

ناصر

یکشنبه ۶۹/۱۲/۱۹

فرمولبندی یک دستگاه  $N$  ذره‌ای در اولین و دومین گوانتیشن

دیدیم که معادله شرودینگر یک دستگاه  $N$  - ذره‌ای بصورت زیر است .

$$\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, \dots, x_N, t) = H \Psi(x_1, \dots, x_N, t).$$

در اینجا  $x_k$  معرف مختصات ذره  $k$  ام است و شامل مختصات مکانی  $\vec{r}_k$  و مثلاً "مولفه  $z$  اسپینی یک دستگاه فرمیونی و یا مولفه  $z$  ایزواسپین  $z$  spin یک دستگاه بوزونی می شود

$$x_k \equiv (\vec{r}_k, S_{zk}) \quad \text{و یا} \quad x_k = (\vec{r}_k, I_{zk})$$

$H$  هامیلتونی دستگاه  $N$  - ذره‌ای است و تقریباً در کلیه حالت‌های مورد بحث ما در فیزیک ماده چگال می توان آن را به صورت

$$H = \sum_{k=1}^N T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N V(x_k, x_l)$$

نشان داد . جمله انرژی پتانسیل نمایشگر برهمکنش بین کلیه جفت ذرات است و  $\frac{1}{2}$  برای آنست که برهمکنش بین هر دو ذره تنها یکبار به حساب آورده شود .

مثالهای متعددی از  $V(x_k, x_l)$  خواهیم دید . مثلاً در مورد گاز یا مایع الکترونی داریم .

$$V(x_k, x_l) = \frac{e^2}{|\vec{r}_k - \vec{r}_l|}$$

در مورد جامد هیدروژن چنانکه خواهیم دید برهمکنش بین مولکولها می تواند از نوع پتانسیل لارند-جوز

$$V(x_k, x_l) = \epsilon \left[ \left( \frac{\sigma}{r} \right)^6 - \left( \frac{\sigma}{r} \right)^{12} \right] \quad \vec{r} = \vec{r}_k - \vec{r}_l$$

و در مورد ارتعاشات بلورها چنانکه دیدیم به صورت زیر است :

$$V(x_k, x_l) = \sum_{\alpha \alpha'} \Phi_{\alpha \alpha'}(k, l) U_{\alpha}(k) U_{\alpha'}(l).$$

بلور هیدروژن  
بلور هلیوم  
بلور نئون  
بلور آرگون  
بلور پتانسیل لارند-جوز

مسئله ما حل معادله شرودینگر فوق با شرایط مرزی معینی است .  
 کارمان را با بسط تابع موج  $N$  ذره ای  $\Psi$ ، بر حسب مجموعه کاملی از توابع موج تک ذره ای  
 مستقل از زمان و با منظور داشتن شرایط مرزی شروع می کنیم .

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, t) = \sum_{E'_1, \dots, E'_N} C(E'_1, \dots, E'_N, t) \psi_{E'_1}(x_1) \dots \psi_{E'_N}(x_N)$$

برای وضوح مطلب چند مثال برای  $\psi_{E_k}(x_k)$  میزنیم .

۱- اگر دستگاه همگن بزرگی می داشتیم توابع موج تخت با شرایط مرزی تناوبی می بود

$$\psi_{E_k}(x_k) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i(kx - Et)}$$

۲- اگر دستگاه مرکب از الکترونها یک اتم با برهمکنش کولنی می بود مجموعه کامل توابع موج  $\psi_{E_k}(x_k)$  را می باید توابع موج کولنی تک ذره ای می گرفتیم

۳- اگر دستگاه  $M$  ذرات متحرک یک شبکه بلوری می بود توابع موج را می باید مجموعه کامل توابع موج بلاخ Block با شرایط مرزی تناوبی مربوطه انتخاب می کردیم

در اینجا  $E_k$  مجموعه کاملی از اعداد کوانتومی است

مثلاً  $E_k$  برای یک دستگاه بدون اسپین بوزونی اعداد کوانتومی مربوط به مؤلفه های اندازه حرکت  $\vec{p}$  یک ذره است

برای ذرات بدون اسپین فرمیونی در یک میدان مرکزی  $E_k \equiv E, J, M$  است

یا برای ذرات بدون اسپین فرمیونی یک دستگاه همگن  $E_k = k_x, k_y, k_z, \delta$  است

بسط فوق کاملاً کلی است و از نظر ریاضی کاملاً منطقی است

بستگی به زمان تابع موج تنها در ضرایب  $C(E'_1, \dots, E'_N, t)$  ظاهر می شود

حالاً این بسط را در معادله شرودینگر قرار می دهیم و طرفین معادله را در

$$\begin{aligned} & \int \dots \int \psi_{E'_1}^*(x_1) \dots \psi_{E'_N}^*(x_N) \left[ \mathcal{H} \Psi - E \Psi \right] dx_1 \dots dx_N = 0 \\ & \mathcal{H} \Psi = \sum_{k=1}^N \sum_W \int dx_k \psi_{E_k}^*(x_k) T(x_k) \psi_W(x_k) \\ & C(E_1, \dots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \dots, E_N, t) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \sum_W \sum_{W'} \int \int dx_k dx_l \psi_{E_k}^*(x_k) \psi_{E_l}^*(x_l) V(x_k, x_l) \\ & \psi_{W'}(x_k) \psi_W(x_l) C(E_1, \dots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \dots, E_{l-1}, W', E_{l+1}, \dots, E_N, t) \end{aligned}$$

ابتدا مورد بوزونها را بررسی می کنیم . از تقارن ضرایب برای دسته بندی مجدد اعداد کوانتومی استفاده می کنیم

$$C(11213512 \dots t) = C(\underbrace{1111 \dots}_{n_1} \underbrace{222 \dots}_{n_2} \dots t)$$

بنا به تقارن ذرات کلیه جملاتی که در تابع موج با  $n_1$  ذره در حالت اول ،  $n_2$  ذره در حالت دوم و غیره دارای یک ضریب در تابع موج کل هستند علامت گذاری تازه ای معرفی می کنیم که کارها را آسانتر می کند

$$\bar{C}(n_1, n_2 \dots n_\infty, t) = C(\underbrace{111 \dots}_{n_1} \underbrace{222 \dots}_{n_2} \dots, t)$$

حالا از بهنجارش تابع موج  $\int |\psi|^2 d\tau = 1$  نتیجه می گیریم که

$$\sum_{E_1 \dots E_N} |C(E_1 \dots E_N, t)|^2 = 1$$

اگر می خواستیم این مجموع را به مجموع روی  $n_i$  ها تبدیل کنیم چگونه این کار را می کردیم ؟

$$\sum_{n_1, n_2 \dots n_\infty} |\bar{C}(n_1, n_2 \dots n_\infty, t)|^2 \sum_{E_1 \dots E_N} 1 = 1$$

جمع درم  $(n_1, n_2 \dots)$  به معنی مجموع روی کلیه  $E_i$  ها مشروط به آنکه  $n_1$  ذره در حالت اول و  $n_2$  ذره در حالت دوم و غیره باشد توجه کنید .

با مسئله تقسیم  $N$  ذره در چند تا قوطی ( در اینجا در بینهایت قوطی ) بطوریکه  $n_1$  ذره در قوطی اول  $n_2$  ذره در قوطی دوم و غیره باشد، همگی آشنایی داریم

مقدار آن برابر است با  $N! / [n_1! n_2! \dots]$  لذا

$$\sum |\bar{C}(n_1, n_2 \dots, t)|^2 \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!} = 1$$

دقت کنید که اکثر  $n_i$  ها برابر صفرند، زیرا  $\sum_{i=1}^{\infty} n_i = N$  است  
حالا ضرایب جدیدی تعریف می کنیم

$$f(n_1, n_2 \dots n_\infty, t) = \left[ \frac{N!}{n_1! n_2! \dots n_\infty!} \right]^{1/2} \bar{C}(n_1, n_2 \dots n_\infty, t)$$

$$\sum_{n_1, n_2 \dots n_\infty} |f(n_1, n_2 \dots n_\infty, t)|^2 = 1$$

و با این تعریف

تابع موج اصلی را نیز می توان بر حسب مجموع روی  $n_i$  ها و ضرایب  $f$  نوشت

$$\begin{aligned} \Psi(x_1, \dots, x_N, t) &= \sum_{E_1, \dots, E_N} C(E_1, \dots, E_N, t) \psi_{E_1}(x_1) \dots \psi_{E_N}(x_N) \\ &= \sum_{E_1, \dots, E_N} \bar{C}(n_1, n_2, \dots, t) \psi_{E_1}(x_1) \dots \psi_{E_N}(x_N) \\ &= \sum_{n_1, n_2, \dots} f(n_1, \dots, n_\infty, t) \left[ \frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right]^{1/2} \sum_{E_1, \dots, E_N} \psi_{E_1}(x_1) \dots \psi_{E_N}(x_N) \\ &\quad (n_1, n_2, \dots) \end{aligned}$$

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, t) = \sum_{n_1, n_2, \dots} f(n_1, \dots, n_\infty, t) \Phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_N)$$

$$\Phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_N) = \left[ \frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right]^{1/2} \sum_{E_1, E_2, \dots, E_N} \psi_{E_1}(x_1) \dots \psi_{E_N}(x_N) \quad (n_1, \dots, n_\infty)$$

orthonormal basis of completely symmetrized wave functions

یک تابع موج متقارن بوزونی را می توان بر حسب مجموعه کاملی از توابع موج پایه "کاملاً" متقارن شده، متعامد و بهنجاریده، بسط داد. و ضرایب این بسط همان  $f$  هائیند.

{ ویژگیهای  $\Phi$

$$\Phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_c, \dots, x_j, \dots, x_N) = \Phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_j, \dots, x_c, \dots, x_N) \quad 1$$

$$\int \Phi_{n_1, \dots, n_\infty}^*(x_1, \dots, x_N) \Phi_{n'_1, \dots, n'_\infty}(x_1, \dots, x_N) d\tau = \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2} \dots \quad 2$$

به عنوان نمونه فرض کنید سه ذره داریم بطوریکه دو تای آنها در حالت کوانتومی پایه ۱ و سومی در حالت کوانتومی ۲ باشند.

$$\Phi_{2100} \dots (x_1, x_2, x_3) =$$

$$\frac{1}{\sqrt{3}} [\psi_1(x_1) \psi_1(x_2) \psi_2(x_3) + \psi_1(x_1) \psi_2(x_2) \psi_1(x_3) + \psi_2(x_1) \psi_1(x_2) \psi_1(x_3)]$$

- حالا بر می گردیم به بینهایت معادله انتگرال - دیفرانسیل کوپل شده ضرایب تابع موج دستگاه -  
 -N ذره ای  
 جمله طرف چپ بر حسب f عبارتست از

$$c h \left[ \frac{n_1! n_2! \dots}{N!} \right]^{1/2} \frac{\partial}{\partial t} f(n_1, \dots, n_{\infty}, t)$$

اولین جمله طرف راست مربوط است به انرژی جنبشی که می توان آن را بر حسب  $C(n_1, \dots, t)$  ها به صورت زیر نوشت

$$\sum_{k=1}^N \sum_W \langle E_k | T | W \rangle C(E_1, \dots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \dots, E_N, t) =$$

$$\sum_{k=1}^N \sum_W \langle E_k | T | W \rangle C(n_1, n_2, \dots, n_{E_k}^{-1}, \dots, n_W + 1, \dots, n_{\infty}, t)$$

یعنی عدد کوانتومی  $n_{E_k}$  یکی کمتر شده و عدد کوانتومی  $W$  یکی بیشتر شده است. نکته جالب توجه اینکه هر بار  $E_k$  در جمعی که روی  $k$  بسته شده، یک مقدار معین، مثلاً  $E$  را اختیار می کند (و این امر  $n_E$  بار اتفاق می افتد)، سهم یکسانی در این جمع ظاهر می شود. این حرف باین معنی است که

$$\sum_{k=1}^N \dots = \sum_E n_E \dots$$

مجموع روی ذرات مساویست با مجموع روی حالات (با احتساب فاکتور  $n_E$ )  
 بنابراین

$$\sum_{k=1}^N \sum_W \langle E_k | T | W \rangle C(E_1, \dots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \dots, E_N, t)$$

$$= \sum_E \sum_W \langle E | T | W \rangle n_E \bar{C}(n_1, n_2, \dots, n_E^{-1}, \dots, n_W + 1, \dots, n_{\infty}, t)$$

حالا مجموع روی  $E$  روی بینهایت حالت است و اکثر  $n_E$  ها صفرند

$$= \sum_c \sum_j \langle c | T | j \rangle n_c \bar{C}(n_1, \dots, n_c^{-1}, \dots, n_j + 1, \dots, n_{\infty}, t)$$

در مورد انرژی پتانسیل هم داستان به همین قرار است

$$\frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^{N} \sum_{W, W'} \langle E_k E_l | V | W W' \rangle C(E_1, \dots, E_{k-1}, W, E_{k+1}, \dots, E_{l-1}, W', E_{l+1}, \dots, E_N)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{k \neq l=1}^N \sum_{W, W'} \langle E_k E_l | V | W W' \rangle \bar{C}(n_1, \dots, n_{E_k-1}, \dots, n_{W+1}, \dots, n_{E_l-1}, \dots, n_{W'+1}, \dots, t)$$

مجدداً در اینجا نیز  $E_k$  و  $E_l$  هر یک یکبار کمتر اشغال شده اند. یعنی عدد کوانتومی شان یکی کمتر است و حالت های  $W, W'$  یکی بیشتر اشغال شده اند. مجدداً جمع روی  $k, l$  را می توانیم به جمع روی  $E, E'$  تبدیل کنیم. تنها باید یادمان باشد که اگر  $E \neq E'$  است

$$\sum_{k \neq l} \dots \rightarrow \sum_{E, E'} n_E n_{E'}$$

$$\sum_{k \neq l} \dots \rightarrow \sum_{E \neq E'} n_E (n_{E'} - 1) \quad \text{و اگر } E = E' \text{ باشد}$$

این تفاوت بدلیل محدودیت  $k \neq l$  ظاهر می شود. اگر  $E \neq E'$  این محدودیت اثری روی شمارش بروجیب  $E, E'$  ندارد، ولی اگر  $E = E'$  مقدار ویژه  $E$  در دومین جمع یکبار کمتر رخ می دهد.

انرژی پتانسیل را می توان بصورت مجموعی روی  $E, E', W, W'$  نوشت

$$\frac{1}{2} \sum_{E, E', W, W'} n_E (n_{E'} - \delta_{EE'}) \langle EE' | V | W W' \rangle$$

$$\bar{C}(n_1, \dots, n_{E-1}, \dots, n_{W+1}, \dots, n_{E'-1}, \dots, n_{W'+1}, \dots, t)$$

$$= \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} n_i (n_j - \delta_{ij}) \langle ij | V | kl \rangle \bar{C}(n_1, \dots, n_{i-1}, \dots, n_{j+1}, \dots, n_{i-1}, \dots, n_{j+1}, \dots, t)$$

با قرار دادن این عبارات برای انرژی جنبشی و پتانسیل به معادله زیر میرسیم که در آن etc برای سیزده جمله دیگری است که در اینجا نیامده است. در زیر همین معادله به فرم ساده تری نوشته شده است

$$i\hbar \left[ \frac{n_1! \dots n_{\infty}!}{N!} \right]^{\pm} \frac{\partial}{\partial t} f(n_1, \dots, n_{\infty}, t)$$

$$= \sum_i \langle i | T | i \rangle n_i \left[ \frac{\dots n_i! \dots}{N!} \right]^{\pm} f(n_1, \dots, n_i, \dots, n_{\infty}, t)$$

$$+ \sum_{i \neq j} \langle i | T | j \rangle n_i \left[ \frac{\dots (n_i-1)! \dots (n_j+1)! \dots}{N!} \right]^{\pm}$$

$$\times f(n_1, \dots, n_i-1, \dots, n_j+1, \dots, n_{\infty}, t)$$

$$+ \sum_{i \neq j \neq k \neq l} \langle ij | V | kl \rangle \frac{1}{2} n_i n_j$$

$$\times \left[ \frac{\dots (n_i-1)! \dots (n_j-1)! \dots (n_k+1)! \dots (n_l+1)! \dots}{N!} \right]^{\pm}$$

$$\times f(\dots, n_i-1, \dots, n_j-1, \dots, n_k+1, \dots, n_l+1, \dots, n_{\infty}, t)$$

$$+ \sum_{i \neq j \neq k \neq l} \langle ii | V | kl \rangle \frac{1}{2} n_i (n_i - 1)$$

$$\times \left[ \frac{\dots (n_i-2)! \dots (n_k+1)! \dots (n_l+1)! \dots}{N!} \right]^{\pm}$$

$$\times f(\dots, n_i-2, \dots, n_k+1, \dots, n_l+1, \dots, n_{\infty}, t) + \text{etc.} \quad (1.24)$$

$$\begin{aligned}
i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(n_1 \dots n_\infty, t) &= \sum_i \langle i|T|i\rangle n_i f(n_1 \dots n_i \dots n_\infty, t) \\
&+ \sum_{i \neq j} \langle i|T|j\rangle (n_i)^\pm (n_j + 1)^\pm f(n_1 \dots n_i - 1 \dots n_j + 1 \dots n_\infty, t) \\
&+ \sum_{i \neq j \neq k \neq l} \langle ij|V|kl\rangle \frac{1}{2} (n_i)^\pm (n_j)^\pm (n_k + 1)^\pm (n_l + 1)^\pm \\
&\times f(n_1 \dots n_i - 1 \dots n_j - 1 \dots n_k + 1 \dots n_l + 1 \dots n_\infty, t) \\
&+ \sum_{i \neq j \neq k \neq l} \langle ii|V|kl\rangle \frac{1}{2} (n_i)^\pm (n_i - 1)^\pm (n_k + 1)^\pm (n_l + 1)^\pm \\
&\times f(n_1 \dots n_i - 2 \dots n_k + 1 \dots n_l + 1 \dots n_\infty, t) + \text{etc.} \quad (1.25)
\end{aligned}$$

بازای هر مجموعه‌ای از  $n_1, \dots, n_\infty$  یک چنین معادله‌ای وجود دارد که شکل فعلی آن بسیار پیچیده می‌نماید. بطوریکه نشان خواهیم داد با استفاده از فرمالیسم کوانتوم دوم فرم ساده‌ای برای این معادله‌ها بر حسب عملگرهای بوجود آورنده و از بین برنده می‌برسیم.

فضای هیلبرت دستگاه بس نره‌ای و عملگرهای بوجود آورنده و از بین برنده

بحث قبلی را موقتا "کنار می‌گذاریم و بجای آن از

*Time independent abstract vector space*

فضای برداری و تجربی مستقل از زمان  $|n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$

حرف می‌زنیم. در اینجا  $n_1$  به معنی  $n_1$  نره در اولین حالت کوانتومی تک نره‌ای و  $n_2$  به معنی  $n_2$  نره در دومین حالت کوانتومی تک نره‌ای و غیره است.

می‌خواهیم این بردارهای پایه‌ای (basis vectors) کامل و متعامد و بهنجاریده باشند  
یعنی  
تعامد

$$\langle n_1, \dots, n_\infty | n_1, \dots, n_\infty \rangle = \delta_{n_1, n_1'} \dots \delta_{n_\infty, n_\infty'}$$

$$\sum_{n_1, \dots, n_\infty} |n_1, \dots, n_\infty\rangle \langle n_1, \dots, n_\infty| = 1 \quad \text{Completeness}$$

توجه داشته باشید که برای مجموع روی کلیه اعداد اشغالی *occupation numbers* محدودیتی وجود ندارد.  
حالا عملگرهای مستقل از زمان  $b_k$  و  $b_k^\dagger$  که روابط جابجایی زیر صدق می‌کنند را معرفی می‌کنیم

$$[b_k, b_k^\dagger] = \delta_{kk'}$$

برای بوزونها

$$[b_k, b_{k'}] = [b_k^\dagger, b_{k'}^\dagger] = 0$$

درست بسان عملگرهایی که برای توجیه ارتعاشات جسم جامد دیدیم  
اینها همان عملگرها و روابط جابجایی هستند که برای نوسانگر هماهنگ ساده بکار می‌روند دیدیم که  
از روابط جابجایی به راحتی می‌توان نتیجه گرفت که

$$b_k^\dagger b_k |n_k\rangle = n_k |n_k\rangle \quad n_k = 0, 1, 2, \dots$$

$$b_k |n_k\rangle = \sqrt{n_k} |n_k - 1\rangle$$

$$b_k^\dagger |n_k\rangle = \sqrt{n_k + 1} |n_k + 1\rangle$$

مقادیر ویژه  $n_k$  کلیه مقادیر اعداد صحیح مثبت و صفر هستند  
 $b_k$  را عملگر از بین برنده و  $b_k^\dagger$  را عملگر بوجود آورنده می‌نامند.  
تعمیم این حرفها به حالتی با مدهای مختلف به آسانی قابل حصول است.  
به راحتی می‌توان نشان داد که عملگر عددی *number operator* مدهای مختلف با هم *commute* می‌کنند. این موضوع به این معنی است که حالت‌های ویژه کل دستگاه می‌تواند همزمان حالت‌های ویژه مجموعه  $\{n_k\} = \{b_k^\dagger b_k\}$  باشد. بویژه بردارهای پایه‌ای با اعداد اشغالی

$$|n_1, n_2, \dots\rangle$$

عبارتنداز ضرب مستقیم حالت‌های ویژه عملگر عددی هر مد

$$|n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle = |n_1\rangle \otimes |n_2\rangle \otimes |n_3\rangle \dots \otimes |n_\infty\rangle$$

سوال: آیا می‌توانیم معادله شرودینگر را بر حسب این بردارهای حالت تجزیه‌ی

بنویسیم؟

abstract vector states

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$$

فرض می‌شود که  $f$  ها مجموعه ضرایب بسط هستند که در معادلات پیشین ظاهر شده‌اند. این بردار حالت در فضای تجزیه‌ی هیلبرت در معادله دیفرانسیل زیر صدق می‌کند

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} i\hbar \frac{\partial}{\partial t} f(n_1, \dots, n_\infty, t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle$$

بدیهی است که تمامی بستگی زمانی در  $f$  ها نهفته است. حالا به عنوان مثال به جمله انرژی جنبشی در معادله قبلی برای  $f$  می‌نگریم

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \sum_{\substack{n_1, \dots, n_\infty \\ \sum n_c = N}} \sum_{c \neq j} \langle c | T | j \rangle f(\dots, n_c - 1, \dots, n_j + 1, \dots, t) \sqrt{n_c} \sqrt{n_j + 1} |n_1, \dots, n_\infty\rangle$$

اندیسها را تغییر می‌دهیم

$$n_c - 1 = n'_c \quad n_j + 1 = n'_j \quad n_k = n'_k$$

$$\sum n_p = \sum n'_p$$

در نتیجه جمله مربوط به انرژی جنبشی به شکل زیر در می‌آید

$$\sum_{n'_1, \dots, n'_\infty} \sum_{c \neq j} \langle c | T | j \rangle f(\dots, n'_c, \dots, n'_j, \dots, t) \sqrt{n'_c + 1} \sqrt{n'_j} | \dots, n'_c + 1, \dots, n'_j - 1, \dots \rangle$$

که می‌توان آن را بصورت

$$\sum_{c \neq j} \langle c | T | j \rangle b_c^\dagger b_j \sum f(\dots, n'_c, \dots, n'_j, \dots, t) |n_1, \dots, n'_c, \dots, n'_j, \dots\rangle$$

$$= \sum_{c \neq j} \langle c | T | j \rangle b_c^\dagger b_j |\psi(t)\rangle$$

به همین ترتیب می توان نشان داد که کلیه جملات موجود در معادله بزرگ برای  $\mathcal{P}$  بصورت

$$\mathcal{L} \hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle \quad \text{ضرایب در مس آید}$$

که در آن

$$\hat{H} = \sum_{rj} b_c^\dagger \langle c | T | j \rangle b_j + \frac{1}{2} \sum_{ijkl} b_c^\dagger b_j^\dagger \langle c | V | ikl \rangle b_j b_k$$

خوبست توجه داشته باشیم که مثلا  $\hat{H}$  و یا  $b_c^\dagger$  و  $b_j$  عملگر هستند و المانهای

$$\langle c | T | j \rangle \quad , \quad \langle c | V | ikl \rangle$$

عدد مختلط ثابت اند. این دو معادله دقیقا همان معادله شرودینگر دستگاه  $\mathcal{N}$  - نره ای اند

که به زبان کوانتشن دوم برحسب عملگرهای ایجاد کننده و از بین برنده نوشته شده اند. بدیهی

است که مسئله فیزیکی ما تغییری نکرده است و ما تنها به یک فرمولبندی جدیدی دست یافته ایم.

ضرایب  $\mathcal{P}$  ارتباط بین اولین کوانتشن و دومین کوانتشن را معین می کنند.

بازای هر حلی که از معادله شرودینگر اولیه ما برای یک دستگاه  $\mathcal{N}$  - نره ای بدست می آید

مجموعه ای از ضرایب بسط  $\mathcal{P}$  وجود دارد .

با در دست داشتن این ضرایب بسط می توان حلی از مسئله در کوانتشن دوم ، چنانکه در بالا

اشاره شد، ارائه داد. بالعکس اگر مسئله در کوانتشن دوم حل شده باشد، ما می توانیم مجموعه

ضرایب بسط  $\mathcal{P}$  را بدست آوریم و حلی برای معادله شرودینگر  $\mathcal{N}$  - نره ای وابسته به

زمان بیابیم .

در جلسه پیش نشان دادیم که فرمولبندی اولین کوانتس دستگا‌های  $N$  - ذره‌ای غیرنسبیتی ،  
یعنی

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(x_1, \dots, x_N, t) = H \Psi(x_1, \dots, x_N, t)$$

$$H = \sum_{k=1}^N T(x_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq l} V(x_k, x_l)$$

معادل فرمولبندی دومین کوانتس دستگا‌های  $N$  - ذره‌ای یعنی

$$\hat{H} |\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle$$

$$\hat{H} = \sum_{i,j} \langle i | T | j \rangle b_i^\dagger b_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j,k,l} \langle ij | V | kl \rangle b_i^\dagger b_j^\dagger b_l b_k$$

است که در اینجا عملگرهای بوجود آورنده و از بین برنده برای بوزونها در رابطه جابجایی

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{ij}$$

$$[b_i, b_j] = [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0$$

صدق می‌کنند. نحوه کار ما این بود که ابتدا تابع موج  $N$  ذره‌ای در اولین کوانتس را برحسب توابع موج تک ذره‌ای بسط دادیم و دیدیم که برای بوزونها می‌توان نوشت

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, t) = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) \Phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_N)$$

که در آن  $\Phi$  ها توابع موج کاملاً متقارن ~~هستند~~ ، متعامد و بهنجار شده هستند و مجموعه کاملی را تشکیل می‌دهند.

تجد معادله نسبتاً پیچیده‌ای برای ضرایب بسط ، یعنی  $f$  ها پیدا کردیم. سپس دیدیم که اگر فضای برداری تجربیدی هیلبرتی با بردارهای حالت تجربیدی  $\langle n_1, \dots, n_\infty |$  تعریف کنیم که در آنها  $n_i$  به معنی ذره در حالت کوانتومی اول و غیره است و این بردارها چنان انتخاب شده باشند که متعامد و بهنجار شده باشند و مجموعه کاملی را تشکیل دهند ، و اگر عملگرهای بوجود آورنده و از بین برنده که در رابطه جابجایی مذکور صدق می‌کنند را نیز معرفی می‌کردیم ، می‌دیدیم که نتایج رابطه پیچیده ضرایب بسط را می‌توان به زبان دومین کوانتس برحسب این عملگرها بطور ساده‌ای بیان کرد.

همان طور که می‌توان حدس زد این کار منحصر به بوزونها نیست . در مورد فرمیونها نیز می‌شود همین محاسبات را تکرار کرد و به نتیجه کاملاً مشابهی رسید . در اینجا نیز تابع موج  $N$  - ذره‌ای در اولین کوانتس را برحسب توابع موج تک ذره‌ای بسط می‌دهیم

$$\Psi(x_1, \dots, x_N, t) = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) \Phi(x_1, \dots, x_N)$$

بدلیل **یاد** متقارن بودن تابع موج  $N$  - فرهای فرمیونها، این بار  $\Phi$  ها کاملاً **یاد** متقارن از کار در می آیند که می توان آنها را بصورت دترمینانهای اسلیتر نشان داد.

$$\Phi_{n_1, \dots, n_\infty}(x_1, \dots, x_N) = \left[ \frac{n_1! \dots n_\infty!}{N!} \right]^{1/2} \begin{vmatrix} \psi_{E_1}^{(x_1)} & \dots & \psi_{E_1}^{(x_N)} \\ \vdots & & \vdots \\ \psi_{E_N}^{(x_1)} & \dots & \psi_{E_N}^{(x_N)} \end{vmatrix}$$

در اینجا مجدداً "فضای هیلبرت با بردارهای حالت تجربی  $n_1, \dots, n_\infty$  را تعریف می کنیم. توجه کنید که  $n_i$  ها تنها مقادیر ۰ یا ۱ را بدلیل اصل طرد پائولی اختیار می کنند. در اینجا نیز تابع موج را برحسب این بردارهای حالت بسط می دهیم

$$|\psi(t)\rangle = \sum_{n_1, \dots, n_\infty} f(n_1, \dots, n_\infty, t) |n_1, \dots, n_\infty\rangle$$

این بار نیز به معادله پیچیده ای برای  $f$  ها می رسمیم. برای آنکه بتوانیم این معادله پیچیده را به زبان دومین کوانتس بیان کنیم می باید عملگرها در رابطه **یاد** جابجایی

$$\{a_r, a_s^\dagger\} = \delta_{rs}$$

$$\{a_r, a_s\} = \{a_r^\dagger, a_s^\dagger\} = 0$$

صدق کنند. چرا که عملگر عددی  $a_r^\dagger a_r$  تنها می تواند دارای مقادیر ویژه ۰، ۱، ۲، ... باشد. **یاد** آنرا

$$a_r^\dagger a_r |n_r\rangle = n_r |n_r\rangle$$

$$(a_r^\dagger a_r)^2 - a_r^\dagger a_r = 0 \quad \lambda^2 - \lambda = 0, \lambda = 0, 1$$

در اینجا هم می توان نشان داد که فرمولبندی در **اولین** کوانتس هم ارز فرمولبندی در دومین کوانتس است. یعنی

$$\hat{H} |\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle,$$

$$\hat{H} = \sum \langle r | T | s \rangle a_r^\dagger a_s + \frac{1}{2} \sum_{rstu} a_r^\dagger a_s^\dagger \langle rs | V | tu \rangle a_u a_t.$$

عدم توجه به این نکته در

به ترتیبی که دو عملگر از بین برنده در هامیلتونی ظاهر می شوند توجه کنید. این مسئله مورد بوزونها بی مورد است. چون عملگرهای مربوطه برای بوزونها در رابطه جابجایی صدق می کنند. اما بعکس شدن ترتیب برخی عملگرهای فرمیونی منجر به یک معادله می شود.

این درست عین معادله قبل برای یوزونهاست. مجدداً توجه کنید که در اینجا المانهای ماتریسی عددی مختلط نیست یا c-number اند و  $\hat{H}, a^\dagger, \alpha$  عملگرند.

از این پس هرگاه با یک دستگاه  $N$  - ذره‌ای روبرو شویم اول به برهمکنش بین ذرات در اولین کوانتش می‌نگریم. بعد المانهای ماتریسی مربوطه را حساب می‌کنیم و هامیلتونی این دستگاه را برحسب عملگرهای بوجود آورنده و از بین برنده در دومین کوانتش می‌نویسیم.

میدانها

غالباً مناسب است با ترکیبی خطی از عملگرها کار کنیم

$$\hat{\psi}(x) = \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}(x) C_{\vec{k}}$$

$$\hat{\psi}^\dagger(x) = \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^*(x) C_{\vec{k}}^\dagger$$

که  $\psi_{\vec{k}}(x)$  توابع موج تک ذره‌ایست و مجموع روی کلیه حالات ممکن تک ذره است. یعنی  $\vec{k}$  مجموعه کاملی از اعداد کوانتومی تک ذره می‌باشد

می‌توانیم مختصات مکانی و اسپینی را جدا کنیم. در مورد فرمیونهایی که اسپین  $\frac{1}{2}$  دارند

$$\psi_{\vec{k}}(x) = \begin{cases} \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \uparrow \\ \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \downarrow \end{cases} = \psi_{\vec{k}}(\vec{r}) \alpha \quad \alpha \equiv \uparrow, \downarrow$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\vec{r}')] = \delta_{\alpha\beta} \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

$$[\hat{\psi}_\alpha(\vec{r}), \hat{\psi}_\beta(\vec{r}')] = [\hat{\psi}_\alpha^\dagger(\vec{r}), \hat{\psi}_\beta^\dagger(\vec{r}')] = 0$$

اگر به هامیلتونی مراجعه کنیم دیدیم

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}\lambda\vec{k}'\lambda'} \langle \vec{k}\lambda | T | \vec{k}'\lambda' \rangle a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}'\lambda'}$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}\vec{k}'\vec{q}\vec{q}'} \langle \vec{k}\lambda\vec{k}'\lambda' | V | \vec{q}\sigma\vec{q}'\sigma' \rangle a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}'\lambda'}^\dagger a_{\vec{q}'\sigma'} a_{\vec{q}\sigma}$$

$$= \sum_{\alpha\beta} \int \psi_\alpha^\dagger(\vec{x}) T(\vec{x}) \psi_\beta(\vec{x}) d^3x$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\lambda\lambda'} \int d^3\vec{x} d^3\vec{x}' \hat{\psi}_\lambda^\dagger(\vec{x}) \hat{\psi}_{\lambda'}^\dagger(\vec{x}') V(\vec{x} - \vec{x}') \hat{\psi}_\sigma(\vec{x}) \hat{\psi}_\sigma(\vec{x}')$$

در اینجا از ترمزهای بالا با نام مترادف استفاده شده است

$$\langle k\lambda | T | k'\lambda' \rangle = \int d^3r \psi_{k\lambda}^*(r) T(r) \psi_{k'\lambda'}(r)$$

$$\langle k\lambda k'\lambda' | V | q\sigma q'\sigma' \rangle = \int d^3r d^3r' \psi_{k\lambda}^*(r) \psi_{k'\lambda'}(r') V(r-r') \psi_{q\sigma}(r) \psi_{q'\sigma'}(r')$$

توجه کنید که  $\hat{\psi}^\dagger$  و  $\hat{\psi}$  تابع موج نیستند بلکه عملگرهای میدان هستند و در مقابل  $T(r)$  که در اولین کوانتش نقش عملگر را داشتند در اینجا نقش عدد مختلط (C-number) را دارند.

تعمیم بحث بالا در مورد دیگر عملگرهای موجود در اولین کوانتش بدیهی است.

مثال ۱ - هر عملگر یک ذره‌ای از نوع

$$J = \sum_{c=1}^N J(x_c)$$

که در اولین کوانتش داریم بسان انرژی جنبشی و با همان استدلال تبدیل به عملگر

$$\hat{J} = \sum_r c_r^\dagger \langle r | J | s \rangle c_s$$

$$= \sum_{rs} \int \psi_r^\dagger(\vec{r}) J(\vec{r}) \psi_s(\vec{r}) d^3r c_r^\dagger c_s$$

$$\hat{J} = \int \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) J(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}) d^3r$$

می شود. مثلا "عملگر چگالی - عددی number density operator"

$$n(\vec{r}) = \sum_{c=1}^N \delta(\vec{r} - \vec{r}_c)$$

$$\hat{n}(\vec{r}) = \int \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}') d^3r' = \hat{\psi}^\dagger(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r})$$

و عملگر عددی کل

$$\hat{N} = \int d^3x \hat{n}(x) = \sum_r c_r^\dagger c_r = \sum_r n_r = \int \hat{\psi}^\dagger(x) \hat{\psi}(x) d^3x$$

عملگر عددی کل با هامیلتونی جایگزین می‌شود. این امر را با استفاده از روابط جایگزینی عملگرهای میدان می‌توان ثابت کرد. این نتیجه از نظر فیزیکی بدیهی به نظر می‌رسد چرا که معادله شرودینگر غیرنسبیتی تعداد ذرات را تغییر نمی‌دهد

$$\hat{n}(x) = \sum_q n_q e^{-iq \cdot x} \Rightarrow \sum_q$$

n

گاز یا مایع الکترونی در یک - دو و سه بعد

ایده گاز الکترونی اول بار توسط P. Drude به منظور تعیین خواص فلزات عنوان شد. در آن زمان از یکسو نظریه جنبشی گازها بخوبی جا افتاده و پیشرفت کرده و از سوی دیگر J. J. Thomson جهت‌زنگی، (۱۸۹۷)، موفق به کشف الکترون شده بود. بعدها پس از ظهور مکانیک کوانتومی الگوی گاز الکترونی زومرفلد جایگزین الگوی دروده شد. درک امروزی ما از فلزات مبتنی بر الگوی زومرفلد است و فقط باید کمی و کاستیهای آن را برطرف کنیم. بزبان ساده اتمهای هر فلز دارای الکترونهاى متعددى در بیرونی‌ترین پوسته الکترونی خود هستند. رویهم افتادگی این پوسته‌های الکترونی بیرونی قابل ملاحظه هستند. بنابراین، الکترونهاى این پوسته‌ها که به الکترونهاى والانس موسومند تعلق به اتم خاصی ندارند و در سراسر بلور پراسته می‌زنند. این صورت جمع‌شده الکترونهاى والانس منجر به انرژی پیوندی بزرگی برای فلزات خواهد شد و جوابگوی خواص مکانیکی فلزات خواهد بود.

بنابراین فلز یک شبکه بلوری متشکل از یونهاى مثبت است که دریایی از الکترونها در بین آنها در حرکت می‌باشند.

ساخت و پرداخت نظریه‌ای برای تبیین پدیده‌هایی که چنین دستگا‌هایی از خود بسروز می‌دهند به نظر مشکل میرسد، چرا که از یکسو الکترونهاى والانس با یکدیگر برهمکنش دارند و از سوی دیگر در میدان ناشی از یونها بحرکت در آمده‌اند. فیزیکدانان ماده چگال کوشیده‌اند این مسئله را در چند مرحله حل کنند و رشد فیزیک ماده چگال نیز در عمل چند مرحله‌ای بوده است.

مرحله اول - در تقریب اول یونها را می‌توان به صورت زمینه یکنواختی از بارهای مثبت فرض کرد و از برهمکنش الکترونها با یکدیگر صرف‌نظر نمود. الگوی زومرفلد براساس این تقریب بنا شده است.

مرحله دوم- یونها را به صورت زمینه یکنواختی از بارهای مثبت در نظر می‌گیریم و برهمکنش الکترونها را بحساب می‌آوریم، این همان الگوی ژله‌ایست.

مرحله سوم- یونها را ایستا و واقع در نقاط شبکه‌ای در نظر می‌گیریم و از نظریه شبه پتانسیل برای بمیان آوردن پتانسیل ناشی از یونها استفاده می‌کنیم. ابتدا از برهمکنش الکترونی صرف‌نظر می‌کنیم و سپس برهمکنش آنها را در حضور پتانسیل تناوبی ناشی از یونها حساب می‌کنیم. در اینجا نظریه نوارها مطرح میشود.

مرحله چهارم- برای بمیان آوردن حرکت دینامیکی یونها، ابتدا از تقریب هارمونیک استفاده می‌کنیم که معادل صحبت از یک گاز فونونی بدون برهمکنش است.

سپس برهمکنش فونونها را نیز بحساب می‌آوریم که معادل احتساب جملات غیر هارمونیک می‌باشد.

مرحله پنجم - دستگاه ما در اینجا معادل مخلوط دو گاز الکترونی و فونونی است که از یکسو الکترونها با یکدیگر و فونونها با یکدیگر برهمکنش دارند و از سوی دیگر الکترونها با فونونها برهمکنش پیدا کرده‌اند.

اگر کتاب *Aschcroft, Mermin* را با دقت مطالعه کنید، ملاحظه می‌کنید که این آقایان به تشریح یک یک این مراحل می‌پردازند و در انتهای هر مرحله متذکر می‌شوند که از لحاظ تجربی چه ایرادی به تقریب به کار رفته در آن مرحله وارد است و نتیجه می‌گیرند که برای برطرف کردن ایراد مربوطه باید بمرحله بعدی سر بزنییم.

### گاز الکترونی ایده آل - الگوی زومرفلد

در اینجا الکترونها برهمکنش ندارند و از آمار فرمی - دیراک تبعیت می‌کنند، یعنی اصل طرد پائولی در مورد آنها صادق است. ابتدا حالت پایه در  $T=0$  را بررسی می‌کنیم و سپس چند کلمه‌ای درباره پیش‌بینیهای این الگو در  $T \neq 0$  خواهیم گفت.

فرض کنید  $N$  الکترون در حجم  $V$  (مکعبی به ابعاد  $L$ ) محصور شده باشند. چون فرض بر این است که الکترونها بدون برهمکنش اند، می‌توان مسئله یک الکترون در حجم  $V$  را ابتدا حل کرد و سپس با استفاده از اصل طرد پائولی مشخص کرد که حالت پایه چنین دستگاهی چگونه است.

مسئله نره در جعبه یا قوطی (*particle in a box*) در کتابهای متعارف مکانیک کوانتومی ارائه شده است. معادله شرودینگر الکترونی در جعبه بصورت زیر است

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi(\vec{r}) = \epsilon \psi(\vec{r}) \quad (\vec{r} \text{ نقطه‌ای در داخل جعبه است.})$$

محصور شدن الکترون در جعبه از طریق اعمال شرایط مرزی مشخص می‌شود. اگر بحث بر سر خواص سطحی فلزات نباشد، انتخاب شرایط مرزی تا حدود زیادی با اختیار ماست. در کتابها دو دسته شرایط مرزی ارائه می‌شود. یکی صفر بودن تابع موج بر روی دیواره‌های مکعب و دیگری شرایط مرزی تناوبی که موسوم به شرایط مرزی بورن - فون کارمن یا شرایط مرزی تناوبی است.

*Born - von Karman or periodic boundary conditions*

در مورد اول یعنی صفر بودن تابع موج روی دیواره‌ها، جوابهای معادله شرودینگر به صورت امواج ایستا (standing waves) در می‌آیند حال آنکه انتقال و ترابری بار و انرژی توسط الکترونها بزبان امواج متحرک (running waves) راحتتر بیان می‌شود. در این مورد، در حالت یک بعدی مانند آنیست که پاره خط صفر تا  $L$  مورد نظر که الکترون در آنجا محصور است را به صورت دایره در می‌آوریم و ابتدای آن را به انتهایش وصل می‌کنیم.  $\psi(x+L) = \psi(x)$

$$\psi(x+L) = \psi(x)$$

تعمیم این ایده به حالت سه بعدی مورد نظر ما عبارتست از:

$$\psi(x, y, z+L) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x, y+L, z) = \psi(x, y, z)$$

$$\psi(x+L, y, z) = \psi(x, y, z)$$

در مورد اول موج به دیواره می‌خورد و منعکس می‌شود و در مورد دوم الکترونی از دینوازه می‌گذرد و همزمان از انتهای دیگر وارد دستگاه می‌شود.

جواب معادله شرودینگر در این مورد بصورت

$$\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

و رابطه بردار موج  $\vec{k}$  با انرژی  $E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  است.  $\frac{1}{\sqrt{V}}$  ضریب بهنجارش است. شرایط مرزی به معنی  $\exp(i\vec{k}_x L) = \exp(i\vec{k}_y L) = \exp(i\vec{k}_z L)$  است.

$$k_x = \frac{2\pi}{L} n_x, \quad k_y = \frac{2\pi}{L} n_y, \quad k_z = \frac{2\pi}{L} n_z \quad \text{بنابراین}$$

و  $n_x, n_y, n_z$  اعداد صحیح هستند.

از اینجا دیده می‌شود که

$$\sum_{n_x, n_y, n_z} \dots = \frac{V}{(2\pi)^3} \int \dots d\vec{k}$$

یعنی تعداد حالت‌های ممکن در واحد حجم در فضای  $\vec{k}$  برابر  $1/(L/2\pi)^3 = V/(2\pi)^3$  است. حالت پایه دستگاه با این ترتیب درست می‌شود که اول دو الکترون با اسپینهای متفاوت در

پایین ترین حالت و سپس دو الکترون در حالت‌های بعدی قرار می‌گیرند و باین ترتیب با رعایت اصل طرد پائولی حالت‌های با کمترین انرژی کاملاً پرشوند. انرژی بالاترین حالت پرشده را انرژی فرمی،  $k_F$ ، و بردار موج آنرا بردار موج فرمی  $k_F$  می‌نامند. چون رابطه انرژی با  $k$  از درجه دوم است در این جریان یک پوسته کروی بعد از پوسته دیگر پرمی‌شود و در نهایت به کره‌ای به شعاع  $k_F$  می‌رسیم. کره حاصل را کره فرمی می‌نامند، و بطور کلی سطحی که حالت پرشده را از حالت خالی جدا می‌کند را سطح فرمی می‌نامند. رابطه چگالی  $n = \frac{N}{V}$  با  $k_F$  به صورت زیر است

$$N = 2 \sum_{n_x, n_y, n_z} (\text{کلیه حالات پرشده}) = 2 \frac{V}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} 4\pi k^2 dk$$

$$\frac{N}{V} = n = \frac{k_F^3}{3\pi^2}, \quad \boxed{3\pi^2 n = k_F^3}$$

چند نکته در مورد علامت گذاری

۱- اگر حجمی که به یک الکترون تعلق می‌گیرد کره‌ای به شعاع  $r_0$  باشد در آن صورت داریم

$$\frac{4\pi}{3} r_0^3 \cdot N = V, \quad \frac{1}{n} = \frac{4\pi}{3} r_0^3, \quad r_0 = r_s a_0$$

$r_s$  برای فلزات بین ۲ تا ۶ است.

فلز	Li	Na	K	Rb	Cs	Cu	Ag	Al
$r_s$	3.25	3.93	4.86	5.20	5.62	2.67	3.02	2.07

۲- رابطه بین  $k_F$  و  $r_s$  عبارت از

$$k_F = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s a_0} = \frac{1.92}{r_s} a_0^{-1} = \frac{3.63}{r_s} \text{Å}^{-1}$$

۳-

$$v_F = \left(\frac{\hbar}{m}\right) k_F = \frac{4.20}{r_s / a_0} \times 10^8 \text{ cm/sec}$$

ملاحظه می‌شود که سرعت الکترون در فلزات حدود  $\frac{1}{100}$  سرعت نور است.

$$\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} = \frac{e^2}{2\alpha_0} (k_F a_0)^2 \quad -۴$$

$$\varepsilon_F = \frac{2 \cdot 21}{r_s^2} \quad \text{مرحله زیر برگ}$$

۵- اگر دمای  $T_F$  به صورت  $\varepsilon_F = k_B T_F$  به الکترونهاى مجاور سطح فرمی تخصیص داده شود.

فلز	Li	Na	K	Rb	Cs
$T_F$	$5.5 \times 10^4 K$	$3.77 \times 10^4 K$	$2.46 \times 10^4 K$	$2.15 \times 10^4 K$	$1.84 \times 10^4 K$

دیده می شود که کارکردن در دمای  $T=0$  تقریب بدی نیست.

$$T_F = \frac{\varepsilon_F}{k_B} = \frac{58.2}{r_s^2} \times 10^4 K$$

بر اساس این الگو می توان نشان داد که

۶- گرمای ویژه فلزات در دماهای پایین با دما بطور خطی تغییر می کند

$$C_V \propto T$$

۷- مدول حجمی فلزات Bulk modulus حدوداً با مقادیر تجربی مربوطه سازگاری دارد.

$$B = \frac{6.13}{r_s} \times 10^{10} \text{ dynes/cm}^2$$

$$B = 1/K = -V \frac{\partial P}{\partial V}, \quad P = -\frac{\partial E}{\partial V}, \quad E = \frac{3}{5} N \varepsilon_F$$

فلز	Li	Na	K	Cu	Al	
B نظری	23.9	9.23	3.19	63.8	22.8	$\times 10^{10} \text{ dynes/cm}^2$
B تجربی	11.5	6.42	2.81	134.3	76.0	$\times 10^{10} \text{ dynes/cm}^2$

بر اساس این الگو یک سری کمیات فیزیکی را می توان محاسبه کرد که از آن جمله اند

الف - ضریب حال

ب - مقاومت مغناطیسی magnetoresistance

ج - هدایت الکتریکی و نشان داده بین داده های تجربی بین های نظری

د - عدم تطابق چشم گیری وجود دارد. پیشنهاد می کنم فصلهای ۱-۲-۳ کتاب Aschcroft و

Mermin را بخوانید و ریزه کاریها و اشکالات این الگو را بیان کنید.

یکی از اشکالات بدیهی در نظر گرفتن برهمکنش الکترونها با یکدیگر است که می خواهیم

اینک به آن بپردازیم.

اولین سوال اینست که هامیلتونی این دستگاه  $N$ - الکترونی را در کوانتتس دوم چگونه

می‌نویسیم و چگونه انرژی دستگاه را حساب می‌کنیم و البته درباره موضوعاتی چون محاسبه تابع همبستگی دوتایی و محاسبه کمیات سنجش پذیر دیگر حرف خواهیم زد.

برای مشخص شدن هامیلتونی لازم است که

۱- هامیلتونی را در اولین کوانتتش بنویسیم.

۲- المانهای ماتریسی را مشخص کنیم و سپس برای اینکار ابتدا باید توابع موج تک تیره‌ای را بشناسیم و سپس بکمک آنها المانهای ماتریسی را محاسبه کنیم.

۳- به فرمولبندی که ما را از هامیلتونی اولین کوانتتش به هامیلتونی دومین کوانتتش میرساند، مراجعه کنیم.

مرحله اول

$$\hat{H} = \hat{H}_{el} + \hat{H}_b + \hat{H}_{el-b}$$

$$\hat{H}_{el} = \sum_{l=1}^N \frac{p_l^2}{2m} + \frac{e^2}{2} \sum_{l \neq j} \frac{\exp[-\kappa |\vec{r}_l - \vec{r}_j|]}{|\vec{r}_l - \vec{r}_j|} \quad \text{هامیلتونی الکترونها}$$

هامیلتونی زمینه یکنواخت با بارهای مثبت

$$H_b = \frac{e^2}{2} \iint d^3x d^3x' \frac{n(\vec{x}) n(\vec{x}') \exp[-\kappa |\vec{x} - \vec{x}'|]}{|\vec{x} - \vec{x}'|}$$

$$n(\vec{x}) = n(\vec{x}') = n_0 = N/V$$

هامیلتونی الکترون و زمینه

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{l=1}^N \int d^3x \frac{n(\vec{x}) \exp[-\kappa |\vec{x} - \vec{r}_l|]}{|\vec{x} - \vec{r}_l|}$$

تابع نمایی در برهمکنش کولنی بدانجهت ظاهر شد که جملات فوق در حد ترمودینامیکی یعنی  $N \rightarrow \infty$ ،  $V \rightarrow \infty$  و  $\frac{N}{V} = \bar{n}$  بینهایت می‌شوند ولی در حد  $\mu$  های غیر صفر مقادیرشان محدود بوده و مشکل ریاضی بوجود نمی‌آورند. عبارت دیگر این کلک ریاضی

است و مانده‌ای مقدار صفر را صفر خواهیم کرد. به زبان فیزیکی ذرات بار دار استوارند.

در اینجا ابعاد جعبه‌ای که الکترونها در آن قرار دارند را  $L$  می‌گیریم و  $L \rightarrow \infty$  معادل

$L \rightarrow \infty$  است. روش محاسبه چنان خواهد بود که ابتدا  $L \rightarrow \infty$  مرود و سپس  $L \rightarrow 0$ .

بعبارت دیگر در مرحله  $L \ll \lambda_D$  اختیار می‌شود.

$$H_b = \frac{e^2}{2} \left(\frac{N}{V}\right)^2 \iint d^3x d^3x' \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{x}'|}}{|\vec{x}-\vec{x}'|}$$

$$\stackrel{[4\pi z^2 e^{-\mu z}]}{=} \frac{e^2}{2} \left(\frac{N}{V}\right)^2 \int d^3x \int_0^\infty 4\pi z^2 \frac{e^{-\mu z}}{z} dz = \frac{e^2}{2} \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$

$$H_{el-b} = -e^2 \sum_{l=1}^N \frac{N}{V} \int d^3x \frac{e^{-\mu|\vec{x}-\vec{r}_l|}}{|\vec{x}-\vec{r}_l|}$$

$$= -e^2 \sum_{l=1}^N \frac{N}{V} \int d^3z \frac{e^{-\mu z}}{z} = -e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$$

در اینجا از ناوردایی انتقالی استفاده شده است. بنابراین

$$H = -\frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} + H_{el}$$

و تمامی آثار فیزیکی جالب در  $H_{el}$  قرار دارد. نشان خواهیم داد که جمله  $\vec{q}=0$  در هامیلتونی که در دومین کوانتش ظاهر می شود دقیقاً "از جمله اول بینهایت میزدود و بنابراین هیچگونه تبعاعی در اصل مسئله وجود ندارد" ~~ها سیلر منی در مجموع متباعد نمی شود~~.  
حال می پردازیم به قسمت دوم یعنی محاسبه المانهای ماتریسی. چنانکه گفته شد ابتدا باید تابع موج  $\psi$  را محاسبه کنیم.

در یک محیط بکنواخت بینهایت، کلیه خواص فیزیکی تحت انتقال فضایی ناوردایند. با استفاده از شرایط مرزی تناوبی می توان گفت که توابع موج تخت باشند. تک ذرات توابع تخت اند.

$$\psi_{k\lambda}(\vec{x}) = V^{-1/2} e^{i\vec{k}\cdot\vec{x}} \eta_{\lambda}$$

$\eta_{\lambda}$  معرف دو حالت اسپینی برای الکترونها با اسپین  $\frac{1}{2}$  است.

$$\eta_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} \quad \eta_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}$$

شرایط مرزی تناوبی بما می گویند که

$$k_c = \frac{2\pi \cdot n_c}{L} \quad L \equiv x, y, z, \quad n_c = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$$

حالا المان ماتریسی موجود در انرژی جنبشی را حساب می کنیم

$$\langle \vec{k}_1, \lambda_1 | T | \vec{k}_2, \lambda_2 \rangle = \frac{1}{2mV} \int d^3x e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}} \eta_{\lambda_1} (-\hbar^2 \nabla_x^2) e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}} \eta_{\lambda_2}$$

ت.ا.ف.

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1, \lambda_1 | T | \vec{k}_2, \lambda_2 \rangle &= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2mV} \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \int d^3x e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{x}} \\ &= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \end{aligned}$$

$$\int e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{x}} d^3x = V \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}$$

$$\hat{T} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda}$$

اینک المان ماتریسی انرژی پتانسیل را حساب می‌کنیم

$$\begin{aligned} \langle \vec{k}_1, \lambda_1, \vec{k}_2, \lambda_2 | V | \vec{k}_3, \lambda_3, \vec{k}_4, \lambda_4 \rangle &= \langle \psi | V | \psi \rangle \\ &= \frac{e^2}{V^2} \iint d^3x_1, d^3x_2 e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1} e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2} \eta_{\lambda_1}^\dagger \eta_{\lambda_2}^\dagger \\ &\quad \frac{e^{-\mu |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{x}_1} e^{i\vec{k}_4 \cdot \vec{x}_2} \eta_{\lambda_3} \eta_{\lambda_4} \end{aligned}$$

$$\vec{x} = \vec{x}_2 \quad \vec{y} = \vec{x}_1 - \vec{x}_2 \quad \vec{x}_1 = \vec{x} + \vec{y}$$

$$\langle \vec{k}_1, \lambda_1, \vec{k}_2, \lambda_2 | V | \vec{k}_3, \lambda_3, \vec{k}_4, \lambda_4 \rangle =$$

$$\frac{e^2}{V^2} \int d^3x \exp[-i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) \cdot \vec{x}] \int d^3y \exp[i(\vec{k}_3 - \vec{k}_1) \cdot \vec{y}] \frac{e^{-\mu y}}{y} \delta_{\lambda_1, \lambda_3} \delta_{\lambda_2, \lambda_4}$$

$$= \frac{e^2}{V^2} \delta_{\lambda_1, \lambda_3} \delta_{\lambda_2, \lambda_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \frac{4\pi}{(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)^2 + \mu^2}$$

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} e^2 \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2} + \sum \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}\lambda}$$

$$+ \frac{e^2}{2V} \sum \delta_{\lambda_1 \lambda_2} \delta_{\lambda_2 \lambda_4} \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4} \frac{4\pi}{(\vec{k}_1 - \vec{k}_3)^2 + \mu^2} a_{\vec{k}_1 \lambda_1}^\dagger a_{\vec{k}_2 \lambda_2}^\dagger a_{\vec{k}_3 \lambda_3} a_{\vec{k}_4 \lambda_4}$$

$$\vec{k}_1 = \vec{k} + \vec{q} \quad \vec{k}_3 = \vec{k}$$

$$\vec{k}_2 = \vec{p} - \vec{q} \quad k_4 = \vec{p}$$

با این متغیرهای جدید جمله آخر  $\hat{H}$  به صورت زیر در می آید:

$$\frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\vec{k} + \vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p} - \vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}$$

$$= \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}, \vec{q}} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2 + \mu^2} a_{\vec{k} + \vec{q}, \lambda_1}^\dagger \dots \dots \dots$$

$$+ \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} \frac{4\pi}{\mu^2} a_{\vec{k}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}$$

$q=0, \lambda_2$

$$q=0 \text{ جمله} = \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} \sum_{\vec{k}, \vec{p}} a_{\vec{k}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda_1} (a_{\vec{p}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} - \delta_{\vec{k}, \vec{p}} \delta_{\lambda_1, \lambda_2})$$

$$= \frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2} (\hat{N}^2 - \hat{N})$$

جمله اول دقیقا  $\frac{e^2}{2} \frac{N^2}{V} \frac{4\pi}{\mu^2}$  را حذف می کند و جمله دوم برای انرژی در واحد ذره  $\frac{e^2}{2V} \frac{4\pi}{\mu^2}$  است

است که در حد  $L \rightarrow \infty$  صفر می شود، بنابراین هامیلتونی این دستگاه عبارت از:

$$\hat{H} = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}\lambda}^\dagger a_{\vec{k}\lambda} + \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{p}, \vec{q}, \vec{k}} \sum_{\lambda_1, \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k} + \vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p} - \vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}$$

رسم براین است که این هامیلتونی را بر حسب پارامتر بدون بعد  $r_0$  می‌نویسند.  
 حاصلضرب  $r_0$  در شعاع بوهر  $a_0 = \frac{\hbar^2}{m_e e^2}$ ، یعنی  $r_0 = r_0 a_0$  برابر است با شعاع کره‌ای که  
 بطور متوسط یک الکترون در خود جای می‌دهد.

$$V = \frac{4\pi}{3} r_0^3 N, \quad r_0 = \frac{r_0}{a_0}$$

اگر واحد طول را  $r_0$  بگیریم، در آنصورت داریم

$$\tilde{V} = r_0^{-3} V, \quad \tilde{\mathbf{k}} = r_0 \mathbf{k}, \quad \tilde{\mathbf{p}} = r_0 \mathbf{p}, \quad \tilde{\mathbf{q}} = r_0 \mathbf{q}$$

و هامیلتونی بصورت زیر در می‌آید

$$\hat{H} = \frac{e^2}{a_0 r_0^2} \left[ \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{k}}^2 a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}, \lambda} + \frac{r_0}{2V} \sum_{\mathbf{k}, \lambda} \frac{4\pi}{\tilde{\mathbf{q}}^2} a_{\mathbf{k}, \lambda}^\dagger a_{\mathbf{p}-\tilde{\mathbf{q}}, \lambda} a_{\mathbf{p}, \lambda}^\dagger a_{\mathbf{k}, \lambda} \right]$$

از این فرمول براحتی دیده میشود که در حد  $r_0 \rightarrow 0$  جمله برهمکنش کولنی در مقایسه با  
 انرژی جنبشی بسیار کوچک خواهد شد. لذا نظریه اختلال کاربرد پیدا می‌کند. البته این  
 نتیجه را براحتی می‌توانستیم از اصل قطعیت بدست آوریم. در حد چگالیهای زیـــــــاد  
 پتانسیل کولنی متناسب با  $\frac{1}{r_0}$  و انرژی جنبشی متناسب با  $\frac{1}{r_0^2}$  تغییر می‌کند. لذا جمله  
 دوم هامیلتونی در مقایسه با جمله اول کوچک خواهد بود. انتظار می‌رود که بتوان انرژی  
 حالت پایه چنین دستگاهی را بصورت توانهایی از  $r_0$  در حد مدون نوشت. یکی از کاربردهای  
 نمودارهای فاینمن برای آن است که بتوان از نظریه اختلال برای مرتبه‌های بالاتر استفاده  
 کرد.

نشان خواهیم داد که برخی از نمودارهای مرتبه‌های بالاتر بینهایت می‌شوند. بنابراین  
 نظریه اختلال برای گاز (مایع) الکترونی با مشکل روبرو بوده است. خواهیم دید که اگر  
 متناهیترین جملات نمودارهای فاینمن در محاسبه انرژی حالت پایه را جمع کنیم به نتیجه  
 محدودی می‌رسیم و نشان خواهیم داد که در حد چگالیهای زیاد

$$E_0 = \frac{N e^2}{a_0 r_0^2} (a + b r_0 + c r_0^2 \ln r_0 + d r_0^2 \dots)$$

بنابراین کار ما در جلسات آینده ایست که تکنیک توابع گرین و نمودارهای فاینمن را  
 مطالعه کنیم و ببینیم چگونه انرژی حالت پایه گاز الکترونی همگن را می‌توان حساب کرد.  
 متأسفانه باید اشاره کرد که چگالی الکترونها در فلزات ( $10^{23} < r_0 < 10^4$ ) نه چندان  
 زیاد است که بتوان از نظریه اختلال و نمودارهای فاینمن استفاده کرد و نه چندان کم که  
 بشود بلور شدگی و یگنبر را پیش کشید. به این دلیل است که مسئله گاز الکترونی سالهاست  
 در دستور کار فیزیکدانان قرار داشته است. این مبحث بویژه وقتی گاز الکترونی ناهمگن  
 است، بدلیل عدم وجود تقارن انتقالی پیچیده‌تر می‌شود و در این مورد کار کمتری صورت

گرفته است.

کوشش خواهیم کرد تا قبل از انتهای این ترم به طرح این مسائل بپردازیم. اما تا کنون با همین اطلاعاتی که داریم ببینیم می‌توانیم ضرایب جملات اول و دوم انرژی حالت پایه یعنی  $a$  و  $b$  را حساب کنیم. در حد چگالیهای زیاد دیدیم که می‌شود هامیلتونی را به دو تکه تقسیم کرد.

$$\hat{H}_0 = \sum_{\vec{k}, \lambda} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda}$$

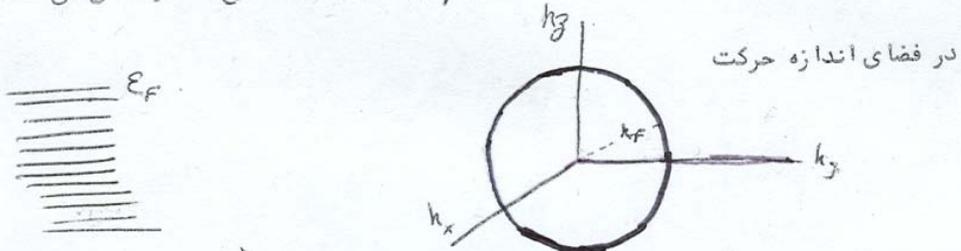
$$\hat{H}' = \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{p}, \lambda, \lambda_1, \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}$$

$\hat{H}_0$  هامیلتونی دستگاه  $N$  نره‌ای بدون برهمکنش است و  $\hat{H}'$  را می‌توان اختلال کوچکی روی آن - بحساب آورد. لذا انرژی حالت پایه را می‌توان بصورت

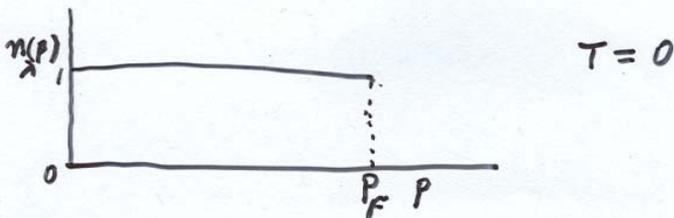
$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots$$

نوشت که در آن  $E^{(1)}$  انرژی دستگاه ذرات بدون برهمکنش است و  $E^{(2)}$  تغییر مرتبه اول انرژی (first order shift in energy) است.

اصل طرد پائولی تنها بما اجازه می‌دهد که دو الکترون با اسپینهای بالا و پایین در یک حالت کوانتومی با اندازه حرکت مشخص قرار دهیم. بنا براین، سطوح انرژی در حالت بدون برهمکنش تا انرژی  $\epsilon_F$  کریم، بنام انرژی فرمی پر می‌شوند و سطوح بالاتر خالی می‌مانند.



در حدی که حجم دستگاه به بینهایت میل کند می‌توان مجموع روی  $\vec{k}$  ها را تبدیل به انتگرال کرد.



← F

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \lambda} f_{\lambda}(\vec{k}) &= \sum_{n_x, n_y, n_z} f_{\lambda} \left( \frac{2\pi \vec{n}}{L} \right) \\ &\rightarrow \iiint dn_x dn_y dn_z \sum_{\lambda} f_{\lambda} \left( \frac{2\pi \vec{n}}{L} \right) \\ &= \left( \frac{L}{2\pi} \right)^3 \int d\vec{k} \sum_{\lambda} f_{\lambda}(\vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \sum_{\lambda} f_{\lambda}(\vec{k}) \end{aligned}$$

بنابراین قانون روی  $\vec{k}$  ها معادل است با انتگرال روی  $\vec{k}$  ها ضربدر فاکتور  $\frac{V}{(2\pi)^3}$  و ما از این پس از این قاعده استفاده خواهیم کرد.

۱- بدست آوردن رابطه  $n_0$  و  $k_f$  (قبلا این رابطه را دیده ایم.)

$$N = \langle \varphi | \hat{N} | \varphi \rangle = \langle \varphi | \sum_{\vec{k}, \lambda} a_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} a_{\vec{k}, \lambda} | \varphi \rangle$$

$|\varphi\rangle$  مبین حالت پایه است که در آن کلیه حالات با انرژی کمتر از انرژی فرمی پر شده اند و بقیه حالات خالی هستند.

$$N = \sum_{\vec{k}, \lambda} \langle \varphi | a_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} a_{\vec{k}, \lambda} | \varphi \rangle$$

بدیهی است که  $k < k_f$  است، چه در غیر اینصورت نتیجه صفر خواهد شد. بنابراین

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} \sum_{\lambda} \int d^3k \theta(k_f - k) = \frac{2V}{(2\pi)^3} \cdot 4\pi \int_0^{k_f} k^2 dk$$

$$N = \frac{V}{(2\pi)^3} k_f^3$$

$$3\pi^2 n_0 = k_f^3 \quad \underline{\quad} \quad k_f = \left( \frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} r_0^{-1} = \frac{1.92}{r_s}$$

$$n_0 = \frac{N}{V} = \frac{N}{\frac{4\pi}{3} r_0^3 N} = \frac{3}{4\pi} r_0^{-3}$$

محاسبه  $E^{(0)}$

$$E^{(0)} = \langle \varphi | \hat{H}_0 | \varphi \rangle = \sum_{\vec{k}, \lambda} \epsilon_k \langle \varphi | a_{\vec{k}, \lambda}^{\dagger} a_{\vec{k}, \lambda} | \varphi \rangle$$

$$E^{(0)} = \frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \cdot \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \Theta(k_F - k) = \frac{3}{5} \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} N$$

$$E^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} N \frac{2.21}{r_s^2}, \quad \epsilon = \frac{2.21}{r_s^2}$$

$\epsilon$  انرژی در واحد ذره بر حسب ریبرگ است.

باین ترتیب اولین جمله انرژی حالت پایه بر حسب  $r_s$  آمده است.  
۳ - برای محاسبه  $E^{(1)}$ ، یعنی تغییر مرتبه اول در انرژی حالت پایه می‌دانیم که بنابر نظریه اختلال

$$E^{(1)} = \langle \varphi | H' | \varphi \rangle \\ = \frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{p, q, k \\ \lambda_1, \lambda_2}}' \frac{4\pi}{q^2} \langle \varphi | a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_1} a_{\vec{k}, \lambda_2} | \varphi \rangle$$

است. اولاً بدیهی است که حالت‌های  $\vec{k}, \lambda_1$  و  $\vec{p}, \lambda_2$  باید حالت‌های پرباشند و همچنین حالت‌های  $\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1$  و  $\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2$  باید حالت‌های پرباشند، زیرا در غیر این صورت به هنگام عمل روی  $\langle \varphi |$  به صفر خواهند انجامید. ثانياً این امان ماتریسی وقتی صفر نخواهد بود که نتیجه  $\langle \varphi | a_{\vec{k}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_1} a_{\vec{k}, \lambda_2} | \varphi \rangle$  معادل وضعیت باشد و پیلاینکه دو عملگر بوجود آورنده دو حفره‌ای را که دو عملگر از بین برنده ایجاد کرده‌اند پیرکنند. این امر تنها در صورتی ممکن است که روابط زیر برقرار باشند:

$$\vec{k} + \vec{q}, \lambda_1 = \vec{k}, \lambda_1 \quad \vec{k} + \vec{q}, \lambda_1 = \vec{p}, \lambda_2 \\ \vec{p} - \vec{q}, \lambda_2 = \vec{p}, \lambda_2 \quad \vec{p} - \vec{q}, \lambda_2 = \vec{k}, \lambda_1$$

حالت اول بمعنی  $q=0$  است که در  $H'$  موجود نیست، لذا تنها حالت ممکن وقتی است که

$$\vec{p} - \vec{q} = \vec{k}, \quad \vec{k} + \vec{q} = \vec{p}, \quad \lambda_1 = \lambda_2$$

باشند. بنابراین

$$E^{(1)} = \frac{e^2}{2V} \sum' \frac{4\pi}{q^2} \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \delta_{\vec{p}-\vec{q}, \vec{k}} \\ \langle \varphi | a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda}^\dagger a_{\vec{k}, \lambda}^\dagger a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda} a_{\vec{k}, \lambda} | \varphi \rangle$$

۲۵

$$E^{(1)} = - \frac{e^2}{2V} \sum_{\substack{P, k, q \\ \lambda}} \frac{4\pi}{q^2} \delta_{\vec{k} + \vec{q}, \vec{p}} \langle \psi | \hat{n}_{\vec{k} + \vec{q}, \lambda} \hat{n}_{\vec{k}, \lambda} | \psi \rangle$$

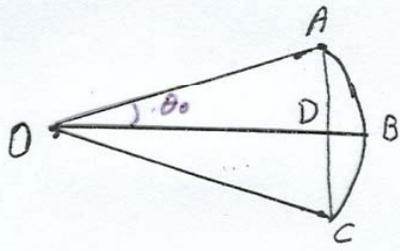
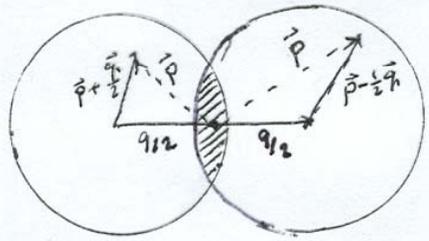
$$= - \frac{e^2}{2V} 4\pi \sum_{k, q, \lambda} q^{-2} \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

$$= - \frac{e^2}{2} \frac{4\pi V}{(2\pi)^6} \int d^3k d^3q q^{-2} \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

بدلیل اسین θ(k\_F - k) ضرب

اگر  $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}$  برود  
~~اگر  $\vec{p} \rightarrow \vec{p} + \frac{\vec{q}}{2}$  قرار داده شود در آن صورت~~

$$E^{(1)} = - 4\pi e^2 \frac{V}{(2\pi)^6} \int d^3q q^{-2} \int d^3p \theta(k_F - |\vec{p} + \frac{\vec{q}}{2}|) \theta(k_F - |\vec{p} - \frac{\vec{q}}{2}|)$$



ناحیه انتگرال گیری روی p ها شور زده شده و انتگرال روی  $\vec{p}$  معادل بدست آوردن حجم ها شور زده است.

$$V_{OABC} = \frac{4\pi}{3} k_F^3 (1-x)/2 = 2\pi \int_0^{\theta_0} q^2 dq \int \sin \theta d\theta = -\frac{2\pi}{3} k_F^2 (\cos \theta_0 - 1)$$

$$= \frac{4\pi}{3} k_F^3 (1-x)/2 \quad x = \frac{q}{2} \frac{1}{k_F}$$

$$V_{OADC} = \pi (k_F^2 - \frac{q^2}{4}) \frac{q}{2} \times \frac{1}{3} = \frac{4\pi}{3} k_F^3 (1-x^2) \frac{x}{2} \cdot \frac{1}{2}$$

$$V_{OABC} - V_{OADC} = \frac{4\pi}{3} k_F^3 \left[ 1 - x - \frac{x}{2} (1 - x^2) \right] / 2$$

$$\int d^3p \theta(k_F - |\vec{R} + \frac{\vec{q}}{2}|) \theta(k_F - |\vec{P} - \frac{\vec{q}}{2}|) =$$

باید  $q < 2k_F$  باشد، در غیر اینصورت دو کره فصل مشترکی نخواهند داشت و مقدار انتگرال صفر خواهد شد.

$$= \frac{4\pi}{3} k_F^3 \left( 1 - \frac{3}{2}x + \frac{1}{2}x^3 \right) \theta(1-x), \quad x = \frac{q}{2k_F}$$

$$E^{(1)} = -4\pi e^2 \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{3} k_F^3 \cdot 2k_F \int_0^1 dx \cdot 4\pi \left( 1 - \frac{3}{2}x + \frac{x^3}{2} \right)$$

$$= -\frac{e^2}{2\alpha_0} \frac{N}{r_s} \left( \frac{4\pi}{9} \right)^{1/3} \frac{3}{2\pi} = -\frac{e^2}{2\alpha_0} N \frac{0.916}{r_s}$$

باین ترتیب دیده می شود که

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{2\alpha_0} \left[ \frac{2.21}{r_s^2} - \frac{0.916}{r_s} + \dots \right]$$

اولین جمله همان انرژی جنبشی و دومین جمله موسوم به انرژی تبادل است. همانطور که در ~~مکانیک کوانتوم~~ توضیح دادم می توان انرژی تبادل را بکمک تابع همبستگی دوتایی *pair correlation function* حساب کرد.

$$E_{ex} = -e^2 \int \frac{n_0 [g(r) - 1]}{r} d^3r$$

انرژی تبادل بنا به تعریف انرژی برهمکنش یک الکترون با حفره فرمی ایست که در دوروبر خود بوجود آورده است. همان تابع همبستگی دوتایی است، که برای گاز الکترونی بدون برهمکنش عبارتست از:

$$g(r) = 1 - \frac{9}{2} \left( \frac{J_1(k_F r)}{k_F r} \right)^2$$

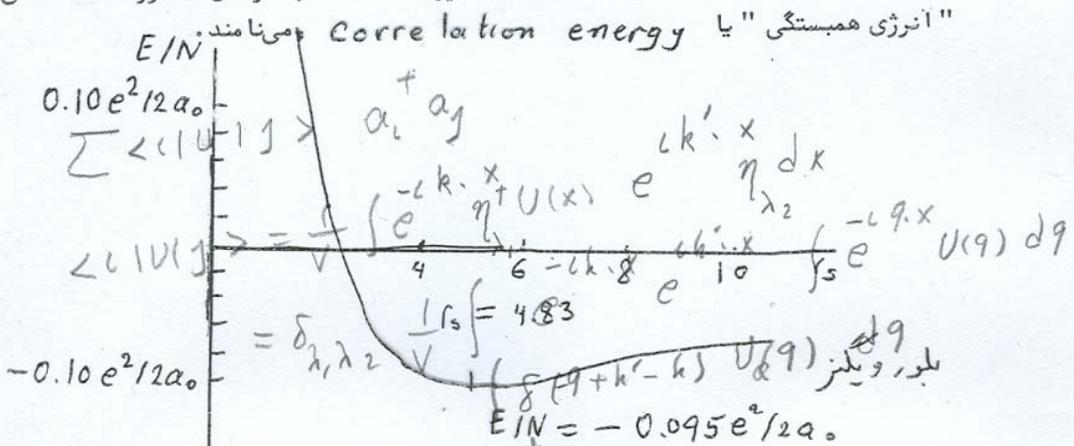
$$J_1(x) = \frac{\sin x - x \cos x}{x^2}$$

$$E_{ex} = -\frac{e^2}{2\alpha_0} \frac{0.916}{r_s} \text{ می شود.}$$

$J_1(x)$  تابع بسل کروی مرتبه اول است.

محاسبه انتگرال فوق نشان می دهد که

وقتی  $r_s \rightarrow 0$  میل می‌کند این جمله اساسی ترین قسمت انرژی پس از انرژی جنبشی خواهد بود. علت نام انرژی تبدلی از آنجا ناشی می‌شود که در محاسبه المان ماتریسی به دو جمله برخوردیم یکی "مستقیم" که مربوط می‌شود به جمله  $q=0$  و با قسمت  $H_0 + H_{e1-b}$  حذف می‌شد و باین ترتیب خنثی بودن الکتریکی کل دستگاه را تضمین میکرد. دیگری "تبدلی" بود. بنا به تعریف باقیمانده انرژی دستگاه  $N$  ذره‌ای الکترونی را



اولاً "منحنی می‌نیمیم داریم" یعنی فقط با احتساب اختلال مرتبه اول دیده می‌شود که دستگاه مقید است. بعبارت دیگر اگر تابع موج دستگاه (تتابع موج ذرات بدون برهمکنش در نظر بگیریم دستگاه بدلیل عملکرد اصل طرد پائولی مقید می‌شود. غالب است توجه کنیم که می‌نیمیم در  $r_s = 4.83$  اتفاق می‌افتد و انرژی مربوط به این می‌نیمیم برابر  $E/N = -1.29 eV$  است. در عمل سدیم دارای  $r_s = 3.96$  است و انرژی هر واحد ذره آن مساوی  $E/N = -1.13 eV$  می‌باشد.

باین ترتیب دیده می‌شود که این الگوی ساده بخش اعظم انرژی پیوندی فلز را پیچیده می‌کند. در فلز واقعی یونها موضعی در نقاط شبکه برمی‌گزینند و باید انرژی دستگاه را با احتساب وضعیت یونها بطور دقیقتر محاسبه کرد. همچنین می‌توان خواص ترمودینامیکی گاز الکترونی را از روی حالت پایه حساب کرد.

$$P = - \left( \frac{\partial E}{\partial V} \right)_N = - \frac{\partial E}{\partial r_s} \frac{dr_s}{dV} = \frac{Ne^2}{2a_0} \frac{r_s}{3V} \left[ \frac{2(2.21)}{r_s^3} - \frac{0.916}{r_s^2} \right]$$

فشار در  $r_s = 4.83$  صفر می‌شود، جایی که دستگاه در حال تعادل است.

همچنین مدول حجمی *bulk modulus* قابل محاسبه است.

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{Ne^2}{2\alpha_0} \frac{2}{9V} \left[ \frac{5(2.21)}{r_s^2} - \frac{2(0.916)}{r_s} \right]$$

در حد چگالیهای کم وقتی  $r_s \rightarrow \infty$  ویگنر استدلال کرده است که دستگاه وقتی انرژی کمتری خواهد داشت که الکترونها شبکه تشکیل دهند. دلیل این امر اینست که در این حد انرژی جنبشی در مقایسه با انرژی پتانسیل ناچیز است و می‌نیم شدن انرژی پتانسیل دستگاه موجب پیدایش چنان پیکربندی می‌شود که حول و حوش هر نقطه شبکه‌ای مانند هر نقطه دیگر باشد و این در صورتی امکان پذیر است که الکترونها شبکه‌ای تشکیل دهند. این امر معروف به بلور شدگی ویگنر است. ویگنر نشان داده است که انرژی در این صورت عبارتست از:

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{2\alpha_0} \left[ -\frac{1.79}{r_s} + \frac{2.66}{r_s^{3/2}} \dots \right]$$

اشاره به چند نکته درباره هامیلتونی گاز الکترونی ضروریست.  
۱- تعمیم آن به گاز فرمیونی بدیهی است.

$$H = \sum_{k\lambda} \epsilon_k a_{k\lambda}^\dagger a_{k\lambda} + \frac{1}{2V} \sum_{q, \lambda_1, \lambda_2} V(q) a_{k+q, \lambda_1}^\dagger a_{p-q, \lambda_2}^\dagger a_{p, \lambda_2} a_{k, \lambda_1}$$

اما این فرم هامیلتونی گاهی از اوقات به مشکل برخورد می‌کند. مثلاً اگر می‌خواستیم از مایع  $He^3$  حرف بزنیم و پتانسیل بین دو اتم هلیوم را ندارد چون انتخاب کنیم با این مشکل روبرو می‌شویم که پتانسیل ندارد چون تبدیل فوریه ندارد. البته راههایی وجود دارد که کمک آنها می‌شود این مشکل را از میان برداشت، مثلاً استفاده از ماتریس  $T$  یکی از این راههاست. اگر وقت کردیم بعداً به آن خواهیم پرداخت.

۲- اغلب می‌توان پتانسیل ناشی از یونها و یا پتانسیل خارجی را بصورت زیر در هامیلتونی وارد کرد.

$$H = \sum_{p, \lambda} \epsilon_p a_{p, \lambda}^\dagger a_{p, \lambda} + \sum_q V(q) \rho(q) + \frac{1}{2V} \sum_q V(q) a_{k+q, \lambda_1}^\dagger a_{p-q, \lambda_2}^\dagger a_{p, \lambda_2} a_{k, \lambda_1}$$

$$\rho(q) = \sum_{k, \lambda} a_{k+q, \lambda}^\dagger a_{k, \lambda}$$

$V(q)$  غالباً بصورت سلب پتانسیل بیان آورده می‌شود.

۳- ما از آنجهت موج تخت برای تتابع تک نره به کار بردیم که الگوی الکترون آزاد در تقریب اول به نتایج کیفی خوبی میرسید. مثلا "گرمای ویژه با دما بطور خطی تغییر می کند و غیره .

اما اگر بنا باشد از این الگو برای جامدات یونی مثل نمک طعام استفاده کنیم ، چنین الگویی بسیار نامناسب خواهد بود. در بسیاری از جامدات الکترونها موضعی برگزیده اند (localized) و جایشان روی اتمهای معین بوده و تنها هر از گاهی به یون مجاور می پرند. الگویی که چنین وضعیتی را در نظر میگیرد موسوم به الگوی پیوند قوی یا tight-binding model است. شکل ساده ای از این الگو می تواند بصورت زیر باشد

$$H = \sum_{i, \delta, \alpha} t_{\delta, \alpha} C_{i, \alpha}^\dagger C_{i+\delta, \alpha} = \sum_{i, \delta} t_{\delta} (H) C_{i, \alpha}^\dagger C_{i+\delta, \alpha}$$

اندیس  $i$  نشانگر مکان  $R_i$  شبکه ای  $i+\delta$  نشانگر موضع نزدیکترین همسایه به اتم  $i$  است. می توانیم همان ماتریسی  $t_{\delta}$  را بصورت

$$t_{\delta, \alpha} = \int d\vec{r} \psi_{\lambda}^*(r - R_{i+\delta}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U(r) \right] \psi_{\lambda}(r - R_i)$$

در نظر بگیریم و توابع  $\psi$  را توابع موج اتمی حول مکانهای  $R_i$  و  $R_{i+\delta}$  بیندازیم. یعنی در اینجا دیگر درست نیست که  $\psi$  ها را تابع موج تخت چنانچه برای گاز الکترونی گرفتیم انتخاب کنیم.

جمله  $t_{\delta}$  وقتی  $\delta \neq 0$  است نمایشگر روندهایی است که در آنها الکترون از مکان  $j+\delta$  به مکان  $j$  می پرد.  $t_{\delta}$  مربوط می شود به انرژی موضعی و یا *site energy* . اصطلاحاً "hamiltonian های bilinear دقیقاً" قابل حل اند.

در اینجا

$$C_{j, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i\vec{k} \cdot R_j} C_{k, \sigma}$$

$$C_{k, \sigma}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-i\vec{k} \cdot R_j} C_{j, \sigma}^\dagger$$

$$H = \sum_{i, \delta, \alpha} t_{\delta} (H) C_{i, \alpha}^\dagger e^{-i\vec{k} \cdot R_{i+\delta}} C_{i+\delta, \alpha} e^{i\vec{k}' \cdot (R_i + \delta)}$$

$$H = \sum_{q, k, k'} t_{\delta} (H) C_{k, \lambda}^\dagger C_{k', \lambda} e^{i(-q+k') \cdot \delta} e^{i R_i \cdot (k-k)}$$

$q = k = k'$

در آن صورت داریم

$$H = \sum_{\alpha} t_{\alpha} C_{\alpha}^{\dagger} C_{\alpha+\delta, \alpha} = \sum_{k\sigma} t_{\sigma}(k) C_{k\sigma}^{\dagger} C_{k\sigma}$$

$$t_{\sigma}(k) = \sum_{\delta} t_{\sigma} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$$

معمولاً پیرس به نزدیکترین همسایه با در نظر گرفته می شود. دیده می شود که به حاملین از این مشابه حاملین الکترون های بدون برهنش و یا فرزون های بدون برهنش رسید ایم. به عبارت دیگر مسئله ما در اینجا عیناً مشابه مسئله فرمیون های بدون برهنش (الگوری زومزله) است. هر یک از مد های  $\sigma$  که به صورت یک فرمیون مستقل عمل می کند.

در دمای صفر ( $T=0$ )، به منظور محاسبه کیفیت های فیزیک همان کاری را می توانیم انجام دهیم که برای الگوری زومزله انجام دادیم. تفاوت دو محاسبه در تفاوت رابطه پیرس آن ها ظاهر می شود. رابطه پیرس در الگوری زومزله  $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$  و در اینجا به صورت

$$t(k) = \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}} t_{\delta}$$

است. اگر تنها نزدیکترین همسایه را در نظر بگیریم و شبکه را به صورت یکساز فرض کنیم، داریم

$$t(k) = t \sum_{\delta} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\delta}}$$

$$t(k) = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a).$$

با این رابطه پیرس، محاسبه انرژی حالت پایه، گرمای ویژه مدول جبر، فشار و غیره به صورت قبل انجام شود.

در دماهای غیر صفر ( $T \neq 0$ ) تابع پارتیشن را حساب می‌کنیم

$$Z_0 = e^{-\beta \Omega_0} = \text{Tr} (e^{-\beta \hat{K}})$$

اندیس صفر به معنی استاندارد از دستگاه بدون برهمکنش است.

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu \hat{N}$$

$\Omega$  حرف grand potential است و از آنجا که کانونیک درت استاندارد شده است.

$$Z_0 = \prod_k (1 + e^{-\beta \epsilon_k})^2$$

$\epsilon_k = \epsilon(k) - \mu$  و توان 2 بدلیل دو حالت اسپین بالا و پایین است.

$$\beta \Omega_0 = -2 \sum_k \ln (1 + e^{-\beta \epsilon_k})$$

$$= -\frac{2V}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} \ln (1 + e^{-\beta \epsilon_k})$$

$$+\frac{\partial \Omega}{\partial \mu} = \langle \hat{N}_e \rangle = \bar{N}_e$$

$$\frac{\partial (\beta \Omega)}{\partial \beta} = \langle \hat{K} \rangle = U - \mu \bar{N}_e = \Omega + TS$$

$$m \frac{\partial \Omega}{\partial m} = \left\langle \sum \frac{p_i^2}{2m} \right\rangle = \sum_p n_p \frac{p^2}{2m}$$

تابع  $n_p$  تابع توزیع مکانی ذرات است که بدین سطح مایعات فرس شکست دارد.

گفتیم در الگوی تنگ بست (TBM) الکترون با ستیل از یکدیگر  
 عمل می‌کنند. اما در عمل، رفتار الکترون با هیپ این گونه نیست.  
 اصل طرد پائولی می‌گوید اگر الکترونی با اسپین معین در اوربیتال  
 معین اتم حضور داشته باشد، الکترونی با همان اسپین  
 نمی‌تواند به آنجا برود. به عبارت دیگر هر پیرس مجاز نیست و  
 حرکت الکترون با به یکدیگر **همبسته** اند (are correlated)  
 این همبستگی از یک سو به دلیل پادمقارن بودن تابع موج و  
 از سوی دیگر به دلیل برهمکنش بین آنهاست.  
 به منظور به میان آوردن آثار برهمکنش در الگوی تنگ بست  
 به جلد برهمکنش

$$\frac{1}{2} \sum v_{ij} m l C_i^{\dagger} C_j^{\dagger} C_p C_m$$

می‌گیریم. این بار به دلیل آن که الکترون های جایگزین به  
 ردی اتمی که مورد نظرند، عبارت  $v_{ij} m l$  عبارت است از

$$v_{ij} m l = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \mathcal{P}^*(r_1 - R_e) \mathcal{P}^*(r_2 - R_j) \\ \times \frac{e^{-2}}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \mathcal{P}(r_2 - R_m) \mathcal{P}(r_1 - R_e)$$

چهار اوربیتال موجود در انتگرال فوق می‌تواند در حول جوش  
 مرکز چهار اتم متفاوت تمرکز یافته باشند (انتگرال های چهار مرکزی)  
 در این صورت مقدار ماتریس برهمکنش بسیار کوچک و در نتیجه  
 قابل صرف نظر است، چرا که رویه اتفاقاً توابع موج ناچیز است

ما به دنبال حفظ جلاقی هستیم که بیشترین تأثیر را دارند. در نام  
 بعضی برچکنش دو ذره ای را در نظر می گیریم که ردی دو اتم  
 متفاوت نشسته اند. مثلاً اگر  $c = m$  و  $l = 0$  باشد، برچکنش  
 کولن به صورت

$$\frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j$$

در می آید. علامت  $(i \neq j)$  برای آنست که ذره با خودش  
 برچکنش نداشته باشد. تعریف  $V_{ij}$  به صورت زیر است:

$$V_{ij} = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 |\varphi(r_1 - R_i)|^2 \frac{e^{-\alpha |r_1 - r_2|}}{|r_1 - r_2|} |\varphi(r_2 - R_j)|^2$$

حاملیتین

$$H = \sum_{i,j} t_{ij} \hat{C}_i^+ \hat{C}_j + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j$$

ما به حاملیتین گاز شبکه ای است که در ارتباط با یک  
 دستگاه اسپین مطرح می شود. در این مورد بیشتر  
 توضیح داد خواهد شد.

### الگوی هاوارد

هاوارد، در سال ۱۹۶۳ الگوین معرفی کرد که ما آن را به نام  
 الگوی هاوارد می شناسیم. در این الگو تنها آن دسته از  
 اشکال های کولن حفظ می شود که بیشترین صده او را دارند  
 و این وقت است که هر چهار اوردیتال ردی یک اتم متمرکز شده اند.

به این ترتیب برکنش دو الکترون در یک اوربیتال اتمی مطرح می شود. در این صورت حالت های اسپین دو الکترون می باید متفاوت باشند + یکی با اسپین بالا و دیگری با اسپین پایین.

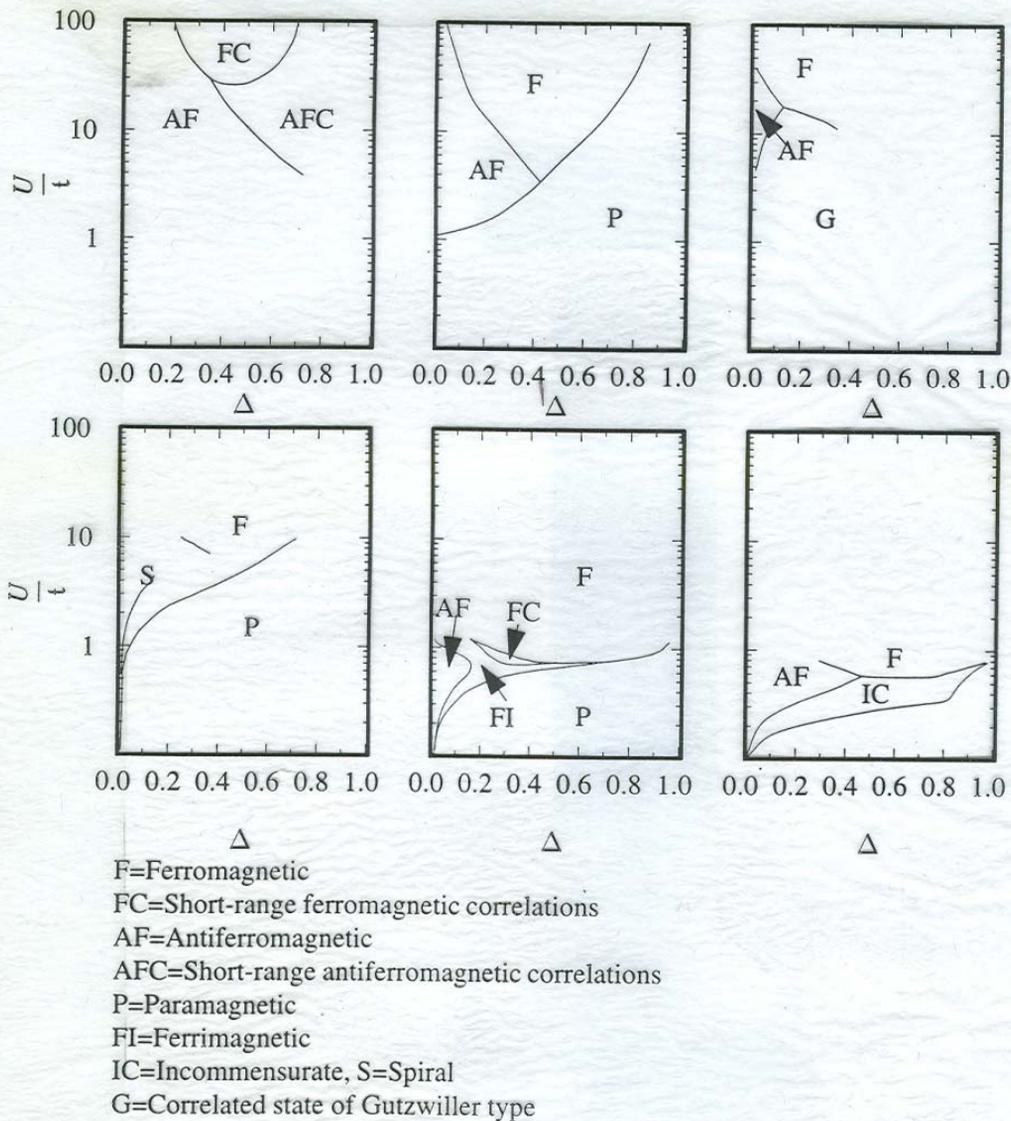
از اینرو الگوری ها با رد به صورت زیر در می آید:

$$\hat{H} = t \sum_{\langle \lambda, \delta \rangle} c_{\lambda}^{\dagger} c_{\lambda+\delta} + t_0 \sum_{\lambda} n_{\lambda} + U \sum_{\lambda} n_{\lambda \uparrow} n_{\lambda \downarrow}$$

در اولین جلد، تنها پیش به نزدیکترین همسایه ها در نظر گرفته شد است. تاکنون کوشش های زیادی برای حل الگوری ها با رد صورت گرفته است و این کوشش ها همچنان ادامه دارد.

در اینجا باید متذکر شد که گوتزویلر (Gutzwiller) نیز مستقل از ها بار د، به هنگام مطالعه خواص ذرات  $d$  ی مزدخناگیس با این الگوری اعرضی کرد. بهر حال، مطالعه این الگوری ما را با سایل تحقیق روز رو برو می کند.

نکته مهمی که باید بدان اشاره شود اینست که وقتی به سراغ یک مسئله فیزیکی خاص می رویم، نگاه می کنیم مسئله ما چه ویژگی های دارد و سپس می کنیم الگوری از حاصلتدن اراده د همیم که در آن این ویژگی ها لحاظ شده باشند مثلاً در نظریه ابررساناها BCS حاصلتدن ای اراده می شود که در آن جفت های کوپر منظور شده است.



**Figure 26.9.** Six representative phase diagrams of the two-dimensional Hubbard model, as a function of on-site repulsion  $U$  over hopping parameter  $t$ , and filling fraction  $\Delta$ , which tells the fraction of sites that has more than one electron. In the absence of reliable controlled approximations, researchers try various variational wave functions or numerical approaches, but few researchers have yet agreed particularly on the form of the results. The graphs should all be the same, but they are so different that a logarithmic vertical axis was needed to fit them all on the same page. This problem is still unsolved. [Results of Dorantes-Davila et al. (1983), Sarker et al. (1991), Kaxiras and Manousakis (1988) Coppersmith and Yu (1989), Schumacher (1983), and Richter et al. (1978). There are also predictions of superconducting regions, as in Giamarchi and Lhuillier (1991).]

الکترونها در آن مستقر بود.

به طور خلاصه، مسئله حل دستگاههای بس نره ای باینجا ختم می شود که ما چگونه الکترونی هامیلتونی امی بسازیم که مشغول به ویژگیهای دستگاه منبسط نشود. البته گاه پیش می آید که هر الگوی هامیلتونی براحتی قابل فهم و حل نیست. از اینرو تکنیکهای خاصی توسعه و گسترش پیدا می کند که خود راهگشایی برای حل مسائل دیگر دستگاههای بس نره ای است و از سوی دیگر مورد استفاده فیزیکدانان در قسمتهای دیگر قرار می گیرد. بعنوان مثال میتوان از اثر کاندرو نام برد.

تا اینجا با الگرای زیر و هامیلتونی آنها آشنا شدیم:

- ۱- الگوی زوج مزله  

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{a}_{k\sigma}$$
- ۲- الگوی رله ای (گاز یا مایع الکترونی)  

$$H = \sum_{k\lambda} \hbar \omega_{k\lambda} (b_{k\lambda}^\dagger + b_{k\lambda})$$

$$\hat{H} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k \hat{a}_{k\sigma}^\dagger \hat{a}_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k, p, q, \sigma, \sigma'} V(q) \hat{a}_{k+q, \sigma}^\dagger \hat{a}_{p-q, \sigma}^\dagger \hat{a}_{p, \sigma} \hat{a}_{k, \sigma}$$

- ۳- الگوی تنگ-بند  

$$\hat{H} = \sum_{i, j} t_{ij} c_i^\dagger c_j$$
- Tight-binding model
- $$\hat{H} = \sum_{\vec{k}} t_{\vec{k}} c_{\vec{k}\sigma}^\dagger c_{\vec{k}\sigma}$$

- ۴- الگوی شبکه گازی  

$$\hat{H} = \sum_{i, j} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \frac{1}{2} \sum_{i, j} V_{ij} \hat{n}_i \hat{n}_j$$
- Lattice gas model

- ۵- الگوی هابارد  

$$\hat{H} = t \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i+\delta, \sigma} + t_0 \sum_{i\sigma} n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

دیدیم که الگوهای زوسرمله و تنگ-بست دقیقاً قابل حل اند.

سؤال: آیا می توان با تقریب حوزی هامیلتونن های دیگر

را به صورت هامیلتونن های زوسرمله یا تنگ-بست

در آورده؟ به عبارت دیگر آیا می توان هامیلتونن

دستگاه های با برکنش را با تقریب حوزی هم ارز هامیلتونن

دستگاهی از شبه ذرات بدون برکنش قرار داد.

جواب: در مواردی که همبستگی بین ذرات ضعیف است

این کار عملی است. اما، وقتی همبستگی بین ذرات

قوی است، تقریب فوق الذکر می تواند به

جواب های نادرست (عینر فیزیکل) بیا نجامد.

به عنوان مثال نظریه های BCS ، DFT-KS ، RPA ، FLT

از تقریب فوق الذکر موسوم به تقریب میدان میانگین استاتیک

استناد می شود.

هامیلتونن BCS را با استناد از تبدیل های بوگولیبوف

می توان به صورت هامیلتونن حثبت ذرات بدون برکنش

در آورد. با استناد از RPA می توان الگوی ژله ای

را به صورت هامیلتونن شبه الکترون های بدون برکنش در آورد.

و بالاخره، فرض اساسی DFT-KS اینست که <sup>برای</sup> دستگاه فرضی

با برکنش یک دستگاه بدون برکنش هم ارز وجود دارد.

در نظریه مایع فرس (FLT) از سبب ذرات با برکنش ضعیف  
صحت می شود

این نوع تقریب را تقریب میدان میانگین می نامند و  
در موارد متعددی در جام های مختلف نیز یک ماده چگال،  
از آن استناد می شود. در صفحات بعدی چند مثال از  
تقریب میدان میانگین ارائه خواهد شد

اما الگوهای هابارد، گاندو و اندرسون به  
درجه های تابع دارند که جهت الگوردن بیان فرمات. این  
نوع مایل را می توان با استناد از تقریب میدان میانگین  
استنتاج حل کرد. در این موارد از نظریه میدان میانگین  
دنیا میگویند (DMFT) و با نظریه های غیر اختلاص استناد  
خواهد شد. در این باره به تفصیل صحبت خواهم کرد.

در چند صحنه اخیر به موضوعات زیر اشار شد

۱- هبت‌های ضعیف و هبت‌های قوی الکترودنی

۲- نظریه میدان میانگین استاتیک

۳- نظریه مایع فرس لانداو

۴- تقریب ناز کاترالی

۵- نظریه تابش چگالی و فرمول بندی کوهن-شم

در صفحات بعد با اختصار در بار هر یک از این موضوعات صحبت خواهیم کرد و توضیح تفصیلی آن را به نوبه بعد مکتوب می‌کنیم.

## ہبٹل ضعیف weakly correlated

نوار ہیں  $\Leftarrow$  انٹری جنبش زیاد  $\Leftarrow$  الکترونا زمان کوتاہی

در مجاورت ہر ایک ایسا سپریس میں گنڈ  $\Leftarrow$  delocalized electrons

$\Leftarrow$  رفتار موج گونہ  $\Leftarrow$  تابع موجشان توسط

an effective one-particle periodic potential

قابل توصیف است  $\Leftarrow$  نظریہ میدان میاٹلین انتاشیک (MFT)

## ہبٹل قوی الکترونا Strongly Correlated Systems

نوار ہر ایک  $\Leftarrow$  انٹری جنبش کم  $\Leftarrow$  زمان طویل

در مجاورت ہر ایک ایسا سپریس میں گنڈ  $\Leftarrow$  الکترونا

میں تو انڈ localize سونہ  $\Leftarrow$  رفتار ذرہ گونہ

$\Leftarrow$  independent particle picture جائزیدگی

مجاز من دارد  $\Leftarrow$  استفاد از MFT مجاز نتیجہ

$\Leftarrow$  DFT با شکست مواجهہ میں مشورہ

## جمع بندی نظر فیزیکدانان قرن بیستم:

اگر الکترونیکی یک دستگاه بس ذراتی همبستگی ضعیفی دارند  
استفاده از  $DFT(KS)$  یا  $LFLT$  بجای

اما اگر بستر الکترون  $electron\ correlation$  قوی است  
بتر است الگوری با زیم که از ابتدا این همبستگی در  
ها میگذرد آن لحاظ شده باشد.

چارلز و گوتزویلر در سال ۱۹۶۳ مقاله همبستگی قوی  
الکترون مای-د در فلزات واسطه ای را بررسی کردند  
و کوشیدند  $model\ Hamiltonian$  (ها میگذرد الگوری)  
با زیم که این همبستگی مای قوی را در خود داشته باشد.

M.C. Gutzwiller, PRL, 10, 159 (1963)  
J. Hubbard, Proc. Royal Soc. of London  
A 276 (1963) 228; 277 (1964) 237

در حالت قبل مسئله لال کردیم که چگونه به حاصل میگذرد  
دری قوی رسید.

$$H = \sum_{\sigma} \sum_{\langle ij \rangle} t_{ij} C_{i\sigma}^{\dagger} C_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

این دو جمله با هم در رقابت اند. الکترونها وقتی بر هم  
دارند که درسی یک اتم نشسته باشند. در نتیجه به دلیل  
اصل طرد پائولی جمله دافس کولن به صورت  $U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$   
در می آید. بخش انرژی جنبش (جمله اول) به معنای انرژی الکترونی



# نظریه میدان میانگین استاتیکی (Static Mean Field Theory)

کار نظریه میدان میانگین اینست که

مشکلی شبکه ای با درجات آزادی زیاد را به مسئله single site effective problem تبدیل می کند.

بزبان دیگر

مشکل بس ذره ای با برهمکنش را هم ارزش دستکاری از شبکه ذرات بدون برهمکنش می گیرد.

مثال های از نظریه میدان میانگین استاتیکی (MFT)

۱- تقریب هارتری

$$U_{\text{eff}}(\vec{r}) = \frac{1}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r}'$$

۲- الگوری آیزنبرگ

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} S_i^z S_j^z - h \sum_i S_i^z$$

متوسط گرمایی مغناطیس در یک سایت شبکه  $m_i = \langle S_i^z \rangle$

$$H_{\text{eff}} = - \sum_i h_i^{\text{eff}} S_i^z$$

میدان وایس

$$h_i^{\text{eff}} = \sum_j J_{ij} m_j + h = h + z J m$$

$$m = \tanh(\beta h + 2\beta J m)$$

BCS - نظر - ۳

$$H_{BCS} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{kl} V_{kl} c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\downarrow}^\dagger c_{l\downarrow} c_{l\uparrow}$$

$$c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} = b_k + (c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - b_k)$$

$$b_k = \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle$$

$$H_{MF} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}$$

$$- \sum_k [\Delta_k c_{k\uparrow}^\dagger c_{-k\downarrow}^\dagger + \Delta_k^* c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} - \Delta_k]$$

پس از تبدیلات کانزنیگ بوجولیوف

$$H_{MF} = \sum_k [\epsilon_k - E_k + \Delta_k b_k^*]$$

$$+ \sum_k \epsilon_k [\gamma_{k\sigma}^\dagger \gamma_{k\sigma} + \gamma_{k\uparrow}^\dagger \gamma_{k\downarrow}]$$

$$\Delta_k = - \sum_{kl} V_{kl} \langle c_{-l\downarrow} c_{l\uparrow} \rangle = - \sum_{val} v_{el} b_l, \quad b_k = \langle c_{-k\downarrow} c_{k\uparrow} \rangle$$

DFT → LDA - ۴

حاصلیت در دستگاه با برعکس

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \psi_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) \left[ -\frac{\hbar^2}{2m_e} \nabla^2 + V_{\text{یون}} \right] \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

$$+ \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int d\vec{r} d\vec{r}' \psi_{\sigma}^\dagger(\vec{r}) \psi_{\sigma'}^\dagger(\vec{r}') V_{ee}(\vec{r}-\vec{r}') \psi_{\sigma'}(\vec{r}') \psi_{\sigma}(\vec{r})$$

$$V_{\text{یون}}(\vec{r}) = -e^2 \sum_c \frac{Z_c}{|\vec{r}-\vec{R}_c|}, \quad V_{ee}(\vec{r}-\vec{r}') = \frac{e^2}{2} \sum_{c \neq r, r'} \frac{1}{|\vec{r}-\vec{r}'|}$$

## Hartree Approximation

378

19

This approximation results in an Eq. for an electron moving in an average potential due to all other electrons.

One starts with an ansatz for the many electron wave function

$$\hat{H}\Psi = \frac{-\hbar^2}{2m} \sum_{l=1}^N \nabla_l^2 \Psi + \sum_{l=1}^N V_{ne}(\vec{r}_l) \Psi + \sum_{l < l'} \frac{e^2}{|\vec{r}_l - \vec{r}_{l'}|} \Psi = \epsilon \Psi,$$

$$\Psi = \prod_{\ell=1}^N \psi_{\ell}(\vec{r}_{\ell})$$

and uses the variational principle to find the extrema of the functional

$$E_{\text{H}}\{\Psi\} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle,$$

subject to the constraint that  $\langle \Psi | \Psi \rangle = 1$ .

$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_l + [V_{ne}(\vec{r}) + V_{ee}(\vec{r})] \psi_l = \epsilon \psi_l.$$

$$V_{ee}(\vec{r}) = \int d\vec{r}' \frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|},$$

where  $n$  is the number density of electrons

$$n(\vec{r}) = \sum_j |\psi_j(\vec{r})|^2.$$

میدان میانگین

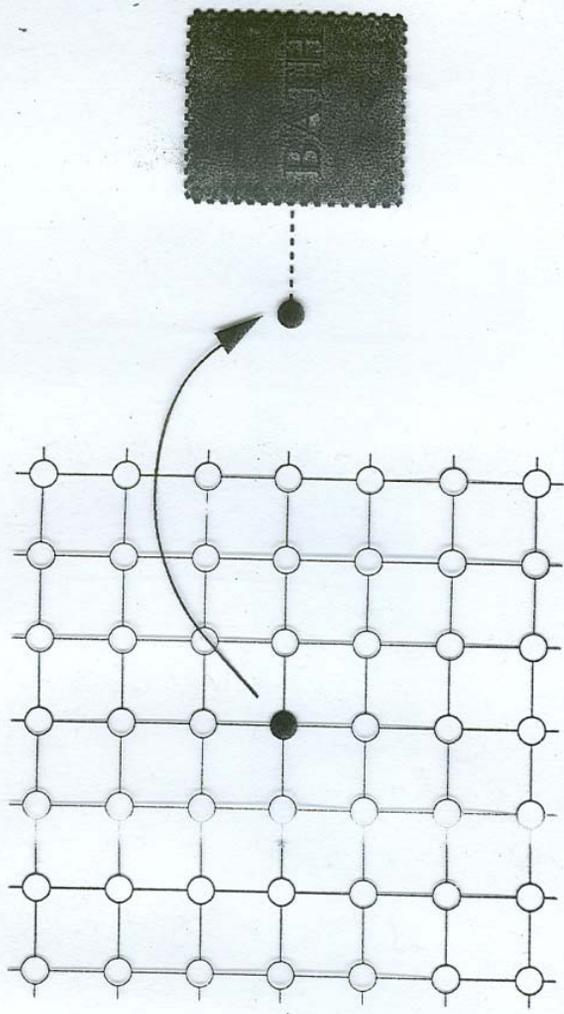


FIGURE 4. Mean-field theory replaces a lattice model by a single site coupled to a self-consistent bath.

ایده اصلی نظریه میدان میانگین، اینست که دینامیک مسئله در یک سایت معین را  
 به صورت برهمکنش بین درجات آزادی آن سایت با یک حمام بیرونی در  
 نظری میگیرد. حمام بیرونی شامل کلیه درجات آزادی مجموعه سایتهای دیگر است.