



دانشگاه شاهرود

فیزیک بس ذره‌ای

(اصول و روش‌ها)

ولفگانگ نولتینگ

ترجمه: دکتر علی اصغر شکری دکتر ابراهیم کشاورز صفری

جلد دوم

امروزه کتاب‌خوانی و علم‌آموزی، نه تنها یک وظیفه‌ی ملی، که یک واجب دینی است.

مقام معظم رهبری

در عصر حاضر یکی از شاخصه‌های ارزیابی رشد، توسعه و پیشرفت فرهنگی هر کشوری میزان تولید کتاب، مطالعه و کتاب‌خوانی مردم آن مرز و بوم است. ایران اسلامی نیز از دیرباز تاکنون با داشتن تمدنی چندهزارساله و مراکز متعدد علمی، فرهنگی، کتابخانه‌های معتبر، علما و دانشمندان بزرگ با آثار ارزشمند تاریخی، سرآمد دولت‌ها و ملت‌های دیگر بوده و در عرصه‌ی فرهنگ و تمدن جهانی به‌سان خورشیدی تابناک همچنان می‌درخشد و با فرزندان نیک‌نهاد خویش هنرنمایی می‌کند. چه کسی است که در دنیا با دانشمندان فرزانه و نام‌آور ایرانی همچون ابوعلی سینا، ابوریحان بیرونی، فارابی، خوارزمی و ... همچنین شاعران برجسته‌ای نظیر فردوسی، سعدی، مولوی، حافظ و ... آشنا نباشد و در مقابل عظمت آنها سر تعظیم فرود نیاورد. تمامی این افتخارات ارزشمند، برگرفته از میزان عشق و علاقه فراوان ملت ما به فراگیری علم و دانش از طریق خواندن و مطالعه منابع و کتاب‌های گوناگون است. به شکرانه‌ی الهی، تاریخ و گذشته ما، همیشه درخشان و پر بار است. ولی اکنون در این زمینه در چه جایگاهی قرار داریم؟ آمار و ارقام ارائه‌شده از سوی مجامع و سازمان‌های فرهنگی در مورد سرانه‌ی مطالعه‌ی هر ایرانی، برایمان چندان امیدوارکننده نمی‌باشد و رهبر معظم انقلاب اسلامی نیز از این وضعیت بارها اظهار گله و ناخشنودی نموده‌اند.

کتاب، دروازه‌ای به سوی گستره‌ی دانش و معرفت است و کتاب خوب، یکی از بهترین ابزارهای کمال بشری است. همه‌ی دستاوردهای بشر در سراسر عمر جهان، تا آنجا که قابل کتابت بوده است، در میان دست‌نوشته‌هایی است که انسان‌ها پدید آورده و می‌آورند. در این مجموعه‌ی بی‌نظیر، تعالیم الهی، درس‌های پیامبران به بشر، و همچنین علوم مختلفی است که سعادت بشر بدون آگاهی از آنها امکان‌پذیر نیست. کسی که با دنیای زیبا و زندگی‌بخش کتاب ارتباط ندارد بی‌شک از مهم‌ترین دستاورد انسانی و نیز از بیشترین معارف الهی و بشری محروم است. با این دیدگاه، به‌روشنی می‌توان ارزش و مفهوم رمزی عمیق در این حقیقت تاریخی را دریافت که اولین خطاب خداوند متعال به پیامبر گرامی اسلام(ص) این است که «بخوان!» و در اولین

سوره‌ای که بر آن فرستاده‌ی عظیم‌الشان خداوند، فرود آمده، نام «قلم» به تجلیل یاد شده‌است: «إِقْرَأْ وَ رَبُّكَ الْأَكْرَمُ. الَّذِي عَلَّمَ بِالْقَلَمِ» در اهمیت عنصر کتاب برای تکامل جامعه‌ی انسانی، همین بس که تمامی ادیان آسمانی و رجال بزرگ تاریخ بشری، از طریق کتاب جاودانه مانده‌اند.

دانشگاه پیام‌نور با گستره‌ی جغرافیایی ایران‌شمول خود با هدف آموزش برای همه، همه‌جا و همه‌وقت، به‌عنوان دانشگاهی کتاب‌محور در نظام آموزش عالی کشورمان، افتخار دارد جایگاه اندیشه‌سازی و خردورزی بخش عظیمی از جوانان جویای علم این مرز و بوم باشد. تلاش فراوانی در ایام طولانی فعالیت این دانشگاه انجام پذیرفته تا با بهره‌گیری از تجربه‌های گرانقدر استادان و صاحب‌نظران برجسته کشورمان، کتاب‌ها و منابع آموزشی درسی شاخص و خودآموز تولید شود. در آینده هم، این مهم با هدف ارتقای سطح علمی، روزآمدی و توجه بیشتر به نیازهای مخاطبان دانشگاه پیام‌نور با جدیت ادامه خواهد داشت. به‌طور قطع استفاده از نظرات استادان، صاحب‌نظران و دانشجویان محترم، ما را در انجام این وظیفه‌ی مهم و خطیر یاری‌رسان خواهد بود. پیشاپیش از تمامی عزیزانی که با نقد، تصحیح و پیشنهادهای خود ما را در انجام این وظیفه‌ی خطیر یاری می‌رسانند، سپاسگزاری می‌نماییم. لازم است از تمامی اندیشمندانی که تاکنون دانشگاه پیام‌نور را منزلگاه اندیشه‌سازی خود دانسته و ما را در تولید کتاب و محتوای آموزشی درسی یاری نموده‌اند، صمیمانه قدردانی گردد. موفقیت و بهروزی تمامی دانشجویان و دانش‌پژوهان عزیز آرزوی همیشگی ما است.

دانشگاه پیام‌نور

فهرست

۳۶۱	فصل چهارم. دستگاه‌های ذرات برهم‌کنشی
۳۶۱	۴-۱ الکترون‌ها در جامدات
۳۶۱	۴-۱-۱ مورد حدی نوار بی‌نهایت باریک
۳۶۵	۴-۱-۲ تقریب هارت‌تری - فوک
۳۷۲	۴-۱-۳ همبستگی‌های الکترونی
۳۷۶	۴-۱-۴ روش درونیابی
۳۷۸	۴-۱-۵ روش گشتاورها
۳۸۹	۴-۱-۶ نوار دقیقاً نیمه‌پر
۳۹۵	۴-۱-۷ تمرین‌ها
۳۹۹	۴-۲ برانگیختگی‌های الکترونی جمعی
۳۹۹	۴-۲-۱ استتار بار (تقریب توماس - فرمی)
۴۰۵	۴-۲-۲ امواج چگالی بار، پلاسمون‌ها
۴۱۶	۴-۲-۳ امواج چگالی اسپین، مگنون‌ها
۴۲۱	۴-۲-۴ تمرین‌ها
۴۲۴	۴-۳ برانگیختگی‌های مقدماتی در آلیاژهای بی‌نظم
۴۲۴	۴-۳-۱ فرمول‌بندی مسأله
۴۲۹	۴-۳-۲ روش محیط مؤثر
۴۳۲	۴-۳-۳ تقریب پتانسیل همدوس
۴۳۷	۴-۳-۴ روش‌های نموداری
۴۵۰	۴-۳-۵ کاربردها
۴۵۲	۴-۴ دستگاه‌های اسپینی
۴۵۲	۴-۴-۱ تقریب تیابلیکوف
۴۶۱	۴-۴-۲ امواج اسپینی باز بهنجارش شده
۴۶۷	۴-۴-۳ تمرین‌ها
۴۶۹	۴-۵ برهم‌کنش الکترون - مگنون
۴۶۹	۴-۵-۱ دستگاه‌های مغناطیسی $4f$ (مدل $s-f$)
۴۷۳	۴-۵-۲ نوار بی‌نهایت باریک
۴۸۰	۴-۵-۳ شباهت آلیاژی
۴۸۳	۴-۵-۴ پلارون مغناطیسی
۴۹۵	۴-۵-۵ تمرین‌ها
۴۹۶	۴-۶ سؤالات خودآزمایی
۵۰۳	فصل پنجم. نظریه اختلال ($T=0$)
۵۰۳	۵-۱ توابع گرین سببی
۵۰۳	۵-۱-۱ نظریه اختلال وابسته به زمان "متعارف"
۵۰۸	۵-۱-۲ "روشن کردن" برهم‌کنش به‌طور بی‌دررو
۵۱۶	۵-۱-۳ توابع گرین سببی
۵۲۱	۵-۱-۴ تمرین‌ها
۵۲۲	۵-۲ قضیه ویک
۵۲۲	۵-۲-۱ ضرب نرمال

۵۲۷	۵-۲-۲ قضیه ویک
۵۳۳	۵-۲-۳ تمرین‌ها
۵۳۴	۵-۳ نمودارهای فاینمن
۵۳۴	۵-۳-۱ بسط اختلالی برای دامنه خلاء
۵۴۶	۵-۳-۲ قضیه خوشه پیوندی
۵۵۱	۵-۳-۳ قضیه اصلی نمودارهای متصل
۵۵۵	۵-۳-۴ تمرین‌ها
۵۵۶	۵-۴ توابع گرین تک‌ذره‌ای
۵۵۶	۵-۴-۱ بسط‌های اختلالی نموداری
۵۶۴	۵-۴-۲ معادله دایسون
۵۶۸	۵-۴-۳ تمرین‌ها
۵۶۹	۵-۵ انرژی حالت پایه گاز الکترونی (مدل ژله‌ای)
۵۶۹	۵-۵-۱ نظریه اختلال مرتبه اول
۵۷۳	۵-۵-۲ نظریه اختلال مرتبه دوم
۵۸۲	۵-۵-۳ انرژی همبستگی
۵۹۶	۵-۶ جمع‌های جزئی نموداری
۵۹۷	۵-۶-۱ انتشارگر قطبش
۶۰۵	۵-۶-۲ برهم‌کنش‌های مؤثر
۶۱۱	۵-۶-۳ تابع رأس
۶۱۴	۵-۶-۴ تمرین‌ها
۶۱۶	۵-۷ سؤالات خودآزمایی

۶۲۱	فصل ششم. نظریه اختلال در دماهای متناهی
۶۲۱	۶-۱ روش متسوبارا
۶۲۲	۶-۱-۱ توابع متسوبارا
۶۲۹	۶-۱-۲ تابع پارش کانونی (بندادی) بزرگ
۶۳۲	۶-۱-۳ تابع متسوبارای تک‌ذره‌ای
۶۳۸	۶-۲ نظریه اختلال نموداری
۶۳۸	۶-۲-۱ قضیه ویک
۶۴۲	۶-۲-۲ تحلیل نموداری تابع پارش کانونی بزرگ
۶۵۱	۶-۲-۳ نمودارهای حلقوی
۶۵۶	۶-۲-۴ تابع متسوبارای تک‌ذره‌ای
۶۶۱	۶-۳ سؤالات خودآزمایی

۶۶۳	پیوست ب. تمرین‌ها مرتبط به فصول ۴ و ۵ و ۶
۷۳۳	واژگان انگلیسی - فارسی

یادداشت مترجمین

هدف نویسنده از نگارش کتاب حاضر در زمینه «اصول فیزیک نظری»، مشایعت مستقیم دانشجویان رشته فیزیک در مطالعه یکی از زیربخش‌های این رشته یعنی فراهم آوردن ابزارهای فیزیکی در سراسرترین و فشرده‌ترین قالبی است که در مطالعه و تحقیقات پیشرفته‌شان برای کسب مهارت‌های نظری در مسائل و موضوعات پیچیده‌تر به آن‌ها نیاز دارند. از این رو، محتویات این کتاب آن قدر مفصل و باحوصله طراحی شده‌است که به افراد با سلیقه‌های متفاوت اجازه مطالعه شخصی و انفرادی می‌دهد، طوری که از ارجاع به نوشته‌های دیگر کاملاً بی‌نیاز باشند. روش‌های مدرن برای توصیف دستگاه‌های بس‌ذره‌ای برهم‌کنشی که با دانش پایه مکانیک کوانتومی و فیزیک آماری بنا شده‌اند، به مسائل واقعی گوناگونی که عمدتاً در حوزه فیزیک حالت جامد هستند، اعمال گشته و توسعه داده شده‌اند.

همان‌طوری که می‌دانیم جهان مادی‌ای که ما را احاطه کرده شامل تعداد بسیار زیادی ذره است که با یکدیگر برهم‌کنش دارند. توصیف همه آن‌ها مستلزم حل تعداد بسیار زیادی از معادلات حرکت مکانیک کوانتومی (معادلات شرودینگر) جفت شده‌است. این مهم عملاً جز در موارد استثنایی و خاص در یک مفهوم صرفاً ریاضیاتی امکان‌پذیر نیستند. بنابراین، مفاهیم آمار کوانتومی و مکانیک کوانتومی مقدماتی مستقیماً در قالبی که تاکنون با آن‌ها مواجه شده‌ایم کاربردپذیر نبوده و نیازمند بسط و بازسازی‌اند. این بسط اصطلاحاً «نظریه بس‌ذره‌ای» نامیده می‌شود. در این کتاب حاضر،

سعی شده است که ابزار لازم و کافی برای آشنایی کامل و مطالعه این نظریه به صورت آسان و قابل فهم در اختیار خوانندگان قرار گیرد. خودآموز بودن این کتاب از محاسن آن بوده که باعث ایجاد انگیزه برای ترجمه آن شده است. از طرفی دیگر، خودآزمایی‌ها و تمرین‌های طبقه‌بندی شده تعبیه شده در هر فصل نیز، مهارت‌های شما را در جهت درک بهتر مفاهیم موجود در این نظریه تقویت می‌کند. امید است که این اثر مورد قبول و استفاده محققان، اساتید، دانشجویان و سایر علاقه‌مندان قرار گیرد. با توجه به حجم زیاد کتاب ترجمه آن در دو جلد ۱ و ۲ پیش‌بینی شده است به طوری که حل تعدادی از مسائل هر فصل در انتهای آن آوریم. این کتاب برای کلیه اساتید و دانشجویان رشته‌های فیزیک، شیمی، مهندسی شیمی، مهندسی برق، فناوری نانو در مقاطع کارشناسی ارشد و دکتری مفید می‌باشد.

در خاتمه بر خودمان لازم می‌دانیم به رسم قدردانی از کلیه عزیزانی که در تمام مراحل از ترجمه تا چاپ این اثر، ما را یاری نموده‌اند به‌ویژه خانم دکتر نهال واعظ و سرکار خانم پروا مرادی صمیمانه سپاسگزاری نماییم.

مترجمین

زمستان ۱۳۹۶

فصل چهارم

دستگاه‌های ذرات برهم‌کنشی

در این بخش، قصد داریم فرمولبندی انتزاعی توابع گرین معرفی شده در فصل پیش را به مسائل واقعی در نظریه بس‌ذره‌ای، به‌ویژه با یادآوری دستگاه‌های مدل از فصل ۲، اعمال نماییم. از یک سو، می‌خواهیم بدانیم که چه اطلاعاتی را از توابع گرینی که به‌طور مناسب انتخاب شده‌اند می‌توان به‌دست آورد، و از سویی دیگر، می‌خواهیم ببینیم چگونه می‌توان در موارد عملی چنین توابع گرینی را محاسبه نمود. تقریب‌هایی را که قاعداً به منظور حل‌پذیر نمودن مسائل باید به‌کار برد را به‌طور انتقادی بررسی خواهیم کرد.

۴-۱ الکترون‌ها در جامدات

با بررسی الکترون‌های برهم‌کنشی در جامدات شروع می‌کنیم، در اینجا روی چند مسأله نوعی متمرکز می‌شویم بدون اینکه تلاشی در بررسی کامل و مفصل آن داشته باشیم. دو تا از مدل‌های معرفی شده در بخش ۲-۱، مدل ژله‌ای و مدل هابارد، اساس این بحث را تشکیل خواهند داد. با یک مورد خاص دقیقاً حل‌پذیر از مدل هابارد شروع می‌کنیم.

۴-۱-۱ مورد حدی نوار بی‌نهایت باریک

مدل هابارد، الکترون‌های برهم‌کنشی را در نوارهای انرژی نسبتاً باریک توصیف می‌کند. این مدل با هامیلتونی (۲-۱۱۷) بیان می‌شود:

$$\mathcal{H} = \sum_{ij\sigma} (T_{ij} - \mu\delta_{ij}) a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \frac{1}{2} U \sum_{i,\sigma} n_{i\sigma} n_{i-\sigma} \quad (۱-۴)$$

می‌خواهیم تابع گرین تک‌الکترونی را محاسبه نماییم. شکل هامیلتونی (۱-۴)، استفاده از فرمول‌بندی واینر (۳-۳۱۹) را پیشنهاد می‌دهد.

$$G_{ij\sigma}^\alpha(E) = \langle \langle a_{i\sigma}; a_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_E^\alpha \quad (۲-۴)$$

برای معادله حرکت، به جابه‌جاگر

$$[a_{i\sigma}, \mathcal{H}]_- = \sum_m (T_{im} - \mu\delta_{im}) a_{m\sigma} + U n_{i-\sigma} a_{i\sigma} \quad (۳-۴)$$

نیاز داریم. جمله دوم به تابع گرین مرتبه بالاتر منجر می‌شود.

$$\Gamma_{ilm;j\sigma}^\alpha(E) = \langle \langle a_{i-\sigma}^\dagger a_{l-\sigma} a_{m\sigma}; a_{j\sigma}^\dagger \rangle \rangle_E^\alpha \quad (۴-۴)$$

در این صورت، معادله حرکت تابع گرین تک‌الکترونی به صورت: (۱-۴)

$$(E + \mu) G_{ij\sigma}^\alpha(E) = \hbar \delta_{ij} + \sum_m T_{im} G_{mj\sigma}^\alpha(E) + U \Gamma_{iii;j\sigma}^\alpha(E) \quad (۵-۴)$$

نتیجه می‌شود، که به‌خاطر تابع گرین مرتبه بالاتر $\Gamma_{iii;j\sigma}^\alpha(E)$ در سمت راست، مستقیماً قابل حل نیست. بنابراین، معادله حرکت متناظر برای این تابع را نیز می‌نویسیم.

$$\begin{aligned} [n_{i-\sigma} a_{i\sigma}, \mathcal{H}_0]_- &= \sum_{lm\sigma'} (T_{lm} - \mu\delta_{lm}) [n_{i-\sigma} a_{i\sigma}, a_{l\sigma'}^\dagger a_{m\sigma'}]_- \\ &= \sum_{lm\sigma'} (T_{lm} - \mu\delta_{lm}) \{ \delta_{il} \delta_{\sigma\sigma'} n_{i-\sigma} a_{m\sigma'} \\ &\quad - \delta_{il} \delta_{\sigma-\sigma'} a_{i-\sigma}^\dagger a_{i\sigma} a_{m\sigma'} - \delta_{im} \delta_{\sigma-\sigma'} a_{l\sigma'}^\dagger a_{i-\sigma} a_{i\sigma} \} \end{aligned} \quad (۶-۴)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_m (T_{im} - \mu\delta_{im}) \{ n_{i-\sigma} a_{m\sigma} + a_{i-\sigma}^\dagger a_{m-\sigma} a_{i\sigma} \\ &\quad - a_{m-\sigma}^\dagger a_{i-\sigma} a_{i\sigma} \} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [n_{i-\sigma} a_{i\sigma}, \mathcal{H}_1]_- &= \frac{1}{2} U \sum_{m, \sigma'} [n_{i-\sigma} a_{i\sigma}, n_{m\sigma'} n_{m-\sigma'}]_- \\
 &= \frac{1}{2} U \sum_{m, \sigma'} n_{i-\sigma} [a_{i\sigma}, n_{m\sigma'} n_{m-\sigma'}]_- \\
 &= \frac{1}{2} U \sum_{m, \sigma'} n_{i-\sigma} \{ \delta_{im} \delta_{\sigma\sigma'} a_{m\sigma'} n_{m-\sigma'} \\
 &\quad + \delta_{im} \delta_{\sigma-\sigma'} n_{m\sigma'} a_{m-\sigma'} \} \\
 &= U a_{i\sigma} n_{i-\sigma}
 \end{aligned} \tag{۷-۴}$$

در گام آخر، از رابطه:

$$n_{i\sigma}^2 = n_{i\sigma}$$

استفاده کرده‌ایم (که برای فرمیون‌ها برقرار است). به همه این‌ها، برای معادله حرکت می‌یابیم.

$$\begin{aligned}
 (E + \mu - U) \Gamma_{iii;j\sigma}^\alpha(E) \\
 = \hbar \delta_{ij} \langle n_{i-\sigma} \rangle + \sum_m T_{im} \{ \Gamma_{iim;j\sigma}^\alpha(E) + \Gamma_{imi;j\sigma}^\alpha(E) - \Gamma_{mii;j\sigma}^\alpha(E) \}
 \end{aligned} \tag{۸-۴}$$

در این بخش، خود را به مورد حدی نسبتاً ساده اما کاملاً آموزنده یک نوار بی‌نهایت باریک محدود خواهیم کرد،

$$\varepsilon(\mathbf{k}) \equiv T_0 \Leftrightarrow T_{ij} = T_0 \delta_{ij} \tag{۹-۴}$$

که برای آن، رشته معادلات حرکت، همبستگی خود را از دست می‌دهد. از این‌رو، معادله (۸-۴) به:

$$(E + \mu - U - T_0) \Gamma_{iii;j\sigma}^\alpha(E) = \hbar \delta_{ij} \langle n_{-\sigma} \rangle \tag{۱۰-۴}$$

ساده می‌شود. به‌خاطر تقارن انتقالی، مقدار چشمداشتی عملگر تعداد مستقل از جایگاه شبکه $\langle n_{i\sigma} \rangle = \langle n_\sigma \rangle \quad \forall i$ است. جواب (۱۰-۴) را در (۵-۴) قرار می‌دهیم.

$$(E + \mu - T_0) G_{ii\sigma}^\alpha = \hbar + \hbar \frac{U \langle n_{-\sigma} \rangle}{E - (T_0 - \mu + U)}$$

آن‌گاه، درنهایت برای تابع تأخیری می‌یابیم.

$$G_{ii\sigma}^{\alpha}(E) = \frac{\hbar(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)}{E - (T_0 - \mu) + i0^+} + \frac{\hbar \langle n_{-\sigma} \rangle}{E - (T_0 + U - \mu) + i0^+} \quad (۱۱-۴)$$

از این‌رو، $G_{ii\sigma}^{ret}(E)$ دارای دو قطب

$$E_{1\sigma} = T_0 - \mu = E_{1-\sigma} \quad (۱۲-۴)$$

$$E_{2\sigma} = T_0 + U - \mu = E_{2-\sigma} \quad (۱۳-۴)$$

است که به انرژی‌های برانگیختگی ممکن، مربوط هستند. تراز اصلی T_0 به‌خاطر برهم‌کنش کولنی به دو تراز شبه ذره‌ای مستقل از اسپین $E_{1\sigma}$ و $E_{2\sigma}$ شکافته می‌شود. با استفاده از (۱۵۴-۳) می‌توان چگالی طیفی را به سهولت از (۱۱-۴) به‌دست آورد.

$$S_{ii\sigma}(E) = \hbar \sum_{j=1}^2 \alpha_{j\sigma} \delta(E - E_{j\sigma}) \quad (۱۴-۴)$$

وزن‌های طیفی

$$\alpha_{1\sigma} = 1 - \langle n_{-\sigma} \rangle ; \quad \alpha_{2\sigma} = \langle n_{-\sigma} \rangle \quad (۱۵-۴)$$

مقیاسی از این احتمال هستند که الکترون σ با یک الکترون $(-\sigma)$ در همان جایگاه شبکه روبرو شود، $(\alpha_{2\sigma})$ ، یا در یک جایگاه اشغال‌نشده وارد شود، $(\alpha_{1\sigma})$. در مورد احتمال اول چگالی حالت‌های شبه‌ذره‌ای بایستی بر برهم‌کنش کولنی U غلبه‌کرد.

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{1}{N\hbar} \sum_i S_{ii\sigma}(E - \mu) = \frac{1}{\hbar} S_{ii\sigma}(E - \mu) \quad (۱۶-۴)$$

$$= (1 - \langle n_{-\sigma} \rangle) \delta(E - T_0) + \langle n_{-\sigma} \rangle \delta(E - (T_0 + U))$$

در این حد از دو نوار بی‌نهایت باریک، به در انرژی‌های T_0 و $T_0 + U$ مبتنی است. نوار پایین‌تر، که به تراز تبهگن می‌شود، شامل $(1 - \langle n_{-\sigma} \rangle)$ ، و نوار بالاتر $\langle n_{-\sigma} \rangle$ حالت بر اتم می‌باشد. از این‌رو، تعداد حالت‌ها در زیر نوار شبه‌ذره‌ای وابسته به دما است!

برای تعیین کاملی از چگالی حالات شبه‌ذره‌ای، بایستی مقدار چشمداشتی $\langle n_{-\sigma} \rangle$ را با استفاده از قضیه طیفی (۱۵۷-۳) بیابیم.

$$\langle n_{-\sigma} \rangle = \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE S_{ii-\sigma}(E) [e^{\beta E} + 1]^{-1}$$

$$= (1 - \langle n_{\sigma} \rangle) f_{-}(T_0) + \langle n_{\sigma} \rangle f_{-}(T_0 + U)$$

در اینجا، $f_{-}(E)$ باز هم تابع فرمی است. عبارت متناظر را به جای $\langle n_{\sigma} \rangle$ قرار می‌دهیم. از این‌رو،

$$\langle n_{-\sigma} \rangle = \frac{f_{-}(T_0)}{1 + f_{-}(T_0) - f_{-}(T_0 + U)} \quad (۱۷-۴)$$

آن‌گاه، حل کامل برای $\rho_{-\sigma}(E)$ با

$$\rho_{\sigma}(E) = \frac{1}{1 + f_{-}(T_0) - f_{-}(T_0 + U)} \{ (1 - f_{-}(T_0 + U)) \delta(E - T_0) + f_{-}(T_0) \delta(E - T_0 - U) \}$$

$$= \rho_{-\sigma}(E) \quad (۱۸-۴)$$

داده می‌شود. از این‌رو، چگالی حالات شبه ذره‌ای مستقل از اسپین است. بنابراین، مغناطش خودبه‌خودی، یعنی فرومغناطیس، در مورد حدی یک نوار بی‌نهایت باریک وارد نمی‌شود.

$$\langle n_{\sigma} \rangle = \langle n_{-\sigma} \rangle = \frac{1}{2} n \quad (۱۹-۴)$$

۴-۱-۲ تقریب هارتری - فوک

در این بخش، می‌خواهیم یک تقریب بسیار ساده اما بسیار بارز را معرفی کنیم، که یقیناً برای نیازهای دقیق بسیار زمخت است، اما خیلی اوقات می‌تواند یک درک ارزشمند مقدماتی از فیزیک مدل فراهم آورد. تقریب هارتری - فوک در مدل هابارد در متون به مدل استونر معروف است و همین‌طور در بحث به رفتار مغناطیسی الکترون‌های نواری اشاره دارد.

نقطه شروع ما اتحاد زیر برای ضرب دو عملگر A و B است:

$$AB = (A - \langle A \rangle)(B - \langle B \rangle) + A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (۲۰-۴)$$

ساده‌سازی شامل یک خطی‌سازی از این عبارت است. ضرب AB را به‌صورت مؤلفه‌ای از یک تابع گرین تصور می‌کنیم، که فی الواقع به‌صورت یک میانگین ترمودینامیکی تعریف می‌شود. تقریب هارتری - فوک یا همچنین تقریب میدان مولکولی /فت و خیزهای مشاهده‌پذیرها را حول میانگین‌های ترمودینامیکی‌شان در توابع گرین نادیده می‌گیرد؛ از این‌رو، جایگزینی

$$AB \xrightarrow{HFA} A\langle B \rangle + \langle A \rangle B - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (۲۱-۴)$$

را اتخاذ می‌کند. جمله آخر یک عدد c محض است و در معادلات حرکت ظاهر نمی‌شود.

تقریب (۲۱-۴) را برای تابع گرین $\Gamma_{iii;j\sigma}^{\alpha}(E)$ در (۵-۴) انجام می‌دهیم. به‌عنوان نتیجه‌ای از:

$$a_{i\sigma}n_{i-\sigma} \xrightarrow{HFA} a_{i\sigma}\langle n_{-\sigma} \rangle + \langle a_{i\sigma} \rangle n_{i-\sigma} - \langle a_{i\sigma} \rangle \langle n_{-\sigma} \rangle = a_{i\sigma}\langle n_{-\sigma} \rangle$$

برای تابع گرین مرتبه بالاتر $\Gamma_{iii;j\sigma}^{\alpha}(E)$ در تقریب هارتری - فوک، می‌یابیم.

$$\Gamma_{iii;j\sigma}^{\alpha}(E) \xrightarrow{HFA} \langle n_{-\sigma} \rangle G_{ij\sigma}^{\alpha}(E) \quad (۲۲-۴)$$

$\langle n_{-\sigma} \rangle$ ، یک اسکالر، می‌تواند از تابع گرین حذف شود. آنگاه معادله حرکت (۵-۴) را می‌توان به

$$(E + \mu - U\langle n_{-\sigma} \rangle)G_{ij\sigma}^{\alpha}(E) = \hbar\delta_{ij} + \sum_m T_{im}G_{mj\sigma}^{\alpha}(E)$$

ساده‌کرد، و آن را با تبدیل فوریه به اعداد موج، می‌توان به سهولت حل کرد.

$$G_{k\sigma}(E) = \frac{\hbar}{E - (\varepsilon(\mathbf{k}) + U\langle n_{-\sigma} \rangle - \mu)} \equiv G_{k\sigma}^{(0)}(E - U\langle n_{-\sigma} \rangle) \quad (۲۳-۴)$$

در تقریب هارتری - فوک، تابع گرین تک‌الکترونی مدل هابارد دارای همان شکل با فرم دستگاه آزاد، اما با انرژی‌های تک‌ذره‌ای وابسته به اسپین بازبهنجار شده/ست. با استفاده از کمیت بدون بعد

$$m = \frac{1}{2}(\langle n_{\uparrow} \rangle - \langle n_{\downarrow} \rangle) \text{ مغناطش} \quad (۲۴-۴)$$

و نیز

$$n = \langle n_{\uparrow} \rangle + \langle n_{\downarrow} \rangle \quad \text{چگالی ذره} \quad (۲۵-۴)$$

انرژی‌های شبه ذره‌ای با

$$E_{\sigma}(\mathbf{k}) = \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}Un \right) - z_{\sigma}mU \quad (۲۶-۴)$$

داده می‌شوند. z_{σ} نمادی برای علامت است: $(z_{\uparrow} = +1, z_{\downarrow} = -1)$. برای حل کامل مسأله، هنوز بایستی مقدار چشمداشتی $\langle n_{-\sigma} \rangle$ را در (۲۳-۴) تعیین کنیم. می‌توان این را با به‌کار بردن قضیه طیفی انجام داد. از (۲۳-۴)، مستقیماً عبارت زیر

$$S_{k\sigma}(E) = \hbar \delta(E - \varepsilon(\mathbf{k}) - U\langle n_{-\sigma} \rangle + \mu) \quad (۲۷-۴)$$

را برای چگالی طیفی می‌خوانیم. آن‌گاه، قضیه طیفی (۱۵۷-۴) به‌دست می‌دهد.

$$\langle n_{-\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_i \langle n_{i-\sigma} \rangle$$

$$= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle a_{\mathbf{k}-\sigma}^{\dagger} a_{\mathbf{k}-\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dE f_{-}(E) S_{\mathbf{k}-\sigma}(E - \mu)$$

این به این معنی است که

$$\langle n_{-\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \{1 + \exp[\beta(\varepsilon(\mathbf{k}) + U\langle n_{\sigma} \rangle - \mu)]\}^{-1} \quad (۲۸-۴)$$

این، یک معادله تابعی ضمنی برای تعداد میانگین ذرات $\langle n_{\sigma} \rangle$ و $\langle n_{-\sigma} \rangle$ است که می‌توانیم در عبارت مربوط به برای مغناطش m بازآرایی نماییم.

$$m = \frac{1}{2} \sinh(\beta Um) \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} g_{\mathbf{k}}(\beta, n, m) \quad (۲۹-۴)$$

در اینجا، از کوتاه‌نویسی

$$g_{\mathbf{k}}(\beta, n, m) = \left\{ \cosh(\beta Um) + \cosh \left[\beta \left(\varepsilon(\mathbf{k}) + \frac{1}{2}Un - \mu \right) \right] \right\}^{-1} \quad (۳۰-۴)$$

استفاده کرده‌ایم. برای چگالی ذره، داریم.

$n =$

$$\frac{1}{N} \sum_k \left\{ \exp \left[-\beta \left(\varepsilon(k) + \frac{1}{2} Un - \mu \right) \right] + \cosh(\beta Um) \right\} g_k(\beta, n, m) \quad (۳۱-۴)$$

می‌توانیم فوراً تصدیق کنیم که حالت غیرمغناطیسی $m = 0$ همواره یک حل ممکن را نمایش می‌دهد. برای دیدن اینکه حل‌های دیگری برای $m \neq 0$ وجود دارد؛ عبارت (۳۰-۴) را با استفاده از چگالی حالات (۲۱۳-۳) دستگاه غیربرهم‌کنشی، تا حدی بازآرایی می‌کنیم،

$$\rho_0(E) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(E - \varepsilon(k))$$

که می‌توانیم فرض کنیم که معلوم باشد.

$$\frac{1}{N} \sum_k g_k(\beta, n, m) = \quad (۳۲-۴)$$

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho_0(x) \left\{ \cosh(\beta Um) + \cosh \left[\beta \left(x + \frac{1}{2} Un - \mu \right) \right] \right\}^{-1}$$

در دماهای بالا ($T \rightarrow \infty \Leftrightarrow \beta \rightarrow 0$)، می‌توانیم توابع هذلولی را بسط دهیم.

$$\sinh x = x + \frac{1}{3!} x^3 + \dots ; \quad \cosh x = 1 + \frac{1}{2!} x^2 + \dots$$

این به این معنی است که

$$\frac{1}{N} \sum_k g_k(\beta, n, m) \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} dx \rho_0(x) , = \frac{1}{2} \quad (۳۳-۴)$$

یا، با (۲۹-۴)

$$m \xrightarrow{T \rightarrow \infty} \frac{1}{4} \beta Um \quad (۳۴-۴)$$

این معادله دارای تک‌جواب $m = 0$ است. از این‌رو، در دماهای بالا، هیچ مغناطش خودبه‌خودی $m \neq 0$ وجود ندارد. اگر اصلاً یک حل فرومغناطیسی $m \neq 0$ وجود داشته باشد، آن‌گاه به‌وضوح، تنها زیر دمای بحرانی T_C (دمای کوری) است. اگر از پایین به T_C نزدیک شویم، آن‌گاه، m بایستی بسیار کوچک شود (گذار فاز مرتبه دوم!) به‌طوری که در (۴-۳۲)، جمله اول را می‌توانیم بسط دهیم. آن‌گاه، در همسایگی T_C ، با (۴-۲۵) بایستی بیابیم.

$$T \rightarrow T_C :$$

$$1 \approx \frac{1}{2} \beta_C U \int_{-\infty}^{+\infty} dx \frac{\rho_0(x)}{1 + \cosh\left(\beta_C + \left(x + \frac{1}{2} Un - \mu\right)\right)} \quad (۴-۳۵)$$

در حقیقت، برای درک فرومغناطیس، باید حداقل نیاز داشته باشیم که

$$T_C = 0^+ \quad (\beta_C = (k_B T_C)^{-1} \rightarrow \infty)$$

برآورده شود. با نمایش زیر از تابع δ (به‌عنوان تمرین ۴-۱-۲ اثبات کنید)،

$$\delta(x) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{1}{2} \left[\frac{\beta}{1 + \cosh(\beta x)} \right] \quad (۴-۳۶)$$

با استفاده از (۴-۳۵)، معیار

$$1 \approx U \rho_0 \left(\mu - \frac{1}{2} Un \right) \quad (۴-۳۷)$$

را به‌دست می‌آوریم. در $T \approx 0$ ، پتانسیل شیمیایی μ را می‌توان با انرژی فرمی E_F جایگزین کرد. از (۴-۲۶)، انرژی فرمی به انرژی دستگاه آزاد (E_F) ، مربوط است، به‌خاطر $m \approx 0$ ، به‌طوری که $E_F \approx \varepsilon_F + \frac{1}{2} Un$. آن‌گاه، از (۴-۳۷)

معیار استونر

$$1 \leq U \rho_0(\varepsilon_F) \quad (۴-۳۸)$$

معروف را برای رویداد فرومغناطیس به‌دست می‌آوریم. اگر این رابطه برآورده شود، آن‌گاه دستگاه الکترونی بایستی یک مغناطش خودبه‌خودی $m \neq 0$ را نمایش دهد، یعنی با یک میدان مغناطیسی خارجی القاء نشده باشد. علی‌رغم فرض‌های ساده‌سازی

عمده و گوناگون که در نهایت به (۳۸-۴) منجر شد، اثبات شده است که معیار استونر برای روند‌های پیش‌گویی صحیح است.

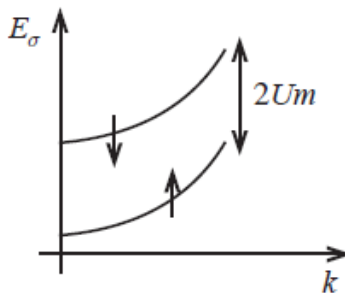
در نهایت به انرژی‌های شبه ذره‌ای $E_{\sigma}(\mathbf{k})$ ، (۲۶-۴) باز می‌گردیم. مشاهده کرده‌ایم که تحت شرایط خاص (۳۸-۴)، مغناطش می‌تواند غیرصفر باشد، $m \neq 0$. این با یک شکافتگی تبادلی وابسته به دما ΔE_{ex} متناظر است.

$$\Delta E_{ex} = 2Um$$

که در مثال ساده کنونی انعطاف‌ناپذیر (سفت و محکم)، یعنی مستقل از $\mathbf{k}$ است. در ارتباط با مفهوم توابع گرین تک‌الکترونی، انرژی‌های شبه ذره‌ای $E_{\sigma}(\mathbf{k})$ همان انرژی‌هایی هستند که بایستی به منظور اضافه کردن یک الکترون $(\mathbf{k}, \sigma)$ به دستگاه N ذره‌ای فراهم آورد. آن‌گاه، برای انرژی برانگیختگی دقیق در دستگاه، می‌یابیم.

$$\Delta E_{\sigma\sigma'}(\mathbf{k}; \mathbf{q}) = E_{\sigma'}(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - E_{\sigma}(\mathbf{k}) \quad (۳۹-۴)$$

$$= \varepsilon(\mathbf{k} + \mathbf{q}) - \varepsilon(\mathbf{k}) + mU(z_{\sigma} - z_{\sigma'})$$

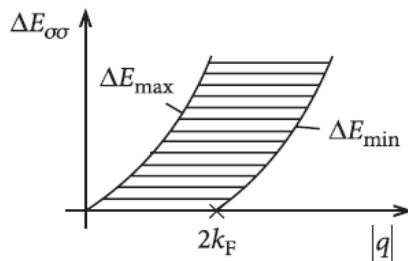


شکل ۴-۱. شکافتگی وابسته به اسپین انرژی‌های شبه‌ذره‌ای در مدل استونر برای دماهای پایین‌تر از دمای کوری.

اگر یک برانگیختگی از این نوع بدون چرخش اسپینی ($\sigma = \sigma'$) در یک زیر نوار اتفاق بیافتد، آن‌گاه به دلیل جابه‌جایی نواری صلب، برانگیختگی با یک گذار متناظر در یک دستگاه غیر برهم‌کنشی ($U = 0$) یکسان است. در مورد حجم فرمی با تقارن کروی، یعنی $\varepsilon(\mathbf{k}) = \hbar^2 k^2 / 2m^*$ ، طیف برانگیختگی بین دو منحنی قرارداد (شکل ۴-۲ را ببینید):

$$\Delta E_{\max}(q) = \frac{\hbar^2}{2m^*} (q^2 + 2k_F |q|) \quad (40-4)$$

$$\Delta E_{\min}(q) = \begin{cases} \frac{\hbar^2}{2m^*} (q^2 - 2k_F |q|) , & |q| > 2k_F \text{ وقتی} \\ 0 & \text{در غیر این صورت} \end{cases} \quad (41-4)$$

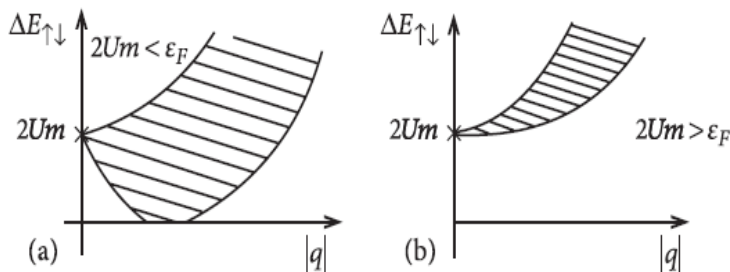


شکل ۴-۲. طیف برانگیختگی در مدل استونر برای گذارهای غیر چرخش اسپینی.

در مقابل، برانگیختگی‌ها با یک چرخش اسپینی، گذارهایی بین دو زیر نوار هستند.

$$\Delta E_{\uparrow\downarrow}(k; q) = \varepsilon(k + q) - \varepsilon(k) + 2Um \quad (42-4)$$

بین فرومغناطیس قوی ($2Um > \varepsilon_F$) و ضعیف ($2Um < \varepsilon_F$) تمیز قائل می‌شوند (شکل ۴-۳ را ببینید).



شکل ۴-۳. طیف برانگیختگی در مدل استونر برای گذارهای چرخش اسپینی: (الف) یک فرومغناطیس ضعیف؛ (ب) یک فرومغناطیس قوی.

۳-۱-۴ همبستگی‌های الکترونی

همان‌طور که در بخش آخر توضیح داده‌شد، تقریب هارتری - فوک برای مدل هابارد به تابع گرین مرتبه بالاتر $\Gamma_{iii\sigma}^{\alpha}(E)$ اعمال می‌شود (رجوع شود به (۴-۲۲))، که برای تابع گرین تک‌الکترونی در معادله حرکت (۴-۵) ظاهر می‌شود. به سهولت می‌توان خود را متقاعد کرد که اگر تقریب (۴-۲۱) مستقیماً به هامیلتونی (۴-۱) اعمال شده بود همان نتایج به‌دست می‌آمد.

$$\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_S =$$

$$\sum_{i,j,\sigma} (T_{ij} + (U\langle n_{-\sigma} \rangle - \mu)\delta_{ij}) a_{i\sigma}^{\dagger} a_{j\sigma} = \sum_{k,\sigma} (E_{\sigma}(k) - \mu) a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma} \quad (۴۳-۴)$$

مدل استونر واقعی را تعریف می‌کند. یک عملگر تک‌ذره‌ای است، که برای آن $G_{k\sigma}(E)$ در توافق با (۴-۲۳)، به آسانی می‌تواند به‌طور دقیق محاسبه گردد. اطلاعات اضافی را می‌توانیم با تجزیه زنجیره معادلات حرکت در مرحله بعدی، مثلاً در تابع گرین جدیدی که در معادله حرکت (۴-۸) برای $\Gamma_{iii;j\sigma}^{\alpha}(E)$ ظاهر می‌شود بدست می‌آوریم. نتیجه را دیگر نمی‌توان در چارچوب یک مدل تک‌ذره‌ای فرمول‌بندی کرد. در این ارتباط، مفهوم

همبستگی‌های ذره

معرفی می‌گردد که در آن تمام برهم‌کنش‌های ذرات که در یک مدل تک‌ذره‌ای قابل توصیف نیستند گنجانده می‌شود. بنابراین

اثرات بس ذره‌ای

واقعی را نمایش می‌دهند.

تجزیه‌ای که چندین بار در بالا ذکر شد توسط خود هابارد معرفی شده‌بود، که به‌وسیله آن یک حل تقریبی برای مدل خود پیشنهاد داد. فرآیند هارتری - فوک (۴-۲۱) به توابع گرین معادله (۴-۸) اعمال می‌شود. از این‌رو، با احتساب پایستگی تعداد ذره و اسپین، می‌یابیم.

$$\Gamma_{iim;j\sigma}^{\alpha}(E) \xrightarrow{i \neq m} \langle n_{-\sigma} \rangle G_{mj\sigma}^{\alpha}(E) \quad (۴۴-۴)$$

$$\Gamma_{imi;j\sigma}^{\alpha}(E) \xrightarrow{i \neq m} \langle a_{i-\sigma}^{\dagger} a_{m-\sigma} \rangle G_{ij\sigma}^{\alpha}(E) \quad (45-4)$$

$$\Gamma_{mii;j\sigma}^{\alpha}(E) \xrightarrow{i \neq m} \langle a_{m-\sigma}^{\dagger} a_{i-\sigma} \rangle G_{ij\sigma}^{\alpha}(E) \quad (46-4)$$

معادلات (۴۵-۴) و (۴۶-۴) هیچ سهمی در درج در (۸-۴) نمی‌دهند،

$$\begin{aligned} & \sum_m^{m \neq i} T_{im} \left(\Gamma_{imi;j\sigma}^{\alpha}(E) - \Gamma_{mii;j\sigma}^{\alpha}(E) \right) \\ & \rightarrow G_{ij\sigma}^{\alpha}(E) \sum_m T_{im} (\langle a_{i-\sigma}^{\dagger} a_{m-\sigma} \rangle - \langle a_{m-\sigma}^{\dagger} a_{i-\sigma} \rangle) \end{aligned} \quad (47-4)$$

اگر مثل همیشه، یک شبکه با تقارن انتقالی را فرض کنیم.

$$\begin{aligned} & \sum_m T_{im} (\langle a_{i-\sigma}^{\dagger} a_{m-\sigma} \rangle - \langle a_{m-\sigma}^{\dagger} a_{i-\sigma} \rangle) \\ & = \frac{1}{N} \sum_i \sum_m T_{im} (\langle a_{i-\sigma}^{\dagger} a_{m-\sigma} \rangle - \langle a_{m-\sigma}^{\dagger} a_{i-\sigma} \rangle) \\ & = \frac{1}{N} \sum_{i,m} (T_{im} - T_{mi}) \langle a_{i-\sigma}^{\dagger} a_{m-\sigma} \rangle \\ & = 0 \end{aligned} \quad (48-4)$$

در رفتن از خط اول به خط دوم، از تقارن انتقالی استفاده کرده‌ایم؛ در رفتن از خط دوم به خط سوم برای جمله دوم، شاخص‌های جمع‌زنی را عوض می‌کنیم و در رفتن از خط سوم به خط چهارم، از $T_{im} = T_{mi}$ استفاده می‌شود. با معادلات (۴۷-۴) و (۴۸-۴)، برای معادله حرکت (۸-۴) داریم.

$$(E + \mu - T_0 - U) \Gamma_{iii;j\sigma}^{\alpha}(E) = \hbar \delta_{ij} \langle n_{-\sigma} \rangle + \langle n_{-\sigma} \rangle \sum_m^{m \neq i} T_{im} G_{mj\sigma}^{\alpha}(E)$$

با حل کردن برحسب $\Gamma_{iii;j\sigma}^{\alpha}(E)$ و درج در (۵-۴)، یک رابطه اساسی برای تابع گرین تک‌الکترونی به‌دست می‌آوریم: