

گاز یا مایع الکترونی در یک - دو و سه بعد

ایدهٔ 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 الکترونهاست و بیرونی‌ترین پوسته الکترونی خود هستند. رویهم افتادگی این پوسته‌های الکترونی بیرونی قابل ملاحظه هستند. بنابراین، الکترونهاست این پوسته‌ها که به الکترونهاست والاند موسومند تعلق به اتم خاصی ندارند و در سراسر بلور پراکنده می‌زنند. این صورت جمع الکترونهاست والانس منجر به انرژی پیوندی بزرگی برای فلزات خواهد شد و جوامع الکترونی مکانیکی فلزات خواهد بود.

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

ساخت و پرداخت نظریه‌ای برای تبیین پدیده‌هایی که چنین دستگاهایی از خود به‌روز می‌دهند به نظر مشکل می‌رسد، چرا که از یکسو الکترونهاست والانس با یکدیگر برهمکنش دارند و از سوی دیگر در میدان ناشی از یونهاست حرکت 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 یونهاست را می‌توان به صورت زمینه یکنواختی از یارهای مثبت فرض کرد و از برهمکنش الکترونهاست با یکدیگر صرف‌نظر نمود. الگوی زومرفلد براساس این تقریب بنا شده است.

مرحله دوم - یونهاست را به صورت زمینه یکنواختی از یارهای مثبت در نظر می‌گیریم و برهمکنش الکترونهاست را بحساب می‌آوریم، این همان الگوی ژله‌ایست.

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

مرحله چهارم - برای بمیان آوردن حرکت دینامیکی یونهاست، 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 برهمکنش‌اند، 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 ذره 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 ما است. 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 دیواره 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 $\exp(i k_x L) = \exp(i k_y L) = \exp(i k_z L)$ است.

بنابراین

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

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 باین ترتیب درست می‌شود که اول دو الکترون با اسپینهای متفاوت در

پائین ترین حالت و سپس دو الکترون در ^{پایه}حالت‌های بعدی قرار می‌گیرند و باین ترتیب با رعایت اصل طرد پائولی حالت‌های با کمترین انرژی کاملاً "پُرشوند". 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 پُر می‌شود 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

$$\frac{4\pi}{3} r_0^3 \cdot N = V, \quad \frac{1}{n} = \frac{4\pi}{3} r_0^3, \quad r_0 = r_s \alpha_0$$

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

رابطه بین k_F و r_s عبارت از

$$k_F = \frac{(9\pi/4)^{1/3}}{r_s \alpha_0} = \frac{1.92}{r_s} \alpha_0^{-1} = \frac{3.63}{r_s} \text{Å}^{-1}$$

$$v_F = \left(\frac{\hbar}{m} \right) k_F = \frac{4.20}{r_s / \alpha_0} \times 10^8 \text{ cm/sec} \quad 2-$$

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

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

$$\mathcal{E}_F = \frac{2 \cdot 21}{r_s^2} \quad \text{مرحله بزرگ}$$

۵- اگر دمای T_F به صورت $\mathcal{E}_F = k_B T_F$ 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 می‌شود که کارکردن در دمای $T=0$ تقریب بدی نیست.

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

بر اساس این الگو می‌توان نشان داد که

۶- گرمای ویژه فلزات در دماهای پائین با دما بطور خطی تغییر می‌کند

$$C_V \propto T$$

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

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

$$B = 1/\kappa = -V \frac{\partial P}{\partial V}, \quad P = -\frac{\partial E}{\partial V}, \quad E = \frac{3}{5} N \mathcal{E}_F$$

نلز	Li	Na	K	Cu	Al	
نظری B	23.9	4.23	3.19	63.8	22.8	$\times 10^{10} \text{ dynes/cm}^2$
تجربی B	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 می‌توان محاسبه کرد که از آن جمله‌اند

الف - ضریب هال

ب - مقاومت مغناطیسی *magnetoresistance*

ج - هدایت الکتریکی و نشان داده بین داده‌های تجربی بین‌های نظری

د - عدم تطابق چشم‌گیری وجود دارد. پیشنهاد می‌کنم فصل‌های ۱-۲-۳ کتاب *Aschcroft* و

Mermin را بخوانید و ریزه‌کاریها و اشکالات این الگو را بیان کنید.

یکی از اشکالات بدیهی در نظرگرفتن برهمکنش الکترونها با یکدیگر است که می‌خواهیم

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 کوانتس بنویسیم.

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

۳- به فرمولبندی که ما را از هامیلتونی اولین کوانتس به هامیلتونی دومین کوانتس 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 یا 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 نمایشی در برهمکنش کوانتی پدانهت ظاهر شد که جملات فوق در حد ترمودینامیکی یعنی $N \rightarrow \infty$ ، $V \rightarrow \infty$ و $n = \frac{N}{V} = \text{const}$ بینهایت می‌شوند ولی در حد μ های غیر صفر

مقادیرشان محدود بوده و مشکل ریاضی بوجود نمی‌آورند. عبارت دیگر این کلک ریاضی

است و مارنهایت مقدار μ 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 μ معادل

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

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

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

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

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

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

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 می رسد و بنابراین هیچ گونه تبعاعی در اصل مسئله وجود ندارد. **ما باید در مجموع متباعد نمی شود.** حال می پردازیم به قسمت دوم یعنی محاسبه المانهای ماتریسی. چنانکه گفته شد ابتدا باید تابع موج ψ را محاسبه کنیم.

در یک محیط یکنواخت 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.**

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

η_λ 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 بنا 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

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

عناوين

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

$$= \frac{\hbar^2 k_2^2}{2m} \delta_{\lambda_1, \lambda_2} \delta_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}$$

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

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

اینک المان ماتریسی انرژی پتانسیل را حساب می‌کنیم

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

$$= \frac{e^2}{V^2} \iint d^3x_1 d^3x_2 e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{x}_1} e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{x}_2} \eta_{\lambda_1}^\dagger \eta_{\lambda_2}^\dagger$$

$$\frac{e^{-\mu |\vec{x}_1 - \vec{x}_2|}}{|\vec{x}_1 - \vec{x}_2|} e^{i\vec{k}_3 \cdot \vec{x}_1} e^{i\vec{k}_4 \cdot \vec{x}_2} \eta_{\lambda_3} \eta_{\lambda_4}$$

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

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

$$\frac{e^2}{V^2} \int d^3x \exp[-i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) \cdot \vec{x}]$$

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

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

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

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

$$\begin{aligned} \vec{k}_1 &= \vec{k} + \vec{q} & \vec{k}_3 &= \vec{k} \\ \vec{k}_2 &= \vec{p} - \vec{q} & k_4 &= p \end{aligned}$$

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

اگر واحد طول را r_0 بگیریم، در آن صورت داریم

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

و هامیلتونی بصورت زیر در می‌آید

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

از این فرمول براحتی دیده میشود که در حد $r_s \rightarrow \infty$ 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 دستگای را بصورت توانهایی از r_s در حد $r_s \rightarrow \infty$ 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 متباینترین جملات نمودارهای فاینمن در محاسبه انرژی حالت پایه را جمع کنیم به نتیجه محدودی می‌رسیم و نشان خواهیم داد که در حد چگالیهای زیاد

$$E_g = \frac{Ne^2}{a_0 r_s^2} (a + b r_s + c r_s^2 \ln r_s + d r_s^2 \dots)$$

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 ($6 < r_s < 2$) 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 α و β را حساب کنیم. در حد چگالیهای زیاد دیدیم که می‌شود هامیلتونی را به دو تکه تقسیم کرد.

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

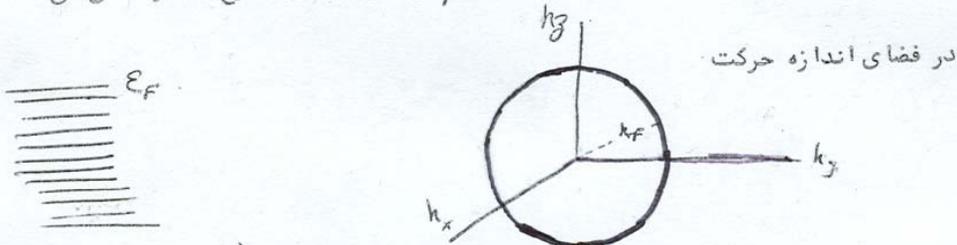
$$\hat{H}' = \frac{e^2}{2V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}, \vec{p}, \lambda_1, \lambda_2} \frac{4\pi}{q^2} a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1}$$

\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

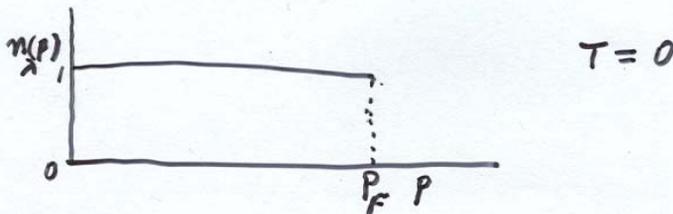
$$E = E^{(0)} + E^{(1)} + E^{(2)} + \dots$$

نوشت که در آن $E^{(1)}$ انرژی دستگاه نرات 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 ϵ_F کثیممی 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 قاعده 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

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

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

$$3\pi^2 n_0 = k_F^3 \quad \text{یا} \quad k_F = \left(\frac{9\pi}{4} \right)^{1/3} n_0^{-1} = \frac{1.92}{r_s}$$

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

محاسبه $E^{(0)}$

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

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

$$E^{(0)} = \frac{e^2}{2a_0} N \frac{2 \cdot 21}{r_s^2}, \quad \epsilon = \frac{2 \cdot 21}{r_s^2}$$

ε 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'' ، یعنی تغییر مرتبه اول در انرژی حالت پایه می‌دانیم که بنا بر نظریه اختلال

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

است. اولاً بدیهی است که حالت‌های \vec{k} و \vec{p} 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 اینصورت به هنگام عمل روی $\langle \varphi |$ به صفر خواهند انجامید. ثانياً این همان ماتریسی وقتی صفر نخواهد بود که نتیجه $\langle \varphi | a_{\vec{k}+\vec{q}, \lambda_1}^\dagger a_{\vec{p}-\vec{q}, \lambda_2}^\dagger a_{\vec{p}, \lambda_2} a_{\vec{k}, \lambda_1} | \varphi \rangle$ معادل وضعیت باشد و یکتا \vec{k} و \vec{p} وجود 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:

$$\begin{aligned} \vec{k} + \vec{q}, \lambda_1 &= \vec{k}, \lambda_1 & \vec{k} + \vec{q}, \lambda_1 &= \vec{p}, \lambda_2 \\ \vec{p} - \vec{q}, \lambda_2 &= \vec{p}, \lambda_2 & \vec{p} - \vec{q}, \lambda_2 &= \vec{k}, \lambda_1 \end{aligned}$$

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

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

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

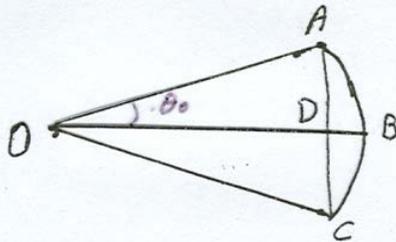
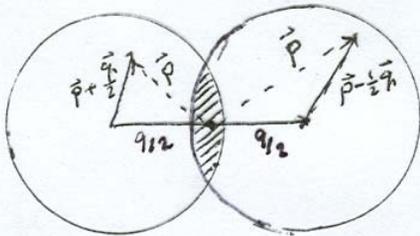
$$= -\frac{e^2}{2V} 4\pi \sum_{kq\lambda} q^{-2} \theta(k_F - |\vec{k} + \vec{q}|) \theta(k_F - |\vec{k}|)$$

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

بدلیل اسین θ(k_F - k) صریح

اگر $\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \frac{\vec{q}}{2}$ برود
~~اگر $\vec{q} \rightarrow \frac{1}{2}\vec{q}$ برابر \vec{k} 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 هاشور زده شده و انتگرال روی \vec{p} معادل بدست آوردن حجم هاشور زده است.

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

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

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

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

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

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 ~~فیزیک بس فرملی~~ توضیح دادم می توان انرژی تبادل را بکمک تابع همبستگی دوتایی pair correlation function حساب کرد.

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

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:

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

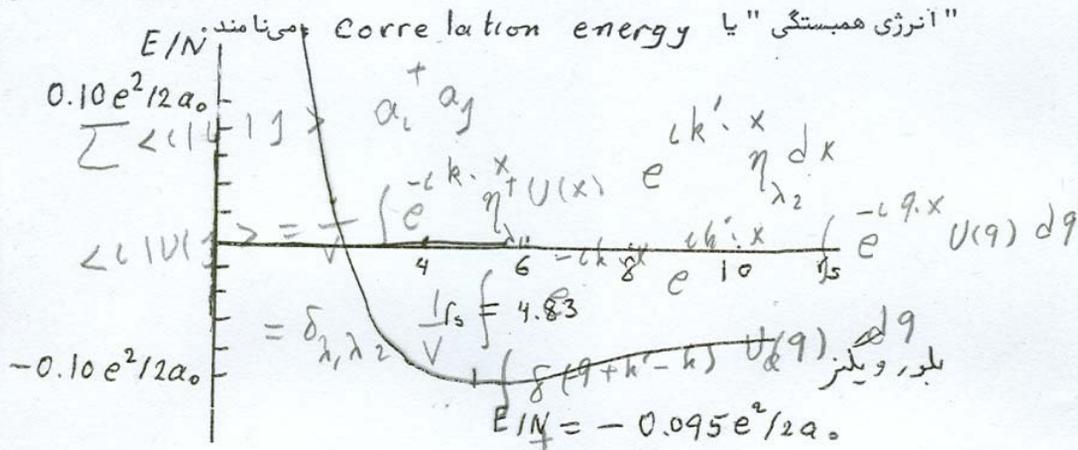
$J_1(x)$ تابع بسل کروی مرتبه اول است.

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

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

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 تبدیلی 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 "تبدیلی" بود. بنا به تعریف باقیمانده انرژی دستگاه N - ذره‌ای الکترونی را



اولاً "منحنی می‌نیمیم یار" یعنی فقط با احتساب اختلال مرتبه اول دیده می‌شود که دستگاه مقید است. بعبارت دیگر اگر تابع موج دستگاه را $\psi(\mathbf{r})$ تابع موج ضربات بدون برهمکنش در نظر بگیریم دستگاه را بدلیل عملکرد اصل طرد پائولی مقید می‌شود. جالب 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 $r_s = 3.9$ است و انرژی در واحد ذره آن مساوی $E/N = -1.13 eV$ می‌باشد.

باین ترتیب دیده می‌شود که این الگوی ساده بخش اعظم انرژی پیوندی فلز را پیشگویی می‌کنند. 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.

$$B = -V \frac{\partial P}{\partial V} = \frac{Ne^2}{2a_0} \frac{2}{9V} \left[\frac{5(2.21)}{r_s^2} - \frac{2(0.916)}{r_s} \right]$$

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:

$$\frac{E}{N} = \frac{e^2}{2a_0} \left[-\frac{1.79}{r_s} + \frac{2.66}{r_s^{3/2}} \dots \right]$$

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 می‌شدیم 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.

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

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

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

۳- ما از آنجهت موج تخت برای تناوب تک ذره به کار بردیم که الگوی الکترون آزاد در تقریب اول به نتایج کیفی خوبی میرسید. مثلاً گرمای ویژه با دما بطور خطی تغییر می‌کند 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 برکزیده‌اند (*localized*) و جایشان روی اتمهای معین بوده و تنها هر از گاهی به یون مجاور می‌پرند. الگویی که چنین وضعیتی را در نظر میگیرد موسوم به الگوی پیوند قوی یا *tight-binding model* است. شکل ساده‌ای از این الگو می‌تواند بصورت زیر باشد

$$H = \sum_{i, \delta} t_{i, \delta} c_{i, \delta}^{\dagger} c_i = \sum_{i, \delta} t_{i, \delta} c_{i, \delta}^{\dagger} c_i$$

اندیس i نشانگر مکان R_i شبکه‌ای و δ نشانگر موضع نزدیکترین همسایه به اتم i است. می‌توانیم المان ماتریسی $t_{i, \delta}$ را بصورت

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

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

جمله $t_{i, \delta}$ وقتی $\delta \neq 0$ است نمایشگر روندهایی است که در آنها الکترون از مکان $i + \delta$ به مکان i می‌پرد. $t_{i, \delta}$ مربوط می‌شود به انرژی موضعی و یا *site energy*. اصطلاحاً "hamiltonian های *bilinear* دقیقاً" قابل حل‌اند.

در اینجا

$$c_{j, \sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot R_j} c_{\mathbf{k}, \sigma}$$

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

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

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

در آن صورت داریم

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

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

معمولاً پروسه به نزدیکترین همسایه با در نظر گرفته می شود. دید می شود که به حاملین ذراتی از شباهت حاملین الکترون های بدون برهمکنش و یا فونون های بدون برهمکنش رسیدیم. به عبارت دیگر مسئله ما در اینجا عیناً شباهت مسئله فرمیون های بدون برهمکنش (الگوری زومرله) است. هر یک از ذراتی که به صورت یک فرمیون مستقل عمل می کنند.

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

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

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

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

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

با این رابطه پراش، محاسبه انرژی حالت پایه، گرمای ویژه و طول جبر، فشار و غیره به صورت آسان انجام می 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.

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

Ω حرف grand potential است و از آن می‌توان کمالات درشت استاندارد شد 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.

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

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

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

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

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

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

گفتیم در الگوی تنگ بست (TBM) الکترون ها مستقیماً از یکدیگر
 عمل می کنند. اما در عمل، رفتار الکترون ها همیشه این گونه نیست.
 اصل طرد پائولی می گوید اگر الکترونی با اسپین معین در اوربیتال
 معین اتم حضور داشته باشد، الکترونی با همان اسپین
 نمی تواند به آنجا برود. به عبارت دیگر هر پیرس مجاز نیست و
 حرکت الکترون ها به یکدیگر همبسته اند (are correlated)
 این همبستگی از یک سو به دلیل پادمتقارن بودن تابع موج و
 از سوی دیگر به دلیل برهمکنش بین آنهاست.
 به منظور به میان آوردن آثار برهمکنش در الگوی تنگ بست
 به جمله برهمکنش

$$\frac{1}{2} \sum V_{ij} m_l C_i^\dagger C_j^\dagger C_p C_m$$

می نگریم. این بار به دلیل آن که الکترون های جاگزین به
 ردی اتمی مورد نظرند، عبارت $V_{ij} m_l$ عبارت از

$$V_{ij} m_l = \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \mathcal{P}^*(r_1 - R_i) \mathcal{P}(r_2 - R_j) \\ \times \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} \mathcal{P}(r_2 - R_m) \mathcal{P}(r_1 - R_l)$$

چهار اوربیتال موجود در اشتغال فوق می تواند در حول جوش
 مرکز چهار اتم متفاوت تمرکز یافته باشند (اشتغال های چهارگانه).
 در این صورت مقدار ماتریس برهمکنش بسیار کوچک و در نتیجه
 قابل صرف نظر است، چرا که رویم اتفاقاً توابع موج ناچیز است.

ما به دنبال حفظ جلاقی هستیم که بیشترین تأثیر را دارند. در تمام
 معیاری برهکنش دو ذره‌ای را در نظریه گیریم که ردی دو اتم
 متفاوت نبوده اند. مثلاً اگر $c = m$ ، $l = \rho$ باشد، برهکنش
 کوئین به صورت

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

ردی آن به علامت $i \neq j$ برای آنت که ذره با خودش
 برهکنش نداشته باشد. تعریف V_{ij} به صورت زیر است:

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

حاصل می‌شود

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

مانند حاصل می‌شود که از شبکه‌ای است که در ارتباط با یک
 دستگاه اسپین مطرح می‌شود. در این مورد بیشتر
 توضیح داد خواهد شد

الگوری‌ها بارد

ها بارد، در سال ۱۹۶۳ الگوری‌ها معرفی کرد که ما آن را به نام
 الگوری‌ها بارد می‌شناسیم. در این الگوری‌ها آن دسته از
 اشکال‌های کوئین حفظ می‌شود که بیشترین صدها را دارند
 و این وقت است که هر چهار اوردیال ردی یک اتم متمرکز شده اند.

به این ترتیب برهکنش 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 الگوی هامبارد به صورت زیر در می آید:

$$\hat{H} = t \sum_{\substack{\lambda, \delta \\ \delta \neq 0}} c_{\lambda}^{\dagger} c_{\lambda + \delta} + t_0 \sum_{\lambda} n_{\lambda} + U \sum_{\lambda} n_{\lambda \uparrow} n_{\lambda \downarrow}$$

در اولین جلد، تنها پیش به نزدیکترین همسایه ها در نظر گرفته شده است. تاکنون کوشش های زیادی برای حل الگوی هامبارد صورت گرفته است و این کوشش ها همچنان ادامه دارد.

در اینجا باید متذکر شد که گوتزویلر (Gutzwiller) نیز مستقل از هامبارد، به هنگام مطالعه خواص نوار d ی مزدخانیس ها این الگورا معرفی کرد. بهر حال، مطالعه این الگورا با سایل تحقیق روز روبرو 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 هامیلتون اراده مییم که در آن این ویژگی ها لحاظ شده باشند. مثلاً در نظریه ابررساناها BCS هامیلتون این اراده می شود که در آن جفت های کوپر منظور شده است.

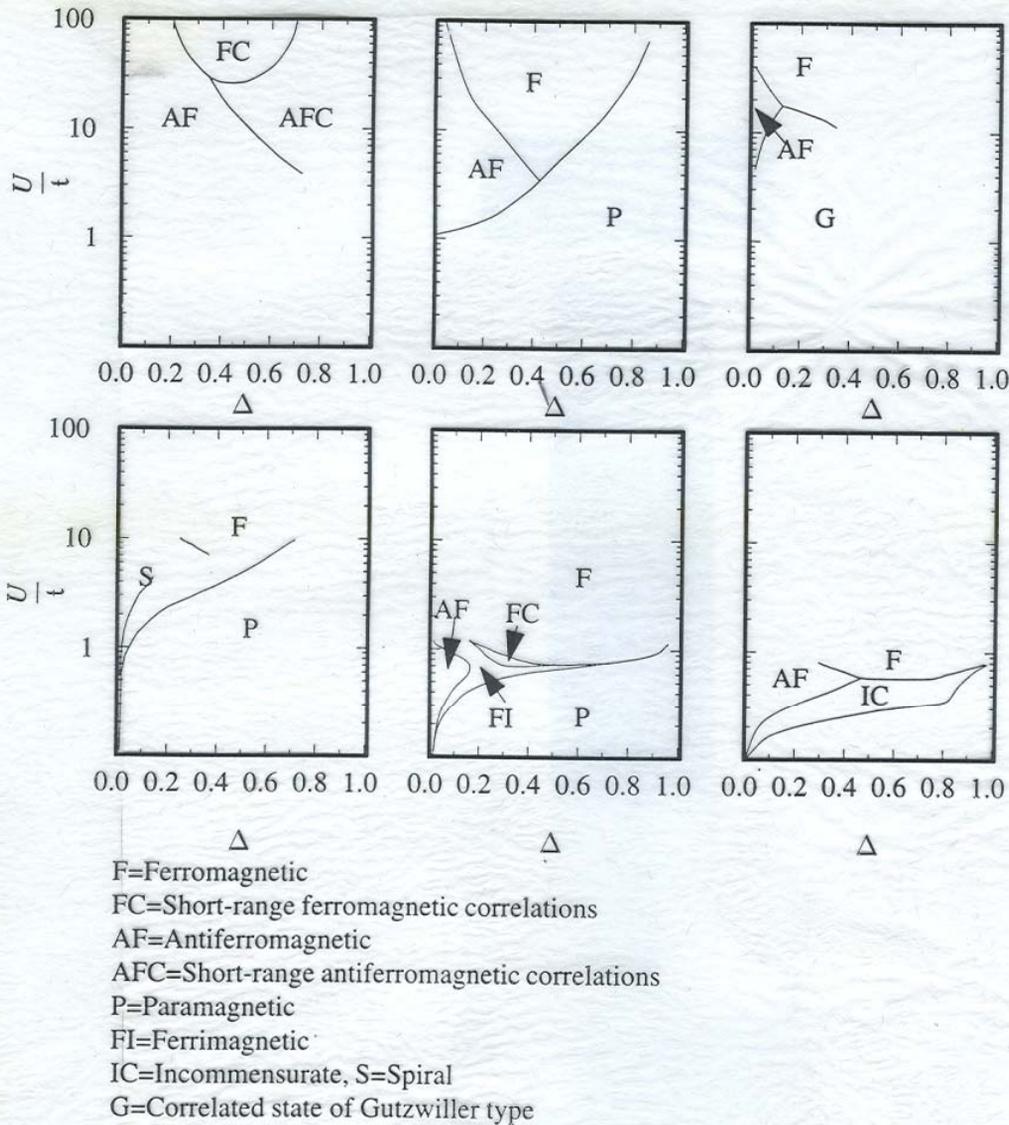


Figure 26.9. Six representative phase diagrams of the two-dimensional Hubbard model, as a function of on-site repulsion U over hopping parameter t , and filling fraction Δ , which tells the fraction of sites that has more than one electron. In the absence of reliable controlled approximations, researchers 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 طرز خلاصه، مسئله حل دستگاه‌های بس ذره‌ای باینجا ختم می‌شود که ما چگونه الکترونی هامیلتونی می‌سازیم که متجزی‌ناپذیر و ویژگیهای دستگاه مربوطه نشود. البته گاه پیش می‌آید که هر الگوی هامیلتونی براحتی قابل فهم و حل نیست. از اینرو تکنیکهای خاصی توسعه و گسترش پیدا می‌کند که خود راهگشایی برای حل مسائل دیگر دستگاه‌های بس ذره‌ای است و از سوی دیگر مورد استفاده فیزیکدانان در قسمتهای دیگر قرار می‌گیرد. بعنوان مثال میتوان از اثر کاندرو نام برد.

تا اینجا با الگرای زیر و هامیلتونی آنها آشنا شدیم:

- ۱- الگوی زوحرمله

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

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

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

Tight-binding model

- ۳- الگوی تنگ-بند

$$\hat{H} = \sum_{i \neq j} t_{ij} c_i^\dagger c_j$$

Lattice gas model الگوی شبکه‌گازی

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

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 الگوریتمی زومر فله و تنگ - بت دقیقاً قابل حل اند.

سؤال: آیا می توان با تقریب خوبی هامیلتونن های دیگر

را به صورت هامیلتونن های زومر فله یا تنگ - بت

در آورد؟ به عبارت دیگر آیا می توان هامیلتونن

دستگاه های با برعکس را با تقریب خوبی هم ارز هامیلتونن

دستگاهی از شبه ذرات بدون برعکس 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 مینزیکلن) بیا انجامد.

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

از تقریب فوق الذکر مرسوم به تقریب میدان میانگین استاتیک

استناد می شود.

هامیلتونن BCS را با استناد از تبدیل های بوگولوبوف

می توان به صورت هامیلتونن جهت ذرات بدون برعکس

در آورد. با استناد از RPA می توان الگوریتمی

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

و بالاخره، فرض اساس DFT-KS اینست که ^{برای} دستگاه فرمیونی

با برعکس یک دستگاه بدون برعکس هم ارز وجود دارد.

۵۹
در نظریه مایع فزنی (FLT) از شبه ذرات با برهمکنش ضعیف
صحبت می شود

این نوع تقریب را تقریب میدان میانگین می نامند و
در موارد متعددی در جای 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 هامبارد، گاندو و اندرسون به
درستگاه های تعلق دارند که همبستگی الکترون های آن قوی است. این
نوع مایل را نمی توان با استناد از تقریب میدان میانگین
استنتاجی حل کرد. در این موارد از نظریه میدان میانگین
دنیا میکن (DMFT) و یا نظریه های غیر اختلاص استناد
خواهد شد. در این باب، به تفصیل صحبت خواهیم کرد.

در چند صفحه اخیر به موضوعات زیر اشاره شد

۱- هبتهای صنعت و هبتهای قومی الکترودین

۲- نظریه میدان میانگین استاتیک

۳- نظریه مایع غرض لاندائو

۴- تقریب ناز کاترادی

۵- نظریه تابش چگالی و مزولندی کوهن-شتم

در صفحات بعد با اختصار در بار هر یک از این موضوعات صحبت خواهیم کرد و توضیحات تفصیلی آن را در نوبت بعد موقوف می‌کنیم.

ہبٹنگ ضعیف weakly correlated

نوار پین \Leftarrow انٹری جنبش زیاد \Leftarrow الٹرنٹا زمان کوتاہی
 در مجاورت ہر ایک اتمہ سپری میں کھنڈ \Leftarrow delocalized electrons
 \Leftarrow رفتار موج گونہ \Leftarrow تابع موجشان توسط

an effective one-particle periodic potential

قابل توصیف است \Leftarrow نظریہ میدان میانگین استاتیک (MFT)

ہبٹنگ قوی الٹرنٹا Strongly Correlated Systems

نوار باہر یک \Leftarrow انٹری جنبش کم \Leftarrow زمان طویل
 در مجاورت ہر ایک اتمہ سپری میں کھنڈ \Leftarrow الٹرنٹا
 میں توانڈ localize سونڈ \Leftarrow رفتار ذرہ گونہ
 \Leftarrow independent particle picture جائزیدگی را

جائز من دارد \Leftarrow استناد از MFT جائزیت

\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 $LFLT$ بجاست

اما اگر بخواهیم الکترونیکی $electron\ correlation$ قوی است
بجاست الکترونیکی با زیمیم که از ابتدا این همبستگی در
همبستگی آن لحاظ شده باشد.

حاجار د و گوتزویلیر در سال ۱۹۶۳ مقاله همبستگی قوی
الکترونیکی ماس - d در فلزات واسطه اسی را بررسی کردند
و کوشیدند $model\ Hamiltonian$ (همبستگی الکترونیکی)
با زیمیم که این همبستگی ماس 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 جلسات قبل استدلال کردیم که چگونه به همبستگی حاجار د
رسی توان رسید.

$$H = \sum_{\sigma, \sigma'} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma'} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

این دو جمله با هم در رقابت اند. الکترونیکی وقتی بر همبستگی
دارند که ادرسی یک اتم نشسته باشند. در نتیجه به دلیل
اصل طرد پائولی جمله دافنس کولن به صورت $U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$
در می آید. بخش انرژی جنبشی (جمله اول) به عنوان اثرش الکترونیکی

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.

زبان دیگر

مشکل بس ذره ای با برهمکنش را هم ارز دستگامی از شبکه ذرات بدون برهمکنش می گیرد.

مثال های از نظریه میدان میانگین استاتیکی (MFT)

۱- تقریب هارتری

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

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 $m_c = \langle S_i^z \rangle$

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

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

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

۳ - نظر: BCS

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

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

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

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

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

پس از تبدیلات کانزنیگ بوجولیوف

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

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

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

DFT \rightarrow LDA - ۴

حالیتون دستگاه با برکنش

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

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

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

Hartree Approximation

378

14

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

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

$$\Psi = \prod_{l=1}^N \psi_l(\vec{r}_l)$$

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

$$F_{\mathcal{H}}\{\Psi\} = \langle \Psi | \hat{H} | \Psi \rangle,$$

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

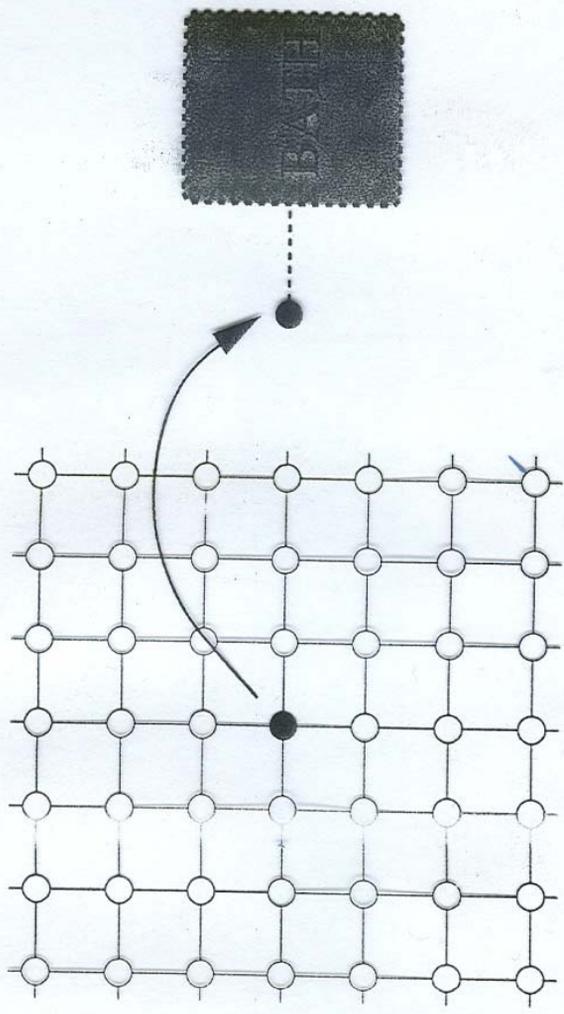
$$\frac{-\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_l + [V_{ne}(\vec{r}) + V_{ee}(\vec{r})] \psi_l = \epsilon \psi_l.$$

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

where n is the number density of electrons

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

میدان میانگین



۹۵ ۴۸۸

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 سگله در یک سایت معین را به صورت برهمکنش بین درجات آزادی آن سایت با یک حمام بیرونی در نظری می گیرد. حمام بیرونی شامل کلیه درجات آزادی مجموعه سایت های دیگر است.