به زمان و عملگرها مستقل از زمان هستند. این روش بیان معادلات، به **نمایش شرودینگر** معروف است. معادلهٔ شرودینگر به قرار زیر است (در دستگاه یکاهایی که در آن $\hbar = ۱$ است)

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi_S(t) = \hat{\mathsf{H}}\psi_S(t) \qquad (۱-۳)$$

که درآن فرض می‌شود $\hat{\mathsf{H}}$ هیچ وابستگی صریح زمانی ندارد. از آنجایی‌که معادلهٔ فوق یک معادلهٔ دیفرانسیل مرتبهٔ اول است، رفتار تابع موج در زمان t از روی تابع موج دستگاه در زمان $t = ۰$ تعیین می‌شود

$$\psi(t) = e^{-i\hat{\mathsf{H}}t}\psi(۰) \qquad (۲-۳)$$

۳-۲ نمایش هایزنبرگ

حل مسائل مکانیک کوانتومی به روش دیگری نیز ممکن است که پاسخ کاملاً یکسانی را نتیجه می‌دهد، ولی درآن از روشی کاملاً متفاوت استفاده می‌شود. در این روش که به نمایش هایزنبرگ معروف است، توابع موج مستقل از زمان و عملگرها وابسته به زمان هستند.

$$\hat{\mathsf{O}}_H(t) = e^{i\hat{\mathsf{H}}t}\hat{\mathsf{O}}e^{-i\hat{\mathsf{H}}t} \qquad (۳-۳)$$

یا به‌طور معادل، تلاش می‌کنیم که معادلهٔ حاصل از رابطهٔ زیر را حل کنیم

$$i\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathsf{O}}(t) = [\hat{\mathsf{O}}(t), \hat{\mathsf{H}}] \qquad (۴-۳)$$

۳–۳ نمایش برهمکنشی

نمایش برهمکنشی روش دیگری برای حل مسایل مکانیک کوانتومی است. در این روش هم توابع موج و هم عملگرها وابسته به زمان هستند. برای این منظور هامیلتونی را به دوبخش تقسیم می‌کنیم

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V} \qquad (۵–۳)$$

که در آن $\hat{H}_0$ بخش غیربرهمکنشی یا غیر اختلالی است و $\hat{V}$ بخش برهمکنشی است که شامل برهمکنش بین ذره‌ها می‌باشد. معمولاً $\hat{H}_0$ به گونه‌ای انتخاب می‌شود که به طور دقیق قابل حل باشد.

وابستگی زمانی عملگرها در نمایش برهمکنشی به شکل زیر خواهد بود

$$\hat{O}_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t}\hat{O}e^{-i\hat{H}_0 t} \qquad (۶–۳)$$

و وابستگی توابع موج به شکل زیر خواهد شد

$$\psi_I(t) = e^{i\hat{H}_0 t}\, e^{-i\hat{H}t}\psi(0) \qquad (۷–۳)$$

همچنین فرض می‌کنیم $[\hat{H}_0, \hat{V}] \neq 0$. اگر این دو عملگر جابجا شوند، مسئله به‌قدری ساده می‌شود که حل آن نیاز به نظریهٔ بس–ذره‌ای ندارد. وقتی این عملگرها جابجا نمی‌شوند،توابع نمایی نمی‌توانند ترکیب شوند. زیرا تنها هنگامی که $[\hat{A}, \hat{B}] = 0$ باشد می‌توان نوشت

$$e^{\hat{A}}e^{\hat{B}} = e^{\hat{A}+\hat{B}} \qquad (۸-۳)$$

در نمایش برهمکنشی وابستگی زمانی عملگرها به وسیلهٔ هامیلتونی مختل نشده $\hat{H}_0$ کنترل می‌شود(رابطهٔ (۳-۶)). حال نشان می‌دهیم که وابستگی زمانی توابع موج به وسیلهٔ برهمکنش‌ها کنترل می‌شود

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}\psi_I(t) &= i\hat{H}_0 e^{i\hat{H}_0 t}e^{-i\hat{H}t}\psi(0) - ie^{i\hat{H}_0 t}\hat{H}e^{-i\hat{H}t}\psi(0) \\
&= ie^{i\hat{H}_0 t}(\hat{H}_0 - \hat{H})e^{-i\hat{H}t}\psi(0) \\
&= -ie^{i\hat{H}_0 t}\hat{V}\left(e^{-i\hat{H}_0 t}e^{i\hat{H}_0 t}\right)e^{-i\hat{H}t}\psi(0) \\
&= -i\hat{V}_I(t)\psi_I(t) \qquad (۹-۳)
\end{aligned}$$

که نشان می‌دهد که وابستگی زمانی $\psi_I(t)$ به وسیلهٔ $\hat{V}_I(t)$ تعیین می‌شود. عملگر وارد شده در رابطهٔ (۳-۷) را به عنوان $\hat{U}(t)$ تعریف می‌کنیم

$$\hat{U}(t) = e^{i\hat{H}_0 t}e^{-i\hat{H}t} \qquad (۱۰-۳)$$

که در زمان $t = 0$ به صورت زیر خواهد بود

$$\hat{U}(0) = \mathbb{1} \qquad (۱۱-۳)$$

و معادلهٔ دیفرانسیل آن در نمایش برهمکنشی خواهد شد

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}\hat{\mathsf{U}}(t) &= \frac{\partial}{\partial t}\left(e^{i\hat{\mathsf{H}}_{\circ}t}e^{-i\hat{\mathsf{H}}t}\right)\\ &= ie^{i\hat{\mathsf{H}}_{\circ}t}\left(\hat{\mathsf{H}}_{\circ}-\hat{\mathsf{H}}\right)e^{-i\hat{\mathsf{H}}t}\\ &= -ie^{i\hat{\mathsf{H}}_{\circ}t}\hat{\mathsf{V}}\left(e^{-i\hat{\mathsf{H}}_{\circ}t}e^{i\hat{\mathsf{H}}_{\circ}t}\right)e^{-i\hat{\mathsf{H}}t}\\ &= -i\hat{\mathsf{V}}_I(t)\hat{\mathsf{U}}(t) \qquad (۱۲-۳)\end{aligned}$$

برای حل این معادله از طرفین نسبت به زمان انتگرال می‌گیریم

$$\begin{aligned}\hat{\mathsf{U}}(t)-\hat{\mathsf{U}}(\circ) &= -i\int_{\circ}^{t}dt_{۱}\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۱})\hat{\mathsf{U}}(t_{۱})\\ \hat{\mathsf{U}}(t) &= \mathbb{1}-i\int_{\circ}^{t}dt_{۱}\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۱})\hat{\mathsf{U}}(t_{۱}) \qquad (۱۳-۳)\end{aligned}$$

با جایگذاری مکرر $\hat{\mathsf{U}}(t)$ در این رابطه خواهیم یافت

$$\begin{aligned}\hat{\mathsf{U}}(t) &= \mathbb{1}-i\int_{\circ}^{t}dt_{۱}\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۱})+(-i)^{۲}\int_{\circ}^{t}dt_{۱}\int_{\circ}^{t_{۱}}dt_{۲}\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۱})\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۲})+\ldots\\ &= \sum_{n=\circ}^{\infty}(-i)^{n}\int_{\circ}^{t}dt_{۱}\int_{\circ}^{t_{۱}}dt_{۲}\ldots\int_{\circ}^{t_{n-۱}}dt_{n}\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۱})\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۲})\ldots\hat{\mathsf{V}}_I(t_{n})\end{aligned}$$

$$(۱۴-۳)$$

در اینجا مناسب است که **عملگر ترتیب زمانی** $\hat{\mathsf{T}}$ را معرفی کنیم. اگر عملگر $\hat{\mathsf{T}}$ بر روی گروهی از عملگرهای وابسته به زمان اثر کند

$$\hat{\mathsf{T}}\left[\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۱})\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۲})\hat{\mathsf{V}}_I(t_{۳})\right]$$

آنها را به ترتیب زمانی مرتب می‌کند [۱]. برای مثال اگر $t_۳ > t_۱ > t_۲$ باشد خواهیم داشت

$$\hat{\mathsf{T}}\left[\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۳)\right] = \hat{\mathsf{V}}_I(t_۳)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲) \qquad (۱۵-۳)$$

با معرفی تابع پله‌ای به شکل زیر می‌توانیم تعریف بهتری برای عملگر $\hat{\mathsf{T}}$ ارائه کنیم

$$\theta(x) = \left\{ \begin{matrix} ۱ & x>۰ \\ ۰ & x<۰ \end{matrix} \right\} \qquad (۱۶-۳)$$

به این ترتیب تعریف صریح $\hat{\mathsf{T}}$ برای دو عملگر به شکل زیر خواهد شد

$$\begin{aligned} \hat{\mathsf{T}}\left[\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲)\right] &= \theta(t_۱ - t_۲)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲) \\ &+\theta(t_۲ - t_۱)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱) \qquad (۱۷-۳) \end{aligned}$$

البته اگر عملگرهای $\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱)$ و $\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲)$ با یکدیگر جابجا شوند، دیگر ترتیب عملگرها اهمیتی ندارد.بنابراین تنها برای عملگرهایی که در زمانهای متفاوت با یکدیگر جابجا نمی‌شوند نیاز به عملگر $\hat{\mathsf{T}}$ داریم. حال انتگرال را به کمک رابطهٔ فوق بازنویسی می‌کنیم

$$\begin{aligned} &\tfrac{۱}{۲!}\int_۰^t dt_۱ \int_۰^t dt_۲ \hat{\mathsf{T}}\left[\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲)\right] \\ &= \tfrac{۱}{۲!}\int_۰^t dt_۱ \int_۰^{t_۱} dt_۲ \hat{\mathsf{V}}_I(t_۱)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۲) + \tfrac{۱}{۲!}\int_۰^t dt_۲ \int_۰^{t_۲} dt_۱ \hat{\mathsf{V}}_I(t_۲)\hat{\mathsf{V}}_I(t_۱) \qquad (۱۸-۳) \end{aligned}$$

[۱] توجه کنید که هنگام تعویض ترتیب عملگرها باید به تغییر علامت آنها براساس روابط جابجایی و پادجابجای بین عملگرها توجه کنیم.

جملهٔ دوم سمت راست برابر جملهٔ اول است، این مورد با تغییر متغیرهای انتگرالگیری $t_1 \to t_2$ ،$t_2 \to t_1$ به سادگی مشخص می‌شود. پس خواهیم یافت

$$\frac{1}{2!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \hat{T}\left[\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\right] = \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2) \quad (۱۹-۳)$$

به طور مشابه می‌توان نشان داد

$$\begin{aligned} &\frac{1}{3!}\int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 \int_0^t dt_3 \hat{T}\left[\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\hat{V}_I(t_3)\right] \\ &= \int_0^t dt_1 \int_0^{t_1} dt_2 \int_0^{t_2} dt_3 \hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\hat{V}_I(t_3) \end{aligned} \quad (۲۰-۳)$$

بنابراین برای عبارت $\hat{U}(t)$ خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \hat{U}(t) = \mathbb{1} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-i)^n}{n!} \int_0^t dt_1 \int_0^t dt_2 ... \int_0^t dt_n \\ \times \hat{T}\left[\hat{V}_I(t_1)\hat{V}_I(t_2)\hat{V}_I(t_3)...\hat{V}_I(t_n)\right] \end{aligned} \quad (۲۱-۳)$$

این بسط را می‌توان به صورت زیر خلاصه کرد

$$\hat{U}(t) = \hat{T} exp\left[-i\int_0^t dt_1 \hat{V}_I(t_1)\right] \quad (۲۲-۳)$$

۳-۴ ماتریس $\hat{S}$

در بخش قبل نشان دادیم که تابع موج در نمایش برهمکنشی دارای وابستگی زمانی به شکل زیر است

$$\psi_I(t) = \hat{U}(t)\psi(0) \qquad (۲۳-۳)$$

حال ماتریس $\hat{S}$ را به‌صورت $\hat{S}(t,t')$ به عنوان عملگری که تابع موج $\psi_I(t')$ را به $\psi_I(t)$ تبدیل می‌کند تعریف می‌کنیم

$$\psi_I(t) = \hat{S}(t,t')\psi_I(t') \qquad (۲۴-۳)$$

از تعریفهای اولیه داریم

$$\psi_I(t) = \hat{U}(t)\psi(0) = \hat{S}(t,t')\hat{U}(t')\psi(0) \qquad (۲۵-۳)$$

که نتیجه می‌دهد

$$\hat{S}(t,t') = \hat{U}(t)\hat{U}^{\dagger}(t') \qquad (۲۶-۳)$$

ماتریس $\hat{S}(t,t')$ دارای سه ویژگی مهم زیر است

$$\hat{S}(t,t') = \hat{U}(t)\hat{U}^{\dagger}(t) = e^{i\hat{H}_0 t}e^{-i\hat{H}t}e^{i\hat{H}t}e^{-i\hat{H}_0 t} = \mathbb{1} \qquad (۲۷-۳)$$

$$\hat{S}^{\dagger}(t,t') = \hat{U}(t')\hat{U}^{\dagger}(t) = \hat{S}(t',t) \qquad (۲۸-۳)$$

$$\hat{S}(t,t')\hat{S}(t',t'') = \hat{S}(t,t'') \qquad (۲۹-۳)$$

ماتریس $\hat{S}(t,t')$ در معادلهٔ دیفرانسیلی زیر صدق می‌کند

$$\frac{\partial}{\partial t}\hat{S}(t,t') = \frac{\partial}{\partial t}\hat{U}(t)\hat{U}^{\dagger}(t') = -i\hat{V}_I(t)\hat{S}(t,t') \qquad (۳۰-۳)$$

این معادله دارای پاسخی به شکل زیر است

$$\hat{S}(t,t') = \hat{T}\left[exp(-i\int_{t'}^{t} dt_1 \hat{V}_I(t_1))\right] \qquad (۳۱-۳)$$

تابع موج $\psi(0)$ که در بخشهای فوق معرفی شد، تابع موج در نمایش هایزنبرگ است. بنابراین مستقل از زمان است. با توجه به تعریف تابع موج در نمایشهای شرودینگر و هایزنبرگ یعنی روابط (۳-۲) و (۳-۷)، معلوم می‌شود که تابع موج $\psi(0)$ تابع موج زمان $t = 0$ این نمایشها نیز می‌باشد. در حالت پایه (دمای صفر) انتظار داریم که تابع موج $\psi(0)$ حالت پایهٔ هامیلتونی H باشد، که مایل به تعیین آن هستیم.

در انتخاب هامیلتونی به صورت $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{V}$ بخش $\hat{H}_0$ را چنان انتخاب کردیم که ویژه توابع و ویژه مقادیر $\hat{H}_0$ به سادگی به دست آید. فرض کنید که پایین‌ترین ویژه حالت $\hat{H}_0$، یعنی حالت پایهٔ آن، ϕ_0 باشد. حال می‌خواهیم حالت پایهٔ $\psi(0)$ را برحسب ϕ_0 تعیین کنیم.

۳-۵ برقراری برهمکنش به طور بی‌دررو

برقراری برهمکنش به طور بی‌دررو [۲]، یک ابزار ریاضی برای تولید ویژه حالتهای دستگاه برهمکنشی از ویژه حالتهای دستگاه غیر برهمکنشی $\hat{H}_0$ است. از آنجایی که

[۲] Adiabatic Switching ON

ویژه حالتهای دستگاه غیر برهمکنشی را می‌دانیم، این روند به ما کمک می‌کند که با برقرارکردن برهمکنش بین ذرات، ویژه حالتهای دستگاه برهمکنشی را بیابیم. برای این منظور هامیلتونی وابسته به زمان زیر را تعریف می‌کنیم

$$\hat{H} = \hat{H}_{\circ} + e^{-\epsilon|t|}\hat{V} \qquad (۳۲-۳)$$

که در آن ϵ یک کمیت کوچک مثبت است. به این ترتیب در زمانهای بسیار بزرگ چه در گذشته و چه در آینده هامیلتونی ما به $\hat{H}_{\circ}$ کاهش می‌یابد و در زمان $t = \circ$، هامیلتونی به هامیلتونی واقعی دستگاه برهمکنشی تبدیل می‌شود. اگر در پایان محاسبات ϵ را به سمت صفر میل دهیم، اختلال به صورت بی‌نهایت آهسته برقرار و قطع خواهد شد (یعنی به طور بی‌دررو) و هر پاسخ با معنی بایستی مستقل از کمیت ϵ باشد[۴].

به این ترتیب رابطهٔ بین دو حالت پایهٔ $\psi(\circ)$ و $\phi_{\circ}$ در دمای صفر به شکل زیر خواهد بود

$$\psi(\circ) = \hat{S}(\circ, -\infty)\phi_{\circ} \qquad (۳۳-۳)$$

$$\psi(\circ) = \hat{S}(\circ, +\infty)\phi_{\circ} \qquad (۳۴-۳)$$

۳–۶ تابع گرین فرمیونی دمای صفر

تابع گرین دمای صفر برای دو عملگر فرمیونی $\hat{A}(t)$ و $\hat{B}(t)$ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

$$\mathsf{G}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right)=-i\frac{<\psi_\circ|\hat{\mathsf{T}}[\hat{\mathsf{A}}(t)\hat{\mathsf{B}}(t')]|\psi_\circ>}{<\psi_\circ|\psi_\circ>} \qquad (۳۵-۳)$$

که در آن $\hat{\mathsf{A}}(t)$ و $\hat{\mathsf{B}}(t')$ دو عملگر در نمایش هایزنبرگ هستند و $|\psi_\circ>$ حالت پایهٔ هایزنبرگ دستگاه برهمکنشی است که هیچ اطلاعی از آن نداریم و مایل به یافتن آن هستیم

$$\hat{\mathsf{H}}|\psi_\circ>=E_\circ|\psi_\circ> \qquad (۳۶-۳)$$

حالتهای برانگیختهٔ این هامیلتونی در نمایش هایزنبرگ را به صورت زیر در نظر می‌گیریم

$$\hat{\mathsf{H}}|\psi_n>=E_n|\psi_n> \qquad (۳۷-۳)$$

که تشکیل یک مجموعهٔ کامل را می‌دهند.

اگر $|\psi_\circ>$ بهنجار باشد، با استفاده از تعریف عملگر $\hat{\mathsf{T}}$، تابع گرین به شکل زیر خواهد بود

$$\begin{aligned}\mathsf{G}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right) &= -i\theta(t-t')<\psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}(t)\hat{\mathsf{B}}(t')|\psi_\circ> \\ &\quad +i\theta(t'-t)<\psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}(t')\hat{\mathsf{A}}(t)|\psi_\circ> \qquad (۳۸-۳)\end{aligned}$$

که تغییر علامت در رابطهٔ فوق به علت تعویض مکان دو عملگر فرمیونی است. رابطهٔ فوق را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\mathsf{G}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right) = -i\theta(t-t') < \psi_\circ|e^{i\hat{\mathsf{H}}t}\hat{\mathsf{A}}e^{-i\hat{\mathsf{H}}(t-t')}\hat{\mathsf{B}}e^{-i\hat{\mathsf{H}}t'}|\psi_\circ >$$
$$+i\theta(t'-t) < \psi_\circ|e^{i\hat{\mathsf{H}}t'}\hat{\mathsf{B}}e^{i\hat{\mathsf{H}}(t-t')}\hat{\mathsf{A}}e^{-i\hat{\mathsf{H}}t}|\psi_\circ > \quad (۳۹-۳)$$

و با استفاده از رابطهٔ (۳-۳۶) خواهیم داشت

$$< \psi_\circ|e^{i\hat{\mathsf{H}}t} = e^{iEt} < \psi_\circ|$$
$$e^{-i\hat{\mathsf{H}}t'}|\psi_\circ >= e^{-iEt}|\psi_\circ > \quad (۴۰-۳)$$

در نتیجه داریم

$$\mathsf{G}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right) = -i\theta(t-t')e^{iE_\circ(t-t')} < \psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}e^{-i\hat{\mathsf{H}}(t-t')}\hat{\mathsf{B}}|\psi_\circ >$$
$$+i\theta(t'-t)e^{-iE_\circ(t-t')} < \psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}e^{i\hat{\mathsf{H}}(t-t')}\hat{\mathsf{A}}|\psi_\circ > \quad (۴۱-۳)$$

به این ترتیب با توجه به آنکه عملگرهای $\hat{\mathsf{A}}$ و $\hat{\mathsf{B}}$ در طرف راست رابطهٔ فوق مستقل از زمان هستند، تابع گرین تنها تابعی از اختلاف زمانی $(t-t')$ خواهد بود.

۳-۷ تفسیر فیزیکی تابع گرین

حالت $|\psi_I(t')>$ در نمایش شرودینگر را در نظر بگیرید. در زمان t' ذره‌ای در حالت α به این حالت می‌افزاییم $\hat{\mathsf{c}}^\dagger_{I\alpha}|\psi_I(t')>$. عموماً این حالت ویژه حالت هامیلتونی نیست. این حالت به صورت $\hat{\mathsf{S}}(t,t')\hat{\mathsf{c}}^\dagger_{I\alpha}|\psi_I(t')>$ در زمان منتشر می‌شود. حال می‌خواهیم ببینیم که در زمان $t>t'$ همپوشی این حالت با حالت $\hat{\mathsf{c}}^\dagger_{I\beta}|\psi_I(t)>$ چیست؟

$$
\begin{aligned}
&< \psi_I(t)|\hat{c}_{I\beta}(t)\hat{S}(t,t')\hat{c}^{\dagger}_{I\alpha}(t')|\psi_I(t') > \\
&=< \psi_\circ|\hat{U}^{\dagger}(t)\hat{c}_{I\beta}(t)\hat{U}(t)\hat{U}^{\dagger}(t')\hat{c}^{\dagger}_{I\alpha}(t')\hat{U}(t')|\psi_\circ > \\
&=< \psi_\circ|\hat{c}_{\beta}(t)\hat{c}^{\dagger}_{\alpha}(t')|\psi_\circ > \\
&= G\left(\hat{c}_{\beta}(t),\hat{c}^{\dagger}_{\alpha}(t')\right) \qquad (۴۲-۳)
\end{aligned}
$$

عبارت نهایی چیزی نیست جز تابع گرین عملگرهای هایزنبرگی $\hat{c}^{\dagger}(t')$ و $\hat{c}_{\beta}(t)$. اگر $t > t'$ باشد در زمان t ذره‌ای خلق و در زمان t' ذره‌ای نابود می‌شود.به این ترتیب این عبارت انتشار حالتی با یک ذرهٔ اضافی را نشان می‌دهد و به شکل مشابه اگر $t < t'$ باشد ابتدا در زمان t' ذره‌ای نابود و سپس در زمان t ذره‌ای خلق خواهد شد، یعنی این عبارت انتشار حفره‌ای را نشان می‌دهد که در زمان t ایجاد شده‌است. در نهایت تابع گرین، احتمال یافتن ذره‌ای (حفره‌ای) در زمان t (زمان t') در حالت پایهٔ دستگاه برهمکنش کننده را نشان می‌دهد.

۳-۸ توابع گرین تاخیری و تعجیلی

عملگر همانی را با استفاده از مجموعهٔ ویژه حالتهای کامل $|\psi_n >$ می‌توان به صورت زیر تعریف کرد

$$
\mathbb{1} = \sum_n |\psi_n >< \psi_n| \qquad (۴۳-۳)
$$

با قراردادن عملگر همانی فوق در بین عملگرهای $\hat{A}(t)$ و $\hat{B}(t')$ در تابع گرین (۳-۳۸) خواهیم یافت

$$\mathsf{G}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right)=\sum_n\left\{-i\theta(t-t')<\psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}(t)|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{B}}(t')|\psi_\circ>\right\}$$
$$+\sum_n\left\{i\theta(t'-t)<\psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}(t')|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{A}}(t)|\psi_\circ>\right\}\qquad(۴۴-۳)$$

با بازنویسی عملگرها در نمایش شرودینگر خواهیم یافت

$$\mathsf{G}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right)=$$
$$\sum_n\left\{-i\theta(t-t')e^{-i(E_n-E_\circ)(t-t')}<\psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{B}}|\psi_\circ>\right\}$$
$$+\sum_n\left\{i\theta(t'-t)e^{i(E_n-E_\circ)(t-t')}<\psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{A}}|\psi_\circ>\right\}\qquad(۴۵-۳)$$

رابطهٔ فوق تنها تابعی از $(t-t')$ است، بنابراین می‌توان تبدیل فوریهٔ آن را نسبت به $(t-t')$ به شکل زیر نوشت

$$\mathsf{G}_E\left(\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right)=\frac{۱}{۲\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}d(t-t')e^{iE(t-t')}\mathsf{G}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right)\qquad(۴۶-۳)$$
$$=\sum_n\left\{\frac{i}{۲\pi}\int_{-\infty}^{\circ}d(t-t')e^{i(E+(E_n-E_\circ))(t-t')}<\psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{A}}|\psi_\circ>\right\}$$
$$+\sum_n\left\{\frac{-i}{۲\pi}\int_{\circ}^{+\infty}d(t-t')e^{i(E-(E_n-E_\circ))(t-t')}<\psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{B}}|\psi_\circ>\right\}$$

برای اطمینان از همگرایی انتگرالهای فوق در انتگرال اول تبدیل $E\to E-i\delta$ و در انتگرال دوم تبدیل $E\to E+i\delta$ را انجام می‌دهیم. از آنجایی که $<\psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{B}}|\psi_\circ>$ و $<\psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{A}}|\psi_\circ>$ مستقل از زمان هستند خواهیم یافت

$$\mathsf{G}_E\left(\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right) \qquad (۴۷-۳)$$
$$= \frac{۱}{۲\pi}\sum_n \left\{ \frac{<\psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{A}}|\psi_\circ>}{E+(E_n-E_\circ)-i\delta} + \frac{<\psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{B}}|\psi_\circ>}{E-(E_n-E_\circ)+i\delta} \right\}$$

به این ترتیب جملهٔ اول در نیم صفحهٔ بالای صفحهٔ مختلط E و جملهٔ دوم در نیم صفحهٔ پایین صفحهٔ مختلط E تکینگی خواهد داشت. بنابراین تابع گرین $\mathsf{G}_E\left(\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right)$ نه در نیم صفحهٔ بالا و نه در نیم صفحهٔ پایین تحلیلی نیست. برای انتگرالهای پربندی بهتر است که تابع در یکی از نیم صفحه‌ها تحلیلی باشد. برای این منظور توابع گرین تاخیری $(+)$ و تعجیلی $(-)$ را برای عملگرهای فرمیونی به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$\mathsf{G}^{\pm}\left(\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\right) = \mp i\theta\left\{\pm(t-t')\right\} < \psi_\circ|\{\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\}|\psi_\circ > \qquad (۴۸-۳)$$

که در آن $\{\hat{\mathsf{A}}(t),\hat{\mathsf{B}}(t')\}$ پادجابجایی دو عملگر است. پس تابع گرین تاخیری $(+)$ به‌ازای $t>t'$ و تابع گرین تعجیلی $(-)$ به‌ازای $t<t'$ دارای مقدار صفر هستند. تبدیل فوریهٔ آنها را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\mathsf{G}_E^{(\pm)}\left(\hat{\mathsf{A}},\hat{\mathsf{B}}\right) \qquad (۴۹-۳)$$
$$= \frac{۱}{۲\pi}\sum_n \left\{ \frac{<\psi_\circ|\hat{\mathsf{B}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{A}}|\psi_\circ>}{E+(E_n-E_\circ)\pm i\delta} + \frac{<\psi_\circ|\hat{\mathsf{A}}|\psi_n><\psi_n|\hat{\mathsf{B}}|\psi_\circ>}{E-(E_n-E_\circ)\pm i\delta} \right\}$$

پس تابع گرین تاخیری $(+)$ در نیم صفحهٔ‌بالا و تابع گرین تعجیلی $(-)$ در نیم صفحهٔ پایین تحلیلی هستند.

۳–۹ تابع گرین فرمیونی دمای متناهی

برای سیستم‌هایی با دمای متناهی (دمای غیر صفر) مناسب‌تر است که از هنگرد گراند کانونیک [۳] استفاده کنیم، که امکان داشتن تعداد متغیری از ذرات را فراهم می‌کند. تابع پارش گراند کانونیک را می‌توان به صورت زیر نوشت

$$Z_G = Tr\{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\} \qquad (۵۰-۳)$$

که در آن $\hat{H}$ هامیلتونی، $\hat{N}$ عملگر تعداد کل، $\beta = \frac{1}{kT}$، k ثابت بولتزمن، T دمای مطلق و μ پتانسیل شیمیایی الکترونها است.

عملگر چگالی گراند کانونیک را نیز می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\hat{\rho}_G = Z_G^{-1}\ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})} \qquad (۵۱-۳)$$

به این ترتیب متوسط هر عملگر $\hat{X}$ در هنگرد گراند کانونیک را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$\begin{aligned} <\hat{X}> &= Tr\{\hat{\rho}_G\hat{X}\} \\ &= \frac{Tr\{\hat{X}\ e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\}}{Tr\{e^{-\beta(\hat{H}-\mu\hat{N})}\}} \end{aligned} \qquad (۵۲-۳)$$

آنگاه می‌توان توابع گرین تاخیری $(+)$ و تعجیلی $(-)$ را برای فرمیونها به صورت زیر تعریف کرد

---

[۳] Grand Canonical Ensemble

$$<< \hat{A}(t); \hat{B}(t') >>^{(\pm)} = \mp i\theta\{\pm(t-t')\} < \{\hat{A}(t), \hat{B}(t')\} > \qquad (۵۳-۳)$$

به این ترتیب با توجه به تعریف تابع پله‌ای، تابع گرین تاخیری $(+)$ به ازای $t < t'$ و تابع گرین تعجیلی $(-)$ به ازای $t > t'$ دارای مقدار صفر است. با مشتق‌گیری از این توابع خواهیم یافت

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} << \hat{A}(t); \hat{B}(t') >>^{(\pm)} &= \mp i \frac{d}{dt}(\theta\{\pm(t-t')\}) < \{\hat{A}(t), \hat{B}(t')\} > \\ &\quad \mp i\theta\{\pm(t-t')\} < \{\frac{d\hat{A}(t)}{dt}, \hat{B}(t')\} > \end{aligned} \qquad (۵۴-۳)$$

می‌دانیم که

$$\frac{d}{dt}(\theta\{\pm(t-t')\}) = \pm\delta(t-t') \qquad (۵۵-۳)$$

همچنین با توجه به رابطهٔ (۳-۴) داریم

$$\frac{d\hat{A}(t)}{dt} = -i[\hat{A}(t), \hat{H}] \qquad (۵۶-۳)$$

بنابراین توابع گرین تاخیری و تعجیلی معادله حرکت زیر را ارضا می‌کنند

$$\begin{aligned} i\frac{d}{dt} << \hat{A}(t); \hat{B}(t') >>^{(\pm)} &= \delta(t-t') < \{\hat{A}(t), \hat{B}(t')\} > \\ &\quad + << [\hat{A}(t), \hat{H}]; \hat{B}(t') >>^{(\pm)} \end{aligned} \qquad (۵۷-۳)$$

از آنجایی که $<< \hat{A}(t);\hat{B}(t') >>^{(\pm)}$ تنها تابعی از $(t-t')$ است، می‌توانیم تبدیل فوریهٔ آن را به صورت زیر بنویسیم

$$<< \hat{A};\hat{B} >>_E^{(\pm)} = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} << \hat{A}(t);\hat{B}(0) >>^{(\pm)} e^{iEt}dt \qquad (۳-۵۸)$$

همانند قبل، تابع گرین $<< \hat{A};\hat{B} >>_E^{(+)}$ تابعی منظم در نیم صفحهٔ بالا و تابع $<< \hat{A};\hat{B} >>_E^{(-)}$ تابعی منظم در نیم‌صفحهٔ پایین صفحهٔ مختلط E است. حال می‌توان تابع گرین زیر را تعریف کرد

$$<< \hat{A};\hat{B} >>_E = \begin{cases} <<\hat{A};\hat{B}>>_E^{(+)} & ImE>0 \\ <<\hat{A};\hat{B}>>_E^{(-)} & ImE<0 \end{cases} \qquad (۳-۵۹)$$

این تابع در کل صفحهٔ مختلط E تابعی منظم است. اگر رابطهٔ (۳-۵۷) را در e^{iEt} ضرب کنیم (که در آن برای تابع گرین تاخیری $(+)$، $ImE>0$ و برای تابع گرین تعجیلی $(-)$، $ImE>0$ است) و به ازای $t'=0$ نسبت به t انتگرال بگیریم خواهیم یافت

$$\begin{aligned} &\int_{-\infty}^{+\infty}\left(i\frac{d}{dt}<< \hat{A}(t);\hat{B} >>^{(\pm)}\right)e^{iEt}dt = \\ &\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(t-0)<\{\hat{A}(t),\hat{B}\}>e^{iEt}dt \\ &+\int_{-\infty}^{+\infty}<< [\hat{A}(t),\hat{H}];\hat{B} >>^{(\pm)} e^{iEt}dt \end{aligned} \qquad (۳-۶۰)$$

برای جملهٔ سمت چپ با انتگرال‌گیری جزء به جزء خواهیم داشت

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\left(i\frac{d}{dt}<<\hat{A}(t);\hat{B}>>^{(\pm)}\right)e^{iEt}dt$$
$$=\ [<<\hat{A}(t);\hat{B}>>^{(\pm)}\ e^{iEt}]_{-\infty}^{+\infty}-\int_{-\infty}^{+\infty}i<<\hat{A}(t);\hat{B}>>^{(\pm)}\ (iEe^{iEt})\ dt$$
$$=\ 0+E\int_{-\infty}^{+\infty}<<\hat{A}(t);\hat{B}>>^{(\pm)}\ e^{iEt}\ dt \qquad (۳-۶۱)$$

و جملهٔ اول سمت راست رابطه (۳−۶۰) خواهد شد

$$\int_{-\infty}^{+\infty}\delta(t-0)<\{\hat{A}(t),\hat{B}\}>e^{iEt}dt=<\{\hat{A},\hat{B}\}> \qquad (۳-۶۲)$$

که با استفاده از تبدیل فوریه و تعریف (۳−۵۹) می‌توان نوشت

$$E<<\hat{A};\hat{B}>>_E=\frac{1}{2\pi}<\{\hat{A},\hat{B}\}>+<<[\hat{A},\hat{H}];\hat{B}>>_E \qquad (۳-۶۳)$$

می‌توان نشان داد [۵] که

$$<\hat{B}(t')\hat{A}(t)>=i\lim_{\epsilon\to 0^+}\int_{-\infty}^{+\infty}[<<\hat{A};\hat{B}>>_{E+i\epsilon}-<<\hat{A};\hat{B}>>_{E-i\epsilon}]$$
$$\times\frac{e^{-iE(t-t')}}{e^{\beta(E-\mu)}+1}dE \qquad (۳-۶۴)$$

معادلات (۳−۶۳)و(۳−۶۴) به همراه روش توصیف شده به وسیلهٔ زوباروف پایهٔ اساسی برای محاسبات با این تابع گرین را تشکیل می‌دهند. در فصل بعد به کمک توابع گرین و تقریبهای ارائه شده توسط زوباروف به حل هامیلتونی هابارد خواهیم پرداخت.

فصل ۴

حل تقریبی مدل هابارد

در فصل دوم هامیلتونی هابارد را معرفی کردیم. در این فصل با استفاده از توابع گرین (فصل سوم) به حل تقریبی مدل هابارد خواهیم پرداخت.

۴–۱ پاسخ دقیق در حد اتمی

در اینجا به حل هامیلتونی هابارد (۲–۲۷) در حالت حدی عرض نواری صفر می‌پردازیم. حد عرض نواری صفر متناظر وضعیتی است که در آن توابع موج اتم‌های مختلف دارای همپوشی ناچیزی هستند. در این حد تکنیک تابع گرین پاسخ دقیقی را نتیجه می‌دهدکه مطابق پاسخ نظریهٔ اتمی است.

تلاش ما در اینجا یافتن عبارتی برای تابع گرین به شکل زیر است

$$G_{ij}^{\sigma}(E) = << \hat{c}_{i\sigma}; \hat{c}_{j\sigma}^{\dagger} >>_E \qquad (۱–۴)$$

میانگین انرژی در یک نوار ϵ_k را به صورت زیر تعریف می‌کنیم

$$T_{\circ} = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}} \qquad (۲-۴)$$

در حد عرض نواری صفر برای تمام kها $\epsilon_{\mathbf{k}} = T_{\circ}$ است، بنابراین از رابطهٔ (۲-۱۷) نتیجه می‌شود که $T_{ij} = T_{\circ}\delta_{ij}$ و هامیلتونی (۲-۲۷) به شکل زیر در می آید

$$\hat{\mathsf{H}} = T_{\circ} \sum_{i,\sigma} \hat{\mathsf{n}}_{i\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} \hat{\mathsf{n}}_{i\sigma} \hat{\mathsf{n}}_{i,-\sigma} \qquad (۳-۴)$$

که از آن نتیجه می‌شود

$$[\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}, \hat{\mathsf{H}}] = T_{\circ} \sum_{i\sigma} [\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}, \hat{\mathsf{n}}_{i\sigma}] + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} [\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}, \hat{\mathsf{n}}_{i\sigma} \hat{\mathsf{n}}_{i,-\sigma}] \qquad (۴-۴)$$

با استفاده از روابط پادجابجایی بین عملگرهای خلق و نابودی خواهیم یافت

$$[\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}, \hat{\mathsf{H}}] = T_{\circ} \hat{\mathsf{c}}_{i\sigma} + U \hat{\mathsf{c}}_{i\sigma} \hat{\mathsf{n}}_{i,-\sigma} \qquad (۵-۴)$$

بنابراین از رابطهٔ (۳-۶۳) می‌توان نتیجه گرفت

$$\begin{aligned} E\mathsf{G}^{\sigma}_{ij}(E) &= \frac{1}{2\pi} < \{\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}, \hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{j\sigma}\} > + U << [\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}, \hat{\mathsf{H}}]; c^{\dagger}_{j\sigma} >>_E \\ &= \frac{1}{2\pi}\delta_{ij} + T_{\circ}\mathsf{G}^{\sigma}_{ij}(E) + U\Gamma^{\sigma}_{ij}(E) \qquad (۶-۴) \end{aligned}$$

که در آن

$$\Gamma^{\sigma}_{ij}(E) = << \hat{\mathsf{n}}_{i,-\sigma}\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}; \hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{j\sigma} >> \qquad (۷-۴)$$

حال داریم

$$\{\hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}, \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\} = \delta_{ij}\hat{n}_{i,-\sigma} \qquad (۸-۴)$$

همچنین از معادلهٔ (۴-۳) بدست می آید

$$[\hat{n}_{i\sigma}, \hat{H}] = ۰ \qquad (۹-۴)$$

حال $\Gamma^{\sigma}_{ij}(E)$ را از معادلهٔ (۳-۶۳) حساب می‌کنیم

$$E\Gamma^{\sigma}_{ij}(E) = \frac{۱}{۲\pi}\delta_{ij} < \hat{n}_{i,-\sigma} > + T_{۰}\Gamma^{\sigma}_{ij} + U << \hat{n}^{۲}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}; \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} >> \quad (۱۰-۴)$$

در اینجا با توجه به آنکه $\hat{n}^{۲}_{i\sigma} = \hat{n}_{i\sigma}$ است، جملهٔ آخر رابطهٔ فوق همان $U\Gamma^{\sigma}_{ij}$ خواهد بود. بنابراین می‌توان معادلهٔ فوق را حل کرد و به دست آورد

$$\Gamma^{\sigma}_{ij}(E) = \frac{۱}{۲\pi}\delta_{ij}\frac{< \hat{n}_{i,-\sigma} >}{E - T_{۰} - U} \qquad (۱۱-۴)$$

در حالت عام برای رسیدن به پاسخ باید دنبالهٔ نامتناهی از معادلاتی به شکل (۳-۶۳) را حل کنیم، ولی در اینجا چون جملهٔ آخر رابطهٔ (۴-۱۰) برحسب Γ^{σ}_{ij} مشخص می‌شود به سادگی به پاسخ دست یافتیم. به همین دلیل است که در اینجا می‌توانیم حل دقیقی را به دست آوریم.

می‌دانیم که به علت تقارن انتقالی بلوری، احتمال اشغال تمام جایگاههای اتمی یکسان است. همچنین احتمال آن که اسپین الکترونی که در یک جایگاه قرار می‌گیرد

بالا باشد با احتمال پایین بودن اسپین برابر است. بنابراین $< \hat{n}_{i\sigma} >$ مستقل از i و σ می‌باشد. از آنجایی که در هر جایگاه دو الکترون با اسپین مخالف می‌توانند قرارگیرند، پس

$$< \hat{n}_{i\sigma} >=< \hat{n}_{\uparrow} >=< \hat{n}_{\downarrow} >= \frac{1}{2}n \qquad (۱۲-۴)$$

بااستفاده از این نتیجه و جایگذاری (۴—۱۱) در (۴—۶) به دست می آید

$$G^{\sigma}_{ij}(E) = \frac{1}{2}\delta_{ij}\left\{\frac{1-\frac{1}{2}n}{E-T_0} + \frac{\frac{1}{2}n}{E-T_0-U}\right\} \qquad (۱۳-۴)$$

حال با دانستن تابع گرین قادریم انرژی‌های شبه ذرات، انرژی فرمی، انرژی آزاد و غیره را محاسبه کنیم. برای مثال با قراردادن تابع گرین در رابطهٔ (۳—۶۴) و قرار دادن $i = j$ ، $t - t' = 0$ و جمع زنی برروی j می‌توان تعداد میانگین الکترونها با اسپین σ را به ازای هر اتم بیابیم

$$\hat{n}_{\sigma} = \frac{1}{N}\sum_{i} < \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}j\sigma > \qquad (۱۴-۴)$$
$$= \frac{i}{N}\lim_{\epsilon\to 0^{+}}\sum_{j}\int [G^{\sigma}_{jj}(E+i\epsilon) - G^{\sigma}_{jj}(E-i\epsilon)]\frac{dE}{e^{\beta(E-\mu)}+1}$$

و چگالی حالتهای شبه‌ذره‌ای به ازای هر اتم با اسپین σ خواهد شد

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{i}{N}\lim_{\epsilon\to 0^{+}}\sum_{j}[G^{\sigma}_{jj}(E+i\epsilon) - G^{\sigma}_{jj}(E-i\epsilon)] \qquad (۱۵-۴)$$

در نتیجه با قرار دادن تابع گرین (۴—۱۳) به دست می آوریم

$$\rho_\sigma(E) = (۱ - \frac{۱}{۲}n)\delta(E - T_\circ) + \frac{۱}{۲}n\delta(E - T_\circ - U) \qquad (۱۶-۴)$$

این محاسبه نشان می‌دهد که دستگاه به گونه‌ای رفتار می‌کند که گویی دارای دو تراز انرژی $T_\circ$ و $T_\circ + U$ است که به ترتیب شامل $(۱ - \frac{۱}{۲}n)$ و $\frac{۱}{۲}n$ حالت به ازای هر اتم هستند. پس با افزوده شدن تدریجی الکترونها به نوار، ابتدا انرژی فرمی در $\mu = T_\circ$ ثابت می‌ماند تا هنگامی که تراز پایینی پر شود. یعنی وقتی $\frac{۱}{۲}n = (۱ - \frac{۱}{۲}n)$ یا $n = ۱$ باشد. سپس با افزودن الکترونهای بیشتر پتانسیل شیمیایی به $\mu = T_\circ + U$ جهش می‌کند. در واقع وقتی $n = ۱$ است دیگر امکان اضافه کردن الکترونهایی با اسپین مشابه به اتمهایی که در حال حاضر دارای یک الکترون هستند وجود ندارد. بنابراین μ به $T_\circ + U$ جهش می‌کند.

برای توصیف این موضوع فرض کنید که الکترونهای اسپین $-\sigma$ در اتمهای ویژه‌ای ثابت شده‌اند. حال اگر الکترونی با اسپین σ بر روی اتمی که هیچ الکترونی ندارد فرود آید، آنگاه اتم بایستی گذاری را برای جذب الکترون با اسپین σ انجام دهد، که انرژی تشدید متناظر با آن $T_\circ$ است. از سوی دیگر اگر اتم در حال حاضر دارای الکترونی با اسپین $-\sigma$ باشد، در این صورت انرژی تشدید برابر $T_\circ + U$ خواهد بود. احتمال آنکه اتمی دارای الکترونی با اسپین $-\sigma$ باشد، یا نباشد به ترتیب برابر $n_{-\sigma}$ و $(۱ - n_{-\sigma})$ است.

۴-۲ پاسخ تقریبی

حال به روش مشابه، هامیلتونی هابارد (۲-۲۷) را در عرض نواری معین حل می‌کنیم. از هامیلتونی هابارد (۲-۲۷) می‌توان یافت

$$[\hat{c}_{i\sigma}, \hat{H}] = \sum_j T_{ij}\hat{c}_{j,\sigma} + U\hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma} \qquad (۱۷-۴)$$

$$[\hat{n}_{i\sigma}, \hat{H}] = \sum_j T_{ij}(\hat{c}^{\dagger}_{i\sigma}\hat{c}_{j\sigma} - \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma}\hat{c}_{i\sigma}) \qquad (۱۸-۴)$$

در اینجا نیز در پی یافتن تابع گرینی به شکل (۴-۱) هستیم. بنابراین

$$EG^{\sigma}_{ij}(E) = \frac{۱}{۲\pi}\delta_{ij} + \sum_k T_{ik}G^{\sigma}_{kj} + U\Gamma^{\sigma}_{ij} \qquad (۱۹-۴)$$

که Γ^{σ}_{ij} به وسیلهٔ رابطهٔ (۴-۷) تعریف شده‌است، ولی در اینجا Γ^{σ}_{ij} در رابطهٔزیر صدق می‌کند

$$\begin{aligned} E\Gamma^{\sigma}_{ij}(E) &= \frac{۱}{۲\pi}\delta ij < \hat{n}_{i,-\sigma} > + T_{\circ}\Gamma^{\sigma}_{ij} + U\Gamma^{\sigma}_{ij} \\ &+ \sum_{k\neq i} T_{ik} << \hat{n}_{i,-\sigma}, \hat{c}_{k\sigma}; \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} >>_E \qquad (۲۰-۴) \\ &+ \sum_{k\neq i} T_{ik}\{<< \hat{c}^{\dagger}_{i,-\sigma}\hat{c}_{k,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}; \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} >>_E - << \hat{c}^{\dagger}_{k,-\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}; \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} >>_E\} \end{aligned}$$

جملهٔ $U\Gamma^{\sigma}_{ij}$ با استفاده از رابطهٔ $\hat{n}^{۲}_{i,-\sigma} = \hat{n}_{i,\sigma}$ به دست آمده‌است. جملهٔ $T_{\circ}\Gamma^{\sigma}ij$ از طریق جدا کردن بخش $i = k$ از جملهٔ چهارم به دست آمده است. سه جملهٔ اول با جملات رابطهٔ (۴-۱۰)یکسان هستند، در صورتیکه دو جملهٔ دیگر در حد عرض نواری صفر، صفر هستند. بنابراین هر تقریبی هم که در این دو جمله صورت گیرد بازهم به نظریه‌ای خواهیم رسید که در حد عرض نواری صفر به پاسخ دقیق منجر می‌شود.

برای قطع کردن دنبالهٔ توابع گرین عبارتهایی تقریبی جایگزین دو جملهٔ آخر رابطهٔ(۴–۲۰) خواهیم کرد. این تقریبها که منسوب به زوباروف [۵]هستند، عبارتند از

$$<< \hat{n}_{i,-\sigma}\hat{c}_{k\sigma}; \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} >>_E \approx < \hat{n}_{i,-\sigma} > G^{\sigma}_{kj}(E) \qquad (۴–۲۱)$$

$$<< \hat{c}^{\dagger}_{i,-\sigma}\hat{c}_{k,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}; \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} >>_E \approx < \hat{c}^{\dagger}_{i,-\sigma}\hat{c}_{k,-\sigma} > G^{\sigma}_{ij}(E) \qquad (۴–۲۲)$$

$$<< \hat{c}^{\dagger}_{k,-\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma}\hat{c}_{i\sigma}; \hat{c}^{\dagger}_{j\sigma} >>_E \approx < \hat{c}^{\dagger}_{k,-\sigma}\hat{c}_{i,-\sigma} > G^{\sigma}_{ij}(E) \qquad (۴–۲۳)$$

با انجام این تقریب‌ها به نظریهٔ خامی دست می‌یابیم که در حد عرض نواری صفر به پاسخ صحیح منجر می‌شود.

به علت تقارن انتقالی با انجام تقریب‌های (۴–۲۲)و(۴–۲۳) جملهٔ آخر (۴–۲۰) حذف می‌شود، زیرا

$$\begin{aligned}
\sum_{k\neq i} T_{ik} < \hat{c}^{\dagger}_{i,-\sigma}\hat{c}_{k,-\sigma} > &= \frac{1}{N}\sum_{i,k}{}' T_{ik} < \hat{c}^{\dagger}_{i,-\sigma}, \hat{c}_{k,-\sigma} > \\
&= \frac{1}{N}\sum_{k,i}{}' T_{ik} < \hat{c}^{\dagger}_{k,-\sigma}, \hat{c}_{i,-\sigma} > \\
&= \sum_{k\neq i} T_{ik} < \hat{c}^{\dagger}_{k,-\sigma}, \hat{c}_{i,-\sigma} > \qquad (۴–۲۴)
\end{aligned}$$

که در آن $T_{ik} = T_{ki}$ از $\epsilon_{\mathbf{k}} = \epsilon_{-\mathbf{k}}$ به دست آمده‌است و $\sum'_{ik}$ به معنی جمع‌زنی دوگانه‌ای است که جملهٔ $i = k$ در آن حذف شده است.

حال در رابطهٔ (۴–۲۱) قرارمی‌دهیم

$$< \hat{n}_{i\sigma} >= \hat{n}_{\sigma} \qquad (۴–۲۵)$$

که از تقارن انتقالی نتیجه می‌شود. از تقارن مسئله معلوم می‌شود که $\hat{n}_\sigma$ مستقل از σ است و بنابراین برابر $n/2$ است. اگر برای این معادله پاسخهای $\hat{n}_\uparrow \neq \hat{n}_\downarrow$ وجود داشته باشد، این پاسخها امکان وجود فرومغناطیس در سیستم را نشان می‌دهند (البته به شرطی که انرژی آنها پایین‌تر از انرژی پاسخ غیرمغناطیسی باشد). این وضعیت را می‌توان به این صورت توجیه کرد که با به‌کارگیری میدان مغناطیسی کوچکی تقارن بین اسپین‌های بالا و پایین از بین می‌رود، اما این میدان به‌قدری کوچک است که در محاسبات می‌توان از آن صرفنظر کرد. قابل توجه است که وضعیت مشابهی در حالت عرض نواری صفر نیز وجود دارد، ولی با در نظر گرفتن $\hat{n}_\uparrow \neq \hat{n}_\downarrow$ تغییری در پاسخ (انرژی ترازها) پیدا نمی‌شود.

با جایگذاری تقریبهای (۴—۲۱) تا (۴—۲۳) در (۴—۲۰)داریم

$$E\Gamma^\sigma_{ij} = n_{-\sigma}\frac{\delta_{ij}}{2\pi} + (T_0 + U)\Gamma^\sigma_{ij} + n_{-\sigma}\sum_{k\neq i} T_{ik}\mathsf{G}^\sigma_{kj} \qquad (۴—۲۶)$$

که از آنجا به دست می آید

$$\Gamma^\sigma_{ij}(E) = \frac{n_{-\sigma}}{E - T_0 - U}\left\{\frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{k\neq i} T_{ik}\mathsf{G}^\sigma_{kj}\right\} \qquad (۴—۲۷)$$

اگر این عبارت را در (۴—۱۹) بنشانیم خواهیم داشت

$$E\mathsf{G}^\sigma_{ij}(E) = T_0\,\mathsf{G}^\sigma_{ij} + \left\{1 + \frac{Un_{-\sigma}}{E - T_0 - U}\right\}\left\{\frac{\delta_{ij}}{2\pi} + \sum_{k\neq i} T_{ik}\mathsf{G}^\sigma_{kj}\right\} \qquad (۴—۲۸)$$

این معادله به وسیلهٔ تبدیل فوریه حل می‌شود. برای این کار می‌نویسیم

$$\mathsf{G}^\sigma_{ij}(E) = N^{-1}\sum_{\mathbf{q}} \mathsf{G}^\sigma(\mathbf{q}, E)\ \exp[i\mathbf{q}.(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)] \qquad (۴—۲۹)$$

و با استفاده از رابطهٔ (۲–۱۷) از رابطهٔ (۴–۲۸) به دست می آوریم

$$E\mathsf{G}^{\sigma}_{ij}(E) = T_{\circ}\mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q},E) + \left\{ 1 + \frac{Un_{-\sigma}}{E - T_{\circ} - U} \right\} \times \left\{ \frac{1}{2\pi N} + (\epsilon_{\mathbf{q}} - T_{\circ})\mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q},E) \right\} \qquad (۴–۳۰)$$

که درنتیجه خواهیم داشت

$$\mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q},E) = \frac{1}{2\pi N} \frac{E - T_{\circ} - U(1 - n_{-\sigma})}{(E - \epsilon_{\mathbf{q}})(E - T_{\circ} - U) + n_{-\sigma}U(T_{\circ} - \epsilon_{\mathbf{q}})} \qquad (۴–۳۱)$$

که پاسخ تقریبی را برای مسئله همبستگی نتیجه می‌دهد.

۴–۳ خواص پاسخ تقریبی

عبارت (۴–۳۱) برای $\mathsf{G}^{\sigma}(E)$ تابعی از E است که می‌تواند به کسرهای جزئی به قرار زیر جدا شود

$$\mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q},E) = \frac{1}{2\pi N} \frac{1}{E^{(1)}_{\mathbf{q},\sigma} - E^{(2)}_{\mathbf{q},\sigma}} \times \left\{ \frac{E^{(1)}_{\mathbf{q},\sigma} - T_{\circ} - U(1 - n_{-\sigma})}{E - E^{(1)}_{\mathbf{q},\sigma}} - \frac{E^{(2)}_{\mathbf{q},\sigma} - T_{\circ} - U(1 - n_{-\sigma})}{E - E^{(2)}_{\mathbf{q},\sigma}} \right\} \qquad (۴–۳۲)$$

که در آن $E^{(1)}_{\mathbf{q},\sigma} < E^{(2)}_{\mathbf{q},\sigma}$ دو ریشهٔ معادلهٔ زیر هستند

$$(E - \epsilon_{\mathbf{q}})(E - T_{\circ} - U) + n_{-\sigma}U(T_{\circ} - \epsilon_{\mathbf{q}}) = 0 \qquad (۴–۳۳)$$

می‌توان نشان داد که $E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma} < T_۰ + U(۱ - \hat{\mathsf{n}}_{-\sigma}) < E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}$، بنابراین رابطهٔ (۴–۳۳) دارای شکل زیر است

$$\mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q}, E) = \frac{۱}{۲\pi N}\left\{\frac{A^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}}{E - E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}} + \frac{A^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}}{E - E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}}\right\} \qquad (۴–۳۴)$$

که در آن $A^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}, A^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma} > ۰$. اگر داشته باشیم $A^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma} + A^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma} = ۱$، آنگاه عبارت (۴–۳۴) تابع گرین متناسب با ساختار نواری است که در آن دو نوار با رابطهٔ پاشندگی $E = E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}$ و $E = E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}$ موجود است. برای ضرایب $A^{(i)}_{\mathbf{q}\sigma}$ نمی‌توان هیچ تفسیر ساده‌ای آورد مگر آنکه بگوییم که این ضرایب، چگالی حالتها در هریک از نوارها را به‌گونه‌ای کاهش می‌دهند که تعداد کل حالتها به ازای هراتم در هردو نوار درست برابر یک باشد. این موضوع را می‌توان به صورت زیر به دست آورد. از روابط (۴–۱۵) و (۴–۲۹) داریم

$$\rho_{\sigma}(E) = i \lim_{\epsilon \to ۰^{+}} \sum_{\mathbf{q}} [\mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q}, E + i\epsilon) - \mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q}, E - i\epsilon)] \qquad (۴–۳۵)$$

با جایگذاری عبارت (۴–۳۴) برای $\mathsf{G}^{\sigma}(\mathbf{q}, E)$ خواهیم یافت

$$\rho_{\sigma}(E) = N^{-۱} \sum_{\mathbf{q}} \left[A^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}\delta[E - E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}] + A^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}\delta[E - E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}]\right] \qquad (۴–۳۶)$$

و سرانجام خواهیم یافت

$$A^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma} + A^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma} = ۱ \qquad (۴–۳۷)$$

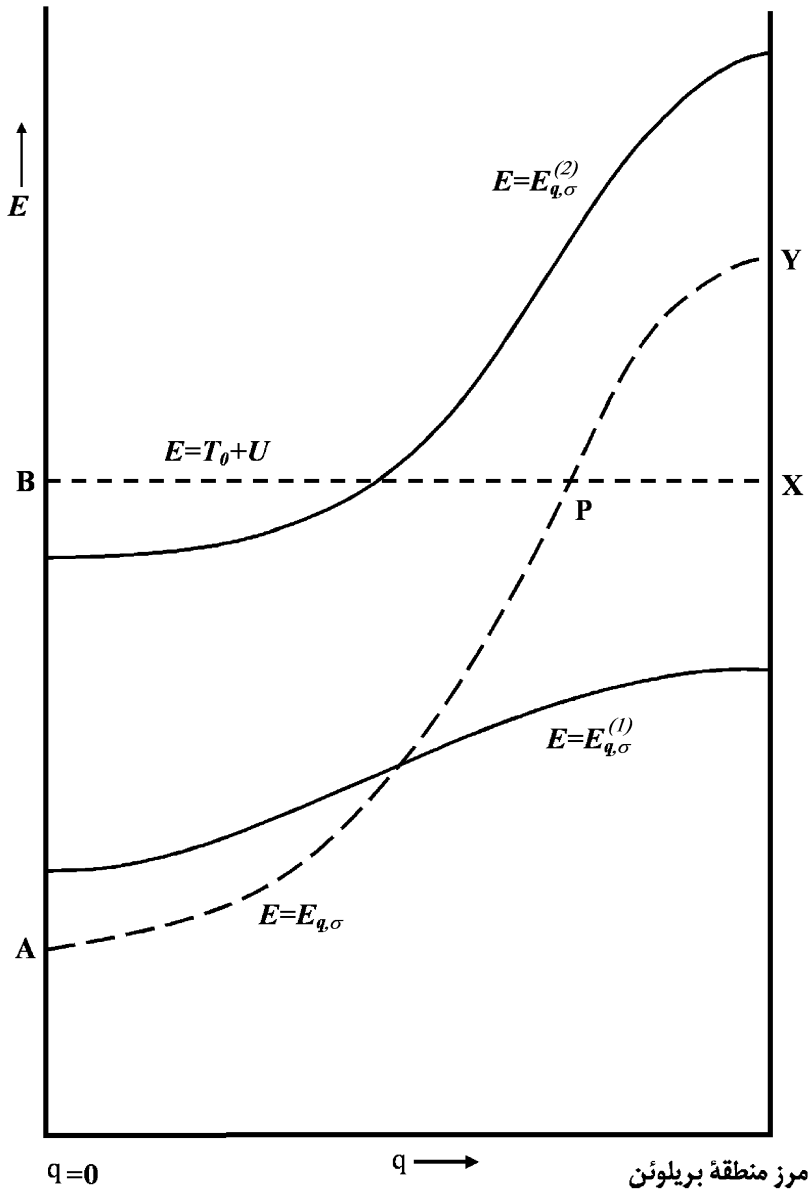
شکل عمومی ساختار نواری $E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}$ و $E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}$ در شکل ۴–۱ رسم شده است. در حد $U \to ۰$، منحنی پایین $E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}$ به APX میل می‌کند. در این هنگام در امتداد AP، $A^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma} \to ۱$ و در امتداد PX، $A^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma} \to ۰$. به طور مشابه منحنی بالا $E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}$ به BPY میل می‌کند، که در امتداد PY، $A^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma} \to ۱$. بنابراین، با قطع‌شدن برهمکنش دو بخش AP و PY ترکیب می‌شوند و ساختار نواری مختل نشده را به وجود می‌آورند و بخشهای دیگر حذف می‌شوند. از رابطهٔ (۴–۳۱) نیز مشاهده می‌شود که هنگامی که $U \to ۰$، تابع گرین مختل نشده برابر $\frac{۱}{۲\pi N(E-E\mathbf{q})}$ خواهد شد.

در حد عرض نواری صفر، $\epsilon_{\mathbf{q}} \to T_۰$ و منحنی‌های $E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma}$ و $E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma}$ مسطح می‌شوند و به $E^{(۱)}_{\mathbf{q},\sigma} = T_۰$ و $E^{(۲)}_{\mathbf{q},\sigma} = T_۰ + U$ میل می‌کنند. در نتیجه دو تراز به ترتیب شامل $(۱ - n_{-\sigma})$ و n_σ حالت که در بخش قبل بررسی کردیم به دست می‌آید.

برای $\rho_\sigma(E)$ علاوه بر رابطهٔ (۴–۳۶) می‌توان عبارت صریح‌تری را به دست آورد. از رابطهٔ (۴–۳۳) و رابطهٔ (۴–۳۵) می‌توان یافت

$$\begin{aligned}
\rho_\sigma(E) &= |E - T_۰ - U(۱ - n_{-\sigma})| N^{-۱} \\
&\quad \times \sum_{\mathbf{q}} \delta[(E - \epsilon_{\mathbf{q}})(E - T_۰ - U) + U n_{-\sigma}(T_۰ - \epsilon_{\mathbf{q}})] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt |E - T_۰ - U(۱ - n_{-\sigma})| \delta[(E - t)(E - T_۰ - U) \\
&\quad + U n_{-\sigma}(T_۰ - t)] N^{-۱} \sum_{\mathbf{q}} \delta[t - \epsilon_{\mathbf{q}}] \\
&= \int_{-\infty}^{+\infty} dt \; P(t) \delta \left[\frac{E(E - T_۰ - U) + U n_{-\sigma} T_۰}{E - T_۰ - U(۱ - n_{-\sigma})} - t \right] \\
&= P\{g(E, n_{-\sigma})\} \qquad (۴–۳۸)
\end{aligned}$$

که در آن



شکل ۴–۱ : نمودار یک نمونه از ساختار نواری شبه ذره‌ای برای $E^{(۱)}_{q\sigma}$ و $E^{(۲)}_{q\sigma}$ که در حالت غیر اختلالی به ساختار نواری APY کاهش می‌یابد[۲].

$$g(E,n_{-\sigma}) = E - Un_{-\sigma} - \frac{U^{۲}n_{-\sigma}(۱-n_{-\sigma})}{E - T_{۰} - U(۱-n_{-\sigma})} \qquad (۳۹-۴)$$

و

$$P(E) = N^{-۱}\sum_{\sigma}\delta(E-\epsilon_{\mathrm{q}}) \qquad (۴۰-۴)$$

چگالی حالتهای متناظر با ساختار نواری ϵ_{q} است.

پس $\rho(E)$ به سادگی از $P(E)$ به وسیلهٔ تبدیلات (۴−۳۸) و (۴−۳۹) به دست می‌آید. این تبدیلات در شکل ۴−۲ توصیف شده‌اند. در شکل ۴−۲ با استفاده از منحنی $g(E)$ و تصویر کردن $P(E)$، $\rho_{\sigma}(E)$ به دست آمده است. در حد $U \to ۰$، منحنی $g(E)$ به خط مستقیم AOB میل می‌کند. جدا شدن نوارها به دو بخش را می‌توان ناشی از نامتناهی شدن $g(E)$ در $E = T_{۰} + U(۱-n_{\sigma})$ دانست.

برای درک بیشتر، خواص این پاسخ، شاید مفید باشد که یک مثال ساده را در نظربگیریم. چگالی حالتها را به صورت مربعی به شکل زیر در نظرمی‌گیریم

$$P(E) = \begin{cases} ۱/\Delta & \text{اگر } T_{۰}-\frac{\Delta}{۲}<E<T_{۰}+\frac{\Delta}{۲} \\ ۰ & \text{درغیراین‌صورت} \end{cases} \qquad (۴۱-۴)$$

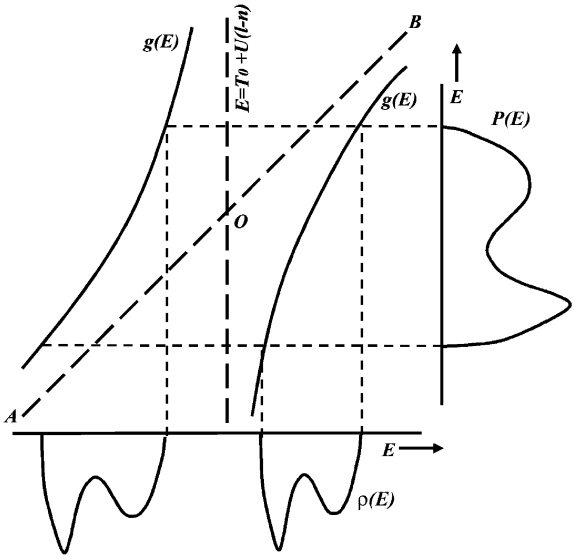
که برای آن به سادگی خواهیم یافت

$$\rho_{\sigma}(E) = \begin{cases} ۱/\Delta & \text{اگر } E^{\sigma}_{-۱,-۱}<E<E^{\sigma}_{-۱,۱} \\ & \text{یا } E^{\sigma}_{۱,-۱}<E<E^{\sigma}_{۱,۱} \\ ۰ & \text{درغیراین‌صورت} \end{cases} \qquad (۴۲-۴)$$

که در آن

$$E^{\sigma}_{\alpha\beta} = T_{۰} + \frac{U}{۲} + \frac{\beta\Delta}{۴} + \alpha\sqrt{\{(\frac{U}{۲}-\frac{\beta\Delta}{۴})^{۲} + \frac{۱}{۲}\beta\Delta U n_{-\sigma}\}} \qquad (\alpha,\beta = \pm ۱)$$

(۴۳−۴)



شکل ۴–۲: نمودار منحنی $g(E,n)$. با تصویرکردن تابع چگالی حالتها $P(E)$ چگالی حالتهای شبه ذره‌ای $\rho_\sigma(E)$ به دست آمده‌است [۲].

توجه کنید از آنجایی‌که $(E_{-1,1}-E_{-1,-1})+(E_{1,1}-E_{1,-1})=\Delta$ است، همانطور که انتظار داشتیم نوار $\rho(E)$ تنها شامل یک حالت به ازای هر اتم است.

در ادامهٔ این بخش بیشتر به پاسخ‌های غیر مغناطیسی که در آنها $n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{n}{2}$ توجه می‌کنیم و پاسخهای فرومغناطیسی را در بخش **شرط فرومغناطیس** بررسی خواهیم کرد. انرژی فرمی μ برای حالت غیر مغناطیسی از طریق معادلهٔ زیر تعیین می‌شود

$$\frac{1}{2}n = \int_{-\infty}^{\mu} P\{g(E,\frac{1}{2}n)\}dE \qquad (۴۴-۴)$$

پس با اضافه شدن الکترونها μ نیز افزایش می‌یابد تا هنگامی که نوار پایینی پر شود. در این هنگام با اضافه شدن الکترونهای بیشتر μ یک جهش ناپیوسته انجام خواهدداد و سپس دوباره به‌طور پیوسته افزایش می‌یابد تا هنگامی که کل نوار پر شود. اگر E_{max}

و E_{min} به ترتیب بیشینه و کمینهٔ انرژی‌های نواری باشند. از شکل ۴–۲ مشاهده می‌شود که این جهش از مقدار $\mu_<$ به مقدار $\mu_>$ در چگالی n_c که به وسیلهٔ معادلات زیر مشخص می‌شود، رخ می‌دهد

$$E_{max} = g(\mu_<, \frac{۱}{۲}n_c) \qquad (۴۵–۴)$$

$$E_{min} = g(\mu_>, \frac{۱}{۲}n_c) \qquad (۴۶–۴)$$

$$\frac{۱}{۲}n_c = \int_{-\infty}^{\mu<} P\{g(E, \frac{۱}{۲}n_c\}dE \qquad (۴۷–۴)$$

که در(۴–۴۵) کوچکترین و در(۴–۴۶) بزرگترین ریشه را در نظرمی‌گیریم.

در حالت عمومی $n_c \neq ۱$ می‌باشد، ولی در مورد منحنی چگالی حالتهای(۴–۴۱)، به دلیل تقارن بین الکترونها و حفره‌ها، یا به‌طور دقیق‌تر، باتوجه به این واقعیت که در این مورد $P(E)$ دارای خاصیت $P(۲T_۰ - E) = P(E)$ می‌باشد، داریم $n_c = ۱$. در نتیجه ناپیوستگی μ برابر خواهد شد با

$$\mu_> - \mu_< = \sqrt{(U^۲ + \frac{۱}{۴}\Delta^۲)} - \frac{۱}{۲}\Delta \qquad (۴۸–۴)$$

که وقتی $U \to ۰$ مقدار فوق نیز به صفر میل می‌کند و وقتی $\Delta \to ۰$ این مقدار به سمت U میل می‌کند.

ایجاد دو نوار را می‌توان به شکل زیر تفسیر کرد. همانند تفسیر حالت حدی اتمی حرکت الکترونهایی با اسپین $\sigma-$ را دریک جامد درنظرمی‌گیریم. در حد اتمی، از جهش الکترونهای با اسپین σ بین اتمها صرفنظر کردیم. ولی در اینجا امکان جهش الکترون از یک اتم به اتم دیگر نیز وجود دارد. به این ترتیب اتمها بین دو حالت تشدید با انرژی $T_۰$ و $T_۰ + U$ سوئیچ می‌کنند. تاثیر کل این سوئیچ‌کردن وابسته به آن است که

آیا آهنگ این تغییرات در مقایسه با U سریع است یا آهسته. اگر آهنگ سوئیچ‌کردن آهسته باشد، تاثیر آن تنها پهن کردن دو انرژی تراز انرژی تشدید به میزان $۱/\tau$ است که در آن τ متوسط طول عمر االکترون برروی یک اتم است، یعنی $۱/\tau$ از مرتبهٔ عرض نوار W است. از سوی دیگر اگر آهنگ سوئیچ کردن در مقایسه با U سریع باشد، دو تراز تشدید مجزا ناپدید می‌شوند و در عوض یک نوار با انرژی متوسط $T_۰ + n_{-\sigma}U$ خواهیم داشت. یعنی اگر U بسیار کوچکتر از W باشد، رفتار نواری را خواهیم یافت.

۴–۴ مثال دو الکترونی

برای درک فیزیکی بهتر پاسخ به دست آمده در بخشهای قبل و به ویژه برای درک چگونگی شکافته شدن نوارها به دو بخش، دو الکترون را درنظرمی‌گیریم که طبق هامیلتونی (۲–۲۷) حرکت و برهمکنش می‌کنند

تابع موج فضایی ویژه حالت دستگاه دو الکترونی را به صورت $\psi(i,j)$ درنظرمی‌گیریم. به این ترتیب $|\psi(i,j)|^۲$ احتمال یافتن یکی از الکترونها در اتم i ام و الکترون دیگر در اتم j ام است. از $۴N^۲$ حالت ممکن برای این دستگاه $۳N^۲$ حالت، حالتهای سه‌گانه اسپینی هستند که برای آنها $\psi(i,j) = -\psi(j,i)$ و $N^۲$ حالت دیگر حالتهای یگانه هستند که برای آنها $\psi(i,j) = \psi(j,i)$ می‌باشد. اگر $\psi(i,j)$ ویژه‌حالت هامیلتونی (۲–۲۷) با انرژی E باشد، یعنی

$$E\psi(i,j) = \sum_k T_{ik}\psi(k,j) + \sum_k T_{jk}\psi(i,k) + U\delta_{ij}\psi(i,i) \qquad (۴۹–۴)$$

از آنجایی که برای حالتهای سه گانه داریم $\psi(i,i)=0$ است، برای این حالتها جملهٔ آخر صفر می‌شود. بنابراین حالتهای سه‌گانه توسط برهمکنش مختل نمی‌شوند. این به آن علت است که هامیلتونی (۲–۲۷) تنها برهمکنش بین الکترونهایی با اسپین مخالف را در نظرمی‌گیرد. پس توجه ما به حالتهای یگانه محدود می‌شود.

حال در مورد حالت یگانه می‌نویسیم

$$\psi(i,j)=\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{K}}\sum_{\mathbf{k}}\phi(\mathbf{k},\mathbf{K})\exp\{i\mathbf{K}.(\mathbf{R}_i+\mathbf{R}_j)+\frac{1}{2}i\mathbf{k}.(\mathbf{R}_i-\mathbf{R}_j)\} \quad (۵۰–۴)$$

و با جایگذاری آن در رابطهٔ (۴–۴۹) و با استفاده از رابطهٔ (۲–۱۷) به دست می‌آید

$$E\phi(\mathbf{k},\mathbf{K})=\{\epsilon_{\mathbf{K}+\frac{1}{2}\mathbf{k}}+\epsilon_{\mathbf{K}-\frac{1}{2}\mathbf{k}}\}\phi(\mathbf{k},\mathbf{K})+\frac{U}{N}\sum_{\mathbf{k}'}\phi(\mathbf{k}',\mathbf{K}) \quad (۵۱–۴)$$

بنابراین پاسخ‌هایی با اندازه حرکت‌های کل $\mathbf{K}$ متفاوت، دارای جفت‌شدگی نیستند، این پیامد تقارن انتقالی است. از رابطهٔ (۴–۵۱) خواهیم یافت

$$\phi(\mathbf{k},\mathbf{K})=\frac{UN^{-1}\sum_{\mathbf{k}'}\phi(\mathbf{k}',\mathbf{K})}{E-\epsilon_{\mathbf{K}+\frac{1}{2}\mathbf{k}}-\epsilon_{\mathbf{K}-\frac{1}{2}\mathbf{k}}} \quad (۵۲–۴)$$

که از آنجا

$$1=\frac{U}{N}\sum_{\mathbf{k}}\frac{1}{E-\epsilon_{\mathbf{K}+\frac{1}{2}\mathbf{k}}-\epsilon_{\mathbf{K}-\frac{1}{2}\mathbf{k}}} \quad (۵۳–۴)$$

و به‌این‌ترتیب ترازهای انرژی برای هر $\mathbf{K}$ مفروض به‌دست می‌آید.

ماهیت پاسخ‌های معادلاتی از نوع (۴–۵۳) به خوبی شناخته شده است. این معادله دارای N ریشه است. سمت راست رابطه به ازای N مقدار از $\mathbf{K}$ در N انرژی که توسط رابطهٔ زیر به دست می‌آید، بی‌نهایت می‌شود

$$E = \epsilon_{\mathbf{K}+\frac{1}{2}\mathbf{k}} + \epsilon_{\mathbf{K}-\frac{1}{2}\mathbf{k}} \qquad (۵۴-۴)$$

بنابراین $(N-1)$ ریشه در بین این بی‌نهایتها قرارمی‌گیرد. این $N-1$ ریشه در نوار انرژی مختل نشده که توسط رابطهٔ (۴−۵۴) مشخص می‌شود، قرار دارند. یک ریشه دیگر هم وجود دارد. برای Uهای بسیار بزرگ این ریشه کاملاً جدا از نوار(۴−۵۴) است و یک حالت مقید را تشکیل می‌دهد. وقتی U در مقایسه با عرض نوار رابطهٔ (۴−۵۴) بزرگ باشد، این ریشه از نوار رابطهٔ (۴−۵۴) مجزا نیست.

بنابراین برای Uهای بسیار بزرگ $N(N-1)$ حالت پراکندگی یگانه وجود دارد که در نوار مختل نشده قرار دارند. همچنین N حالت مقید (یکی به ازای هر یک از N مقدار **K**) با انرژی بالا وجود دارد. در حد $U \to \infty$، همهٔ این حالتهای مقید ناپدید می‌شوند. وقتی $U \to \infty$ دیگر هیچ دو الکترونی نمی‌توانند بر روی یک جایگاه قرارگیرند. بنابراین اگر الکترونی در هریک از N حالت ممکن وجود داشته‌باشد و الکترون دیگری را به آن بیفزاییم، آنگاه تنها $N-1$ حالت ممکن برای الکترون دوم وجود خواهد داشت. بنابراین به جای N^2 حالت تنها $N(N-1)$ حالت برای دو الکترون وجود خواهد داشت. وقتی U بزرگ است ولی مقدار آن متناهی است، N حالت دیگر با انرژی بالا ظاهر خواهند شد. حال می‌توان حدس زد، هنگامی که m الکترون موجود باشد، در حالت حدی $U \to \infty$ تنها $N-m$ حالت دیگر برای الکترون افزوده شدهٔ بعدی وجود دارد. به این ترتیب هنگامی که U متناهی باشد، این m حالت باقی مانده با انرژی‌های بالا ظاهر خواهند شد. به این ترتیب می‌توانیم چگونگی پیدایش دو نوار شکل ۴−۱ را درک کنیم. ضرورتاً نوار پایین، نوار مختل نشده‌ای است که تعدادی از حالتهای آن حذف شده‌اند. این حالتها در نوار بالایی ظاهر می‌شوند.

این مثال ضعف پاسخ تقریبی به دست آمده در بخش ۲.۴ را نشان می‌دهد.

بحث مطرح شده در بالا تنها هنگامی کاربرد دارد که U به اندازهٔ کافی بزرگ باشد تا حالتهای مقید مجزا را نتیجه دهد. ولی پاسخ تقریبی بخش ۲.۴ برای تمام مقادیر غیر صفر U، شکافتگی دو نواری را نتیجه می‌دهد. واضح است که در این تقریب، اهمیت اثرات همبستگی برای Uهای کوچک، بیش از حد تخمین زده شده است، که احتمالاً پیامد تقریبهای (۴–۲۱) تا (۴–۲۳) می‌باشد.

۴–۵ شرط فرومغناطیس

فرومغناطیس هنگامی روی می‌دهد که انرژی آزاد حالتهای به صف شدهٔ فرومغناطیسی کمتر از انرژی آزاد حالتهای غیر مغناطیسی باشد. وقتی اثرات همبستگی به حساب آورده می‌شوند، عمدتاً این همبستگی ناشی از الکترونهایی با اسپین‌های پادموازی است (زیرا طبق آمار فرمی دیراک الکترونهایی با اسپین موازی نمی‌توانند در یک جایگاه قرار گیرند). بنابراین وارد کردن اثرات همبستگی انرژی حالتهای غیرمغناطیسی را بیشتر از حالتهای فرومغناطیسی کاهش می‌دهد.

با استفاده از رابطهٔ (۴–۳۸) برای چگالی حالتها و با استفاده از شرط

$$n = n_{\uparrow} + n_{\downarrow} \qquad (۵۵–۴)$$

مقدار n_σ برای دمای صفر مطلق به وسیلهٔ شرط زیر تعیین خواهدشد

$$n_\sigma = \int_{-\infty}^{\mu} P\{g(E, n - n_{-\sigma})\} dE \qquad (۵۶–۴)$$

از حل یک جفت از معادلات فوق (برای $n_\uparrow$ و $n_\downarrow$) به همراه شرط (۴–۵۵) می‌توان $n_\uparrow$، $n_\downarrow$ و μ را به دست آورد.

یکی از پاسخهای ممکن که حالت غیرمغناطیسی دستگاه را نشان می‌دهد عبارت است از

$$n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{۱}{۲}n \qquad (۵۷–۴)$$

که در نتیجه μ نیز از رابطهٔ زیر تعیین می‌شود

$$\frac{n}{۲} = \int_{-\infty}^{\mu} P(E - \frac{۱}{۲}Un)dE \qquad (۵۸–۴)$$

ممکن است پاسخهای مغناطیسی $n_\uparrow \neq n_\downarrow$ نیز برای دستگاه وجود داشته باشد. شرط وجود چنین جوابهایی را می‌توان به صورت زیر به دست آورد.

فرض کنید که پاسخی به شکل زیر برای دستگاه وجود داشته باشد

$$n_\uparrow = \frac{n}{۲} + \delta n$$
$$n_\downarrow = \frac{n}{۲} - \delta n \qquad (۵۹–۴)$$

حال اگر δn به صفر میل کند دو پاسخ فوق به یک پاسخ مضاعف $n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{۱}{۲}n$ برای معادلهٔ (۴–۵۶) تبدیل خواهدشد. پس می‌توان گفت، که شرط وجود پاسخهای مغناطیسی آن است که پاسخ $n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{۱}{۲}n$ یک پاسخ مضاعف برای معادلهٔ (۴–۵۶) باشد. بنابراین علاوه‌بر آنکه این پاسخ باید در معادلهٔ (۴–۵۶) صدق کند (یعنی برقراری رابطهٔ (۴–۵۸)) باید در مشتق اول معادلهٔ (۴–۵۶) نیز صدق کند. یعنی

$$-\frac{۱}{۲} = \int_{-\infty}^{\mu} \frac{\partial}{\partial n}[P\{g(E, \frac{۱}{۲}n)\}]dE \qquad (۶۰-۴)$$

تصور شرایط فوق بدون در نظر گرفتن تابع خاصی برای چگالی حالتها مشکل است. فرض کنید که چگالی حالتها به وسیلهٔ رابطهٔ (۴-۴۱) داده می‌شود. رابطهٔ (۴-۴۲) را می‌توان به شکل زیر برحسب تابع پله‌ای نوشت

$$\begin{aligned} \rho_\sigma(E) &= \frac{۱}{\Delta}\{\theta(E - E^\sigma_{-۱,-۱}) - \theta(E - E^\sigma_{-۱,۱}) \\ &\quad +\theta(E - E^\sigma_{۱,-۱}) - \theta(E - E^\sigma_{۱,۱})\} \\ &= -\frac{۱}{\Delta}\sum_{\alpha=\pm۱}\sum_{\beta=\pm۱}\beta\theta(E - E^\sigma_{\alpha,\beta}) \qquad (۶۱-۴) \end{aligned}$$

که اگر در رابطهٔ (۴-۶۰) قراردهیم خواهیم یافت

$$-۱ = \frac{۱}{\Delta}\int_{-\infty}^{\mu}\sum_{\alpha=\pm۱}\sum_{\beta=\pm۱}\beta\frac{\partial E^\sigma_{\alpha,\beta}}{\partial n}\delta(E - E^\sigma_{\alpha\beta})dE \qquad (۶۲-۴)$$

اگر μ در نوار پایین قرارداشته‌باشد $E^\sigma_{-۱,-۱} < \mu < E^\sigma_{-۱,۱}$ (به علت تقارن بین الکترونها و حفره‌ها تنها در نظرگرفتن این نوار کافی است، زیرا وجود الکترون در نوار بالا معادل وجود حفره در نوار پایین است)، آنگاه این شرط خواهد شد

$$۱ < \frac{۱}{\Delta}\frac{\partial E^\sigma_{-۱,-۱}}{\partial n} \qquad (۶۳-۴)$$

یا با استفاده از رابطهٔ (۴-۴۳) به ازای $n_{-\sigma} = \frac{۱}{۲}n$

$$۱ < \frac{\frac{۱}{۴}U}{\sqrt{\{(\frac{۱}{۲}U + \frac{۱}{۴}\Delta)^۲ - \frac{۱}{۴}n\Delta U\}}} \qquad (۶۴-۴)$$

از آنجایی که μ در نوار پایین قراردارد باید داشته‌باشیم $n < ۱$. اما به ازای $n < ۱$ شرط (۴–۶۴) به ازای هیچ U و Δ نمی‌تواند برقرار باشد. بنابراین نظریهٔ همبستگی تقریبی پیشگویی می‌کند که امکان فرومغناطیس شدن برای تابع چگالی حالتهای (۴–۴۱) وجود ندارد.

حال به بررسی دلایل عدم امکان فرومغناطیس در شرایط فوق خواهیم پرداخت. دلیل منفی بودن پاسخ را می‌توانیم با در نظرگرفتن مثالی از تابع چگالی حالتهای $P(E)$ که امکان فرومغناطیس برای آن وجود دارد، توضیح دهیم

تابع چگالی حالتهای زیر را در نظربگیرید

$$P(E)=\begin{cases} ۱/\delta & \text{اگر } T_۰-\Delta/۲<E<T_۰-\Delta/۲+\delta/۲ \\ & \text{یا } T_۰+\Delta/۲-\delta/۲<E<T_۰+\Delta/۲ \\ ۰ & \text{درغیراین‌صورت} \end{cases} \qquad (۶۵–۴)$$

که دو نوار مربعی به عرض $\delta/۲$ را ارائه می‌کند که حول $T_۰$ به طور متقارن قرارگرفته‌اند. این چگالی حالتها را می‌توان به عنوان تقریبی از یک حالت عمومی از تابع چگالی حالتها در نظر گرفت که در آن دو قلهٔ بلند در دو انتهای نوار قرار دارد و چگالی حالتها در میانهٔ نوار بسیار پایین است. به طریق مشابه بالا می‌توان نشان داد که برای چنین تابع چگالی به ازای μهای کوچک، شرط فرومغناطیس به شکل زیر خواهد شد

$$\delta < \frac{\frac{۱}{۴}\Delta U}{\sqrt{\{(\frac{۱}{۲}U+\frac{۱}{۴}\Delta)^۲-\frac{۱}{۴}n\Delta U\}}} \qquad (۶۶–۴)$$

که با در نظرگرفتن δ های بسیار کوچک، همواره برقرار خواهد بود.

از این مثال می‌توان نتایجی برای شرایط فرومغناطیس بودن به دست آورد. آشکار است که رابطهٔ (۴–۶۶) تنها هنگامی برقرار است که δ کوچکتر از Δ باشد. همچنین می‌توان نتیجه گرفت که لازم است انرژی فرمی در بخشهایی از نوار باشد که

ترجیحاً در آن بخشها چگالی حالتها بیشتر از چگالی متوسط حالتها در طول نوار است. به علاوه این نکته نیز قابل ذکر است که از آنجایی که سمت چپ رابطهٔ (۴–٦٦) تابعی است که به طور یکنواخت با Δ افزایش می‌یابد، پس برای δ ثابت، شرط (۴–٦٦) به سادگی برای Δهای بزرگ برقرار است. از آنجایی که Δ فاصلهٔ بین دو قلهٔ چگالی حالتها را نشان می‌دهد، مطلوب ترین شرط برای فرومغناطیس هنگامی است که انرژی فرمی در قله‌های چگالی حالتها به دور از مرکز نوار قرار دارد. بنابراین قرارداشتن انرژی فرمی در قلهٔ حالتهایی که در مرکز نوار قرار دارد، بی‌تاثیر خواهدبود.

۴–٦ جمع بندی

مدل هابارد در حد اتمی به کمک توابع گرین به‌طور دقیق قابل حل است. در این حد، پاسخ به‌دست آمده از مدل هابارد با پاسخ‌های دیگر یکسان است. پاسخ تقریبی مدل هابارد وجود دو نوار با یک گاف انرژی را نشان می‌دهد. وجود حالت فرومغناطیسی در این پاسخ تقریبی به شکل تابع چگالی حالتهای این نوارها بستگی دارد. مطلوب‌ترین حالت فرومغناطیسی هنگامی است که چگالی حالتها در هریک از نوارها، به صورت قله‌هایی به دور از مرکز نوار قرار داشته‌باشد.

فصل ۵

حل دقیق مدل هابارد در یک بعد

پاسخ دقیق برای مدل هابارد تنها در حالتهای خاص وجود دارد. یکی از این پاسخها توسط الیوت لیب و فرد وو برای مدل هابارد در یک بعد انجام شده است. در این فصل به بررسی این پاسخ می‌پردازیم.

۵–۱ هامیلتونی هابارد در یک بعد

یک بلور یک بعدی با N_a جایگاه شبکه و تعداد کل $N \leq ۲N_a$ الکترون را در نظر می‌گیریم. فرض می‌کنیم که در هر جایگاه تنها دو الکترون با اسپین مخالف می‌توانند قرار بگیرند، که انرژی برهمکنش بین آنها $U > ۰$ است. همچنین فرض می‌کنیم که الکترونها تنها می‌توانند بین جایگاههای نزدیکترین همسایه‌ها جهش کنند (در واقع احتمال جهش به نزدیکترین همسایه‌ها بیشتر از جهشهای دیگر است). در این‌صورت هامیلتونی هابارد (۲–۲۷) برای چنین دستگاهی به شکل زیر خواهد شد

$$\hat{\mathsf{H}} = T \sum_{<ij>} \sum_{\sigma} \hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma} \hat{\mathsf{c}}_{j\sigma} + U \sum_{i} \hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\uparrow} \hat{\mathsf{c}}_{i\uparrow} \hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\downarrow} \hat{\mathsf{c}}_{i\downarrow} \qquad (۱-۵)$$

که در آن $\hat{\mathsf{c}}^{\dagger}_{i\sigma}$ و $\hat{\mathsf{c}}_{i\sigma}$ به ترتیب عملگرهای خلق و نابودی برای الکترونی با اسپین σ در جایگاه شبکهٔ i ام است و جمع‌بندی $\sum_{<ij>}$ به نزدیکترین جایگاههای همسایه محدود می‌شود.

به علت هم ارزی توصیف حفره‌ای و الکترونی بدون از دست دادن هیچ کلیتی می‌توانیم حالتی را در نظر بگیریم که در آن $N \leq N_a$ باشد (یعنی کمتر از نصف نوار پر باشد). حالت $N \geq N_a$ را می‌توان به‌طور مشابه از طریق توصیف حفره‌ای بررسی کرد.

جایگاههای شبکه‌ای را به‌طور متوالی از ۱ تا N_a شماره‌گذاری می‌کنیم. فرض می‌کنیم که $\psi(x_1, ..., x_M | x_{M+1}, ..., x_N)$ بخش فضایی تابع موج را ارائه دهد، که درآن $x_1, ..., x_M$ نشان دهندهٔ شمارهٔ جایگاه الکترونهایی با اسپین پایین و $x_{M+1}, ..., x_N$ نشان دهندهٔ شمارهٔ جایگاه الکترونهایی با اسپین بالا باشد. به این ترتیب لازم است که پاسخ $\psi(x_1, ..., x_M | x_{M+1}, ..., x_N)$ برای M متغیر اول و $N - M$ متغیر آخر پادمتقارن باشد، یعنی

$$\begin{aligned} &\psi(x_1, ..., x_i, ..., x_j, ..., x_M | x_{M+1}, ..., x_N) \\ &= -\psi(x_1, ..., x_j, ..., x_i, ..., x_M | x_{M+1}, ..., x_N) \qquad (۲-۵) \\ &\psi(x_1, ..., x_M | x_{M+1}, ..., x_i, ..., x_j, ..., x_N) \\ &= -\psi(x_1, ..., x_M | x_{M+1}, ..., x_j, ..., x_i, ..., x_N) \qquad (۳-۵) \end{aligned}$$

در این‌صورت اگر دو متغیر از M متغیر اول (یا $N - M$ متغیر آخر) با هم مساوی باشند، تابع ψ صفر خواهد شد.

۵—۲ معادلهٔ ویژه مقداری

معادلهٔ ویژه مقداری برای هامیلتونی هابارد در یک بعد $\hat{H}\psi = E\psi$ را می‌توان به شکل زیر نوشت

$$T\sum_{i=1}^{N}\sum_{s=\pm 1}\psi(x_1,...,x_i+s,...,x_N) \\ +U\sum_{i<j}\delta(x_i-x_j)\psi(x_1,...,x_N) = E\psi(x_1,...,x_N) \qquad (۴—۵)$$

که در آن جملهٔ اول جهش به نزدیکترین همسایه‌ها و جملهٔ دوم برهمکنش بین دو الکترون با اسپین مخالف برروی جایگاه یکسان را نشان می‌دهد.

این هامیلتونی را می‌توانیم به عنوان هامیلتونی یک تک‌ذره با یک پتانسیل ثابت در فضای N بعدی در نظربگیریم، که در آن مکانهای ذرات مختصات در فضای N بعدی را تشکیل می‌دهند. برای روشن شدن این موضوع یک دستگاه سه ذره‌ای را درنظر بگیرید. [۱]

اگر مکان سه ذره را به‌ترتیب با x، y و z نشان دهیم، رابطهٔ (۵—۴) به شکل زیر خواهد شد

$$T\sum_{s=\pm 1}[\psi(x+s,y,z)+\psi(x,y+s,z)+\psi(x,y,z+s)] \\ +U[\delta(x-y)+\delta(x-z)+\delta(y-z)]\psi(x,y,z) = E\psi(x,y,z) \quad (۵—۵)$$

[۱] در همهٔ محاسبه‌های این فصل برای روشن‌تر بیان شدن موضوع نمونهٔ سه‌بعدی را بررسی خواهیم کرد

که هم‌ارز یک هامیلتونی تک ذره‌ای در فضای سه بعدی است و پتانسیل تنها برروی صفحات $x = y$، $x = z$ و $y = z$ غیر صفر است. این صفحات فضا را به ۶ = !۳ ناحیهٔ متناظر به صورت زیر تقسیم می‌کنند

$$x < y < z \qquad y < x < z \qquad z < x < y$$

$$x < z < y \qquad y < z < x \qquad z < y < x$$

که در این نواحی پتانسیلی وجود ندارد. به این ترتیب وجود پتانسیل تابع دلتا را می‌توانیم به عنوان شرایط مرزی برای این نواحی در نظر بگیریم.

به‌طور مشابه برای N ذره یک فضای N بعدی خواهیم داشت. صفحات $N - ۱$ بعدی تابع دلتا، فضای N بعدی را به $N!$ ناحیهٔ متناظر تقسیم می‌کنند. این نواحی را می‌توان از جایگشت مختصه‌های $x_۱, ..., x_N$ برای ناحیهٔ زیر به‌دست آورد [۱۲، ۱۳]

$$x_۱ < x_۲ < ... < x_N$$

به این ترتیب پتانسیل تابع دلتا سدهای پتانسیلی را بین این نواحی ایجاد می‌کند. در داخل این نواحی هیچ پتانسیلی وجود ندارد و سدهای پتانسیل تنها برروی مرزهای این نواحی قراردارند. پس می‌توانیم وجود این سدهای پتانسیل را به عنوان شرایط مرزی برای این نواحی در نظر بگیریم.

برای سه ذره با در نظر گرفتن سه عددموج $k_۱, k_۲, k_۳$ می‌توانیم تابع موج برای هر ناحیه‌ای مانند $۱ \le x \le y \le z \le N_a$ (علامت مساوی، مرز ناحیه را نشان می‌دهد) را به صورت ترکیب خطی از ۶ = !۳ موج تخت به شکل زیر نوشت

$$
\begin{aligned}
R۱ \quad &: \quad ۱ \le x \le y \le z \le N_a \\
\psi_{R۱}(x,y,z) &= A_{R۱}(۱۲۳)e^{i(k_۱x+k_۲y+k_۳z)} \\
&+ A_{R۱}(۲۱۳)e^{i(k_۲x+k_۱y+k_۳z)} \\
&+ A_{R۱}(۲۳۱)e^{i(k_۲x+k_۳y+k_۱z)} \\
&+ \ldots \qquad (۶-۵)
\end{aligned}
$$

که در آن $A_{R۱}(۱۲۳)$ و $A_{R۱}(۲۱۳)$ و... ضرایب این امواج تخت در ناحیهٔ $R۱$ می‌باشند. در هریک از این ۶ = !۳ناحیه ۶ = !۳ ضریب وجود دارد. بنابراین !۳ × !۳ ضریب وجود دارد که باید آنها را تعیین کنیم.

به طور مشابه با در نظر گرفتن N عدد موج برای N ذره به‌صورت $k_۱,...,k_N$ می‌توانیم تابع موج برای هرناحیه‌ای مانند $۱ \le x_۱ \le x_۲ \le ... \le x_N \le N_a$ (علامت مساوی مرز ناحیه را نشان می‌دهد) را به صورت ترکیب خطی از $N!$ موج تخت به شکل زیر نوشت

$$
\begin{aligned}
R۱ \quad &: \quad ۱ \le x_۱ \le x_۲ \le ... \le x_N \le N_a \\
\psi_{R۱}(x_۱,...,x_N) &= A_{R۱}(۱۲۳...N)e^{i(k_۱x_۱+k_۲x_۲+k_۳x_۳+...+k_Nx_N)} \\
&+ A_{R۱}(۲۱۳...N)e^{i(k_۲x_۱+k_۱x_۲+k_۳x_۳+...+k_Nx_N)} \\
&+ \ldots \qquad (۷-۵)
\end{aligned}
$$

که‌در اینجا نیز $N!$ ضریب وجود دارد. این ضرایب را می‌توان به شکل دیگری هم نوشت، تا هر ناحیه مستقیماً در ضرایب مشخص باشد.

$$A_{R۱}(۱۲۳...N) \equiv A(۱۲۳...N, ۱۲۳...N)$$

$$A_{R۱}(۲۱۳...N) \equiv A(۱۲۳...N, ۲۱۳...N)$$

...

به این ترتیب N عدد اول نشان‌دهندهٔ هریک از $N!$ ناحیه می‌باشد.

به طورکلی‌تر در هر ناحیه‌ای به صورت $۱ \leq x_{Q۱} \leq x_{Q۲} \leq ... \leq x_{QN} \leq N_a$ می‌توانیم پاسخ آزمایشی زیر در نظر بگیریم

$$\psi(x_۱, ..., x_M | x_{M+۱}, ..., x_N) = \sum_P A[Q,P] exp(i \sum_{j=۱}^{N} k_{Pj} x_{Qj}) \qquad (۸-۵)$$

که در آن $P = (P۱, P۲, ..., PN)$ و $Q = (Q۱, Q۲, ..., QN)$ جایگشتهایی از اعداد $(۱, ۲, ..., N)$ می‌باشند. $A[Q,P]$ مجموعهٔ $N! \times N!$ ضرایب امواج تخت را نشان می‌دهد که $Q = (Q۱, ..., QN)$ هریک از $N!$ ناحیهٔ متناظر را نشان می‌دهد.

با قراردادن پاسخ آزمایشی (۵−۸) در معادلهٔ (۵−۴) در درون هر ناحیه (نه برروی مرزها) خواهیم یافت

$$T \sum_{i=۱}^{N} \sum_{s=\pm ۱} \sum_P A[Q,P] exp(i \sum_{j=۱}^{N} k_{Pj} x_{Qj}) exp(isk_i)$$
$$= E \sum_P A[Q,P] exp(i \sum_{j=۱}^{N} k_{Pj} x_{Qj}) \qquad (۹-۵)$$

که خواهیم یافت

$$\sum_P \left(T \sum_i (e^{ik_i} + e^{-ik_i}) - E \right) A[Q,P] exp(i \sum_{j=۱}^{N} k_{Pj} x_{Qj}) = ۰ \qquad (۱۰-۵)$$

بنابراین باید داشته باشیم

$$E = T\sum_i (e^{ik_i} + e^{-ik_i}) = ۲T\sum_i \cos k_i \qquad (۱۱-۵)$$

حال لازم است که N عدد موج $k_۱, ..., k_N$ را تعیین کنیم. برای تعیین اعداد موج $k_۱, ..., k_N$ از شرایط مرزی دوره‌ای استفاده می‌کنیم. همچنین باید $N! \times N!$ ضرایب $A[Q, P]$ را نیز تعیین کنیم. ضرایب $A[Q, P]$ مستقل از یکدیگر نیستند. با استفاده از شرط پیوستگی تابع موج و شرط ناپیوستگی مشتق تابع موج در مرز نواحی (به علت وجود تابع دلتا) می‌توان روابط بین این ضرایب را به دست آورد. **الیوت لیب** و **فرد وو** در مقالهٔ خود [۱۰] این روابط را به صورت زیر به دست آورده‌اند.

$$A[Q, P] = Y^{ab}_{mn}\ A[Q, P'] \qquad (۱۲-۵)$$

که در آن عملگر Y^{ab}_{mn} به صورت زیر تعریف می‌شود.

$$Y^{ab}_{mn} = \frac{-\frac{۱}{۲}iU}{\sin k_n - \sin k_m + \frac{۱}{۲}iU} + \frac{\sin k_n - \sin k_m}{\sin k_n - \sin k_m + \frac{۱}{۲}iU}P^{ab} \qquad (۱۳-۵)$$

که در آن به ازای $j = i + ۱$ داریم

$$\begin{aligned} a = Qi = Q'j \quad &, \quad b = Qj = Q'i \\ a = Pi = P'j \quad &, \quad n = Pj = P'i \end{aligned} \qquad (۱۴-۵)$$

و به ازای تمام $k \neq i, j$ داریم

$$Qk = Q'k$$

$$Pk = P'k \qquad (۱۵-۵)$$

یعنی تنها دو عنصر از عناصر $P = (P۱, ..., PN)$ و $Q = (Q۱, ..., QN)$ با یکدیگر جابجا می‌شوند. عملگر P^{ab}، عملگری است که $Qi = a$، $Qj = b$ را تعویض می‌کند.

همچنین اعداد موج $k_۱, ..., k_N$ را می‌توان از رابطهٔ زیر تعیین کرد

$$N_a k_j = ۲\pi I_j + \sum_{\beta=۱} M\theta\left(۲\sin k_j - ۲\Lambda_\beta\right) \quad , \quad j = ۱, ۲, ..., N \qquad (۱۶-۵)$$

که در آن Λ ها مجموعه‌ای از اعداد حقیقی هستند که از طریق رابطهٔ زیر با kها مربوط هستند

$$-\sum_{j=۱}^{N} \theta\left(۲\Lambda_\alpha - ۲\sin k_j\right) = ۲\pi J_\alpha - \sum_{\beta=۱}^{M} \theta\left(\Lambda_\alpha - \Lambda_\beta\right) \quad , \quad \alpha = ۱, ۲, ..., M$$

$$(۱۷-۵)$$

و

$$\theta(p) = -۲tan^{-۱}(۲p/U) \quad , \quad -\pi \leq \theta \leq \pi \qquad (۱۸-۵)$$

۵–۳ مشکلات تعمیم به سه بعد

اگر بخواهیم حل فوق را برای مدل سه بعدی هابارد تعمیم دهیم، باید معادلهٔ ویژه مقداری (۵–۴) را به شکل زیر تغییر دهیم.

$$T\sum_{i=1}^{N}\sum_{<\hat{S}>}\psi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_i+\hat{S},...,\mathbf{r}_N)$$
$$+U\sum_{i<j}\delta(\mathbf{r}_i-\mathbf{r}_j)\psi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N)=E\psi(\mathbf{r}_1,...,\mathbf{r}_N) \qquad (۱۹–۵)$$

که درآن $\mathbf{r}$ بردار مکان الکترونها در سه بعد و جمع بندی برروی $\hat{S}$

۵–۴ جمع بندی

در این فصل با حل معادلهٔ ویژه مقداری برای هامیلتونی هابارد یک بعدی توانستیم ویژه مقادیر هامیلتونی هابارد یا طیف انرژی دستگاه را بیابیم، که تعیین این طیف انرژی به کمک شرایط مرزی دوره‌ای برای ویژه توابع هامیلتونی صورت پذیرفت.

پیوست A

روابط پادجابجایی عملگرهای فرمیونی

پادجابجایی $\{\hat{c}_p, \hat{c}_q\}$ را برای عملگرهای فرمیونی $\hat{c}_p$ و $\hat{c}_q$در نظر بگیرید

الف) اگر $p = q$ داریم

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_p\} = ۲\hat{c}_p\hat{c}_p \qquad (۱-A)$$

از آنجایی که برای ذرات فرمیونی تنها یک ذره می‌تواند در هر حالت p قرارگیرد، تاثیر دوباره عملگر نابودی برروی هر حالت دلخواه $|\ >$ برابر صفر خواهد بود، بنابراین

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_p\}|\ >= ۲\hat{c}_p\hat{c}_p|\ >= ۰ \qquad (۲-A)$$

پس

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_p\} = ۰ \qquad (۳-A)$$

ب) اگر $p \neq q$، خواهیم یافت

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_q\}| \quad >= \hat{c}_p\hat{c}_q| \quad > +\hat{c}_q\hat{c}_p| \quad > \qquad (۴-A)$$

تاثیر عملگرهای نابودی $\hat{c}_p$ و $\hat{c}_q$ تنها بر روی حالتهایی غیرصفر است که درآنها هر دو حالت p و q اشغال شده باشند. فرض کنید $p < q$ باشد، به این ترتیب از تعریف (۱-۴۴) برای جملهٔ اول می‌توان نوشت

$$\hat{c}_p\hat{c}_q|..., n_p = ۱, ..., n_q = ۱, ... >= \hat{c}_p(-۱)^{N_q}|..., n_p = ۱, ..., n_q = ۰, ... >$$

$$= (-۱)^{N_p+N_q}|..., n_p = ۱, ..., n_q = ۰, ... > \qquad (۵-A)$$

و برای جملهٔ دوم

$$\hat{c}_q\hat{c}_p|..., n_p = ۱, ..., n_q = ۱, ... >$$

$$= \hat{c}_q(-۱)^{N_p}|..., n_p = ۰, ..., n_q = ۱, ... > \qquad (۶-A)$$

از آنجایی که هنگام اثر عملگر $\hat{c}_q$ ذره‌ای در حالت p ام وجود ندارد، بنابراین در این جمله N_q یکی کمتر از جملهٔ اول خواهدبود. پس

$$\hat{c}_q(-۱)^{N_p}|..., n_p = ۰, ..., n_q = ۱, ... >$$

$$= (-۱)^{N_p+N_q-۱}|..., n_p = ۰, ..., n_q = ۰, ... > \qquad (۷-A)$$

بافرض $q < p$ نیز به‌طور مشابه به همین نتیجه خواهیم رسید. پس به‌طور کلی در هر دو حالت الف و ب خواهیم یافت

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_q\} = ۰ \qquad (۸-A)$$

به‌شکل مشابهی برای پادجابجایی $\{\hat{c}_p^\dagger, \hat{c}_q^\dagger\}$ نیز خواهیم یافت

$$\{\hat{c}_p^\dagger, \hat{c}_q^\dagger\} = ۰ \qquad (۹-A)$$

حال پادجابجایی $\{\hat{c}_p, \hat{c}_q^\dagger\}$ را در نظرمی‌گیریم

الف) اگر $p = q$ داریم

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_p^\dagger\}|\ > = \hat{c}_p\hat{c}_p^\dagger|\ > + \hat{c}_p^\dagger\hat{c}_p|\ > \qquad (۱۰-A)$$

اگر حالت pام اشغال شده باشد تاثیر جملهٔ اول صفر و تاثیر جملهٔ دوم همان حالت را نتیجه می‌دهد و اگر حالت pام اشغال نشده باشد، این بار تاثیر جملهٔ دوم صفر و تاثیر جملهٔ اول همان حالت را نتیجه می‌دهد. بنابراین در هر حالت خواهیم داشت

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_p^\dagger\}|\ > = |\ > \qquad (۱۱-A)$$

پس خواهیم داشت

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_p^\dagger\} = ۱ \qquad (۱۲-A)$$

ب) اگر $p \neq q$، خواهیم یافت

$$\{\hat{c}_p, \hat{c}_q^\dagger\}|\ > = \hat{c}_p\hat{c}_q^\dagger|\ > + \hat{c}_q^\dagger\hat{c}_p|\ > \qquad (۱۳-A)$$

تاثیر عملگرهای نابودی $\hat{c}_p$ و خلق $\hat{c}_q^\dagger$ تنها بر روی حالتهایی غیرصفر است که درآنها حالت p ام اشغال شده باشد و حالت q ام اشغال نشده باشند. فرض کنید $p < q$ باشد، به این ترتیب برای جملهٔ اول می‌توان نوشت

$$\hat{c}_p\hat{c}_q^\dagger|..., n_p = ۱, ..., n_q = ۰, ... > = \hat{c}_p(-۱)^{N_q}|..., n_p = ۱, ..., n_q = ۱, ... >$$
$$= (-۱)^{N_p+N_q}|..., n_p = ۰, ..., n_q = ۱, ... > \qquad (۱۴-A)$$

و برای جملهٔ دوم

$$\hat{c}_q^\dagger\hat{c}_p|..., n_p = ۱, ..., n_q = ۰, ... >$$
$$= \hat{c}_q^\dagger(-۱)^{N_p}|..., n_p = ۰, ..., n_q = ۰, ... > \qquad (۱۵-A)$$

حال هنگام اثر عملگر $\hat{c}_q$ ذره‌ای در حالت p ام وجود ندارد، بنابراین در این جمله N_q یکی کمتر از جملهٔ اول خواهدبود. پس

$$\hat{c}_q(-1)^{N_p}|...,n_p=0,...,n_q=0,...>$$
$$=(-1)^{N_p+N_q-1}|...,n_p=1,...,n_q=0,...> \qquad (16\text{—A})$$

بافرض $q<p$ نیز به‌طور مشابه به همین نتیجه خواهیم رسید. پس در حالت کلی دو حالت الف و ب را می‌توان به‌صورت زیرنوشت

$$\{\hat{c}_p,\hat{c}_q^\dagger\}=\delta_{pq} \qquad (17\text{—A})$$

مراجع

[1] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, W. B. Saunders Company (1976).

[2] J. Hubbard, "Electron Correlations in Narrow Energy Bands", Proc. Roy. Soc. A276, 238 (1963).

[3] M.C. Gutzwiller, "Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals", Phys. Rev. Lett. 10,159 (1963).

[4] M. Gell-Man and F. Low, Phys. Rev., 84, 350 (1951).

[5] D. N. Zubarev , Soviet Phys. Usp. 3, 320 (1960).

[6] Gerald D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenume Press, Second Edition (1990).

[7] Philip L. Taylor, *A Quantum Approach to the Solid State* , Printice-Hall (1990).

[8] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, McGraw-Hill, NewYork (1971).

[9] M. Cyrot, "The Hubbard Hamiltonian", Physica, 91B, 141 141 (1977).

[10] E. H. Lieb and F.Y. Wu, "Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension", Phys. Rev. Lett. 20, 1445 (1968).

[11] E. H. Lieb and W. Liniger, "Exact Analysis of an Interacting Bose Gas", Phys. Rev. 130, 4, 1605 (1963).

[12] J. B. McGuire, "Interacting Fermions in One Dimension", J. Math. Phys. 6, 3, 432 (1965).

[13] J. B. McGuire, "Study of Exactly Soluble One-Dimensional N-Body Problems", J. Math. Phys. 5, 5, 622 (1964).

[14] M. Caffarel, R. Mosseri, "Hubbard Model on d-Dimensional Hypercubes", Phys. Rev. B 57, 20, R12651 (1998).

[15] M. Flicker and E. Lieb, "Delta Function Fermi Gas with Two-Spin Deviates", Phys. Rev. 161, 1, 179 (1967).

[16] C. N. Yang, "Some Exact Result for the Many-Body Problem in One Dimension with Repulsive Delta-Function Interaction", Phys. Rev. Lett. 19, 23, 1312 (1967).

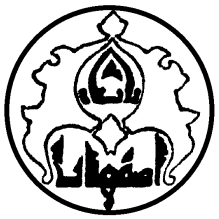
Abstract

The success of Hubbard model in describing the correlation effects in d electrons of the transition metals has attracted a lot of interest between physicists. the special importance of this model is that it describes the metal-insulator Mott transition and also high T_c superconductors.

in this work, we introduce this model, and investigate the Hubbard hamiltonian.

There are quite a few approximate solution for this hamiltonain, which we have introduced some of them, and considered the conditions for the the existence of ferromagnetism in these solutions.

There are a few exact solution for Hubbard model, only in special cases. Here we have studied the exact solution in one dimension.



Isfahan University

Physics Department

Hubbard Model

Investigation of Exact Solution in One Dimension

by

Javad Roshdi Dizaji

under supervision of

Dr. Pourqazi

Dr. Parvaresh

August 2000