کاربردهایی از روش کوانتش دوم
در فیزیک ماده چگال - بخش اول

وحیدکریمی پور– دانشکده فیزیک – دانشگاه صنعتی شریف

۲۷ آذر ۱۳۹۶

۱ مقدمه

در این درس و درس آینده آنچه راکه در مورد روش کوانتش آموخته ایم برای مطالعه چند مثال از سیستم های بس ذره ای به کار می بریم. این مثال های ایده آل [۱] نخست برای روشن شدن ایده ها و تکنیک های اصلی طرح می شوند. سپس در ادامه درس توضیح داده می شودکه این مثال های ایده آل چگونه از بررسی یک پدیده واقعی یعنی حرکت الکترون ها در فلزات در تقریب های خاص بدست می آیند. در این درس توجه خود را به طور خاص به مدل های اسپینی که برهم کنش اسپین های جایگزیده را توضیح می دهند معطوف می کنیم. در درس بعدی یک گاز الکترونی را در یک شبکه جامد مطالعه می کنیم.

[۱] Toy Models

۲ فرومغناطیس هایزنبرگ

از نظر تاریخی این مدل برای توضیح پدیده فرومغناطیس و توسط هایزنبرگ ابداع شده است. شبکه جامد می تواند یک بعدی، دو بعدی و یا سه بعدی و حتی نامنظم باشد. . این برهم‌کنش مغناطیسی در واقع یک برهم‌کنش موثرِ ناشی از نیروی الکتریکی کولومب و اصل طرد پاوولی است. برای فهم اینکه چگونه تلفیق این دو اثر منجر به برهم‌کنش موثر مغناطیسی می شود خواننده می تواند به فصل مربوط به اتم هلیوم در درسنامه مکانیک کوانتومی نگاه کند. معمولا فرض می شود که این برهم‌کنش مغناطیسی با افزایش فاصله ضعیف می شود به همین دلیل فقط برهم‌کنش بین همسایه های نزدیک در نظر گرفته می شود. برای یک شبکه دلخواه هامیلتونی هایزنبرگ به شکل زیر خواهد بود:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \tag{۱}$$

که در آن $\mathbf{S}_i$ عملگر اسپینِ مربوط به ا تم i ام است و نماد $\langle i,j \rangle$ به معنای آن است که اتمهای i و j همسایه هستند. بسته به تعداد الکترون های جفت نشده ی درون اتم و حالت آنها، عملگر اسپین نیز می تواند نشان دهنده اسپین $\frac{1}{2}$ یا 1 باشد. به طور دقیق تر $\mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n$ نشان دهنده ی

$$\mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n = S_{m,x}S_{n,x} + S_{m,y}S_{n,y} + S_{m,z}S_{n,z} \tag{۲}$$

است که در آن

$$S_{n,a} := I \otimes I \otimes \cdots \otimes S_a \otimes \cdots \otimes I \otimes I, \tag{۳}$$

فقط روی اتم n به صورت S_a عمل می کند و در بقیه نقاط شبکه مثل عملگر واحد عمل می کند. اگر به صورت کلاسیک نگاه کنیم یعنی بردارهای $\mathbf{S}$ را به صورت دوقطبی های مغناطیسی کلاسیک در نظر بگیریم، وقتی که J مثبت است دوقطبی ها ی همسایه میل دارند که هم راستا شوند، زیرا به این ترتیب انرژی کم می شود، و اگر J منفی باشد، دو قطبی های همسایه تمایل به این دارند که در خلاف جهت یکدیگر قرار گیرند. حالت اول را فرو مغناطیس و حالت دوم را پادفرومغناطیس می گویند. در حالت کوانتومی نیز کمابیش چنین وضعیتی برقرار است البته فقط از نظر کیفی چرا که ساختار ویژه حالت های انرژی به خصوص در حالت پادفرومغناطیس خیلی پیچیده است.

باید تاکید کنیم که اگر چه از نظر تاریخی این مدل برای توضیح برهم‌کنش های موثر مغناطیسی در جامدات ابداع شده است اما با کمی تغییر می توان این هامیلتونی را برای توصیف برهم‌کنش بسیاری از سیستم های دو ترازه کوانتومی مثل یون ها، نقطه های اتمی، کاواک های الکترودینامیکی، اتصالات جوزفسون و نظایر آن بکار برد. در واقع اگر یک سیستم دو ترازه را که ترازهای آن با بردارهای $\{|0\rangle, |1\rangle\}$ مشخص می شوند، در نظر بگیریم، آنگاه کلی ترین هامیلتونی بین این دو سیستم یک ماتریس هرمیتی چهاربعدی است. این ماتریس دارای ۱۶ پارامتر

حقیقی است و می توان آن را بر حسب ماتریس های پاوولی و ضرب تانسوری آنها بسط داد. ولی معمولا به دلایل فیزیکی و هم چنین به دلایل تقارنی خیلی از پارامترها ممکن است صفر باشند. دسته وسیعی از این هامیلتونی ها به شکل زیر هستند:

$$h = J_x\sigma_x\otimes\sigma_x + J_y\sigma_y\otimes\sigma_y + J_z\sigma_z\otimes\sigma_z + B_x(\sigma_x\otimes I + I\otimes\sigma_x) + B_y(\sigma_y\otimes I + I\otimes\sigma_y) + B_z(\sigma_z\otimes I + I\otimes\sigma_z). \quad (۴)$$

که می توان آن را به عنوان هامیلتونی برهم‌کنش ناهمسانگرد دو ذره اسپین یک دوم در میدان مغناطیسی خارجی در یک جهت معین تلقی‌کرد، اگر چه منشاء فیزیکی برهم‌کنش ممکن است اصلا مغناطیسی نباشد.

به هر حال نظر به اهمیت این مدل تلاش بسیاری برای مطالعه جوانب مختلف آن از سال های ۱۹۳۰ تاکنون صورت‌گرفته است. در این جا ما ساده ترین نوع مطالعه را برای آشنایی انجام می دهیم.

۱.۲ حالت پایه

نخست دقت می‌کنیم‌که این هامیلتونی دارای تقارن $SU(2)$ است.

■ تمرین: نشان دهیدکه این هامیلتونی دارای تقارن‌گفته شده هست. به عبارت دیگر نشان دهید:

$$[H\ ,\ J_x] = [H\ ,\ J_y] = [H\ ,\ J_z] = 0 \quad (۵)$$

که در آن

$$J_a := \sum_{j=1}^{N} S_{a,j}. \quad (۶)$$

دقت‌کنیدکه این تقارن محدود به اسپین $\frac{1}{2}$ نیست و محدود به یک بعد هم نیست . روابط فوق نشان می دهندکه ما می توانیم ویژه حالت های مشترکِ $\{H, S^2, S_z\}$ راکه در آن $S^2 = S_x^2 + S_y^2 + S_z^2$ را پیداکنیم. بنابراین علی الاصول می توانیم حالت های طیف را به صورت $|\epsilon, s, m\rangle$ بنویسیم

$$H|\epsilon, s, m\rangle = \epsilon|\epsilon, s, m\rangle, \qquad S^2|\epsilon, s, m\rangle = s(s+1)|\epsilon, s, m\rangle, \qquad S_z|\epsilon, s, m\rangle = m|\epsilon, s, m\rangle. \quad (۷)$$

معنای دیگرش این است‌که اگر $|\psi\rangle$ یک ویژه حالت انرژی باشد، آنگاه $R_{\mathbf{n}}(\theta)|\Psi\rangle = e^{i\theta\mathbf{n}\cdot\mathbf{J}}|\Psi\rangle$ نیزکه در آن $R_{\mathbf{n}}(\theta)$ یک عملگر دوران حول محور $\mathbf{n}$ به اندازه زوایه θ است نیز یک ویژه حالت انرژی است. به عبارت دیگر هرگاه همه اسپین ها در هر جهت دلخواهی

هم جهت شوند یک حالت پایه هامیلتونی بدست می آید. البته باید توجه داشت که این به معنای واگنی بی نهایت حالت پایه نیست زیرا این حالت ها همه برهم عمود نیستند.

■ تمرین: الف: ویژه حالت های یک ذره اسپین S را به صورت $|s,m\rangle$ نشان می دهیم به این معنی که

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{S}|s,m\rangle = s(s+1)|s,m\rangle \quad , \quad S_z|s,m\rangle = m|s,m\rangle. \tag{۸}$$

در این صورت نشان دهید که حالت زیر یک ویژه حالت هامیلتونی (؟؟) است:

$$|\Psi_0\rangle := |s,s\rangle\otimes|s,s\rangle\cdots|s,s\rangle. \tag{۹}$$

. انرژی این حالت را حساب کنید. هم چنین ویژه مقدار $S_z := S_{z,1}+\cdots S_{z,N}$ را برای این حالت پیدا کنید.

ب: با توجه به رابطه تقارنی $[H,J_-]=0$ ویژه حالت های دیگری از هامیلتونی را که با حالت فوق یک انرژی دارند پیدا کنید.

راهنمایی: از این موضوع استفاده کنید که

$$\mathbf{S}^1\cdot\mathbf{S}^2 = S_z^1S_z^2 + \frac{1}{2}S_+^1S_-^2 + \frac{1}{2}S_-^1S_+^2. \tag{۱۰}$$

■ تمرین: حالتِ (۹) را که به صورت خلاصه ی

$$|\Psi\rangle = |s,s,\cdots s\rangle \tag{۱۱}$$

نشان می دهیم. این حالت نشان دهنده وضعیتی است که در آن همه اسپین ها در راستای z همراستا شده اند و مولفه آنها در این راستا مقدار بیشینه دارد. حال نشان می دهیم که این حالت، حالت پایه است. برای فهم این موضوع به دو اسپین همسایه نگاه می کنیم. همواره می توانیم بنویسیم:

$$S_m\cdot S_n = \frac{1}{2}\left(2S_m\cdot S_n\right) = \frac{1}{2}\left((S_m+S_n)^2 - S_m^2 - S_n^2\right) \tag{۱۲}$$

اگر اتم ها اسپین s داشته باشند آنگاه $S_n^2 = S_m^2 = s(s+1)$ و بنابراین

$$S_m\cdot S_n = \frac{1}{2}(S_m+S_n)^2 - s(s+1) \tag{۱۳}$$

و در نتیجه هامیلتونی به شکل زیر در می آید:

$$H = -J\sum_{\langle m,n\rangle}\left[\frac{1}{2}(S_m+S_n)^2 - s(s+1)\right] = \frac{Js(s+1)\mathcal{N}}{2} - \frac{J}{2}\sum_{\langle m,n\rangle}(S_m+S_n)^2 \tag{۱۴}$$

که در آن N تعداد نقاط شبکه، $\mathcal{N}$ تعداد اتصالات (همسایه های شبکه) و $(S_m+S_n)^2$ نیز عملگر مربوط به اسپین کل دو همسایه است. حال واضح است که در حالت فرومغناطیس، یعنی وقتی که J مثبت است، انرژی این هامیلتونی وقتی کمترین مقدار خود را دارد که عملگرهای $(S_m+S_n)^2$ بیشترین مقدار خود را اختیار کنند. به عبارت دیگر سوال این است که آیا حالتی وجود دارد که ویژه بردارِ مشترک تمام عملگرهای $(S_m+S_n)^2$ با بیشترین ویژه مقدار باشد؟ پاسخ این سوال مثبت است. در واقع حالتِ $|\Psi_s\rangle := |s,s,\cdots s\rangle$ چنین حالتی است. خواننده براحتی می تواند درستی این ادعا را ثابت کند.

این استدلال هم چنین نشان می دهد که چرا در حالت پادفرومغناطیس، پیداکردن حالت پایه آسان نیست و در واقع چرا حالت پایه ساختار ساده ای مثل (۱۱) ندارد. توجه به فرم هامیلتونی (۱۴) نشان می دهد که در این صورت حالت پایه حالتی است که ویژه بردار مشترک تمام عملگرهای $(S_m+S_n)^2$ با کمترین ویژه مقدار باشد و واضح است که یافتن چنین حالتی ساده نیست.

- تمرین: الف: دو ذره اسپین $\frac{1}{2}$ در نظر بگیرید. کمترین ویژه مقدار $(S_1+S_2)^2$ چقدر است؟ حالتی که ویژه بردار $(S_1+S_2)^2$ با کمترین مقدار باشد کدام حالت است؟

ب: سه ذره اسپین $\frac{1}{2}$ در نظر بگیرید که در روی یک زنجیره سه تایی باز قرار گرفته اند. هامیلتونی به صورت

$$H = (S_1+S_2)^2 + (S_2+S_3)^2 \tag{۱۵}$$

است. حالت پایه این هامیلتونی را پیدا کنید. آیا این حالت، ویژه بردار مشترک $(S_1+S_2)^2$ و $(S_2+S_3)^2$ با کمترین ویژه مقدارهاست؟

حالتی را در نظر بگیرید که یکی از این اسپین ها مثلا اسپین k ام، مقدار کمترِ $s-1$ را اختیار کرده است. این حالت را به صورت زیر نشان می دهیم:

$$|k\rangle := |s,s,\cdots s-1,\cdots s\rangle. \tag{۱۶}$$

با بازنویسی $\mathbf{S}_m \cdot \mathbf{S}_n$ به صورت $S_{z,m}S_{n,z} + \frac{1}{2}(S_{+,m}S_{n,-} + S_{-,m}S_{+,n})$ اثر هامیلتونی را روی حالتِ $|k\rangle$ حساب کنید. با قطری کردن اثر هامیلتونی در زیر فضای $\{|k\rangle, \quad k = 1,\ 2,\ 3, \cdots N\}$ ویژه حالت های هامیلتونی را در این زیر فضا بدست آورید. انرژی آنها را نیز مشخص کنید.

پس از این ملاحظات کلی نخست به حد اسپین $\frac{1}{2}$ و سپس به حد اسپین های بالا نگاه می کنیم.

۲.۲ حد اسپین $\frac{1}{2}$

وقتی با اسپین های $\frac{1}{2}$ سر و کار داریم می توانیم از یک رابطه زیبا بین عملگرهای اسپین و عملگر جایگشت استفاده کنیم و بصیرت جالبی در باره این مدل پیدا کنیم. نخست توجه می کنیم که هامیلتونی به شکل زیر نوشته می شود:

$$H = -\frac{J}{4}\sum_{\langle n,m\rangle} \sigma_m \cdot \sigma_n, \tag{۱۷}$$

که در آن $\hbar$ را نیز برابر با 1 گرفته ایم. سپس به رابطه زیر توجه می کنیم

$$\sigma\cdot\sigma = \sigma_x \otimes \sigma_x + \sigma_y \otimes \sigma_y + \sigma_z \times \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & -1 & 2 & \\ & 2 & -1 & \\ & & & 1 \end{pmatrix} = 2P - 1 \tag{۱۸}$$

که در آن عملگر

$$P = \begin{pmatrix} 1 & & & \\ & & 1 & \\ & 1 & & \\ & & & 1 \end{pmatrix} \tag{۱۹}$$

یک عملگر جایگشت ساده است یعنی

$$P|\alpha,\beta\rangle = |\beta,\alpha\rangle. \tag{۲۰}$$

■ تمرین: نشان دهید که برای هر دو حالت دلخواه $|\mathbf{m}\rangle$ و $|\mathbf{n}\rangle$ رابطه زیر برقرار است:

$$P|\mathbf{m}\rangle|\mathbf{n}\rangle = |\mathbf{n}\rangle|\mathbf{m}\rangle.$$

بنابراین با جایگزینی $\sigma_m\cdot\sigma_n = 2P_{m,n}-1$ می توان هامیلتونی را به شکل زیر نوشت :

$$H = -\frac{J}{4}\sum_{\langle m,n\rangle}(2P_{m,n}-1) = \frac{-J\mathcal{N}}{4} + \frac{J}{2}\sum_{\langle m,n\rangle}(1-P_{m,n}) \equiv \frac{-J\mathcal{N}}{4} + \frac{J}{2}H_0, \tag{۲۱}$$

که در آن N تعداد نقاط شبکه، $\mathcal{N}$ [۲] تعداد اتصالات شبکه و

$$H_0 := \sum_{\langle m,n\rangle}(1-P_{m,n}). \tag{۲۲}$$

کافی است که ما ویژه حالت های H_0 را مطالعه کنیم زیرا این ویژه حالت ها همان ویژه حالت های H هستند . حال دقت می کنیم که عملگر $P-1$ یک عملگر مثبت است زیرا ویژه مقدارهای آن برابرند با صفر و یک. بنابراین ویژه مقدارهای عملگرِ H_0 نیز مثبت یا صفر هستند.

■ تمرین: بنا بر تعریف، یک عملگرِ A مثبت است اگر دارای خاصیت زیر باشد:

$$\langle\psi|A|\psi\rangle \geq 0. \tag{۲۳}$$

ثابت کنید که ویژه مقدارهای یک عملگر مثبت بزرگتر یا مساوی با صفر هستند. هم چنین ثابت کنید که مجموع دو عملگر مثبت نیز یک عملگر مثبت است.

حال واضح است که هر حالت به صورت $|\Phi_{\mathbf{n}}\rangle = |\mathbf{n}\rangle^{\otimes N}$ که در آن همه اسپین ها در یک حالت $|\mathbf{n}\rangle$ همراستا شده اند یک ویژه حالت پایه ی H_0 است. . انرژی این حالت برابر است با: $E_0 = -\frac{J\mathcal{N}}{8}$. البته به دلیل تقارن $SU(2)$ حالت پایه واگن است . در واقع حالتی را که در آن همه اسپین ها در راستای z همراستا شده اند را با $|0,0,\cdots 0\rangle$ نشان می دهیم و در این صورت داریم:

$$|0,0,0\cdots 0\rangle = |\epsilon, s=\frac{N}{2}, m=\frac{N}{2}\rangle. \tag{۲۴}$$

در این صورت بقیه حالت ها با اثر متوالی عملگر $S_{-,z}$ روی این حالت بدست می آیند. تعداد این حالت ها برابر است با $2(\frac{N}{2})+1 = N+1$.

[۲] برای شبکه های منظم می توان نوشت: $\mathcal{N} = \frac{Nz}{2}$ که در آن z تعداد همسایه های هر نقطه از شبکه است.

۳.۲ حالت های برانگیخته

از این به بعد برای سادگی خود را محدود به یک شبکه یک بعدی می‌کنیم. برای این شبکه داریم $z=2$ و $E_0=-\frac{JN}{4}$. اکنون می توانیم به سراغ حالت های برانگیخته برویم . البته پیداکردن تمام حالت های برانگیخته‌کار راحتی نیست و ما فقط اولین حالت های برانگیخته را مطالعه می‌کنیم. این حالت ها را اصطلاحاً و به دلیلی‌که بعداً خواهیم دید، حالت های تک ذره ای می نامیم. برای پیداکردن این حالت ها یک حالت پایه مثل مثل $|0,0,\cdots 0\rangle \equiv |\mathbf{z}\rangle^{\otimes} = |\Psi_{\mathbf{z}}\rangle$ را در نظر می‌گیریم. حالت های مثبت و منفی اسپین در راستای z را با $|0\rangle$ و $|1\rangle$ نشان می دهیم. ($\sigma_z|0\rangle=|0\rangle \quad , \quad \sigma_z|1\rangle=-|1\rangle$).

برای بدست آوردن اولین حالت های برانگیخته حالتی را در نظر بگیریدکه در آن اسپین n ام برگشته است :

$$|n\rangle = |0\,0\,\cdots\,0\,1\,0\cdots 0\rangle. \tag{۲۵}$$

براحتی معلوم می شودکه

$$H_0|n\rangle = |n+1\rangle + |n-1\rangle - 2|n\rangle. \tag{۲۶}$$

بنابراین این حالت ها هیچ‌کدام ویژه حالت انرژی نیستند. اما رابطه بالا نشان می دهدکه هامیلتونی در زیرفضای حالت های تک ذره ای قابل قطری‌کردن است. در واقع ترکیب های زیر را در نظر می‌گیریم:

$$|\Psi_k\rangle := \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{k}^{N} e^{ikn}|n\rangle. \tag{۲۷}$$

براحتی معلوم می شودکه

$$H_0|\Psi_k\rangle = 4\sin^2\frac{k}{2}|\Psi_s\rangle. \tag{۲۸}$$

بنابراین انرژی این حالت ها برابر است با $E_k=4\sin^2\frac{k}{2}$. آیا به این ذرات می توان تکانه هم نسبت داد؟ برای پاسخ به این سوال می بایست اثر عملگر انتقال را روی آنها پیداکرد. عملگر انتقال به اندازه طول یک واحد شبکه‌کار زیر را انجام می دهد:

$$T : |n\rangle \longrightarrow |n+1\rangle \tag{۲۹}$$

و می توان از روی آن عملگر تکانه را به صورت زیر تعریف‌کرد:

$$T =: e^{-iP}. \tag{۳۰}$$

بنابراین داریم

$$T|\Psi_k\rangle = e^{-ik}|\Psi_k\rangle \quad , \quad \longrightarrow P|\Psi_k\rangle = k|\Psi_k\rangle. \tag{۳۱}$$

بنابراین تکانه این حالت های تک ذره ای عبارت است از k. در نتیجه رابطه بین انرژی و تکانه این حالت های تک ذره ای عبارت است از:

$$E_k = 4\sin^2\frac{k}{2}. \tag{۳۲}$$

این رابطه رابطه پاشندگی [۳] خوانده می شود و نقش مهمی در مطالعه خواص هر سیستمی دارد. این حالت ها به صورت زیر تحول پیدا می‌کنند:

$$|\psi_k(t)\rangle = e^{-iE_kt}|\Psi_k\rangle \tag{۳۳}$$

و در نتیجه

$$\Psi_k(n,t) = \langle n|\Psi_k(t)\rangle = e^{-iE_kt+ikn}$$

که نشان دهنده یک موج است‌که با انرژی یا فرکانس E_k و تکانه یا عدد موجی k منتشر می شود. در یک شبکه d بعدی، این موج به صورت زیر خواهد بود:

$$\Psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{n},t) = \langle \mathbf{n}|\Psi_{\mathbf{k}}(t)\rangle = e^{-iE_{\mathbf{k}}t+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \tag{۳۴}$$

که در آن $\mathbf{k}$ و $\mathbf{n}$ بردارهای تکانه و بردار مکان شبکه هستند و رابطه پاشندگی نیز به صورت زیر است:

$$E_{\mathbf{k}} = 4\sum_{i=1}^{d}\sin^2\frac{k_i}{2}. \tag{۳۵}$$

این حالت های تحریکی مثل امواجی از اسپین های بالا هستند‌که در یک دریای با اسپین های پایین حرکت می‌کنند. البته باید توجه‌کرد‌که در این حالت ها فقط یک اسپین رو به بالاست و احتمال وجود این اسپین بالاست‌که به صورت یک موج منتشر می شود. این امواج، امواج اسپینی [۴] خوانده می شوند.

می توانیم حالت های برانگیخته ی دو ذره ای را نیز مطالعه‌کنیم.

- تمرین: نشان دهید‌که هامیلتونی زیرفضای حالت های دو ذره ای را به خودش می نگارد. بعد این زیرفضا را نیز تعیین‌کنید. به طورکلی بعد زیر فضای k ذره ای را تعیین‌کنید.

---

[۳] Dispersion Relation

[۴] Spin Wave

■ تمرین: حالت های برانگیخته را در فرومغناطیس هایزنبرگ برای یک شبکه d بعدی حل‌کنید و رابطه پاشندگی مربوط به آن را بدست آورید.

اما قطری‌کردن هامیلتونی در فضای حالت های چند ذره ای به آسانی حالت های تک ذره ای نیست. با این وجود می توان این‌کار را به حل کردن مجموعه ای از معادلات غیر خطی تبدیل‌کرد. این روش نخستین بار توسط هانس بته [۵] ابداع شده و نهاده بته [۶] خوانده می شود. مجموعه مقالاتِ مربوط به نهاده بته یک مجموعه خیلی وسیع در نوشتارهای فیزیک است.

۴.۲ حد اسپین های بالا- بسط بر حسب عکس اندازه اسپین

حال به یک حد مقابل یعنی حد اسپین های بالا نگاه می‌کنیم. اگر اسپین یک ذره را با s نشان دهیم، می دانیم‌که در حدِ $s \longrightarrow \infty$ رفتار اسپین ها به رفتار دوقطبی های‌کلاسیک نزدیک می شود. حال می توانیم روشی را ابداع‌کنیم‌که خصوصیات فیزیکی را بر حسب قوای $\frac{1}{s}$ بسط دهیم. چنانکه خواهیم دید برای اینکه نتایج ما معتبر باشد لازم نیست مقدار اسپین s خیلی بزرگ باشد. نتایجی‌که بدست می آوریم برای اسپین های‌کم و حتی برای اسپین $\frac{1}{2}$ نیز صحیح هستند.

نخست نیاز داریم‌که رابطه ای را بین عملگرهای اسپین و عملگرهای خلق و فنای بوزونی را بفهمیم.

۵.۲ تبدیلات هولشتاین پریماکوف

به تبدیلات زیر بین عملگرهای اسپین و عملگرهای خلق و فنای بوزونی‌که در آن ها s یک عدد صحیح یا نیمه صحیح است، توجه می‌کنیم:

$$S_z = \hat{N} - s, \qquad S_+ = a^\dagger \sqrt{2S - \hat{N}}, \qquad S = \sqrt{2S - \hat{N}}\, a \tag{۳۶}$$

در این روابط $\hat{N} = a^\dagger a$ عملگر شمارش است.

■ تمرین: الف: ثابت‌کنید‌که عملگرهای اسپینی به طریقی‌که در بالا تعریف شده اند واقعا در روابط جابجایی مربوط به اسپین صدق می‌کنند.

---

[۵] Hans Bethe

[۶] Bethe Ansatz

ب: با استفاده از رابطه

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{S} = S_z S_z + \frac{1}{2}\left(S_+S_- + S_-S_+\right) \qquad (۳۷)$$

نشان دهید که

$$\mathbf{S}\cdot\mathbf{S} = s(s+1). \qquad (۳۸)$$

با توجه به این روابط می توانیم بفهمیم که عملگرهای اسپینی چگونه روی فضای هیلبرت مربوط به یک نوسانگر نمایش داده می شوند. برای این کار به روابط زیر توجه می کنیم:

$$\hat{N}|n\rangle = n|n\rangle \qquad \hat{a}|n\rangle = \sqrt{n}|n-1\rangle, \qquad \hat{a}^\dagger|n\rangle = \sqrt{n+1}|n+1\rangle. \qquad (۳۹)$$

فضای هیلبرت مربوط به یک نوسانگر بوزونی که دارای بی نهایت حالت است براحتی تمامی نمایش های متفاوت اسپین را در خود جای می دهد. کافی است که تناظر زیر را برقرار کنیم:

$$|s,m\rangle\rangle := |s+m\rangle \qquad (۴۰)$$

که در آن نماد طرف چپ را برای نشان دادن حالت های نمایش اسپین s از جبر تکانه زاویه ای به کار برده ایم.

■ تمرین: اثر عملگرهای اسپین را روی حالت های $|s,m\rangle\rangle$ محاسبه کنید. تعیین کنید که کدام مجموعه از حالت های نوسانگر هارمونیک یک نمایش اسپین s از جبر $su(2)$ را در خود جای می دهد.

حال تبدیلات هولشتاین – پریماکوف را در هامیلتونی هایزنبرگ به کار می بریم. نخست هامیلتونی را به صورت زیر بازنویسی می کنیم:

$$H = -J\sum_{\langle m,n\rangle}\mathbf{S}_m\cdot\mathbf{S}_n = -J\sum_{\langle m,n\rangle}\left(S_{m,z}S_{n,z} + \frac{1}{2}(S_{m,+}S_{n,-} + S_{m,-}S_{n,+})\right), \qquad (۴۱)$$

سپس در حد s های خیلی بزرگ دقت می کنیم که این تبدیلات به شکل زیر در می آیند:

$$S_z = s - a^\dagger a, \qquad S_+ \approx \sqrt{2s}a, \qquad S_- \approx \sqrt{2s}a^\dagger. \qquad (۴۲)$$

در نتیجه هامیلتونی بسط زیر را پیدا می‌کند:

$$H = -J \sum_{\langle m,n\rangle} (s - a_n^\dagger a_n)(s - a_m^\dagger a_m) + \frac{1}{2} 2s(a_n a_m^\dagger + a_n^\dagger a_m), \tag{۴۳}$$

یا پس از جمع و جورکردن

$$H = -\frac{Js^2 Nz}{2} + s \sum_{\langle m,n\rangle} J \left[a_n a_m^\dagger + a_m^\dagger a_n - a_n^\dagger a_n - a_m^\dagger a_m\right] + \sum_{\langle m,n\rangle} a_m^\dagger a_m a_n^\dagger a_n. \tag{۴۴}$$

جمله اول عبارت بالا یک عدد ثابت است و در اولین تقریب می توان از آخرین جمله صرف نظر کرد. هامیلتونی باقیمانده یک هامیلتونی رتبه ۲ است و در نتیجه به صورت دقیق می توان آن را حل کرد. برای حل این هامیلتونی کافی است که با یک تبدیل فوریه هامیلتونی را قطری کنیم . از این به بعد توجه خود را به یک بعد معطوف می‌کنیم اگرچه هر آنچه که در پی می اید با تغییراتی اندک برای بعد دلخواه نیز برقرار است. قرار می دهیم

$$a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n=1}^{N} e^{ikn} a_n \tag{۴۵}$$

که در نتیجه آن هامیلتونی فرومغناطیس یک بعدی به صورت زیر در می آید

$$H = -JNs^2 + \sum_k (e^{ik} + e^{-ik} - 2) a_k^\dagger a_k \tag{۴۶}$$

و یا

$$H = -JNs^2 + 4Js \sum_k \sin^2 \frac{k}{2} a_k^\dagger a_k. \tag{۴۷}$$

از آنجاکه عبارت $4Js\sin^2\frac{k}{2}$ یک عبارت مثبت است، حالت پایه حالتی است که توسط تمام عملگرهای a_k نابود می شود یعنی همان حالت خلاء و حالت های انرژیِ پایین حالت هایی هستند که در آن تعدادکمی ذره وجود دارد. این امر به ما امکان می دهدکه در مرتبه های بالاتر اختلالی نیز جملات برهم‌کنشی مثل $\sum_{\langle m,n\rangle} a_m^\dagger a_m a_n^\dagger a_n$ را در نظر بگیریم. برای این‌کار می بایست روابط تبدیل هولشتاین- پریماکوف را بر حسب قوای متوالی $\frac{1}{s}$ بسط داد:

$$S_- = \sqrt{2S} a^\dagger (1 - \frac{a^\dagger a}{2S})^{\frac{1}{2}} = \sqrt{2S} a^\dagger \left(1 - \frac{1}{2}\frac{a^\dagger a}{2S} + \cdots\right) \tag{۴۸}$$

$$S_+ = \sqrt{2S} (1 - \frac{a^\dagger a}{2S})^{\frac{1}{2}} a = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{1}{2}\frac{a^\dagger a}{2S} + \cdots\right) a \tag{۴۹}$$

طبیعی است که جملات متوالی بسط منجر به پیدایش برهم‌کنش در گاز بوزونی آزاد می شود.

- تمرین: الف: متوسط عملگر $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}$ را در حالت پایه حساب کنید.
  ب: متوسط عملگر $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+2}$ را در حالت پایه حساب کنید.
  پ: متوسط عملگر $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}$ را در هرکدام از حالت های برانگیخته ای که پیدا کردیم محاسبه کنید.

- تمرین: هامیلتونی هایزنبرگ را تا مرتبه $\frac{1}{s}$ بر اساس نوسانگرهای هارمونیک بسط دهید.

۳ پاد فرومغناطیس هایزنبرگ

در این بخش به مطالعه پادفرومغناطیس هایزنبرگ می پردازیم. هامیلتونی این سیستم به صورت زیر است

$$H = J \sum_{\langle m,n \rangle} \left[S_m^z S_n^z + \frac{1}{2}(S_m^+ S_n^- + S_m^- S_n^+) \right], \qquad J > 0. \tag{۵۰}$$

تفاوت اش با فرومغناطیس علامت J است ولی همین تغییر کوچک باعث می شود که رفتار پادفرومغناطیس به کلی با رفتار فرومغناطیس متفاوت باشد. در واقع نگاهی به شکل هامیلتونی (۴۷) نشان می دهد که وقتی J منفی است یعنی سیستم پادفرومغناطیس است دیگر حالت خلاء حالت پایه نیست. حتی نمی توان گفت که حالت پایه حالتی است که اعداد اشغال یعنی ویژه مقدارهای $a_k^\dagger a_k$ بیشترین مقدار خود را داشته باشند چرا که این ویژه مقدارها حد بالایی ندارند، ضمن آنکه در چنین حدی تقریب (۴۲) دیگر معتبر نیست. بنابراین باید یک روش کاملاً جدید را برای مطالعه حالت های نزدیک به پایه این هامیلتونی پیدا کنیم. این روش فقط روی شبکه های دوبخشی [۷] امکان پذیر است، یعنی شبکه هایی که می توان آن ها را به دو قسمت مجزا مثل A و B بگونه ای تقسیم کرد که اتصالات نزدیک ترین همسایه ها تنها بین یک نقطه از بخش A و یک نقطه از بخش B برقرار است. [۸] بنابر این روی چنین شبکه هایی هامیلتونی به شکل زیر است:

$$H = J \sum_{\langle m\in A, n\in B \rangle} S_m^A \cdot S_n^B. \tag{۵۱}$$

حال قبل از ادامه می بایست روی یکی از این شبکه ها مثلا شبکه B یک دوران حول محور x به اندازه ۱۸۰ درجه انجام بدهیم. در این صورت خواهیم داشت:

$$S_x^B \longrightarrow S_x^B, \quad S_y^B \longrightarrow -S_y^B, \quad S_z^B \longrightarrow -Sz^B. \tag{۵۲}$$

[۷] Bi-partite

[۸] شبکه مربعی یک شبکه دوبخشی است ولی شبکه مثلثی چنین نیست. هم چنین شبکه لانه زنبوری نیز یک شبکه دوبخشی است.

در نتیجه خواهیم داشت:

$$S_{+}^{B} \longrightarrow S_{-}^{B}, \quad S_{-}^{B} \longrightarrow S_{+}^{B}, \tag{۵۳}$$

در نتیجه هامیلتونی به شکل زیر در می آید:

$$H = J \sum_{\langle m\in A, n\in B\rangle} \left[-S_z^A S_z^B + \frac{1}{2}\left(S_+^A S_+^B + S_-^A S_-^B \right) \right]. \tag{۵۴}$$

بازهم از تبدیلات هولشتاین – پریماکوف استفاده می‌کنیم. این بار این تبدیلات بازهم در حد s های بزرگ به رابطه زیر منجر می شوند:

$$H_{AF} = -\frac{Js^2Nz}{2} + Js \sum_{\langle n,m\rangle} \left[a_m^\dagger a_m + a_n^\dagger a_n + a_m^\dagger\, a_n^\dagger + a_m\, a_n \right] - J \sum_{\langle n,m\rangle} a_m^\dagger a_m a_n^\dagger a_n. \tag{۵۵}$$

در اولین حد تقریب فقط تا جمله وسط را در نظر می‌گیریم. از این به بعد برای سادگی خود را به یک شبکه یک بعدی با N نقطه محدود می کنیم. هامیلتونی را نیز تا رتبه s می نویسیم و از جملاتِ $\frac{1}{s}$ صرف نظر می‌کنیم:

$$H_{AF} = -Js^2N + Js \sum_{\langle n\rangle} \left[2a_n^\dagger a_n + a_n^\dagger\, a_{n+1}^\dagger + a_n\, a_{n+1} \right] \tag{۵۶}$$

از تبدیل فوریه ی

$$a_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} a_n^\dagger \quad , \quad a_k = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-ikn} a_n \tag{۵۷}$$

و یا معکوس آنها

$$a_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{-ikn} a_k^\dagger \quad , \quad a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n e^{ikn} a_k \tag{۵۸}$$

استفاده می‌کنیم و هامیلتونی H_{AF} را به صورت زیر می نویسیم:

$$H_{AF} = -Js^2N - Js \sum_k \left[2a_k^\dagger a_k + e^{ik} a_k^\dagger a_{-k}^\dagger + e^{-ik} a_k\, a_{-k} \right] \tag{۵۹}$$

برای قطری‌کردن این هامیلتونی می بایست نخست یک تبدیل بوگولیوبیوف [۹] به‌کار برد به این ترتیب‌که می نویسیم:

$$H_{AF} \quad = \quad -Js^2N - Js \sum_k \begin{pmatrix} a_k^\dagger & a_{-k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 & e^{ik} \\ e^{-ik} & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_k \\ a_{-k}^\dagger \end{pmatrix}$$

[۹] Bogoliobov Transformation

$$= \quad -Js^2N - Js\sum_k \begin{pmatrix} a_k^\dagger & a_{-k} \end{pmatrix} \Omega \begin{pmatrix} a_k \\ a_{-k}^\dagger \end{pmatrix} \tag{۶۰}$$

که در آن

$$\Omega = \begin{pmatrix} 1 & e^{ik} \\ e^{-ik} & 1 \end{pmatrix} \tag{۶۱}$$

یک ماتریس مثبت با ویژه مقدارهای 2 و 0 است. اگر ماتریس قطری‌کننده Ω را با S نشان دهیم و بنویسیم

$$\Omega = S^\dagger \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

آنگاه خواهیم داشت:

$$H_{AF} = -Js^2N - Js\sum \begin{pmatrix} a_k^\dagger & a_{-k} \end{pmatrix} S^\dagger \begin{pmatrix} 2 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} S \begin{pmatrix} a_k \\ a_{-k}^\dagger \end{pmatrix}. \tag{۶۲}$$

بنابراین با تعریف نوسانگرهای جدید به صورت

$$\begin{pmatrix} b_k \\ b_{-k}^\dagger \end{pmatrix} = S \begin{pmatrix} a_k \\ a_{-k}^\dagger \end{pmatrix} \tag{۶۳}$$

به هامیلتونی زیر می رسیم:

$$H = -Js^2N - 2Js\sum_k b_k^\dagger b_k + \ldots \tag{۶۴}$$

به این ترتیب بازهم هامیلتونی هایزنبرگ تا تقریب مرتبه s تبدیل می شود به هامیلتونی مجموعه ای از بوزون های بدون بره‌کنش که طیف آن براحتی قابل بدست آمدن است. حال تمرین های زیر را برای زنجیره پادفرومغناطیس هایزنبرگ انجام دهید.

- تمرین: الف: متوسط عملگر $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}$ را در حالت پایه حساب‌کنید.

  ب: متوسط عملگر $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+2}$ را در حالت پایه حساب‌کنید.

  پ: متوسط عملگر $\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}$ را در هرکدام از حالت های برانگیخته ای تک ذره ای محاسبه‌کنید.

■ اگر به جای چرخش حول محور x چرخشی حول محور z انجام بدهیم، آیا بازهم به نتیجه دلخواه می رسیم؟

۴ تبدیلات جوردن - ویگنر و فرمیون های آزاد

تاکنون مطالعه خود را به مدل هایزنبرگ محدودکردیم. در این مدل ضرایب جفتیدگی مولفه های اسپین در هر سه راستای x ، y و z با هم برابرند و همین امر باعث تقارن دورانی این مدل می شود. اما وضعیت هایی وجود داردکه یکی از این ضرایب مثلا در جهت محور z برابر با صفر است. در چنین حالتی هامیلتونی این سیستم اسپینی به صورت زیر در می آید:

$$H = J \sum_{\langle m,n \rangle} S_n^x S_m^x + S_n^y S_m^y. \qquad (۶۵)$$

این هامیلتونی علاوه بر توصیف برهم‌کنش های فوق به دلایل دیگری هم مورد علاقه است چراکه پدیده های دیگری را می توان با آن مدل‌کرد. مدلی‌که با این هامیلتونی تعریف می شود مدل XY خوانده می شود. در این بخش می خواهیم نشان دهیم‌که این مدل را به طورکامل می توان حل‌کرد به این معناکه همه ویژه حالت های انرژی را براحتی می توان بدست آورد. انگیزه مهم دیگر این است‌که یک تبدیل مهم دیگر را بین اسپین و فرمیون ها یاد بگیریم. البته باید تاکیدکنیم‌که این تبدیل فقط برای سیستم های یک بعدی و اسپین $\frac{1}{2}$ تعریف می شود و نمی توان آن را برای سیستم های با بعد بالاتر یا اسپین های دیگر به‌کار برد. بنابراین از این به بعد هامیلتونی را به شکل زیر می نویسیم:

$$H = J \sum_{n=1}^{N} \sigma_n^x \sigma_{n+1}^x + \sigma_n^y \sigma_{n+1}^y. \qquad (۶۶)$$

شرایط مرزی را نیز تناوبی می‌گیریم به این معناکه در همه جا شرط $N+1 \equiv 1$ را به‌کار می بریم. با تعریف

$$\sigma_n^+ = \frac{1}{2}(\sigma_x + i\sigma_y) \quad , \quad \sigma_n^- = \frac{1}{2}(\sigma_x - i\sigma_y) \qquad (۶۷)$$

هامیلتونی شکل زیر را پیدا می‌کند:

$$H = \frac{J}{2} \sum_{n=1}^{N} \sigma_n^+ \sigma_{n+1}^- + \sigma_n^- \sigma_{n+1}^+. \qquad (۶۸)$$

حال تبدیلات زیر موسوم به تبدیلات جردن – ویگنر [۱۰] در نظر می‌گیریم.

$$
\begin{aligned}
c_n &:= \sigma_1^z\sigma_2^z\cdots\sigma_{n-1}^z\sigma_n^+ \\
c_n^\dagger &:= \sigma_1^z\sigma_2^z\cdots\sigma_{n-1}^z\sigma_n^- .
\end{aligned}
\qquad (۶۹)
$$

دقت کنید که روش تعریف این عملگرها که در آن نیاز به یک ترتیب در شمارش نقاط شبکه داریم، نشان می دهد که چرا این تبدیل فقط در یک بعد امکان پذیر است. خواننده براحتی می تواند نشان دهد که

$$
c_n c_n = c_n^\dagger c_n^\dagger = 0. \qquad (۷۰)
$$

علاوه بر آن براحتی معلوم می شود که روابط زیر هم برقرارند:

$$
\{c_n\ ,\ c_m\} = \{c_n^\dagger\ ,\ c_m^\dagger\} = 0 \qquad (۷۱)
$$

به عبارت دیگر به نظر می رسد که عملگرهای c_n و $c_n^\dagger$ همه مشخصات لازم برای این‌که عملگرهای خلق و فنای فرمیونی نامیده شوند را دارند. اما روابط فوق‌کافی نیستند و یک رابطه ی دیگر را نیز باید ثابت‌کنیم تا این ادعا کامل شود. این ادعا در تمرین زیر ثابت می شود:

- تمرین: نشان دهید که روابط زیر هم برقرارند:

$$
\{c_n\ ,\ c_m^\dagger\} = \delta_{m,n}. \qquad (۷۲)
$$

به این ترتیب معلوم می شود که عملگرهای c_n و $c_n^\dagger$ واقعاً عملگرهای خلق و فنای فرمیونی هستند. برای آنکه هامیلتونی مدل XY را برحسب عملگرهای فرمیونی بنویسیم به روابط زیر توجه می‌کنیم:

$$
\begin{aligned}
c_n^\dagger c_{n+1} &= \sigma_n^-\sigma_n^z\sigma_{n+1}^+ = \sigma_n^-\sigma_{n+1}^+ \\
c_n c_{n+1}^\dagger &= \sigma_n^+\sigma_n^z\sigma_{n+1}^- = -\sigma_n^+\sigma_{n+1}^- .
\end{aligned}
\qquad (۷۳)
$$

بنابراین باتوجه به اینکه فرمیون ها با هم پادجابجا می شوند بدست می آوریم:

[۱۰] Jordan Wigner

$$\begin{aligned}\sigma_n^-\sigma_{n+1}^+ &= c_n^\dagger c_{n+1}\\ \sigma_n^+\sigma_{n+1}^- &= -c_n c_{n+1}^\dagger = c_{n+1}^\dagger c_n.\end{aligned} \tag{۷۴}$$

در نتیجه هامیلتونی به شکل زیر در می آید

$$H \equiv \frac{J}{2}\sum_n c_n^\dagger c_{n+1} + c_{n+1}^\dagger c_n. \tag{۷۵}$$

بر حسب فرمیون مربعی است و به همین دلیل نیز مدل فرمیون آزاد خوانده می شود و به صورت دقیق قابل حل است. برای حل آن کافی است که از تبدیل فوریه استفاده کنیم:

$$b_k := \frac{1}{\sqrt{N}}e^{ikn}c_n, \qquad b_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}}e^{-ikn}c_n^\dagger \tag{۷۶}$$

در نتیجه خواهیم داشت:

$$H \equiv \frac{J}{2}\sum_n (e^{ik}+e^{-ik})c_k^\dagger c_k = J\sum_k \cos k c_k^\dagger c_k. \tag{۷۷}$$

حالت پایه این هامیلتونی حالتی است که توسط همه عملگرهای فرمیونی نابود می شود و بقیه حالت ها حالت های برانگیخته هستند:

$$c_k|\mathbf{0}\rangle = 0 \quad , \quad |n_1, n_2, \cdots n_N\rangle = \prod_1^N b_1^{\dagger\, n_1} b_2^{\dagger\, n_2}\cdots b_N^{\dagger\, n_N}|\mathbf{0}\rangle, \quad n_k = 0\ ,\ 1. \tag{۷۸}$$

انرژی این حالت ها نیز به سادگی به دست می آید:

$$H|n_1, n_2, \cdots n_N\rangle = \left(\sum_k n_k \cos k\right)|n_1, n_2, \cdots n_N\rangle. \tag{۷۹}$$

- تمرین: نشان دهید که حالت خلاءِ $|\mathbf{0}\rangle$ برای عملگرهای فرمیونیِ $b_k,\ b_k^\dagger$ با حالت خلاء برای عملگرهای فرمیونی $c_k,\ c_k^\dagger$ یکی هستند.

- تمرین: حالت پایه مدل XY را در نظر بگیرید. این حالت را با $|\Psi\rangle$ نشان می دهیم. توابع همبستگی زیر را حساب کنید:

$$\langle\Psi|\sigma_i^x|\Psi\rangle, \qquad \langle\Psi|\sigma_i^y|\Psi\rangle, \qquad \langle\Psi|\sigma_i^x\sigma_j^x|\Psi\rangle. \tag{۸۰}$$

- تمرین: مدل زیر موسوم به مدل آیزینگ در میدان مغناطیسی عرضی [۱۱] است:

$$H = J\sum_{n=1}^N \sigma_n^z\sigma_{n+1}^z + h\sum_{n=1}^N \sigma_n^x. \tag{۸۱}$$

[۱۱] Ising model in Transverse Field (ITF)

دلیل این نامگذاری نیز از شکل هامیلتونی معلوم است. پارامتر h نقش میدان مغناطیسی عرضی را مشخص می‌کند.

الف: نشان دهید که این مدل نیز با استفاده از تبدیلات جوردن – ویگنر تبدیل به یک مدل فرمیون آزاد می شود.

ب: طیف انرژی هامیلتونی را مشخص کنید.