

Thomas - Fermi Theory

A precursor theory to the density functional theory

In this theory one starts with the known relations for the homogeneous electron gas and uses these relations locally for a many electron system.

Non interacting electrons in a huge box form a homogeneous gas

To the first approximation, electrons moving in presence of a uniformly distributed positive charged background can be considered as a

Homogeneous electron gas

E_F = Fermi energy, $\hbar k_F$ = Fermi momentum

statistical mechanics implies

$$n_0 = \frac{N}{V} = 2 \left(\frac{\frac{4\pi}{3} P_F^3 V}{h^3} \right) / V = \frac{8\pi P_F^3}{3h^3}$$

or $3\pi^2 n_0 = k_F^3$

Next we divide the inhomogeneous electron system into small portions and regard each small portion as a HEG.

$$3\pi^2 n(r) = k_F^3(r)$$

probability of finding an electron at a point \vec{r} with momentum between p and $p+dp$

$$\text{is } I(p) dp = \frac{4\pi p^2 dp}{\frac{4\pi}{3} P_F^3(r)} = \frac{3p^2 dp}{P_F^3(r)}, p \leq P_F$$

$$I(p) dp = 0 \quad \text{otherwise}$$

Kinetic energy per unit volume

$$T[n] = \int_0^{P_F} n(\vec{r}) \frac{p^2}{2m} \frac{3p^2 dp}{P_F^3(r)}$$

$$T[n] = C_k [n(r)]^{5/3} \quad C_k = \frac{3h^2}{10m} \left(\frac{3}{8\pi}\right)^{2/3}$$

The potential energy is

$$e \left\{ n(\vec{r}) V_N(\vec{r}) d\vec{r} + \frac{e^2}{2} \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d\vec{r} d\vec{r}' \right\}$$

$$E_{el} = C_k \int [n(r)]^{5/3} d\vec{r} + e \left\{ n(r) V_N(\vec{r}) dr + \frac{e^2}{2} \int \frac{n(\vec{r}) n(\vec{r}')}{} d\vec{r} d\vec{r}' \right\}$$

Density Functional Theory

In 1964 Hohenberg and Kohn proved two theorems which provided a firm ground for the conjecture used in TFT.

فناوری هربرگ و کوئن

Theorem 1. The external potential $V(\vec{r})$ and the wave func. of a nondegenerate many electron system is uniquely determined by the density distribution $n(\vec{r})$

Theorem 2. There is a universal energy functional of density which assumes its minimum when the density is the ground state density

Next, we have to specify the energy functional

$$E_{eq}(\rho) = T_s + V_{en} + V_{ee} + V_{nn} + E_{xc}(\rho)$$

از روی سیا دلی - هر چهارمین اکثر داد برهانی اکثر داد از روی جنی ks

Exc^n contains all the quantum mechanical many body effects.

Local Density Approximation

The quantum mechanical calculations of energy per particle for the homogeneous electron gas

(HEG) are known (see Ceperly Alder Monte Carlo calculations and the various interpolations based on their results). Thus

$$E_{xc}[P] = \int_P(r) \epsilon_{xc}^h [P(r)] d\vec{r}$$

The same idea of applying the MEG results locally, applies in here.

۱۹ DFT ۴۴۷/۱

فرض اساس خرمالیم کوهن - شم (KS) در اینست که " دستگاه بس ذره ای با برهمکنش را می توان هم ارزیک دستگاه شبیده ذرات بدون برهمکنش پنده است" این شبیده ذرات تحت تأثیر یک تپانیل متوثر $V_{\text{eff}}(r)$

این فرض همان تقریب است که در نظریه میانگین Mean Field Theory

طابت این فرض و دریم

$$\hat{H} = \sum_{\sigma} \int \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{x}) [T_s(x) + V_{\text{eff}}(x)] \hat{\Psi}_{\sigma}(x) d^3x$$

برای ملزات (جاذبهای)، اعماق، مرکوزها و غیره

$$V_{\text{eff}}(r) = V_{\text{coul}}(r) + V_H(r) + V_{xc}[\rho(r)]$$

$$V_H(r) = \frac{1}{2} \int \frac{\rho(r') d^3r'}{|r-r'|}, \quad V_{xc}[\rho(r)] = \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(r)}$$

کلیه آثار کوانتومیم \rightarrow $V_{xc}[\rho(r)]$ یا $E_{xc}[\rho]$ نشسته است.

اینک یک حل معادلات حزد سازگار KS می توانیم در این تقریب جواب دقیق دستگاه شبیده ذرات بدون برهمکنش را پیدا کنیم و ویژه تر از این شبیده ذرات، اخیراً حالت پایه دستگاه و تابع صفحه حالت پایه شبیده ذرات را می توانیم کنیم.

این حاسیلتمن در تقریب LDA هم ارز حاسیلتمن زیر مرض میگردد

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

این حاسیلتمن شبیه ذرات به عن برآورده است که تحت تأثیر
تپاوتیل شرکت زیر قرار دارند

$$V_{eff}(r) = V_{\text{یون}}(r) + \int d\vec{r}' V_{ee}(r-r') \rho(r') + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(r)}$$

تقریب صیغه ای این صنایعیگان و قدر مناسب است که
دستگاه همچنان الکترونی ضعیف داشته باشد.

مایعی مزی

خرمیدن: ذرات را با اسپین $\frac{1}{2}$, $-\frac{3}{2}$

مایع مزی: ذرات تکلیل دهنده مایع مزی خرمیدن نباشد

مثال: a) - مایع هلیوم-۳، ${}^3\text{He}$

b) - ماده هسته‌ای - ستاره در مروزن

c) - گاز الکترونی $\rightarrow n$ بعده

$$n = 0, 1, 2, 3$$

(گاز) مایع مزی برون بر چشم

$T = 0$ توسط سطح مزی، انرژی مزی درد برخی
نمی‌شود.

$$C_V^o = \frac{\pi^2}{3} N(0) T \quad \text{گرمایی دیرزه}$$

$$\chi_s^o = \mu_0^2 N(0) \quad \text{بنزرفواری مغناطیس}$$

$$K^o = N(0) / n^2 \quad \text{ضریب تراکم بنزیری}$$

$$N(0) = \frac{m k_F}{\frac{h^2}{4\pi^2} \pi^2} = \sum_p \delta(\epsilon_p - \mu - \epsilon) \quad \text{چگالی حالت}$$

Density of states

نظریہ مایع مریز لانڈاو Landau Fermi Liquid Theory

تعریف مایع مریز مزمال: با حضور برھمنش بین ذرات،
بمقابلہ مایع مریز مزمال نسبت ہے

حالت بدون برھمنش تغیر اساس اس نہ کرے۔

الف: مایع سطح مریز تعریف ملے اس دار در و توزیع کیا ہے اس دی طبع فریز

ب: آگر ہائی ویژہ درجہ حریق نامہ در دمایاں با پیش بصری خطر
تغیریں کرے

ج: پذیرفتاری مختلطیں متعدد ثابت اختیاریں کرے (رمائی پائیں)

د: صزیب تراکم پذیری " "

طبق نظریہ لانڈاو کہ در ۱۹۵۶ میلادی اسلام

اگر برھمنش بصری آریا بائیک برقرار سود، رابطہ اسی
یک بیک بین حالتاں ویژہ درستگاہ بدون برھمنش

وابا برھمنش برقرار سود۔

میں بعض
میں بعض

مردوں نے اور کہ ہیٹھ چنیں رابطہ اسی برقرار رکھئے۔ (ابرہنایم)

امزجی آزاد F
امزجی سبہ ذرہ

$$F - F_0 = \sum (\epsilon_p - \mu) \delta n_p + \sum_{pp'} f_{pp'} \delta n_p \delta n_{p'}$$

$$\delta n_p = n_p - n_p^0$$

n_p توزیع ذرات بائنة ازه حرکت \vec{p}
 n_p^0 " " " در حالت پایی

$f_{pp'}$ برھمنش بین سبہ ذرات راستھیں کرے

با ترجمه به تقارن انعکاس زمان Time reversal symmetry
 رهایی تغیر دستگاه تها سوئله کسی ستارن و پارامتران
 (اکسپینها کی مولازی و ناسو ازی) باقی می سانند رس توان
 آنرا بر حسب چند جمله ای کی لورانز ربط دارد

$$f_{PP'}^{S(a)} = \sum_{l=0}^{\infty} f_l^{S(a)} P_l(\cos \xi)$$

$$N(0) f_l^{S(a)} = F_l^{S(a)} \quad \text{بار استریکی دارد}$$

$$C_V = \frac{m^*}{m} C_V^0$$

$$\chi_s = \frac{m^*/m}{1 + F_0} \chi_s^0$$

$$\kappa = \frac{m^*/m}{1 + F_0^s} \kappa^0 \quad , \quad \frac{m^*}{m} = 1 + F_1^s / 3$$

$$\tau \propto T^{-2}$$

$$\sigma = n e^2 \tau / m \propto T^{-2}$$

$$\rho \propto T^2 \quad \text{as } T \rightarrow 0$$

$$R_H = -\frac{1}{nec}$$

این روابط براحتی مذکور می شوند و مایع همیشمه نتایج خوبی
 بدست مده و با نتایج تجربی مطابق دارد.
 نظریه لانداو کیک نظریه فنز منزک دریک است.

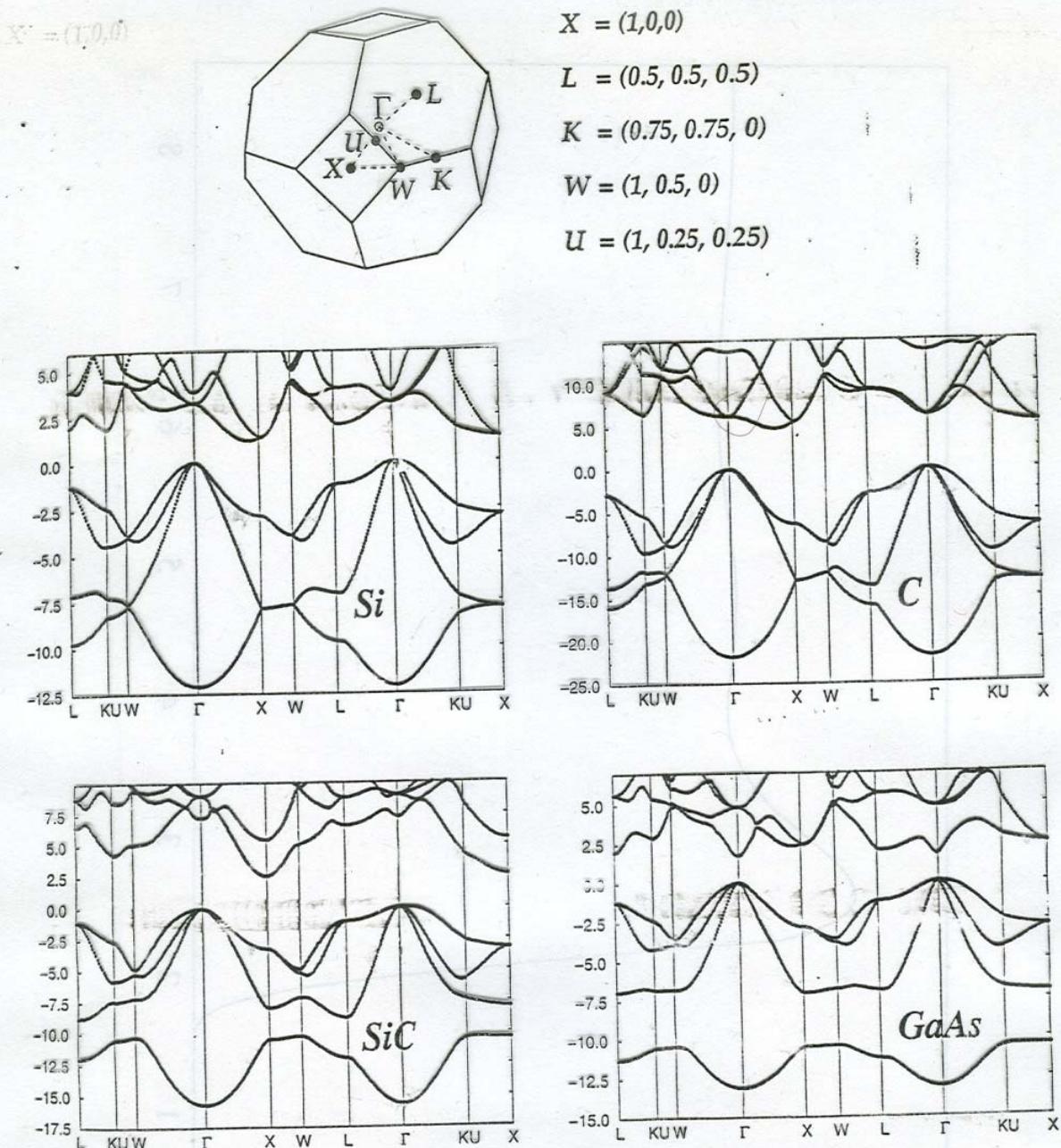


Figure 4.8. Band structure of four representative covalent solids: Si, C, SiC, GaAs. The first and the last are semiconductors, the other two are insulators. The small diagram above the band structure indicates the Brillouin Zone for the FCC lattice, with the special k -points X, L, K, W, U identified and expressed in units of $2\pi/a$, where a is the lattice constant; Γ is the center of the BZ. The energy scale is in electronvolts and the zero is set at the Valence Band Maximum. (Based on calculations by I.N. Remediakis.)

1. NON-INTERACTING ELECTRONS

21

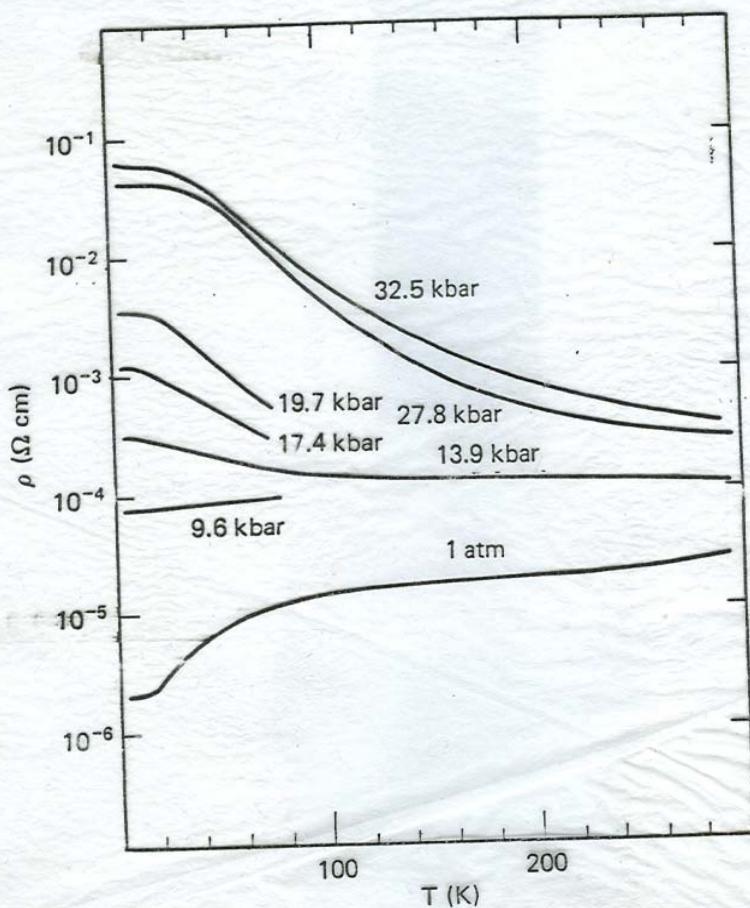


Fig. 1.14 Resistivity ρ of ytterbium as a function of temperature at various pressures
(McWhan *et al.* 1969).

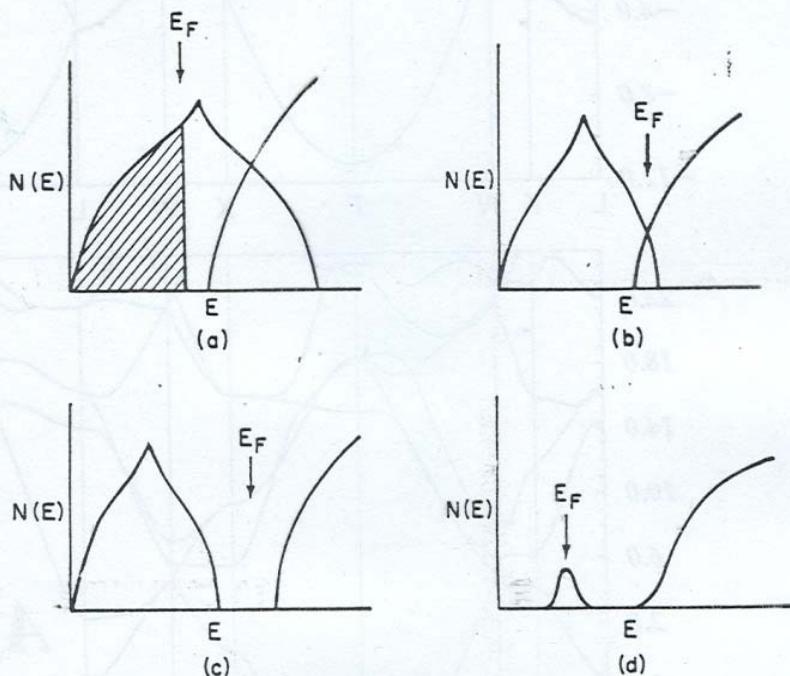


Fig. 1.13 Electron density of states $N(E)$ in a cubic material; E_F denotes the Fermi energy; (a) normal metal; (b) semimetal; (c) insulator; (d) n-type degenerate semiconductor.

INTERACTING ELECTRONS IN DISORDERED SYSTEMS

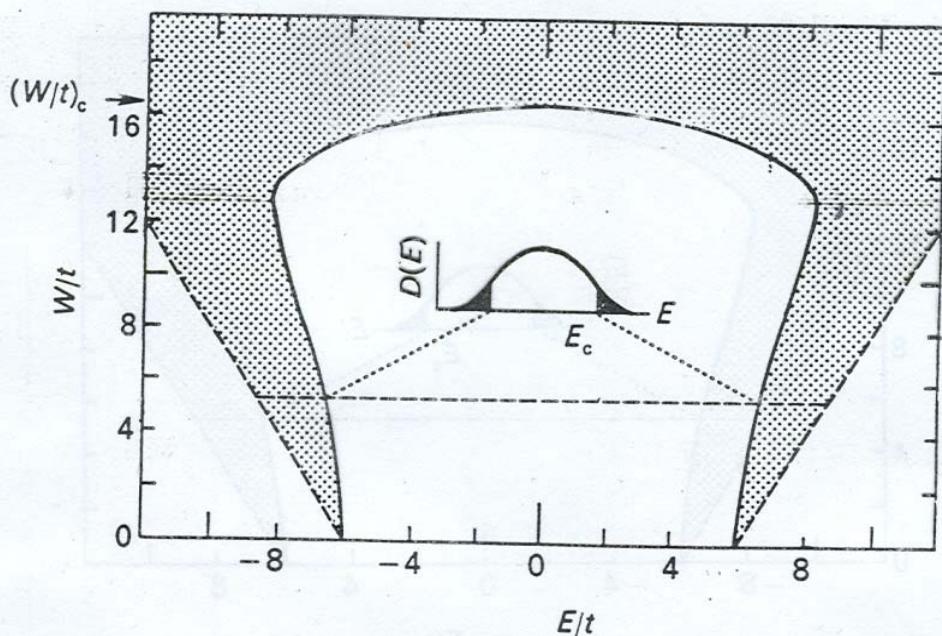


FIG. 1.4. The trajectory of the mobility edge on the E (energy)- W (disorder) parameter plane for three-dimensional simple cubic lattice systems as determined numerically by the finite-size scaling method. The shaded region represents localized states with the exact upper bound (Lifshitz boundary) for the band edge being shown by the broken line. The Anderson transition occurs at $W_c = 16.5$. Here E and W are measured by the transfer energy in the tight-binding model. (After Zdetsis *et al.* 1985.)

$$n_c^{1/3} a_B^* = 0.26 \pm 0.05. \quad (1.4)$$

The result is close to both eqn (1.1) for the Mott transition and eqn (1.2) for the Anderson transition.

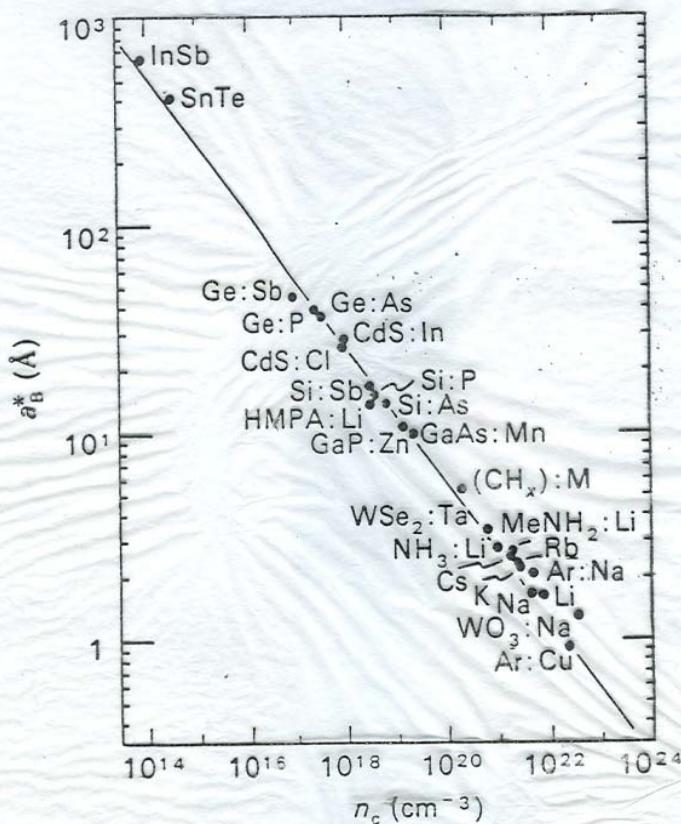


FIG. 1.1. Effective Bohr radius, a_B^* , plotted against the critical concentration of donor centres, n_c , for various systems in logarithmic scales. The straight line represents $n_c^{1/3} a_B^* = 0.26$. (After Edwards and Sienko 1978; Mott and Kaveh 1985b.)

این نتایج علیم آن دست است (برهانی اکثر روند) این
آن دست است که این بدلیل آن است که اندرون و کاترگی موجود
درستگاه است؟ که اینها هم برهانی اکثر روند داشتند
درستگاه در کار بوده اند تا این نتایج بتوانند

خواص الگری های ابرد

۸۱

- با استفاده از تبدیل

$$- c\bar{k} \cdot \vec{R}_c$$

$$a_{k\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum a_{i\sigma} e^{-ck \cdot \vec{R}_c}$$

حاصلیترین های ابردرایس نران به صورت زیر نوشته شد

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k a_{k\sigma}^\dagger a_{k\sigma} + \frac{U}{N} \sum_{\substack{k k' q \neq 0 \\ \sigma}} a_{k+q, \sigma}^\dagger a_{k-q, \sigma}^\dagger a_{k', \sigma} a_{k, \sigma}$$

$$n = \frac{Ne}{N} = نهاد اتمی، \quad \text{نعداد الکترone} = Ne$$

$$\epsilon_k = t \sum_{\delta} e^{ck \cdot \vec{\delta}} + \epsilon_0$$

$$0 \leq n \leq 2$$

و مکان نزدیکی های هم داشتنی را شخصی می کند.
برای ساختار مکعبی

$$\epsilon_k = 2t (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a) + \epsilon_0$$

$$n = \frac{Ne}{N} = 1 \quad \text{half-filling}$$

- اگر $t=0$ باشد. پرش الکترone از یک اتم به اتم دیگر
عاجز است. هر اتم تنها یک الکترone را تبیین می کند.
کل الکترone های تبیین پایین دارد

$$----- U + \epsilon_0$$

$$\mu = 0$$

$$----- \epsilon_0$$

$\epsilon_0 + U - \mu \gg kT, \mu - \epsilon_0 \gg kT$ است و قریب

- وقتی t (transfer matrix) ماتریس انتقال کو جگه بست

$$|t| \ll \epsilon_0 - \mu, \quad |t| \ll \epsilon_0 + U - \mu$$

در اینجا می توان از نظریه اختلال استفاده کرد.

حالات $t=0$ (بدون اختلال) تنها یک الکترون را در آنم می نشیند. اگر اسپین الکترون یک اتم پادموزاری اسپین اتم عاقدش باشد، این الکترون می تواند به اتم عاقدش بپرسد. اگر در اسپین موادی این پرسش مجاز نباشد (اصل طرد پاولی). در نتیجه میان الکترونها پادموزاری هستند که می توانند از زیری دستگاه را پاپین بیاورند. تغییر در از زیری تا اختلال مرتبه دوم عبارتست از

$$\Delta E = \sum \frac{\langle \psi_1 H_0 \psi_1 \rangle - \langle \psi_2 H_0 \psi_2 \rangle}{\epsilon_0 - \epsilon_j} = -2t^2/U$$

فاکتور ۲ بدلیل دو مزایه داشت که در آنها الکترون اتم و الکترون اتم را به اتمکاری و دو میگردند و بجای حذف از زیری گردند

آخر اسپین را الکترون در ساخت نهاده باشد ننان دهیم،
حاصلیترین هابارد راس توان به صورت

$$H = - \sum_{i,j} J (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{1}{4})$$

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{4}, \quad \vec{S}_i \uparrow \uparrow \vec{S}_j \uparrow \uparrow$$

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{3}{4}, \quad \vec{S}_i \uparrow \downarrow \vec{S}_j \uparrow \downarrow$$

$$(\vec{S}_i + \vec{S}_j)^2 = S_i^2 + S_j^2 + 2 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$$

$$\text{بنابراین } J = -\frac{2t^2}{U} \text{ است}$$

در اینجا

دستگاهی با هاصلیترین خرق ($J < 0$)، آنرا می خواهد میگیریم (anti-ferromagnetic) است.

۳ - حالت $U=0$ یا $U \neq 0$ کو جذب

حالات پایه حالت است که در آن دو الکترون با امتریس ϵ_{ij} ، μ_i را
و اسینهاس فعال کلیه سطوح امتریس تا سطح مرس μ_i ، μ_j را
پرس کنند. اگر از سوره (۱) که در آن $\chi_{(9)}$ Charge susceptibility
یا رذایه امتریس $\chi_{(9)}$ magnetic susceptibility مس کو نه فعل
عیشم پرس بشیم $\chi_{(9)}(T=0) \rightarrow \chi_{(9)}(T=0) \rightarrow 10$ بینهایت مس شود)،
با مایع مرس، بر همان کوئن ضعیف سر رکار دارد.
در این سوره بر همانش الکترون لازم است جب امتریس همیس
و پیش و تراوایی مخنا طیس مس شود. در این حالت انتظار
داریم که دستگاه نلزی باشد

۴ - $t \neq 0$, $U \neq 0$

انتظار می‌رود در $\frac{1}{2}t$ به حضور مس کنار ناز از
قطربه عایین رخ دهد. این همان کنار می‌است که در
آن اثرا نشود. وقتی $t > U$ مس شود، انتظار می‌رود این کنار
رخ دهد. یعنی اد نزدیکترین مسایی می‌باشد:

۵ - محکم رعایت

$$\hat{\bar{S}}_{tot} = \sum_i \bar{S}_i, \quad \hat{S}_{tot}^z = \sum_i S_i^z$$

با همیت من حابی باس مس کو نه. مجموع $\{\hat{H}, \hat{N}_i, \hat{S}_{tot}^z, \hat{S}_{tot}\}$ مس

می‌توانند بردار حالتکار و پرده مس ترک درسته باشند

۶ - اگر $\vec{h}_{co} \rightarrow h_{co}^+$ برود، یعنی نکات ذره جزء
همیم داشتم، همیت من های بر دنادرد می‌باشد، بشرط
آنکه تبیین الکترون ذره برای ساختار رعایتی مس

$$H = t \sum_{\langle ij \rangle} h_{co}^+ h_{go}^+ + U \sum_{\langle ij \rangle} h_{co}^+ h_{go}^+ h_{ci}^+ h_{cj}^-$$

ترجمه: تجربه پیره بجهت

$$n = \frac{N_e}{N} \neq 1$$

در این سرده، حتن با حضور α ، الکترودها و حزره ها می توانند
چنان حرکت کنند که بر سر راه کلید یک مرآه نگیرند. در نتیجه این
امکان وجود دارد که دستگاه با یک فزار طاریک بتواند در حالت
فلزی باشد. دلیل آن اینست که جون $n = \frac{N_e}{N}$ است،
الکترودها یا حزره ها می توانند از طریق پرس به حالت
استحال نشوند به نقاط دیگر قابل استحال یابند.

این ده حاوردت $n = 1$ الکترودها (حزره ها) جایگزین می شوند و بنابر
قضیه Nagao ka دستگاه تغایل به ضرب خناطیس بودن
پس از آنکه دیگر در حالت فلزی باقی نمی شاند.

y. Nagao ka, Solid State Commu. 3 (1965) 409
Phys. Rev. 197 (1966) 392.

مدل های این در کلی بعده را می توان به لذت *Bethe Ansatz*
دقیقاً حل کرد. (به صفات بعده می توان آن را حل کنند).
اما این آنقدر $D = 2D$ و 3 تا یکی زن تقدیر تحلیل دقیقاً
حل نمی داشت. از این دو برض از زدانته ایان بروساکی
عددی روس آور داشت. با توجه به کلات روشی های ساده
مثله الگرس های این 2 -بعدی دو بعده می توان هنوز زیک
نمایه باز (حل نمایه) است.

به صفات بعده به کار محتیق Kanamori در مایه محبت
الکترود اشاره خواهد شد. روش کاناموری مناسب
دستگاههای (الکترون/حزره) با خواص پایین است.

د- صفحه ۶۰ نتیجه حسابات از محتیق در مایه الگرس های این
ارائه شده است. ملاحظه می شود که عزوداری می نازس آنها
آنها را می توان دارین.

Λ

*Quantum Many-body Systems in : 2-D
one Dimension by Zachary N.C. Ha 1996*

3.2 Bethe-Ansatz Equations

3.2

3.2 Bethe-Ansatz Equations

The hamiltonian of the model written in a symmetric form is given by

$$H = -\sum_i \sum_{\sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma} + c_{i\sigma}^\dagger c_{i+1\sigma}) + U \sum_i (n_{i\uparrow} - \frac{1}{2})(n_{i\downarrow} - \frac{1}{2}), \quad (3.1)$$

where $c_{i\sigma}^\dagger$, $c_{i\sigma}$, and $n_{i\sigma}$ are the creation, annihilation, and number operators, respectively, for an electron at site i with spin σ (\uparrow or \downarrow). The transfer integral, t , is set to unity and the on-site interaction energy is parameterized by U .

The hamiltonian (3.1) is invariant under the following unitary transformations: $c_{i\sigma} \rightarrow \sum_{\sigma'} U_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}$ and $c_{i\sigma} \rightarrow e^{i\theta} c_{i\sigma}$, where U is an $SU(2)$ matrix. The Hubbard model, therefore, has a $SU(2) \times U(1)$ symmetry. Furthermore, when the number of sites is even, there is a "hidden" $SU(2)$ symmetry where the $U(1)$ charge symmetry is a subgroup of the hidden $SU(2)$. When the number of sites is odd, a more general twisted boundary condition is needed to get the extra $SU(2)$ symmetry. The generators of this hidden pseudo-spin symmetry is as follow [39]

$$Q^z = \frac{1}{2}(N_a - \sum_{i,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}), \quad (3.2)$$

$$Q^{\pm} = \sum_i (-1)^i c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}, \quad (3.3)$$

$$Q^- = (Q^+)^{\dagger}. \quad (3.4)$$

(Here, I use different but essentially equivalent notations as those used in [111, 19].) Essentially, the extra symmetry appears between the doubly occupied and empty sites which correspond to the up and down states for spin $SU(2)$ case. One can easily check that these operators commute with the hamiltonian and the degeneracy of energy levels is enlarged to $(2S + 1)(2Q + 1)$, where S is the usual spin and Q the pseudo-spin. This extra symmetry will be used to show in the next section that the Bethe-ansatz states give the correct number of eigen-states of the 1D Hubbard model.

I now write the eigen-states of the hamiltonian in the following second quantized form

$$|\Psi\rangle_{N,M} = \sum_{\{1 \leq n_i \leq N_a\}} \phi(n_1, \dots, n_M, n_{M+1}, \dots, n_N) \prod_{j=1}^M c_{n_j, \downarrow}^\dagger \prod_{k=M+1}^N c_{n_k, \uparrow}^\dagger |0\rangle, \quad (3.5)$$

where n_1, \dots, n_M are the positions of the M down spins, N the total number of electrons and ϕ the amplitude function. The anti-commutation relations among the creation operators eliminate all the terms with two up (or two down) spin electrons at the same site.

I now introduce a sector D_Q [25] defined as a region in the N particle space such that

$$D_Q = \{1 \leq n_{Q_1} < n_{Q_2} < \dots < n_{Q_N} \leq N\}, \quad (3.6)$$

where Q denotes a permutation of N numbers $\{1, 2, \dots, N\}$. I also define a neighboring sector of D_Q as $D_{Q(ij)}$, where $j = i + 1$ and $Q(ij)$ is a permutation obtained from Q by interchanging Q_i and Q_j . Let ϕ_Q be the amplitude function in the sector D_Q and introduce the following ansatz for ϕ_Q

$$\phi_Q(n_1, \dots, n_N) = \sum_P [Q, P] \exp(i \sum_j k_{P_j} n_{Q_j}). \quad (3.7)$$

P denotes a permutation of $\{1, \dots, N\}$ associated with the quasi-momenta $\{k_i\}$ and Q with the electron site locations $\{n_i\}$. $[Q, P]$ is a coefficient that can be determined essentially from the boundary conditions imposed on the amplitude ϕ . Since ϕ_Q is a smooth function, I should have $\phi_Q = \phi_{Q(ij)}$ at the intersection of the two sectors (i.e. at $n_{Q_i} = n_{Q_j} = n$). From this continuity condition I obtain the following relationship,

$$[Q, P] + [Q, P(ij)] = [Q(ij), P] + [Q(ij), P(ij)]. \quad (3.8)$$

I start with the Schrödinger equation $H|\Psi\rangle = E|\Psi\rangle$, and obtain the following eigenvalue equation for ϕ

$$\begin{aligned} - \sum_{i=1}^N \sum_{s=\pm 1} \phi(n_1, \dots, n_i + s, \dots, n_N) &+ U \sum_{i>j} \delta(n_i - n_j) \phi(n_1, \dots, n_N) \\ &= E' \phi(n_1, \dots, n_N), \end{aligned} \quad (3.9)$$

where $E' = E + U(2N - N_a)/4$. Since no particles coincide in the sector D_Q , the on-site interaction term is identically zero and ϕ_Q satisfies

$$- \sum_{i=1}^N \sum_{s=\pm 1} \phi_Q(n_1, \dots, n_i + s, \dots, n_N) = E' \phi_Q(n_1, \dots, n_N). \quad (3.10)$$

However, at the intersection between the two sectors D_Q and $D_{Q(ij)}$ (i.e. at $n_{Q_i} = n_{Q_j} = n$) the eigenvalue equation (3.9) is

$$\dots + \phi(\dots, n+1, n, \dots) + \phi(\dots, n, n-1, \dots) + \phi(\dots, n, n+1, \dots) + \dots + \phi(\dots, n-1, n, \dots) + \dots + U \phi(\dots, n, n, \dots) = E' \phi(\dots, n, n, \dots), \quad (3.11)$$

where the obvious terms are omitted and are represented by dots. Note that the first and the second terms shown on the left side of the Eq. (3.11) necessarily belong to the sector $D_{Q(ij)}$ while the second and the forth terms to D_Q . I now evaluate Eq. (3.10) at $n_{Q_i} = n_{Q_j} = n$ (I can do this since ϕ is smooth), subtract it from Eq. (3.11) and use Eq. (3.8) to reduce the resulting expression to the following

$$[Q, P] = Y_{nm}^{ab} [Q, P'], \quad (3.12)$$

where

$$x_{nm} = -\frac{iU/2}{\sin k_n - \sin k_m + iU/2}, \quad (3.13)$$

$$Y_{nm}^{ab} = x_{nm} + (x_{nm} + 1) P^{ab}. \quad (3.14)$$

حل آنگریزی های ابرد با در آنگریزون و درسایت

ها میتوان آنگریزی های ابرد با در آنگریزون و درسایت به صورت زیر است

$$H = t \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^+ a_{2\sigma}^- + a_{2\sigma}^+ a_{1\sigma}^-)$$

$$+ U (n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow})$$

جهله اول پرسش از جایگاه اول به درم و باعکس را فان می دهی
جهله درم سینه بردو آنگریزون در جایگاه اول ریا هردو آنگریزون
در جایگاه درم است.

برای صریح در حالت وحدتدار $t = 0$

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^- + a_{2\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^-)$$

وقتن کل آنگریزون رس ترکیب از جایگاه ۱ و ۲ وحدتدار

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1\uparrow}^+ a_{1\downarrow}^- + a_{2\uparrow}^+ a_{2\downarrow}^-)$$

وقتن هردو آنگریزون رس ترکیب سایت متراده اند.

$$H \Psi_1 = 0 \Psi_1, \quad H \Psi_2 = U \Psi_2$$

وقتن $t > 0$ است

در این حالت تابع ویره دستگاه در آنگریزون را به صورت ترکیب خصل اس از Ψ_1 و Ψ_2 می نزدیم

$$\Phi = (\Psi_1 + g\Psi_2) / \sqrt{1+g^2}$$

نظری کا اسراری درباره هبتوی الکترونی

دستگاه را در نظر بگیرید کہ بعد ادکس حزه دارد مانند

$Ni [Ar] 3d^8 4s^2$, Palladium Pd $[Kr] 4d^10 5s^2$

هرچنان متران بدلیل آثار بیوپسیون الکترونی - ۵، از برخانش کردن الکترونیکس پر در اتم حاوله خصیم پوشید.

در نتیجه نقش برخانش جله ۷ از محلات دیگر هاسیلر من سهم زری نمود.

اگر $N > 0$ (نهایی خواز) باشد، برخانش سُرثُر V_{eff}

ب $\approx 7/1$ کامن می یابد.

در نتیجه، نہ هنگام بزرگ بودن مقادیر، افزایش افزایی مقادیر محدود رس خواهد بود (برخط آنکه دستگاه در حالت ملزمس باقی مانند باشد)

باد متنام

تابع سرچ در الکترون $k_1 \sigma_1$ و $k_2 \sigma_2$ را با $\langle k_1 \sigma_1, k_2 \sigma_2 \rangle$ نیان می دهیم. در نزدیک HF ، افزایش برخانش بین دو الکترون عبارت از

$$\Delta E_{HF}(\bar{k}_1 \sigma_1, \bar{k}_2 \sigma_2) = \frac{V}{N} (1 - \delta_{\sigma_1 \sigma_2})$$

اگر این دو الکترون معاذس باشند

$$\Delta E_{HF} = V/N$$

اگر $\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma$ باشد حالت $\langle \bar{k}_1 \sigma, \bar{k}_2 \sigma \rangle$ حالت دیگر H

خرابه بود

و نقش در این حالت کلیدگیر نه تابع سرچ آنرا به صورت زیر در نظر بگیریم

$$\Psi(1,2) = \sum_{\bar{k}_1 \bar{k}_2} \Gamma(\bar{k}_1, \bar{k}_2) \Psi(1, \bar{k}_1) \Psi(2, \bar{k}_2)$$

برآس حالت singlet در نظر بگیریم

$$\Gamma(\bar{k}_1, \bar{k}_2) = \Gamma(\bar{k}_2, \bar{k}_1)$$

۸۹

با تراز دادن این نابج مدرج در معادله سرددنیگر، داریم

$$[\epsilon(\vec{k}_1) + \epsilon(\vec{k}_2) - E] G(\vec{k}_1, \vec{k}_2) + \frac{U}{N} \sum_{k'} G\left(\frac{\vec{Q}}{2} + \vec{k}', \frac{\vec{Q}}{2} - \vec{k}'\right) = 0$$

$$\vec{Q} = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$$

اگر $\frac{Q}{2} \neq k$ داشتند از اولین ناحیه بر می‌توان قرار
گیرد، با اضافه کردن یک مبردار شکلی حکایت، آن را
از توان مداخل اولین ناحیه بر می‌توان انتقال داد.
از معادله مفرق نتیجه سردد کر

$$-\frac{1}{U} = \sum_k \frac{1}{\epsilon(\frac{Q}{2} + k) + \epsilon(\frac{Q}{2} - k) - E}$$

دلیل سردد کردن بسته از ارزشی سینت پیدا کرده که معنای آن
ترتیب را به زیر مخصوص می‌سند:

$$E = \epsilon(k_1) + \epsilon(k_2) + \Delta E(k_1, k_2)$$

با محاسبات کس س توان نهاد که

$$\Delta E(k_1, k_2) = \frac{U}{N} \left[1 - \frac{U G(k_1, k_2)}{1 + U G(k_1, k_2)} \right]$$

$$= \frac{U}{N} \frac{1}{1 + U G(k_1, k_2)}$$

با تغایر با ترتیب HF نتیجه س تیریم که

$$U_{eff} = \frac{U}{1 + U G(k_1, k_2)}$$

از آنچه که $G(k_1, k_2)$ حدود آن برابر سکون پنهانی فزار است
و U_{eff} ترتیبی برابر نهایی فزار س شود.

$$G(k_1, k_2)$$

با معادله $\Gamma(k_1, k_2)$ را جمع می کنیم

$$[\epsilon(k_1) + \epsilon(k_2) - E] \Gamma(k_1, k_2) + \frac{U}{N} \sum_{k'} \Gamma\left(\frac{Q}{2} + k', \frac{Q}{2} - k'\right) = 0$$

حالت غیر احتلامی دستگاه را برای $U=0$ در نظر می گیریم

در این حالت مرض می کنیم $\Psi(k_1, k_2) = \Psi(1, k_1) \Psi(2, k_2)$
نماین با $\Gamma(k_1, k_2) = 1$ را سرودع می کنیم و حل می کنیم.
معادله مزق برس آید. توجه $q = Q/2 = k_1 + k_2$ است.

$$[\epsilon(k_1) + \epsilon(k_2) - E] + \frac{U}{N} \left(1 + \sum_{k'} \Gamma(q+k', q-k') \right) = 0$$

$k=k'$ را در این حالت می نماییم $k'=k$ می نویسیم

$$\begin{aligned} q+k' &= q+k = k_1 \\ q-k' &= q-k = k_2 \end{aligned} \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \text{می نماییم} \\ \Gamma(q+k', q-k') \equiv \Gamma(k_1, k_2) = 1 \end{array} \right.$$

و جمله $1/N \times 1$ از اینجا می شود است.

$$\Gamma(q+k', q-k') \equiv \Gamma(k')$$

با معادله زیر می شویم

$$[\epsilon(q-k') + \epsilon(q+k') - E] \Gamma(k') + \frac{U}{N} \left(1 + \sum_{k''} \Gamma(k'') \right) = 0$$

$$(N \cdot E = \epsilon(k_1) + \epsilon(k_2)) \Rightarrow \frac{U}{N} \sum_{k''} \Gamma(k'')$$

$$\Gamma(k') = -\frac{U}{N} \left(1 + \sum_{k''} \Gamma(k'') \right) / [\epsilon(q-k') + \epsilon(q+k') - E(k_1) - E(k_2)]$$

جمع کردن در این معادله با $k' = k$ می شود k' و k' می شوند!

$$\sum_k \Gamma(k') = -U G(k_1, k_2) / [1 + U G(k_1, k_2)]$$

$$G(k_1, k_2) = \frac{1}{N} \sum_{k'} \frac{1}{[\epsilon(q-k') + \epsilon(q+k') - E(k_1) - E(k_2)]}$$

$$G(k_1, k_2) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}_1} \frac{1}{E(\vec{q}-\vec{k}_1) + E(\vec{q}+\vec{k}_1) - E(k_1) - E(k_2)}$$

و متى $\omega > U$ است U_{eff} در حدود بُنایی فزار ω است.

این عاشه حالت مرادی باشد که بدلیل پراکنده‌گشتن مکرر در اکثر دنیا رعایت از نیکوییتر و پیدا شده اند را شامل می‌شود برای دستگاه‌ها با تعداد ذرات کم می‌توان از حصر برذخات دیگر چشم پوشید و نهایا پراکنده‌گشتن دلخواهی را جایب آورد.

از این درست که این عاشه برای دستگاهی با جمیعیت کم صادق است و به *low density approximation*

معروف است

این کافیست همچنان اکثر دنیا برای سمه چگالی دارد ($n \neq 1$)

حضرصیت مزونخناطیس انحرافات و مسطه‌ای مانند Ni
با برتری HF سرتیفیکه مزونخناطیس شدن تورط رابطه

$1 < \mu(0)$

مخصوص می‌شود. $\mu(0)$ جمیعیت حالات ذره سطح مزس است.
چون $U \approx U_{eff}$ کاملاً می‌باشد، انتظار می‌رود حضرصیت
مزونخناطیس شدن به سختی تا حد می‌شود
که نادری این دلالت می‌کند که مزونخناطیس شدن تنها در صورت
تعداده می‌شود که جمیعیت حالات در سطح مزس درستایه با
عکس بُنایی فزار نیروگ باشد.

در واقع جمیعیت حالات در مرد Ni میکنیم در بالای
هزار از زیشن دارد. \leftarrow نتایج اثبات که نادری که بر اگلوری
نمایند می‌باشد و با تجزیه مطابقت خواهد دارد.

حل الگری هایارد با در الکترون و درسایت

ها میان این الگری هایارد با در الکترون و درسایت به صورت زیر است

$$H = t \sum_{\sigma} (a_{1\sigma}^{\dagger} a_{2\sigma} + a_{2\sigma}^{\dagger} a_{1\sigma})$$

$$+ U (n_{1\uparrow} n_{1\downarrow} + n_{2\uparrow} n_{2\downarrow})$$

جهله اول پرسش از جایگاه اول بودم و بالکن را فان می دهم
جهله درم میین بردو الکترون در جایگاه اول دیا هردو الکترون
در جایگاه درم است.

جزئی صورت $t = 0$ در حالت وحدددار

$$\Psi_1 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger} + a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger})$$

وقتن کلیک الکترون مرتب از جایگاه ۲ وحدددار

$$\Psi_2 = \frac{1}{\sqrt{2}} (a_{1\uparrow}^{\dagger} a_{1\downarrow}^{\dagger} + a_{2\uparrow}^{\dagger} a_{2\downarrow}^{\dagger})$$

وقتن مردو الکترون مرتب کلیک سایت مردارد از نهاد

$$H \Psi_1 = 0 \Psi_1 \quad H \Psi_2 = U \Psi_2$$

وقتن $t > 0$ است

دوسن حالت . تابع ویره دستگاه در الکترون را به صورت ترکیب خصل اس از Ψ_1 و Ψ_2 می نزدیم

$$\Phi = (\Psi_1 + g\Psi_2) / \sqrt{1+g^2}$$

نامکمل $\frac{1}{\sqrt{1+g^2}}$ به دلیل بجهارش تابع سرج ظاهر شده است.
برای این بهت آوردن متادیر و میز، به معادله سردد شکل از نظریم

$$(\hat{H} - E) \Phi = 0$$

$$\hat{H} \Psi_1 = 2t \Psi_2$$

$$H \Psi_2 = 2t \Psi_1 + U \Psi_2$$

$$H(\Psi_1 + g\Psi_2) = 2t \Psi_2 + g(2t \Psi_1 + U \Psi_2)$$

$$= 2t g \Psi_1 + (2t + gU) \Psi_2$$

$$= E \Phi = E (\Psi_1 + g\Psi_2)$$

لذ

$$-E + 2tg = 0$$

$$2t + (U - E)g = 0$$

$$\boxed{g = \frac{E}{2t}}$$

$$2t + (U - E) \frac{E}{2t} = 0$$

$$E^2 - UE - 4t^2 = 0$$

$$\boxed{E = -\frac{1}{2} \left(\sqrt{U^2 + 16t^2} - U \right)}$$

$$E = \begin{cases} -2t + \frac{U}{2} - \frac{U^2}{16t} & U \ll t \\ -4t^2/U & U \gg t \end{cases}$$

نمایه این افزایش U استگاه آنکه در این میان میان
دیگر ضعیف تر مسُود و وزن Ψ_2 که برابر $\frac{g^2}{1+g^2}$ است
از $\frac{1}{2}$ به $\frac{4t^2}{U^2}$ کاهش می یابد.

تحمیل اس بر الگری اسپین هایزبرگ (مرد مژده‌نگار)

در الکتردن را در نظر مگیرید که می‌توانند در اوربیتال‌های قدرتی باشند. تجربه می‌شود که می‌توانند در اوربیتال‌های قدرتی باشند.

فرض می‌کنیم این در مطع از خروج از مطری دیگر درستگاه توطیخ باشند. در الکتردن می‌توانند یکی از این دو حالت دیگر دوستی آنرا استفاده کرد باشند.

غناهنه به جهت این معرفتی. الگری‌ها بر دسته شده‌اند. بر همین کوشش در ذرات اس در کوتاه‌ترین دورنمایی دارند به صورت زیر است

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int d^3x d^3y \bar{v}(x, y) \sum_{ss'} \psi_s^\dagger(x) \psi_{s'}^\dagger(y) \psi_{s'}(y) \psi_s(x)$$

$$\hat{\rho}(x) = \sum_s \psi_s^\dagger(x) \psi_s(x)$$

$$= \sum_{i,s} \psi_i^\dagger(x) \psi_i(x) C_{is}^\dagger C_{is}$$

بر همین کوشش را می‌توان به صورت

$$\hat{V} = \sum_{i \neq i'} U_{ii'} n_i n_{i'} + \sum_i U_{ii'} P_{i\downarrow} P_{i\uparrow} + \sum_i J F C_{i\downarrow}^\dagger C_{i\downarrow} C_{i\uparrow} C_{i\uparrow}$$

$$n_i = \sum_s P_{is}$$

$$J F = \frac{1}{2} \int d\vec{x} d\vec{y} \bar{v}(\vec{x}, \vec{y}) \psi_i(\vec{x}) \psi_{i'}^\dagger(\vec{x}) \psi_{i'}(\vec{y}) \psi_i^\dagger(\vec{y})$$

جستجو و مثبت $J F$ بر اس تبازنیل کرده بود $(y-x)^2 = \delta(x-y) = \delta(r)/r^2$. است. و

$$U_{ii'} = \frac{1}{2} \int d\vec{x} d\vec{y} \bar{v}(x, y) |\psi_i(x)|^2 |\psi_{i'}(y)|^2$$

$$J F > 0$$

می‌توان نهان داد که $U_{ii'}$ مثبت است.

به کتاب A. Auerbach مراجعه کنید. قبل از $U_{ii'}$ را دیدیم، $U_{ii'}$ همانی است که در الگری های برآمد است. در اینجا درباره جمله تبادلی J می‌خواهیم عرف بزیم.