کاربرد هایی از روش کوانتش دوم

در فیزیک ماده چگال - بخش دوم

وحیدکریمی پور- دانشکده فیزیک - دانشگاه صنعتی شریف

۱۰ دی ۱۳۹۶

---

۱ مقدمه

در درس گذشته دیدیم که چگونه مطالعه مدل مغناطیس هایزنبرگ منجر به مطالعه یک گاز بوزونی در روی یک شبکه می شود. در این درس می خواهیم مثال های دیگری را ازکاربرد کوانتش دوم مطالعه کنیم. این مثال ها از مثالهای درس قبل به فلسفه اصلی کوانتش دوم که خاستگاه اصلی اش مطالعه سیستمی از ذرات جای ناگزیده یکسان است نزدیک تر و از این جهت آموزنده تر است. نخست از مثال های خیلی ساده و ایده آل شروع می کنیم و سپس به مثال های واقعی تر می رسیم.

---

۲ بوزون های آزاد در یک جاه پتانسیل هارمونیک

مجموعه ای از ذرات بوزون را که با یکدیگر برهم کنش ندارند در نظر بگیرید. این ذرات همه در یک چاه پتانسیل هارمونیک با پتانسیل $V(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$ ریخته شده اند. هر ذره با ذره دیگر برهم کنش ندارد و تنها تحت تاثیر این پتانسیل خارجی است. اگر از فرمالیزم کوانتش

دوم استفاده نکنیم ، هامیلتونی این سیستم که آن را با H_0 نشان می دهیم به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_0 = \sum_{j=1}^{N} h_j = \sum_{j=1}^{N} \frac{\hat{P}_j^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}_j^2 \qquad (۱)$$

بنا براین هامیلتونی این سیستم مجموع عملگرهای تک ذره ای است و در نتیجه در صورت بندی در صورت بندی کوانتش دوم هامیلتونی این سیستم به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_0 = \sum_{\alpha,\beta} \langle \alpha | \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 | \beta \rangle a_\alpha^\dagger a_\beta \qquad (۲)$$

که در آن $|\alpha\rangle, \quad |\beta\rangle$ بردارهای پایه برای فضای هیلبرت تک ذره ای هستند. فرم هامیلتونی بستگی به انتخاب این پایه دارد . بسته به انتخاب این پایه فرم هامیلتونی می تواند ساده یا پیچیده باشد و البته درهر پایه ای نیز تعبیر و تفسیر مفهومی خاص خود و هم چنین فایده خاص خود را خواهد داشت . دراینجا سه نوع پایه مختلف در نظر می گیریم و هامیلتونی را برای این سه نوع پایه می نویسیم:

۱.۲ پایه مختصات

در این پایه در رابطه بالا می بایست تغییرات زیر را از نظر نمادها انجام دهیم:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |x\rangle, \quad |\beta\rangle \longrightarrow |y\rangle, \quad a_\alpha^\dagger \longrightarrow \psi^\dagger(x), \quad a_\beta \longrightarrow \psi(y). \qquad (۳)$$

در اینجا $\psi^\dagger(x)$ عملگری است که یک ذره را در نقطه x خلق می کند. عملگر $\psi(x)$ نیز ذره را در نقطه x نابود می کند. بنابراین هامیلتونی به شکل زیر در می آید:

$$H_0 = \int dx\, dy\, \langle x | \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 | y \rangle\, \psi^\dagger(x)\, \psi(y). \qquad (۴)$$

محاسبه عنصر ماتریسی ساده است. خواهیم داشت:

$$\langle x | \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 X^2 | y \rangle = \left(-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2}{\partial_x^2} + \frac{1}{2} m\omega^2 x^2 \right) \delta(x-y) \qquad (۵)$$

و در نتیجه هامیلتونی به صورت زیر در خواهد آمد:

$$H_0 = \int dx\ \psi^\dagger(x) \left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial_x^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2 \right) \psi(x) \qquad (۶)$$

دقت کنید که $\psi^\dagger(x)\psi(x)$ عملگر شمارش ذرات در نقطه x است و بنابراین جمله دوم در این هامیلتونی تعداد ذرات در نقطه x را می شمارد و به آنها انرژی پتانسیل $\frac{1}{2}m\omega^2x^2$ نسبت داده و سپس همه انرژی ها را با هم جمع می‌کند. بنابراین جمله دوم انرژی ذرات را در چاه پتانسیل هارمونیک حساب می‌کند. جمله اول در واقع یک جمله انرژی جنبشی است زیرا ذرات را در نقطه x نابودکرده و آنها را در نقاط خیلی نزدیک آن خلق می‌کند به عبارت دیگر این جمله یک جمله پرش [۱] است که باعث حرکت ذرات در طول شبکه می شود. برای اینکه معنای این پرش را بهتر بفهمیم کافی است که جمله $\psi^\dagger(x)\left(-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\partial^2}{\partial_x^2}\right)\psi(x)$ را به شکل گسسته بنویسیم. اگر بجای یک خط پیوسته یک شبکه با طول واحد برابر با a داشته باشیم، و قرار دهیم $\psi(x) \equiv \psi(na) \equiv \psi_n$ این جمله تبدیل می شود به

$$-\frac{\hbar^2}{2ma^2}\psi_n^\dagger\left(\psi_{n+1} + \psi_{n-1} - 2\psi_n\right) \qquad (۷)$$

که به خوبی نمایانگر پرش از یک نقطه به نقاط همسایه است.

۱mm

۲.۲ پایه تکانه

در این پایه در رابطه بالا می بایست تغییرات زیر را از نظر نمادها انجام دهیم:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |p\rangle, \quad |\beta\rangle \longrightarrow |q\rangle, \quad a_\alpha^\dagger \longrightarrow \phi^\dagger(p), \quad a_\beta \longrightarrow \phi(q). \qquad (۸)$$

در اینجا $\phi^\dagger(p)$ عملگری است که یک ذره را در تکانه p خلق می‌کند. عملگر $\phi(p)$ نیز ذره را در تکانه p نابود می‌کند. و بنابراین هامیلتونی به شکل زیر در می آید:

$$H_0 = \int dp\ dq\ \langle p|\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2X^2|q\rangle\ \phi_(p)^\dagger\phi(q). \qquad (۹)$$

محاسبه عنصر ماتریسی ساده است. خواهیم داشت:

[۱] hopping term

$$\langle p|\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2X^2|q\rangle=\left(p^2-\frac{1}{2}m\omega^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\delta(p-q) \qquad (۱۰)$$

و در نتیجه هامیلتونی به صورت زیر در خواهد آمد:

$$H_0=\int dp\phi^\dagger(p)\left(\frac{p^2}{2m}-\frac{1}{2}m\omega^2\frac{\partial^2}{\partial p^2}\right)\phi(p) \qquad (۱۱)$$

در این پایه نیز هامیلتونی تفسیری مشابه با هامیلتونی قبلی دارد. در اینجا $\phi^\dagger(p)\phi(p)$ عملگر شمارش ذرات در تکانه ی p است و بنابراین جمله اول این هامیلتونی تعداد ذرات را با تکانه ی p را می شمارد و به آنها انرژی جنبشی $\frac{p^2}{2m}$ نسبت داده و سپس همه انرژی های جنبشی را با هم جمع می‌کند. بنابراین جمله اول انرژی جنبشی ذرات را حساب می‌کند. اما جمله دوم یعنی پتانسیل هارمونیک باعث می شود که تکانه ذرات تغییر کند و یک ذره با تکانه ی p نابود شده و همان ذره در تکانه های نزدیک خلق شود. این جمله یک جمله پرش در فضای تکانه است.

۳.۲ پایه انرژی

شاید مناسب ترین پایه برای توصیف این هامیلتونی پایه انرژی باشد یعنی پایه ای‌که در آن به جای حالت های تک ذره ای ویژه حالت های انرژی تک ذره را به‌کار می بریم. ویژه حالت های انرژی را با $|\phi_n\rangle$ و انرژی آنها را با ϵ_n نشان می دهیم:

$$\left(\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2X^2\right)|\phi_n\rangle=\epsilon_n|\phi_n\rangle. \qquad (۱۲)$$

برای این‌کار در رابطه (۲) می بایست تغییرات زیر را از نظر نمادها انجام دهیم:

$$|\alpha\rangle\longrightarrow|\phi_n\rangle,\quad |\beta\longrightarrow|\phi_m\rangle,\quad a_\alpha^\dagger\longrightarrow a_n^\dagger,\quad a_\beta\longrightarrow a_m. \qquad (۱۳)$$

با این تغییرات هامیلتونی به شکل زیر در می آید:

$$H_0=\sum_{m,n}\langle\phi_n|\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2X^2|\epsilon_m\rangle\ a_n^\dagger a_m. \qquad (۱۴)$$

در اینجا $a_n^\dagger$ عملگری است که یک ذره را در تراز انرژی $|\phi_n\rangle$ خلق می‌کند. عملگر a_n نیز ذره را در همان سطح انرژی نابود می‌کند. محاسبه عنصر ماتریسی ساده است. خواهیم داشت:

$$\langle\phi_n|\frac{\hat{P}^2}{2m}+\frac{1}{2}m\omega^2X^2|\phi_m\rangle=\epsilon_n\delta_{m,n} \tag{۱۵}$$

و در نتیجه هامیلتونی به صورت زیر در خواهد آمد:

$$H_0=\sum_n\epsilon_n a_n^\dagger a_n. \tag{۱۶}$$

دیده می شود که در پایه انرژی هامیلتونی شکل خیلی ساده ای پیدا می‌کند. این رابطه تفسیر خیلی ساده ای دارد . عملگر $a_n^\dagger a_n$ تعداد ذرات را در تراز n ام انرژی می شمارد و سپس انرژی همه ذرات را با هم جمع می‌کند. آنچه که به این طریق به دست می آید، انرژی کل است. دقت کنید که هیچ جمله ی پرشی بین تراز های انرژی وجود ندارد زیرا تراز های انرژی تک ذره ای را به طور دقیق حساب کرده ایم و ذرات نیز با هم برهم کنش ندارند بنابراین هر ذره که در یک تراز انرژی قرار دارد، در همان تراز انرژی باقی می ماند. شکل (۱) یک حالت ویژه انرژی از هامیلتونی را نشان می دهد.

حالت پایه این هامیلتونی حالتی است که در آن هیچ ذره ای در هیچ ترازی نیست. این حالت را با $|\mathbf{0}\rangle=|0,0,\cdots 0\rangle$ نشان می دهیم. حالت های دیگر حالت هایی هستند که در هر تراز انرژی تعداد معینی ذرات وجود دارد. در این صورت خواهیم داشت:

$$H_0|n_1,n_2,\cdots n_k\cdots\rangle=(\sum_{k=1}^{\infty}n_k\epsilon_k)|n_1,n_2,\cdots n_k\cdots\rangle \tag{۱۷}$$

۴.۲ درجه آزادی اسپین

تا کنون درجه آزادی اسپین را در نظر نگرفتیم. اکنون می توانیم این درجه آزادی را نیز اضافه کنیم. در این صورت یک پایه کامل برای فضای تک ذره ای عبارت خواهد بود از $\{|x,\sigma\rangle\}$ و یا $\{|p,\sigma\rangle\}$ که درآن $\sigma=\pm$ نشان دهنده ی درجه آزادی اسپین است. فرض می کنیم که ذرات علاوه

بر اینکه در پتانسیل هارمونیک قرارگرفته اند تحت تاثیر یک میدان مغناطیسی یکنواخت در راستای z نیز هستند. در این صورت هامیلتونی ای که روی یک ذره اثر می‌کند به شکل زیر است:

$$h = \left(\frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{1}{2} m\omega^2 \hat{X}^2 \right) \otimes I + I \otimes (-\mu B\, \sigma_z)\,. \tag{۱۸}$$

که در آن $\mu = \frac{e\hbar}{mc}$ و e بار ذره است و هامیلتونی کل طبیعتا مجموع این هامیلتونی برای ذرات مختلف است. ویژه حالت ها و انرژی ها ی تک ذره را برای این مسئله می توان از ویژه حالت های مسئله قبلی ساخت . این ویژه حالت ها برابرند با:

$$\begin{aligned} h|\phi_n,\uparrow\rangle &= (\epsilon_n - \mu B)|\phi_n,\uparrow\rangle, \\ h|\phi_n,\downarrow\rangle &= (\epsilon_n + \mu B)|\phi_n,\downarrow\rangle, \end{aligned} \tag{۱۹}$$

که در آن منظور از $|\uparrow\rangle$ و $|\downarrow\rangle$ به ترتیب ویژه حالت های عملگر σ_z با ویژه مقادیر 1 و -1 هستند. در نتیجه هامیلتونی این سیستم به صورت زیر در می آید:

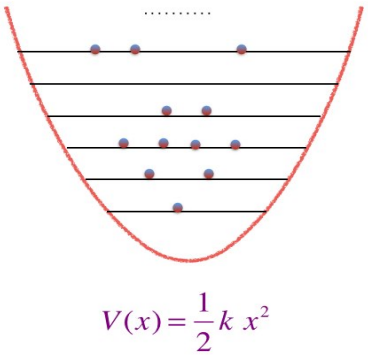
$$H_0 = \sum_{n=0}^{\infty} (\epsilon_n + \mu) a^\dagger_{n,\downarrow} a_{n,\downarrow} + \sum_{n=0}^{\infty} (\epsilon_n - \mu) a^\dagger_{n,\uparrow} a_{n,\uparrow}. \tag{۲۰}$$

---

۳ فرمیون های آزاد در یک چاه پتانسیل هارمونیک

اکنون از خود می پرسیم که اگر ذراتی که در مثالهای قبلی مطالعه کردیم به جای بوزون فرمیون می بودند چه تغییراتی می بایست در روابط و نتایج بالا مشاهده می‌کردیم. پاسخ به این سوال ساده است. همه روابط به همان شکل باقی می مانند با این تفاوت که عملگرهای خلق و فنای ذرات بجای روابط جابجایی دارای روابط پادجابجایی هستند. با در نظرگرفتن اسپین این روابط به شکل زیر هستند:

$$\{a_{n,\sigma},\, a_{n',\sigma'}\} = 0 \qquad \{a^\dagger_{n,\sigma},\, a^\dagger_{n',\sigma'}\} = 0 \qquad \{a_{n,\sigma},\, a^\dagger_{n',\sigma'}\} = \delta_{n,n'}\delta_{\sigma,\sigma'}. \tag{۲۱}$$



شکل ۱ : بوزون های بدون برهم‌کنش در یک چاه پتانسیل هارمونیک

دقت‌کنید که این روابط تنها می‌گویند که $a_{n,\uparrow}^2 = 0$ یا $a_{n,\downarrow}^2 = 0$ ولی

$$a_{n,\uparrow}a_{n,\downarrow} = -a_{n,\downarrow}a_{n,\uparrow} \neq 0$$

یعنی نمی توان دو ذره با اسپین یکسان را در یک حالت قرار داد. اما می توان دو ذره را با اسپین های متفاوت در یک تراز قرار داد.

۴ بوزون های با بر هم‌کنش در یک چاه پتانسیل

حال همان چاه پتانسیل را در نظر می‌گیریم و ذرات بوزون را در آن می ریزیم با این تفاوت‌که بوزون ها با هم برهم‌کنش هم دارند. فرض می کنیم‌که پتانسیلِ بین دو ذره‌که در نقاط x و y قرار دارند برابر با $V(x-y)$ است. بنابراین به هامیلتونی (۱) اکنون یک جمله برهم‌کنش بین ذرات نیز اضافه می شود:

$$H = H_0 + V = H_0 + \sum_{j,k=1}^{N} V_{j,k} = H_0 + \sum_{j,k=1}^{N} V(|\hat{X}_j - \hat{X}_k|). \qquad (۲۲)$$

می خواهیم ببینیم که این هامیلتونی در فرمالیزم کوانتش دوم به چه شکل در می آید. به طور کلی می دانیم که عملگر دو ذره ای V را می بایست به صورت زیر بنویسیم:

$$\hat{V} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} a_\alpha^\dagger \, a_\beta^\dagger \, \langle \alpha, \beta | V | \gamma, \delta \rangle \, a_\delta \, a_\gamma. \tag{۲۳}$$

از بخش پیشین می دانیم که بهترین پایه برای توصیف هامیلتونی H_0 پایه انرژی است. بنابراین در همان پایه نیز جمله برهم‌کنش را بیان می‌کنیم. بنابراین مطابق با آنچه که در بخش های قبلی دیدیم می بایست تغییرات زیر را از نظر نمادها انجام دهیم:

$$|\alpha\rangle \longrightarrow |\phi_n\rangle, \quad |\beta \longrightarrow |\phi_m\rangle, \quad a_\alpha^\dagger \longrightarrow a_n^\dagger, \quad a_\beta \longrightarrow a_m, \quad \cdots \tag{۲۴}$$

$$\hat{V} = \sum_{m,n,k,l} a_m^\dagger a_n^\dagger \langle \phi_m, \phi_n | V | \phi_k, \phi_l \rangle a_l a_k. \tag{۲۵}$$

حال می بایست عنصر ماتریسی را محاسبه کنیم:

$$\langle \phi_m, \phi_n | V | \phi_k, \phi_l \rangle = \int dx \, dy \, \langle \phi_m, \phi_n | x, y \rangle \langle x, y | V | \phi_k, \phi_l \rangle \tag{۲۶}$$

و با توجه به اینکه $\langle x | \phi_n \rangle = \phi_n(x)$, نشان دهنده تابع موج n ام برای یک تک ذره در چاه پتانسیل هارمونیک است، خواهیم داشت:

$$\begin{aligned} \langle \phi_m, \phi_n | V | \phi_k, \phi_l \rangle &= \int dx \, dy \phi_m^*(x) \, \phi_n^*(y) \langle x, y | V | \epsilon_k, \epsilon_l \rangle \\ &= \int dx dy \phi_m^*(x) \, \phi_n^*(y) \, V(x-y) \, \phi_k(x) \, \phi_l(y) =: V_{m,n,k,l} \end{aligned} \tag{۲۷}$$

که در آن ضرایب $V_{m,n,k,l}$ توسط این رابطه تعریف شده اند. بنابراین بدست می آوریم:

$$\hat{V} = \sum_{m,n,k,l} a_m^\dagger a_n^\dagger V_{m,n,k,l} a_l a_k. \tag{۲۸}$$

در نتیجه هامیلتونی کل به صورت زیر در می آید:

$$H = H_0 = \sum_n \epsilon_n a_n^\dagger a_n + \sum_{m,n,k,l} a_m^\dagger a_n^\dagger V_{m,n,k,l} a_l a_k. \tag{۲۹}$$

جمله دوم نشان می دهد که در اثر بر هم‌کنش ذرات در ترازهای انرژی باقی نمی مانند بلکه بین ترازها حرکت می‌کنند. این جمله در واقع نشان دهنده یک نوع برخورد بین ذرات است به این معنا که دو ذره که در ترازهای انرژی k و l هستند در اثر برهم‌کنش با هم برخورد کرده و با دامنه ی احتمال $V_{mn,kl}$ به ترازهای m و n می روند. البته تعداد ذرات در اثر این برهم‌کنش ثابت باقی می ماند.

■ یادآوری: توجه به این نکته مهم است که در این مثال شاخص n نشان دهنده یک تراز انرژی برای یک ذره است و هر نوع پرشی نیز بین این تراز ها رخ می دهد. در آینده با مثالهایی آشنا خواهیم شد که در آن شاخص n یک نقطه از یک شبکه فضایی را مشخص می کند. به فرق این دو نوع شاخص می بایست توجه داشت.

---

۵ یک مدل واقعی تر: گاز الکترونی

بعد از این مثال های مقدماتی به سراغ یک وضعیت نسبتاً واقعی می رویم. یک شبکه جامد از اتم ها را در نظر می گیریم. بازهم برای سادگی شبکه را یک بعدی و شامل N اتم با شرایط مرزی پریودیک می گیریم. تمام این محدودیت ها را پس از یادگرفتن مفاهیم و روش های اساسی می توان براحتی رفع کرد. فعلا فرض می کنیم که این اتم ها تک الکترونی هستند. ترازهای انرژی یک تک اتم را وقتی که کاملا به صورت مجزا در نظرگرفته شود می توان مشخص کرد. اگر این اتم ها بی نهایت از هم دور باشند آنگاه هر الکترون مشروط به اینکه انرژی اش خیلی زیاد نباشد، تنها و تنها پتانسیل جاذبه مربوط به اتم خود را می بیند و در چاه پتانسیلی که آن اتم برایش درست کرده محصور و مقید است. فاصله ای که الکترونِ یک اتم مقید به آن است در حدود شعاع اتم بوهر است. وقتی که اتم ها را به هم نزدیک می کنیم الکترون یک اتم تحت تاثیر پتانسیل اتم دیگر نیز قرار می گیرد. وقتی که تعداد $\mathcal{N}$ تا از این اتم ها را در یک شبکه قرار دهیم بسته به این که این فاصله چه نسبتی با شعاع اتم بوهر داشته باشد الکترون ها می توانند بیشتر مقید به اتمِ خود باشند یا اینکه نسبتاً آزاد از قید هر اتمی باشند. این چنین سیستمی بسته به فاصله اتم ها از یکدیگر و نوع اتم ها و این که هرکدام چه تعداد الکترون و در چه ترازهایی به اشتراک می گذارند می تواند گستره وسیعی از رفتارها را از خود بروز دهد. مجموعه این پدیده ها و انواع روش هایی که در حد های گوناگون برای مطالعه آنها به کار می رود بخش مهمی از فیزیک ماده چگال را به خود اختصاص می دهد. در این بخش ما سعی می کنیم به صورت ابتدایی خصوصیات کلی این سیستم را مطالعه کنیم. دو حد کاملا متفاوت را جداگانه بررسی می کنیم. یک حد که در آن الکترون ها تقریبا وابسته به هیچ اتمی نیستند و آزادند [۲] و یک حد هم که در آن الکترون ها تقریبا به اتم های خود مقیدند [۳] . آنچه که در این بخش بررسی می کنیم هیچ نوع تفاوت اساسی با فرمالیزم کلی و مثالهایی که تاکنون بررسی کرده ایم ندارد تنها تفاوت این است که به جای پتانسیل هارمونیک ذرات در یک پتانسیل پریودیک قرارگرفته اند . هم چنین برای سادگی نخست از اسپین الکترونها صرف نظر می کنیم . یعنی فرض می کنیم که الکترون ها درجه آزادی اسپینی ندارند. این فرض فقط برای سادگی فرمالیزم است .

[۲] Nearly Free Electron Model
[۳] Tight Bonding Model

بعد از فراگیری اصول اولیه این فرض را بر می داریم. دیدیم که از میان همه پایه ها، مثل پایه مختصات و پایه تکانه ، پایه مناسب برای حالت های تک ذره ای پایه انرژی است. بنابراین آنچه که ما به آن احتیاج داریم این است که تشخیص دهیم حالت های انرژی تک ذره چه هستند؟ در مورد پتانسیل هارمونیک این حالت ها را می شناختیم در مورد پتانسیل پریودیک کافی است که کمی از درس مکانیک کوانتومی را به خود یادآوری کنیم. الکترون ها تحت تاثیر یک پتانسیل پریودیک خارجی هستند که ناشی از چینش یون ها در یک شبکه منظم سه بعدی است. تعداد اتم ها در هر بعد شبکه برابر با N و فاصله آنها از هم a است بنابراین طول شبکه مکعبی برابر با $L = Na$ است. تعداد کل اتم ها برابر با $\mathcal{N} \equiv N^3$ است. یک الکترون در این پتانسیل حرکت می کند و هامیلتونی آن چنین است:

$$\mathbf{h} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V_{ex}(\mathbf{x}) \qquad (۳۰)$$

که در آن

$$V(\mathbf{x}) = V(\mathbf{x} + n_1 a\mathbf{e}_1 + n_2 a\mathbf{e}_2 + n_3 a\mathbf{e}_3) \qquad \forall\ n_i = 0, 1, \cdots N-1.$$

در این جا V_{ex} پتانسیل خارجی ناشی از یون های شبکه است و طبیعتا با پتانسیل V_{ee} که ناشی از برهم کنش کولومبی الکترون ها با یکدیگر است متفاوت است.

از مکانیک کوانتومی یا قضیه بلوخ [۴] می دانیم که ویژه حالت های انرژی این هامیلتونی به صورت زیر هستند:

$$\psi_{\mathbf{k},s}(\mathbf{x}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}} u_s(\mathbf{x}) \qquad (۳۱)$$

که در آن $\mathbf{k}$ بردار موج یا تکانه است و s عدد کوانتومی گسسته است. هم چنین $u_s(\mathbf{x})$ نیز در شرط

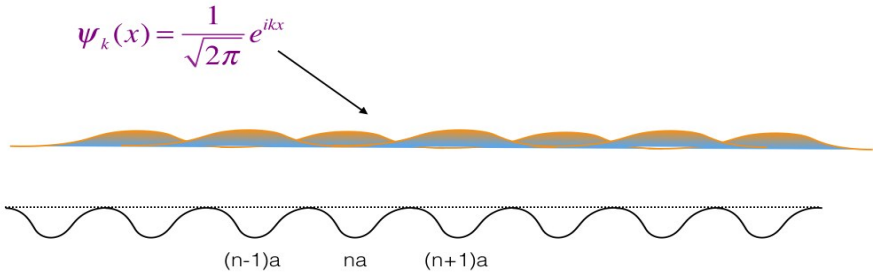
$$u_s(\mathbf{x} + \mathbf{a}) = u_s(\mathbf{x} + n_1 a\mathbf{e}_1 + n_2 a\mathbf{e}_2 + n_3 a\mathbf{e}_3) \qquad \forall\ n_i = 0, 1, \cdots N-1 \qquad (۳۲)$$

صدق می کند. بنابراین این توابع توابعی هستند که در تمام طول شبکه مقدار قابل ملاحظه دارند به عبارت دیگر این توابع موج جایگزیده [۵] نیستند.

تکانه ی $\mathbf{k} = (k_x,\ k_y,\ k_z)$ = می بایست چنان باشد که در شرط $r = x,\ y,\ z$ $e^{ik_r \cdot L} \equiv e^{ik_r Na} = 1$ صدق کند.
بنابراین مولفه های بردار تکانه مقادیر زیر را اختیار می کنند:

$$\mathbf{k} = \frac{2\pi}{Na}(m_1, m_2, m_3), \qquad m_i = -\frac{N}{2} \cdots \frac{N}{2}. \qquad (۳۳)$$

[۴] Bloch Theorem
[۵] Localized



شکل ۲ : مدل الکترون های تقریباً آزاد. چاه های پتانسیل و فاصله اتم ها چنان است که الکترون ها تقریبا به هیچ آتمی مقید نیستند و آزاد هستند و تحت تاثیر برهم کنش کولومبی هستند.

برای هر N محدودی این تکانه ها نیز مقادیر گسسته ولی نزدیک به هم را اختیار می‌کنند و و برای N های خیلی بزرگ یا برای شبکه بی نهایت $k_x,\ k_y,\ k_z$ ها مقادیر پیوسته ای را در فاصله ی $[\frac{-\pi}{a},\ \frac{\pi}{a}]$ اختیار می‌کنند. انرژی یک حالت مثل (۳۱) را با $\epsilon_s(\mathbf{k})$ نشان می دهیم. می توان این انرژی ها را برای s های متفاوت برحسب $\mathbf{k} \in [-\frac{\pi}{a}\ ,\ \frac{\pi}{a}]^3$ رسم کرد. یک نمونه از آن در شکل (؟؟) برای وقتی که شبکه یک بعدی داریم نشان داده شده است. چنین چیز ی را ساختار نواری [۶] می گویند. معمولا لایه های زیرین همگی پر هستند و تنها الکترون لایه آخر آنقدر آزاد است که در همه جامد حرکت کند. به همین دلیل کمی بعد و در بحث پیش رو دیگر اندیس s را نخواهیم نوشت. توابع حالت $|\psi_{\mathbf{k},s}\rangle$ یک پایه متعامد یکه برای یک ذره تشکیل می دهند:

$$\langle\psi_{\mathbf{k},s}|\psi_{\mathbf{k}',s'}\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\delta_{s,s'} \qquad (۳۴)$$

می توان با همین حالت ها به عنوان حالت های تک ذره ای درست به همان شکلی که در مورد بوزون ها در چاه پتانسیل هارمونیک عمل کردیم عمل کنیم. اما می توانیم با توجه به درک فیزیکی خود از این پدیده پایه های مناسب تری بیابیم. برای درک بهتر این مسئله بهتر است به بررسی دو حد گفته شده بپردازیم.

۱.۵ حد برهم‌کنش ضعیف: الکترون های تقریباً آزاد

در بعضی از فلزات فاصله اتم ها و پتانسیل آنها به‌گونه ای است که عملا الکترون ها آزاد هستند. برای چنین جامداتی حالت های تک ذره ای را همان امواج تخت می‌گیریم یا به عبارت دیگر تابع $u_s(\mathbf{x})$ برای آنها برابر با یک است. در واقع در این حالت با الکترون های مقید در یک نوار انرژی سر و کار نداریم و تابع موج یک الکترون تنها با بردار تکانه یعنی با $\mathbf{k}$ مشخص می شود، یعنی $\psi_{\mathbf{k}}(x) \equiv \langle \mathbf{x} \mid \mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{L^3}}e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{x}}$. این توابع بر یکدیگر عمودند : $\langle\mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$.

در چنین حالتی هامیلتونی الکترون های آزاد به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\mathbf{k}^2}{2m} a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma}, \qquad (۳۵)$$

[۶] Band Structure

که در آن $a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma}$ و $a_{\mathbf{k},\sigma}$ عملگرهای خلق و فنای یک الکترون با تکانه ی $\mathbf{k}$ و اسپین σ هستند. اسپین σ می تواند دو مقدار $\uparrow$ و $\downarrow$ را اختیارکند.

از آنجاکه الکترون ها با یکدیگر برهم‌کنش کولومبی دارند انرژی پتانسیل به شکل زیر در می آید:

$$V_{ee} = \sum_{\mathbf{k}_1,\sigma_1,\mathbf{k}_2,\sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_3,\sigma_3,\mathbf{k}_4,\sigma_4} a^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} a^\dagger_{\mathbf{k}_2,\sigma_2} \langle \mathbf{k}_1,\sigma_1,\mathbf{k}_2,\sigma_2|V|\mathbf{k}_3,\sigma_3,\mathbf{k}_4,\sigma_4\rangle a_{\mathbf{k}_4,\sigma_4} a_{\mathbf{k}_3,\sigma_3} \qquad (۳۶)$$

از آنجاکه پتانسیل کولومبی ربطی به اسپین ندارد، جمله بالا ساده تر شده و به شکل زیر در می آید:

$$V_{ee} = \sum_{\mathbf{k}_1,,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4} \sum_{\sigma_1,\sigma_2} a^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} a^\dagger_{\mathbf{k}_2,\sigma_2} \langle \mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,|V|\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\rangle a_{\mathbf{k}_4,\sigma_2} a_{\mathbf{k}_3,\sigma_1}. \qquad (۳۷)$$

می بایست عنصر ماتریسی را حساب‌کنیم. بدست می آوریم:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|V|\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\rangle &= \int d\mathbf{x}d\mathbf{y} \langle \mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|\mathbf{x},\mathbf{y}\rangle \langle \mathbf{x},\mathbf{y}| \frac{e^2}{|\hat{X}_1 - \hat{X}_2|} |\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\rangle \\
&= \int\int d\mathbf{x}d\mathbf{y} \frac{1}{L^3} e^{-i\mathbf{k}_1\cdot\mathbf{x} - i\mathbf{k}_2\cdot\mathbf{y}} \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \frac{1}{L^3} e^{i\mathbf{k}_3\cdot\mathbf{x} + i\mathbf{k}_4\cdot\mathbf{y}} \\
&= \int\int d\mathbf{x}d\mathbf{y} \frac{1}{L^6} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{x} - i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{y}} \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \qquad (۳۸)
\end{aligned}$$

برای محاسبه این انتگرال می بایست یک تغییر متغیر را اعمال‌کنیم:

$$\mathbf{R} := \frac{1}{2}(\mathbf{x}+\mathbf{y}), \qquad \mathbf{r} = \mathbf{x}-\mathbf{y}, \qquad d\mathbf{x}d\mathbf{y} = d\mathbf{R}d\mathbf{r}. \qquad (۳۹)$$

در نتیجه خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|V|\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\rangle &= \int\int d\mathbf{r}d\mathbf{R} \frac{1}{L^6} \frac{e^2}{r} e^{-i(\mathbf{k}_1-\mathbf{k}_3)\cdot(\mathbf{R}+\frac{1}{2}\mathbf{r}) - i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_4)\cdot(\mathbf{R}-\frac{1}{2}\mathbf{r})} \\
&= \int\int d\mathbf{r}d\mathbf{R} \frac{1}{L^6} \frac{e^2}{r} e^{i(-\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_4-\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_3)\cdot\mathbf{R}} e^{i\frac{1}{2}(-\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{r}} \qquad (۴۰)
\end{aligned}$$

انتگرال روی متغیر $\mathbf{R}$ منجر به یک تابع $\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\ ,\ \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4}$ می شود. بنابراین خواهیم داشت:

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2|V|\mathbf{k}_3,\mathbf{k}_4\rangle &= \frac{1}{L^3} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\ ,\ \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \int d\mathbf{r} \frac{e^2}{r} e^{i\frac{1}{2}(-\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2+\mathbf{k}_3-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{r}} \\
&= \frac{1}{L^3} \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\ ,\ \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \int d\mathbf{r} \frac{e^2}{r} e^{i(\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_4)\cdot\mathbf{r}}. \qquad (۴۱)
\end{aligned}$$

طرف راست را می توان ساده‌کرد. آنچه‌که می بایست حساب‌کنیم انتگرال زیر است:

$$I(\mathbf{q}) = \int d\mathbf{r} \frac{1}{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}. \qquad (۴۲)$$

این عبارت در واقع تبدیل فوریه پتانسیل کولومبی $\frac{1}{r}$ است. این پتانسیل دارای برد بی نهایت است که ناشی از بدون جرم بودن فوتون است. محاسبه این انتگرال در ضمیمه این درس آمده است. یک راه ساده تر این است که فرض کنیم پتانسیل یک برد محدود ξ دارد (یا فوتون یک جرم غیرصفر $m = \frac{1}{\xi}$ دارد) و سپس در انتهای محاسبه m را به سمت صفر میل دهیم البته ممکن است که در درون یک ماده بدلیل پدیده پوشش [۷] واقعا هم برد محدود باشد و نیازی به حد $m \longrightarrow 0$ وجود نداشته باشد.

■ تمرین: انتگرال زیر را محاسبه کنید.

$$I_m(\mathbf{q}) := \int d\mathbf{r} \frac{e^{-mr}}{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}}, \tag{۴۳}$$

و نشان دهید که مقدار آن برابر است با:

$$I_m(\mathbf{q}) = \frac{4\pi}{q^2 + m^2}.$$

به این ترتیب با ترکیب این روابط به این نتیجه می رسیم که:

$$\langle \mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2 | V | \mathbf{k}_3, \mathbf{k}_4 \rangle = \frac{4\pi}{L^3} e^2 \delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\ ,\ \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \frac{1}{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4|^2} \tag{۴۴}$$

بنابراین با جایگذاری این عنصر ماتریسی در (۳۷) پتانسیل کولومبی بین الکترون ها یعنی V_{ee} در فرمالیزم کوانتش دوم تعیین می شود:

$$V_{ee} = \frac{4\pi}{L^3}\, e^2 \sum_{\mathbf{k}_1,\sigma_1,\mathbf{k}_2,\sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_3,\sigma_3,\mathbf{k}_4,\sigma_4} a^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} a^\dagger_{\mathbf{k}_2,\sigma_2} \left[\delta_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2\ ,\ \mathbf{k}_3+\mathbf{k}_4} \frac{1}{|\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_4|^2} \right] a_{\mathbf{k}_4,\sigma_2} a_{\mathbf{k}_3,\sigma_1}. \tag{۴۵}$$

می توانیم جمع روی k_4 را انجام دهیم و بدست بیاوریم:

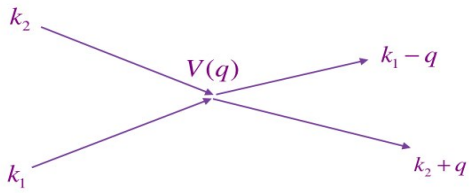
$$V_{ee} = \frac{4\pi}{L^3}\, e^2 \sum_{\sigma_1,\sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{k}_3} a^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} a^\dagger_{\mathbf{k}_2,\sigma_2} \frac{1}{|\mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3|^2} a_{\mathbf{k}_1+\mathbf{k}_2-\mathbf{k}_3,\sigma_2} a_{\mathbf{k}_3,\sigma_1}. \tag{۴۶}$$

با تعریف $\mathbf{q} := \mathbf{k}_1 - \mathbf{k}_3$ و اضافه کردن جمله H_0 می توانیم هامیلتونی کامل را برای وقتی که الکترون ها تقریباً آزاد هستند، به شکل نهایی زیر بنویسیم:

$$H = \sum_\sigma \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m} a^\dagger_{\mathbf{k},\sigma} a_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{4\pi}{L^3} e^2 \sum_{\sigma_1,\sigma_2} \sum_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}_2,\mathbf{q}} a^\dagger_{\mathbf{k}_1,\sigma_1} a^\dagger_{\mathbf{k}_2,\sigma_2} \frac{1}{|\mathbf{q}|^2} a_{\mathbf{k}_2+\mathbf{q},\sigma_2} a_{\mathbf{k}_1-\mathbf{q},\sigma_1}. \tag{۴۷}$$

■ **یادآوری:**

[۷] Screening



شکل ۳: در مدل الکترون آزاد، الکترون ها با تکانه خود مشخص می شوند و در اثر برهم‌کنش کولومب از یکدیگر پراکنده می شوند. است.

در حدی که L یا N به سمت بی نهایت میل کند، تکانه ها دیگر کوانتیده نیستند و هر مقداری را اختیار می‌کنند. در این صورت در روابط بالا می بایست تغییرات زیر را اعمال کرد:

الف- همه جمع های روی تکانه ها به انتگرال تبدیل می شوند،

ب- همه دلتاهای کرونکر به دلتای دیراک تبدیل می شوند،

پ- همه L^3 ها به $(2\pi)^3$ تبدیل می شوند.

در عبارت (۴۷) جمله اول همان انرژی جنبشی کل است به این معنا که الکترون هایی که دارای تکانه ی k هستند شمرده شده و انرژی جنبشی آنها باهم جمع می شود. جمله دوم نشان دهنده پراکندگی این الکترون ها از یکدیگر بوسیله برهم‌کنش کولومب است به این معنا که دو الکترون با تکانه های $\mathbf{k}_1 - \mathbf{q}$ و $\mathbf{k}_2 + \mathbf{q}$ با یکدیگر برخورد کرده و با مبادله تکانه ی q به الکترون هایی با تکانه های $\mathbf{k}_1$ و $\mathbf{k}_2$ تبدیل می شوند، شکل (۳). از انجا که برهم‌کنش کولومبی بستگی به اسپین الکترون ها ندارد، در این برخوردها اسپین الکترون ها نیز عوض نشده و دست نخورده باقی می ماند. به طور کلی در این حد اسپین فقط یک درجه آزادی اضافی است که نقش چندانی در دینامیک و خواص فیزیکی سیستم ندارد.

■ تمرین: یک جفت نوسانگر بوزونی و مستقل با عملگرهای مربوطه $(a, a^\dagger)$ و $(b, b^\dagger)$ در نظر بگیرد.

الف: نشان دهید که عملگرهای زیر واقعا در روابط جابجایی مربوط به جبر $su(2)$ صدق می‌کنند:

$$S_z := \frac{1}{2}(a^\dagger a - b^\dagger b) \quad , \quad S_+ := a^\dagger b \quad , \quad S_- = b^\dagger a. \tag{۴۸}$$

این نمایش از جبر $su(2)$ نمایش شوینگر [۸] نامیده می شود.

ب: عملگر $S^2 := S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ را در نمایش شوینگر بنویسید و نشان دهید که

$$[S^2, S_a] = 0 \quad , \quad a = x\,, y\,, z.$$

پ : می دانیم که فضای هیلبرتی که این دو نوسانگر هارمونیک روی آن عمل می‌کنند به صورت زیر است:

$$\mathcal{H} := Span\{|m, n\rangle, \quad m\,,\, n = \,0,\, 1\,,\, 2\,, \cdots\}$$

تاثیر عملگرهای $S_+,\ \ S_z,\ \ S^2$ و S_- را روی این فضا بدست آورید و نشان دهید که این فضا همه نمایش های مختلف جبر $su(2)$ را در بر دارد.

۲.۵ حد برهم‌کنش قوی: الکترون های تقریباً مقید

- تذکر: از این به بعد تنها برای سادگی نمادها و روابط خود را محدود به یک شبکه یک بعدی می‌کنیم. در پایان خواننده براحتی می تواند همه روابط را به بعد دلخواه تعمیم دهد. برای این کار کافی است که تغییرات زیر را در همه روابط اعمال کند:

$$\{n,\ x,\ k, kx, N\} \longrightarrow \{\mathbf{n},\ \mathbf{x},\ \mathbf{k}, \mathbf{k}\cdot\mathbf{x}, \mathcal{N}\}. \tag{۴۹}$$

در بخش قبلی حد الکترون های تقریبا آزاد را بررسی کردیم. در این بخش حد کاملا مقابل را بررسی می‌کنیم که در آن اثر پتانسیل پریودیک آنقدر قوی است که هر اتم الکترون مربوط به خود را تقریبا در نزدیکی خود نگاه می دارد و آن را در کل شبکه رها نمی‌کند. توابع موجی که در این حد مطالعه رفتار گاز الکترونی را ساده می‌کنند توابع وانی یر [۹] نام دارند. این توابع طوری ساخته می شوند که هر کدام در نزدیکی یک اتم

[۸] Schwinger Representation
[۹] Wannier Functions

جایگزیده باشد. شکل (۴) به طور شماتیک یکی از این توابع وانی یر را نشان می دهد. یک نکته را می بایست از همین ابتدا به خاطر بسپاریم و آن این‌که این توابع، ویژه حالت های هامیلتونی بدون برهم‌کنش هم نیستند. ویژه توابع هامیلتونی بدون برهم‌کنش یعنی هامیلتونی (۳۰) با سه عددکوانتومی k ، s و σ مشخص می شوندکه در آن k در واقع تکانه و s عددکوانتومی‌گسسته ای است‌که به اصطلاح شماره باند یا نوار انرژی را مشخص می‌کند، و σ نیز عددکوانتومی اسپین است.

این توابع به همان دلیل‌که ویژه تابع تکانه هستند در تمام فضاگسترده هستند و به جای اینکه در فضای مختصات جایگزیده باشند در فضای تکانه جایگزیده هستند. اما در این حدی‌که هستیم یعنی حد الکترون های تقریبا مقید ما در جستجوی توابعی هستیم‌که ضمن آنکه یک نوع نزدیکی با ویژه توابع انرژی دارند در فضای مختصات جایگزیده باشند. طبیعی ترین‌کاری‌که می توانیم بکنیم این است‌که این توابع را با استفاده از یک تبدیل فوریه از روی توابع $\psi_{k,s,\sigma}$ بسازیم. به همین دلیل توابع زیر را تعریف می‌کنیم: در این رابطه N تعدادکل اتم هاست.

$$W_{n,s,\sigma}(x) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} \psi_{k,s,\sigma}(x) \qquad (۵۰)$$

این توابع بجای بردارهای k در فضای تکانه با بردارهای n یا na در شبکه مشخص می شوندکه نشان دهنده این است‌که در نزدیکی‌کدام اتم جایگزیده هستند. برای درک بهتر این توابع بیایید رابطه تعامد آن ها را بررسی‌کنیم. براحتی متوجه می شویم‌که :

$$\begin{aligned} \langle W_{n',s',\sigma'} | W_{n,s,\sigma} \rangle &= \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{ik\cdot na - ik'n'a} \langle \psi_{k',s',\sigma'} | \psi_{k,s,\sigma} | \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{ikna - ik'n'a} \delta_{k,k'} \delta_{s,s'} = \frac{1}{N} \sum_{k,k'} e^{ik\cdot na - ik'\cdot n'a} \delta_{k,k'} \delta_{s,s'} \delta_{\sigma,\sigma'} = \delta_{n,n'} \delta_{s,s'} \delta_{\sigma,\sigma'}. \end{aligned} \qquad (۵۱)$$

یک نکته اما خیلی مهم است و آن این است‌که این توابع ویژه حالت انرژی نیستند زیرا

$$H_0 |W_{n,s,\sigma}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} H_0 |\psi_{k,s,\sigma}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ik\cdot na} \epsilon_{k,s} |\psi_{k,s,\sigma}\rangle$$

و چون $\epsilon_{\mathbf{k},s}$ بستگی به تکانه دارد، باعث می شودکه تابع موج وانی یر یک ویژه حالت انرژی نباشد. ضمناً توجه‌کنیدکه به دلیل اینکه پتانسیل ایجاد شده توسط یون ها معمولا بستگی به اسپین ندارد، انرژی $\epsilon_{k,s}$ بستگی به اسپین ندارد. هم چنین می توان‌گفت‌که اگر بستگی $\epsilon_{k,s}$ به تکانه زیاد شدید نباشد، تابع موج وانی یر را هم می توان به طور خیلی تقریبی وکیفی یک ویژه حالت H_0 به حساب آورد. رابطه تعامد (۵۱) به خوبی نشان می دهدکه توابع موج وانی یر جایگزیده و متعامد هستند. رابطه (۵۰) هم چنین نشان می دهدکه عملگرهای خلق و فنای جدید چگونه تعریف می شوند:

$$a^\dagger_{n,s,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikna} a^\dagger_{k,s,\sigma}$$

$$a_{n,s,\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{-ik\cdot na} a_{k,s,\sigma}. \quad (۵۲)$$

به این ترتیب در حالیکه عملگر $a^\dagger_{k,s,\sigma}$ یک ذره در باند s و با تکانه ی k خلق می‌کند، عملگر $a^\dagger_{n,s,\sigma}$ یک ذره در باند s و در نزدیکی اتم n ام و با اسپین σ خلق می‌کند. حال سعی می‌کنیم که هامیلتونی سیستم بس ذره ای را در این پایه و در فرمالیزم کوانتش دوم بنویسیم. مثل همه موارد قبلی به روابط اصلی توجه می‌کنیم و می نویسیم:

$$H_0 = \sum_{\alpha,\beta} a_\alpha{}^\dagger \langle \alpha|h|\beta\rangle a_\beta \quad (۵۳)$$

و

$$V_{ee} = \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} a^\dagger_\alpha a^\dagger_\beta \langle \alpha,\beta|h|\gamma,\delta\rangle a_\delta a_\gamma \quad (۵۴)$$

که در آن $|\alpha\rangle$ و نظایر آن حالت های تک ذره ای هستند. کاری که باید انجام بدهیم این است که به جای این حالت های تک ذره ای حالت هایی راکه در این حد مناسب می دانیم قرار دهیم یعنی حالت های وانی یر راکه آنها را با $|\psi_{\mathbf{n},s,\sigma}\rangle$ نشان می دهیم. برای تکمیل روابط خود می بایست عناصر ماتریسی لازم را محاسبه کنیم.

تذکر: می دانیم که توابع وانی یر مربوط به باندهای مختلف بر هم عمودند. هم چنین می دانیم که اولین این عناصر عبارت است از:

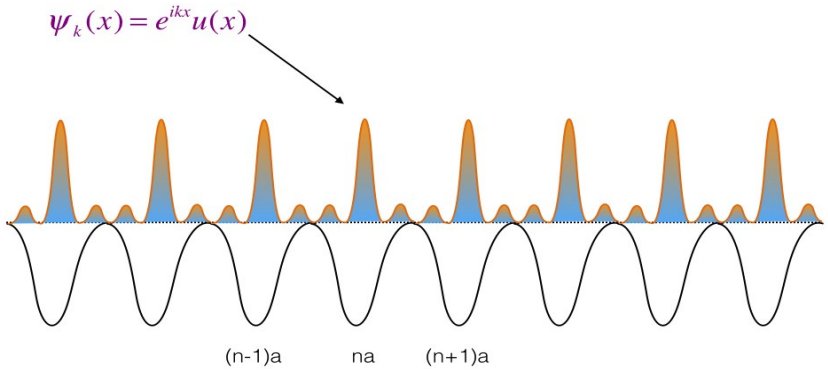
$$\langle \alpha|h|\beta\rangle \equiv \langle \psi_{\mathbf{n},s,\sigma}|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{ex}|\psi_{\mathbf{n}',s',\sigma'}\rangle \quad (۵۵)$$

می توانیم به طور مشخص تر این عنصر ماتریسی را محاسبه کنیم:

$$\begin{aligned} & \langle W_{\mathbf{n},s,\sigma}|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{ex}|W_{\mathbf{n}',s',\sigma'}\rangle \\ = \;& \delta_{s,s'}\delta_{\sigma,\sigma'} \int dx W^*_{\mathbf{n},s,\sigma}(x) \left[\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{ex}\right] W_{\mathbf{n},s,\sigma}(x) =: \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{s,s'} t_s(n,n'). \end{aligned} \quad (۵۶)$$

برای اینکه بفهمیم چرا این عنصر ماتریسی متناسب با $\delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{s,s'}$ است به ساختمان توابع وانی یر توجه می‌کنیم:

$$\langle W_{\mathbf{n},s,\sigma}|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{ex}|W_{\mathbf{n}',s',\sigma'}\rangle = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{k,k'} e^{-ikna + ik'n'a} \langle \psi_{k,s,\sigma}|\frac{\hat{p}^2}{2m} + V_{ex}|\psi_{k',s',\sigma'}\rangle$$



شکل ۴: وقتی‌که عمق چاه زیاد باشد و الکترون ها چندان آزاد نباشند، و یژه توابع انرژی نه مثل ذره آزاد یعنی e^{ikx} هستند و نه‌کاملا در یک نقطه از شبکه جایگزیده هستند. این توابع ترکیبی از هر دوکیفیت را دارند و به صورت $\psi_{k,s}(x)$ نوشته می شوند.

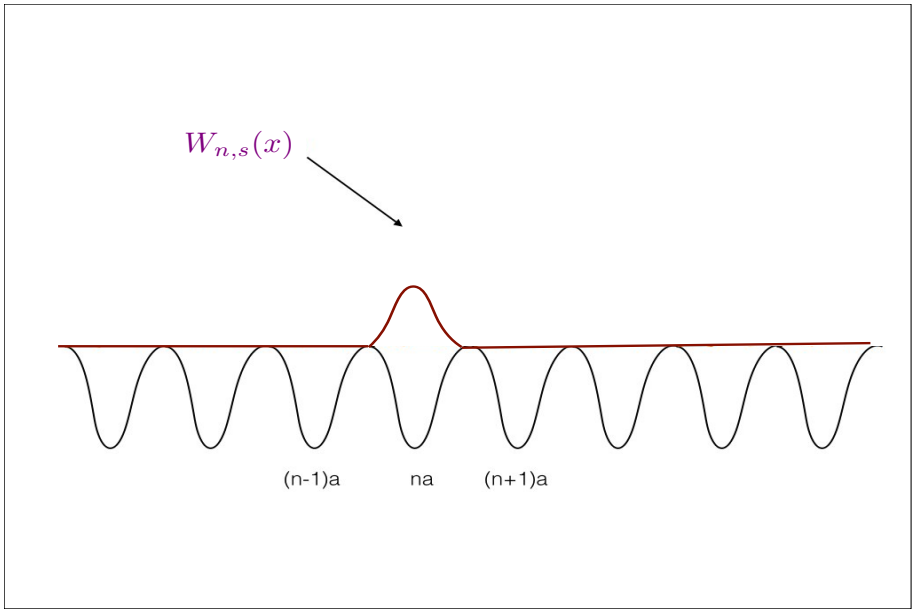
$$\begin{aligned} &= \frac{1}{N}\sum_{k,k'} e^{-ikna+ik'n'a}\epsilon_{k,s}\delta_{k,k'}\delta_{s,s'}\delta_{\sigma,\sigma'} \\ &= \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{s,s'}\frac{1}{N}\sum_{k} e^{-ik(n-n')a}\epsilon_{k,s} =: \delta_{\sigma,\sigma'}\delta_{s,s'}t_s(n,n'). \end{aligned} \qquad (۵۷)$$

در خط آخر این رابطه از این استفاده‌کرده ایم‌که $|\psi_{k,s,\sigma}\rangle$ یک ویژه حالت هامیلتونی h_0 است و این ویژه حالت ها بر هم عمودند. هم چنین پارامتر زیر را تعریف‌کرده ایم:

$$t_s(n,n') := \frac{1}{N}\sum_{k} e^{-ik(n-n')a}\epsilon_{k,s}. \qquad (۵۸)$$

رابطه (۵۷) نشان می دهدکه در واقع این پارامتر بستگی به میزان همپوشانی توابع موج وانی یر دارد و چون‌که این توابع روی اتم ها جایگزیده هستند، پس $t_s(n,n')$ با تقریب خیلی خوبی تنها برای اتم های همسایه نزدیک غیر صفر است. بنابراین در فرمالیزم‌کوانتش دوم H_0 به صورت زیر نوشته می شود:

$$H_0 = \sum_{n,s,\sigma} t_s(n,n')a^\dagger_{n,s,\sigma}a_{n',s,\sigma}. \qquad (۵۹)$$



شکل ۵: توابع وانی بر تبدیل فوریه توابع $\psi_{k,s}(x)$ هستند. این توابع جایگزیده هستند ولی ویژه توابع انرژی نیستند.

این رابطه بیان می‌کند که در اثر هامیلتونی H_0 هیچ نوع پرشی بین باندهای انرژی رخ نمی دهد و هم چنین اسپین نیز تغییر نمی‌کند ولی الکترون ها بین اتم ها، آنهم اتم های همسایه نزدیک، پرش انجام می دهند. احتمال این پرش ها بین اتم ها به نسبت فاصله اتم ها بسرعت کاهش می یابد. دامنه احتمال پرش در باند s بین اتم هایی که در نقاط na و $n'a$ قرار دارند با $t_s(n,n')$ داده می شود. از تقارن انتقالی معلوم است که $t_s(n,n') = t_s(n-n')$. نیز می دانیم که هیچ نوع پرشی بین نوار های انرژی رخ نمی دهد. از این به بعد خود را به یک باند مشخص انرژی محدود می‌کنیم و در نتیجه اندیس s را دیگر نمی نویسم. هم چنین توجه به شهود فیزیکی فرض کنیم که $t(n-n')$ تنها برای همسایه های نزدیک غیر صفر است و بنویسیم:

$$t(0) =: \epsilon, \qquad t(\pm 1) =: t. \tag{۶۰}$$

در نتیجه این قسمت از هامیلتوی شکل ساده زیر را پیدا می‌کند:

$$H_0 = \epsilon \sum_{n,\sigma} a^\dagger_{n,\sigma} a_{n,\sigma} + t \sum_{n,\sigma} a^\dagger_{n+1,\sigma} a_{n,\sigma} + a^\dagger_{n,\sigma} a_{n+1,\sigma}. \tag{۶۱}$$

جمله اول بیان می‌کند که انباشته شدن ذره در هر نقطه از شبکه به ازای هر ذره مقدار انرژی ϵ را به انرژی کل اضافه می‌کند و جمله دوم هم بیان می‌کند که ذرات با نرخ t بین نقاط مجاور از شبکه پرش انجام می دهند. این جمله در واقع انرژی جنبشی ذرات است.

تاکنون به طور دقیق متوجه شدیم که پرش بین باندهای مختلف انرژی وجود ندارد و به همین دلیل خود را مقید به یک نوار انرژی کردیم. از این به بعد تنها به عنوان یک تقریب خود را مقید به یک نوار انرژی می کنیم زیرا نمی توان به طور دقیق ثابت کرد که جمله انرژی پتانسیل نیز بین نوارهای مختلف صفر است. در نتیجه با حذف اندیس مربوط به نوار انرژی به برهم‌کنش بین الکترون ها می پردازیم. از رابطه ی (۵۴) استفاده می کنیم . می بایست عنصر ماتریسی زیر را حساب کنیم:

$$\langle W_{n_1,\sigma_1}, W_{n_2,\sigma_2}|V(X,X')|W_{n_3,\sigma_3}, W_{n_4,\sigma_4}\rangle. \tag{۶۲}$$

با محاسبه رابطه فوق بدست می آوریم:

$$\begin{aligned} & \langle W_{n_1,\sigma_1}, W_{n_2,\sigma_2}|V(X,X')|W_{n_3,\sigma_3}, W_{n_4,\sigma_4}\rangle \\ = & \int dx_1 dx_2 W^*_{n_1,\sigma_1}(x_1) W^*_{n_2,\sigma_2}(x_2) V(x_1,x_2) W_{n_3,\sigma_3}(x_1) W_{n_4,\sigma_4}(x_2) \\ =: & V_{n_1,n_2,n_3,n_4}\delta_{\sigma_1,\sigma_2}\delta_{\sigma_3,\sigma_4}. \end{aligned} \tag{۶۳}$$

به این ترتیب جمله پتانسیل به صورت زیر در می آید:

$$V_{ee} = \frac{1}{2}\sum_{n_1,n_2,n_3,n_4,\sigma_1,\sigma_2} a^\dagger_{n_1,\sigma_1} a^\dagger_{n_2,\sigma_2} a_{n_3,\sigma_1} a_{n_4,\sigma_2} V_{n_1,n_2,n_3,n_4}. \tag{۶۴}$$

■ تمرین: تابع حالت $|W_{n,\sigma}\rangle$ را به صورت $|\phi_n\rangle \otimes |\sigma\rangle$ بنویسید که در آن $|\phi_n\rangle$ تابع حالت فضایی و $|\sigma\rangle$ تابع حالت اسپینی است و با استفاده از آن نشان دهید که V_{n_1,n_2,n_3,n_4} واقعا مستقل از درجه آزادی اسپین است.

بازهم بنابر شهود فیزیکی می دانیم تنها جملاتی مهم هستند که در بردارنده نزدیک ترین همسایه ها هستند. به عبارت دیگر در تقریب نخست که مهم ترین تقریب نیز هست، اگر نزدیک ترین همسایه های یک نقطه مثل n را با m نشان دهیم، تنها جملات زیر از ضرایب فوق را غیر صفر می گیریم:

$$U := V_{n,n,n,n}, \qquad V := V_{n,m,n,m}, \qquad J := V_{n,m,m,n}. \tag{۶۵}$$

در نتیجه هامیلتونی کل به شکل زیر در می آید.

$$
\begin{aligned}
H &= t \sum_{\langle n,m\rangle,\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma} a_{m,\sigma} + U \sum_{n,\sigma,\sigma'} a^{\dagger}_{n,\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma'} a_{n,\sigma'} a_{n,\sigma} \\
&+ V \sum_{n\neq m,\sigma,\sigma'} a^{\dagger}_{n,\sigma} a^{\dagger}_{m,\sigma'} a_{m,\sigma'} a_{n,\sigma} + J \sum_{n\neq m,\sigma,\sigma'} a^{\dagger}_{n,\sigma} a^{\dagger}_{m,\sigma'} a_{n,\sigma'} a_{m,\sigma},
\end{aligned} \tag{۶۶}
$$

حال به تجزیه تحلیل جملات این هامیلتونی می پردازیم.

- الف: جمله انرژی جنبشی یعنی $\sum_{n,m\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma} a_{m,\sigma}$ نشان دهنده پرش الکترون بین نقاط همسایه نزدیک در شبکه اتم هاست.
- جملات پتانسیل نیز به دلیل همپوشانی توابع وانی یر، تنها بین همسایه های نزدیک مقدار قابل ملاحظه و غیر صفر دارند. این جمله ها سه نوع هستند:

$$
V^{(onsite)} := U \sum_{n,\sigma,\sigma'} a^{\dagger}_{n,\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma'} a_{n,\sigma'} a_{n,\sigma} \tag{۶۷}
$$

با توجه به اینکه

$$
\begin{aligned}
a^{\dagger}_{n,\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma'} a_{n,\sigma'} a_{n,\sigma} &= a^{\dagger}_{n,\sigma} \hat{n}_{n,\sigma'} a_{n,\sigma} \\
&= a^{\dagger}_{n,\sigma} \left[a_{n,\sigma} \hat{n}_{n,\sigma'} - a_{n,\sigma} \delta_{\sigma,\sigma'} \right] \\
&= \hat{n}_{n,\sigma} \hat{n}_{n,\sigma'} - \hat{n}_{n,\sigma} \delta_{\sigma,\sigma'}
\end{aligned} \tag{۶۸}
$$

شکل جمله $V^{(onsite)}$ به صورت زیر در می آید:

$$
V^{(onsite)} := U \sum_{n} \sum_{\sigma,\sigma'} \left[\hat{n}_{n,\sigma} \hat{n}_{n,\sigma'} - \hat{n}_{n,\sigma} \delta_{\sigma,\sigma'} \right] = U \sum_{n} \left[(n_{\uparrow} + n_{\downarrow})^2 - (n_{\uparrow} + n_{\downarrow}) \right] \tag{۶۹}
$$

از طرفی می دانیم که برای فرمیون ها $n^2_{\uparrow} = n_{\uparrow}$ و $n^2_{\downarrow} = n_{\downarrow}$. در نتیجه جمله $V^{(onsite)}$ به شکل زیر در می آید:

$$
V^{(onsite)}_{ee} = 2U \sum_{n} n_{\uparrow} n_{\downarrow}. \tag{۷۰}
$$

این عبارت تنها به سایت های کاملا پر یعنی سایت هایی که یک الکترون با اسپین بالا و یک الکترون با اسپین پایین در آنها وجود دارند انرژی $2U$ نسبت می دهد.

■ تمرین: یک جفت نوسانگر فرمیونی و مستقل با عملگرهای مربوطه $(a, a^\dagger)$ و $(b, b^\dagger)$ در نظر بگیرید.

الف: نشان دهید که عملگرهای زیر واقعا در روابط جابجایی مربوط به جبر $su(2)$ صدق می کنند:

$$S_z := \frac{1}{2}(a^\dagger a - b^\dagger b) \quad , \quad S_+ := a^\dagger b \quad , \quad S_- = b^\dagger a. \tag{۷۱}$$

ب: عملگر $S^2 := S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ را در نمایش شوینگر بنویسید و نشان دهید که

$$[S^2, S_a] = 0 \quad , \quad a = x\ , y\ , z.$$

پ : می دانیم که فضای هیلبرتی که این دو نوسانگر هارمونیک روی آن عمل می کنند به صورت زیر است:

$$\mathcal{H} := Span\{|m, n\rangle, \quad m\ ,\ n = \ 0,\ 1\}$$

تاثیر عملگرهای S_+، S_z، S^2 و S_- را روی این فضا بدست آورید. این فضا کدام یک از نمایش های جبر $su(2)$ را در بر دارد.

ت: عملگر زیر را که نشان دهنده متوسط تعداد فرمیون ها با هر نوع اسپینی است تعریف می کنیم:

$$\hat{n} = \frac{1}{2}(a^\dagger a + b^\dagger b). \tag{۷۲}$$

نشان دهید که:

$$a^\dagger a = \hat{n} + S_z \quad , \quad b^\dagger b = \hat{n} - S_z \quad , \quad a^\dagger b = S_x + iS_y \quad , \quad b^\dagger a = S_x - iS_y. \tag{۷۳}$$

■ پ: پتانسیل مستقیم یا

$$V^{(direct)} \quad = \quad V \sum_{n \neq m, \sigma, \sigma'} a^\dagger_{n,\sigma} a^\dagger_{m,\sigma'} a_{m,\sigma'} a_{n,\sigma}$$

$$= \quad V \sum_{n \neq m} n_n n_m, \tag{۷۴}$$

که در آن $n_m = n_{m,\uparrow} + n_{m,\downarrow}$ نشان دهنده چگالی کل الکترون ها مستقل از اسپین آنها در یک سایت است. به این ترتیب $V^{(direct)}$ نشان دهنده برهم‌کنش مستقیم کولومبی بین الکترون هاست.

■ ت : پتانسیل تبادلی [۱۰] یا

$$V^{(exchange)} = J \sum_{n \neq m, \sigma, \sigma'} a^{\dagger}_{n,\sigma} a^{\dagger}_{m,\sigma'} a_{n,\sigma'} a_{m,\sigma}. \tag{۷۵}$$

این جمله از نظر ترتیب عملگر های خلق و فنا با پتانسیل مستقیم تفاوت مهمی دارد. این تفاوت به یک تفاوت مهم در ماهیت این برهم کنش منجر می شود. برای اینکه این پتانسیل را بفهمیم کمی نمادها را ساده می کنیم تا ترکیب خاصی که از عملگرهای خلق و فنا در این پتانسیل وجود دارد را ساده کنیم. فعلا اندیس های n و m را نادیده می گیریم و عملگرهای مربوط به سایت n را با $(a \ , \ a^{\dagger})$ و عملگرهای مربوط به سایت m را با $(b \ , \ b^{\dagger})$ نشان می دهیم. بنابراین جملاتی که با آنها سر وکار داریم به صورت زیر هستند:

$$\begin{aligned} V_{exc} &= -\sum_{\sigma,\sigma'} a^{\dagger}_{\sigma} a_{\sigma'} b^{\dagger}_{\sigma'} b_{\sigma} \\ &= a^{\dagger}_{\uparrow} a_{\uparrow} b^{\dagger}_{\uparrow} b_{\uparrow} + a^{\dagger}_{\uparrow} a_{\downarrow} b^{\dagger}_{\downarrow} b_{\uparrow} + a^{\dagger}_{\downarrow} a_{\uparrow} b^{\dagger}_{\uparrow} b_{\downarrow} + a^{\dagger}_{\downarrow} a_{\downarrow} b^{\dagger}_{\downarrow} b_{\downarrow}. \end{aligned} \tag{۷۶}$$

اما از تمرینی که قبلا حل کردیم می توانیم این عملگرها را بر حسب عملگرهای اسپینی بنویسیم به این معنا که قرار دهیم:

$$\begin{aligned} a^{\dagger}_{\uparrow} a_{\uparrow} &= n_n + S^z_n, & b^{\dagger}_{\uparrow} b_{\uparrow} &= n_m + S^z_m, \\ a^{\dagger}_{\downarrow} a_{\downarrow} &= n_n - S^z_n, & b^{\dagger}_{\downarrow} b_{\downarrow} &= n_m - S^z_m, \\ a^{\dagger}_{\uparrow} a_{\downarrow} &= S^+_n, & b^{\dagger}_{\uparrow} b_{\downarrow} &= S^+_m, \\ a^{\dagger}_{\downarrow} a_{\uparrow} &= S^-_n, & b^{\dagger}_{\downarrow} b_{\uparrow} &= S^-_m. \end{aligned} \tag{۷۷}$$

با این جایگذاری ها پس از ساده کردن پتانسیل تبادلی به شکل زیر در می آید:

$$V_{(exchange)} = -J \sum_{m \neq n} \left(2\mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n + \frac{1}{2} \hat{n}_m \hat{n}_n \right) \tag{۷۸}$$

[۱۰] Potential Exchange

با جمع‌کردن تمام جملات و نامگذاری دوباره ضرایب جفتیدگی، می توانیم هامیلتونی را به شکل کامل بنویسیم.

$$H = t \sum_{n \neq m,\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma} a_{m,\sigma} + U \sum_{n} n_{\uparrow} n_{\downarrow} + V \sum_{n \neq m} n_n n_m - J \sum_{m \neq n} \mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n. \qquad (۷۹)$$

این هامیلتونی نشان دهنده انواع برهم‌کنش هایی است که در یک گاز الکترونی در حد Tight Bonding وجود دارد. جمله اول نشان دهنده انرژی جنبشی الکترون ها و تمایل آنها برای پریدن از یک اتم به یک اتم دیگر است. درکنار این انرژی جنبشی سه نوع دیگر برهم‌کنش بین الکترون ها نیز وجود دارد، جمله ای که برهم‌کنش کولومبی الکترون های با اسپین بالا و پایین را در نزدیکی هر اتم نشان می دهد، جمله ای که نشان دهنده برهم‌کنش کولومبی الکترون های مربوط به اتم های همسایه است و سرانجام جمله ای که نشان دهنده یک نوع برهم‌کنش اسپینی بین الکترون های اتم های نزدیک ترین همسایه هاست. باید دقت کنیم که منشاء این برهم‌کنش، یک نیروی مغناطیسی بین گشتاور مغناطیسی مربوط به اسپین الکترون ها نیست چرا که از همان ابتدا چنین جمله ای در هامیلتونی گاز الکترونی وجود نداشته است، بلکه منشاء این برهم‌کنش همان نیروی دافعه کولومبی بین الکترون هاست که به خاطر آمار فرمیونی به این شکل خود را نشان می دهد. در حالتی که فاصله اتم ها از یک دیگر زیاد باشد جملات سوم و چهارم نیز قابل صرف نظرکردن می شوند و هامیلتونی بالا به شکل ساده تر زیر در می آید:

$$H = t \sum_{n \neq m,\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma} a_{m,\sigma} + U \sum_{n} n_{\uparrow} n_{\downarrow}. \qquad (۸۰)$$

مدلی که توسط این هامیلتونی توصیف می شود به مدل مات–هابارد [۱۱] معروف است و به عنوان مدل اصلی برای مطالعه سیستم های الکترونی همبسته قوی [۱۲] شناخته می شود. با وجود سادگی ظاهری اش این مدل پس از حدود نیم قرن که از معرفی و مطالعه وسیع آن می‌گذرد هنوز ناشناخته های بسیاری در بردارد.

■ تمرین: هامیلتونی هابارد را در حد $U = 0$ در نظر بگیرید:

$$H = t \sum_{n \neq m,\sigma} a^{\dagger}_{n,\sigma} a_{m,\sigma} \qquad (۸۱)$$

الف: شبکه را یک بعدی و با شرایط مرزی پریودیک در نظر بگیرید. طیف این هامیلتونی یعنی ویژه حالت های هامیلتونی و انرژی آنها را پیدا کنید.

---

[۱۱] Mott-Hubbard

[۱۲] Strongly Correlated Electron System

ب: از نظر فیزیکی خواص این حالت ها را بررسی‌کنید. از جمله متوسط مشاهده پذیرهای زیر را روی این ویژه حالت ها حساب‌کنید:

$$\langle n_{i,\uparrow} + n_{i,\downarrow} \rangle \tag{۸۲}$$

پ: شبکه را d بعدی و مکعبی در نظر بگیرید و طیف انرژی را مثل حالت قبل بدست آورید.

■ تمرین: هامیلتونی زیر را در یک شبکه یک بعدی با طول N و با شرایط مرزی پریودیک در نظر بگیرید:

$$H = t \sum_n a^\dagger_{n,\uparrow} a_{n+1,\downarrow} + a^\dagger_{n,\downarrow} a_{n+1,\uparrow} + a^\dagger_{n+1,\downarrow} a_{n,\uparrow} + a^\dagger_{n+1,\uparrow} a_{n,\downarrow} \tag{۸۳}$$

طیف این هامیلتونی یعنی ویژه حالت های هامیلتونی و انرژی آنها را پیدا کنید.

تمرین: عملگرهای فرمیونی را به صورت بردارهای دوبعدی مثل $\begin{pmatrix} a_{n,\downarrow} \\ a_{n,\uparrow} \end{pmatrix}$ بنویسید و سپس سعی‌کنید که ماتریس σ_x را که در طی نوشتن هامیلتونی با استفاده از بردارهای فوق ظاهر می شود، قطری‌کنید.

■ تمرین: الف: هامیلتونی زیر را در یک شبکه یک بعدی با طول $N = 3$ و با شرایط مرزی پریودیک در نظر بگیرید: از اسپین الکترون ها صرف نظرکرده ایم.

$$H = t \sum_n a^\dagger_n a_{n+1} + U \sum_n a^\dagger_n a_n a^\dagger_{n+1} a_{n+1} \tag{۸۴}$$

طیف این هامیلتونی یعنی ویژه حالت های هامیلتونی و انرژی آنها را پیدا کنید.

ب: همین‌کار را برای یک شبکه با طول $N = 4$ انجام دهید.

راهنمایی: به دو تقارن و قانون بقای عمده این هامیلتونی توجه‌کنید. یکی بقای تعداد ذرات و دیگری تقارن انتقالی.